

**ИТМО** | **СН** 

# «МОЛОДЫЕ ПРОФЕССИОНАЛЫ»

ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

**СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ**

- Искусственный интеллект
- Интеллектуальные технологии в инфохимии
- Биоинженерия от цифровых решений до практического применения
- Предиктивная аналитика для углеводородной энергетики

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

**Молодые профессионалы**  
**Всероссийская конференция**  
**Сборник научных трудов**



Санкт-Петербург  
2022

УДК 082.2, ББК 94.3

Молодые профессионалы. Всероссийская конференция. Сборник научных трудов.  
– СПб.: Университет ИТМО, 2022. – 144 с.

Издание содержит результаты научных работ молодых ученых, доложенные на первой Всероссийской конференции «Молодые профессионалы», состоявшийся с 25 по 27 октября 2022 г. в Университете ИТМО.

ISBN 978-5-7577-0685-6

The logo of ITMO University, consisting of the letters 'ИТМО' in a bold, black, sans-serif font. The letter 'И' is slightly larger and positioned to the left of the other letters.

Университет ИТМО (Санкт-Петербург) — национальный исследовательский университет, ведущий вуз России в области информационных, фотонных и биохимических технологий. Альма-матер победителей международных соревнований по программированию: ICPC (единственный в мире семикратный чемпион), Google Code Jam, Facebook Hacker Cup, Яндекс.Алгоритм, Russian Code Cup, Topcoder Open и др. Приоритетные направления: IT и искусственный интеллект, фотоника, робототехника, квантовые коммуникации, трансляционная медицина, Life Sciences, Art&Science, Science Communication.

Входит в ТОП-100 по направлению «Автоматизация и управление» Шанхайского предметного рейтинга (ARWU) и занимает 74 место в мире в британском предметном рейтинге QS по компьютерным наукам (Computer Science and Information Systems). Представлен в мировом ТОП-200 по телекоммуникационным технологиям (Telecommunication engineering), а также в ТОП-300 по нанонаукам и нанотехнологиям (Nanoscience & Nanotechnology) ARWU. Входит в ТОП-200 по инженерным наукам (Engineering and Technology), в ТОП-300 по физике и астрономии (Physics & Astronomy), наукам о материалах (Materials Sciences), а также по машиностроению, аэрокосмической и промышленной инженерии (Mechanical, Aeronautical & Manufacturing Engineering) рейтинга QS. Лидер проекта «Приоритет – 2030».

© Университет ИТМО, 2022

© Авторы, 2022

## РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

---

*По секции «Искусственный интеллект»*

**Председатель:** **Духанов Алексей Валентинович**, доцент, доктор технических наук, доцент факультета цифровых трансформаций, ведущий научный сотрудник исследовательского центра в сфере искусственного интеллекта "Сильный искусственный интеллект в промышленности", начальник отдела образовательной деятельности

**Члены редколлегии:**

**Климова Александра Сергеевна**, кандидат технических наук, заместитель декана факультета цифровых трансформаций, заместитель директора национального центра когнитивных разработок, старший научный сотрудник исследовательского центра в сфере искусственного интеллекта "Сильный искусственный интеллект в промышленности"

**Краев Семён Владимирович**, кандидат филологических наук, декан факультета цифровых трансформаций, ведущий инженер исследовательского центра в сфере искусственного интеллекта "Сильный искусственный интеллект в промышленности"

**Монахов Юрий Сергеевич**, кандидат технических наук, инженер факультета цифровых трансформаций

*По секции «Интеллектуальные технологии в инфохимии»*

**Председатель:** **Скорб Екатерина Владимировна**, кандидат химических наук, директор и профессор научно-образовательного центра инфохимии, заведующая лабораторией интеллектуальных технологий в инфохимии

**Члены редколлегии:**

**Уласевич Светлана Александровна**, кандидат химических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории интеллектуальных технологий в инфохимии, доцент научно-образовательного центра инфохимии

**Громов Владислав Сергеевич**, кандидат технических наук, доцент и старший научный сотрудник факультета систем управления и робототехники

**Пантюхин Игорь Сергеевич**, научный сотрудник лаборатории интеллектуальных технологий в инфохимии, ассистент научно-образовательного центра инфохимии

**Балдина Анна Андреевна**, ассистент и инженер научно-образовательного центра инфохимии, младший научный сотрудник лаборатории интеллектуальных технологий в инфохимии

*По секциям «Биоинженерия от цифровых решений до практического применения» и «Предиктивная аналитика для углеводородной энергетики»*

**Председатель:** **Успенская Майя Валерьевна**, профессор, доктор технических наук, директор и профессор центра химической инженерии, директор и ведущий научный сотрудник научно-исследовательский центра биоинженерии

**Члены редколлегии:**

**Фокина Мария Ивановна**, кандидат физико-математических наук, заместитель директора и доцент центра химической инженерии, руководитель лаборатории лазерных нелинейных кристаллов

**Пономарева Алина Александровна**, кандидат технических наук, доцент центра химической инженерии, инженер научно-исследовательского центра биоинженерии

**Подшивалов Александр Валерьевич**, кандидат химических наук, заведующий лабораторией, центра химической инженерии, заведующий научной лабораторией безопасных технологий переработки полимерных материалов, инженер института перспективных систем передачи данных

**Ситникова Вера Евгеньевна**, кандидат химических наук, доцент центра химической инженерии, инженер института перспективных систем передачи данных

## Введение

Сборник содержит статьи по материалам докладов участников Всероссийской конференции Молодые профессионалы. Конференция проводится в целях развития сотрудничества и обмена опытом молодых специалистов и обучающихся высших учебных заведений, а также развития студенческих научных сообществ, содействующих повышению качества подготовки квалифицированных кадров, сохранению научного потенциала и созданию условий для развития научного творчества обучающейся молодежи, интеграции ее в научно-образовательное пространство.

Мероприятие проводится в рамках реализации в форме субсидий из федерального бюджета образовательным организациям высшего образования на реализацию мероприятий, направленных на поддержку студенческих научных сообществ.

[#СНО](#), [#Росмолодежь](#), [#Digital\\_generation](#)

## Искусственный интеллект

---

УДК 004.89

### **ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОГО АНАЛИЗА ДАННЫХ В МОДЕЛИ ГЕТТОИЗАЦИИ СПАЛЬНЫХ РАЙОНОВ**

**Авдюшина А.Е.** (аспирант, Университет ИТМО), **Шелемеха К.С.** (ТюмГУ)

**Научный руководитель: д.т.н., профессор Бессмертный И.А.** (Университет ИТМО)

*e-mail:* [avdushina98@gmail.com](mailto:avdushina98@gmail.com)

*Методы машинного обучения помогают решать множества проблем современных городов во многих областях (здоровье, безопасность, мобильность и т.д.) и такие технологии позволяют моделировать процессы для принятия решений в области городского планирования. Однако существует большое количество социологических и урбанистических исследований относительно процесса появления городских гетто, но при этом нет формализации выделенных критериев. В то же время модель можно верифицировать за счет многолетней истории исследований районов-гетто. В данной работе проведен анализ географически привязанной информации и атрибутивных данных в целях создания методике по определению районов с признаками гетто. Данный анализ проведен на примере города Мурино и района Шувалово-Озерки города Санкт-Петербурга. Для проведения исследования использовались методы сбора данных (пространственные данные и краулинг), кластеризация и определение статистических метрик районов.*

**Ключевые слова:** интеллектуальный анализ данных, умный город, информационная модель, системы поддержки принятия решений, геттоизация.

В литературе и среди междисциплинарных исследователей по всему миру увеличилось количество смешанных систем поддержки принятия решений [1,2]. В настоящее время многочисленными исследованиями доказано, что эффективность городской системы связана с распределением городских функций [3], однако возросла необходимость и в применении методов искусственного интеллекта в государственном управлении. В этом контексте информационная модель города помогает в поиске информации о будущих требованиях, предоставляя целостный вид на город [4, 5]. Подобная модель города располагает актуальной городской базой данных, которая позволяет проводить анализ и моделирование. Пространственный анализ актуален и полезен в исследовании городского неравенства и социальных различий [6]. Пространственные аспекты социального неравенства часто лежат на поверхности, но внимание к пространственности может помочь пролить свет на то, как социальное неравенство и социальные различия распространяются, действуют и воспроизводятся в городской среде. Результаты научных исследований процесса геттоизации способствует привлечению внимания экспертов к понятию гетто в каждой конкретной ситуации при архитектурном проектировании новых районов, например, учитывать дискурсивную практику формирования названия нового микрорайона. Конечно, понятие «гетто», являющееся академическим социологическим понятием, в публичном дискурсе каждой страны и культуры является особым феноменом, также как и в России, и поэтому требует исследования с учетом реальности.

#### **Критерии оценки степени геттоизации**

В статье Чернышевой Л.А. [7] рассматривается как гетто Мурино (новый жилой район в Петербурге), поэтому этот район был выбран как отправная точка исследования и как район, на котором будет верифицирована разрабатываемая модель. Это демонстрационное исследование по методике, разработанной Институтом градостроительства Вильнюсского технического университета имени Гедиминаса [8]. Методика использовалась в градостроительстве при разработке генеральных планов малых литовских городов и других городских проектов. Результаты помогли планировщикам найти подходящие места и функциональное использование городских кварталов.

Модель геттоизации имеет большое количество параметров (массовая застройка, уровень преступности, отсутствие социальных услуг и т.д.), однако, чтобы привести все эти критерии в программный вид, нужно большое количество закрытых данных, поэтому был проведён анализ источников данных. Основным источником картографических данных является OpenStreetMap, который позволяет строить запросы к пространственным данным. Исходя из данных и критериев в статье Чернышевой Л.А. [7] были выделены 3 критерия, на которых будем проверять гипотезу, что Мурино является гетто:

- плотность алкогольных маркетов на квадратный километр;
- объем пустот и неблагоустроенных мест в районе;
- объем и тип объявлений об аренде в районе.

Для проверки гипотезы, что данные критерии являются признаками процесса геттоизации, была разработана методика для проведения сравнительно-сопоставительного анализа. Сравнимаемыми районами были Мурино (гетто-район) и Озерки (территория, не описываемая жителями и исследователями как гетто, но являющаяся спальным районом с многоэтажной застройкой).

### Анализ критериев модели геттоизации спального района г. Санкт-Петербург

Рассмотрим первых из выбранных критериев. Алкоголь продается во многих продуктовых магазинах и наличие продуктовых магазинов — не признак маргинализации среды. При этом продажа алкоголя в формате магазина разливных напитков позволяет обходить ограничения по реализации алкоголя в ночное время. Поэтому были построены запросы к пространственным данным с использованием библиотеки Overpass для выделения объектов и координат с тегом #beer и #alcohol на OpenStreetMap и категорию «Пивной магазин» на Яндекс.Картах. Также проведено объединение полученных данных, убраны дублирующиеся объекты.

Для того, чтобы провести очистку данных проведена кластеризация данных методом k-ближайших соседей и выделены объекты, которые не входят в кластера и являются выбросами. Результаты анализа представлены на рисунке 1.

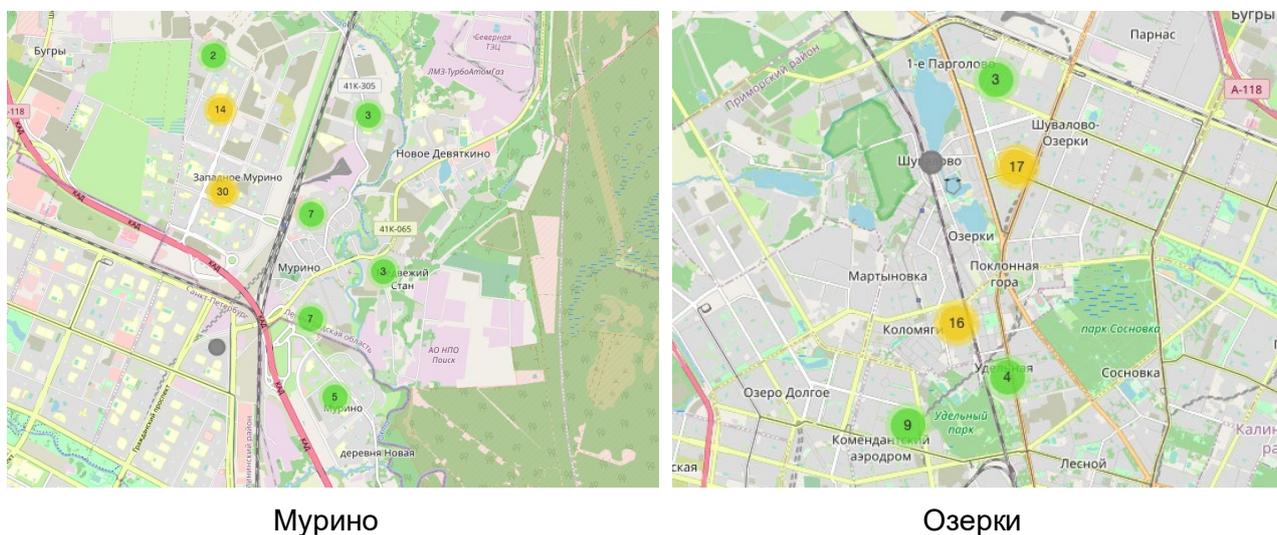


Рис. 1. Кластера с пивными магазинами в Мурино и Озерках

Для определения показателей районов была найдена плотность объектов (местоположение объектов и их количество) на квадратный километр:

- Мурино – 5,3892 /кв.км;
- Озерки – 2,008 /кв.км.

В Мурино — районе как гетто — плотность магазинов разливных напитков в 2,68 раза выше, чем в Озерках — типичном спальном районе.

Теперь рассмотрим второй из выделенных критериев геттоизации. Для оценки количества сдаваемых квартир был разработан парсер для сбора данных о стоимости аренды и объеме объявлений в районах Мурино и Озерки, представленных сервисами продажи и

аренды квартир Циан и Яндекс. Проведено сравнение цены и количество объявлений, сравнительные данные о ценах по исследуемым районам представлены на рисунке 2. В анализ взяли комнаты и квартиры, в которых 1, 2 комнаты. Самая большая сложность заключается в получении общего количества квартир в муниципальных округах, так как эти данные являются кадастровыми и их предоставляет Комитет имущественных отношений. Для определения доли квартир, которые сдают в Выборгском районе Санкт-Петербурга и в Мурино, были построены запросы к кадастровым данным и найдено соотношение количества квартир, которые сдаются, к количеству жилых помещений, результатом анализа является процентное соотношение, которое показывает, что в этих районах сдается схожий объем жилья: 0,3% и 0,4%, соответственно. Эти результаты не дают возможности утверждать, что люди используют потенциальные гетто для инвестиций или покидают их со временем. Район имеет признаки гетто в пространственном и социокультурном отношении, но депопуляции не наблюдается.

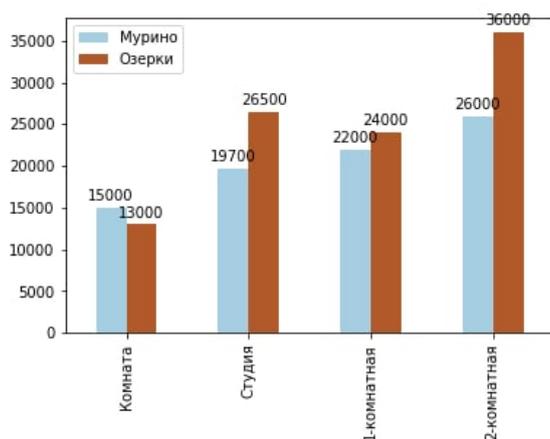


Рис. 2. Диаграмма с ценами на квартиры в Мурино и Озерках

Перейдем к третьему рассматриваемому критерию. Один из признаков геттоизации — большой объем «ничьих» мест (это пустыри, брошенные здания и прочее), представленных на рисунке 3. Быстрый темп жизни и повседневные заботы приводят к сужению понятия «своего» до порога квартиры. Жители домов не стремятся и не требуют благоустройства прилегающих к дому территорий, и стремятся не замечать недостатков, например, отсутствия зелени, лавочек, детских площадок.

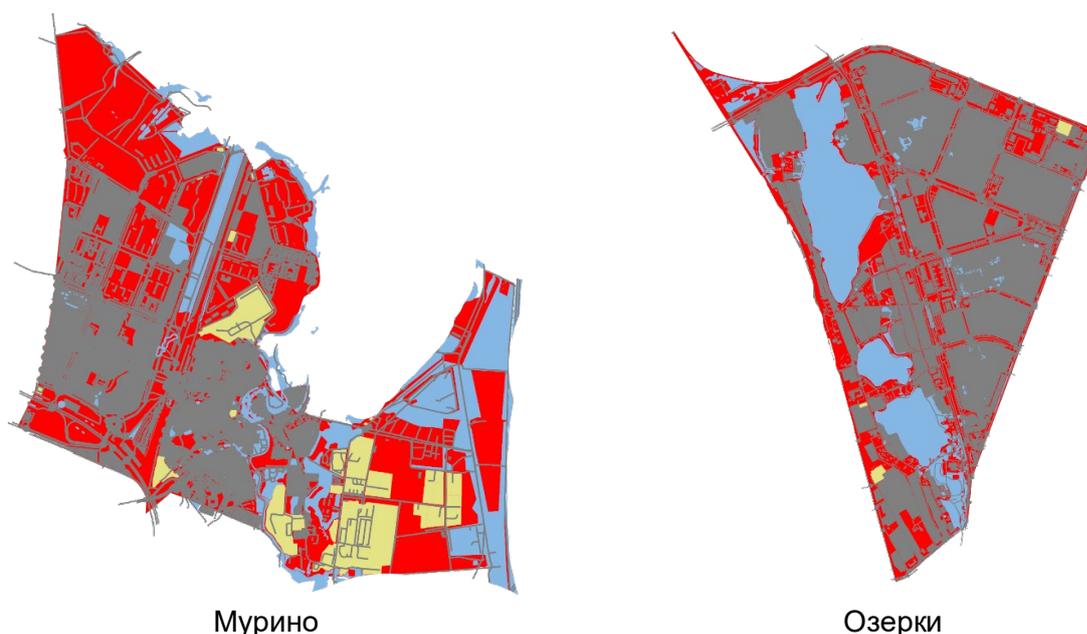


Рис. 3. Карта с разграничением пустот районов

Итак, в Мурино процент пустот составляет 44,29% относительно всей территории района, а в Озерках — 7,46%. Да, район только застраивается, но на карте видно, что даже в частях Мурино, где плотная застройка, между домами — пустота, а в Озерках большой процент территории — это зоны рекреации и зеленые насаждения.

Таким образом, измерение геттоизации района имеет большой потенциал для составления информационной модели города и создания методики по автоматизации анализа процесса геттоизации района, так как позволит своевременно принимать решения. Исследование состояло из этапов, приведенных на рисунке 4.



Рис. 4. Этапы анализа признаков геттоизации района

Сами автоматизированные решения не новы. Но трудности вызывает не поиск метода как таковой, а его применение на конкретной базе данных или к конкретному запросу. К тому же часто для получения результата методы приходится сочетать. Полученная методика позволяет автоматизировать работу с пространственными данными при принятии решений и позволяет преобразовать социологическое исследование в четкие количественные характеристики на открытых данных. Дальнейшее развитие модели геттоизации будет дополнено анализом новостных статей и постов в социальных сетях для формирования контекста территории.

Методами сбора пространственных данных, краулинга веб-сайтов, очистки и объединения данных, кластеризации, оценки плотности распределения и визуализации данных произведен анализ признаков процесса геттоизации. Выполненный анализ позволил выработать методику по оценке уровня данного процесса для принятия решений на общегородском уровне.

## Литература

1. Alex J., Hall D.J., Song J. The Conceptualization of Data-driven Decision Making Capability // Conference: the Americas Conference on Information Systems. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: [https://www.researchgate.net/publication/280051851\\_The\\_Conceptualization\\_of\\_Data-driven\\_Decision\\_Making\\_Capability\\_The\\_Conceptualization\\_of\\_Data-driven\\_Decision\\_Making\\_Capability](https://www.researchgate.net/publication/280051851_The_Conceptualization_of_Data-driven_Decision_Making_Capability_The_Conceptualization_of_Data-driven_Decision_Making_Capability) (дата обращения: 10.10.2022).
2. Wen R., Li S. Spatial Decision Support Systems with Automated Machine Learning: A Review // Preprints. – 2022, 2022090465. DOI: 10.20944/preprints202209.0465.v1.

3. Mirjam S., De Jesus Dionisio M.R., Kingham S. Challenges of Spatial Decision-Support Tools in Urban Planning: Lessons from New Zealand's Cities // Journal of Urban Planning and Development. – 2020. DOI 10.1061/(ASCE)UP.1943-5444.0000575.
4. Galster G., Sharkey P. Spatial Foundations of Inequality: A Conceptual Model and Empirical Overview // The Russell Sage Foundation Journal of the Social Sciences. – 2017. – Vol. 3. – №. 2. – Pp. 1-33.
5. Souza L., Bueno C. City Information Modelling as a support decision tool for planning and management of cities: A systematic literature review and bibliometric analysis // Building and Environment. – 2022. – Vol. 207. – Part A. – P. 108403.
6. Wacquant L. Ghettos and Anti-Ghettos: An Anatomy of the New Urban Poverty // Thesis Eleven. – 2008. – №. 94. – Pp. 113–118.
7. Чернышева Л.А. Российское гетто: воображаемая маргинальность новых жилых районов // Городские исследования и практики. – 2019. – №2 (15). – С. 37-58.
8. Bielinskas V., Burinskienė M., Podviekzo A. Choice of abandoned territories conversion scenario according to MCDA methods. Journal of Civil Engineering and Management. – 2018. DOI: 10.3846/jcem.2018.303.

УДК 004.89

## **АЛГОРИТМ ИДЕНТИФИКАЦИИ ЛИЧНОСТИ ПО РИСУНКУ ВЕН ПАЛЬЦЕВ НА ОСНОВЕ ПРЕДОБУЧЕННОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ**

Диденко Е.С. (студент, Университет ИТМО)

Научный руководитель: к.т.н., доцент Штенников Д.Г. (Университет ИТМО)

e-mail: [ekaterinadidenko20@gmail.com](mailto:ekaterinadidenko20@gmail.com)

*В данной работе разработан алгоритм для систем идентификации личности на основе рисунка вен пальцев для повышения степени защищенности и точности распознавания личности в уже используемых и перспективных системах контроля и управления доступом. Алгоритм предполагает предобработку изображений с помощью различных встроенных функций открытой библиотеки OpenCV, а также использование предобученной нейронной сети VGG-16, которая была дообучена на на датасете с фотографиями рисунков вен пальцев.*

**Ключевые слова:** биометрия, идентификация личности, алгоритм распознавания личности, идентификация по рисунку вен пальцев, Python, OpenCV, VGG-16, нейронные сети.

В современном мире слово «биометрия» встречается в обиходе практически любого человека, а методы биометрические идентификации пользователя все больше укореняются в жизни каждого и становятся неотъемлемой частью ежедневной рутины. Изо дня в день любой может столкнуться с примерами применения биометрического распознавания – начиная от использования обычного интернет-банка, заканчивая аутентификацией при входе в помещение с системой контроля доступа. Колоссальное преимущество идентификации людей по биометрическим данным в том, что для пользования необходимо при себе иметь лишь свою собственную биометрическую характеристику, которая у любого человека всегда с собой.

К сожалению, наиболее используемые биометрические характеристики (например, радужная оболочка глаза или отпечаток пальца) при всей своей распространенности имеют некоторые недостатки. В связи с этим был выбран более надежный биометрический параметр, который стал использоваться относительно недавно – рисунок вен пальцев. Преимущества данного метода:

1. Защищенность – рисунок вен нельзя украсть и подделать. Данная биометрическая характеристика скрыта под кожей от глаз сторонних людей и определяется только под воздействием специального инфракрасного освещения.
2. Высокая надежность – узоры вен каждого человека уникальны, в том числе у близнецов, что обеспечивает наибольшую оптимальность показателей системы FAR (False Acceptance Rate – вероятность ложного допуска) и FRR (False Rejection Rate – вероятность ложного недопуска). Каждые 10 лет шаблон рисунка вен необходимо обновлять из-за возможности изменения узора, что также повышает надежность.
3. Бесконтактное сканирование – для получения считывателем данной биометрической характеристики не требуется контакта со сканером, что помогает предотвратить

распространения инфекций и бактерий. Благодаря такой возможности сканирования технология востребована на современном рынке СКУД и отлично подходит для применения в общественных местах с большим потоком людей.

4. Доступная цена и удобство интеграции – технология достаточно проста в реализации (по сравнению, например, с технологией распознавания по радужной оболочке глаза), в связи с чем не требует огромных финансовых и человеческих затрат. Зачастую, метод распознавания по венам использует ту же аппаратную базу, что и сканеры с отпечатком пальца, что дает возможность объединять технологию распознавания по рисунку вен с другими, при этом повышая уровень защищенности систем контроля и управления доступом.

У метода распознавания по венам, в свою очередь, также есть несколько недостатков:

1. Необходимость особых условий использования – наличие инфракрасного излучателя и отсутствие прямых солнечных лучей, так как считыватели рисунка вен чувствительны к засветке, а качество распознавания напрямую зависит от качества полученного рисунка.
2. На данный момент размер сканеров для получения рисунка вен достаточно большой, что ограничивает область применения.

#### **Анализ существующих решений**

Идентификация по рисунку вен пальцев – молодая технология, в связи с чем аналогов алгоритмов распознавания в открытом доступе не так много. В данной работе было рассмотрено два алгоритма биометрической идентификации на основе вен пальцев – проведено их тестирование на наборе данных (RYeltsin Finger Vein [1]), сравнительный анализ, выделение преимуществ и недостатков методов.

RYeltsin Finger Vein Dataset – открытый набор данных, размещенный в системе Kaggle. Датасет состоит из 3392 изображений 106 человек. У каждой фотографии указана информация о том, с какой руки и с какого пальца снят рисунок вен. Изображения представлены в формате BMP, высотой и шириной 320x240 пикселей и размером 225 кбайт каждое. Пример фотографии датасета представлен на рисунке 1.

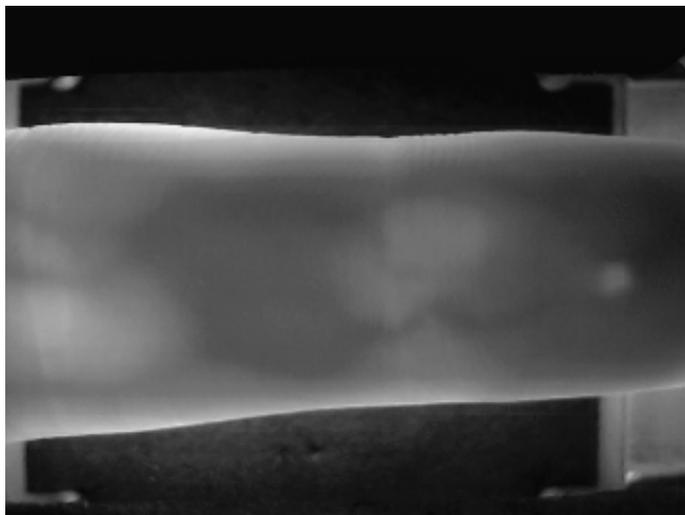


Рис. 1. Фотография из набора данных RYeltsin Finger Vein

Данная работа – итоговый проект по курсу Machine Vision Application (Применение машинного зрения) одного из выпускников Южно-китайский технологического университета. Его подход заключается в использовании традиционных способов обработки изображения, основанные на математических и аналитических функциях. В работе используется высокоуровневый язык программирования Python с использованием модулей Numpy, Math и OS. Для обработки полученных на вход изображений используется фильтр Габора (линейный фильтр, пропускающий определенную «полосу» частот, тем самым обнаруживая границы объекта), а для сравнения изображений используется обычный бинарный метод, который

поляризует изображения и сравнивает их попиксельно. Итогом обработки является идентификатор эталона, который соответствует входному изображению, а также итоговая оценка score (доля совпадений пикселей изображений, переведенная в проценты).

Аналог 2 – Identifying individuals from the vein patterns in their fingers (Идентификация людей по рисунку вен на пальцах) [3].

Работа является магистерской выпускной квалификационной работой одного из выпускников Кейптаунского университета по специальности Electrical and Computer Engineering (Электротехника и вычислительная техника). Это большой исследовательский и практико-ориентированный проект, поэтому в ходе работы автором было разработано и протестировано целых пять алгоритмов идентификации помимо алгоритма обработки фотографий. В тестировании алгоритма для оценки его эффективности использовался лучший алгоритм классификации. Весь алгоритм реализован в MATLAB 8.1 и использует набор инструментов обработки изображений (Image Processing Toolbox), набор инструментов статистики (Statistics Toolbox), а также библиотеку LIBSVM с открытым исходным кодом для применения метода опорных векторов. Для обработки получаемых на вход изображений использовался алгоритм CLAHE (улучшает контрастность изображения путем выравнивания гистограммы цвета), а также методы Miura's Maximum и Curvature Method (находят центральные точки рисунка вен и соединяют их между собой). Для сравнения изображений использовались классификаторы – MHD, Cluster, Canonical LBP, Uniform LBP, Fourier LBP; лучше всего сработал Uniform LBP Classifier – алгоритм локальных бинарных шаблонов с параметром uniform (равномерный), который является простым оператором классификации текстур.

Ниже представлена таблице 1 со сравнением двух алгоритмов-аналогов, где скорость работы алгоритма – скорость работы метода – время полной обработки одного изображения и сравнения его с эталонным используемым методом в миллисекундах (мс), точность алгоритма (accuracy) – метрика, оценивающая долю правильных прогнозов, сделанных разработанным алгоритмом в процентах, FAR (False Acceptance Rate) – вероятность ложного допуска в процентах и FRR (False Rejection Rate) – вероятность ложного недопуска в процентах:

$$\text{Accuracy} = \frac{\text{количество правильных пропусков в систему}}{\text{общее число попыток входа в систему}},$$

$$\text{FAR} = \frac{\text{количество незарегистрированных лиц, принятых системой}}{\text{общее количество попыток входа незарегистрированных лиц}},$$

$$\text{FRR} = \frac{\text{количество зарегистрированных лиц, отклоненных системой}}{\text{общее количество попыток входа зарегистрированных лиц}}.$$

Таблица 1

**Сравнение аналоговых алгоритмов биометрической идентификации на основе вен пальцев**

Алгоритм	Инструменты реализации	Скорость работы алгоритма	Точность алгоритма	FAR, FRR
<b>Распознавание по венам пальцев</b> Автор: Цин Чен	Python, модули numpy, math, os	155 мс	79,5%	FAR = 23% FRR = 18%
<b>Идентификация людей по рисунку вен на пальцах</b> Автор: Анураг Арнаб	MATLAB, Image Processing и Statistics Toolbox, библиотека LIBSVM	199 мс	73%	FAR = 4% FRR = 50%

#### Разработанный алгоритм

Для разработки алгоритма был использован язык программирования Python с дополнительными модулями. Высокая скорость работы алгоритма достигалась использованием различных встроенных функций библиотеки OpenCV (Open Source Computer Vision Library) [4], с помощью которых изображения обрабатывались. Глобально алгоритм

делится на предобработку изображения и на дальнейшую идентификацию с использованием предобученной нейронной сети.

Предобработка изображения представляет собой использование различных функций для нахождения необходимой области изображения для работы с рисунком вен (ROI-области), а также для улучшения качества и четкости фотографии. Например, применяются две встроенные функции: `cv2.normalize` [4] и `cv2.createCLAHE` [4]. Первая функция делает изображение более четким, `cv2.createCLAHE` – функция, которая использует алгоритм CLAHE (Contrast Limited Adaptive histogram equalization [5] – адаптивное выравнивание гистограммы с ограничением контрастности) для улучшения контрастности изображения и избавления от лишних шумов.

Предобработка фотографий продемонстрирована на рисунке 2.



Рис. 2. Процесс предобработки получаемой на вход фотографии

На рисунке 2 последним этапом изображена фотография в том виде, в котором она передается на дальнейшую идентификацию. Видно, что благодаря предобработке фотографии с нее были убраны лишние шумы и элементы, а сам рисунок вен стал виден более четко даже невооруженным глазом.

Основой алгоритма идентификации является предобученная нейронная сеть VGG-16, которая выделяет ключевые признаки на изображениях. VGG-16 – сверточная нейронная сеть, состоящая из шестнадцати сверточных слоев размера 3x3, а также большого количества фильтров. Устройство этой модели нейронной сети показано на рисунке 3, а полное описание модели VGG-16 представлено в источнике [6]. Данная модель была дообучена на наборе данных RYeltsin Finger Vein Dataset для того, чтобы она умела выделять именно ключевые признаки рисунка вен пальцев. Всего выделяется 4096 параметров каждой фотографии.

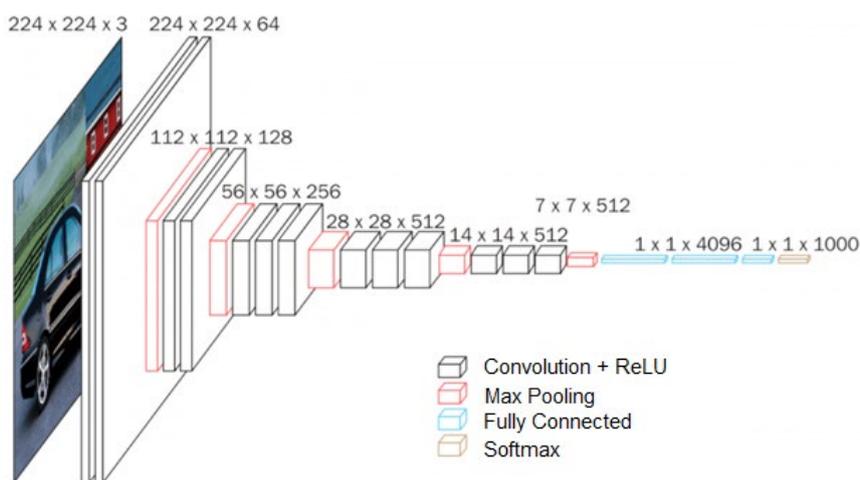


Рис. 3. Архитектура VGG-16

Суть алгоритма идентификации данным методом заключается в использовании косинусного сходства – меры сходства, которая измеряет насколько два объекта похожи. Математически алгоритм подразумевает измерение косинуса угла между двумя векторами, которые были построены на основе выделенных нейронной сетью признаков фотографий, что продемонстрировано в формуле (1):

$$similarity = \cos \theta = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\|\vec{a}\| \times \|\vec{b}\|}. \quad (1)$$

Косинусное сходство – это широко используемый метод измерения подобия, готовые решения которого есть в различных библиотеках. Для данного алгоритма функция косинусного сходства была взята из библиотеки машинного обучения SciKit-Learn. В процессе идентификации строится таблица с коэффициентами, которые выражают похожесть полученной на вход фотографии с базой эталонов (рис. 4). Пороговое значение схожести выбрано равным 0,9 как компромиссное значение между скоростью и безопасностью. Исход идентификации может быть следующий:

- найден коэффициент равный или больше 0,9 – найдена эталонная фотография и идентификация пройдена;
- найдено несколько коэффициентов больше 0,9 – эталонной фотографией считается фотография с наибольшим коэффициентом, идентификация пройдена;
- коэффициента равного или больше 0,9 нету – идентификация считается не пройденной.

	images/1-left-index_1.bmp	images/1-left-index_2.bmp	images/1-left-index_3.bmp	images/1-left-index_4.bmp	images/1-left-index_5.bmp	images/1-left-index_6.bmp	images/1-left-middle_1.bmp	images/1-left-middle_2.bmp	images/1-left-middle_3.bmp	images/1-left-middle_4.bmp
images/1-left-index_1.bmp	1.000000	0.793070	0.910576	0.902802	0.921582	0.909172	0.793904	0.849087	0.826341	0.795382

Рис. 4. Построение таблицы схожести с использованием косинусного сходства

Результатом идентификации считается фотография из базы эталонов, которая наибольшим образом совпадает с полученной на вход фотографией, а также выведение оценки совпадения (коэффициента из таблицы схожести). Скорость работы метода, включающая в себя обработку полученного на вход изображения и сравнение его с одной из базы эталонов: 370 мс.

На рисунке 5 представлена блок-схема разработанного алгоритма идентификации.

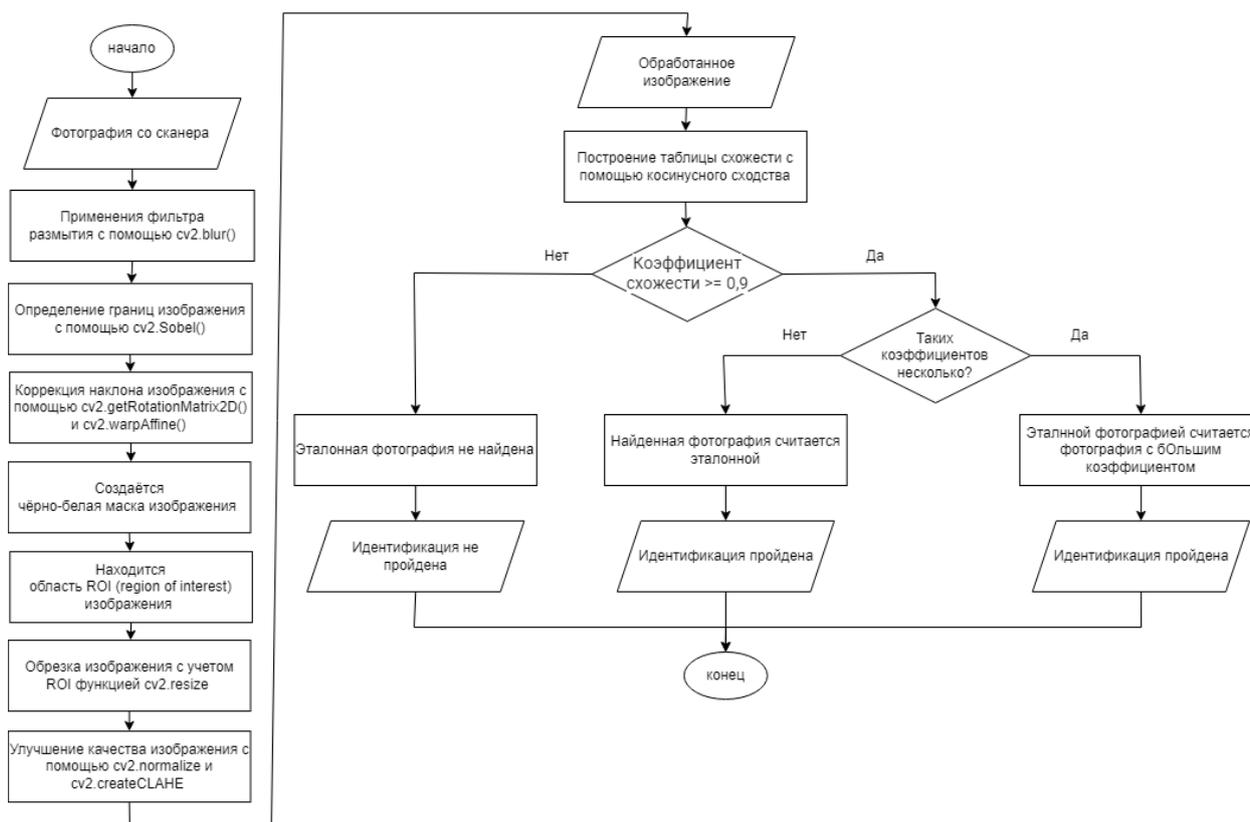


Рис. 5. Фотография из набора данных VERA FingerVein Dataset

### Тестирование и результаты

Тестирование работы алгоритма проходило на наборе данных VERA FingerVein Dataset [7] – это частный набор данных с ограниченным доступом, полученный с репозитория Zenodo. Пример фотографии показан на рис. 6. Датасет состоит из 440 изображений 110 человек, из которых 40 женщин и 70 мужчин в возрасте от 18 до 60 лет. Для каждой

фотографии набора есть информация о поле, возрасте и руке. Изображения представлены в формате PNG, высотой и шириной 250x665 пикселей и размером около 80 кбайт каждое.

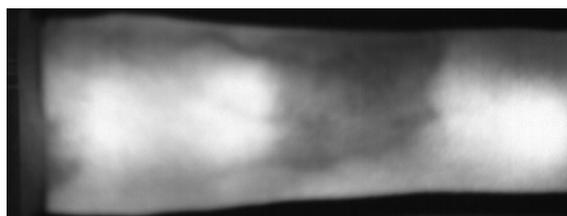


Рис. 6. Фотография из набора данных VERA FingerVein Dataset

Для приближения тестирования к реальным условиям из датасета была создана база эталонов, а также база «испытуемых». Для базы эталонов отобралось сто хороших фотографий указательного пальца правой руки ста разных людей. База «испытуемых» подразумевает собой фотографии, подаваемые на вход алгоритму. Для нее было взято десять фотографий указательного пальца правой руки, четыре из которых присутствовали в базе эталонов, а остальные шесть – изображения людей, которые не зарегистрированы в базе. Для людей чьи эталонные фотографии присутствуют в базе, бралась фотография, отличная от эталона, но с того же пальца, той же правой руки. На вход алгоритмам давалось изображение указательного пальца, которое обрабатывалось и сравнивалось со 100 уже обработанными экземплярами из базы эталонов, на выход выдавался статус идентификации. Если идентификация пройдена, то на выход выдавалось имя, указанное в базе эталонов, а также оценка совпадения. Для более точной оценки эффективности разработанного алгоритма в тех же условиях были протестированы два алгоритма-аналога. Было проведено 10 экспериментов для каждого из алгоритмов (для каждой фотографии из базы эталонов по эксперименту). Для оценки работы алгоритмов результаты усреднены и представлены в сводной таблице 2.

Таблица 2

**Результаты тестирования разработанного алгоритма**

Алгоритм	Инструменты реализации	Скорость работы	Точность	FAR, FRR
<b>Алгоритм с использованием VGG-16</b>	Python, модули Python, библиотеки OpenCV, Tensorflow, SciKit-Learn	0,3 с	97,5%	FAR = 0,2% FRR = 11%
<b>Finger vein recognition</b>	Python, модули numpy, math, os	10 с	79,5%	FAR = 23% FRR = 18%
<b>Identifying individuals from the vein patterns in their fingers</b>	MATLAB, Image Processing и Statistics Toolbox, библиотека LIBSVM	10,9 с	73%	FAR = 4% FRR = 50%

В данной работе представлен алгоритм идентификации личности по рисунку вен пальцев с использованием предобученной нейронной сети VGG-16. Благодаря использованию нейронной сети, которая была дообучена на наборе данных с фотографиями вен пальцев, была достигнута высокая точность алгоритма с низким процентом ложноположительных срабатываний, в отличие от алгоритмов, рассматриваемых как аналоги – точность распознавания была увеличена в среднем на 21%. Для улучшения скорости работы в разработанный алгоритмы идентификации были включены встраиваемые функции библиотеки OpenCV, что позволило достичь значительного сокращения времени обработки фотографии по сравнению с аналогами. Единственная особенность данного метода заключается в том, что для использования VGG-16 необходимо мощная аппаратная база.

Возможным практическим применением алгоритма является создание программного модуля на его основе и встраивание его в системы контроля и управления доступом совместно с аутентификацией, как биометрической, так и обычной.

## Литература

1. Kaggle, Finger Vein. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.kaggle.com/datasets/ryeltsin/finger-vein> (дата обращения: 20.04.2022).
2. Репозиторий проекта, автор: Qing Chen. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://github.com/Qingcsai/Finger-Vein-Recognition> (дата обращения: 23.03.2022).
3. Репозиторий проекта, автор: Anurag Arnab. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://github.com/anuragarnab/vein-recognition> (дата обращения: 25.03.2022).
4. OpenCV Online Documentation. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://opencv.org/> (дата обращения: 03.04.2022).
5. Wikipedia, Adaptive histogram equalization. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: [https://en.wikipedia.org/wiki/Adaptive\\_histogram\\_equalization](https://en.wikipedia.org/wiki/Adaptive_histogram_equalization) (дата обращения: 20.04.2022).
6. VGG16 and VGG19, Keras. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://keras.io/api/applications/vgg/> (дата обращения: 20.04.2022).
7. Zenodo, VERA Fingervein. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.idiap.ch/en/dataset/vera-fingervein> (дата обращения: 20.04.2022).

УДК 004. 912

## **ОПТИМИЗАЦИЯ СТРУКТУРЫ ПОЛНОТЕКСТОВОГО ПОИСКОВОГО ИНДЕКСА, ИСПОЛЬЗУЮЩЕГО НЕЙРОННЫЕ СЕТИ АРХИТЕКТУРЫ "ТРАНСФОРМЕР"**

**Добрынин В.Ю.** (аспирант, Университет ИТМО), **Абрамович Р.К.** (студент, Университет ИТМО), **Горшков А.Д.** (студент, Университет ИТМО)

**Научный руководитель: к.т.н, доцент Платонов А.В.** (Университет ИТМО)

*e-mail:* [vidobrynin@itmo.ru](mailto:vidobrynin@itmo.ru)

*Использование современных языковых моделей архитектуры "Трансформер" в информационном поиске значительно улучшает его качество, но отрицательно влияет на производительность процесса. В работе рассмотрен подход к формированию обратного индекса поисковой системы, позволяющий избежать потерь в скорости при поиске за счет предрасчета расстояний от элементов словаря до документов на этапе индексации.*

**Ключевые слова:** *поисковая система, трансформер, BERT, обратный индекс, оптимизация.*

Предобученные нейронные сети позволяют эффективно использовать сложные модели с меньшими усилиями на их обучение для решения различного рода задач. Информационный поиск не исключение, в данной области долгое время применялись простые алгоритмы, которые показывали высокую производительность, но сравнительно низкое качество поиска. Использование машинного обучения дает возможность значительно улучшить качественные характеристики поиска, но из-за необходимости выполнения большого количества операций, т.е. высокой алгоритмической сложности, это приводит к потерям производительности. В связи с этим современные поисковые системы используют две стадии отбора релевантных запросу документов [1]. На первой стадии используются простые и эффективные алгоритмы отсеивающие большую часть кандидатов, а на второй нейронные сети, позволяющие более точно определить релевантность оставшихся документов. Таким образом, сочетается скорость простых алгоритмов и качество сложных. Но такая архитектура имеет свои недостатки: полученные на первом этапе документы отбираются без понимания семантики текстов, а также пропускаются потенциально релевантные документы из-за несовпадения словаря запроса и документов [2]. В работе представлен подход к построению обратного индекса поисковой системы с использованием нейронной сети архитектуры "Трансформер", направленный на преодоление вышеуказанных недостатков. Особенность подхода заключается в том, что расстояния от элементов словаря, с учетом контекста, до документов вычисляются на этапе индексации с помощью модели, а поиск выполняется по индексу без нее, в результате чего поиск выполняется быстро и качественно с учетом семантики текстов.

Предлагаемый подход основан на использовании нейронной сети архитектуры "Трансформер" для поиска сходства между запросом и документом. В частности, на текущий момент, BERT [3] является одной из лучших моделей этой архитектуры для задач обработки

естественного языка и информационного поиска. Данная модель помогает представить документ или запрос в многомерном семантическом пространстве, используя которое можно находить расстояние или иначе сходство между документом и запросом, принимая во внимание смысл текстов. Однако использование глубоких нейронных сетей сопровождается потерями в производительности, что может быть критичным при прямом взаимодействии пользователя с поисковой системой. Ввиду этого отличительной чертой предлагаемого подхода является то, что он подразумевает использование нейронной сети только во время построения индекса. Это достигается благодаря особой структуре обратного индекса, позволяющей хранить всю необходимую для поиска информацию.

Обратный индекс представляет собой хеш-таблицу, ключами которой являются все элементы словаря, а значениями – данные, отображающие расстояние конкретного элемента до документа, в котором он встречается. В упрощенном понимании во время индексации каждый документ разбивается на токены и затем, используя BERT, между токеном и документом, содержащим данный токен, находится расстояние, детальное описание алгоритма нахождения которого представлено ниже. Далее в обратный индекс для заданного токена сохраняется идентификатор документа и расстояние между ним и токеном. Если этот токен встречается в другом документе, то в индекс к уже существующим данным добавляется идентификатор другого документа и соответствующее расстояние. Таким образом, происходит построение индекса для всего набора документов и токенов встречающихся в этих документах. На рисунке 1 проиллюстрирован процесс индексации.

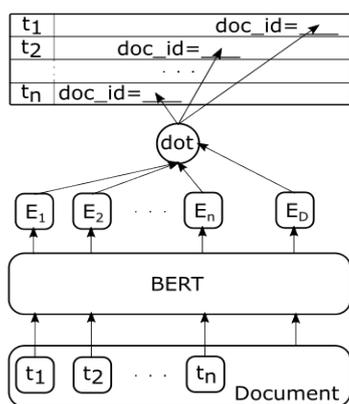


Рис. 1. Индексация документа (упрощенный вариант)

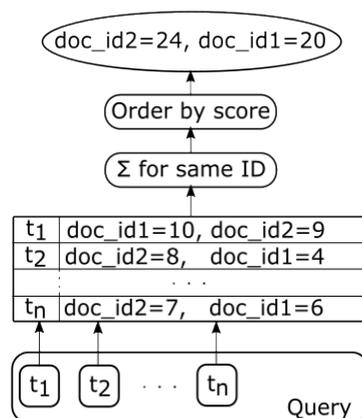


Рис. 2. Поиск документов (упрощенный вариант)

В работе были рассмотрены два способа поиска расстояния между токеном и документом. Первый подразумевает преобразование токена и документа в многомерные вектора, между которыми впоследствии будет находиться расстояние с помощью косинуса угла между ними или скалярного произведения, данный способ представлен на рисунке 1. Второй способ состоит в том, чтобы обучить модель выдавать расстояние сразу, принимая во внимание более глубокую интерпретацию текстов, из-за чего данный вариант выбран в качестве предпочтительного.

Рассмотренный ранее процесс индексации имеет недостаток в виде отсутствия учета контекста токенов. Данный недостаток решается путем разбиения каждого документа на наборы токенов одинаковой длины. Так для длины равной 3 и предложения “Университет ИТМО расположен в Санкт-Петербурге” наборы будут следующие: [Университет, ИТМО], [Университет, ИТМО, расположен], [ИТМО, расположен, Санкт-Петербурге], [расположен, Санкт-Петербурге]. Для них находится расстояние до документа, после чего это расстояние присваивается каждому токеном в наборе. Как видно из примера, в разных наборах может встречаться один и тот же токен, что означает что одному токеном принадлежит несколько расстояний до документа, зависящих от соответствующего контекста. Эти расстояния усредняются и результат, учитывающий контекст, записывается в обратный индекс.

Процесс поиска в упрощенном варианте подразумевает разбиение запроса на токены, по которым будут найдены пары идентификатора документа и расстояния в индексе. Для пар с

одинаковым идентификатором расстояния суммируются, после чего результат сортируется по убыванию полученных расстояний. Таким образом, пользователь получает ранжированный список документов, извлеченных из хранилища по идентификатору. На рисунке 2 проиллюстрирован процесс поиска.

Важно отметить, что данный алгоритм поиска не решает проблему несоответствия словаря. Описание решения данной проблемы будет рассмотрено в последующих работах.

Предложенный алгоритм построения обратного индекса реализуется на JVM языке Kotlin, что дает доступ ко всему многообразию технологий, доступных в JVM платформе. Реализацией нейронной сети архитектуры “Трансформер” была выбрана PyTorch BERT модель, дообученная для задачи предсказания следующего предложения. В качестве реализации обратного индекса, хранимого на диске, была выбрана подсистема хранения резидентной базы данных h2. MS MARCO [4] выбран в качестве набора индексируемого набора документов. Ввиду того, что использование BERT требует больших вычислительных мощностей, на данном этапе, индексация полного набора данных не была выполнена.

Данная работа предлагает новый подход к построению обратного индекса информационно поисковой системы и поиска в нем. Он позволяет принимать во внимание более глубокую интерпретацию запроса и документа, благодаря использованию нейронной сети архитектуры “Трансформер”. Особенностью упрощенного подхода является отсутствие необходимости использовать нейронную сеть во время выполнения поисковых запросов пользователем, в результате чего это позволяет сочетать как учитывание семантики текстов, так и скорость поиска, но он не подразумевает решения проблемы несовпадения словаря, её рассмотрение будет выполнено в будущих работах. Планируется выбор более подходящей реализации обратного индекса, на данный момент Apache Lucene [5] рассматривается как целевое решение. Полная индексация набора документов будет выполняться на машине с видеокартами.

## Литература

1. Chen R.-C., Gallagher L., Blanco R., Culpepper J.S. 2017. Efficient Cost-Aware Cascade Ranking in Multi-Stage Retrieval // In Proceedings of the 40th International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval (Shinjuku, Tokyo, Japan) (SIGIR '17). Association for Computing Machinery, New York, NY, USA. – Pp. 445–454. DOI: 10.1145/3077136.3080819.
2. Furnas G.W., Landauer T.K., Gomez L.M., Dumais S.T. The vocabulary problem in human-system communication // Commun. ACM 30. – 1987. – №11. – Pp. 964–971.
3. Devlin J., Chang M.-W., Lee K., Toutanova K. Bert: Pre-training of deep bidirectional transformers for language understanding // arXiv:1810.04805, 2018.
4. Nguyen T., Rosenberg M., Song X., Gao J., Saurabh Tiwary R.M., Deng L. MS MARCO: A Human Generated MACHine Reading COmprehension Dataset. arXiv:1611.09268. – 2016.
5. Apache Lucene open-source search software. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://github.com/apache/lucene> (дата обращения: 16.10.2022).

УДК 004.056

## ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ В РАБОТЕ НЕКОММЕРЧЕСКИХ ОРГАНИЗАЦИЙ

Некрасова Д.В. (Институт экономики УрО РАН)

Научный руководитель: д.э.н., доцент Урасова А.А. (Институт экономики УрО РАН)

e-mail: [pfie@mail.ru](mailto:pfie@mail.ru)

*Искусственный интеллект в деятельности некоммерческих организаций позволяет оптимизировать работу организаций, заменив выполнение ряда конкретных задач, которые выполняли сотрудники технологическими решениями искусственного интеллекта, а сотрудникам сфокусироваться на работе с отдельными частными ситуациями. Авторами рассмотрены практики внедрения искусственного интеллекта в третий сектор как перспективное направление для развития некоммерческого сектора в регионе. Искусственный интеллект как прорывная технология делает возможным разработку оптимальных управленческих решений в новых условиях..*

**Ключевые слова:** *некоммерческие организации, третий сектор экономики, искусственный интеллект, non-profit organizations, third sector of the economy, artificial intelligence.*

Некоммерческие организации как явление длительное время устойчиво развивается в российских регионах. Это те, организации, которые могут выявить проблему в общественном секторе и предложить нестандартное решение социально-экономической проблемы. Стоит отметить, что сегодня, некоммерческие организации имеют достаточно высокий уровень компетенций в решении тех или иных проблем и могут предлагать новые инновационные решения тех или иных проблемных областях, внедрять новые перспективные технологии, а также предлагать эффективные решения проблемы региональным органам государственной власти и местного самоуправления на системном уровне.

Федеральный закон определяет искусственный интеллект как – «комплекс технологических решений, позволяющий имитировать когнитивные функции человека (включая самообучение и поиск решений без заранее заданного алгоритма) и получать при выполнении конкретных задач результаты, сопоставимые, как минимум, с результатами интеллектуальной деятельности человека. Комплекс технологических решений включает в себя информационно-коммуникационную инфраструктуру (в том числе информационные системы, информационно-телекоммуникационные сети, иные технические средства обработки информации), программное обеспечение (в том числе, в котором используются методы машинного обучения), процессы и сервисы по обработке данных и поиску решений» [1].

Таким образом, интерпретируя определение искусственного интеллекта применительно к некоммерческим организациям, можно сказать, что это технологические решения, которые позволяют повысить эффективность работы сотрудников путем решения задач интеллектуальной оптимизации и создать такой результат работы, который позволит имитировать когнитивные функции человека в результате работы.

По мнению Благотворительного фонда развития филантропии Россия, в первую очередь, некоммерческие организации используют механизмы искусственного интеллекта для более эффективной работы. Так, с помощью искусственного интеллекта третий сектор может проводить мониторинг качества оказания социальных услуг в регионе, анализировать отзывы на сайтах. Также это может быть предиктивная аналитика, связанная с анализом актуальности своих услуг. Следующим моментом взаимодействия некоммерческих организаций с искусственным интеллектом становятся программы, упрощающие сдачу отчетности в Министерство юстиции РФ. Также с помощью искусственного интеллекта некоммерческие организации могут вести реестры и базы данных. Отдельно стоит отметить и чат-боты и колл-центры, которые могут использоваться некоммерческими организациями [2]. Следовательно, некоммерческие организации постепенно начинают внедрять в работу искусственный интеллект, который может оказывать положительное влияние на некоммерческую организацию.

Сегодня искусственный интеллект может оказывать содействие в осуществлении операционной работы, а также может внедряться для работы с целевой аудиторией, для внедрения значительно улучшенных практик. «Когда нацеленность на позитивные социальные изменения соединяются с возможностями новых технологий рождаются решения, которые могут быстро изменить мир к лучшему», - говорит Мария Баландина, директор Фонда «Друзья» [3]. Следовательно, искусственный интеллект может значительно усилить некоммерческий сектор в работе и внести новые варианты оптимизированные работы.

Однако, по результатам исследования фонда «Истоки», лишь 4% российских НКО используют в работе возможности искусственного интеллекта [4]. Таким образом, мы понимаем, что практики внедрения искусственного интеллекта в работу третьего сектора уже существует, однако являются малозначительными.

Одним из примеров внедрения искусственного интеллекта в практику работы некоммерческой организации является практика Фонда «Подари жизнь» и сервиса «Юридическая поддержка». В рамках работы сервиса родители могут узнать на какую поддержку от государства они могут рассчитывать. Сервис задает несколько вопросов и выдает необходимую информацию. Внедрение такого формата работы позволяет фонду разгрузить юристов, от часто повторяющихся вопросов, и погрузить их в более сложные

ситуации, требующие адресной помощи [5]. Таким образом, с помощью искусственного интеллекта некоммерческая организация разгрузила сотрудников и передала часть работы искусственному интеллекту, позволив юристам сфокусироваться на частных случаях.

Еще одной практикой взаимодействия третьего сектора в сфере искусственного интеллекта является благотворительный проект «Новая галерея цифрового искусства», в рамках которого проводился аукцион картин, созданных нейросетью. Собранные средства планировалось направить в фонды «Линия жизни» и «Галчонок» [6]. Следовательно, с помощью искусственного интеллекта можно привлекать внимание к деятельности некоммерческих организаций, и искусственный интеллект наравне с человеком может производить продукты для благотворительных целей.

Следующей практикой внедрения искусственного интеллекта в работу некоммерческих организаций является регистр болящих буллезным эпидермолизом и ихтиозом, созданный благотворительным фондом «Дети-бабочки». В данном регистре собирается и обрабатывается информация об истории болезни, клинических проявлениях, генетических исследованиях и об участии пациентов в программах помощи. Регистр закрыт и используется врачами и пациентами, однако, данные регистра выгружаются на сайт фонда и благодаря нему можно кликнуть на карточку определенного пациента и узнать на какие средства он проходит лечение [7]. Данная практика демонстрирует, как некоммерческая организация с помощью искусственного интеллекта смогла выстроить систему взаимодействия участников процесса и автоматизировать часть алгоритмов в работе.

Таким, образом, искусственный интеллект в деятельности третьего сектора способен приносить новые варианты работы, путем решения задач интеллектуальной оптимизации и создать такой результат работы, который позволит имитировать когнитивные функции человека в результате работы, высвобождая время сотрудников для адресной и частной работы с целевой аудиторией, а также выстраивать эффективные алгоритмы взаимодействия некоммерческих организаций с целевой аудиторией. На наш взгляд, внедрение искусственного интеллекта в работу некоммерческого сектора позволит усилить позиции отдельных организаций в регионе и вывести работу на качественно новый уровень. Однако, стоит учитывать, что организации должны иметь достаточно высокий уровень компетентности в своей сфере и опыт работы.

Работа выполнена в рамках НИР ИЭ УрО РАН.

## Литература

1. О проведении эксперимента по установлению специального регулирования в целях создания необходимых условий для разработки и внедрения технологий искусственного интеллекта в субъекте Российской Федерации - городе федерального значения Москве и внесении изменений в статьи 6 и 10 Федерального закона "О персональных данных" от 24.04.2020 N 123-ФЗ (последняя редакция). [Электронный ресурс]. – Режим доступа: [http://www.consultant.ru/document/cons\\_doc\\_LAW\\_351127/](http://www.consultant.ru/document/cons_doc_LAW_351127/) (дата обращения: 28.09.2022).
2. Фонд «Истоки» представил результаты масштабного исследования. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://istoki-foundation.org/fond-istoki-predstavit-rezultaty-issledovaniya-tsfrovizatsii-v-blagotvoritelnoj-sfere/> (дата обращения: 28.09.2022).
3. Искусственный интеллект выбрал «Подари жизнь». [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://podarizhizn.ru/ru/publications/premiu-poluchil-servis-uridicheskaya-podderzhka> (дата обращения: 28.09.2022).
4. В России пройдет первый благотворительный аукцион картин, созданных искусственным интеллектом. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.asi.org.ru/report/2022/09/06/v-rossii-projdet-pervyj-blagotvoritelnyj-aukcziion-kartin-sozdannyh-iskusstvennym-intellektom/>. (дата обращения: 28.09.2022).
5. Официальный сайт АСИ. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.asi.org.ru/news/2020/05/14/deti-babochki-registr-sozdanie/> (дата обращения: 28.09.2022).
6. Официальный сайт благотворительного фонда развития филантропии Россия. [Электронный ресурс]. URL: <https://philanthropy.ru/novosti-organizatsij/2021/09/17/106107/> (дата обращения: 28.09.2022).
7. Официальный сайт Россия страна возможностей. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://rsv.ru/news/1/3090/> (дата обращения: 28.09.2022).

УДК 004.8

## **АНАЛИЗ НЕЙРОСЕТЕВЫХ МОДЕЛЕЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ СУДЕБНЫХ РЕШЕНИЙ**

**Стёба О.В.** (аспирант, КНИТУ-КАИ им. А.И. Туполева)

**Научный руководитель: д.т.н., доцент Новикова С.В.** (КНИТУ-КАИ им. А.И. Туполева)

*e-mail:* [it.intellect.styoba@gmail.com](mailto:it.intellect.styoba@gmail.com)

*Данная статья представляет собой результат исследования в целях продолжения работы над созданием интеллектуальной экспертной системы поддержки принятия решений на основе нейросетевого семантического анализатора корпуса юридических текстов DigiLex. Цель данной статьи – обзор существующих систем прогнозирования судебных решений и нейросетевых моделей, решающих аналогичные вопросы, и выявление закономерностей, шаблонов и особенностей, присущих именно сфере предсказания судебных решений.*

**Ключевые слова:** *право, цифровые технологии, гражданское право, прогнозирование судебных решений, ПСР, корпус юридических текстов, нейросетевые модели, интеллектуальные системы поддержки принятия решений.*

## **ANALYSIS OF NEURAL NETWORK MODELS USED TO PREDICT COURT DECISIONS**

**Steba O.V.** (graduate student, KNRTU-KAI named by A. I. Tupolev)

**Scientific supervisor: Dr. tech. Sciences, Associate Professor Novikova S.V.** (KNRTU-KAI named by A.I. Tupolev)

*e-mail:* [it.intellect.styoba@gmail.com](mailto:it.intellect.styoba@gmail.com)

*The article is the result of research to continue working on the creation of an intelligent expert decision support system based on the neural network semantic analyzer of the corpus of legal texts DigiLex. The purpose of this article is to analyze existing prediction systems of court decisions and neural network models that address similar issues and to identify patterns and features that are specific to the area of Legal Judgment Prediction.*

**Keywords:** *law, digital technologies, civil law, legal corpus, neural network models, intelligent decision support systems, Legal Judgment Prediction, LJP.*

In recent years, the development of information technology has significantly changed the world around us, including various spheres of life in our society. This has an impact on the economy in general and the labor market in particular - many professions are being transformed and some are disappearing from the market forever, the number of jobs is decreasing due to digitalization and robotization, etc.

Moreover, around the world, the coronavirus pandemic has also transformed many productions, logistics, environmental, and many other processes, changing their formats to more flexible, digital, remote ones.

As a result, this has also affected such a conservative sphere in terms of technological modernization as the law. The practice of the last decade indicates that this industry is gradually and at a measured pace changing the direction of its movement, taking into account the requirements of the digitalization of the modern economy. For example, in April 2022 at the conference "Digital competence of the lawyer of the future", held at the IX Moscow Legal Forum, taking into account the relevant statistics, the limits of digitalization in the legal profession were set at the level of 30 percent [2,3].

All the above reflects the objective requirements of the economy in recent years, in particular, the need to optimize the process of making a profit based on the results of economic activity, by reducing the time spent on the provision of routine services, work units, etc. As a consequence, in jurisprudence was created such technological areas as Legal Tech. It is just aimed at solving such problems, for example, creating robot-lawyers to automate the routine procedures of drafting and preparing agreements and contracts, drafting and certifying digital powers of attorney, as well as claims and statements of claim for filing in the courts, etc.

For the last five years or so, a sub-branch of Legal Tech that addresses more specific and narrowly focused issues has been Legal Judgment Prediction (hereinafter – LJP). The international

legal community indicates that analyzing and predicting legal data will improve the justice system by clarifying which cases will be a waste of time and money for the client, as well as identifying signs of biased or inconsistent judging. All of this will lead to a better understanding of how the legal system works [2]. In this paper, we will analyze existing judicial decision prediction systems and neural network models that address similar issues and identify patterns, patterns, and features specific to the area of judicial decision prediction. In the conclusion, we will present the identified patterns and peculiarities of neural network model construction and use revealed as a result of this analysis.

### Overview of major neural network models for LJP

Scientists, programmers, legal practitioners, and the judicial community have combined their efforts to create several artificial intelligence models that can optimize court operations. Currently, China has made the greatest progress in this area, as can be seen by the official statement of the Information Center of the Supreme Court, according to which the intelligent judicial system is now on the desktop of every working judge [10].

China's judicial artificial intelligence is spreading to all levels of the PRC justice system, advising judges and participating in every verdict. The structure and technical capabilities of the smart court system provides its users with access to the information bases of the Chinese police, prosecutor's office and government. This use of databases also supplies an additional opportunity for the population to use the social credit system of this state.

As for other countries, development in this area is proceeding at a different pace and with varying success there.

#### 1. FantasySCOTUS (USA) [6].

In 2015, American researchers Josh Blackman, Daniel Martin Katz, and Michael Bommarito made a real breakthrough in the field of predicting court decisions. These authors created an algorithm that made it possible to predict the results of judicial practice by the U.S. Supreme Court. The study used data from court decisions from 1816 to 2015, exclusively BEFORE the decision on the merits. In their work, the authors indicate that the accuracy of their proposed methodology was 70.2% at the case completion level. In absolute terms, the result was the exact prediction of 28 thousand cases and 240 thousand judges' votes.

During the construction of the algorithm architecture, the scientists pursued the following goals: generalization, consistency, as well as applicability beyond sampling. The source data for their research was the Supreme Court Database (SCDB).

Outcome Variable. To develop a generalized model capable of handling all cases, including non-binary cases, the authors created a disposition coding map that identifies a judge's vote as (1) overturned, (2) affirmed, or (3) other, depending on the judge's vote and the case decision [6].

A random forest classifier was chosen in constructing the model. Random forests are a special case of ensemble methods. On this basis, bootstrap aggregation on random substrates of training data is the foundation by which a forest of statistically diverse trees is built. For prediction, calculations are first made for each of these trees, followed by the calculation of averages over the entire forest. The authors of the model had three modeling goals: generality, consistency, and applicability outside the sample.

The authors presented to the scientific community the results of their study of trial outcome prediction, which can be seen in Table 1.

Table 1

**Effectiveness of case prediction, unadjusted estimate [6]**

Class	Feedback	Accuracy	F1 Score	Support
No cancellation	0.71	0.83	0.77	16,748
Canceled	0.67	0.50	0.57	11,340
Average/Total	0.70	0.70	0.69	28,080

The procedure of predicting the outcome of the case is based on the analysis of the behavior of the majority of specific judges and their attitude to the previous judicial precedents on a similar topic.

The correctness of this procedure and the algorithm, in general, is proved by the fact that for the period 1816 – October 2014 the algorithm in question showed a prediction accuracy of 70,2%.

The authors have clearly demonstrated that their approach is consistent and universal. This is confirmed by the data on the performance of the algorithm over a period of two hundred years, which are shown in the aforementioned table. The left side of Table 1 demonstrates the accuracy of the time series of the mathematical model under consideration for a cross-section of court cases, and the right side shows the accuracy of prediction at the justice level.

To summarize, we can say that the authors of this mathematical model were able to implement an algorithm with a good accuracy rate of 70,2% at the level of the court case and 71,9% at the level of justice based on data for a fairly long period. This indicates this model's superiority over all existing basic models by all indicators at that time.

## 2. **Lawformer** is a pre-trained language model for Chinese legal documents (China).

Lawformer is a pre-trained model capable of processing texts in Chinese that are longer than 512 tokens, which is a limitation on the number of tokens processed in most current neural network models of the BERT family. It encodes documents containing more than a thousand tokens, using the Longformer model as the main encoder. This model does not use the full internal attention mechanism to encode a long sequence. It produces a layout of sliding window attention, extended sliding window attention, and global attention mechanisms.

The Chinese researchers used the CAIL-Long dataset, which includes both civil (1,099,605) and criminal cases (1,129,053) that are exactly identical to the original documents [5].

Lawformer achieves the best performance among existing models on both micro and macro-F1 scores, indicating that Lawformer is capable of extracting key information from a fairly voluminous body of factual material. In addition, the data used for cases with different labels (charges, causes of action, and laws) is unbalanced, but Lawformer is able to process labels even under these inherently unfavorable conditions [5].

## 3. **MSJudge framework** – multitasking learning process (China).

The MSJudge framework is a structure with a "bionic design" that allows for multistage interaction with document content. In particular, to identify links between allegations, judicial debates, and the actual composition of cases. Among other things, this framework is able to recognize facts and predict judgments - identify legal facts and then make judgments (conclusions) about each lawsuit.

The model is trained on data from a dataset that includes 70,482 private lending cases (each case in the dataset includes the plaintiff's claims, trial transcripts, and court verdict). In total, the dataset contains more than 4.1 million judgments and 133,209 statements. In the main task classifier, the authors identified the following labels: denial, partial support, and claim support.

The authors in the article indicate that the structure of the model is three modules and functions in a multitask observation mode with multistage representation learning. The above allows the model to solve prediction problems by learning and at the same time visualizing the interactions between "debates and facts", "facts and assertions" and "between assertions" [9].

Given the data obtained by the authors during the research, MSJudge outperforms similar models in some respects. In this article, we can see, that it gives better performance than the Lawformer model mentioned above. On the micro<sub>1</sub> score according to the multistage trial database, the MSJudge shows 86,5%. Considering the equivalent prediction efficiency of this model, which is 86,6% on the micro score, we can conclude that the model is capable of optimizing case presentation at various stages for more practical use.

## 4. **LEGAL-BERT**: BERT models for the legal domain (European Union).

The creators of the model were able to adapt BERT with additional pre-training on subject-oriented corpora and pre-train BERT from scratch on subject-oriented corpora. The authors created, with fine-tuning, a broader hyperparameter search space for solving subsequent problems in LEGAL-BERT.

12 GB of various legal texts in English from a variety of fields have been collected to address the pretraining goals of all LEGAL-BERT variations.

LEGAL-BERT-SC has a similar architecture to the BERT-BASE model (12 layers, 768 hidden blocks, and 12 attention blocks (110 M parameters) [4].

It should be particularly noted that the performance growth is observed in the most complex finite state tasks (multilevel classification in ECJ decisions and contract header, lease information in CONTRACTS-NER), where knowledge of the subject domain plays a very important role [11].

5. **LBOX OPEN, LCUBE** is a multitask test for understanding the Korean legal language and predicting judgments (Korea).

LBOX OPEN is capable of solving two legal judgment classification and prediction tasks (LJP) and one summarization task each [8].

The datasets used to train this model consist of 11,000 criminal cases in which the model is asked to predict fines, imprisonment with correctional time, and imprisonment without correctional time for given facts, and 5,000 civil cases containing factual and exemplary claims for damages. The output of the model provides degrees of acceptance of the plaintiff's claim, presenting a kind of scoring [7].

The legal corpus under consideration consists of 150,000 Korean precedents (264 million tokens). It solves two tasks of classification - predicting case names (10 thousand) and laws (3 thousand) based on the actual description of individual cases. As a result of the authors' research, they created the first legal language model in the Korean language LCUBE and trained on the legal corpus LBOX OPEN [7].

6. **Robot-judge** – the development of the company "Megafon Retail" (Russia).

The developers of the company "Megafon Retail" created an intelligent system and installed it at three magistrates' court stations in the Belgorod region. It is able to recognize incoming documents, then analyze them, and finally - prepare a draft decision for the justice of the peace. In practice, this model was used only during the consideration of court cases with the tax service for the issuance of court orders. During two months of this experiment, the results showed that the time spent on the preparation of the judicial act decreased by 84%, and the time needed for filling in the case card decreased by 96%, which proves the effectiveness of this project for judicial authorities [1].

7. **Caselook** – a system for searching and analyzing court practices (Pravo.Tech Company – Russia).

Caselook is one of the subsystems of the Casebook system used to analyze court cases and check companies.

One of the modules of Caselook carries out forecasting of the probability of the outcome of a court case with 82% accuracy. The mathematical probability of the outcome of the case is calculated by an artificial intelligence-based algorithm [12].

In our review we came to the following conclusions:

1. LJP problems are more accurately and optimally solved by deep learning neural network models, meanwhile, statistical and linear models also sometimes successfully solve private-specific problems.
2. The main feature of judgment texts is their long length, which complicates the use of BERT models since they have a processing length limit of 512 tokens. Therefore, to solve such specific tasks more suitable models Longformer and its modifications, TransformerXL and XLNet.
3. Given the peculiarities of the subject area, models developed based on court documents of the Anglo-Saxon legal family are in most cases inapplicable to work with judicial data of the Romano-Germanic system of law.
4. At the experimental level, mathematical models created based on the relevant national language of a particular legal system in general and the relevant state in particular work best.

This information will be used to build and optimize the DigiLex neural network model under development.

## Литература

1. Робот-судья: реальность или фантастика – решали на ПМЮФ-22. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://pravo.ru/lf/story/241675/> (дата обращения: 11.08.2022).

2. Робот-юрист "Сбера" выдал свыше 2,5 млн юридических заключений за восемь месяцев работ. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://tass-ru.turbopages.org/tass.ru/s/obschestvo/9690435/> (дата обращения: 21.08.2022).
3. Робот-юрист: как сэкономить рабочее время квалифицированных сотрудников. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://sber.pro/publication/robot-iurist-kak-sekonomit-rabochee-vremia-kvalifitsirovannykh-sotrudnikov> (дата обращения: 21.09.2022).
4. Chalkidis I., Fergadiotis M., Malakasiotis P., Aletras N., Androutsopoulos I. LEGAL-BERT: The Muppets straight out of Law School. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://arxiv.org/abs/2010.02559>. (дата обращения: 21.08.2022).
5. Chaojun X., Hu X., Liu Z., Tu C., Sun M. Lawformer: A Pre-trained Language Model for Chinese Legal Long Documents. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://arxiv.org/abs/2105.03887> (дата обращения 21.09.2022).
6. Katz D.M., Bommarito M.J., Blackman J. A general approach for predicting the behavior of the United States Supreme Court. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://arxiv.org/abs/1612.03473> (дата обращения: 15.09.2022).
7. Hwang W., Lee D, Cho K., Lee H., Seo M. A Multi-Task Benchmark for Korean Legal Language Understanding and Judgement Prediction. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://arxiv.org/abs/2206.05224> (дата обращения: 21.09.2022).
8. Ma L. et al. Legal Judgment Prediction with Multi-Stage Case Representation Learning in the Real Court Setting // Proceedings of the 44th International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval. – 2021. – С. 993-1002.
9. Vijit M., Rishabh S., Kumar N.S., Kripa G., Kumar G.S., Arnab B., Ashutosh M. ILDC for CJPE: Indian Legal Documents Corpus for Court Judgment Prediction and Explanation. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://arxiv.org/abs/2105.13562> (дата обращения: 21.09.2022).
10. Stephen Chen. China's court AI reaches every corner of the justice system, advising judges and streamlining punishment. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.scmp.com/news/china/science/article/3185140/chinas-court-ai-reaches-every-corner-justice-system-advising/> (дата обращения: 15.09.2022).
11. Tsarapatsanis D., Aletras N. et al. Predicting judicial decisions of the European Court of Human Rights: A natural language processing perspective // PeerJ Computer Science. – 2016. – Т. 2. – С. e93.
12. 12 tools for checking counterparties and analysing companies' legal cases. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://casebook.ru/demo/articles/12-instrumentov-dlya-proverki-kontragentov-i-analiza-sudebnykh-del-kompanij> (дата обращения: 15.10.2022).

УДК 004.855.5

## **СОЗДАНИЕ И ОБУЧЕНИЕ НЕЙРОСЕТИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВОПЛОЩЕННОГО АГЕНТА В ОТКРЫТОМ ВИРТУАЛЬНОМ МИРЕ НА ДАННЫХ ВСЕМИРНОЙ ПАУТИНЫ**

**Топчий Д.В.** (студент, ЛГУ им. В. Даля)

**Научный руководитель: к.т.н., доцент Попов И.Ю.** (Университет ИТМО)

*e-mail:* [unvscorp@gmail.com](mailto:unvscorp@gmail.com)

*Применение автономных агентов увенчалось большим успехом в игровой области, а именно в играх Atari и Go. Однако они, как правило, обучаются в изолированной среде с ограниченными и поставленными вручную целями, поэтому не могут обобщить широкий спектр задач и возможностей. В данной статье представлен алгоритм, основанный на популярной игре Minecraft, который включает набор симуляторов с тысячами разнообразных открытых задач и базу знаний в масштабе Интернета с видеороликами Minecraft, учебные пособия, вики-страницы и обсуждения на форуме. Агент может решать множество открытых задач, заданных в свободной форме, без какого-либо вручную разработанного плотного вознаграждения за формирование.*

**Ключевые слова:** агент, фреймворк, обучение, игра, открытая среда, вознаграждение, майнкрафт, решение, открытые задачи.

Разработка автономных воплощенных агентов, которые могут достигать производительности на уровне человека в широком спектре задач, была давней целью исследований искусственного интеллекта (ИИ).

Был достигнут впечатляющий прогресс к этой цели, особенно в таких играх как:

- Atari 2600 [1], где разработка автономных воплощенных агентов была применена без корректировки архитектуры или алгоритма обучения;

- Dota 2 [2], где OpenAI Five, используя существующие методы обучения с подкреплением, смог победить чемпиона мира по данной игре;
- Starcraft II [3], где алгоритм AlphaStar смог обучиться на стратегии в реальном времени. Также, кроме игр, внушительный прогресс был и в робототехнике:
- интерактивная 3D среда Ai2-thor [4], которая основана на использовании автономных воплощенных агентов;
- имитационная платформа для исследований в области воплощенного искусственного интеллекта AI Habitat [5], которая основана на использовании автономных воплощенных агентов;
- Robosuite [6], robosuite - это платформа моделирования, работающая на физическом движке MuJoCo для обучения роботов. Она предлагает модульную конструкцию для создания роботизированных задач, а также набор эталонных сред для воспроизводимых исследований;
- интерактивный тест Гибсона (iGibson 0.5): Тест для интерактивной навигации в загроможденных средах [7];
- iGibson 1.0: Среда моделирования для интерактивных задач в больших реалистичных сценах, его окружающая среда содержит 15 полностью интерактивных сцен домашнего размера со 108 комнатами, заполненными жесткими и сочлененными объектами [8].

Эти воплощенные агенты обычно обучаются с нуля в изолированных мирах с ограниченной сложностью и разнообразием. Несмотря на высокую производительность, они являются специализированными моделями, которые не выходят за рамки узкого набора задач. Но люди, напротив, обитают в бесконечно богатой реальности, постоянно учатся и адаптируются к широкому спектру открытых задач и могут использовать большое количество предварительных знаний из своего собственного опыта, а также из опыта других.

### Мультимодальная база знаний Minecraft в масштабе Интернета

В Minecraft насчитывается более 100 миллионов активных игроков, которые в совокупности сгенерировали огромное количество данных. Они записывают обучающие видеоролики, транслируют сеансы игры в прямом эфире, составляют рецепты и обсуждают советы и рекомендации на форумах. Более 6 000 страниц Wiki в свободной форме и более 340 000 постов Reddit с мультимедийным содержанием (рис.1).



Рис. 1. База знаний Minecraft

### Симулятор работы алгоритма

Алгоритм предполагает набор симуляторов API-интерфейсов, помогающих исследователям разрабатывать общедоступных агентов в Minecraft. Он основан на кодовой базе MineRL с открытым исходным кодом [11] и вносит следующие обновления:

1. Предоставляются унифицированные пространства для наблюдения и действий для всех задач, облегчая разработку многозадачных и постоянно обучающихся агентов, которые могут постоянно адаптироваться к новым сценариям и новым задачам. Это отличается от дизайна MineRL Challenge, который адаптирует пространства для наблюдения и действий к индивидуальным задачам.

2. Симуляция открывает все три типа миров в Minecraft, включая Верхний мир, Нижний мир и Край, что существенно расширяет возможное пространство задач, в то время как MineRL изначально поддерживает только Верхний мир.
3. Предоставляются удобные API для настройки начальные условия и настройки мира для стандартизации наших задач. С помощью этого симулятора определяются тысячи задач сравнительного анализа, которые делятся на две категории:
  - a) программные задачи, которые можно автоматически оценивать на основе реальных данных;
  - b) творческие задачи, которые не имеют четко определенных или легко автоматизируемых критериев успеха, что мотивирует наш новый протокол оценки с использованием изученной модели.

Чтобы масштабировать количество творческих задач, идеи извлекаются из учебных пособий на YouTube и используется сервис OpenAI GPT-3 [20] для создания значительно большего количества определений задач. По сравнению с творческими задачами, программные задачи легче начать, но, как правило, они имеют ограниченный объем, ограниченные языковые варианты и в целом менее открыты.

### **Набор задач I: программные задачи**

Формализуем каждую программную задачу в виде 5-кортежа:  $T = (G, G, I, fS, fR)$ .  $G$  – это английское описание цели задания, например, «найти материал и изготовить золотую кирку».  $G$  – это руководство на естественном языке, которое предоставляет агенту полезные советы, рецепты или советы.

Используем API OpenAI GPT-3-davinci для автоматического создания подробных инструкций для подмножества задач. Для примера цели «принести свинью в Нижний мир» GPT-3 возвращает:

- 1) найти свинью в мире;
- 2) щёлкните правой кнопкой мыши по свинье с поводком;
- 3) щёлкните правой кнопкой мыши портал нижнего мира, выбрав поводок и свинью;
- 4) свинью протащат через портал.

$I$  – начальные условия агента и мира, такие как начальный инвентарь, местность возрождения и погода.  $fS: st \rightarrow \{0, 1\}$  - критерий успеха, детерминированная функция, которая отображает текущее состояние мира  $st$  в логическую метку успеха.  $fR: st \rightarrow R$  - необязательная плотная функция вознаграждения. Мы предоставляем  $fR$  только для небольшого подмножества задач, из-за высоких затрат на тщательное создание плотных вознаграждений, включая:

- 1) выживание: выживание в течение определенного количества дней;
- 2) сбор урожая: поиск, получение, выращивание или производство сотен материалов и предметов;
- 3) дерево технологий: навыки создания и использования иерархии инструментов;
- 4) бой: рефлекс и боевые навыки агента для борьбы с различными монстрами и существами.

Каждый шаблон имеет ряд вариаций, основанных на местности, начальном инвентаре, количестве и т.д., которые образуют гибкий спектр сложности. Для сравнения, NeurIPS. Задача MineRL Diamond [11] - это часть программного набора задач, определяемая целью задачи «получить 1 бриллиант».

### **Набор задач II: творческие задачи**

Определяется каждую творческую задачу как тройку,  $T = (G, G, I)$ , которая отличается от программных задач отсутствием простых критериев успеха. Вдохновленные метриками на основе моделей, такими как начальная оценка и оценка FID для генерации изображений, мы разрабатываем новую метрику оценки задачи, на основе предварительно обученной контрастной модели видео языка.

*Подход 1 Интеллектуальный анализ задач из обучающих видеороликов YouTube*

Мы определяем наш набор данных YouTube как богатый источник заданий, поскольку многие игроки-люди демонстрируют и рассказывают о творческих миссиях в учебных плейлистах.

Чтобы собирать высококачественные задания и сопровождающие их видеоролики, мы разрабатываем трехэтапный конвейер, который позволяет легко находить интересные задачи и комментировать их. С помощью этого конвейера мы извлекаем 1042 идеи задач из общей мудрости огромного числа опытных игроков Minecraft, таких как “сделай автоматическую машину для майнинга” и “вырасти кактус до небес”.

#### *Подход 2 Создание задачи с помощью GPT-3*

Мы используем возможности GPT-3 с несколькими кадрами для генерации новых идей задач, добавляя в них задачи, которые мы создаем вручную или загружаем с YouTube. Шаблон приглашения таков: Вот несколько примеров творческих заданий в Minecraft: {несколько примеров}.

#### **Набор начальных заданий**

Мы курируем набор из 64 основных задач, чтобы будущим исследователям было легче приступить к работе. Если их агент хорошо справляется с этими задачами, они могут более уверенно масштабироваться до полного эталона.

- 32 программных задания: 16 “стандартных” и 16 “сложных”, охватывающих все 4 категории (выживание, сбор урожая, бой и дерево технологий). Мы полагаемся на наши знания о Майнкрафте, чтобы определить уровень сложности. Для выполнения “стандартных” задач требуется меньше шагов и меньше зависимостей от ресурсов;
- 32 творческих задания: 16 “стандартных” и 16 “сложных”. Аналогичным образом, задачи, помеченные как “стандартные”, обычно являются краткосрочными задачами.

#### **База знаний в масштабе Интернета**

Два широко используемых подхода [2, 3, 21, 22] для обучения агентов включают в себя обучение агентов с нуля с использованием RL с хорошо настроенными функциями вознаграждения для каждой задачи или использование большого количества человеческих демонстраций для запуска обучения агентов. Однако создание хорошо настроенных функций вознаграждения является сложной или невыполнимой задачей для нашего набора задач, а привлечение опытных игроков для предоставления больших объемов демонстрационных данных также было бы дорогостоящим и неосуществимым [3].

Вместо этого было сделано обращение к открытой сети как к постоянно растущему, практически неограниченному источнику учебного материала для воплощенных агентов. Интернет предоставляет огромное количество знаний о предметной области о Minecraft, которые были собраны путем обширного веб-скрейпинга и фильтрации, собираются видео на YouTube за 33 года, более 6 тысяч вики-страниц и миллионы веток комментариев на Reddit. Вместо того, чтобы нанять горстку людей-демонстраторов, был передан коллективный разум миллионов игроков Minecraft по всему миру. Кроме того, язык является ключевым и всеобъемлющим компонентом нашей базы данных, которая принимает форму расшифровок на YouTube, текстовых описаний в Wiki и обсуждений на Reddit. Язык способствует пониманию открытого словарного запаса, обеспечивает основу для модальностей изображений и видео и открывает мощь больших языковых моделей для воплощенных агентов.

#### **Видео YouTube и стенограммы**

Minecraft - одна из самых популярных игр на YouTube [23]. Игроки-люди продемонстрировали ошеломляющий диапазон творческих действий и сложных миссий, на выполнение которых уходят часы (примеры представлены на рисунке 2).

Выровненные по времени стенограммы позволяют агенту обосновывать естественный язык в свободной форме в видеопикселях и изучать семантику различных действий без трудоемкой человеческой маркировки.

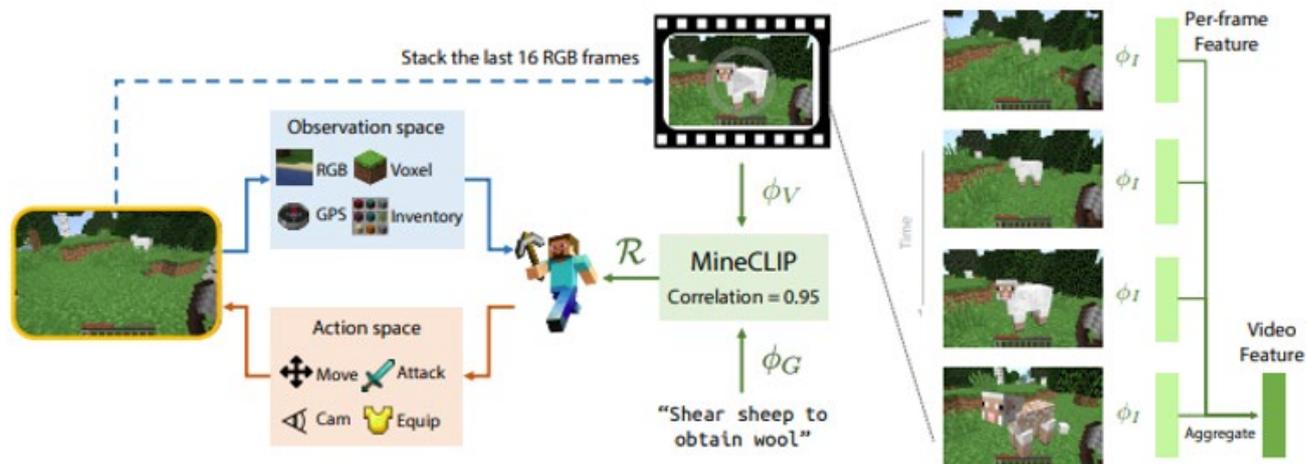


Рис. 2. Диапазон действий

### Майнкрафт википедия

Страницы Wiki охватывают практически все аспекты игровой механики и представляют собой богатый источник неструктурированных знаний в мультимодальных таблицах, рецептах, иллюстрациях и пошаговых инструкциях.

Здесь используется Selenium [24] для очистки 6735 страниц, которые чередуют текст, изображения, таблицы и диаграммы. Страницы крайне неструктурированы и не имеют общей схемы, поскольку Вики предназначена для человеческого потребления, а не обучение ИИ. Чтобы сохранить информацию о макете, нужно дополнительно сохранять скриншоты целых страниц и извлекаем 2,2 млн ограничивающих рамок визуальных элементов. Одним из многообещающих будущих направлений является применение моделей понимания документов, таких как LayoutLM [25] и DocFormer [26], для извлечения практических знаний из этих неструктурированных данных Wiki.

### Обучение агентов с крупномасштабным предварительным обучением

Одной из главных задач воплощенного ИИ является создание единого агента, способного выполнять широкий спектр задач в открытом мире. Алгоритм направлен на содействие новым методам достижения этой цели, предоставляя открытый набор задач и крупномасштабную базу знаний в Интернете.

Здесь делается первый шаг к этой цели, разрабатывая доказательство концепции, которое демонстрирует, как одного агента с языковой подсказкой можно обучить для выполнения нескольких сложных задач Minecraft. С этой целью в данной статье предлагается алгоритм обучения агентов, который использует огромные данные YouTube. отмечается, что это только один из множества возможных способов использования интернет-базы данных — корпус Wiki также обладает большим потенциалом для открытия новых алгоритмов для сообщества в будущих работах.

Новая модель вознаграждения в MineClip (рис. 3) способна обеспечить производительность с помощью написанной вручную функции плотного вознаграждения для программных задач и значительно превосходит метод CLIPOpenAI во всех творческих задачах. Записи представляют собой процент успеха, усредненный по 3 семенам, каждый из которых тестировался в течение 200 эпизодов. Условия успеха точны в программных задачах, но оцениваются с помощью MineCLIP для творческих задач.

Group	Tasks	Ours (Attn)	Ours (Avg)	Manual Reward	Sparse-only	CLIP <sub>OpenAI</sub>
	Milk Cow	<b>64.5 ± 37.1</b>	6.5 ± 3.5	62.8 ± 40.1	0.0 ± 0.0	0.0 ± 0.0
	Hunt Cow	<b>83.5 ± 7.1</b>	0.0 ± 0.0	48.3 ± 35.9	0.3 ± 0.4	0.0 ± 0.0
	Shear Sheep	12.1 ± 9.1	0.6 ± 0.2	<b>52.3 ± 33.2</b>	0.0 ± 0.0	0.0 ± 0.0
	Hunt Sheep	8.1 ± 4.1	0.0 ± 0.0	<b>41.9 ± 33.0</b>	0.3 ± 0.4	0.0 ± 0.0
	Combat Spider	80.5 ± 13.0	60.1 ± 42.5	<b>87.5 ± 4.6</b>	47.8 ± 33.8	0.0 ± 0.0
	Combat Zombie	47.3 ± 10.6	<b>72.3 ± 6.4</b>	49.8 ± 26.9	8.8 ± 12.4	0.0 ± 0.0
	Combat Pigman	1.6 ± 2.3	0.0 ± 0.0	<b>13.6 ± 9.8</b>	0.0 ± 0.0	0.0 ± 0.0
	Combat Enderman	0.0 ± 0.0	0.0 ± 0.0	0.3 ± 0.2	0.0 ± 0.0	0.0 ± 0.0
	Find Nether Portal	37.4 ± 40.8	<b>89.8 ± 5.7</b>	N/A	N/A	26.3 ± 32.6
	Find Ocean	33.4 ± 45.6	<b>54.3 ± 40.7</b>	N/A	N/A	9.9 ± 14.1
	Dig Hole	<b>91.6 ± 5.9</b>	88.1 ± 13.3	N/A	N/A	0.0 ± 0.0
	Lay Carpet	97.6 ± 1.9	<b>98.8 ± 1.0</b>	N/A	N/A	0.0 ± 0.0

Рис. 3. Новая модель вознаграждения

### Предварительное обучение MINECLIP на крупномасштабных видео

Формально изученная функция вознаграждения может быть определена как  $\Phi R : (G, V) \rightarrow R$ , которая отображает языковую цель  $G$  и фрагмент видео  $V$  в скалярное вознаграждение. Идеальный  $\Phi R$  должен возвращать высокую награду, если поведение, изображенное на видео, точно соответствует языковому описанию, и низкую награду в противном случае.

Этого можно достичь путем оптимизации задачи InfoNCE [27], которая учится коррелировать положительные видео и текстовые пары. Подобно модели CLIP изображения и текста [28], MINECLIP состоит из отдельного кодировщика текста  $\phi G$ , который включает в себя языковую цель и видеокодер  $\phi V$ , который включает в себя движущееся окно из 16 последовательных кадров с разрешением  $160 \times 256$ .

Данная нейронная архитектура похожа на CLIP4Clip [29], где  $\phi G$  повторно использует предварительно обученный текстовый кодировщик OpenAI CLIP, а  $\phi V$  разбивается на покадровый кодировщик изображений  $\phi I$  и временной агрегатор  $\phi a$ , который суммирует последовательность из 16 признаков изображения в одно вложение видео. В отличие от CLIP4Clip, мы вставляем два дополнительных слоя остаточного адаптера CLIP [30] после агрегатора  $\phi a$ , чтобы улучшить характеристики видео, и настраиваем только два последних слоев предварительно обученных  $\phi I$  и  $\phi G$ .

Из базы данных YouTube мы следуем процедуре, описанной в VideoCLIP [31], для выборки 640 000 пар 16-секундных фрагментов видео и выровненных по времени расшифровок на английском языке после применения фильтра по ключевым словам.

Обучаются два варианта MINECLIP с разными типами агрегатора  $\phi a$ : (1) MINECLIP[avg] выполняет простое объединение средних значений, которое выполняется быстро, но не зависит от временного упорядочения; (2) MINECLIP кодирует последовательность двумя слоями преобразователя, что относительно медленнее, но захватывает больше временной информации и, таким образом, в целом дает лучший сигнал вознаграждения. Подробная информация о предварительной обработке данных, архитектуре.

MINECLIP хорошо согласуется с истинным человеческим суждением о творческих задачах (таблица). Цифры - это баллы F1 между двоичной классификацией успешности заданий в MINECLIP и человеческими метками (масштабируются в процентах для лучшей читаемости).

Таблица

Классификация успешности заданий				
Tasks	Find Nether Portal	Find Ocean	Dig Hole	Lay Carpet
Ours (Attn)	98,7	<b>100,0</b>	99,4	97,4
Ours (Avg)	<b>100,0</b>	<b>100,0</b>	<b>100,0</b>	<b>98,4</b>
CLIP <sub>OpenAI</sub>	48,7	98,4	80,6	54,1

## Обучение с подкреплением MINECLIP

При обучении с подкреплением MINECLIP обучается сеть политики, которая принимает в качестве входных данных необработанные пиксели и предсказывает дискретное управление. Политика обучается с помощью PPO [32] на наградах MINECLIP. В каждом эпизоде агенту предлагается языковая цель, и он выполняет последовательность действий для достижения этой цели. При расчете вознаграждения MINECLIP мы объединяем последние 16 эгоцентричных RGB-кадров агента в временное окно для формирования фрагмента видео. MINECLIP обрабатывает все подсказки о задачах без каких-либо дополнительных настроек.

По сравнению с жестко запрограммированными функциями вознаграждения в популярных тестах [33, 34, 35] модель MINECLIP имеет 150 миллионов параметров и, таким образом, намного дороже для запросов. Делаем несколько дизайнов вариантов для значительного ускорения обучения RL с MINECLIP в цикле:

- 1) языковая цель  $G$  фиксирована для конкретной задачи, поэтому текстовые функции  $\phi_G$  могут быть предварительно вычислены, чтобы избежать вызова текстового кодировщика несколько раз;
- 2) кодировщик RGB нашего агента повторно использует предварительно обученные веса  $\phi_I$  из MINECLIP. Здесь не настраивается  $\phi_I$  во время обучения RL, что экономит вычисления и дает агенту хорошие результаты визуального представления с самого начала;
- 3) видеокодер MINECLIP  $\phi_V$  разбивается на кодировщик изображений  $\phi_I$  и легковесный агрегатор  $\phi_A$ . Этот выбор конструкции обеспечивает эффективное изображение кэширования функций.

## Набор задач и разбор алгоритма

### Программные задачи

Программные задачи создаются путем заполнения вручную написанных шаблонов для четырех категорий задач, а именно “Выживание”, “Сбор урожая”, “Технологическое дерево” и “Бой”. Далее следует краткое описание каждой категории задач:

**Выживание. (survival)** Эта группа заданий проверяет способность оставаться в живых в игре. Выжить в Майнкрафте нетривиально, потому что с течением времени агент становится голодным, а планка здоровья постепенно падает. Ночью появляются враждебные mobs, такие как зомби и скелеты, которые очень опасны, если у агента нет соответствующей брони для защиты или оружия для отпора. Мы предоставляем два задания с разными уровнями сложности для выживания. Один из них - начать с нуля без какой-либо помощи. Другой - начать с начального оружия и еды. На рисунке 4 представлены спецификации соответствующих задач.

```

1 survival_sword_food:
2   category: survival
3   prompt: survive as long as possible given a sword and some food
4
5 harvest_wool_with_shears_and_sheep:
6   category: harvest
7   prompt: harvest wool from a sheep with shears and a sheep nearby
8
9 techtree_from_barehand_to_wooden_sword:
10  category: tech-tree
11  prompt: find material and craft a wooden sword
12
13 combat_zombie_pigman_nether_diamond_armors_diamond_sword_shield:
14  category: combat
15  prompt: combat a zombie pigman in nether with a diamond sword,
16  shield, and a full suite of diamond armors

```

Рис. 4. Пример спецификаций

**Сбор урожая. (harvest)** Эта целевая группа проверяет способность агента собирать полезные ресурсы, такие как минералы (железо, алмаз, обсидиан), продукты питания (говядина, тыква, морковь, молоко) и другие полезные предметы (шерсть, дубовая древесина, уголь). Строятся эти задачи, перечисляя декартово произведение между целевыми предметами

для сбора, начальным инвентарем и условиями мира (рельеф, погода, освещение и т.д.) таким образом, чтобы они охватывали спектр сложности. Например, если задача состоит в сборе шерсти, то это относительно просто, если у агента есть ножницы в его первоначальном инвентаре с овцой поблизости, но сложнее, если агенту приходится изготавливать ножницы из сырья и тщательно исследовать, чтобы найти овцу. Мы отфильтровываем невозможные комбинации (например, выращивание определенных растений в пустыне) из декартова произведения.

**Древо развития. (tech-tree)** Minecraft включает в себя несколько уровней инструментов и доспехов с различными свойствами и трудностями разблокировки. Чтобы перейти на более высокий уровень инструментов и доспехов, агенту необходимо развить систематические и композиционные навыки для навигации по дереву технологий (например, дерево → камень → железо → алмаз). В этой группе задач агенту предлагается создать и использовать иерархию инструментов, начиная с менее продвинутого уровня. Например, в каком-то задании агенту предлагается изготовить деревянный меч голыми руками. В другом задании агенту может быть предложено изготовить золотой шлем. Агент, который может успешно выполнить эти задачи, должен обладать способностью переносить аналогичные стратегии разведки на разные технологические уровни.

**Бой. (combat)** Мы проверяем рефлексы агента и боевые навыки, чтобы сражаться с различными монстрами и существами. Аналогично тому, как мы разрабатываем группу задач сбора урожая, мы генерируем эти задачи путем перечисления декартова произведения между целевым объектом, с которым нужно бороться, начальным инвентарем и мировыми условиями, чтобы охватить спектр сложности.

#### *Творческие задачи*

Создаются творческие задачи, используя три подхода:

- 1) ручной мозговой штурм;
- 2) интеллектуальный анализ из обучающих видеороликов YouTube;
- 3) генерация с помощью запроса GPT-3 API.

Ниже подробно рассмотрим второй и третий подходы.

#### **Интеллектуальный анализ задач из обучающих видеороликов YouTube**

Набор данных YouTube служит двойной цели - это богатый источник заданий, поскольку многие игроки-люди демонстрируют и рассказывают о творческих миссиях в учебных плейлистах. Чтобы собирать высококачественные задания и сопровождающие их видеоролики, мы разрабатываем трехэтапный конвейер, который позволяет легко находить интересные задачи и комментировать их.

Этап 1: Ищем плейлисты YouTube с ключевыми фразами “Руководство по Майнкрафту” и “Руководство по Майнкрафту”. Затем мы применяем эвристические правила, чтобы отфильтровать видео низкого качества.

Этап 2: Показываем название видео только человеку-аннотатору через интерфейс командной строки, который принимает двоичное решение принять или отклонить его как потенциальную задачу. Этот шаг обычно выполняется очень быстро, занимая в среднем несколько секунд.

Этап 3: Для принятых задач на этапе 2 разрабатываем пользовательский интерфейс для маркировки, который отображает полное видео и описание YouTube. Человек-аннотатор может отклонить видео, настроить временные метки, выбрать заголовок или уточнить описание в соответствии с целью задачи. С помощью этого конвейера мы извлекаем 1042 идеи задач из общей мудрости огромного числа опытных игроков Minecraft. Вот несколько примеров: “сделай автоматическую горную машину” и “вырасти кактус до неба”.

#### **Детали алгоритма**

Все нейронные сети реализуются в PyTorch v1.11 [37]. Обучающий MINECLIP использует фреймворк PyTorch-Lightning [36], предварительно обученные модели, размещенные на HuggingFace [38], и библиотеку x-transformers для вариантов Transformer [39].

*Извлечение пары видео-текст*

Аналогично VideoClip, отбираются 640 тысяч пар 16-секундных фрагментов видео и выровненных по времени английских транскриптов с помощью следующей процедуры:

- 1) собираем список ключевых слов, соответствующих поддерживаемым сущностям, блокам и предметам в Minecraft;
- 2) выполняем сопоставление строк с нашими транскриптами видео на YouTube, чтобы получить 640 тыс. текстовых сегментов;
- 3) для каждого согласованного сегмента транскрипта случайным образом увеличьте его до  $16 \sim 77$  токенов (ограничено длиной контекста клипа);
- 4) случайным образом выберите временную метку в пределах времени начала и окончания согласованного транскрипта в качестве центра видеоклипа;
- 5) случайным образом увеличьте видеоклип от центральной временной метки до  $8 \times 16$  секунд.

*Архитектура*

MINECLIP архитектура состоит из трех частей:

**Покадровый кодер изображения**  $\phi_I$ . Используется архитектура ViT-B/16 [41] для вычисления 512-D встраивания для каждого кадра RGB. Инициализируем веса из общедоступной контрольной точки OpenAI CLIP [40] и настраиваем только последние два слоя во время тренировки. Входное разрешение составляет  $160 \times 256$ , что отличается от разрешения клипа по умолчанию  $224 \times 224$ . Адаптируем позиционные вложения с помощью бикубической интерполяции, которая не вводит никаких новых обучаемых параметров.

**Временной агрегатор**  $\phi_A$ . Учитывая последовательность покадровых объектов RGB, сеть временных агрегаторов суммирует последовательность в одно встраивание видео. После агрегатора мы вставляем два дополнительных слоя остаточного клипсового адаптера [38]. Остаточный вес инициализируется таким образом, чтобы он был очень близок к функции идентификации в начале тренировки.

**Текстовый кодировщик**  $\phi_G$ . Мы используем 12-слойную модель GPT шириной 512. Входная строка преобразуется в кодировку пар байтов в нижнем регистре с размером словаря 49 152 и ограничена 77 токенами. Только последние два слоя  $\phi_G$  настраиваются точно во время тренировки.

```

Input: policy  $\pi_\theta$ , value function  $VF(\cdot)$ , SI buffer threshold  $\Delta$ , SI frequency  $\omega$ 
1 Initialize empty SI buffers for all tasks  $\mathcal{D}_{SI} \leftarrow \{\emptyset, \forall T \in \text{training tasks}\}$ ;
2 Initialize a counter for simulator steps  $counter \leftarrow 0$ ;
3 while not done do
4   Collect set of trajectories for all tasks  $\{\tau_T, \forall T \in \text{training tasks}\}$  by running policy  $\pi_\theta$  in
   (parallel) environments;
5   forall  $\mathcal{D}_{SI,T}$  do
6     if  $\tau_T$  is successful then
7        $\mathcal{D}_{SI,T} \leftarrow \mathcal{D}_{SI,T} \cup \tau_T$ 
8     else if  $\tau_T$ 's episode return  $\geq \mu_{return}(\mathcal{D}_{SI,T}) + \Delta \times \sigma_{return}(\mathcal{D}_{SI,T})$  then
9        $\mathcal{D}_{SI,T} \leftarrow \mathcal{D}_{SI,T} \cup \tau_T$ 
10  end
11  Increase  $counter$  accordingly;
12  Update  $\pi_\theta$  following Equation 2;
13  Fit  $VF(\cdot)$  by regression on mean-squared error;
14  if  $\mathbb{1}(counter \bmod \omega = 0)$  then
15    Determine the number of trajectories to sample from each buffer
     $\#_{\text{sample}} = \min(\{|\mathcal{D}_{SI,T}|, \forall T \in \text{training tasks}\})$ ;
16    Sample  $\#_{\text{sample}}$  trajectories from each buffer in a prioritized manner to construct  $\mathcal{D}_{SI}$ ;
17    Update  $\pi_\theta$  on  $\mathcal{D}_{SI}$  with supervised objective;
18 end

```

Рис. 5. Алгоритм чередующегося обучения

*Обучение с подкреплением*

Мы используем популярный алгоритм PPO [42] (Proximal Policy Optimization) в качестве основы для обучения подкреплением. PPO – это метод, основанный на политике, который

оптимизирует для достижения суррогатной цели, гарантируя при этом, что отклонение от предыдущей политики относительно невелико. PPO обновляет сеть политик путем

$$\underset{\theta}{\text{maximize}} \mathbb{E}_{s,a \sim \pi_{\theta_{\text{old}}}} L(s, a, \theta_{\text{old}}, \theta), \quad (1)$$

где

$$L(s, a, \theta_{\text{old}}, \theta) = \min \left( \frac{\pi_{\theta}(a|s)}{\pi_{\theta_{\text{old}}}(a|s)} A^{\pi_{\theta_{\text{old}}}}(s, a), \text{clip} \left( \frac{\pi_{\theta}(a|s)}{\pi_{\theta_{\text{old}}}(a|s)}, 1 - \epsilon, 1 + \epsilon \right) A^{\pi_{\theta_{\text{old}}}}(s, a) \right). \quad (2)$$

В этой работе описан алгоритм для разработки общедоступных воплощенных агентов. Данный алгоритм предусматривает набор тестов для тысяч программных и творческих задач, а также мультимодальную базу знаний в Интернете, состоящую из видео, вики и обсуждений на форумах. В качестве примера новых исследовательских возможностей, предлагается MINECLIP в качестве эффективной функция поощрения, обусловленная языком, обученная с помощью видеороликов YouTube в дикой природе. MINECLIP демонстрирует высокую производительность эмпирически и хорошо согласуется с результатами человеческой оценки, что делает его хорошей автоматической метрикой для творческих задач.

## Литература

1. Mnih V., Kavukcuoglu K., Silver D., Graves A., Antonoglou I., Wierstra D., Riedmiller M. Playing atari with deep reinforcement learning. 2013. arXiv: Arxiv-1312.5602.
2. Berner C., Brockman G., Chan B., Cheung V., Debiak P., Dennison C., Farhi D., Fischer Q., Hashme S., Hesse C., Józefowicz R., Gray S., Olsson C., Pachocki J., Petrov M., Pinto H.P.d.O., Raiman J., Salimans T., Schlatter J., Schneider J., Sidor S., Sutskever I., Tang J., Wolski F., Zhang S. Dota 2 with large scale deep reinforcement learning. 2019. arXiv: Arxiv-1912.06680.
3. Vinyals O., Babuschkin I., Chung J., Mathieu M., Jaderberg M., Czarnecki W.M., Dudzik A., Huang A., Georgiev P., Powell R. et al. Alphastar: Mastering the real-time strategy game starcraft ii. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.deepmind.com/blog/alphastar-mastering-the-real-time-strategy-game-starcraft-ii> (дата обращения: 17.09.2022).
4. Kolve E., Mottaghi R., Han W., VanderBilt E., Weihs L., Herrasti A., Gordon D., Zhu Y., Gupta A., Farhadi A. Ai2-thor: An interactive 3d environment for visual ai. 2017. arXiv: Arxiv-1712.05474.
5. Savva M., Kadian A., Maksymets O., Zhao Y., Wijmans E., Jain B., Straub J., Liu J., Koltun V., Malik J., Parikh D., Batra D. Habitat: A platform for embodied ai research // Proceedings of the IEEE/CVF International Conference on Computer Vision (ICCV). arXiv:1904.01201.
6. Zhu Y., Wong J., Mandlekar A., Martín-Martín R. Robosuite: A modular simulation framework and benchmark for robot learning. 2020. arXiv: Arxiv2009.12293.
7. Xia F., Shen W.B., Li C., Kasimbeg P., Tchapmi M., Toshev A., Fei-Fei L., Martín-Martín R., Savarese S. Interactive gibbon benchmark (igibson 0.5): A benchmark for interactive navigation in cluttered environments. 2019. arXiv: Arxiv-1910.14442.
8. Shen B., Xia F., Li C., Martín-Martín R., Fan L., Wang G., Pérez-D'Arpino C., Buch S., Srivastava S., Lyne P., Tchapmi, Micael E. Tchapmi, Vainio K., Wong J., Fei-Fei L., Savarese S. igibson 1.0: a simulation environment for interactive tasks in large realistic scenes. 2020. arXiv: Arxiv-2012.02924.
9. Johnson M., Hofmann K., Hutton T., Bignell D. The malmo platform for artificial intelligence experimentation // IJCAI'16: Proceedings of the Twenty-Fifth International Joint Conference on Artificial Intelligence. – 2016. – Pp. 4246–4247.
10. Brockman G., Cheung V., Pettersson L., Schneider J., Schulman J., Tang J., Zaremba W. Openai gym. 2016. arXiv: Arxiv-1606.01540.
11. Guss W.H., Houghton B., Topin N., Wang P., Codel C., Veloso M., Salakhutdinov R. Minerl: A large-scale dataset of minecraft demonstrations. 2019. arXiv: Arxiv-1907.13440.
12. Guss W.H., Codel C., Hofmann K., Houghton B., Kuno N., Milani S., Mohanty S., Liebana D.P., Salakhutdinov R., Topin N., Veloso M., Wang P. The minerl 2019 competition on sample efficient reinforcement learning using human priors. 2019. arXiv: Arxiv-1904.10079.
13. Guss W.H., Castro M.Y., Devlin S., Houghton B., Kuno N.S., Loomis C., Milani S., Mohanty S., Nakata K., Salakhutdinov R., Schulman J., Shiroshita S., Topin N., Ummadisingu A., Vinyals O. The minerl 2020 competition on sample efficient reinforcement learning using human priors. 2021. arXiv: Arxiv-2101.11071.
14. Kanervisto A., Milani S., Ramanauskas K., Topin N., Lin Z., Li J., Shi J., Ye D., Fu Q., Yang W., Hong W., Huang Z., Chen H., Zeng G., Lin Y., Micheli A.V., Alonso E., Fleuret F., Nikulin A., Belousov Y., Svidchenko O., Shpilman. Minerl diamond 2021 competition: Overview, results, and lessons learned. 2022. arXiv: Arxiv2202.10583.

15. Gray J., Srinet K., Jernite Y., Yu H., Chen Z., Guo D., Goya S.I., Zitnick C.L., Szlam A. Craftassist: A framework for dialogue-enabled interactive agents. 2019. arXiv: Arxiv-1907.08584.
16. Kiseleva J., Li Z., Aliannejadi M., Mohanty S., ter Hoeve M., Burtsev M., Skrynnik A., Zholus A., Panov A., Srinet K., Szlam A., Sun Y., Hofmann K., Galley M., Awadallah A. Neurips 2021 competition iglu: Interactive grounded language understanding in a collaborative environment. 2021. arXiv: Arxiv-2110.06536.
17. Shah R., Wild C., Wang S.H., Alex N., Houghton B., Guss W., Mohanty S., Kanervisto A., Milani S., Topin N., Abbeel P., Russell S., Dragan A. The minerl basalt competition on learning from human feedback. 2021. arXiv: Arxiv-2107.01969.
18. Grbic D., Palm R.B., Najarro E., Glanois C., Risi S. EvoCraft: A New Challenge for Open-Endedness // Springer International Publishing. – 2021. – Pp. 325–340. DOI:10.1007/978-3-030-72699-7\_21.
19. Hafner D. Benchmarking the spectrum of agent capabilities // arXiv preprint arXiv: Arxiv-2109.06780, 2021.
20. Brown T., Mann B., Ryder N., Subbiah M., Kaplan J.D., Dhariwal P., Neelakantan A., Shyam P., Sastry G., Askell A. et al. Language models are few-shot learners // Advances in neural information processing systems. – 2020. – №. 33. – Pp.1877– 1901.
21. Silver D., Hubert T., Schrittwieser J., Antonoglou I., Lai M., Guez A., Lanctot M., Sifre L., Kumaran D., Graepel T., Lillicrap T., Simonyan K., Hassabis D. Mastering chess and shogi by self-play with a general reinforcement learning algorithm. 2017. arXiv: Arxiv-1712.01815.
22. Fuchs F., Song Y., Kaufmann E., Scaramuzza D., Dürr P. Superhuman performance in gran turismo sport using deep reinforcement learning // IEEE Robotics Autom. Lett. – 2021. – №. 6(3). – Pp. 4257–4264. DOI:10.1109/LRA.2021.3064284.
23. Gerblick J. Minecraft, the most-watched game on youtube, passes 1 trillion views. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.gamesradar.com/minecraft-the-most-watched-game-on-youtube-passes-1-trillion-views/> (дата обращения: 17.09.2022).
24. Selenium WebDriver. Selenium webdriver. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.selenium.dev/> (дата обращения: 17.09.2022).
25. Xu Y., Li M., Cui L., Huang S., Wei F., Zhou M. Layoutlm: Pre-training of text and layout for document image understanding. 2019. arXiv: Arxiv-1912.13318.
26. Appalaraju S., Jasani B., Kota B.U., Xie Y., Manmatha R. Docformer: End-to-end transformer for document understanding. 2021. arXiv: Arxiv2106.11539.
27. Chen T., Kornblith S., Norouzi M., Hinton G.E. A simple framework for contrastive learning of visual representations // Proceedings of the 37th International Conference on Machine Learning, ICML 2020, 13-18 July 2020, Virtual Event, volume 119 of Proceedings of Machine Learning Research, PMLR. – 2020. – Pp. 1597–1607.
28. Radford, Kim J.W., Hallacy C., Ramesh A., Goh G., Agarwal S., Sastry G., Askell A., Mishkin P., Clark J. et al. Learnin A.g transferable visual models from natural language supervision // International Conference on Machine Learning. PMLR. – 2021. – Pp. 8748–8763.
29. Luo H., Ji L., Zhong M., Chen Y., Lei, W. Duan N., Li T. Clip4clip: An empirical study of clip for end to end video clip retrieval. 2021. arXiv: Arxiv2104.08860.
30. Gao P., Geng S., Zhang R., Ma T., Fang R., Zhang Y., Li H., Qiao Y. Clip-adapter: Better vision-language models with feature adapters. 2021. arXiv: Arxiv-2110.04544.
31. Xu H., Ghosh G., Huang P.-Y., Okhonko D., Aghajanyan A., Metze F., Zettlemoyer L., Feichtenhofer C. Videoclip: Contrastive pre-training for zero-shot video-text understanding 2021. arXiv: Arxiv-2109.14084.
32. Schulman J., Wolski F., Dhariwal P., Radford A., Klimov O. Proximal policy optimization algorithms. 2017. arXiv: Arxiv-1707.06347.
33. Qinqing Zheng, Amy Zhang, and Aditya Grover. Online decision transformer. 2022. arXiv: Arxiv-2202.05607.
34. Tassa Y., Doron, Y. Muldal A., Erez T., Li Y., de Las Casas D., Budden D., Abdolmaleki A., Merel J., Lefrancq A., Lillicrap T., Riedmiller M. Deepmind control suite. 2018.arXiv: Arxiv-1801.00690.
35. Fan L., Wang G., Huang D.-A., Yu Z., Fei-Fei L., Zhu Y., Anandkumar A. Secant: Self-expert cloning for zero-shot generalization of visual policies. 2021. arXiv: Arxiv-2106.09678.
36. Falcon W. and The PyTorch Lightning team. PyTorch Lightning // Github. – 2019. – №. 3. DOI:10.5281/zenodo.3828935.
37. Paszke A., Gross S., Massa F., Lerer A., Bradbury J., Chanan G., Killeen T., Lin Z., Gimelshein N., Antiga L., Desmaison A., Köpf A., Yang E., DeVito Z., Raison M., Tejani A., Chilamkurthy S., Steiner B., Fang L., Bai J., Chintala S. Pytorch: An imperative style, high-performance deep learning library. 2019. arXiv: Arxiv-1912.01703.
38. Wolf T., Debut L., Sanh V., Chaumond J., Delangue C., Moi A., Cistac P., Rault T., Louf R., Funtowicz M., Davison J., Shleifer S., von Platen P., Ma C., Jernite Y., Plu J., Xu C., Le Scao T., Gugger S., Drame M., Lhoest Q., Rush A.M. Huggingface’s transformers: State-of-the-art natural language processing. 2019. arXiv: Arxiv-1910.03771.
39. Wang P. x-transformers. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://github.com/lucidrains/x-transformers> (дата обращения: 17.09.2022).
40. Radford A., Kim J.W., Hallacy C., Ramesh A., Goh G., Agarwal S., Sastry G., Askell A., Mishkin P., Clark J. et al. Learning transferable visual models from natural language supervision // International Conference on Machine Learning. – 2021. – Pp. 8748–8763.

41. Dosovitskiy A., Beyer L., Kolesnikov A., Weissenborn D., Zhai X., Unterthiner T., Dehghani M., Minderer M., Heigold G., Gelly S., Uszkoreit J., Houlsby N. An image is worth 16x16 words: Transformers for image recognition at scale. 2020. arXiv: Arxiv-2010.11929.
42. Schulman J., Wolski F., Dhariwal P., Radford A., Klimov O. Proximal policy optimization algorithms. 2017. arXiv: Arxiv-1707.06347.

УДК 004.89;681.7

## **РАЗРАБОТКА МОБИЛЬНЫХ АНАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ РАСПОЗНАВАНИЯ ОБЪЕКТОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ ТЕХНОЛОГИЙ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА**

**Шебут Д.А.** (студент, Университет ИТМО)

**Научный руководитель: к.т.н., доцент Рыжова В.А.** (Университет ИТМО)

*e-mail:* [dshebut@rambler.ru](mailto:dshebut@rambler.ru)

*В работе рассматриваются вопросы проектирования и возможные направления применения мобильных аналитических систем, использующих технологии искусственного интеллекта для распознавания объектов и, таким образом, извлечения знаний о предметной области. Обоснована актуальность создания систем распознавания на базе смартфона. Проведен аналитический обзор методов распознавания объектов в контексте их реализации на мобильном устройстве. Предложена архитектура мобильной аналитической системы на основе технологий искусственного интеллекта.*

**Ключевые слова:** *Android, распознавание объектов, мобильные приложения, сверточные нейронные сети, анализ медицинских изображений, промышленное компьютерное зрение.*

В 2022 году количество мобильных устройств на планете превысило 15 млрд., а к 2025 ожидается увеличение этого числа как минимум еще на 3 млрд [1]. Известно, что 67% жителей планеты пользуются хотя бы одним таким устройством [2]. В России 94,9% интернет-пользователей в возрасте с 16 до 64 лет имеют смартфоны [3]. При этом 73% из них владеют устройством под управлением операционной системы (ОС) Android.

Также наблюдается тенденция к постоянному росту производительности смартфонов, они уже постепенно догоняют настольные компьютеры по вычислительной мощности. А флагманские модели уже даже опережают некоторые офисные компьютеры и современные ноутбуки [4]. Кроме того, смартфон, как производительная вычислительная машина с доступом в Интернет по LTE, 4G и 5G, использует преимущества облачных вычислений, выступая легковесным карманным посредником между пользователями и высокопроизводительными центрами обработки данных. К тому же современное мобильное устройство позволяет отслеживать свое положение в пространстве, параметры окружающей среды, взаимодействовать со штатной видеокамерой.

Таким образом, благодаря компактности, популярности, производительности и сравнительной простоте взаимодействия с набором встроенных датчиков, смартфоны применимы не только для развлечения и персонального использования, но и для реализации мобильных систем контроля состояния различных объектов и сред в таких прикладных областях, как обеспечение безопасности объектов городской инфраструктуры, экологический мониторинг, медицинская диагностика. В последнее время все более актуальным и востребованным при создании аналитических (в том числе, мобильных) систем является использование технологий искусственного интеллекта (ИИ) для решения задач распознавания объектов на изображениях.

### **Области применения мобильных аналитических систем**

В промышленности также можно найти примеры использования мобильных аналитических систем распознавания объектов. Например, на рынке представлено несколько решений для автоматического подсчета объема круглого леса [5, 6]. Для автоматизации процесса используются технологии компьютерного зрения и машинного обучения. Все более широкое применение на производстве получает интеграция технологий дополненной

реальности [7]. Дополненная реальность – введение в зрительное поле любых сенсорных данных с целью дополнения сведений об окружении и изменения восприятия окружающей среды. Augmented Reality (AR) на производстве уже сейчас используется для контроля качества, сборки деталей, ремонта оборудования, логистики и обучения. Платформами для AR решений на производстве выступают смартфоны, планшеты и умные очки. Представители бизнеса отмечают, что последние пока не готовы для массового применения в силу своих технических ограничений [7]. При реализации дополненной реальности не обойтись без использования технологий распознавания объектов на базе ИИ, так как актуальные сведения должны отображаться в нужное время в правильной области экрана, соответствующей описываемому объекту. А для этого его необходимо локализовать и классифицировать во входящем видеопотоке. При этом эксперты отмечают, что будущее AR за безмаркерными технологиями и интеграции с геоданными [7].

Одно из важных применений мобильных аналитических систем распознавания объектов – это медицина, а именно, создание мобильных решений на базе смартфонов, чтобы повысить качество и доступность диагностики заболеваний при организации выездных форм медицинского обслуживания в удаленных, малоразвитых районах и при чрезвычайных ситуациях, в условиях боевых действий, когда доступ к профессиональному лабораторному оборудованию затруднителен. В области использования смартфонов как биосенсоров уже существуют наработки. Тут можно выделить работы, связанные с созданием портативных поляриметров [8], измерения с которых обрабатываются смартфоном, оптических платформ для колориметрического анализа на основе штатной камеры смартфона для определения концентрации гематокрита [9, 10], а также применение камеры в качестве спектрометра [11, 12]. Еще одно направление использования устройств обработки изображений на базе смартфонов является микроскопия. Сравнение портативных устройств с полноразмерными системами, в некоторых случаях, показывает соответствие результатов в 99,99% измерений [13]. Особый интерес представляют неинвазивные методы диагностики. В данном случае, наиболее перспективным видится использование активной видеополариметрии для неинвазивного анализа крови пациента [14]. Метод основан на измерении и визуализации распределения параметров поляризации электромагнитных волн, отраженных от кровесодержащей биологической ткани. Поток отраженного излучения разделяется на четыре канала, таким образом, становится возможно измерять величины параметров Стокса. Полученные параметры сопоставляются с калибровочными характеристиками и затем вычисляется уровень гематокрита [14]. Сейчас ведутся разработки портативных поляриметров, основанных на данном принципе [15]. Все упомянутые системы используют методы цифровой обработки изображений для анализа сведений, полученных со штатной камеры устройства или подключенной портативной электронно-оптической установки. Таким образом, они имеют потенциал для применения методов распознавания объектов на основе ИИ с целью создания продвинутых аналитических медицинских систем поддержки принятия решений на базе мобильных биосенсоров.

### **Работа с данными**

Современные технологии ИИ в контексте задач распознавания объектов чаще всего связаны с использованием машинного и глубокого обучения. Эти подходы позволяют решать проблему поиска неочевидных закономерностей в сложных для человека задачах на больших объемах данных с большим количеством параметров. А затем на основе правил, выявленных после обучения на обучающей выборке, принимать решения, в том числе, для новых входных данных, которые система не встречала ранее.

Поэтому определяющую роль в качестве работы системы распознавания объектов играет не только выбор обучаемой нейросетевой модели или алгоритма, но и анализ и предобработка данных. Предобработка изображений чаще всего включает в себя: изменение размера, аффинные преобразования, цветокоррекцию, выравнивание гистограммы, гамма-коррекцию, подавление шумов, выделение контуров или даже кадрирование [16, 17], когда появление

искомых объектов ожидается только в некоторой части изображения (например, выделение области изображения с небом при решении задач распознавания летающих объектов).

Для того чтобы система распознавания на этапе обучения сформировала «представление» об искомых объектах, исходные изображения должны быть размечены. Чаще всего это делается человеком. В зависимости от задач, встречаются различные типы разметки изображений. В простейшем случае, для решения задачи классификации, изображению сопоставляется метка класса объекта, который присутствует на изображении. При этом классифицируемый объект должен занимать большую часть изображения, чтобы снизить влияние посторонних объектов и фона на результаты. Затем, по мере усложнения решаемых задач, добавляется сегментация объекта заданного класса – тогда каждому изображению сопоставляется метка класса, а каждый пиксель изображения помечется как относящийся или не относящийся к заданному объекту. Для другой решаемой задачи – локализации объекта, уже необходимо выделить искомый объект ограничивающей рамкой, описывающим прямоугольником. Если же необходимо решать все три задачи, то тогда размеченные изображения должны содержать: координаты ограничивающих рамок, метку класса для каждой рамки, а каждый пиксель изображения должен быть помечен как принадлежащий к определенному классу или как «фон» [18]. Некоторые открытые наборы данных [19] также предоставляют размеченные изображения для семантического анализа сцен. К трем упомянутым составляющим разметки добавляется описание на естественном языке сцены и отношений между объектами.

Однако не всегда удается запечатлеть распознаваемые объекты при всех возможных условиях и создать максимально репрезентативную обучающую выборку. Чтобы минимизировать ошибку и повысить общее качество распознавания в новых условиях, применяются методы аугментации данных. Используя различные преобразования над изображениями в выборке, она дополняется новыми экземплярами, сгенерированными синтетически на основе исходных. Таким образом, после обучения модель становится более устойчивой к изменениям параметров сцены. Таких, например, как: яркость, контрастность, угол обзора, цветовая температура, зашумленность, наличие перекрытий. Методы аугментации изображений делятся на два типа: применяющие базовые преобразования и подходы на основе глубокого обучения [20].

Еще одна возможная ситуация – это когда обучающий набор очень мал (или вообще не существует) в силу сложности или невозможности создания объемной выборки изображений распознаваемых объектов или явлений. Попытки решения проблемы недостатка обучающих данных привели к разработке концепций few-shot, one-shot, zero-shot learning (FSL, OSL, ZSL) [21]. То есть обучение моделей ИИ на основе малого количества примеров, одного примера, вообще без примеров. Особый интерес представляет ZSL подход к распознаванию объектов, при котором модель в ходе работы с тестовой выборкой начинает распознавать новые классы объектов, не содержащихся в обучающей выборке. Это становится возможным благодаря обработке визуальных и семантических признаков уже известных классов в новом пространстве признаков. Таким образом, модель, уже прошедшая стадию обучения, может распознавать объекты, которые не встречались ей ранее, по их текстовому описанию [22].

### **Выбор метода распознавания объектов**

При проектировании программных систем под мобильные устройства для решения аналитических задач в рассмотренных областях необходимо учитывать ряд особенностей и ограничений, накладываемых программным и аппаратным обеспечением платформы. Во-первых, мобильные устройства и планшеты под управлением ОС Android имеют различный форм-фактор экрана, что необходимо учитывать при проектировании пользовательского интерфейса, так как, если приложение планируется распространять с помощью платформ цифровой дистрибуции, заранее доподлинно неизвестна конфигурация экрана устройства конечного пользователя. Во-вторых, поскольку ОС Android является проектом с открытым исходным кодом, производители устройств могут по своему усмотрению модифицировать систему – это может неожиданным образом повлиять на работу приложения. В-третьих, несмотря на то, что флагманские модели

смартфонов приближаются по производительности к настольным компьютерам, большинство продаваемых в России на данный момент устройств относятся к бюджетному и среднему ценовому сегменту [23]. Следовательно, если предполагается массовое распространение приложения, при разработке программной системы необходимо ориентироваться на уровень производительности устройств из данного ценового диапазона.

Если первые две особенности нивелируются применением принципов адаптивного дизайна пользовательских интерфейсов [24] и встроенными средствами Android SDK, то, чтобы соответствовать требуемому уровню производительности, необходимо использовать наиболее подходящие и оптимальные для поставленной задачи методы распознавания объектов.

Распознавание объектов объединяет в себе множество различных подзадач компьютерного зрения. Таких, например, как обнаружение, классификация, локализация, идентификация. Методы для их решения прошли долгий путь: от простейших методов цифровой обработки изображений, поиска особенностей (feature detection) и выделения их дескрипторов, комбинированных алгоритмов до методов глубокого обучения на основе сверточных нейронных сетей для распознавания объектов [25, 26, 27].

Сверточные нейронные сети можно разделить на двуступенчатые и одноступенчатые. На рисунке 1 представлено сравнение этих двух мета-архитектур. На основе их сравнительного анализа можно выбрать модель, наиболее приемлемую для решения той или иной прикладной задачи.

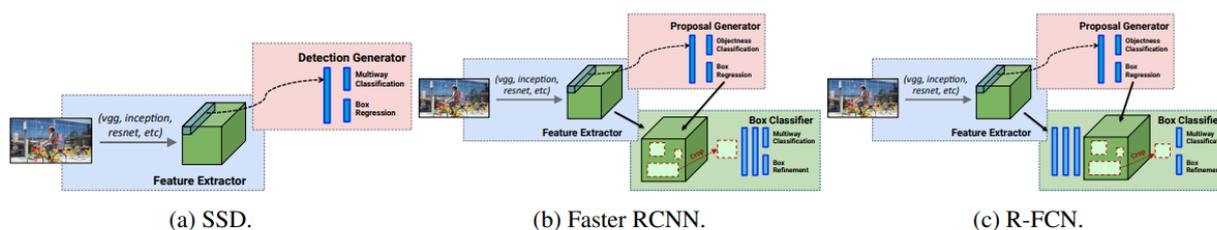


Рис. 1. Сравнение мета-архитектур: а) одноступенчатых (SSD) и б,с) двухступенчатых (Faster R-CNN, R-FCN) моделей распознавания объектов [28]

Одноступенчатые (single-shot) модели применяют «якорные» ограничивающие рамки («anchor box»), положение которых известно заранее. Их расположение может быть как определено архитектурой [29], так и вычислено на основе данных [30]. Примерами одноступенчатых моделей являются семейства моделей YOLO и SSD (рис.1,а) [31], а также RetinaNet [32].

Двухступенчатые модели (two-shot) сначала решают задачу локализации объектов, то есть предлагают области интереса (region of interest), в которых вероятно нахождение объекта одного из искомых классов, а затем классифицируют выделенные фрагменты. Классификатор предсказывает класс объекта и уточняет положение ограничивающих рамок. Среди двухступенчатых моделей можно выделить следующие: R-CNN [26], Fast R-CNN [34], Faster R-CNN (рис.1,б) [35], R-FCN (рис.1,с) [36].

Сравнивая различные модели распознавания объектов, зачастую используются такие метрики как средняя точность (average precision – AP). Эта метрика представляет собой площадь под графиком аппроксимированной функции precision-recall. Также встречается показатель mean average precision (mAP), который является AP, усредненный по всем распознаваемым классам [18]. Решая задачу распознавания объектов, когда предсказывается класс и положение ограничивающей рамки, чтобы отнести предсказание к True Positive, необходимо верно предсказать и то и другое. Чтобы оценить точность предсказания ограничивающей рамки вводится параметр Intersection over Union (IoU) – отношение площади пересечения предсказанной и реальной рамок к площади их объединения. Рамка считается предсказанной верно, если IoU превышает некоторый порог. Выбор порога IoU отличается в разных источниках. В рамках соревнования PASCAL VOC авторы предложили порог 0.5 [37]. В наборе данных COCO [38] используются пороговые значения 0.5, 0.75, 0.95.

При реализации мобильной системы, когда доступные вычислительные мощности ограничены, эффективнее использовать одноступенчатые модели, так как они обладают лучшей производительностью за счет отсутствия этапа генерации областей интереса, но по качеству распознавания они уступают двухступенчатым [28] по описанным выше критериям. Разработчики архитектуры RetinaNet выдвинули предположение, что такое отставание связано с влиянием фона при обучении сетей, работающих за один проход. Поэтому в данной архитектуре была предложена новая функция потерь – Focal Loss, что позволило авторам добиться наилучших результатов по соотношению производительность/качество распознавания на момент публикации.

Описанные методы и архитектуры нейронных сетей адаптируются под мобильные устройства и применяются для создания портативных аналитических систем распознавания объектов. Например, в семействе архитектур YOLO присутствуют ряд моделей «tiny», созданных специально для работы на маломощных и носимых устройствах. Кроме того, в области распознавания объектов ведутся самостоятельные исследования с целью разработки небольших и эффективных архитектур нейронных сетей [39–44] для работы на мобильных устройствах и реализации концепции Internet Of Things (IoT).

Кроме «уменьшения» нейронных архитектур, изучаются методы их оптимизации – компрессии. Один из распространённых подходов – pruning («обрезка»), который представляет собой удаление из обученной модели весов и/или целых нейронов, которые вносят незначительный вклад в результирующий отклик сети. Практика показывает [45], что для качественной работы сети не требуются все ее параметры и нейроны, поэтому их удаление не ухудшает качество распознавания, но при этом уменьшается размер модели, занимаемый в памяти устройства. После проведения такой оптимизации возможно и сокращение вычислительных операций, необходимых для получения предсказания на основе входных данных. Такие программные библиотеки как TensorFlow Lite и Caffe оптимизированы для работы с нейронными сетями после «обрезки» избыточных частей [46] и позволяют получить прирост в производительности.

Другой подход к компрессии нейронных сетей, показавший свою эффективность – квантизация [47]. Суть подхода заключается в переквантовании значений весов по меньшему числу уровней, в отличие от исходного состояния. Например, веса обученной сети хранятся как 32-битные числа с плавающей точкой. После квантизации значение веса может быть представлено как 8-битное число. Продвинутое техники адаптивной квантизации, учитывающие распределение весов для каждого слоя по отдельности, позволяют добиться и лучших результатов [46]. В работе [47] авторы, сочетая pruning и квантизацию, добились уменьшения размеров модели в 27 раз без потерь в точности распознавания объектов.

### **Технологии программной реализации**

Для реализации мобильной аналитической системы распознавания объектов предлагается выбирать инструменты, признанные и поддерживаемые создателями операционной системы Android – корпорацией Google, а также сообществом разработчиков. Стек технологий: Android Software Development Kit (SDK), Android Native Development Kit (NDK) и библиотека компьютерного зрения OpenCV, адаптированная для использования на мобильных устройствах. Разработку предлагается вести на языках программирования Kotlin и C++. Взаимодействие высокоуровневого кода на Kotlin и низкоуровневых библиотек, написанных на C++ организовать с помощью Java Native Interface (JNI). При этом накладные затраты (в терминах вычислительных операций), связанные с использованием выбранных технологий, библиотек и языков программирования должны быть сведены к минимуму.

Поэтому в основу архитектуры мобильной аналитической системы распознавания объектов на изображениях необходимо заложить разделение на реактивный и алгоритмический подходы и предусмотреть их совместное использование. Первый из них подразумевает реакцию на изменения, поступающие извне, в данном случае, от взаимодействия пользователя с устройством, и ориентирован на распространение потоков

данных. Такая концепция отлично подходит для построения пользовательского интерфейса [48] и активно используется в Android SDK.

Операционная система контролирует жизненный цикл приложения и отдельные его компоненты (например, такие, как Activity, Fragment или View) также в нем участвуют, проходя определенные этапы (onCreate, onPause, onDestroy и др.) и изменяя свое состояние. Разработчик, с помощью функций обратного вызова, механизмов подписок и методов родительских классов из SDK может обрабатывать этапы жизненного цикла и управлять реакцией приложения на определенные системные события. Таким образом, чтобы построить пользовательский интерфейс, нужно описать набор задействованных элементов, их компоновку и реакцию на события, будь то запуск приложения, его закрытие, пользовательское нажатие, скролл или какое-то другое событие, обработку которого предполагает SDK.

В качестве недостатков реактивного подхода можно выделить: дополнительные вычислительные операции и абстракции, которые нужны только для реализации «реактивности» и отсутствие полного контроля над потоком выполнения приложения, что приводит к проблемам оптимизации сложных вычислений (таких, например, как обработка видеопотока в реальном времени). Чтобы решить эти проблемы и обойти ограничения реактивного подхода, применяется алгоритмический подход, предполагающий низкоуровневое взаимодействие с системой и выполнение большого количества последовательных вычислительных операций.

Реализовать этот подход предлагается средствами Android NDK [49] и взаимодействием с системой на языке C++. Но такие низкоуровневые инструкции все равно должны вызываться из приложения на Kotlin, так как мы не отказываемся от удобства построения пользовательских интерфейсов на этом языке, поэтому необходимо продумать передачу данных между двумя этими частями системы с целью минимизировать накладные расходы на преобразования типов. Была разработана схема такого взаимодействия, которая представлена на рисунке 2. Части на схеме, отмеченные зеленым – это программные методы и классы Android SDK и OpenCV. Желтым отмечены реализованные нами методы на языке программирования Kotlin, а оранжевым цветом выделена разработанная функция на C++, в которой происходит обработка изображения (в данном случае – распознавание объектов с применением YOLO). Данная реализация основана на том, что обе части системы, высокоуровневый код на Kotlin и низкоуровневая функция обработки изображений на C++, работают с одной и той же областью оперативной памяти устройства, куда записан текущий кадр со штатной видеокamеры.

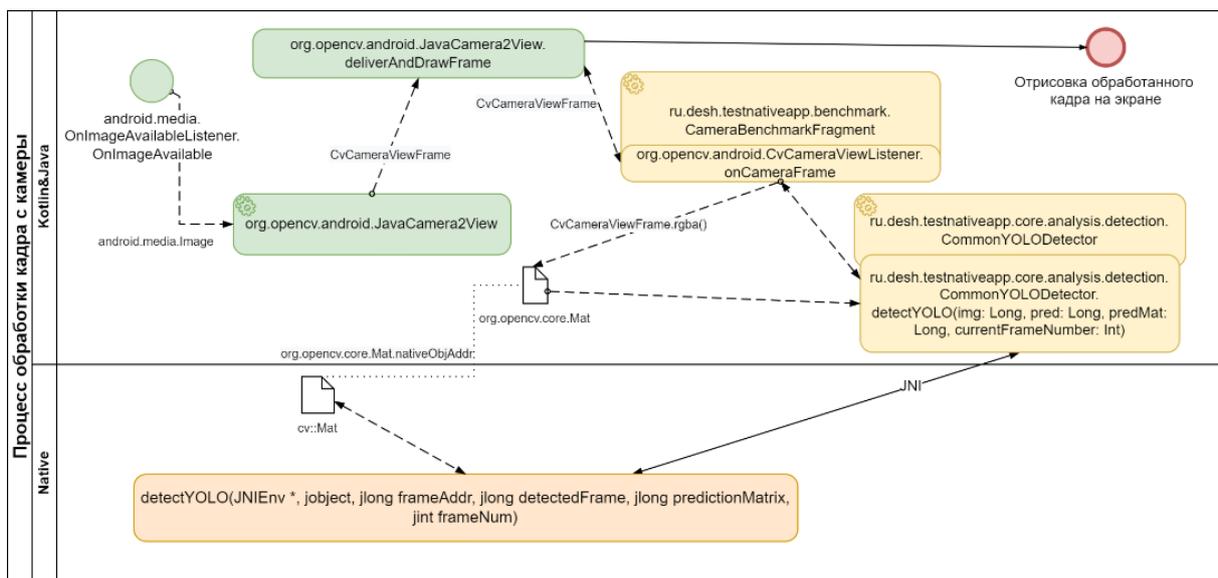


Рис. 2. Описание процесса обработки кадра с камеры смартфона в нотации BPMN 2.0

Если резюмировать полученные в ходе исследования результаты, то можно с уверенностью сказать, что возможности применения смартфонов далеко не ограничиваются персональным использованием для решения повседневных задач. Уже сейчас мобильные устройства позволяют оптимизировать процессы в медицине, промышленности, экологии, урбанистике. А повсеместное распространение смартфонов и совершенствование их технических характеристик делает дальнейшие исследования в области проектирования мобильных аналитических систем все более актуальными.

Особенно можно выделить аналитические системы обработки изображений на базе смартфонов, использующие технологии ИИ для распознавания объектов. Проанализировав нейросетевые архитектуры, решающие задачи распознавания, мы пришли к выводу, что одноступенчатые архитектуры (такие, как YOLO, SSD и RetinaNet) являются наиболее приемлемыми для их применения на мобильных устройствах. Single shot архитектуры производительнее, чем двухступенчатые, при этом ненамного уступают им в качестве распознавания.

Нами разработана схема взаимодействия программных структур, которая эффективно использует вычислительные ресурсы мобильного устройства для обработки изображений. Реализация выполнена применяя самые популярные и зарекомендовавшие себя инструменты и языки программирования для создания приложений под ОС Android: Android SDK, Kotlin, Android NDK, C++, OpenCV. С таким стеком технологий мы не отказываемся от удобства построения пользовательских интерфейсов и полезных высокоуровневых функций SDK, но при этом имеем полный контроль над выполнением приложения в те моменты, когда происходят тяжелые операции обработки изображений. В настоящее время задача распознавания объектов в реальном времени является вычислительно сложной для большинства мобильных устройств. Поэтому необходимо тщательно подходить к проектированию архитектуры мобильных аналитических систем распознавания объектов с использованием технологий ИИ и выбору инструментов разработки, чтобы использовать имеющиеся мощности наиболее эффективно.

В будущем можно ожидать качественного прироста производительности мобильных систем обработки изображений, так как передовые исследования в области распознавания объектов связаны с применением AutoML (автоматический поиск нейронных архитектур), созданием легковесных и эффективных архитектур [50]. Указанная перспектива, несомненно, позволит разрабатывать мобильные аналитические системы на принципиально новом уровне.

## Литература

1. Number of mobile devices worldwide 2020-2025. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.statista.com/statistics/245501/multiple-mobile-device-ownership-worldwide/> (дата обращения: 24.09.2022).
2. Шевченко М. Исследование: мобильные телефоны есть у 67% людей на Земле, а самый дешёвый мобильный интернет в Израиле. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://3dnews.ru/1048111/issledovanie-mobilnie-telefoni-est-u-67-lyudey-na-zemle-a-samiy-deshyoviy-mobilniy-internet-v-izraile> (дата обращения: 24.09.2022).
3. Диджитал-2021 Россия: мобильные факты. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.byud.me/ru/blog/2021/06/digital-2021/> (дата обращения: 24.09.2022).
4. Поляков А. Сравнение производительности ПК и смартфонов, включая iPhone 11. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://habr.com/ru/post/471018/> (дата обращения: 24.09.2022).
5. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2020619990 Российская Федерация. Smart Timber - система для измерения и учета древесины: № 2020618872: заявл. 12.08.2020: опубл. 26.08.2020 / В.В. Уфнаровский, М.Н. Смирнов, Т.В. Елисеева, Д.А. Ткачева; заявитель Общество с ограниченной ответственностью «Системы компьютерного зрения». – EDN DSIWMK.
6. Про Timbeter. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://timbeter.com/ru/about/> (дата обращения: 01.10.2022).
7. Алейник Н. Индустриальный AR: как корпорации используют дополненную реальность. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://rb.ru/longread/industrial-AR/> (дата обращения: 01.10.2022).
8. Zhao Z., Wei L., Cao M., Lu M. A smartphone-based system for fluorescence polarization assays. – 2019. – Vol. 128. – Pp. 91-96.
9. Kim S., Uddin M.J., Im S., Ko S., Shim J. A smartphone-based optical platform for colorimetric analysis of microfluidic device. Sensors and Actuators B: Chemical. – 2016. – №. 239. DOI: 10.1016/j.snb.2016.07.159.

10. Jalal U.M., Kim S.C., Shim J.S. Histogram analysis for smartphone-based rapid hematocrit determination. *Biomedical optics express*. – 2017. – №. 8(7). – Pp. 3317–3328.
11. Gallegos D., Long K.D., Yu H., Clark P.P., Lin Y., George S., Nath P., Cunningham B.T. Label-free biodetection using a smartphone // *Lab on a chip*. – 2013. – №. 13. DOI:10.1039/c3lc40991k.
12. Volkan K., Horzum N., Solmaz M From Sophisticated Analysis to Colorimetric Determination: Smartphone Spectrometers and Colorimetry // *Color Detection*. – 2020. DOI:10.5772/INTECHOPEN.82227.
13. Banik S., Melanthota S.K. Arbaaz et al. Recent trends in smartphone-based detection for biomedical applications: a review // *Anal Bioanal Chem*. – 2021. – №. 413. – Pp. 2389–2406.
14. Khlynov R.D., Ryzhova V.A., Konyakhin I.A., Korotaev V.V. Robotic polarimetry system based in image sensors for monitoring the rheological properties of blood in emergency situations // *Smart Electromechanical System, Studies in System, Decision and Control*. – 2022. – №. 413. – Pp. 201–218.
15. Nguyen C.T., Khlynov R.D., Ryzhova V.A., Gorbachev A.A., Yarishev S.N., Konyakhin I.A., Djamiykov T.S., Marinov M.B. Calibration Methods of a Portable Polarizing System for Monitoring Optically Inhomogeneous Media // *Computation*. – 2022. – №. 10. – 131 p.
16. Anggraeni Pitaloka D., Wulandari A., Basaruddin T., Liliana D.Y. Enhancing CNN with Preprocessing Stage in Automatic Emotion Recognition // *Procedia Computer Science*. – 2017 – №. 116. – Pp. 523-529. DOI: 10.1016/j.procs.2017.10.038.
17. Conn B., Arandjelovic O. Towards computer vision based ancient coin recognition in the wild — Automatic reliable image preprocessing and normalization // *2017 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*. – 2017. – Pp. 1457-1464. DOI: 10.1109/IJCNN.2017.7966024.
18. Padilla R., Lobato Passos W., Dias T., Netto S., da Silva E. A Comparative Analysis of Object Detection Metrics with a Companion Open-Source Toolkit // *Electronics*. 202110. – Pp. 279-306. DOI: 10.3390/electronics10030279.
19. Open Images Dataset V7. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: [https://storage.googleapis.com/openimages/web/factsfigures\\_v7.html](https://storage.googleapis.com/openimages/web/factsfigures_v7.html) (дата обращения: 04.12.2022).
20. Shorten C., Khoshgoftaar T. A survey on Image Data Augmentation for Deep Learning // *Journal of Big Data*. – 2019. – №. 6. DOI: 10.1186/s40537-019-0197-0.
21. Larochelle H., Erhan, D., Bengio Y. Zero-data Learning of New Tasks // *Proceedings of the National Conference on Artificial Intelligence*. – 2008. – №. 2. – Pp. 646-651.
22. Sun X., Gu, J., Sun H. Research progress of zero-shot learning // *Applied Intelligence*. – 2021. – №. 51. – Pp. 1-15. DOI: 10.1007/s10489-020-02075-7.
23. Россияне предпочли флагманам более доступные смартфоны: аналитика МТС. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://media.mts.ru/gadgets/199732-populyarnye-smartfony-2022-goda/> (дата обращения: 29.09.2022).
24. Carvalho D. Adaptive Mobile Patterns: The Silk Route to Apps for Phone and Tablet. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://medium.com/outsystems-experts/adaptive-mobile-patterns-the-silk-route-to-apps-for-phone-and-tablet-3d96b759f22f> (дата обращения: 30.09.2022).
25. Пастушков А.В. Метод и алгоритмы поиска объектов в видеопотоке // *Диссертация на соискание учёной степени кандидата технических наук*. – Томск: ТГУ, 2017. – 135 с.
26. Viola P., Jones M. Rapid object detection using a boosted cascade of simple features // *Proceedings of the 2001 IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. IEEE Comput. Soc, 2001, CVPR 2001*. – Vol. 1. – Pp. I–511–I–518.
27. Dalal N., Triggs B. Histograms of oriented gradients for human detection // *2005 IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR'05)*. – 2005. – Vol. 1. – №. 06. – Pp. 886–893.
28. Huang J., Rathod V., Sun C., Zhu M., Korattikara A., Fathi A., Fischer I., Wojna Z., Song Y., Guadarrama S., Murphy K. Speed/accuracy trade-offs for modern convolutional object detectors // *ArXiv*. 2017. arXiv:1611.10012v3 [cs.CV].
29. Redmon J., Divvala S., Girshick R., Farhadi A. You Only Look Once: Unified, Real-Time Object Detection // *ArXiv*. 2016. arXiv:1506.02640v5 [cs.CV].
30. Redmon J., Farhadi A. YOLO9000: Better, Faster, Stronger // *ArXiv*. 2016. arXiv:1612.08242v1 [cs.CV].
31. Liu W., Anguelov D., Erhan D., Szegedy C., Reed S., Fu C., Berg A. SSD: Single Shot MultiBox Detector // *ArXiv*. 2016. arXiv:1512.02325v4 [cs.CV].
32. Lin T.-Y., Goyal P., Girshick R., He K., Dollár P. Focal Loss for Dense Object Detection // *IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV)*, 2017.
33. Girshick R., Donahue J., Darrell T., Malik J. Rich feature hierarchies for accurate object detection and semantic segmentation // *ArXiv*. 2014. arXiv:1311.2524v5 [cs.CV].
34. Girshick R. Fast R-CNN // *ArXiv*. 2015. arXiv:1504.08083v2 [cs.CV].
35. Ren S., He K., Girshick R., Sun J. Faster R-CNN: Towards Real-Time Object Detection with Region Proposal Networks // *ArXiv*. 2016. arXiv:1506.01497v3 [cs.CV].
36. Dai J., Li Y., He K., Sun J. R-FCN: Object detection via regionbased fully convolutional networks, 2016. arXiv:1605.06409v2.

37. Everingham M., Van Gool L., Williams C., Winn J., Zisserman A. The Pascal Visual Object Classes (VOC) challenge // International Journal of Computer Vision. – 2010. – №. 88. – Pp. 303-338. DOI: 10.1007/s11263-009-0275-4.
38. Lin T.-Y., Maire M., Belongie S., Hays J., Perona P., Ramanan D., Dollár P., Zitnick C. Microsoft COCO: Common Objects in Context. – 2014. arXiv:1405.0312 [cs.CV].
39. Iandola F., Han S., Moskewicz M., Ashraf K., Dally W., Keutzer K. SqueezeNet: AlexNet-level accuracy with 50x fewer parameters and <0.5MB model size. – 2016. arXiv:1602.07360 [cs.CV].
40. Zhang X, Zhou X., Lin M., Sun J. ShuffleNet: An Extremely Efficient Convolutional Neural Network for Mobile Devices. – 2018. – Pp. 6848-6856. DOI: 10.1109/CVPR.2018.00716.
41. Howard A.G., Zhu M., Chen B., Kalenichenko D., Wang W., Weyand T., Andreetto M., Adam H. MobileNets: Efficient convolutional neural networks for mobile vision applications. – 2017. arXiv:1704.04861 [cs.CV].
42. Wang R., Li X., Ao S., Ling C. Pelee: A Real-Time Object Detection System on Mobile Devices. – 2018. arXiv:1804.06882 [cs.CV].
43. Tan M., Chen B., Pang R., Vasudevan V., Sandler M., Howard A., Le Q. MnasNet: Platform-Aware Neural Architecture Search for Mobile // 2019 IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR). – 2019. – Pp. 2815-2823. DOI: 10.1109/CVPR.2019.00293.
44. Cai H., Gan C., Han S. Once for All: Train One Network and Specialize it for Efficient Deployment. – 2019. arXiv:1908.09791 [cs.LG].
45. Han S., Pool J., Tran J., Dally W. Learning both Weights and Connections for Efficient Neural Networks. 2015. arXiv:1506.02626 [cs.NE].
46. Peterson H. An Overview of Model Compression Techniques for Deep Learning in Space. [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://medium.com/gsi-technology/an-overview-of-model-compression-techniques-for-deep-learning-in-space-3fd8d4ce84e5> (дата обращения: 03.12.2022).
47. Han S., Mao H., Dally W. Deep Compression: Compressing Deep Neural Networks with Pruning, Trained Quantization and Huffman Coding. – 2016. arXiv:1510.00149 [cs.CV].
48. Sahil S., Zaidi A., Ansari M., Aslam A., Kanwal N., Asghar M., Lee B. A Survey of Modern Deep Learning based Object Detection Models // ArXiv. 2021. arXiv:2104.11892 [cs.CV].
49. Прищелюк Н. Реактивное программирование простыми словами — объясняют эксперты. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://tproger.ru/experts/reactive-programming-in-simple-words/> (дата обращения: 01.10.2022).
50. Su B., Cheng B., Chen J.-L. GPU based High Definition Parallel Video Codec Optimization in Mobile Device // IEEE Transactions on Mobile Computing. DOI: 10.1109/TMC.2021.3139907.

УДК 004.89

## **ТЕХНОЛОГИИ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА В ОБРАЗОВАНИИ**

**Шуваева В.А.** (студент, Университет ИТМО), **Гюннинен Е.А.** (студент, Университет ИТМО)

**Научный руководитель: к.и.н., доцент Соснило А.И.** (Университет ИТМО)

*e-mail: [gyninen@gmail.com](mailto:gyninen@gmail.com)*

*В работе рассмотрены различные примеры применения искусственного интеллекта в образовании, а также приведен анализ теоретических основ искусственного интеллекта. Подробно описаны ключевые характеристики искусственного интеллекта. Целью данной работы является анализ эффективности применения инновационных технологий, в частности искусственного интеллекта в образовании.*

**Ключевые слова:** *инноватика, образование, искусственный интеллект, VR, AR.*

В современном мире большинство компаний стремятся к автоматизации процессов, например компания Alibaba автоматизировала процессы поиска товара на складе, но стоит подметить, что собирают посылки все еще люди, но автоматизация уже сократила труд работников склада на 70% и позволила доставлять заказ за 24 часа по Китаю и за 72 часа по всему миру. Применение технологий искусственного интеллекта набирает обороты не только в промышленности, но и в образовании. Это стало особенно заметно в онлайн образовании, где процесс проверки заданий, усвоения знаний и построение плана обучения в отдельных случаях уже выполняет машинное обучение. Элементы искусственного интеллекта позволяет снять часть нагрузки с преподавателя и сделать процесс обучения со стороны обучающегося более эффективным, доступным и персонализированным. Далее обратимся к понятию искусственный интеллект.

Искусственный интеллект (ИИ) — это эффективный инструмент, который позволяет машинам учиться на своем опыте, адаптироваться к новым изменениям и выполнять различные задачи на основе анализа больших массивов данных. Высший искусственный интеллект, над созданием которого многие годы трудятся ученые и программисты, будет способен самообучаться и имитировать черты человеческого разума с помощью рассуждений, сенсорных приложений, планирования, оптимального принятия решений и методов решения проблем. Потенциал искусственного интеллекта для выполнения действий человека с помощью открытия знаний привлек особое внимание исследовательских сообществ и первоклассных компаний, и за последние два десятилетия в этой области наблюдался максимальный рост по сравнению с любой другой технологией [7].

В настоящее время искусственный интеллект представлен в виде технологий нейросети или машинного обучения, способного в результате анализа больших данных давать ответы на поставленные перед ним задачи и самообучаться также на основе больших данных.

Рынок искусственного интеллекта ежегодно растёт, рост заметен как на рынке России, так и на международном рынке. В 2021 году финансирование искусственного интеллекта в мире составило 66,8 млрд долларов, что на 108% больше, чем в 2020 году. От года к году финансирование увеличивается, что отражено на рисунке.

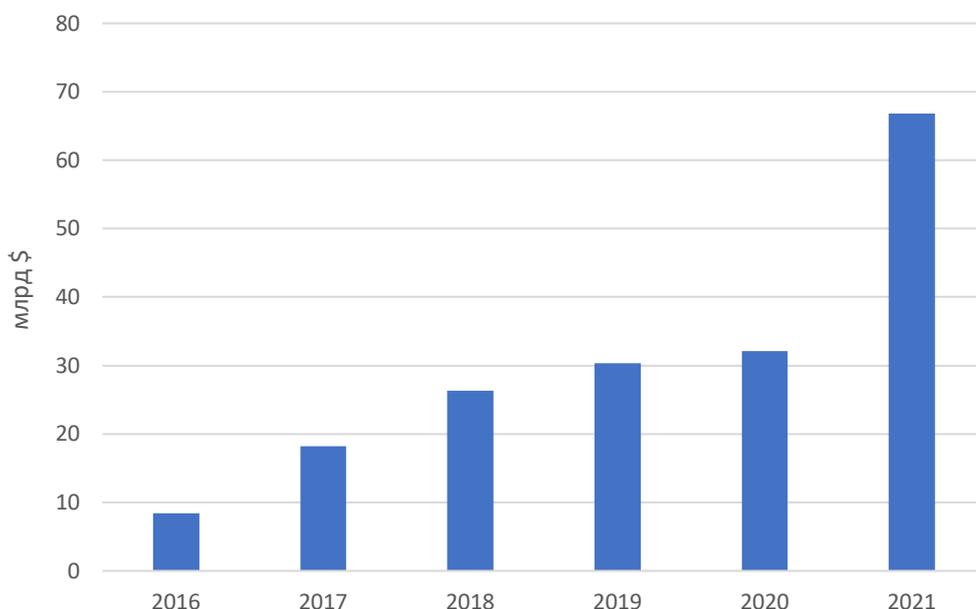


Рисунок. Динамика мирового венчурного рынка ИИ за 2016–2021 гг. [9]

В России также заметна динамика к росту финансирования искусственного интеллекта. В 2021 году было проинвестировано 226 млн долларов в то время, как в 2020 году было проинвестировано 84 млн долларов. Средний рост рынка за последние 6 лет составил 62%. Динамика роста инвестиций в искусственный интеллект в России [9].

В 2021 году был принят Федеральный проект «Искусственный интеллект», в рамках которого производится финансирование технологий искусственного интеллекта через институты размытия и ФОИВы, данный Федеральный проект также помогает тенденции к финансированию технологий искусственного интеллекта в России быть в восходящей динамике.

Технологический прогресс в области искусственного интеллекта используется для решения проблем во многих сферах человеческой жизни таких как: увеличение продаж, своевременное обнаружение мошенничества, автоматизацию процессов, индивидуальная траектория обучения для школьников и студентов исходя из их особенностей. Есть несколько характеристик, которые делают искусственный интеллект важным толчком к развитию, поскольку он дает машинам возможность принимать решения, подобные человеческим. Машины быстрее людей, умнее и точнее, но они не могут думать самостоятельно, и именно

поэтому люди оцениваются выше машин. Предполагается, что ИИ изменит этот факт и наделит машины собственным мозгом. Это дает им возможность думать.

Наиболее распространенными сферами для ИИ являются:

- робототехника;
- домашняя автоматизация или умный дом;
- искусственные нейронные сети;
- чат-боты;
- распознавание голоса или лица.

Хотя некоторые решения образовательных проблем на основе ИИ уже существуют, но государство не стремится их внедрять в школьный образовательный процесс. Однако пандемия изменила ситуацию, заставив Правительство внедрять элементы ИИ в образование. Например, система «Пеликан» еще реализована не во всех школах России, но родители обучающихся уже отмечают положительный эффект от данного нововведения.

Предоставляя доступ к нужным информативным ресурсам, позволяя преподавателям и ученикам взаимодействовать более эффективно, ИИ может помочь студентам учиться более эффективно и достигать целей в зависимости от их запросов. Ниже приведены несколько примеров:

- Персонализация: Персонализация — является одним из основных трендов в образовании. Благодаря использованию элементов ИИ студенты могут получить индивидуальный подход к своим образовательным запросам, основанный на их образовательных предпочтениях. Кроме того, система сама может помочь обучающемуся в подборе необходимого курса, анализируя предыдущий образовательный опыт.
- Репетиторство: зачастую студентам требуется помощь в изучении материала, а встречи с репетитором занимают много времени на сборы. Решением такой проблемы приходят онлайн школы и чат-боты. Студенты, находясь дома, могут получить качественный образовательный материал без ущерба своему времени.
- Быстрые ответы: в современном мире, когда самый ценный для людей ресурс – это время нет ничего более огорчающего чем ждать ответ на свой вопрос по несколько дней. В свою очередь, учителя ежедневно отвечают на повторяющиеся вопросы. Элементы ИИ могут помочь сократить время ожидания ответа на вопрос до нескольких секунд, что значительно упрощает работу как ученику, так и учителю.
- Универсальный круглосуточный доступ к обучению: теперь студенты имеют возможность проходить образовательный курс, не опираясь на назначенное преподавателем время. Онлайн образование дало возможность получать образование, совмещая с профессиональной деятельностью и минимизировать расходы на транспорт и проживание [11].

Примеры применения искусственного интеллекта в сфере образования:

1. Автоматизация процессов: искусственный интеллект используется для автоматизации рутинных процессов. У учителей очень много рутинных процессов, таких как проверка контрольных работ, домашних работ, составление отчетов, сейчас это может выполнять искусственный интеллект. Согласно паспорту стратегии цифровой трансформации, которую подготовило Минпросвещения, до 2030 года будут реализованы сервисы для проверки домашних заданий [3].
2. Персонализированное обучение: такой подход к образованию позволяет выявить потребность в знаниях по каждой отдельной теме каждого ученика и выстроить обучение согласно выявленным потребностям, платформа Knewton одна из первых заняла нишу персонализированного обучения. В совместном проекте с Университетом Аризоны платформа Knewton показала эффективность персонализированного обучения, поскольку результаты обучающихся улучшились на 18%, а процент отчислений снизился на 47% [6].

3. Доступность образования: с помощью технологий искусственного интеллекта реализуется возможность обучения людей с нарушениями слуха, зрения или другими особенностями, таким образом искусственный интеллект делает образование более доступным для большего числа желающих. Платформа AR Tutor помогает детям с особенностями с социальной адаптацией, работа платформы основана на воздействии на 3 канала восприятия, что повышает эффективность обучения. Приложение «AR Tutor» уже используется в учебных центрах, центрах реабилитации инвалидов детства, благотворительных фондах [4].
4. Возможность постоянно быть на связи: искусственный интеллект позволяет обучающемуся иметь возможность всегда задать интересующий вопрос, для этой цели были разработаны чат-боты, которые активно используются, например, в корпоративном университете Сбера используется чат-бот для повышения эффективности адаптации новых сотрудников. Бот Олег помогает отвечать на вопросы новых сотрудников, тем самым облегчая процесс адаптации к новому месту работы [2].
5. Анализ результатов: искусственный интеллект позволяет быстро провести анализ результатов по всем домашним и контрольным работам, выявить темы, которые обучающимся запомнились хуже других, провести ретроспективный анализ всех полученных результатов в процессе обучения, а затем и перспективный анализ с целью составления плана дальнейшего обучения, особенно это важно для реализации адаптивного обучения.
6. Практика: искусственный интеллект в обучении врачей дает возможность отточить навыки с VR или AR формате, что позволяет с большей точностью и уверенностью работать в дальнейшем. VR и AR могут использоваться как для обучения хирургов, так и для обучения стоматологов, терапевтов. Например, в 2017 году в конкурсе EdSim Challenge победил VR проект для обучения хирургов Osso VR. В результате исследования было доказано, что эффективность VR в 2 раза выше, чем эффективность других методов обучения [5].
7. Корпоративное обучение: промышленные компании могут использовать VR и AR для обучения сотрудников работе со специфичным оборудованием. Например, компания BIOCAD при помощи VR обучает сотрудников таким задачам, как подготовка лаборатории к исследованиям, выполнение практических работ, недопущение чрезвычайных ситуации [5].

Искусственный интеллект меняет сферу образования, снимая часть работы с преподавателей, что дает им возможность больше уделять времени и внимания методологии занятий. Также искусственный интеллект отвечает на потребность обучающихся в возможности в любой момент времени задать вопрос и получить на него ответ, теперь для этого есть чат-боты. Искусственный интеллект делает образование более доступным для тех, кто хочет учиться, даже если ранее было тяжело осуществимо в силу различных особенностей человека. Таким образом, невозможно недооценить то, как меняется сфера образования с внедрением в нее технологий искусственного интеллекта, отвечая на потребности преподавателей и обучающихся, искусственный интеллект делает образование более доступным, персонализированным и адаптивным.

## Литература

1. Искусственный интеллект в образовании: изменение темпов обучения. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: [https://iite.unesco.org/wp-content/uploads/2020/12/Steven\\_Duggan\\_AI-in-Education\\_2020\\_RUS.pdf](https://iite.unesco.org/wp-content/uploads/2020/12/Steven_Duggan_AI-in-Education_2020_RUS.pdf) (дата обращения: 04.10.2022).
2. Искусственный интеллект в обучении. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://sberuniversity.ru/edutech-club/glossary/936/?ysclid=l8d227yrrl838736552> (дата обращения: 04.10.2022).
3. Паспорт стратегии «Цифровая трансформация образования». [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://docs.edu.gov.ru/document/267a55edc9394c4fd7db31026f68f2dd/download/4030/> (дата обращения: 04.10.2022).
4. Цифровая платформа для детей с ОВЗ. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://inclusion24.ru/news/tsifrovaya-platforma-dlya-obrazovaniya-detej-s-ovz/> (дата обращения: 04.10.2022).

5. VR/AR: как технологии используют в медицине. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://modumlab.com/blog/medicine?ysclid=l8djvvyk7x425332092> (дата обращения: 04.10.2022).
6. Кнеутоп. [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <https://www.knewton.com> (дата обращения: 04.10.2022).
7. 7 benefits of AI in education. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://thejournal.com/articles/2021/06/23/7-benefits-of-ai-in-education.aspx> (дата обращения: 04.10.2022).
8. Андреева И.Р., Соснило А.И. Применение систем искусственного интеллекта в образовании // Экономика и управление: современные достижения и перспективы развития: Материалы Всероссийской научно-практической конференции с международным участием. – Омск: Омский государственный технический университет, 2021. – С. 238–244.
9. Альманах Искусственный интеллект. Индекс 2021. Аналитический сборник. – МФТИ, 2022. – С. 5-25.
10. Гусарова Н.Ф. Введение в теорию искусственного интеллекта. – Санкт-Петербург: Университет ИТМО, 2018 г. – 64 с.
11. Чубрикова О.В., Гусев С.В. Элементы искусственного интеллекта в образовании. – Новосибирск: Новосибирский химико-технологический колледж им. Д.И. Менделеева, 2022 г. – С 167–171.

УДК 004.056

## **РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА ВЫЯВЛЕНИЯ ДОКУМЕНТОВ, СОДЕРЖАЩИХ ЧУВСТВИТЕЛЬНУЮ ИНФОРМАЦИЮ, НА ОСНОВЕ МЕТОДОВ РАСПОЗНАВАНИЯ ОБРАЗОВ**

**Щиголев Н.А.** (студент, Университет ИТМО)

**Научный руководитель: к.т.н., доцент Воробьева А.А.** (Университет ИТМО)

*e-mail: [zapasnoy\\_variant@hotmail.com](mailto:zapasnoy_variant@hotmail.com)*

*В рамках работы был разработан и программно реализован алгоритм выявления документов, содержащих чувствительную информацию, на основе методов распознавания образов. Предлагаемое решение включает в себя модуль распознавания текста EasyOCR со встроенным средством детектирования текста CRAFT и модуль классификации SVM с TF-IDF векторизацией. Представлены экспериментальные результаты, демонстрирующие прирост точности нового алгоритма на 9,8% в сравнении с существующим научно-техническим уровнем.*

**Ключевые слова:** чувствительная информация, персональные данные, методы распознавания образов, оптическое распознавание символов, искусственные нейронные сети, машинное обучение, информационная безопасность.

Актуальность темы исследования заключается в том, что в изображениях, например в отсканированных документах, отправляемых на удаленные серверы, может присутствовать чувствительная информация с конфиденциальными или же персональными данными, для которых необходимо гарантировать информационную безопасность [1]. Для того, чтобы предотвратить случаи неправомерного доступа злоумышленником к этим сведениям, необходима разработка надежных превентивных методов обеспечения конфиденциальности данных в файлах изображений документов, а именно обнаружения и извлечения текстовой информации с помощью инструментов оптического распознавания символов (OCR), а также ее классификации и последующего предотвращения утечки. Выявление частных документов до сих пор остается сложной задачей, являющейся причиной многочисленных исследований и разработок [2, 3, 4]. Однако авторы в этих статьях делают больший акцент на этапе классификации извлеченной информации, используя современные подходы глубокого обучения, и применяют устаревшие инструменты OCR. Повышение корректности распознавания текста в данном случае является первоочередной задачей прежде всего потому, что качество результата отнесения изображения к классу частных документов напрямую зависит от того, насколько точно информация была извлечена. На практике документ не всегда имеет удобочитаемый формат для распознавания текста алгоритмами OCR, что объясняется наличием на изображении множества вариантов стилей шрифтов, языков, нестандартных фонов, а также узоров, бликов и т.д. [5]. Научная новизна работы заключается в применении конвейера, представляющего из себя связку эффективных алгоритмов OCR и классификации, для исследования повышения точности выявления частных документов. Целью работы является повышение точности выявления документов, содержащих чувствительную

информацию, посредством разработки модификации алгоритма на основе методов распознавания образов.

Чувствительная информация [6] – это данные, которые должны быть защищены от потери, неправильного использования, модификации или несанкционированного доступа в целях обеспечения информационной безопасности. Неправомерные действия с такой информацией могут негативно повлиять на благополучие или частную жизнь человека, активы бизнеса или даже на безопасность и международные отношения страны. Одной из категорий чувствительной информации является персональная информация, которая позволяет прямо или косвенно установить личность. Потеря, компрометация или раскрытие такой информации без разрешения может привести существенному моральному ущербу по отношению к физическому лицу. В данной работе рассматривалось выявление персональных данных, так как они имеют более структурированный характер относительно других категорий чувствительной информации.

Выявление чувствительной информации в документах заключается в последовательной обработке изображения алгоритмами распознавания образов и классификации. В данной статье приоритетной областью для исследования и улучшения существующих методик выявления чувствительных данных в документах были выбраны именно системы распознавания текста, так как на сегодняшний момент точность обработки этого вида информации, от которой напрямую зависит успех выполнения рассматриваемой задачи, не идеальна [7, 8]. Для проведения экспериментального исследования и определения лучшего инструмента по оценке их качественных критериев было выбрано четыре популярных OCR решения, а именно АBBYY FineReader Engine, Google Cloud Vision, Tesseract [9] и EasyOCR [10].

Tesseract и EasyOCR оказались самыми доступными и конкурентно способными программными продуктами. Также важно отметить наличие в EasyOCR “из коробки” детектора текста CRAFT, показавшего свою эффективность среди других алгоритмов решения задачи определения местонахождения ограничивающих рамок текста на изображении [11]. Поэтому предполагается, что EasyOCR улучшит показатели точности в сравнении с существующим решением на основе Tesseract [3], и в будущем предлагаемый алгоритм на основе этого фреймворка будет способен легко интегрироваться в любую информационную систему, где потребуется обеспечение высокого уровня информационной безопасности. Сравнение качественных критериев инструментов OCR представлено в таблице 1.

Таблица 1

**Сравнение качественных критериев инструментов OCR**

Качественный критерий	АBBYY FineReader Engine	Google Cloud Vision (OCR)	Tesseract	EasyOCR
Открытый исходный код	Нет	Нет	Да	Да
Архитектура	–	–	LSTM	CRNN
Бесплатный	Нет	Нет	Да	Да
Доступен в виде онлайн-сервиса	Нет	Да	Да	Да
Возможность интеграции в приложение	Да	Да	Да	Да
Доступен в виде услуги	Да	Да	Да	Да
Поддерживает мультязычность	Да	Да	Да	Да
Поддержка ОС	Windows, Linux, Mac OS	Windows, Linux, Mac OS и др. UNIXподобные	Windows, Linux, Mac OS и др. UNIXподобные	Windows, Linux, Mac OS и др. UNIXподобные

Также немаловажным аспектом исследуемой задачи является классификация распознанного текста. Подходы к ее реализации можно разделить на несколько категорий:

подход, основанный на нейронных сетях [12, 3], подход, основанный на классических алгоритмах машинного обучения [13], а также подход, основанный на сопоставлении со списком ключевых слов [14, 3].

Для проверки гипотезы о потенциальной эффективности инструмента EasyOCR в сравнении с Tesseract были использованы два последних подхода в силу их легковесности и относительно простой реализации. Первый метод заключается в сопоставлении распознанных алгоритмом OCR токенов текста с элементами списка чувствительных атрибутов, который составляется на основе анализа датасета на наличие определенного подмножества приватной информации. Второй метод классификации заключается в использовании классических алгоритмов машинного обучения, а именно Naive Bayes, Decision tree, K-nearest neighbors, Random forest, Stochastic gradient descent, Support vector machine [15] и Logistic regression. Подход нейронной классификации не рассматривался и, следовательно, был исключен из сравнения результатов эксперимента с существующим научно-техническим уровнем, поскольку нейронные сети занимают значительное пространство памяти вычислительного устройства за счет требуемого большого количества обучающих данных, а также требуют высоких вычислительных мощностей [16].

Был сформирован датасет из 700 изображений, в качестве положительного класса которого выступили изображения отсканированных идентификационных карт (id-card) и паспортов из набора данных MIDV, а также найденных в открытом доступе квитанций, счетов-фактур, чеков и т.п. В качестве отрицательного класса выступили изображения отсканированных страниц из наборов данных Ghenga и DIQA, включающих в себя художественные тексты, научные статьи, руководства и т.п.

Согласно предлагаемому алгоритму, входящее изображение подвергается следующим последовательным преобразованиям: предварительной обработке изображения, распознаванию текста глубокими нейронными сетями EasyOCR, предварительной обработке извлеченного текста, классификации на основе метода опорных векторов.

На первом этапе был использован классический метод предобработки – преобразование входящего отсканированного изображения документа в изображение в градациях серого посредством библиотеки обработки изображений OpenCV. Далее изображение конвертируется в текст посредством модуля EasyOCR, в котором происходит обнаружение ограничительных рамок текстовых областей с помощью CRAFT, основанного на архитектуре FCN с VGG-16, и извлечение текста из каждой обнаруженной рамки с помощью CRNN модели распознавания, которая является комбинацией ResNet (извлечения признаков), RNN (LSTM – маркировка последовательности) и CTC (BeamSearch декодирование). После этого происходит предварительная обработка извлеченного текста из формата списка строк в числовой согласно следующим этапам: перевод символов в нижний регистр, удаление специальных символов, токенизация, удаление стоп-слов, векторизация. Наконец, конвертированный в числовой формат текст поступает в модуль классификации на основе метода опорных векторов SVM. В нем создается и обучается соответствующий классификатор на специально собранной выборке изображений. Далее происходит предсказание принадлежности поданного на вход алгоритму отсканированного документа к одному из двух классов: приватному или публичному. На рисунке 1 представлена блок-схема алгоритма-конвейера выявления документов, содержащих чувствительную информацию, а также блок-схемы соответствующих этому алгоритму подпрограмм.

В ходе эксперимента реализация CRNN модели распознавания оказалась более эффективной: в то время, как точность Tesseract с LSTM на тестовом наборе данных равна 90,20%, предложенная модификация алгоритма увеличила этот показатель до 91,33%. Использование же стандартного для EasyOCR текстового детектора CRAFT в эксперименте повысило показатель точности Precision с 91,33% до 92,49%. Количественные результаты показателей точности представлены в таблице 2.

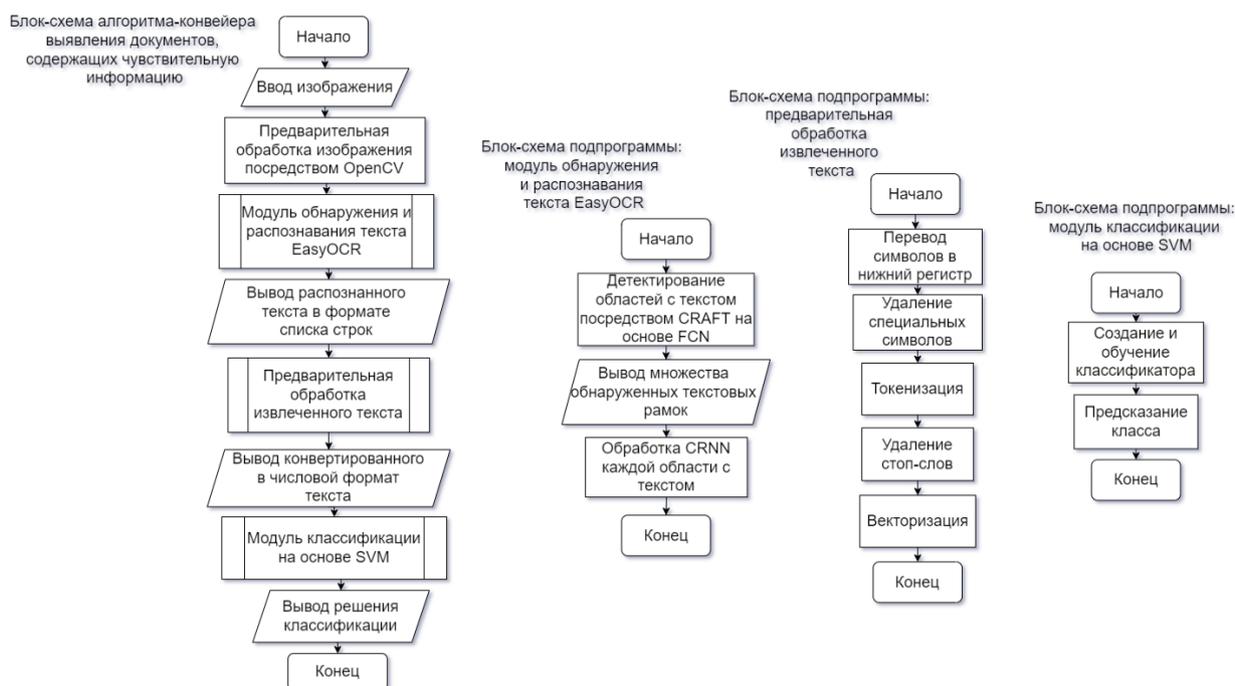


Рис. 1. Блок-схема алгоритма выявления документов, содержащих чувствительную информацию

Таблица 2

**Количественное сравнение показателей точности с использованием различных инструментов OCR и сопоставлением с ключевыми словами (СКС)**

OCR решение	Метод классификации	Accuracy, %	Precision, %	Recall, %	F1 score, %	Error rate
Tesseract 4.0 (LSTM) + East	Сопоставление с ключевыми словами	83,30	90,20	76,50	82,80	0,1670
EasyOCR (CRNN) + модификация с East	Сопоставление с ключевыми словами	90,86	91,33	90,29	90,80	0,0914
EasyOCR (CRNN) + CRAFT	Сопоставление с ключевыми словами	92,00	92,49	91,43	92	0,0799

И все же метод классификации, основанный на сопоставлении распознанных токенов текста со списком чувствительных слов, неидеален. Весомый недостаток этого подхода заключается в том, что в случае присутствия в публичном документе не употребляющихся в контексте чувствительной информации ключевых слов, а их наличие в тексте статистически неизбежно, алгоритм отнесет его к классу частных, не прибегая при этом к выявлению более сложных закономерностей в данных. Поэтому для эффективного решения этой проблемы и, следовательно, получения более точных результатов были применены классические алгоритмы машинного обучения с учителем. Для определения наилучшего метода использовалась 5-кратная перекрестная проверка. Для обучения моделей был применен простой и эффективный фреймворк прогнозного анализа данных Scikit-learn. Таким образом, метод, основанный на связке EasyOCR и классификатора SVM с TF-IDF векторизацией, превзошел все остальные варианты по баллу перекрестной проверки – Accuracy = 98,57%, Precision = 100%. По сравнению с простым методом сопоставления с ключевыми словами прирост точности предлагаемого решения составил 7,51%. В таблице 3 показано сравнение показателей точности модели в зависимости от ее преобразований.

**Количественное сравнение показателей точности с использованием различных классических алгоритмов машинного обучения**

OCR решение	Метод классификации	Векторизация	Accuracy, %	Precision, %	Recall, %	F1 score, %	Error rate
EasyOCR (CRNN) + CRAFT	Сопоставление с ключевыми словами	–	92,00	92,49	91,43	92	0,0799
	Naive Bayes	Count	98,29	100	96,57	98,26	0,0171
		TF-IDF	98,29	100	96,57	98,26	0,0171
	Decision tree	Count	98,29	100	96,57	98,26	0,0171
		TF-IDF	94,86	97,58	92,00	94,70	0,0514
	Random forest	Count	97,71	100	95,43	97,66	0,0229
		TF-IDF	97,43	100	94,86	97,36	0,0257
	SGD	Count	97,43	99,40	95,43	97,38	0,0257
		TF-IDF	98,86	99,42	98,29	98,85	0,0114
	SVM	Count	98,29	99,42	97,14	98,27	0,0171
		TF-IDF	98,57	100	97,14	98,55	0,0143
	Logistic regression	Count	99,14	98,31	100	99,15	0,0086
		TF-IDF	98,00	100	96,00	97,96	0,0200
	KNN	Count	88,86	99,28	78,29	87,54	0,1114
		TF-IDF	98,00	100	96,00	97,96	0,0200

Это исследование было направлено на разработку алгоритма, позволяющего производить автоматизированный анализ отсканированных документов на наличие чувствительной информации (персональных данных), на основе методов распознавания образов посредством нейронных сетей, а также метода классификации с помощью классического алгоритма машинного обучения SVM.

В дальнейших исследованиях в рамках данной темы возможно рассмотрение задачи выявления поддельных водительских прав, заключающейся в сопоставлении распознанной информации с помощью существующего алгоритма на основе EasyOCR с базой данных зарегистрированных документов.

## Литература

- Share of corporate data stored in the cloud in organizations worldwide from 2015 to 2022. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.statista.com/statistics/1062879/worldwide-cloud-storage-of-corporate-data/> (дата обращения: 01.04.2022).
- Myasnikov E., Savchenko A. Detection of sensitive textual information in user photo albums on mobile devices // 2019 International Multi-Conference on Engineering, Computer and Information Sciences (SIBIRCON). – IEEE. – 2019. – С. 0384-0390.
- Koreyukina L., Savchenko A. V. Automatic privacy detection in scanned document images based on deep neural networks // 2019 International Russian Automation Conference (RusAutoCon). – IEEE. – 2019. – С. 1-6.
- Копейкина Л.Н., Савченко А.В. Обнаружение персональных данных в фотоальбоме на основе кластеризации лиц и классификации текста сканированных документов // Информационные технологии и нанотехнологии (ИТНТ-2020). – 2020. – С. 236–243.
- Current State of OCR: Is OCR dead or is it a solved problem? [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://research.aimultiple.com/ocrtechnology/#:~:text=OCR%20is%20not%20a%20stand,structured%20data%20from%20their%20documents.> (дата обращения: 01.04.2022).
- Information sensitivity. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: [https://en.wikipedia.org/wiki/Information\\_sensitivity](https://en.wikipedia.org/wiki/Information_sensitivity) (дата обращения: 05.04.2022).
- Comparison of OCR tools: how to choose the best tool for your project. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://medium.com/dida-machinelearning/comparison-of-ocr-tools-how-to-choose-the-best-tool-for-your-project-bd21fb9dceb6> (дата обращения: 07.04.2022).
- Tafti A.P. et al. OCR as a service: an experimental evaluation of Google Docs OCR, Tesseract, ABBYY FineReader, and Transym // International Symposium on Visual Computing. – Springer, Cham. – 2016. – С. 735-746.
- Tesseract. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://github.com/tesseract-ocr/tesseract> (дата обращения: 07.04.2022).
- EasyOCR. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://github.com/JaidedAI/EasyOCR> (дата обращения: 07.04.2022).

11. Baek Y. et al. Character region awareness for text detection // Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. – 2019. – С. 9365-9374.
12. ML & AI for Software Developers - Part 18 Binary Classification with Neural Networks. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.atmosera.com/blog/binary-classification-with-neural-networks/> (дата обращения: 07.04.2022).
13. 5 Types of Classification Algorithms in Machine Learning. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://monkeylearn.com/blog/classificationalgorithms/> (дата обращения: 07.04.2022).
14. Retsinas G. et al. Efficient learning-free keyword spotting // IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence. – 2018. – Т. 41. – №. 7. – С. 1587-1600.
15. Advantages and Disadvantages of Neural Networks. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.baeldung.com/cs/neural-net-advantagesdisadvantages> (дата обращения: 07.04.2022).
16. SVM. Объяснение с нуля и реализация на python. Подробный разбор метода опорных векторов. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://habr.com/ru/company/ods/blog/484148/> (дата обращения: 17.04.2022).

## Интеллектуальные технологии в инфохимии

УДК 544.6

### ИДЕНТИФИКАЦИЯ БИОЛОГИЧЕСКИХ КОМПОНЕНТОВ СЛОЖНЫХ СМЕСЕЙ ПРИ ПОМОЩИ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Беляев В.Е. (студент, Университет ИТМО), Петрова М.С. (студент, Университет ИТМО),  
Домарева Н.П. (студент, Университет ИТМО), Алиев Т.А. (аспирант, Университет ИТМО)

Научный руководитель: к.х.н., профессор Скорб Е.В. (Университет ИТМО)

e-mail: [belyaev@infochemistry.ru](mailto:belyaev@infochemistry.ru)

*В работе рассмотрено применение электрохимических методов в совокупности с методами машинного обучения для анализа компонентов сложных смесей. На примере идентификации антибиотиков в сухом молоке был рассмотрен и изучен алгоритм по сбору вольтамперных характеристик (ВАХ) и создание программы, позволяющей проводить качественный и количественный анализ компонентов сложных смесей. Был проведен анализ результатов и сделаны выводы об эффективности данного метода и возможности его применения для анализа иных компонентов в иных системах.*

**Ключевые слова:** антибиотики, машинное обучение, ВАХ, базы данных, электродная система.

В настоящее время в пищевой промышленности остро стоит вопрос о контроле качества производимой продукции. Из-за постоянного развития данной отрасли промышленности и введения новых методик в производство необходимо контролировать получаемую продукцию на соответствие государственным стандартам. Например, не превышено ли содержание ионов тяжелых металлов в товарах, или содержание кисломолочных бактерий в молочной продукции. Одним из таких аспектов, требующих внимания, является контроль содержания антибиотиков в молоке [1–4].

Сейчас антибиотики широко используются в животноводстве для лечения домашнего скота, в качестве стимуляторов роста или в качестве кормовых добавок. Несмотря на преимущества их применения, повышенная концентрация антибиотиков также может наблюдаться и в молоке. Их присутствие в пищевых продуктах может вызвать серьезные риски для здоровья потребителя, включая токсические поражения печени, почек, кроветворных органов, неврит слухового нерва, аллергии, разрывы сухожилий, а в сочетании с некоторыми лекарственными препаратами привести к развитию тяжелых нарушений сердечного ритма. Конечно, концентрация любого антибиотика в конкретном продукте не должна превышать установленного порогового значения.

Мы предлагаем новую миниатюрную систему (рис.1), которая позволит определять концентрацию антибиотиков в молоке еще на ферме, что позволит уменьшить количество бракованной продукции, что сэкономит средства производителям и здоровье потребителям.



Рис. 1. Потенциостат и мультиэлектродная «ручка»

Данная система состоит из двух компонентов: потенциостата и мультиэлектродной «ручки». «Ручка» действительно является мультиэлектродной: 7 различных электродов из трех материалов (медь, никель и углеродное волокно) образуют рабочий и вспомогательный электроды. Сам потенциостат не требует подключения к сети, поскольку оснащен аккумулятором, а также системой Bluetooth для подключения к различным устройствам. Специально с данной целью было написано программное обеспечение для Windows и Android.

Для проведения тестирования на ферме человек будет набирать образцы молока, погружать в них ручку-электрод и результаты тестирования будут выводиться у него на планшете или ноутбуке. Планируемое время тестирования будет меньше 10 минут.

На первичном этапе были выбраны различные антибиотики такие как цефазолин, цефтиофур, пенициллин, стрептомицин, тетрациклин. Наши исследования были направлены не только на качественный анализ смеси, т.е. определение наличия антибиотика в молоке, но и на количественный анализ, позволяющий говорить о концентрации данного антибиотика в исследуемом образце. Для выполнения данной задачи, на этапе сбора данных, мы готовили образцы различных концентраций, а именно предельно допустимая концентрация данных антибиотиков в молоке, а также значения, отличающиеся в 10 и 100 раз в большую и меньшую стороны. Для каждой концентрации было проведено 20 экспериментов, итого объем данных для одного антибиотика составил 100 выходных значений.

Полученные значения образуют базу данных, которую мы используем для создания модели с использованием языка программирования Python, чтобы определять содержание антибиотиков в молоке. Поскольку перед нами стоит задача классификации, было принято использовать метод градиентного бустинга, а именно framework – CatBoost. Для первоначальной обработки и сортировки исходных данных были использованы различные библиотеки, такие как NumPy и Pandas. Для проверки результатов машинного обучения исходные данные были разделены на две группы: для обучения было использовано 80% исходных данных и оставшиеся 20% были использованы непосредственно для тестов. Результаты данного тестирования предоставлены на рисунке 2.

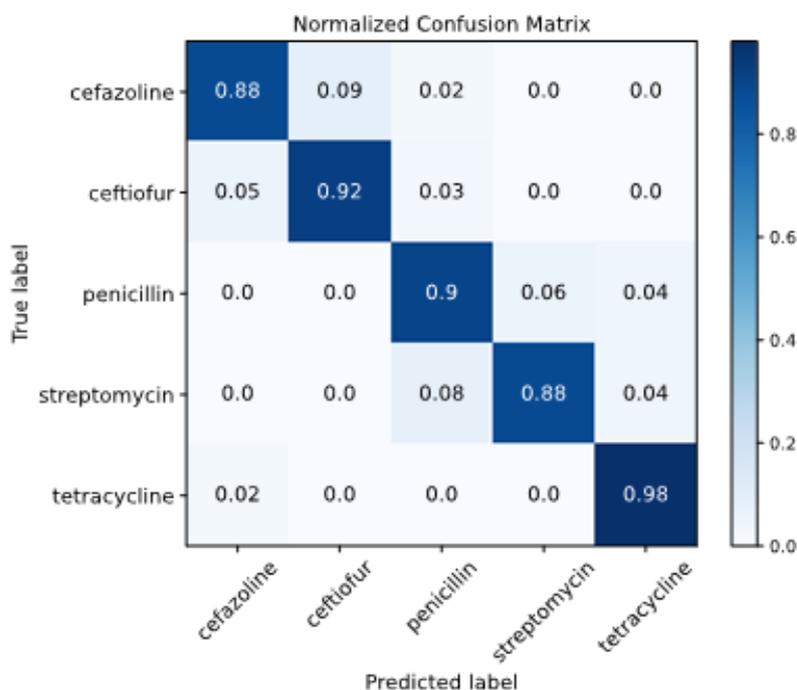


Рис. 2. Матрица ошибок

Анализируя полученную матрицу ошибок, можно сказать, что созданная программа анализирует присутствие антибиотика в молоке с точностью не менее 88%. Это говорит о том, что принципиальная схема эксперимента работает, и данную методику можно применять для анализа других компонентов сложных смесей, например, анализ гормонов во все том же молоке.

## Литература

1. Cháfer-Pericás C., Maquieira A., Puchades R. Fast screening methods to detect antibiotic residues in food samples // TrAC Trends in Analytical Chemistry. – 2010. – Т. 29. – №. 9. – С. 1038-1049.
2. Liu C. et al. Rapid and simultaneous determination of amoxicillin, penicillin G, and their major metabolites in bovine milk by ultra-high-performance liquid chromatography–tandem mass spectrometry // Journal of Chromatography B. – 2011. – Т. 879. – №. 7–8. – С. 533-540.
3. Tuerk J. et al. Analysis of antibiotics in urine and wipe samples from environmental and biological monitoring—comparison of HPLC with UV-, single MS-and tandem MS-detection // Journal of Chromatography B. – 2006. – Т. 831. – №. 1–2. – С. 72-80.
4. Mistry A. et al. How machine learning will revolutionize electrochemical sciences // ACS energy letters. – 2021. – Т. 6. – №. 4. – С. 1422–1431.

УДК 543

## РАЗРАБОТКА МОДИФИКАЦИИ ДЛЯ OPEN-SOURCE МАНИПУЛЯТОРА «BCN 3D MOVEVO»

**Вахрушев Б.С.** (студент, Университет ИТМО), **Соловьёв М.Р.** (студент, Университет ИТМО),  
**Гончаров Е.М.** (студент, Университет ИТМО), **Матюшова О.А.** (студент, Университет ИТМО)  
**Научный руководитель: к.т.н., доцент Абрамчук М.В.** (Университет ИТМО)

*e-mail: [kogwr@mail.ru](mailto:kogwr@mail.ru)*

*Комплект модификаций состоит из полностью переработанной конструкции подготовленной для 3D печати. Манипулятор со всеми сочленениями вращательного типа, приводимых в движение с помощью шаговых двигателей, управляемых с помощью контроллера Arduino. Разрабатываемые модификации предназначены для упрощения сборки, повышения ее жесткости и конечной точности позиционирования. Сохраненная кинематическая схема позволяет использовать исходную программу для управления с незначительными изменениями, а также в случае переделки уже собранного манипулятора «Vsp 3d Movevo» использовать стандартные покупные изделия от ранее собираемого манипулятора в виде: ремней, шкивов, шаговых двигателей, подшипников, валов и управляющей электроники.. Также новые печатные детали пакета модификаций, сокращают суммарное время печати комплекта и снижают требования к габаритным параметрам печатной области 3D принтера.*

**Ключевые слова:** манипулятор, модификация, шаговые двигатели, 3D-печать, упрощение сборки.

В текущем веке тотальной автоматизации невероятными темпами растет потребность в снижении расходов на производство, а также повышение качества продукции при сохранении ее конечной стоимости, или же вовсе ее снижении, данные факторы являются двигателями тотального развития робототехники. Различные роботизированные системы дают возможность освободить подавляющее большинство кадров, выполняющих монотонную работу на предприятии. Роботы способны выполнять большинство монотонных процессов значительно быстрее человека, при этом обеспечивают высокую степень повторяемости результата и снижение итогового процента брака. Ведущие производители промышленных роботов-манипуляторов — это компании FANUC, KUKA, HANWHA. Также существуют колаборативные модели, предназначенные для работы с людьми, такие как Universal Robots. Для образования полезно применять продукцию UFactory [1, 2]. К сожалению, не все вузы смогут позволить их продукцию ввиду их дороговизны. Примером учебной реализации манипуляторы может стать практическая реализация химических лабораторных экспериментов. Для них высокую приоритетность имеет простота робота, возможность его быстрого и доступного обслуживания, возможность массовой установки для охвата группы студентов. Однако точность позиционирования промышленных манипуляторов для них не так важна. В таком случае идеальным вариантом являются Open-source решения, однако «из коробки» подобные варианты имеют множество недоработок. Ставится задача разработки комплекта модификаций для распространенного открытого проекта манипулятора.

Конструкция манипуляторов изготавливается преимущественно методом 3D-печати, с использованием стандартных покупных изделий: шаговых двигателей, шкивов, ремней.

**Необходимость разработки комплекта модификации:**

1. Увеличение прочности конструкции – исходная конструкция манипулятора имеет ряд тонких мест, требующих либо дополнительного армирования, либо изготовления из особо прочных видов пластика. В ходе сборки исходной конструкции было сломано и повреждено несколько подобных деталей, потребовавших повторного воспроизводства на 3D принтере. Помимо проблем при сборке, детали, не обладающие достаточной жесткостью, негативно влияли на точность конечного позиционирования.
2. Упрощение манипулятора – исходный проект имеет пять степеней свободы: поворот вокруг своей оси 1 звена, 3 сочленения поворачивающихся друг относительно друга, продольный поворот третьего звена. Однако опыт практического применения продемонстрировал необходимость лишь в четырех степенях свободы: в большинстве случаев не использовался продольный поворот третьего звена.
3. Отсутствие концевых переключателей – изначальный проект не имеет датчиков, обозначающих конечное положение для движения в одном из направлений, соответственно нет возможности реализации автоматической калибровки манипулятора, что негативно влияет на точность позиционирования. Для выставления начального положения предполагается использовать ручные измерительные приборы, что в условиях проведения лабораторных экспериментов значительно повышает не профильные требования к студентам, наряду со снижением степени автоматизации.
4. Сложная сборка и обслуживание – изначально сборка, в которой легко ошибиться, происходит последовательно и каждый следующий элемент связан с предыдущим. В случае возникновения необходимости заменить элемент в среднем звене требуется разборка большей части манипулятора, для доступа к демонтажу требуемого элемента. В добавок для установки некоторых элементов требуется применение большой физической силы.



Рис. 1. Манипулятор BCN3D в стандартном исполнении [2] со схватом



Рис. 2. Полностью модифицированный BCN3D с установленным дозатором для проведения химических экспериментов

### Разработка модификации

Разработка модификаций производилась в программе трехмерного автоматизированного проектирования «Autodesk Inventor PRO21» с использованием встроенного ядра физического расчета для оптимизации конструкции и повышения прочностных характеристик.

Разработанная 3D модель была воспроизведена из одного из самых распространенных видов пластика для трехмерной печати полилактидного «PLA». Печать производилась на одном из самых распространённых бюджетных принтеров «Flying Bear Ghost 5» В новой версии решены все вышеописанные проблемы:

1. Увеличена прочность конструкции – модификация предполагает увеличение прочностных характеристик за счет изменения конструкции основных элементов их утолщения и добавления ребер жесткости.
2. Упрощена общая конструкция – благодаря уменьшению степеней свободы упростилась конструкция манипулятора, так же изготовление требует меньше компонентов за счет этого вес крайнего звена стал меньше, а следовательно, возросла грузоподъемность. Лишение данной степени свободы практически не влияет негативно на эксплуатационные характеристики для решения поставленных для этого манипулятора задач. В дополнение к вышесказанному уменьшена итоговая себестоимость данного манипулятора.
3. Добавлены площадки под установку концевых датчиков – новая конструкция имеет специальные углубления, предназначенные для установки концевых переключателей, наличие которых позволяет реализовать автоматическую калибровку манипулятора, соответственно, упрощает работу с ним, а также позволяет значительно повысить точность позиционирования.
4. Упрощен алгоритм сборки – модификация разработана таким образом, чтобы сборка не требовала больших физических усилий, а также была максимально очевидной. В дополнение обслуживание и замена компонентов теперь не требуют разборки всего или большей части манипулятора, логика сборки разработана таким образом, чтобы в случае необходимости замены какого-либо компонента возникала необходимость демонтажа лишь небольшого числа компонентов.

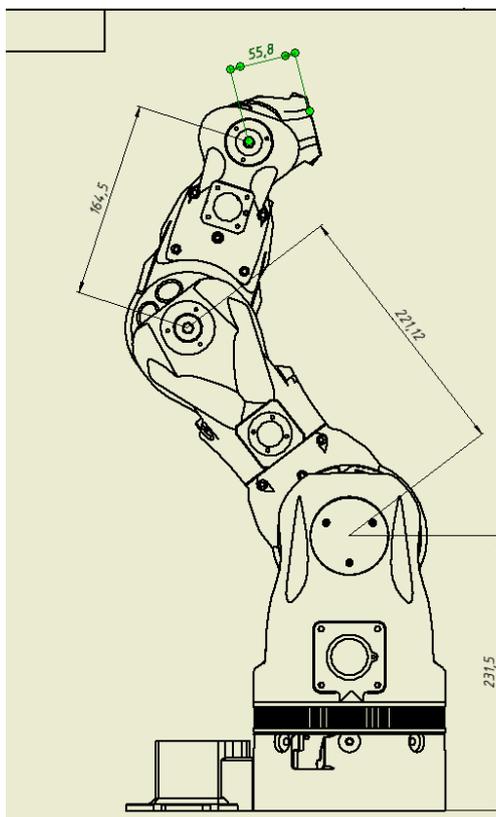


Рис. 3. Чертеж модификации с размерами между осями звеньев

В ходе проведенной работы удалось произвести достаточно глубокую модификацию исходного проекта, с решением множества недоработок, а также обширной оптимизацией в том числе под конкретную задачу автоматизирования химических лабораторных экспериментов. Результаты данной работы используются в рамках образовательной программы НОЦ Инфохимии университета ИТМО.

### Литература

1. Салбиев Д.Г. Роботы манипуляторы и области их применения // Сборник избранных статей Всероссийской (национальной) научно-практической конференции. Санкт-Петербург, 2021.
2. Исходные файлы манипулятора BCN3D Moveo. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://github.com/BCN3D/BCN3D-Moveo> (дата обращения: 15.05.2022).

УДК 543

## МОДИФИКАЦИЯ ПОВЕРХНОСТИ ГРАФИТОВОГО СЛОЯ ЭЛЕКТРОДА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОГО БИОСЕНСОРА

Домарева Н.П. (студент, Университет ИТМО), Балдина А.А. (аспирант, Университет ИТМО),  
Беляев В.Е. (студент, Университет ИТМО), Петрова М.С. (студент, Университет ИТМО),  
Евдокимов А.Е. (аспирант, Университет ИТМО)

**Научный руководитель: к.х.н., профессор Скорб Е.В.** (Университет ИТМО)

*e-mail:* [domareva@infochemistry.ru](mailto:domareva@infochemistry.ru)

*Создание сенсорных систем для point-of-care диагностики является важной задачей. Использование одноразовых печатных электродов позволяет уменьшить время анализа, миниатюризировать электрохимическую систему наряду с низкой стоимостью. Основная проблема использования коммерческих печатных электродов – это невозможность контролировать воспроизводимость поверхности. В современных реалиях в связи с ограниченными поставками из-за границы тяжело получить коммерчески доступные печатные электроды. Таким образом, целью данной работы является разработка собственных усовершенствованных электродов для дальнейшего создания действенных, селективных, мобильных биосенсоров.*

**Ключевые слова:** электрод, графитовые чернила, биосенсор, layer-by-layer, PEI, PSS, циклическая вольтамперометрия.

В последнее время необходимость проводить экспресс-диагностику заболевания является актуальной задачей, поскольку наблюдается значительный рост штаммов, инфекции, которые трудно поддаются лечению за счет устойчивости микроорганизмов к антибактериальным препаратам. В связи с чем появляется острая необходимость дифференциальной диагностики на ранних стадиях, так как это позволяет в дальнейшем проводить более эффективное лечение. Поэтому первостепенной задачей является разработка такой системы диагностики, которая будет доступной, легкой в использовании и оптимизированной. В таком случае использование электрохимических систем на основе биосенсоров является оптимальным вариантом, так как они являются высокочувствительными и имеют быстрый отклик [1].

Метод послойной (LbL) сборки предлагает простой и недорогой процесс многослойного формирования, позволяющий включать различные материалы в структуру модифицированного слоя. Таким образом, метод сборки LbL можно рассматривать как универсальный метод нанопроизводства «снизу вверх» [2].

Методику сборки LbL можно осуществить за счет электростатического взаимодействия, как показано на рисунке 1. Относительно высокие концентрации веществ в растворе приводят к избыточной адсорбции веществ, то есть нейтрализация и перенасыщение заряда приводит к обращению заряда, посредством прямого измерения поверхностной силы. Чередование поверхностного заряда приводит к непрерывной сборке положительно и отрицательно заряженных материалов, что открывает возможность выбора количества слоев и их последовательности [3].

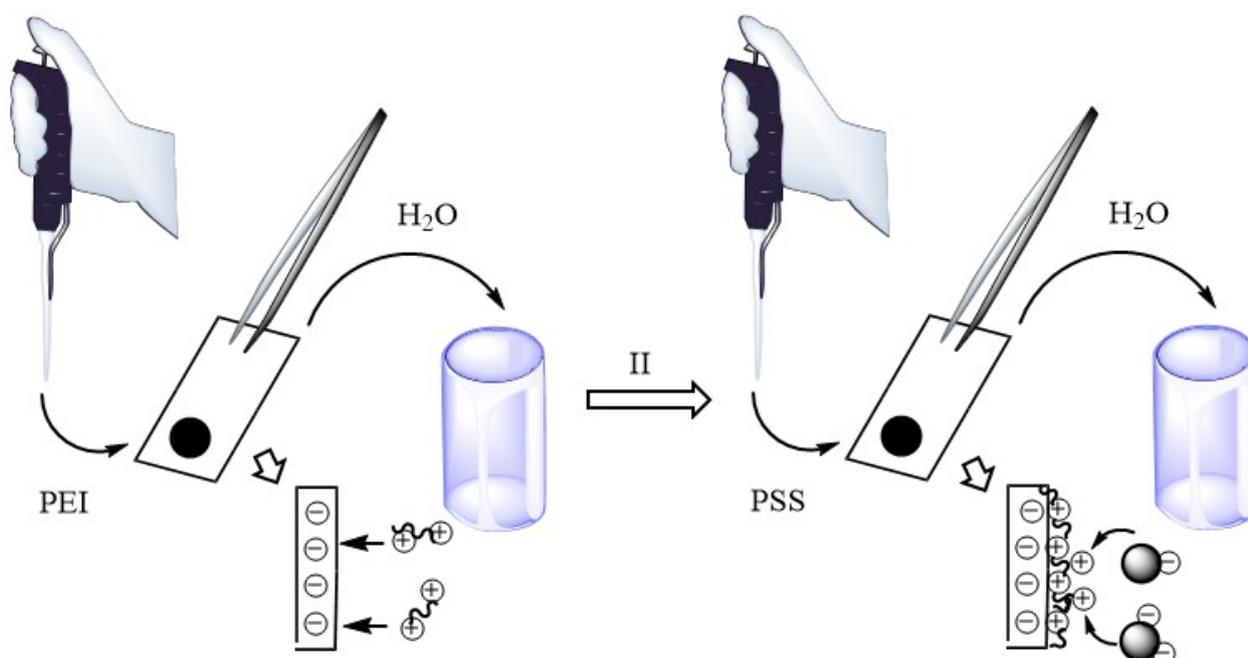


Рис. 1. Схема послойной сборки полиэлектrolитных структур на поверхности электрода [4]

В настоящей работе рассматривается получение электродов, в основу которых входят углеродсодержащие материалы, поскольку появляется возможность менять заряд слоя. Преимуществом графитовых материалов является то, что они обладают высокой удельной поверхностью, а также коммерчески доступны. Варьирование параметров графитового слоя для дальнейшего получения биосенсора, дающего быстрый электрохимический отклик, есть основная задача работы.

Работа представляет собой несколько этапов. Первый – разработка рецептуры чернил для электродов. Второй – оптимизация количества графитовых слоев с максимальной электропроводностью. Третий – создание методом послойной модификации и выявление закономерностей влияния полиэлектrolитов на осаждение полученных электродов.

Первый этап представляет собой подбор компонентов для создания оптимальной, с практической точки зрения, рецептуры углеродсодержащих чернил. В качестве растворителя выступает смесь ацетона и циклогексанона в пропорции 3:2. В пересчете на 1,1 грамма растворителя берется 0,017 граммов ацетилцеллюлозы и 0,314 грамм графита. Сначала в смесь растворителя добавляются гранулы ацетилцеллюлозы и используя ультразвуковую ванную растворяются, после добавляется графит и перемешивается до однородности. Увеличение в составе ацетилцеллюлозы приводит к падению проводимости, а использование чистого графита приводит к тому, что слой не держится на подложке и осыпается. Выявлено, что наиболее эффективным способом нанесения графитового слоя является аэрозольный метод, поскольку здесь не наблюдается скопления чернил в некоторых областях, как это наблюдалось при использовании метода *dip-coating* (окунание) и нанесении чернил кистью. На втором этапе, используя методы вольтамперометрии, изучалась зависимость электропроводности графитового электрода от количества нанесенных слоев (рис.2).

Чтобы отследить изменения сопротивления электрода на каждом этапе модификации, регистрировались кривые циклической вольтамперометрии. Полученные данные показывают изменения в квазиобратимном поведении электрода по отношению к окислительно-восстановительным активным веществам.

Из полученных данных вольтамперограммы видно, что на тенденцию значений тока и сопротивления влияет количество нанесенных графитовых слоев. С увеличением, от 1 до 5 слоев, в сенсорном блоке улучшается электропроводность. Однако, при нанесении большего количества углеродсодержащих слоев наблюдается низкая плотность тока и более высокое значение сопротивления, это связано с тем, что происходит компенсация заряда на поверхности, а также уменьшение ее шероховатости. Также слой становится рассыпчатым,

легко удаляется с подложки и наблюдается плохая адсорбция. Основываясь на результатах, показанных на рисунке 2, в настоящей работе оптимизирован основной процесс изготовления электрода с точки зрения соотношения сигнал-ток и в дальнейшем в работе исследуется электрод с пятью слоями графитового материала.

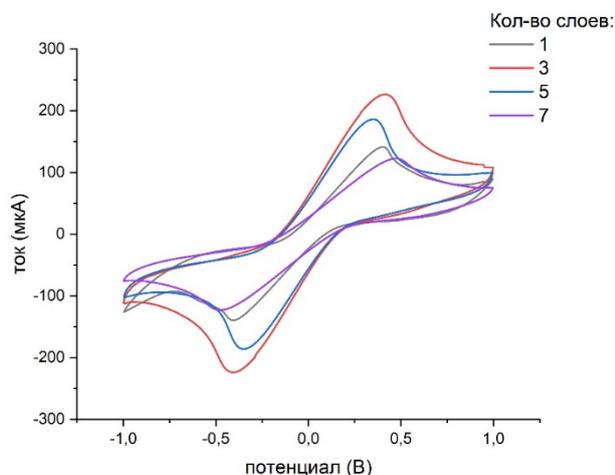


Рис. 2. Влияния количества углеродсодержащих слоев на вольтамперные характеристики

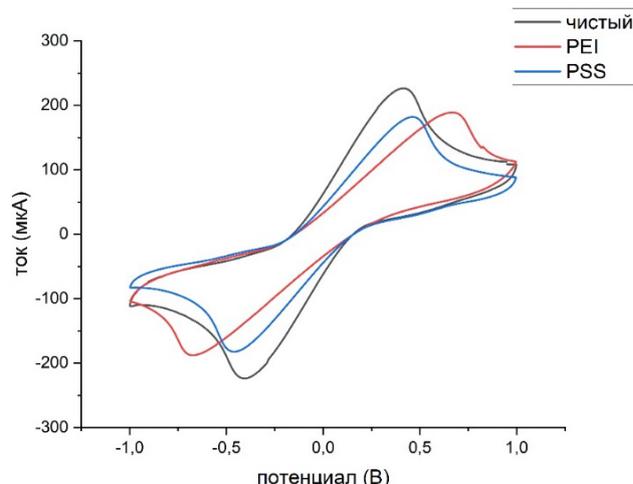


Рис. 3. Кривые циклической вольтамперометрии, записанные для чистого и модифицированного электрода PEI(б) и PSS(в) полиэлектролитами

Заключительный этап сборки представляет собой модификацию полученных на ранних этапах электродов полиэлектролитами. На твердую подложку с отрицательно заряженной поверхностью наносится раствор катионного полиэлектролита (полиэтиленимин PEI), и слой поликатиона адсорбируется за счет электростатического притяжения. Адсорбция осуществляется при относительно высоких концентрациях полиэлектролита, поэтому под действием раствора остается несколько катионных групп, и таким образом, эффективно реверсируется поверхностный заряд. Затем подложку промывают в чистой деионизированной воде и наносят раствор, содержащий анионный полиэлектролит (поли (4-стиролсульфонат натрия) PSS). Новый полимерный слой адсорбируется, после чего восстанавливается первоначальный поверхностный заряд. Процесс сборки сопровождался промывкой и сушкой после каждого нанесенного слоя. Просушивание на каждом этапе увеличивает толщину адсорбированных пленок из-за повышенной шероховатости поверхности пленок, а промывка водой между последовательными адсорбциями эффективна для успешной поочередной адсорбции [2].

Из зарегистрированных кривых видно, что для графитового электрода разница между пиками потенциалов окисления и восстановления составляет 0,8В, тогда как при модификации слоя PEI полиэлектролитом ток пика снижается, а разность потенциалов возрастает до 1,35В, а введение PSS, закрывая поверхность слоя выравнивает заряд, это видно из образования выраженных пиков окисления-восстановления, разница между ними сокращается до 0,92В.

Данная работа была направлена на разработку чернил и методики их нанесения для создания печатных электродов. Поскольку аналитический сигнал формируется за счет процессов, протекающих на поверхности электрода, очень важен выбор материала электрода и способ обработки его поверхности. Показана возможность применения углеродсодержащих чернил для вольтамперметрического определения. Наилучшие результаты показал датчик с пятью графитовыми слоями. Проведено исследование поверхности электрода с адсорбированными полиэлектролитными слоями с использованием медиаторной системы Fe (CN)<sub>6</sub><sup>3-/4-</sup> методом циклической вольтамперометрии. Получены материалы с повышенной электропроводностью, низким сопротивлением и воспроизводимой поверхностью.

## Литература

1. Maciel C.C. et al. Development of a flexible and disposable electrochemical sensor based on poly (butylene adipate-co-terephthalate) and graphite for hydroquinone sensing // *Sensors and Actuators Reports*. – 2022. – V. 4. – Pp. 100091.
2. Ariga K., Hill J.P., Ji Q. Layer-by-layer assembly as a versatile bottom-up nanofabrication technique for exploratory research and realistic application // *Physical Chemistry Chemical Physics*. – 2007. – V. 9. – №. 19. – Pp. 2319–2340.
3. Stekolshchikova A.A. et al. Thin and flexible ion sensors based on polyelectrolyte multilayers assembled onto the carbon adhesive tape // *ACS omega*. – 2019. – V. 4. – №. 13. – Pp. 15421–15427.
4. Baldina A.A. et al. Immunochemical biosensor for single virus particle detection based on molecular crowding polyelectrolyte system // *Journal of Applied Polymer Science*. – 2022. – V. 139. – №. 24. – Pp. 52360.

УДК 539.193

## ПРИМЕНЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКИНГА ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СВЯЗЫВАНИЯ ВКУСОВОГО РЕЦЕПТОРНОГО БЕЛКА $TAS_1R_3$ И СЛАДКИХ МОЛЕКУЛ

Дягиль Д.А. (студент, Университет ИТМО), Муталлибзода Ш. (аспирант, МГУТУ им К.Г. Разумовского)

Научный руководитель: к.х.н., профессор Скорб Е.В. (Университет ИТМО)

e-mail: [ddashkins@bk.ru](mailto:ddashkins@bk.ru)

*В данной работе представлен краткий обзор вычислительных методов молекулярного докинга, которые позволяют предсказать конформацию лиганда внутри активного центра белка. Стыковка позволяет оценить степень комплементарности молекулярной структуры в соответствующей активной полости молекулярной мишени, ответственной за определенные функции. Результатом докинга является количественная оценка качества заполнения активного сайта, энергии сродства к этому сайту и категоризация ключевых фрагментов молекулярной структуры, ответственных за молекулярное распознавание сайта связывания.*

**Ключевые слова:** рецептор сладкого,  $TAS_1R_3$ , молекулярный докинг, энергия связывания, AutoDock, QCM.

Исследования по компьютерному молекулярному моделированию обеспечивают априорное понимание результатов экспериментального исследования. Исследования с использованием компьютерного молекулярного моделирования позволяют экономить время и прогнозировать предпочтения связывания молекул-мишеней с лигандами.

Молекулярный докинг – метод, определяющий конформации, которые предпочитает молекула при соединении с другой молекулой для образования стабильного комплекса [1].

Также предпочтения связывания  $TAS_1R_3$  с двумя сладкими молекулами, а именно глюкозой и сукралозой, отслеживались в Quartz crystal microbalance — микровесов на кристалле кварца (QCM) в режиме реального времени измерения.

Выйдя за рамки традиционного использования QCM, мы определили вес на основе массы, удаленной с поверхности наносенсора. Визуализация молекулярных взаимодействий с помощью молекулярного докинга показала размеры и местоположения связывания сайты, типы привязок и их позиции. Кроме того, расчеты энергии связи из исследований стыковки предоставили информацию об энергетической благоприятности взаимодействий. Эти аффинные взаимодействия, полученные в результате исследований молекулярного моделирования, были подтверждены результатами QCM.

В контексте молекулярного докинга целью нашей работы является расчет энергии связи, констант связывания при взаимодействии различных групп сахаров с белком-рецептором сладкого вкуса.

## Материалы и методы

Для проведения молекулярного докинга нам необходима структура мишени (белка  $TAS_1R_3$ ) и молекулы глюкозы и сукралозы, а также программное обеспечение, позволяющие реализовать процедуру подготовки соединений, докинга, вывести результаты расчетов.

Пространственные структуры белка, молекул глюкозы и сукралозы были взяты из баз данных PubChem в формате файла SDF, затем лиганды были преобразованы в формат PDB с помощью программы Avogadro.

Для исследования взаимодействия лигандов с белком была использована программа AutoDock [2], берущая для оптимизации стохастический алгоритм в сочетании с градиентной локальной оптимизацией. AutoDock использует трехмерную пространственную решетку, которая строится с помощью программа AutoGrid.

Структура белкового рецептора была подготовлена для стыковки с использованием программного обеспечения AutoDockTools. С помощью AutoDockTools необходимо подготовить конфигурационный файл для расчета стыковки [3]. Этот конфигурационный файл содержит информацию о декартовых координатах центра области, подлежащей стыковке, и параметрах функции подсчета очков, а также информацию о лиганде и молекуле-мишени. Запустив программу с этим файлом, можно определить аффинность связывания (аффинность связывания или сила лиганда, который связывается с рецептором).

Для идентификации взяты потенциальные сайты связывания лиганда глюкозы с рецептором, размер ячейки сетки  $42 \times 54 \times 44$  (0,375 Å), размер ячейки сетки для сукралозы –  $30 \times 30 \times 32$ . Молекулярные позы были проанализированы с помощью плагина PyMOL AutoDock Vina.

Выходные результаты AutoDockVina представляли результаты стыковки как свободную энергию связывания Гиббса. Энергия комплексообразования оценивается только по энергии системы белок-лиганд в связанном состоянии, без учета энергии компонентов системы по отдельности.

Взаимодействия между атомами лиганда влияют на разницу в энергиях различных конформаций лиганда. В большинстве случаев, в отсутствие белка, лиганд принимает конформацию с минимальной внутренней энергией, принимая во внимание окружающую среду. При связывании с белком на конформацию лиганда существенно влияют межмолекулярные взаимодействия.

В комплексе с белком лиганд имеет тенденцию принимать более растянутые конформации, в которых гидрофобные области лиганда будут открыты для взаимодействия с белком.

Для детального анализа и дальнейших исследований был выбран тот, который обладает наименьшей энергией связи. Энергия связывания рецептора/лиганда оценивалась на основе их структурных свойств с использованием AutoDock.

Стандартная процедура молекулярного докинга дала два основных результата: конформационный отбор проб (стыковочная поза) молекул-гостей в пределах сайта связывания хозяина и функцию аппроксимации оценки.

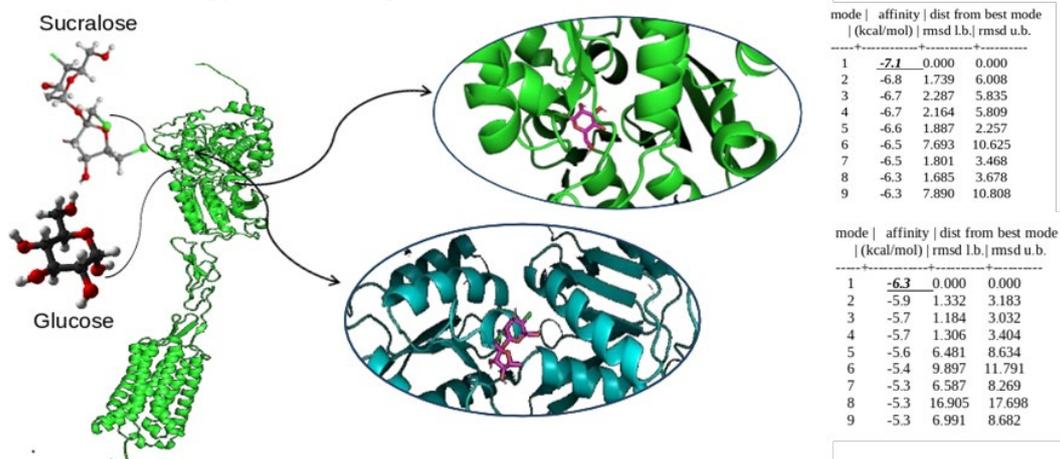


Рисунок. Молекулярный докинг сукралозы и глюкозы с  $TAS_1R_3$

Сродство к связыванию присоединенных молекул оценивается по энергии связи, присоединенной энергии, рассчитанным константам ингибирования ( $K_i$ ) и водородные связи в дополнение к гидрофобным взаимодействиям в канальном кармане.

Константа ингибирования ( $K_i$ ) представляет собой константу диссоциации комплекса фермент–ингибитор, и чем ниже  $K_i$  (чем плотнее связывание), тем эффективнее ингибирование активности фермента. Однако, независимо от  $K_i$ , скорость реакций, катализируемых ферментом, в присутствии конкурентного ингибитора может быть увеличена путем увеличения концентрации субстрата.

Прогнозируемые энергии связывания и стыковки представляют собой сумму межмолекулярной энергии и потери свободной энергии при кручении, а также внутренней энергии стыковочного лиганда соответственно, и константа ингибирования ( $K_i$ ) рассчитывается в AutoDock следующим образом:

$$K_i = \exp\left(\frac{\Delta G \cdot 1000}{R_{cal} \cdot T}\right),$$

где  $\Delta G$  (ккал/моль) – энергия связывания,  $R_{cal} = 1.98719$  (ккал/(моль•К)) и  $T(K) = 298$ .

Каждое соединение (табл.1) с более высокой энергией связи имеет более высокую константу ингибирования.

Таблица 1

**Результаты стыковки с помощью программного обеспечения AutoDock**

	Энергия связывания (ккал/моль)	RMSD	$K_i$ (μM)
Глюкоза	-6.3	1.3	23.96
Сукралоза	-7.1	1.7	6.25

Основным критерием успешности нативного докинга является среднеквадратичное отклонение (RMSD) между координатами одних и тех же атомов в закристаллизованной конформации и конформации, полученной в результате докинга меньше 2 Å. Такое значение RMSD показывает, что положение нативного лиганда в активном центре белка воспроизведено с достаточной точностью и связанное состояние лиганд-активного сайта оказывает значительное влияние на структурную стабильность белка. Также при валидации модели определяется диапазон значений энергии связывания (скорингфункции) для молекул с экспериментально измеренной активностью. Данный диапазон будет считаться пороговым для отбора лучших молекул при дальнейшем виртуальном скрининге библиотек химических соединений.

Как видно из таблицы 1, на основании рассчитанного  $K_i$  можно сделать вывод, что сукралоза лучше связывается с белком, чем глюкоза. Точность позиционирования лиганда влияет на правильность расчета энергии связи, поэтому при стыковке важно, чтобы найденный программой минимум энергии системы белок–лиганд соответствовал положению лиганда в кристалле.

Таким образом, молекулярный докинг глюкозы и сукралозы к  $TAS_1R_3$  был осуществлен с использованием программы AutoDock. Можно сделать вывод, что программа позволяет проводить молекулярный докинг с целью определения энергетически выгодных комплексов белок – лиганд, проводить поиск глобального минимума энергии взаимодействия между лигандом и белком, если положение лиганд связывающего центра не определено экспериментально.

Параллельно с молекулярным докингом был проведен экспериментальный анализ методом QCM, результаты которого (табл.2) подтверждают лучшее взаимодействие сукралозы с макромолекулой, чем с глюкозой. Система датчиков QCM представляет собой поверхностно-чувствительную технологию, используемую для мониторинга изменений массы (нанোগраммов) в молекулярном масштабе. Масса, которая является основным свойством анализируемого вещества, измеряется акустическим оборудованием в QCM [4].

Изменения частоты в режиме реального времени, вызванные молекулярными взаимодействиями или реакциями, происходящими на поверхности кристалла кварца, можно отслеживать с помощью QCM-сенсорных систем.

Таблица 2

**Средние значения сдвига частоты по результатам измерений методом QCM**

Измерение QCM	Состав	Частота (МГц)	Изменение частоты (МГц) $\times 10^{-4}$
<b>PEI/H<sub>2</sub>O/TAS1R3/H<sub>2</sub>O/ PSS/H<sub>2</sub>O/DGlucose/H<sub>2</sub>O</b>	PEI/H <sub>2</sub> O/TAS1R3/H <sub>2</sub> O/PSS/H <sub>2</sub> O/D- Glucose	4,951054	0,19
	PEI/H <sub>2</sub> O/TAS1R3/H <sub>2</sub> O/PSS/H <sub>2</sub> O/D- Glucose/H <sub>2</sub> O	4,951046	0,08
<b>PEI/H<sub>2</sub>O/TAS1R3/H<sub>2</sub>O/ PSS/H<sub>2</sub>O/Sucralose/H<sub>2</sub>O</b>	PEI/H <sub>2</sub> O/TAS1R3/H <sub>2</sub> O/PSS/H <sub>2</sub> O/Su cralose	4,951431	0,26
	PEI/H <sub>2</sub> O/TAS1R3/H <sub>2</sub> O/PSS/H <sub>2</sub> O/Su cralose/H <sub>2</sub> O	4,951385	0,46

Полиэлектролиты (полиэтиленимин (PEI) и сильно отрицательно заряженного поли(4-стиролсульфонат) (PSS)) были применены для повышения чувствительности *TAS1R3*. Полиэлектролитные комплексы увеличивают адсорбцию белка на подложке, тем самым увеличивая специфический сигнал обнаружения.

Исходя из данных таблицы 2, добавление глюкозы приводит к значительному изменению частоты, однако она легко смывается с поверхности водой, захватывая часть полимерных матриц. Система с сукралозой показала образование защитного слоя на поверхности модифицированного белком-рецептором электрода, который не удаляется промывкой.

Метод молекулярного докинга продемонстрировал свои возможности для образования стабильного комплекса. Расчеты энергии связи, константы связывания лиганда с рецептором показали, что сукралоза лучше адсорбируется на белке в сравнении с глюкозой. Результаты метода QCM показали лучшее изменение сдвига резонансной частоты кварцевого кристалла, генерируемого молекулой сукралозы на его поверхности в сравнении с глюкозой. Исследования, проведенные методом QCM, подтвердили достоверность результатов стыковки сладкой молекулы с белком рецептором *TAS1R3* методом молекулярного докинга.

## Литература

1. Lengauer T., Rarey M. Computational Methods for Biomolecular Docking. Curr. Opin. Struct. Biol. – 1996. – №. 6. – Pp. 402–406.
2. Morris G.M., Huey R., Lindstrom W., Sanner M.F., Belew R.K., Goodsell D.S., Olson A.J. AutoDock4 and AutoDockTools4: Automated docking with selective receptor flexibility // J. Comput. Chem. – 2009. – V. 30. – Pp. 2785–2791.
3. Gülgün Aylaz, Müge Andaç Affinity Recognition Based Gravimetric Nanosensor for Equilin Detection. Chemosensors. – 2022. – №. 10. – 172 p.
4. Wasilewski T., Kamysz W., Gębicki J. Bioelectronic Tongue: Current Status and Perspectives. Biosensors and Bioelectronics. – 2020. – V. 150. <https://doi.org/10.1016/j.bios.2019.111923>.

УДК 54.066

## СОЗДАНИЕ ТРЁХЭЛЕКТРОДНОЙ ТЕСТ-ПОЛОСКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЧЕРНИЛ НА ОСНОВЕ ГРАФИТОВЫХ НАНОЧАСТИЦ И АЦЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ

Евдокимов А.А. (аспирант, Университет ИТМО), Алиев Т.А. (аспирант, Университет ИТМО),  
Беляев В.Е. (студент, Университет ИТМО), Домарева Н.П. (студент, Университет ИТМО)

Научный руководитель: к.х.н., профессор Скорб Е.В. (Университет ИТМО)

e-mail: [aaevdokimov@itmo.ru](mailto:aaevdokimov@itmo.ru)

*В работе рассмотрена возможность использования графитосодержащих чернил на основе графитовых нанотрубок с применением ацетилцеллюлозы в качестве связующего для создания трёхэлектродных электрохимических сенсоров методом трафаретной печати. Полученные опытные образцы, измеренные методами циклической вольтамперометрии, показали свой потенциал для разработки собственного электрода, выполненного методами трафаретной печати.*

**Ключевые слова:** электрохимический сенсор, графитовые наночастицы, ацетилцеллюлоза, трёхэлектродная ячейка, циклическая вольтамперометрия, электрод сравнения.

Электрохимические сенсоры на основе углеродсодержащих материалов являются наиболее распространёнными сенсорами для анализа различных биологически активных веществ и ионов металлов. Преимущество таких сенсоров состоит в том, что для определения данных веществ требуется минимально возможное перенапряжение при возможности модификации поверхности рабочего электрода полиэлектролитами и специфичными белками (антитела, ферменты). Большое значение для электрохимических анализов получили углеродсодержащие электроды, получаемые трафаретной печатью (screen-printed carbon electrodes) [1].

В качестве углеродсодержащего материала для изготовления рабочего электрода используются различные разновидности углерода. Одна из них – углеродные наночастицы – обладает высокой электрической проводимостью, способствующей электронному переносу, и большим значением удельной поверхности, что способствует иммобилизации молекул при модификации готовой тест-полоски для решения задач, связанных с определением конкретных аналитов [2].

В нашей работе рассматривается возможность использования в качестве углеродсодержащих чернил состав из углеродных наночастиц и ацетилцеллюлозы. Последнее вещество является длинноцепочечным и разветвлённым полимером, способным связывать углеродные частицы в единую матрицу. В качестве растворителя для ацетилцеллюлозы используется смесь легколетучих ацетона и циклогексанона в соотношении 3:2. Графитовые чернила осаждались на поверхность ПВХ подложки с помощью бумажного трафарета и сушились при  $t = 60^{\circ}\text{C}$ .



Рис. 1. Общий вид графитовой тест полоски и медной пластинки как электрода сравнения

Оценка возможной применимости чернил для изготовления сенсоров осуществлялась с помощью методов циклической вольтамперометрии (ЦВА). В качестве рабочего раствора использовался 5 мМ водный раствор  $K_4[Fe(CN)_6]$  с добавкой KCl в концентрации 0,1 моль/л. Гексацианоферраты используются в качестве медиатора электронного переноса за счёт миграции электронов при редокс процессах, связанных с ионами железа [3]. Хлорид калия является фоновым электролитом, снижающего общее сопротивление пробы и увеличивающего степень переносов электронов в растворе за счёт диффузии [4,5]. Использование химически чистых реагентов и деионизированной воды даёт полную оценку об электрической проводимости графитосодержащих электродов сенсора.

Были изготовлены и измерены три опытных образца сенсоров. Для сравнения был также задействован коммерческий трёхэлектродный печатный сенсор IS-C (ItalSens, PalmSens). Как видно из рисунка 2, вольтамперометрические кривые для каждого из сенсора отличаются по значениям тока и потенциалов редокс пиков гексацианоферрат-ионов. Это может объясняться неравномерной толщиной слоя графитовых чернил и разными электродами сравнения (в сенсоре IS-C используется серебрясодержащий электрод).

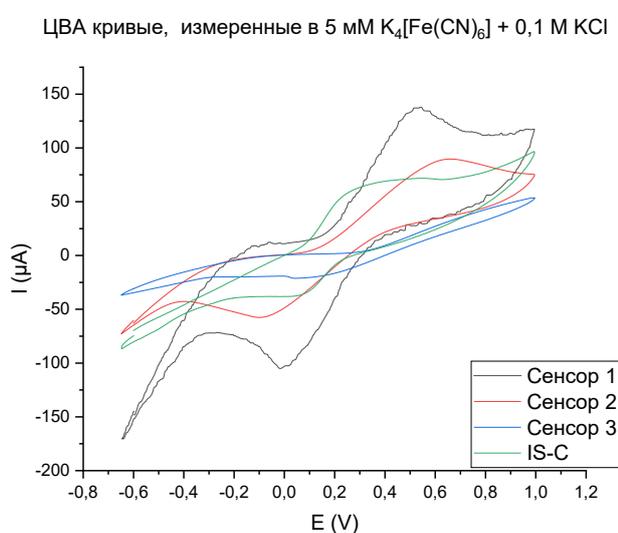


Рис. 2. Сравнение циклических вольтамперограмм, полученных при измерении изготовленных в лаборатории тест-полосок и электрода IS-C

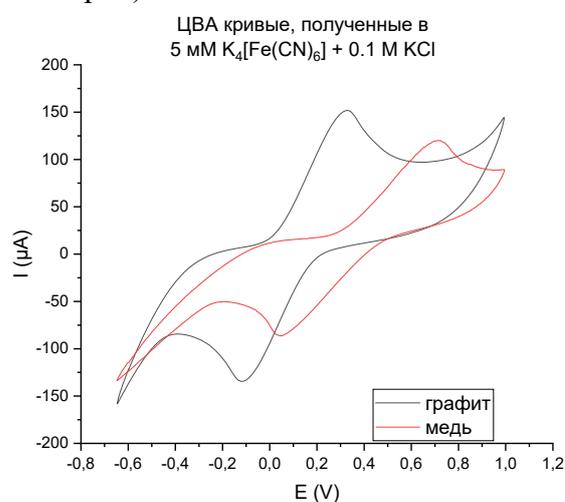


Рис. 3. Сравнение циклических вольтамперограмм электрода, отличающихся электродом сравнения

В ходе исследования была изучена зависимость вольтамперометрических кривых, снятых с помощью готового образца сенсора, от применяемого электрода сравнения. В качестве последнего использовались графитовый электрод, изготовленный из тех же чернил, что и рабочий и вспомогательный электроды сенсора, а также медная пластинка. Полученные результаты, показанные на рисунке 3, показывают, что использование графитовой полоски в качестве электрода сравнения демонстрирует более острые окислительно-восстановительные пики гексацианоферрат-ионов с меньшим значением разницы потенциалов между ними в сравнении с ЦВА кривой, характерной для медной пластинки. Это объясняется различной степенью окисляемости каждого из электродов.

Резюмируя полученные результаты, данная работа демонстрирует потенциальную возможность создания электрохимических сенсоров с использованием чернил на основе углеродных наночастиц и ацетилцеллюлозы. Дальнейшая проработка данного проекта приведёт к созданию собственной трёхэлектродной тест-полоски с высокой степенью воспроизводимости результатов электрохимических измерений и возможностью её модификации для решения более узких задач (определение ионов металлов, патогенов).

## Литература

1. Kadara R.O., Jenkinson N., Banks C.E. Characterisation of commercially available electrochemical sensing platforms // *Sensors and Actuators B: Chemical*. – 2009. – V. 138. – №. 2. – Pp. 556-562.

2. Huang X., Xu S., Zhao W., Xu M., Wei W., Luo J., Li X., Liu X. Screen-Printed Carbon Electrodes Modified with Polymeric Nanoparticle-Carbon Nanotube Composites for Enzymatic Biosensing // ACS Appl. Nano Mater. – 2020. – V. 3. – №. 9. – Pp. 9158–9166.
3. Qin Z., Li Y., Gu N. Progress in Applications of Prussian Blue Nanoparticles in Biomedicine // Advanced Healthcare Materials. – 2018. – №. 1800347. – Pp. 1–13.
4. Radhi M.M., Tan W.T., Ab Rahman M.Z.B., Kassim A.B. Electrochemical Redox of Hg<sup>2+</sup> Mediated by Activated Carbon Modified Glassy Carbon Electrode // International Journal of Electrochemical Science. – 2010. – №. 5. – Pp. 615–629.
5. Stekolshchikova A.A., Radaev A.V., Orlova O.Yu., Nikolaev K.G., Skorb E.V. Thin and Flexible Ion Sensors Based on Polyelectrolyte Multilayers Assembled onto the Carbon Adhesive Tape // ACS Omega. – 2019. – V. 4. – №. 13. – Pp. 15421–15427.

УДК 544.6

## **БИОСЕНСОРЫ ДЛЯ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ ИОННЫХ ТОКОВ В БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ**

**Зырянова П.И.** (студент, Университет ИТМО), **Носкова У.В.** (студент, Университет ИТМО),

**Королев И.С.** (студент, Университет ИТМО), **Пивень А.О.** (студент, Университет ИТМО)

**Научный руководитель: к.х.н., доцент Уласевич С.А.** (Университет ИТМО)

*e-mail:* [zyranova@infichemistry.ru](mailto:zyranova@infichemistry.ru)

*В настоящей работе описана биосовместимая гибкая микроэлектродная система на основе углеволокна для детектирования ионов кальция натрия и калия во внеклеточном пространстве. Данная система позволит определять токовые всплески ионов, генерирующиеся за счет активации кальциевых каналов.*

**Ключевые слова:** *полиэлектролиты, углеволокно, ионоселективные электроды, ионные каналы.*

Связь с помощью электрических сигналов распространена среди биологических систем, и одним из наиболее известных примеров является потенциал действия в нейронах, опосредованный ионными каналами [1, 2]. Известно, что биоэлектрическая передача сигналов происходит из-за изменений потенциала покоя плазматической мембраны, контролируемых ионных каналов, насосов и щелевых контактов [3]. Медленные изменения потенциала покоя плазматической мембраны во всех клетках служат высоко консервативным информационным путем, который регулирует пролиферацию, миграцию и дифференцировку клеток [1]. Это изменение потенциала часто вызывается работой ионных каналов и способствует межклеточной коммуникации, регуляция которой обеспечивается различными сигнальными молекулами, которые высвобождаются и диффундируют во внеклеточное пространство.

В последние десятилетия активно изучается межклеточная коммуникация через ионные каналы, что обеспечило фундаментальное понимание структурных основ передачи сигналов нейронами. В частности, установлено, что кальциевые каналы выполняют уникальные функции: участвуют в электрогенезе, поддерживают определенную внутриклеточную концентрацию ионов кальция, инициируют секрецию медиаторов и гормонов, формируют кратковременные и долговременные формы синаптической пластичности в центральной нервной системе и др. Несмотря на широкий спектр исследований рецепторных систем, паракринной регуляции в клетках и их физиологии в целом, природа передачи сигнала по ионным каналам, особенно кальциевым каналам, остается неясной. В связи с этим мы исследовали механизм передачи сигнала по кальциевым каналам. С этой целью мы выяснили влияние активации кальциевых каналов на изменение количества ионов калия, натрия и кальция в клеточной системе.

На сегодняшний день, для изучения кальциевых каналов используются различные электрофизиологические, биохимические, фармакологические, генетические и другие методы. В представленной работе применяются электрофизиологические методы, потенциометрические, которые заключаются в регистрации изменения напряжений и токов в клеточной системе [3, 4]. Измерение внеклеточного сигнала проводилось с помощью биосовместимых ионоселективных электродов (ИСЭ), которые обладают рядом преимуществ:

высокая эффективность, точность и избирательность. Для локализации клеток применяли гидроксиапатитные паттерны. Клетки при культивации повторяют узор паттерна, что делает предлагаемую систему привлекательной для биологических исследований.

Проводящий материал, который послужил основой для создания ионоселективных электродов – углеродное волокно, модификация которого была произведена с использованием полиэлектролитов: слабо положительно заряженного (полиэтиленимин (PEI) и сильно отрицательно заряженного поли(4-стиролсульфонат) (PSS)) методом послойного осаждения. Схема сборки электродов представлена на рисунке. Последним этапом сборки, после полиэлектролитов, является нанесения ионоселективной мембраны, которая способствует улавливанию необходимого катиона с помощью компонента – ионофора, который в ходе измерений обратимо связывается с определенным ионом. Данная методика создания электрода, селективного к иону калия, натрия и кальция обеспечивает высокую стабильность при измерении и его хранении [5–7]. Далее ИСЭ погружали в растворы соответствующих солей (KCl, NaCl, CaCl<sub>2</sub>). После кондиционирования проводилась калибровка полученных сенсоров на стандартных растворах соответствующих солей (концентрации растворов: 10<sup>-6</sup>, 10<sup>-5</sup>, 10<sup>-4</sup>, 10<sup>-3</sup>, 10<sup>-2</sup> моль/л).

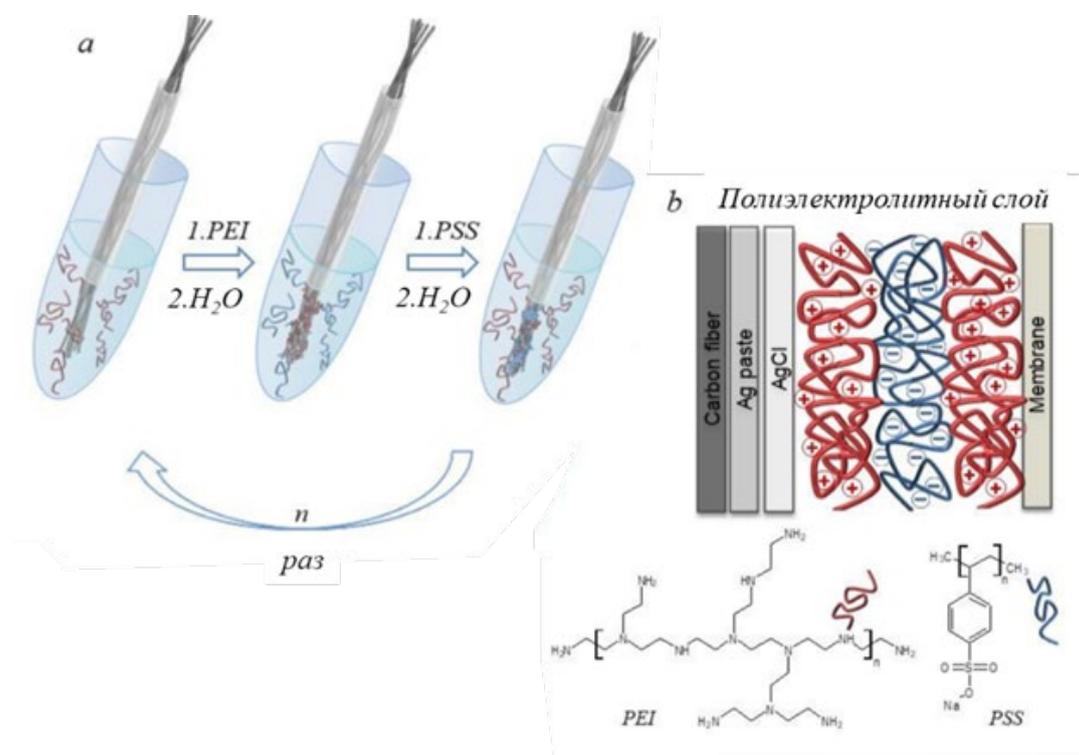


Рисунок. Модификация углеродного волокна послойной сборкой полиэлектролита (а), общая схема ионоселективного электрода (б)

При выборе клеточной линии для контрольных исследований учитывалась их чувствительность к ионам кальция. Таким образом, для изучения кальциевых каналов были выбраны мышечные остеобласты C<sub>2</sub>C<sub>12</sub>. Так, после предварительной калибровки электроды погружали в среду с клетками для обнаружения ионов кальция. Активация кальциевых каналов проходила добавлением рецептора, норадреналина в различных концентрациях для точного установления его влияния на систему. В ходе работы проводилось фиксирование скачков тока, которые связаны с клеточной коммуникацией и доказывают ее активность во время активации каналов. В результате проведенных экспериментов по определению концентрации ионов в стандартных растворах установлено, что измерения ИСЭ точны и близки к значениям Нернста. Полученные значения представлены в таблице.

Калибровочные значения ИСЭ

Ион, к которому селективен электрод	Наклон ИСЭ, мВ	Наклон по Нернсту, мВ
$K^+$	56.0	58.0 – 59.0
$Na^+$	60.2	58.0 – 59.0
$Ca^{2+}$	30.0	29.0 – 29.6

Далее проведены базовые эксперименты по определению потенциала на паттернах с клеточной культурой и без неё. Установлена разница потенциалов в разных частях паттерна с клетками и без них. Также провели измерения высвобождения кальция при добавлении активирующих компонентов: хлорида кальция и норадреналина. Выявили, что хлорид кальция приводит к более значимым, скачкообразным изменениям значениям потенциала, однако, через некоторое время наблюдалась стабилизация значения. Наблюдение показывает, что при добавлении ионов кальция происходит их перераспределение в системе, что наиболее вероятно объяснить клеточной коммуникацией. Для подтверждения гипотезы были проведены эксперименты с добавлением различных концентраций другого активатора кальциевых каналов – норадреналина, который способствовал аналогичной ситуации – скачкообразному изменению концентрации. Однако отмечено более быстрое восстановление. Эти факты служат свидетельством того, что кальциевый канал активирован, следовательно обеспечивается клеточная коммуникация в системе.

В результате проведенных исследований выявлено, что ионоселективные на углеродном волокне стабильны в измерениях. Показано, что кальций-селективные электроды подходят для изучения кальциевых каналов. Установлено, что активация клеток, в частности кальциевого канала, происходит как при добавлении  $CaCl_2$ , так и при добавлении норадреналина, причем при добавлении последнего происходит резкое изменение потенциалов в системе. Таким образом, разработанная система может быть перспективна для мониторинга клеточного взаимодействия.

### Литература

1. Shad K.F., Salman S., Afridi S., Tariq M., Asghar S. Introductory Chapter: Ion Channels. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.intechopen.com/chapters/63380> (дата обращения: 27.02.2022).
2. Subramanyam P., Colecraft H.M. Ion channel engineering: perspectives and strategies // *Journal of molecular biology*. – 2015 – Т. 42. – №. 1 – С. 190–204.
3. Tarasov M.V. et al. Calcium-gated  $K^+$  channels of the  $KCa1.1$ - and  $KCa3.1$ -type couple intracellular  $Ca^{2+}$  signals to membrane hyperpolarization in mesenchymal stromal cells from the human adipose tissue // *Pflügers Archiv-European Journal of Physiology*. – 2017. – Т. 469. – №. 2. – С. 349–362.
4. Kotova P.D. et al. Calcium signaling mediated by aminergic GPCRs is impaired by the PI3K inhibitor LY294002 and its analog LY303511 in a PI3K-independent manner // *European Journal of Pharmacology*. – 2020. – Т. 880. – С. 173182.
5. Nikitina A.A. et al. Nanostructured layer-by-layer polyelectrolyte containers to switch biofilm fluorescence // *Bioconjugate Chemistry*. – 2018. – Т. 29. – №. 11. – С. 3793–3799.
6. Stekolshchikova A.A. et al. Thin and flexible ion sensors based on polyelectrolyte multilayers assembled onto the carbon adhesive tape // *ACS omega*. – 2019. – Т. 4. – №. 13. – С. 15421–15427.
7. Skorb E.V., Volkova A.V., Andreeva D.V. Layer-by-layer approach for design of chemical sensors and biosensors // *Current Organic Chemistry*. – 2015. – Т. 19. – №. 12. – С. 1097–1116.

УДК 544.57

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ КАЧЕСТВЕННОГО И КОЛИЧЕСТВЕННОГО СОСТАВА ЭЛЕКТРОЛИТА ПО ОСОБЕННОСТЯМ ОСЦИЛЛЯЦИЙ КАВИТАЦИОННОГО ПУЗЫРЯ С ПРИМЕНЕНИЕМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Королев И.С. (студент, Университет ИТМО), Зырянова П.И. (студент, Университет ИТМО)

Научный руководитель: к.х.н., доцент Уласевич С.А. (Университет ИТМО)

e-mail: [korolev@infochemisrey.ru](mailto:korolev@infochemisrey.ru)

*Воздействие ультразвуковым излучением на жидкости, такие как водно-спиртовые растворы, приводит к формированию маленьких пузырей, состоящих из газов, растворенных в жидкости, и паров самого растворителя. Размер пузырей колеблется в процессе акустического возбуждения, что приводит к их сжатию под воздействием внешних сил и расширению, когда молекулы внутри пузыря оказывают воздействие на его внутренние стенки.*

**Ключевые слова:** ультразвук, кавитация, искусственный интеллект.

Известно, что наличие вязкоупругой среды сильно влияет на динамику кавитационного пузыря, на его свойства линейного резонанса и нелинейное поведение [1, 2]. Кроме того, молекулы поверхностно-активных веществ или твердые частицы, адсорбированные на поверхности пузырька, также могут изменять их динамику из-за изменения вязкости среды [3, 4].

Целью данной работы являлась разработка метода качественного и количественного детектирования состава электролита по особенностям осцилляций кавитационного пузыря с применением искусственного интеллекта. В ходе эксперимента были поставлены следующие задачи:

1. Изучение особенностей осцилляций в электролитах и водных растворах на их основе.
2. Разработка алгоритма машинного обучения для определения качественного и количественного состава электролита по особенностям осцилляций кавитационного пузыря.

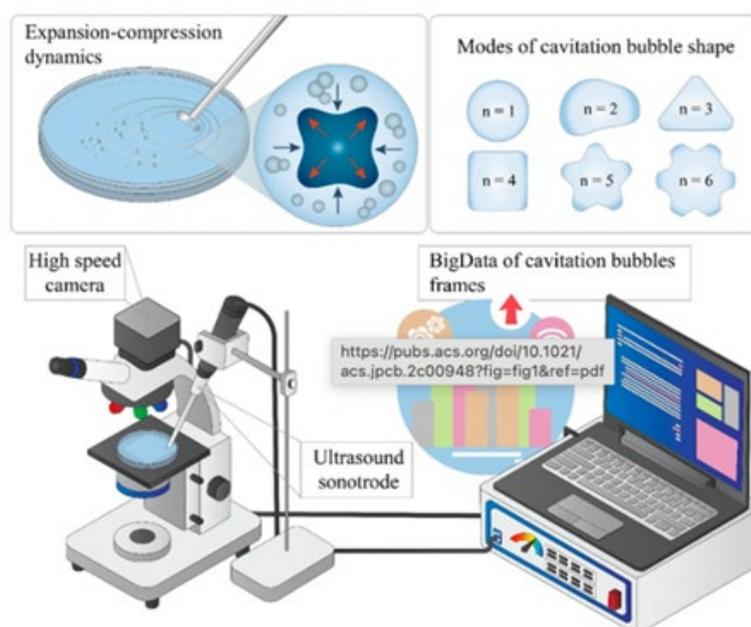


Рис. 1. Схема экспериментальной установки. Динамика расширения–сжатия пузырьков фиксируется высокоскоростной камерой. Кадры анализируются с помощью искусственной нейронной сети

Исследование пузырьковой кавитации проводили в чашке Петри диаметром 10 см. Видео роста пузырьков записывали с помощью скоростной камеры Phantom Miro C110, как показано на рисунках 1 и 2. Чашку Петри помещали на оптический микроскоп Микмед-6

(ЛОМО, Россия) с объективом 10× и генерировали ультразвуковые пузырьки. ультразвуковым генератором УЗГ 55-22 с резонансной частотой  $22 \pm 3$  кГц. Сонотрод располагался под углом  $45^\circ$  к камере. Поведение кавитационных пузырьков и колебания их площади в растворах с разной концентрацией этанола различались (рис.3). В частности, максимальные значения площади кавитационного пузырька наблюдаются в 96%, 75% и 25% растворах этанола. Моды кавитационного пузыря увеличиваются с увеличением продолжительности кавитации.

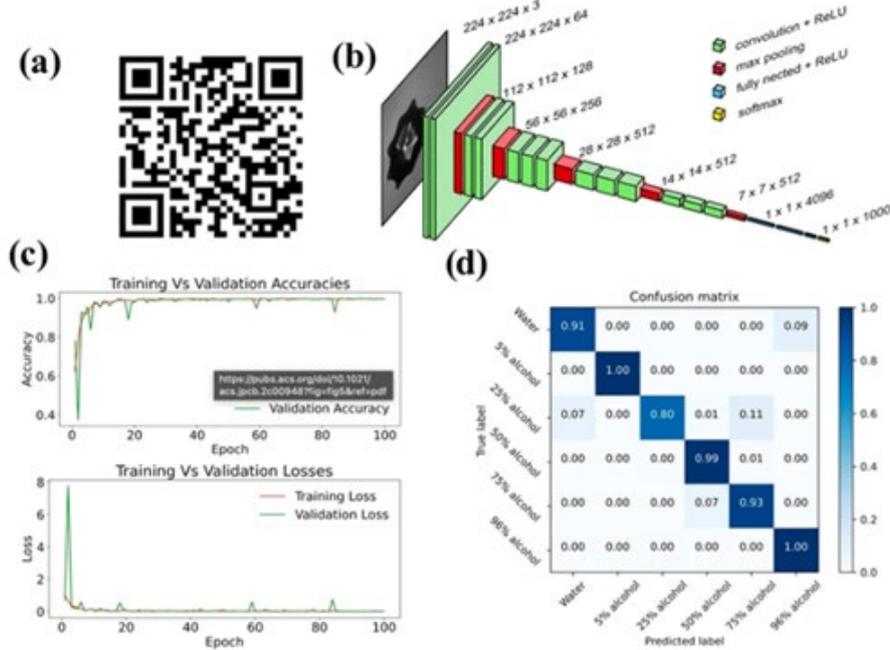


Рис. 2. Оценка эффективности сверточной нейронной сети: а) отношение точности к количеству эпох для набора данных обучения и валидации; б) отношение функции потерь к числу эпох для набора обучающих и валидационных данных; в) состав набора данных, разделенный на обучение, валидацию и тестирование; г) нормализованная матрица ошибки для набора тестовых данных

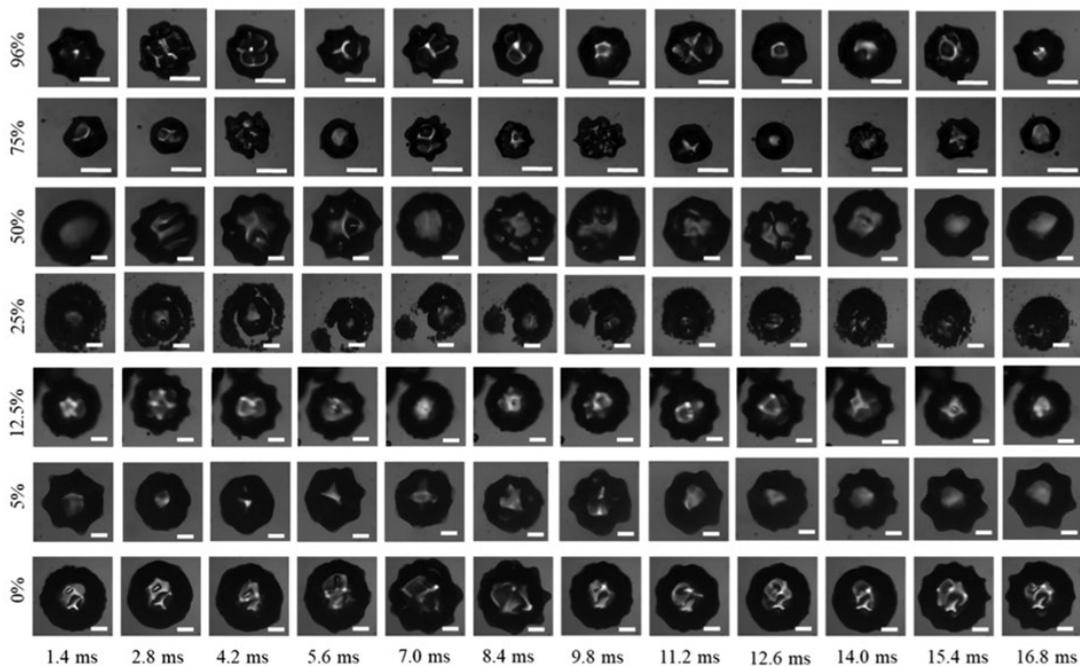


Рис. 3. Колебания формы кавитационных пузырьков в дистиллированной воде и водно-спиртовых растворах, содержащих 5 ÷ 96% мас. EtOH. Период ультразвукового возбуждения составляет  $T = 1/f$ ; период колебания формы соответствует 1,4 мс. Шкала измерения составляет 500 мкм

Так как критерии резонанса и стабильности обеспечивают условия для дестабилизации пузырька, они не дают представления о его динамике или кинетике вблизи нестабильных состояний. Такую кинетику следует рассматривать как близкую к критической или хаотическую, с небольшими случайными флуктуациями, определяющими эволюцию пузырей. Для их описания можно использовать статистические методы [5, 6]. Например, кластеризация визуальных изображений с использованием алгоритмов искусственного интеллекта. Хотя невозможно получить точное описание того, как концентрация раствора влияет на динамику пузырьков, все же возможно разделить изображения с разной концентрацией, применив алгоритм искусственной нейронной сети.

Таким образом, методы искусственного интеллекта могут дополнять качественный и количественный анализ в системах далеких от равновесия, что может быть использовано для автоматического анализа пузырьков в режиме реального времени.

Данная работа была поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации, госзадание № FSER-2021–0013 (Правительством Российской Федерации в рамках Программы стипендий и профессорства Университета ИТМО).

### Литература

1. Coussios C.C., Roy R.A. Applications of acoustics and cavitation to noninvasive therapy and drug delivery // Annual Review of Fluid Mechanics. – 2008. – Т. 40.
2. Dollet B., Marmottant P., Garbin V. Bubble dynamics in soft and biological matter // Annual Review of Fluid Mechanics. – 2019. – Т. 51. – С. 331-355.
3. Choi J.J. et al. Noninvasive and localized neuronal delivery using short ultrasonic pulses and microbubbles // Proceedings of the National Academy of Sciences. – 2011. – Т. 108. – №. 40. – С. 16539-16544.
4. Poulichet V., Huerre A., Garbin V. Shape oscillations of particle-coated bubbles and directional particle expulsion // Soft matter. – 2017. – Т. 13. – №. 1. – С. 125-133.
5. Honarvar F., Varvani-Farahani A. A review of ultrasonic testing applications in additive manufacturing: Defect evaluation, material characterization, and process control // Ultrasonics. – 2020. – Т. 108. – С. 106227.
6. Aboutorab M. et al. Nano emulsion of saffron essential oil by spontaneous emulsification and ultrasonic homogenization extend the shelf life of shrimp (*Crocus sativus* L.) // Journal of Food Processing and Preservation. – 2021. – Т. 45. – №. 2. – С. e15224.

УДК 547

## САМООРГАНИЗАЦИОННЫЕ СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ ДНК В ГИДРОГЕЛЕВОЙ МАТРИЦЕ

**Кутырев М.А.** (студент, Университет ИТМО), **Ненашкина А.В.** (аспирант, Университет ИТМО), **Силин Д.В.** (студент, Университет ИТМО)

**Научный руководитель: к.х.н., профессор Скорб Е.В.** (Университет ИТМО)

*e-mail:* [kutyrev@infochemistry.ru](mailto:kutyrev@infochemistry.ru)

*В данной работе сообщается о новом подходе в формировании двумерного паттерна на основе реакции гибридизации между двумя комплементарными последовательностями ДНК в тонком слое акрил амидного геля, используемый в качестве платформы для нанесения образцов. Также было исследовано влияние ионов магния в системе, который при варьировании его концентрации даёт более интенсивный отклик флуоресценции.*

**Ключевые слова:** ДНК-нанотехнологии, реакционно-диффузионная модель, паттерн, биосенсорика, синтетическая биология.

Дезоксирибонуклеиновая кислота является не только центральной макромолекулой в живых организмах, которая обеспечивает передачу и хранение генетической информации, но и также может служить в качестве строительного блока для многих материалов [1]. Благодаря программируемому росту и самоорганизации молекул ДНК стало возможным разрабатывать уникальные платформы, которые характерны для биологических систем с образованием паттернов [2]. В подходе к биомиметическим структурам клетки ключевая роль отводится синтетической биологии. Это расширяет возможности исследований, что приводит к расширению функциональности таких материалов [3].

Однако всё ещё остаётся сложной задачей в воспроизводимости таких структур, вызванная подбором нужных параметров [4]. Недавние исследования привели к тому, что синтетические ДНК, иммобилизованные на гелевом полимере, образуют настраиваемые паттерны с переключаемыми сигналами.

В качестве модельной системы в работе используются искусственные образцы ДНК, которые имитируют произвольную динамику реакции взаимодействия между двумя молекулами ДНК (рис. 1,а). Эти реакции основаны на специфичном связывании, при котором цепочка ДНК удлиняется, а также организуется в двумерный паттерн в виде решётчатой структуры (рис. 1,б) в тонком слое акриламидного геля. Такое поведение вызвано тем, что при самосборке ДНК-наноструктур образуются стабильные водородные связи. Поскольку исследование паттернов не может быть обнаружено в видимом свете, был применен флуоресцентный краситель, способный качественно определить контроль сборки (рис. 1,в).

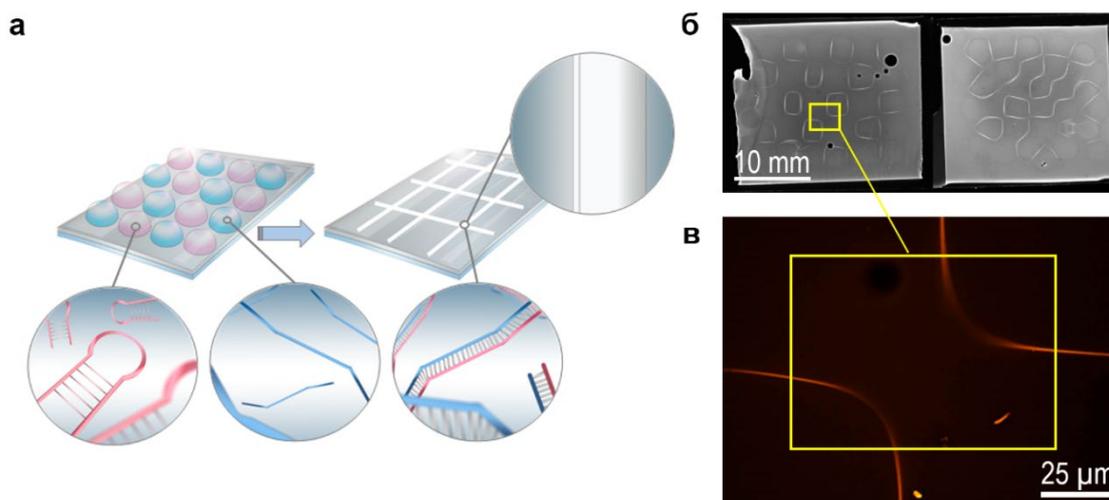


Рис. 1. а) общая схема получения паттерна; б) изображение с геле-документирующей системы; в) изображение, полученное с оптического микроскопа (RHOD канал)

Кроме того, было предположение изменить параметры, добавив к системе ещё один компонент — хлорид магния, который оказывает влияние на структуру ДНК, действуя по принципу защитного механизма и увеличивая жесткость сцепления двух последовательностей ДНК, что приводит к увеличению выхода флуоресценции (рис.2).

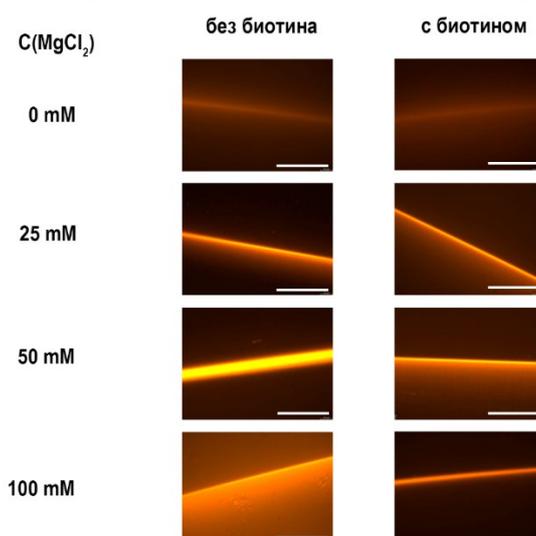


Рис. 2. Влияние концентрации ионов магния на интенсивность флуоресценции [5]

Таким образом, новая разработанная реакционно-диффузионная модель в тонком гидрогелевом слое является перспективным материалом для иммобилизации ДНК, которая преобразуется в двумерный паттерн. Это позволяет исследовать такую модель для возможных разработок биосенсорных платформ, которые основываются на селективной адсорбции

различных биомолекул, но и также способностью иммобилизовать катализаторы, что значительно может повысить коэффициент связывания таких биомолекул. В дальнейшем планируется использовать подобную платформу для доставки нуклеиновых кислот к клеткам, что значительно расширяет потенциальное применение материала.

### Литература

1. Dong Y., Yao C., Zhu Y., Yang L., Luo D., Yang D. DNA Functional Materials Assembled from Branched DNA: Design, Synthesis, and Applications // Chemical Reviews. — 2020. — V. 120. — №. 17. — Pp. 9420-9481.
2. Dorsey P., Scalise D., Schulman R. DNA Reaction-Diffusion Attractor Patterns // Angewandte Chemie. — 2021. — V. 133. — №. 1. — Pp. 342-348.
3. Abe K., Kawamata I., Nomura S.M., Murata S. Programmable reactions and diffusion using DNA for pattern formation in hydrogel medium // Molecular Systems Design & Engineering. — 2019. — V. 4. — № 3. — Pp. 639-643.
4. Gunawardan J. Models in Systems Biology: The Parameter Problem and the Meanings of Robustness // Elements of Computational System Biology. — 2010. — 26 p.

УДК 004.896

## ВОЗМОЖНЫЕ МЕТОДЫ АВТОМАТИЗАЦИИ ПРОЦЕССА ЭЛЕКТРООРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА

**Лисина Е.И.** (студент, Университет ИТМО), **Рудакова М.Д.** (студент, Университет ИТМО),

**Потапов В.В.** (студент, Университет ИТМО), **Скорб Е.В.** (к.х.н, Университет ИТМО)

**Научный руководитель: к.т.н., доцент Громов В.С.** (Университет ИТМО)

*e-mail: [lisina@infochemistry.ru](mailto:lisina@infochemistry.ru)*

*В работе рассмотрены способы автоматизации некоторых этапов электроорганического синтеза с использованием робота-манипулятора на движущейся платформе KUKA KMR iiwa. Идеи предложены на основе ранее представленных научным сообществом методов автоматизации органического синтеза и могут с некоторыми доработками лечь в основу роботизации реакций электрокатализа. Обозначены трудности, с которыми можно столкнуться во время практической реализации задуманного.*

**Ключевые слова:** электроорганический синтез, роботизация химических технологий, роботизированная лаборатория, робот манипулятор, практическая реализация.

Электроорганический синтез с использованием никелевых катализаторов может быть применим в будущем в качестве универсального пути синтеза гетероатомных связей в молекулах. Исследователи смогут создать конкретную реакцию переноса электрона, которая будет происходить с различными функциональными группами, выбирая ток или потенциал. Особые условия и механизмы протекания реакций создания таких связей могут быть точно определены путем многократного повторения экспериментов, которое под силу только роботизированным системам с поддержкой искусственного интеллекта для анализа выходных продуктов. Робот-манипулятор в химической лаборатории способен одновременно измерять различные физические свойства, готовить образцы, работать с лабораторными жидкостями и записывать аналитические данные.

Ученые из Корнельского университета собрали реактор для проведения органического синтеза с использованием электрического тока. Конструкция обладает высокой производительностью за счет наличия 24 лунок для проведения реакций, а реакторный блок имеет вставку для датчика температуры и может нагреваться или охлаждаться с помощью обычных лабораторных систем контроля температуры. Однако, он не подключен к автоматизированной лаборатории для анализа полученных продуктов и не использует методы искусственного интеллекта [1].

На рынке лабораторного оборудования существует установка, позволяющая проводить электрохимические реакции – ИКА ElectraSyn 2.0 (рис.1). Изменять параметры тока можно, нажав кнопку на дисплее, прибор также поставляется со специальным программным

обеспечением, позволяющим передавать графики вольтамперной характеристики на экран телефона [2].



Рис. 1. IKA ElectraSyn 2.0 [2]

Недавно был создан робот для химического синтеза, полностью напечатанный на 3D принтере. Роботизированная станция осуществляет отбор проб жидкости, способна контролировать до шесть реагентов и температуру и имеет свой графический интерфейс, написанный на Python. Управляющая программа имеет модульную структуру и содержит встроенный язык программирования для управления интерфейсами [3].

В данной работе будут рассматриваться возможные способы автоматизации подготовки и проведения реакции электроорганического синтеза с использованием робота KMR iiwa на движущейся платформе.

С точки зрения автоматизации, методика реакции электрокатализа представляет собой смешивание в одном небольшом стакане объемом 50 мл сыпучих крупнодисперсных веществ (электролита, никелевого катализатора, лиганда) с жидкими (растворитель и реагенты: морфолин и бромбензол/1-бромнафталин). Масса твердых веществ составляет десятки мг, а жидких – от 21 мкл до 4 мл. Электрическая ячейка для проведения реакции состоит из стакана, в который через трубку поступает инертный газ, с помещенными внутрь электродами, через которые от источника идет ток с задаваемыми параметрами. Реакция электролиза идет 4 часа при постоянном перемешивании раствора магнитной мешалкой, после чего необходимо экстрагировать чистое вещество с помощью воды и смеси гексана с этилацетатом в соотношении 2:1, встряхнуть и отобрать фазу с продуктами реакции [4].

Процессы, рассматриваемые с целью дальнейшей автоматизации на данный момент:

1. Взвешивание аликвоты вещества.
2. Дозирование растворителей.
3. Открывание вентиля газового баллона.
4. Контроль давления в баллоне.
5. Контроль утечки газа из соединительной трубки.
6. Настройка параметров электрического тока.

При более детальном изучении первого процесса проблема была выявлена в необходимости взвешивания миллиграмм вещества. Механизм отбора и взвешивания очень маленького количества сыпучего реактива промышленным роботом-манипулятором в литературе не освещен широко. В связи с этим, предполагается, что навески будут заранее приготовлены человеком.

Дозирование жидкостей может выполнять сам робот, например, с помощью пневматического штыревого цилиндра SMC, который представлен на рисунке 2 [5].

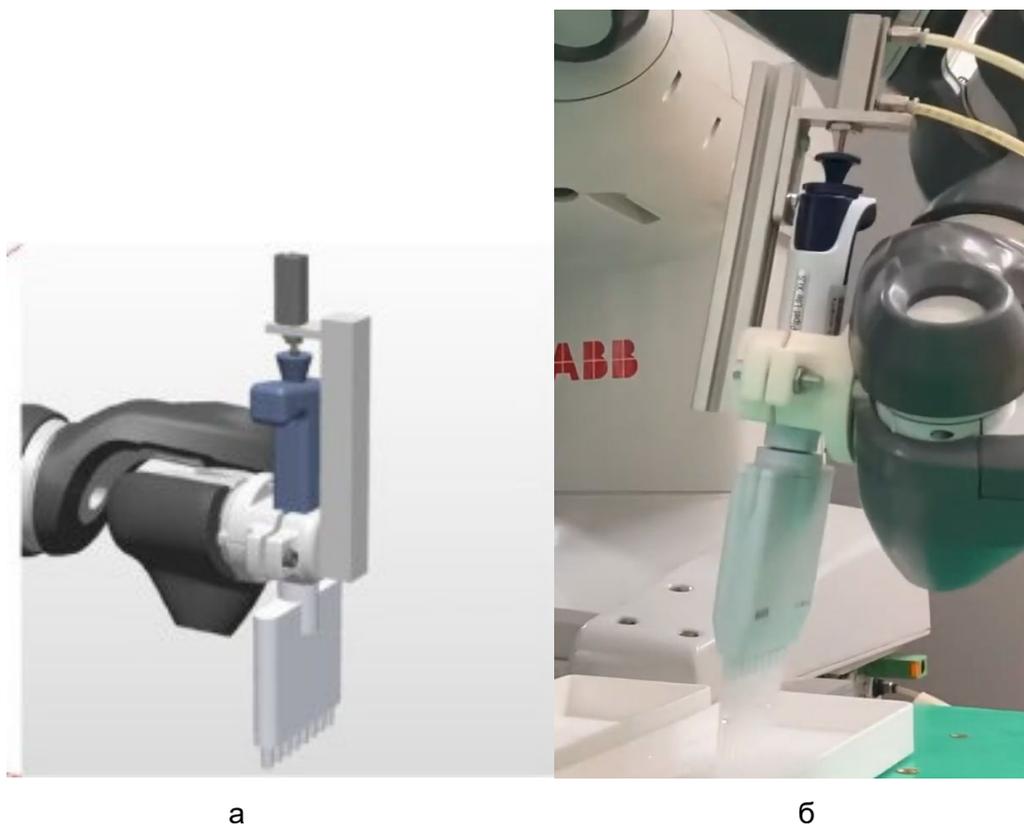


Рис. 2. Пневматический штыревой цилиндр [5]: а) в ABB RobotStudio; б) напечатанный на 3D принтере

Некоторые параметры процесса также можно считывать с помощью недорогих датчиков и устройств, которые можно интегрировать с микропроцессорами. К этим параметрам можно отнести показатель цифрового манометра, отслеживающего давление газа в баллоне. Для обнаружения утечек аргона предполагается использование обычного газового анализатора.

Несмотря на то, что у робота присутствует система навигации, для выполнения точных и деликатных манипуляций требуется дополнительная калибровка по точкам [6]. Размещение QR-кодов на лабораторной посуде позволит роботу контролировать наличие необходимых реактивов и отслеживать их расположение на столе.

В результате работы был проведен анализ литературы и предложены некоторые варианты автоматизации электроорганического синтеза. Обнаружено, что взвешивание сухих мелкодисперсных веществ ранее не выполнялось роботами, а значит, предстоит работа по автоматизации этого процесса или же поиск альтернативных путей. Обозначены идеи, которые могут в будущем, с некоторыми доработками, лечь в основу автоматизации реакций электрокатализа.

## Литература

1. Rein J., Annand J.R., Wismer M.K., Fu J., Siu J.C., Klapars A., Strotman N.A., Kalyani D., Lehnher D., Lin S. Unlocking the Potential of High-Throughput Experimentation for Electrochemistry with a Standardized Microscale Reactor // *ACS Central Science*. – 2021. – №. 7 (8). – Pp. 1347-1355.
2. IKA ElectraSyn 2.0 Package. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.ika.com/ru/Products-Lab-Eq/Electrochemistry-Kit-csp-516/ElectraSyn-20-Package-cpdt-20008980/> (дата обращения: 11.10.2022).
3. Vadivel D., Branciforti D.S., Kerroumi O., Dondi M., Dondi D. Mostly 3D printed chemical synthesis robot // *HardwareX*. – V. 11. – 2022. DOI: 10.1016/j.ohx. 2022.e00310.
4. Evgeniy O. Bortnikov, Sergey N. Semenov. Coupling of Alternating Current to Transition-Metal Catalysis: Examples of Nickel-Catalyzed Cross-Coupling // *The Journal of Organic Chemistry*. – 2021. – №. 86(1). – Pp. 782-793. DOI: 10.1021/acs.joc.0c02350.
5. A collaborative robotic solution to partly automate SARS-CoV-2 serological tests in small facilities // *SLAS Technology*. – 2022. – V. 27(1). – Pp. 100-106. DOI: 10.1016/j.slast.2021.10.012.
6. Burger B., Maffettone P.M., Gusev V.V. et al. A mobile robotic chemist // *Nature*. – 2020. – V. 583. – Pp. 237–241. <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2442-2>.

УДК 532.783, 53.043, 539.22, 544.25

## ГЕНЕРАЦИЯ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ХИРАЛЬНЫХ СТРУКТУР НА КРАЮ ЭЛЕКТРОДА В ОБРАЗЦЕ ДВУХЧАСТОТНОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА

Матюшова О.А. (студент, Университет ИТМО), Пивень А.О. (студент, Университет ИТМО),

Соловьев М.Р. (студент, Университет ИТМО), Николаев А.А. (студент, Университет ИТМО)

Научный руководитель: к. ф.-м.н. Орлова Т. (Университет ИТМО)

e-mail: [265415@niuitmo.ru](mailto:265415@niuitmo.ru)

*В работе представлены экспериментальные наблюдения формирования локализованных хиральных структур в двухчастотном хиральном нематическом жидком кристалле при воздействии переменного электрического сигнала с разной частотой, формой и амплитудой. Были обнаружено различное поведение метастабильных локализованных структур и текстуры «холестерических пальцев». Также было выявлено динамическое поведение локализованных структур вблизи электрода.*

**Ключевые слова:** *двухчастотный нематический жидкий кристалл, хиральная примесь, локализованная хиральная структура, приложенное электрическое поле, динамическое поведение.*

Двухчастотные нематические жидкие кристаллы (DFNLC), как и привычные всем нематические жидкие кристаллы с заданной диэлектрической анизотропией, это оптически одноосные мягкие среды, которые имеют дальнейшее ориентационное упорядочение молекул в отсутствие трансляционного. Такие жидкие кристаллы, как любые нематики, можно допировать органическими хиральными примесями и индуцировать в них макроскопическую холестерическую спираль, т.е. превращать нематическую фазу в хиральную нематическую фазу [1].

Двухчастотные нематические жидкие кристаллы перспективны прежде всего для создания электрооптических переключателей и других устройств с быстрыми временами переключения [2]. Как правило, тестирование электрооптических свойств жидких кристаллов проводится при приложении электрического сигнала синусоидальной формы [1]. В данной работе использовался электрический сигнал прямоугольной формы для переориентации фрустрированного хирального нематика, что приводило к скручиванию холестерической спирали, формированию локализованных хиральных структур [3,4] при определенных параметрах электрического поля и к их необычному поведению.

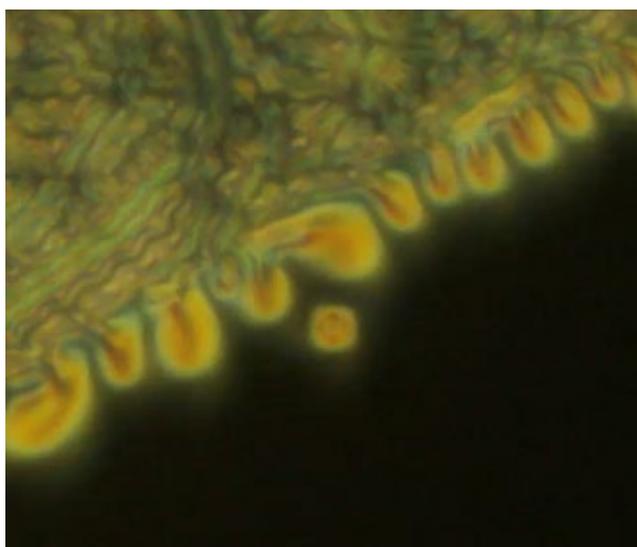


Рис. 1. Сформированная границе электрода локализованная хиральная структура.  
Условия наблюдения: объектив 50х, скрещенные поляризаторы

В эксперименте образец хирального нематика (DFNLC с хиральной примесью S811) помещался в оптический микроскоп между скрещенными под  $90^\circ$  поляризаторами. К жидkokристаллической ячейке прикладывался электрический сигнал прямоугольной формы от генератора Rigol DG1032Z. Текстуры жидкого кристалла наблюдались в области возле

границы электрода с использованием объективов 10х, 20х и 50х. Было обнаружено, что при постоянной частоте 11 кГц и изменении размаха напряжения в диапазоне от 20В до 12В происходило формирование локализованных структур и их перемещение за границу электрода и обратно. Описание эксперимента и соответствующие наблюдения приведены в таблице.

Таблица

**Эффекты в хиральном нематике на основе DFNLC при воздействии приложенного электрического поля (прямоугольный сигнал)**

Время, мин	Напряжение $V_{pp}$ , В	Комментарии
00:00 – 01:53	20	Перед началом эксперимента образец был полностью прозрачен, в оптическом микроскопе в скрещенных поляризаторах наблюдалось темное поле, соответствующее фрустрированному состоянию холестерической спирали жидкого кристалла. Далее произошла активация жидкого кристалла приложенным электрическим полем, образец стал матовым вследствие рассеяния света на появившихся спиралевидных и продолговатых холестерических структурах (т.н. «холестерических пальцах») (рис.1)
01:53 – 07:20	17	Начало образования локализованных хиральных структур на границе электрода (рис.1)
07:20 – 11:06	15	Стабильное состояние, видимых изменений состояния образца не замечено
11:06 – 19:48	13	Стабильное состояние, видимых изменений состояния образца не замечено
19:48 – 32:22	12,8	Спиралевидные холестерические структуры начали раскручиваться, что говорит о приближении к состоянию фрустрации холестерической спирали, а локализованные структуры начали движение обратно к границе электрода
30:32	12,8	Подавляющее большинство локализованных структур достигли края электрода и исчезли
32:22 – 44:42	12,5	Образец просветлился, при этом локализованные структуры снова начали формироваться
44:42 – 53:16	12	Образец полностью просветлился, хиральный жидкий кристалл перешел во фрустрированное состояние, как до начала эксперимента



Рис. 2. Локализованные хиральные структуры за границей электрода после отключения приложенного электрического поля. Условия наблюдения: объектив 20х, скрещенные поляризаторы

Также было отмечено, что, после выключения электрического сигнала, происходит релаксация текстуры «отпечатков пальцев», но локализованные структуры остаются (рис.2).

Т.е., они соответствуют метастабильному состоянию поля директора жидкого кристалла. Эти структуры можно разрушить, т.е. перевести холестерическую спираль во фрустрированное состояние, нагревом образца до 60°C на протяжении 10 минут и последующем охлаждении или длительной релаксацией образца при комнатной температуре около 7 часов.

В заключение, в данной работе были экспериментально определены условия формирования и исчезновения локализованных хиральных структур в двухчастотном хиральном нематике. Было отмечено, что при этом структуры перемещаются вблизи края электрода, что требует дальнейших исследований поведения локализованных структур в электрическом поле.

## Литература

1. Блинов Л.М. Жидкие кристаллы: Структуры и свойства. Изд. стереотип. М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2018. – 482 с.; цв. вкл.
2. Electrically switchable structural patterns and diffractions in a dual frequency nematic liquid crystal. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.opticsjournal.net/Articles/OJ87f344ddcc2f4f85/FullText> (дата обращения: 17.10.2022).
3. Yuan Shen, Ingo Dierking. Electrically Driven Formation and Dynamics of Skyrmionic Solitons in Chiral Nematics // Physical Review Applied. – 2021. – V. 15. – №. 5. – 14 p.
4. Smalyukh I.I., Senyuk B.I. Electric-field-induced nematic-cholesteric transition and three-dimensional director structures in homeotropic cells // Physical Review E. – 2005. – V. 72. – №. 6. – 16 p.

УДК 62;523

## РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ МАНИПУЛЯТОРОВ ДЛЯ АВТОМАТИЗАЦИИ СОЗДАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ РАСТВОРОВ

**Николаев А.А.** (студент, Университет ИТМО), **Соловьёв М.Р.** (студент, Университет ИТМО),

**Зенкин А.М.** (аспирант, Университет ИТМО), **Матюшова О.А.** (студент, Университет ИТМО)

**Научный руководитель: к.т.н., доцент Абрамчук М.В.** (Университет ИТМО)

*e-mail: [nikolaev7aleksandr@gmail.com](mailto:nikolaev7aleksandr@gmail.com)*

*Разрабатываемая система состоит из двух четырёх-осевых манипуляторов со всеми сочленениями вращательного типа, приводимых в движение с помощью шаговых двигателей, управляемых с помощью контроллера Arduino. Разрабатываемая система предназначена для смешивания невязких жидкостей с различными пропорциями. Один из манипуляторов имеет инструмент для взятия пробирок и откручивания крышек, другой – инструмент для переноса жидкости - дозатор. Решается задача разработки системы манипуляторов, обеспечивающей перенос пробирок с жидкостями, открытие пробирок, перенос жидкостей из одной пробирки в другую, исключая незапланированное смешивание веществ.*

**Ключевые слова:** *манипулятор, автоматизация, arduino, шаговые двигатели, 3D-печать, создание растворов.*

В настоящее время растёт потребность в снижении эксплуатационных расходов на предприятиях, что является основной мотивацией развития робототехники. Роботы дают возможность освободить людей от выполнения повторяющихся технологических операций, при этом, выполняя работу эффективнее и стабильнее. Ведущие производители промышленных роботов-манипуляторов — это компании FANUC, KUKA, HANWHA. Также существуют колаборативные модели, предназначенные для работы с людьми, такие как Universal Robots. Для образования полезно применять продукцию UFactory [1]. Однако, для образовательных целей в университетах такие устройства не подходят, поскольку они весьма дороги [3]. Например, для студентов, работающих в области химии, полезно иметь системы автоматизации создания химических растворов [2]. Для таких целей не слишком важно качество и точность системы, напротив, необходимо массовое применение манипуляторов для охвата наибольшего количества обучающихся. Ставится задача разработки системы манипуляторов, обеспечивающей перенос пробирок с жидкостями, открытие пробирок, перенос жидкостей из одной пробирки в другую, исключая незапланированное смешивание веществ.

Конструкция манипуляторов изготавливается преимущественно методом 3D-печати, платформа рабочего пространства собирается из нарезанных деревянных пластин для обеспечения дешевизны.

Система имеет следующие подсистемы:

1. Платформа, которая внутри содержит всю управляющую электронику и на поверхности имеет лабораторные сетки для пробирок с различными веществами и для новых пипеток, захватывающее устройство, предназначенное для удержания одной пробирки при откручивании её крышки, а также контейнеры для сброса использованных крышек и пипеток. В центральной области на платформе расположены 2 адаптированных манипулятора BCN3D.
2. Манипулятор BCN3D с инструментом типа схват. Этот манипулятор предназначен для переноса пробирок между ячейками сеток и для снятия крышек с пробирок. Он имеет четыре степени свободы для позиционирования инструмента по три координатам и одну углу (т.е. удержанию схвата вертикально в любой точке). Все сочленения манипулятора, а также инструмент, приводятся в движение с помощью шаговых двигателей.
3. Манипулятор BCN3D с инструментом типа дозатор. Этот манипулятор предназначен для переноса жидкостей, из одних пробирок в другие. Он имеет четыре степени свободы для позиционирования инструмента по три координатам и одну углу (т.е. удержанию дозатора вертикально в любой точке). Все сочленения манипулятора, а также инструмент, приводятся в движение с помощью шаговых двигателей.
4. Управляющая система, состоящая из контроллеров Arduino Mega с подключенными к ним драйверами шаговых двигателей. Контроллеры Arduino Mega управляются с помощью одноплатного компьютера Raspberry Pi 4.

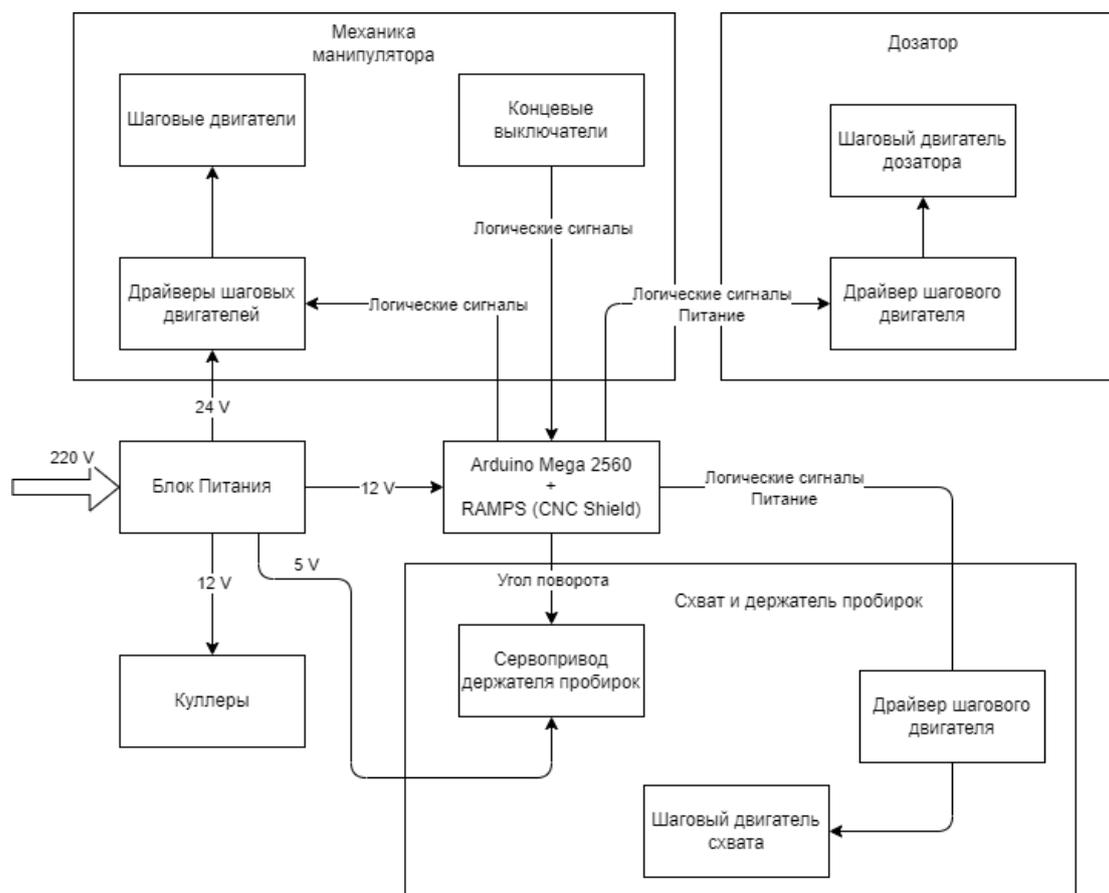


Рис. 1. Структурная схема системы

Конструкция используемых манипуляторов основана на моделях из открытых источников манипулятора 2016 года компании BCN3D, спроектированного для 3D-печати [5]. Кинематическая схема манипулятора представлена на рисунке 2.

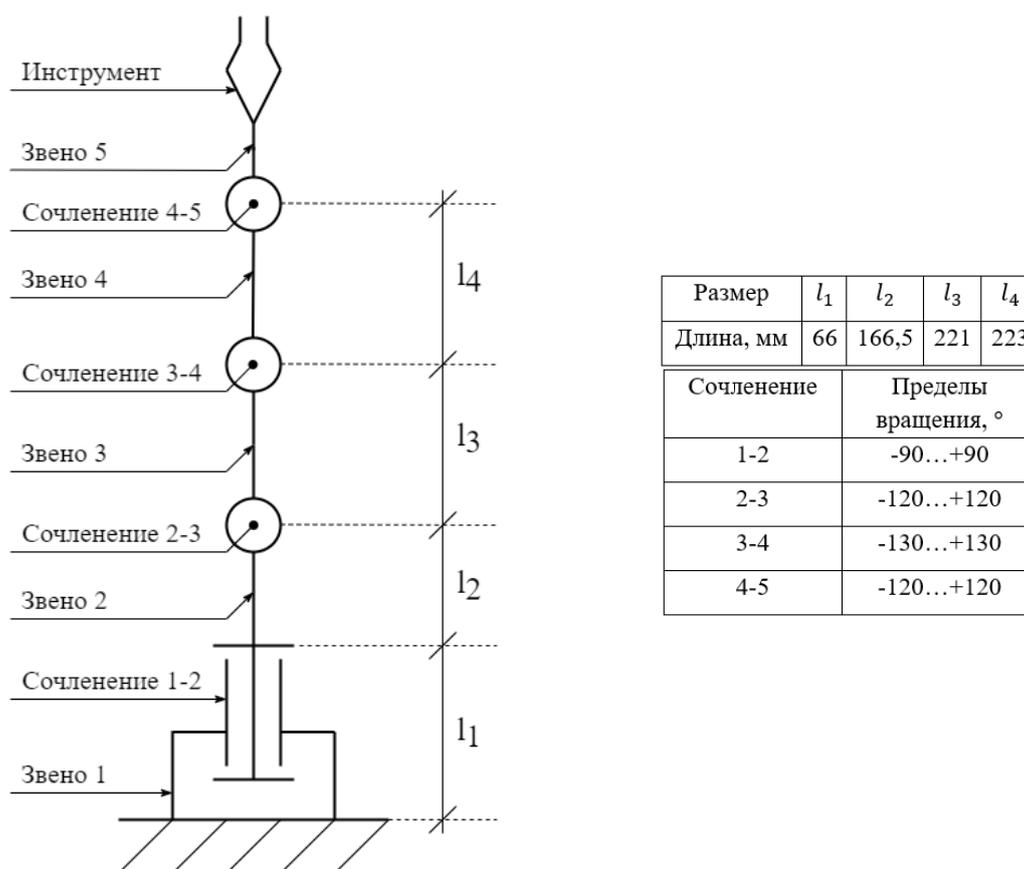


Рис. 2. Кинематическая схема манипулятора BSN3D Moveo

Дозатор предназначен для втягивания жидкости в пипетку и, затем, впрыскивания её в пробирку. Втягивание и испускание жидкости обеспечивается изменением объема сосуда, соединенного с пипеткой, при этом, жидкость не попадает в этот сосуд и касается только пипетки. Сосуд представляет собой цилиндр диаметром 20 мм, в котором для изменения объема перемещается поршень. Поршень приводится в движение с помощью винтового сочленения. Гайка сочленения крепится к поршню, а шаговый двигатель 28BYGN301 вращает крепящийся к нему винт. Вращение гайки относительно шагового двигателя заблокировано корпусом. Для добавления механизму с одной степенью свободы дополнительной функции сброса пипетки используем финальную часть хода гайки для проталкивания конструкции, которая сбрасывает пипетку. Эта конструкция имеет возвратную пружину для возврата себя в исходное положение после сброса пипетки и размыкания контакта с гайкой, которая в свою очередь имеет пружину для прижатия к винту. Вся эта конструкция вставляется в компактный корпус, который удобен для сборки и устанавливается на манипуляторе. Длина дозатора от точки крепления к оси манипулятора до конца конической детали для посадки пипетки  $l_{5h} = 230\text{мм}$ , Расстояние от точки крепления к оси манипулятора до оси винта и поршня дозатора  $l_{5r} = 80\text{мм}$ .

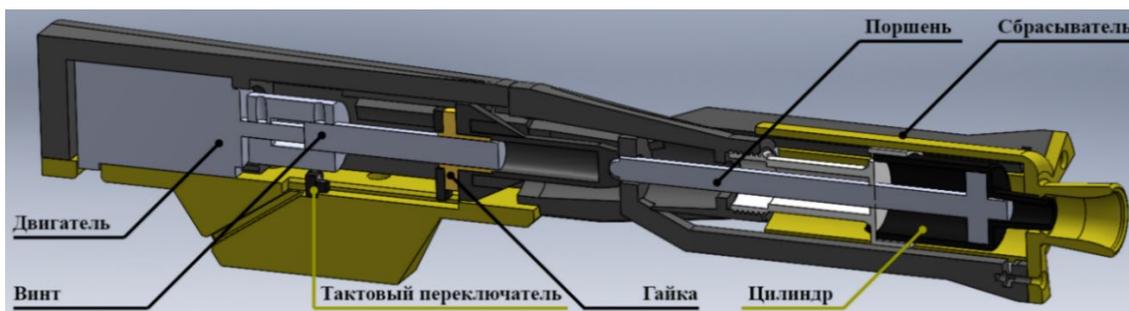


Рис. 3. Разрез дозатора

Внутри корпуса устанавливается тактовая кнопка для регистрации крайнего положения гайки и, тем самым, определения нулевого положения поршня дозатора. Все детали корпуса дозатора изготавливаются на 3D-принтере из пластика PLA с толщиной слоя 0,1 – 0,2 мм, заполнением 40%. Поршень контактирует с цилиндром через силиконовое кольцо, что создаёт герметичность емкости.

$$\Delta V = 0.1963 \text{мкл} - \text{расчетная точность дозатора.}$$

Схват предназначен для взятия пробирок и откручивания крышек. Оба действия производятся одновременным сведением и вращением зажимов схвата. В основании инструмента расположен шаговый двигатель 28BYGH301. На его вал устанавливается муфта, к которой крепятся рычаги. Эти рычаги сопрягаются с губками схвата, которые движутся поступательно относительно центральной муфты. При блокировке поступательного движения губок схвата система, в которой они движутся, начинает вращение. Именно поэтому с помощью схвата возможно захватывать пробирку и, при её фиксации, снимать крышку вращательным движением. Длина схвата от точки крепления  $l_5 = 184$  мм, диаметр внутреннего пространства губок в закрытом состоянии 25 мм, диаметр в открытом – 50 мм.

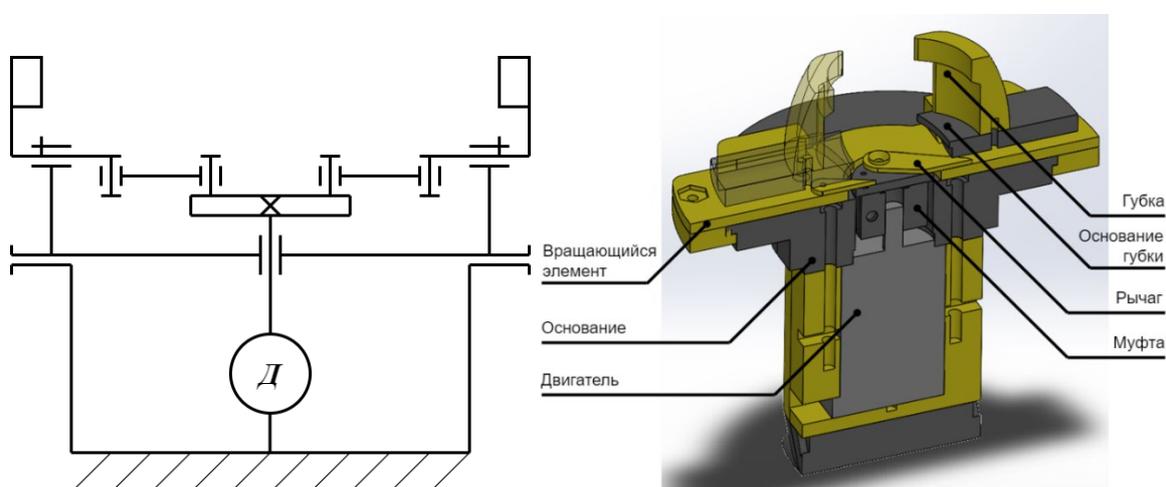


Рис. 4. Кинематическая схема схвата (слева) и разрез конструкции (справа)

**Обратная задача кинематики** состоит в том, чтобы для положения инструмента  $[r, h]$  определить значения углов  $a_2, a_3, a_4$  [4].

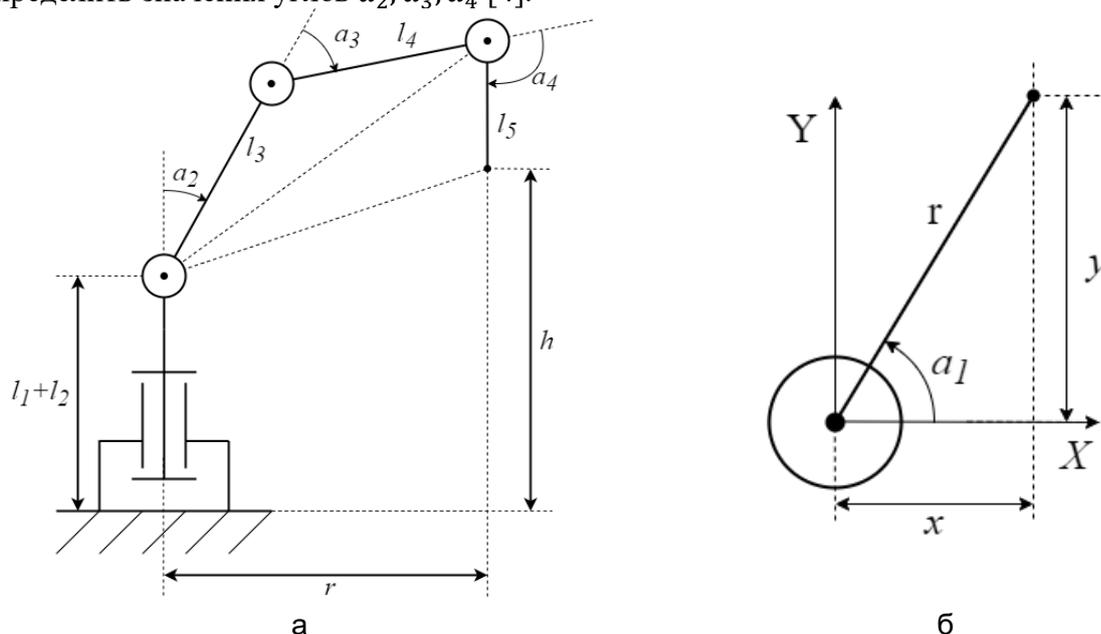


Рис. 5. Кинематическая схема манипулятора со схватом: а) вид сбоку; б) вид сверху

Решение обратной задачи кинематики для манипулятора со схватом выглядит как:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \arccos\left(\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}}\right), \\ \mathbf{a}_2 &= \arctg\left(\frac{\sqrt{x^2+y^2}}{z-l_1-l_2+l_5}\right) - \arccos\left(\frac{l_3^2+x^2+y^2+(z-l_1-l_2+l_5)^2-l_4^2}{2l_3\sqrt{x^2+y^2+(z-l_1-l_2+l_5)^2}}\right), \\ \mathbf{a}_3 &= \pi - \arccos\left(\frac{l_3^2+l_4^2-x^2-y^2-(z-l_1-l_2+l_5)^2}{2l_3l_4}\right), \\ \mathbf{a}_4 &= \arccos\left(\frac{l_3^2+x^2+y^2+(z-l_1-l_2+l_5)^2-l_4^2}{2l_3\sqrt{x^2+y^2+(z-l_1-l_2+l_5)^2}}\right) - \arctg\left(\frac{\sqrt{x^2+y^2}}{z-l_1-l_2+l_5}\right) + \arccos\left(\frac{l_3^2+l_4^2-x^2-y^2-(z-l_1-l_2+l_5)^2}{2l_3l_4}\right). \end{aligned}$$

Для манипулятора с дозатором схема будет иметь следующий вид:

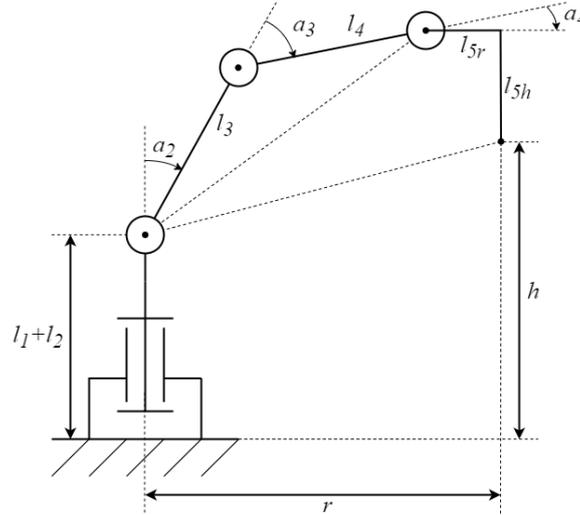


Рис. 6. Кинематическая схема манипулятора с дозатором

Решение обратной задачи кинематики для манипулятора со дозатором выглядит как:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \arccos\left(\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2-l_5r}}\right), \\ \mathbf{a}_2 &= \arctg\left(\frac{\sqrt{x^2+y^2-l_5r}}{z-l_1-l_2+l_5h}\right) - \arccos\left(\frac{l_3^2+(\sqrt{x^2+y^2-l_5r})^2+(z-l_1-l_2+l_5h)^2-l_4^2}{2l_3\sqrt{(\sqrt{x^2+y^2-l_5r})^2+(z-l_1-l_2+l_5h)^2}}\right), \\ \mathbf{a}_3 &= \pi - \arccos\left(\frac{l_3^2+l_4^2-(\sqrt{x^2+y^2-l_5r})^2-(z-l_1-l_2+l_5h)^2}{2l_3l_4}\right), \\ \mathbf{a}_4 &= \arccos\left(\frac{l_3^2+(\sqrt{x^2+y^2-l_5r})^2+(z-l_1-l_2+l_5h)^2-l_4^2}{2l_3\sqrt{(\sqrt{x^2+y^2-l_5r})^2+(z-l_1-l_2+l_5h)^2}}\right) - \arctg\left(\frac{\sqrt{x^2+y^2-l_5r}}{z-l_1-l_2+l_5h}\right) - \frac{\pi}{2} + \\ &\quad + \arccos\left(\frac{l_3^2+l_4^2-(\sqrt{x^2+y^2-l_5r})^2-(z-l_1-l_2+l_5h)^2}{2l_3l_4}\right). \end{aligned}$$

**Прямая задача кинематики** состоит в том, чтобы для углов  $a_2, a_3, a_4$  определить значения положения инструмента  $[r, h]$ .

Решение для манипулятора со схватом будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{cases} x = (l_3 \sin(a_2) + l_4 \sin(a_2 + a_3) + l_5 \sin(a_2 + a_3 + a_4)) \cos(a_1) \\ y = (l_3 \sin(a_2) + l_4 \sin(a_2 + a_3) + l_5 \sin(a_2 + a_3 + a_4)) \sin(a_1) \\ z = l_1 + l_2 + l_3 \cos(a_2) + l_4 \cos(a_2 + a_3) + l_5 \cos(a_2 + a_3 + a_4) \end{cases}$$

Решение для манипулятора с дозатором будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{cases} x = \left( l_3 \sin(a_2) + l_4 \sin(a_{23}) + l_{5r} \sin(a_{234}) + l_{5h} \sin \left( a_{234} + \frac{\pi}{2} \right) \right) \cos(a_1) \\ y = \left( l_3 \sin(a_2) + l_4 \sin(a_{23}) + l_{5r} \sin(a_{234}) + l_{5h} \sin \left( a_{234} + \frac{\pi}{2} \right) \right) \sin(a_1) \\ z = l_1 + l_2 + l_3 \cos(a_2) + l_4 \cos(a_{23}) + l_{5r} \cos(a_{234}) + l_{5h} \cos \left( a_{234} + \frac{\pi}{2} \right) \end{cases}$$

Рабочим пространством манипулятора определим ту область, в которую манипулятор может переместить инструмент на высоту от поверхности стола в диапазоне от 100 мм до 250 мм. Для этого воспользуемся решением обратной задачи кинематики для каждого манипулятора.

По результатам работы программы, получим графики, представленные на рисунке 7.

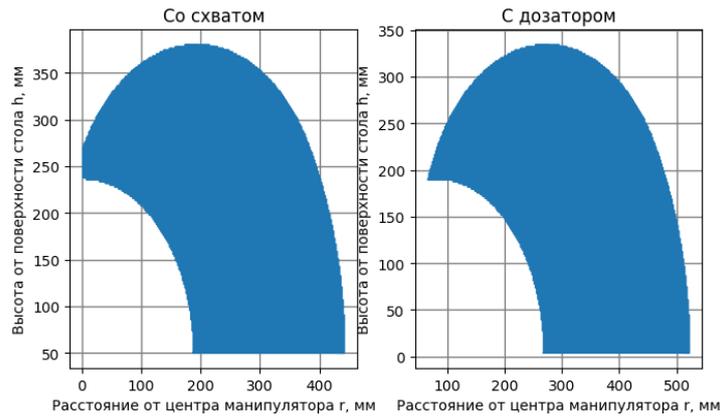


Рис. 7. Рабочие пространства манипуляторов

По графикам получим радиусы и площади рабочей области для каждого манипулятора:

Таблица 1

**Площади рабочих областей манипуляторов**

	Площадь S (h = 100 мм), см <sup>2</sup>	Площадь S (h = 250 мм), см <sup>2</sup>
Манипулятор со схватом	1954	1489
Манипулятор с дозатором	3197	1715

Полученные площади пересечения рабочих областей манипуляторов, расположенных на расстоянии 560 мм друг от друга:

Таблица 2

**Площади общей рабочей области манипуляторов**

Высота от поверхности стола h, мм	100	250
Площадь общей рабочей области S, см <sup>2</sup>	749	804

Для расчета точности позиционирования инструмента расположим звенья так, чтобы для каждой оси инструмент находился на максимальном удалении, поскольку ошибка по координате растет с увеличением расстояния при сохранении ошибки по углу:

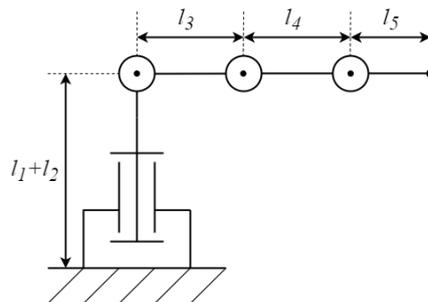


Рис. 8. Схема манипулятора для расчета точности позиционирования

Точность позиционирования каждого шагового двигателя составляет  $1,8^\circ$  при отключенном режиме дробления шага. При включении дробления шага точностькратно растёт. На всех шаговых двигателях установлено дробление шага  $1/4$ . Соответственно, точность позиционирования становится  $\delta = 0,45^\circ = 0,007852$  рад. Рассчитаем точность позиционирования инструмента для манипулятора *со схватом*:

$$\Delta = \Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3 + \Delta_4,$$

где  $\Delta$  – общая ошибка, а  $\Delta_i$  – ошибка, возникшая из-за отклонения  $i$ -ой оси.

$$\Delta_1 = \delta(l_3 + l_4 + l_5)\eta_1, \Delta_2 = \delta(l_3 + l_4 + l_5)\eta_2,$$

$$\Delta_3 = \delta(l_4 + l_5)\eta_3, \Delta_4 = \delta l_5 \eta_4,$$

где  $\eta_i$  здесь это коэффициент ременной передачи для  $i$ -х осей манипулятора:

$$\eta_1 = 0.100, \eta_2 = 0.091, \eta_3 = 0.230, \eta_4 = 0.222,$$

$$\Delta = \delta((l_3 + l_4 + l_5)\eta_1 + (l_3 + l_4 + l_5)\eta_2 + (l_4 + l_5)\eta_3 + l_5\eta_4),$$

$$\Delta = 0.007852 * (62.8 + 57.15 + 93.61 + 40.85) = 2.00 \text{ мм.}$$

Рассчитаем точность позиционирования инструмента для манипулятора *с дозатором*.

Здесь  $l_5 = \sqrt{l_{5r}^2 + l_{5h}^2}$ .

$$\Delta = 0.007852 * (68.75 + 62.56 + 107.30 + 54.05) = 2.30 \text{ мм}$$

Для расчета моментов на двигателях выделим для каждого звена центры масс  $m_i$ , координаты  $x_i$ , и расставим силы  $F_i$ . Установим манипулятор в самое сложное для двигателей положение, представленное на рисунке 9.

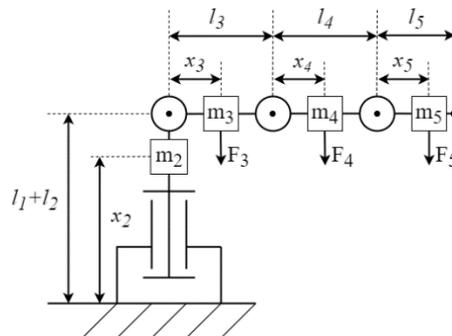


Рис. 9. Схема манипулятора для расчета моментов

### Определим массы в звеньях

Для манипулятора *со схватом*:

Таблица 3

#### Расположение центров масс на звеньях манипулятора *со схватом*

Номер звена	2	3	4	5
Масса $m$ , кг	4.5	2	1	0.5
Центр масс $x$ , мм	130	109	150	40

Рассчитаем моменты, необходимые для удержания манипулятора в самом сложном положении,  $M_{yi}$  для  $i$ -го сочленения:

$$M_{y2} = 8.15 \text{ Н * м} \quad M_{y3} = 2.77 \text{ Н * м} \quad M_{y4} = 0.196 \text{ Н * м.}$$

Для манипулятора *с дозатором*:

Таблица 4

#### Расположение центров масс на звеньях манипулятора *с дозатором*

Номер звена	2	3	4	5
Масса $m$ , кг	4.5	2	1	0.7
Центр масс $x$ , мм	130	109	150	100

$$M_{y_2} = 9.39 \text{ Н} * \text{ м}, \quad M_{y_3} = 3.69 \text{ Н} * \text{ м}, \quad M_{y_4} = 0.687 \text{ Н} * \text{ м}.$$

Рассчитаем моменты, создаваемые двигателями (на обоих манипуляторах):

$$M_2 = 64.7 \text{ Н} * \text{ м}, \quad M_3 = 12.9 \text{ Н} * \text{ м}, \quad M_4 = 1.76 \text{ Н} * \text{ м}.$$

Можем видеть, что моменты, создаваемые двигателями, кратно превышают моменты, необходимые для удержания манипуляторов. Манипулятор со схватом, взявший пробирку массой в 100 грамм, эквивалентен манипулятору с дозатором. Соответственно, манипулятор со схватом так же со значительным запасом будет выдерживать увеличенный момент, создаваемый пробиркой в 100 грамм.

Зададим для манипулятора с дозатором максимальную скорость перемещения инструмента  $V_{max} = 200 \frac{\text{мм}}{\text{с}}$ . Такая скорость соответствует угловой скорости вращения вокруг каждой из осей:

$$t_2 = 2.43 \text{ мс}, \quad t_3 = 4.44 \text{ мс}, \quad t_4 = 5.35 \text{ мс}.$$

Все времена остановки являются временем переходного процесса и существенно меньше  $t = 0,1 \text{ с}$ . Поскольку инструмент манипулятора со схватом легче, то для этого манипулятора так же выполняется это условие.

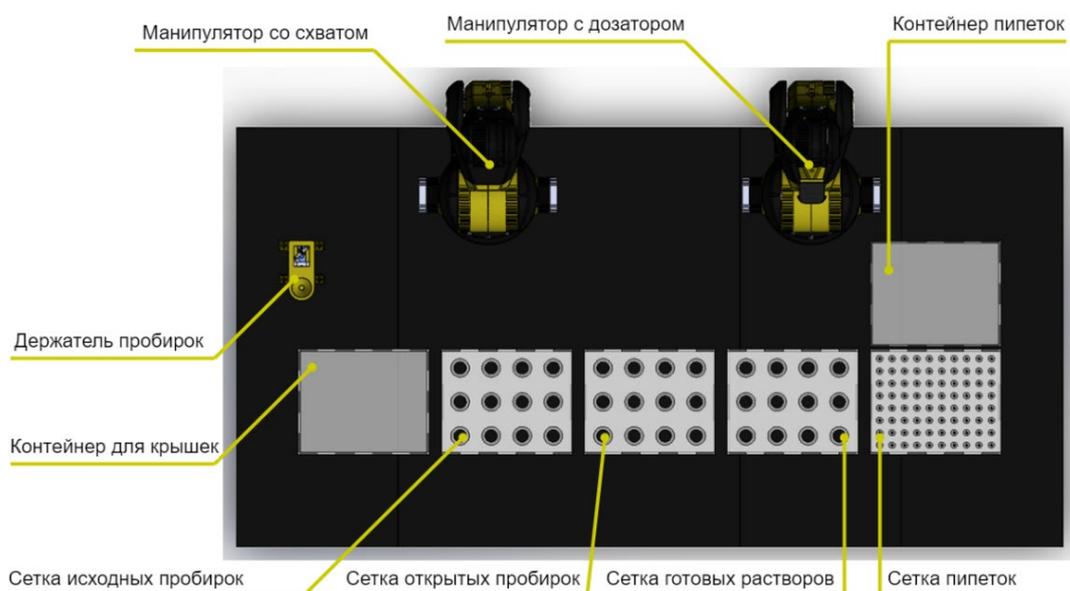


Рис. 10. Рабочий стол, вид сверху

Рабочая область состоит из сеток для размещения пробирок, ячейки с зажимом для откручивания крышек, сетки для размещения пипеток и контейнеров для сброса крышек и пипеток. Управление манипуляторами происходит с помощью контроллеров Arduino Mega через драйверы шаговых двигателей, которые имеют два логических сигнала: шаг и направление. При получении импульса по каналу step (шаг) мотор выполняет перемещение в сторону, соответствующую сигналу канала dir (направление). Исходя из того, что манипулятор имеет пятишаговых двигателей в конструкции и один шаговый двигатель в инструменте, ему требуется шесть драйверов шагового двигателя. Двигатели второго вращательного сочленения симметричны, поэтому могут управляться одним сигналом. Тогда необходимо пять пар каналов step и dir, то есть, 10 цифровых выводов.

На каждой оси манипулятора установлен концевой выключатель, который имеет один цифровой вывод, характеризующий его положение. Дозатор дополнительно имеет тактовую кнопку. Тогда к контроллеру манипулятора с дозатором подключаются 5 цифровых входов, а к контроллеру манипулятора со схватом – 4. Общее количество занятых контактов манипулятором с дозатором составляет 15, а манипулятором со схватом – 14.

Для управления шаговыми двигателями при написании программы в среде Arduino IDE используется библиотека AccelStepper.

Программа представляет собой решенные задачи ПЗК и ОЗК и управление шаговыми двигателями по шагам и скоростям. Программа содержит последовательность точек, необходимых для достижения инструментом и последовательность действий для каждой точки. Координаты пробирок и других элементов задаются в массивы. При начале работы программы происходит калибровочный процесс. Каждый манипулятор поочередно приводит в крайнее состояние каждое звено для определения исходного положения. Скорости движения звеньев задаются в диапазонах, удовлетворяющих техническому заданию (от 20 мм/с до 200 мм/с, в зависимости от звена, времени перемещения).

По результатам работы была разработана система, состоящая из двух четырёх-осевых манипуляторов со всеми сочленениями вращательного типа, приводимые в движение с помощью шаговых двигателей, управляемых с помощью контроллера Arduino. Разрабатываемая система предназначена для смешивания невязких жидкостей с различными пропорциями. Один из манипуляторов имеет инструмент для взятия пробирок и откручивания крышек, другой – инструмент для переноса жидкости - дозатор.

Разработана система манипуляторов, обеспечивающая перенос пробирок с жидкостями, открытие пробирок, перенос жидкостей из одной пробирки в другую, исключая незапланированное смешивание веществ. Площадь рабочей области каждого манипулятора более 1000 см<sup>2</sup>. Манипуляторы имеют общую рабочую область более 500 см<sup>2</sup>. Скорости движения сочленений манипуляторов от 20 мм/с до 200 мм/с. Точность позиционирования инструментов манипуляторов до 5 мм. Апериодичность переходного процесса обеспечивается кратно большими создаваемыми моментами на двигателях, чем требуется для удержания манипуляторов, время переходного процесса до 10 мс. Максимальная масса пробирок с жидкостью 100 г. Точность заполнения объёма жидкости до 1 мкл.

#### Литература

1. Салбиев Д.Г. Роботы манипуляторы и области их применения // Сборник избранных статей Всероссийской (национальной) научно-практической конференции. Санкт-Петербург, 2021.
2. Кремлева А.А., Щеглова М.В., Чуба А.Ю. Роботы-манипуляторы на основе гибких трубчатых элементов // Сборник материалов ЛП Международной студенческой научно-практической конференции 2019.
3. Горюнов Д.Г. магистерская диссертация на тему «Разработка аппаратно-программного комплекса для смешивания химических соединений». ВКР. 155510.09.04.04. ПЗ, 2017.
4. Mark W. Spong, Seth Hutchinson, and M. Vidyasagar, «Robot Modeling and Control». DOI:10.1108/ir.2006.33.5.403.1.
5. Исходные файлы манипулятора BCN3D Moveo. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://github.com/BCN3D/BCN3D-Moveo> (дата обращения: 15.05.2022).

УДК 544.6

### **СОЗДАНИЕ ГИБКОЙ БИОСЕНСОРНОЙ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ УГЛЕВОЛОКНА ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ ФИЗИОЛОГИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ ЧЕЛОВЕКА**

**Носкова У.В.** (студент, Университет ИТМО), **Зырянова П.И.** (студент, Университет ИТМО), **Пивень А.О.** (студент, Университет ИТМО)

**Научный руководитель: к.х.н., профессор Скорб Е.В.** (Университет ИТМО)

*e-mail:* [noskova@infichemistry.ru](mailto:noskova@infichemistry.ru)

*В работе рассмотрено использование полиэлектrolитов для создания псевдожидкостного проводящего слоя на поверхности углеволокна при создании ионоселективных электродов на  $Na^+$ ,  $K^+$ ,  $Ca^{2+}$ . Этот подход помог создать чувствительные, удобные и простые в использовании электроды для мультиселективной платформы, которую можно будет применять как в больницах, так и в повседневной жизни.*

**Ключевые слова:** полиэлектrolиты, мультиселективная платформа, углеволокно, псевдожидкостный слой.

Дефицит микроэлементов является глобальной проблемой здравоохранения. С подорожанием здравоохранения, а также с появлением все новых и новых заболеваний, которые требуют постоянного контроля здоровья, возникает потребность в

персонализированных носимых устройствах для постоянного мониторинга состояния здоровья пациентов в повседневной жизни. Такое устройство должно быть портативным, гибким и простым в использовании для того, чтобы человек мог пользоваться им самостоятельно в повседневной жизни. Благодаря гибким ионоселективным электродам на основе углеродного волокна, мы сможем продвинуться в создании удобной и простой в использовании мультиселективной платформы для контроля физиологического состояния человека. Подобная платформа станет новым прибором для инвазивного сбора данных, а также поспособствует развитию персонализированной медицины.

Данная работа нацелена на разработку системы, селективной к ионам натрия, калия и кальция. Для создания подобной системы были выбраны ионоселективные электроды (ИСЭ). Среди множества вариантов были выбраны ИСЭ, потому что при использовании таких электродов состав пробы почти не меняется, благодаря чему не нарушаются ионные взаимодействия. Помимо этого, время установления равновесных потенциалов у электродов очень мало, оно колеблется от нескольких секунд до нескольких минут, это позволяет следить за изменением ионного состава биологических жидкостей в реальном времени.

В качестве проводящего материала, на котором будет базироваться электрод выбрано углеродное волокно, которое отвечает всем необходимым критериям: компактность, гибкость и простота в использовании. Данные качества позволят произвести интеграцию предлагаемых электродов в носимые гаджеты, такие как браслеты и спортивные часы, а также в одежду [1–3]. Для эффективной работы электрода и переноса заряда, его модифицировали методом послойного наслаивания с использованием полиэлектролитов. Представленный метод доступен, так как не подразумевает использование дорогостоящего оборудования и является наиболее простым в исполнении. Полиэлектролитная сборка завершается нанесением ионоселективной мембраны, в состав которой входит ключевой компонент ионофор, позволяющий улавливать необходимый ион по системе ключ-замок. Комбинация полиэлектролитов и углеродного волокна позволяет создать стабильную систему, так как именно полиэлектролиты создают псевдожидкостный слой. Данный факт является преимуществом в сравнении с полностью твердотельными контактными электродами на основе проводящих полимеров [2–6]. В процессе измерений показатели потенциала фиксировались в режиме реального времени потенциостатом. Сравнение показателей проводилось между рабочим электродом и электродом сравнения.

Качество осаждений полиэлектролитов методом послойного нанесения в ходе модификации электродов контролировалось с применением методики кварцевого микровзвешивания. Методика заключалась в осаждении полиэлектролитов на золотой углерод, так же как и на углеродное покрытие. Проверка проводилась с целью выявления оптимального количества полиэлектролитных слоев. Так, подобранное число слоев – 16, при котором сборка стабильная, а также обладает гидратационной активностью и поэтому может служить внутренним электродным раствором в ИСЭ. Результаты измерений работы электродов на стандартных растворах солей представлены на рисунке.

Таким образом, значения, полученные в ходе электрохимических измерений на стандартных растворах с известной концентрацией близки к значениям Нернста, что свидетельствует о качественной работе электродов в диапазоне от  $10^{-5}$  до 1 М. Наилучшие углы наклона полученных кривых и данные по Нернсту представлены в таблице.

Таблица

Калибровочные значения ИСЭ

Ион, к которому селективен электрод	Наклон ИСЭ, мВ	Наклон по Нернсту, мВ
Ca <sup>2+</sup>	30,0	29,0 – 29,6
K <sup>+</sup>	59,5	58,0 – 59,0
Na <sup>+</sup>	58,3	58,0 – 59,0

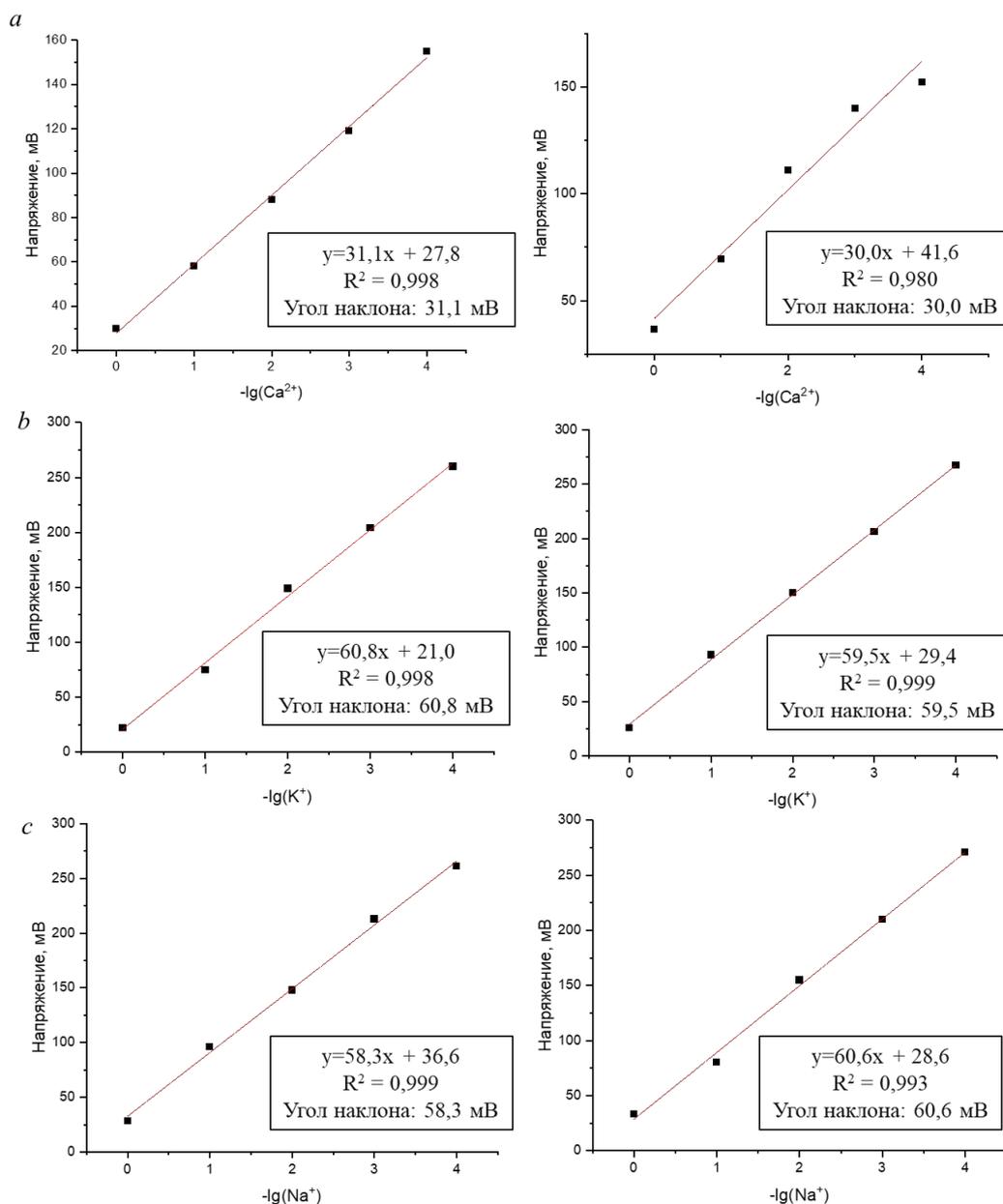


Рисунок. Калибровочные кривые оценки работы электродов на а) Ca<sup>2+</sup>; б) K<sup>+</sup>; в) Na<sup>+</sup>

Разработанная система ИСЭ может лежать в основе создания портативной платформы, и предположительно, сможет определять точную концентрацию ионов K<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>, Ca<sup>2+</sup> в биоаналитах в режиме реального времени. Электроды, модифицированные полиэлектролитами, смогут найти применение в самых различных областях, например, в экологии при измерении загрязнения среды или в медицине, при измерении концентраций различных соединений в биожидкостях. Созданная система из ИСЭ позволит на шаг приблизиться к портативной медицине, созданию носимых устройств. Такие устройства, благодаря их простоте, смогут быть использованы без специальных знаний и определенных сложных лабораторных условий. Все эти факторы позволят применять платформу в повседневной жизни. Таким образом, данная разработка нацелена на людей, предпочитающих активный образ жизни, а также спортсменов, которые смогут контролировать свои физико-химические показатели во время занятий и принимать необходимые меры для восстановления водно-солевого баланса организма, более осознанно подходить к питанию, а также планированию физических активностей. В совокупности знания позволят оптимизировать спортивные результаты и улучшить общее физиологическое состояние.

## Литература

1. Stekolshchikova A.A. et al. Thin and flexible ion sensors based on polyelectrolyte multilayers assembled onto the carbon adhesive tape //ACS omega. – 2019. – Т. 4. – №. 13. – С. 15421–15427.
2. Nikolaev K.G. et al. ElectroSens Platform with a Polyelectrolyte-Based Carbon Fiber Sensor for Point-of-Care Analysis of Zn in Blood and Urine //ACS omega. - 2020. – Т. 5. – №. 30. – С. 18987–18994.
3. Sena S.F. et al Measurement of ionized calcium in biological fluids: Ion-selective electrode method. Metallobiochemistry Part A // Methods in Enzymology. – 1988. – С. 320-334.
4. Yang Y., Gao W. et al Wearable and flexible electronics for continuous molecular monitoring // Chem. Soc. Rev. – 2019. – С. 1465-1491.
5. Brothers. M.C. et al. Achievements and Challenges for Real-Time Sensing of Analytes in Sweat within Wearable Platforms // Acc. Chem. Res. – 2019. – Т. 2. – №. 52. – С. 297–306.
6. Wenji Lan, Xu U. Zou. et al. Paper-Based Potentiometric Ion Sensing // Anal.Chem. – 2014. – Т. 86. – №. 19. – С. 9548–9553.

УДК 622.244

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО МЕТОДА В ОЦЕНКЕ СОДЕРЖАНИЯ ИНГИБИТОРА КОРРОЗИИ В ПЛАСТОВОЙ ВОДЕ И ВОДОНЕФТЯНОЙ ЭМУЛЬСИИ

Петрова М.С. (студент, Университет ИТМО), Беляев В.Е. (студент, Университет ИТМО), Домарева Н.П. (студент, Университет ИТМО)

Научный руководитель: к.г.-м.н., доцент Садовничий Р.В. (Университет ИТМО)

e-mail: [mary1349@mail.ru](mailto:mary1349@mail.ru)

*В работе рассмотрено использование электрохимического метода для оценки содержания в пластовой воде и водонефтяной эмульсии ингибиторов коррозии, применяемых для защиты металлических конструкций в нефтедобывающей промышленности. Описан способ сбора базы данных вольтамперных характеристик для нахождения концентрации ингибитора в водонефтяных флюидах.*

**Ключевые слова:** ингибитор коррозии, пластовая вода, водонефтяная эмульсия, вольтамперограмма, металлическая конструкция, сталь.

Интенсивная коррозия систем сбора и транспортировки водонефтяных смесей на многих месторождениях является важнейшей проблемой нефтедобывающих отраслей промышленности и влечет за собой значительные убытки для компаний. Помимо разрушения металлических труб и сопутствующих конструкций, убытки также приносит замена подобных сооружений в силу их подземного расположения. Применение ингибиторов коррозии является одним из самых эффективных решений данной проблемы, так как снижает риск разрушения металлических конструкций, взаимодействующих с агрессивными водонефтяными флюидами [1].

После подготовки нефтяной смеси к транспортировке она содержит множество различных химически-активных веществ и абразивных твёрдых частиц [2]. Помимо нефти, продукт перекачивания включает в себя пластовую воду, содержание которой в добываемой жидкости по разным данным составляет от 20 до 90%. Вследствие этого металлические конструкции сильно корродируют при соприкосновении с водонефтяной смесью. Решением является введение ингибитора коррозии в перекачиваемую жидкость.

Ингибитор коррозии — это вещество, которое обволакивает металлическую поверхность и создает на ней пленку, способную защитить металл от разрушения. Наиболее популярны в применении ингибиторы на основе азотсодержащих соединений. Защитный эффект проявляют алифатические амины и их соли, аминоспирты, аминокислоты, анилины, гидразиды, имидазы, акрилонитрилы, имины, азотсодержащие пятичленные гетероциклы [3].

Механизм защиты металлических конструкций от коррозии путём введения в систему ингибитора и образования пленки на поверхности металла наглядно продемонстрирован на рисунке 1.



Рис. 1. Действие ингибитора коррозии [4]

Актуальность данного исследования заключается в необходимости оценки концентрации ингибитора коррозии в водонефтяной смеси. Определение концентрации ингибиторов коррозии в водонефтяном флюиде может производиться различными способами. Для определения концентрации нами были использован электрохимический метод циклической вольтамперометрии.

Данный метод основан на исследовании зависимости силы тока от величины электродного потенциала (вольтамперограммы). При помощи данного высокочувствительного метода исследователь получает информацию о природе и содержании веществ, способных окисляться и восстанавливаться на электроде, а также о характере этого процесса.

В данном исследовании для изучения коррозии металлических конструкций были выбраны стальные электроды. Сталь обладает высокой чувствительностью, что благоприятно для проведения экспериментов. При помощи стальных электродов были исследованы образцы водонефтяной эмульсии и модель пластовой воды с различным содержанием ингибитора коррозии Азол 5048 марки Д.

Приготовленная модель пластовой воды аналогична по содержанию солей в пластовой воде, которая добывается вместе с нефтью. Нами были выбраны четыре концентрации ингибитора в исследуемых образцах. Пробоподготовка нефтяного флюида производилась при помощи обработки ультразвуком водонефтяной смеси с соотношением вода: нефть 50:50. Полученная в результате обработки ультразвуком эмульсия обладала достаточной электропроводностью для проведения измерений.

Результатом исследования стала собранная база данных вольтамперограмм (рис.2) образцов с различным содержанием ингибитора в нефтяном флюиде и пластовой воде. Благодаря сравнению полученных вольтамперных кривых мы можем судить о наличии ингибитора в образце, а также определять его приблизительную концентрацию. Полученные результаты позволяют сделать вывод о перспективности использования электрохимических методов в оценке содержания ингибиторов коррозии в пластовой воде и водонефтяной смеси, в том числе в поточном режиме.

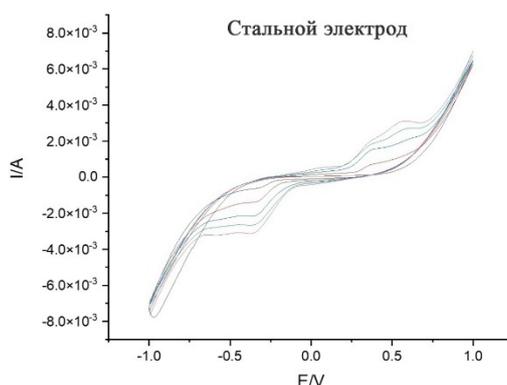


Рис. 2. Вольтамперограмма пластовой воды с содержанием ингибитора  $10 \text{ г/м}^3$  (применены стальные электроды)

## Литература

1. Розенфельд И.Л. Ингибиторы коррозии. – М.: Химия. – 1977. – 352 с.
2. Bentiss F, Traisnel M, Lagrenee M. Corrosion Science. – 2000. – Т. 42. – 127 с.
3. Булачев Н.Д. Методы борьбы с коррозией металлов в условиях нефтедобычи. The Second European Conference on Earth Sciences № 5. – 2015. – С. 56–65.
4. What are Corrosion Inhibitors? [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://penriteoil.com.au/knowledgecentre/Coolant%20Inhibitor%20Packs/149/what-are-corrosion-inhibitors/289> (дата обращения: 02.10.2022).

УДК 544.252.22

## СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ФОРМИРОВАНИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ СТРУКТУР В ФОТОАКТИВНОМ ХИРАЛЬНОМ НЕМАТИЧЕСКОМ ЖИДКОМ КРИСТАЛЛЕ

**Пивень А.О.** (студент, Университет ИТМО), **Матюшова О.А.** (студент, Университет ИТМО), **Зырянова П.И.** (студент, Университет ИТМО), **Носкова У.В.** (студент, Университет ИТМО)  
**Научный руководитель: к. ф.-м.н., Орлова Т.** (Университет ИТМО)  
*e-mail: anastasiaaipiven@gmail.com*

*В работе представлены результаты статистического анализа формирования динамических ориентационно-неоднородных локализованных структур в тонких пленках светочувствительных хиральных нематиков путем индуцирования фотохимического превращения молекул хиральной органической примеси.*

**Ключевые слова:** жидкие кристаллы, хиральные нематики, локализованные структуры, светоиндуцированная генерация, оптические и фотонные приложения.

В настоящее время локализованные топологические структуры в хиральных нематических жидких кристаллах нашли широкое применение в оптике и фотонике в качестве составляющих оптических элементов. Например, такие структуры использовались как перестраиваемые линзы для фокусировки и дефокусировки лазерных пучков и изменения направления их распространения [1]. Кроме того, пространственно-вариативные двулучепреломляющие структуры были продемонстрированы в роли микроскопических оптических вихревых генераторов с возможностями записи и хранения информации на молекулярном уровне [2]. Упорядоченный массив локализованных структур в нематических жидких кристаллах может быть использован как двумерная дифракционная решетка, позволяющая сформировать управляемые фазовые сингулярности в дифрагированных лазерных пучках [3].

В предыдущих исследованиях была изучена генерация разнообразных статичных топологических структур путем оптически индуцированной локальной переориентации жидкокристаллических молекул в фотопассивных хиральных нематиках с помощью сфокусированных Гауссовых световых пучков [4]. Новый метод, основанный на светоиндуцированном управлении шагом холестерической спирали, позволяет создавать различные как статичные, так и уникальные динамические структуры при помощи сфокусированного ультрафиолетового Гауссова пучка мощностью всего в десятки нановатт [5]. Целью нашего исследования является детальное изучение взаимосвязи между топологией и поведением светоиндуцированных локализованных структур в тонких пленках фотоактивных хиральных нематиков.

В настоящей работе мы демонстрируем получение динамических локализованных структур и управление их поведением, индуцируя фотохимическое превращение хиральных примесных молекул в сфокусированном лазерном пучке. Это, в свою очередь, вызывает локальное уменьшение шага холестерической спирали и формирование топологических сложных структур как результат комбинированного эффекта хиральности жидкого кристалла, условий сцепления на подложках и локализованного освещения [5, 6].

Целью проведенного эксперимента является установление статистики формирования динамических локализованных структур  $R_1$  и  $R_2$  из статичной структуры  $S_2$  при увеличении падающей на образец мощности записывающего Гауссова пучка в пленках фрустрированного хирального нематического жидкого кристалла.

В качестве образца в проведенном исследовании использовали нематический жидкий кристалл E7, в который была добавлена светочувствительная молекулярная примесь. Эта легирующая добавка эффективно поглощает свет в ближнем ультрафиолетовом диапазоне около 375 нм. При сфокусированном освещении локальной области образца происходит фотохимическая реакция, сопровождающаяся изомеризацией молекул и изменению закручивающей способности примеси, что приводит к уменьшению шага холестерической спирали. При этом происходит локальный срыв фрустрированного состояния хирального нематического жидкого кристалла и образуется локализованная хиральная структура.

Начальным этапом эксперимента являлось создание статичной локализованной структуры  $S_2$ , стабильно существующей при мощности Гауссова светового пучка 18 нВт. Затем после 15 минут ожидания, что соответствует времени достижения равновесного состояния для локализованных хиральных структур, мощность увеличивалась до 20 нВт и наблюдалось самопроизвольное формирование динамических структур  $R_1$  и  $R_2$ . Эксперимент повторили 20 раз для структур  $S_2$  с противоположной хиральностью.

В результате эксперимента был проведен статистический анализ самопроизвольного формирования динамических структур  $R_1$  и  $R_2$  из статичной структуры  $S_2$ . Было установлено, что, в случае правозакрученной начальной структуры  $S_2$ , формирование динамической структуры  $R_1$  происходит в 7 из 10 случаев, а структуры  $R_2$ , соответственно, в 3 из 10 случаев (процесс формирования показан на рисунке). При генерации из левозакрученной начальной структуры  $S_2$ , формирование динамической структуры  $R_1$  происходит в 6 из 10 случаев, а структуры  $R_2$ , соответственно, в 4 из 10 случаев, как указано в Таблице. В то время как вращательное поведение структуры  $R_1$  уже известно, динамическое поведение структуры  $R_2$  остается неизученным и требует дальнейших исследований.

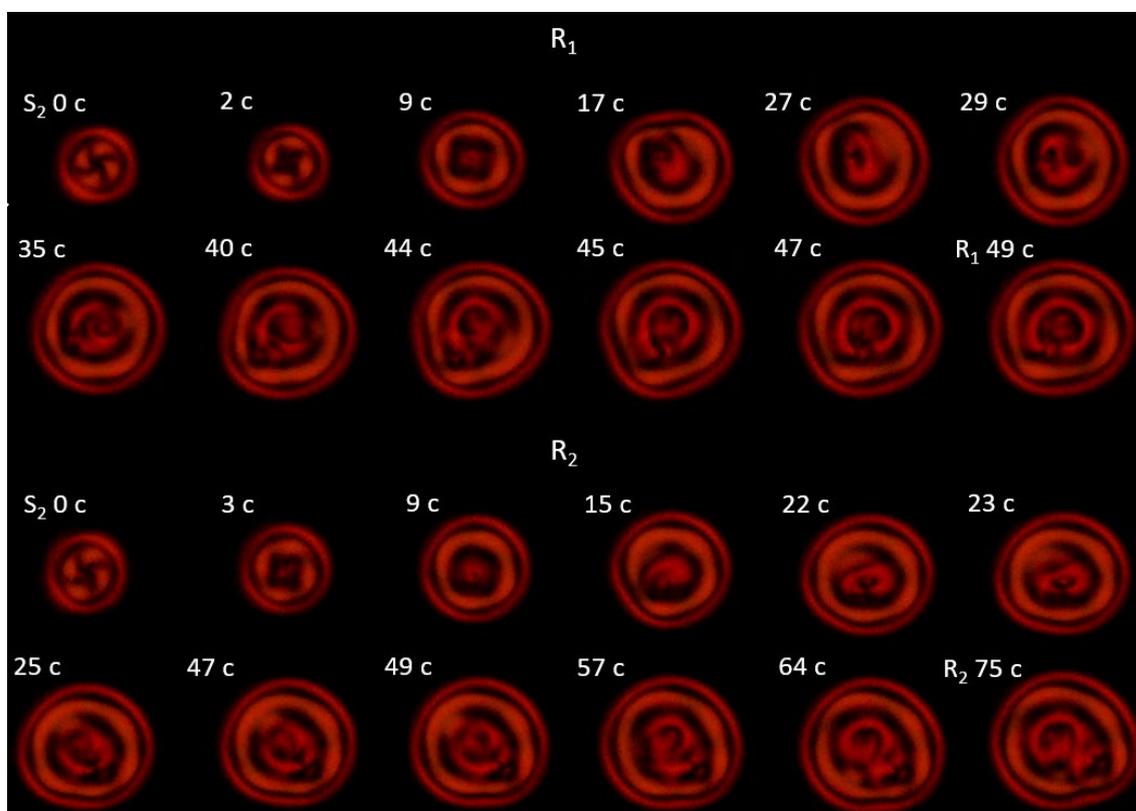


Рисунок. Формирование динамических структур  $R_1$  и  $R_2$  из правозакрученной статичной структуры  $S_2$

## Результат статистического анализа

	Начальная правозакрученная структура $S_2$	Начальная левозакрученная структура $S_2$
Сформированная динамическая структура $R_1$	7/10	6/10
Сформированная динамическая структура $R_2$	3/10	4/10

Актуальность наших исследований обусловлена интенсивными научно-техническими разработками в области перестраиваемых рефрактивных, дифракционных и сингулярных оптических элементов, ячеек оптической памяти, устройств для структурирования световых пучков [1, 3], а также элементов транспортировки микро- и наночастиц [5, 7]. Полученные микроразмерные двулучепреломляющие структуры могут быть использованы, например, для создания многофункционального материала с произвольным набором микроскопических линз или дефлекторов; в качестве генераторов оптических вихрей; для перспективного многофункционального материала в области мягкой роботики.

## Литература

1. Hess A.J., Poy G., Tai J.B., Zumer S., Smalyukh I.I. Control of Light by Topological Solitons in Soft Chiral Birefringent Media // Physical Review X. – 2020. – №. 10. DOI: 10.1103/PhysRevX.10.031042.
2. Yang B., Brasselet E. Arbitrary vortex arrays realized from optical winding of frustrated chiral liquid crystals // Journal of the Optical Society of America. – 2013. – №. 15. DOI:10.1088/2040-8978/15/4/044021.
3. Ackerman P.J., Qi Z., Smalyukh I.I. Optical generation of crystalline, quasicrystalline, and arbitrary arrays of torons in confined cholesteric liquid crystals for patterning of optical vortices in laser beams // Physical Review E. – 2012. – №. 86. DOI:10.1103/PHYSREVE.86.021703.
4. Smalyukh I.I., Lansac Y., Clark N.A., Trivedi R.P. Three-dimensional structure and multistable optical switching of triple-twisted particle-like excitations in anisotropic fluids // Nature Materials. – 2010. – №. 9. – С. 139–145.
5. Orlova T., Lancia F., Lossert C., Lamsaard S., Katsonis N., Brasselet E. Revolving supramolecular chiral structures powered by light in nanomotor-doped liquid crystals // Nature Nanotechnology. – 2018. – №. 13. – С. 304–308.
6. Loussert C., Brasselet E. Multiple chiral topological states in liquid crystals from unstructured light beams // Applied Physics Letters. – 2014. – №. 104. DOI:10.1063/1.4864096.
7. Evans J.S., Ackerman P.J., Broer D.J., Lagemaat J., Smalyukh I.I. Optical generation, templating, and polymerization of three-dimensional arrays of liquid-crystal defects decorated by plasmonic nanoparticles // Physical Review E. – 2013. – №. 87. DOI:10.1103/PHYSREVE.87.032503.

УДК 004.896

### АВТОМАТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА СМЕНЫ РАБОЧЕГО ИНСТРУМЕНТА МАНИПУЛЯЦИОННОГО УСТРОЙСТВА В ЗАДАЧАХ ФОТОКАТАЛИЗА

**Потапов В.В.** (студент, Университет ИТМО), **Юрова В.Ю.** (студент, Университет ИТМО),  
**Лисина Е.И.** (студент, Университет ИТМО), **Рудакова М.Д.** (студент, Университет ИТМО)

**Научный руководитель:** к.т.н., доцент **Громов В.С.** (Университет ИТМО)

*e-mail:* [vlvlpotapov@gmail.com](mailto:vlvlpotapov@gmail.com)

*В данной статье рассматривается идея автоматической системы смены рабочего инструмента манипуляционного устройства для автоматизации процесса исследования фотокаталитических свойств материала. А также рассматриваются операции необходимые для автоматизации данного фотокатализа.*

**Ключевые слова:** автоматизация, химическая лаборатория, фотокатализ, мобильный робот, КУКА.

Перед группой студентов университета ИТМО была поставлена цель, заключающаяся в автоматизации процесса фотокатализа, который предназначен для исследования фотокаталитических свойств материала. Автоматизация в данном случае необходима для многократного повторения всего процесса, для обеспечения работы в темном помещении и

высокой точности в действиях, а также для облегчения и полной замены труда сотрудников лаборатории.

### Процесс автоматизации

В химической лаборатории имеется мобильный робот KUKA KMR iiwa (рис.1), при помощи которого будет достигаться изначально поставленная цель. В его состав входят манипуляционная рука, которая будет взаимодействовать с объектами и мобильная платформа, которая будет перемещаться от одной рабочей станции к другим в пределах одного помещения. Следует отметить некоторые заявленные характеристики робота: максимальная грузоподъемность руки составляет 14 кг, радиус действия – 82 см, максимальная выдерживаемая нагрузка платформы - до 200 кг [1].

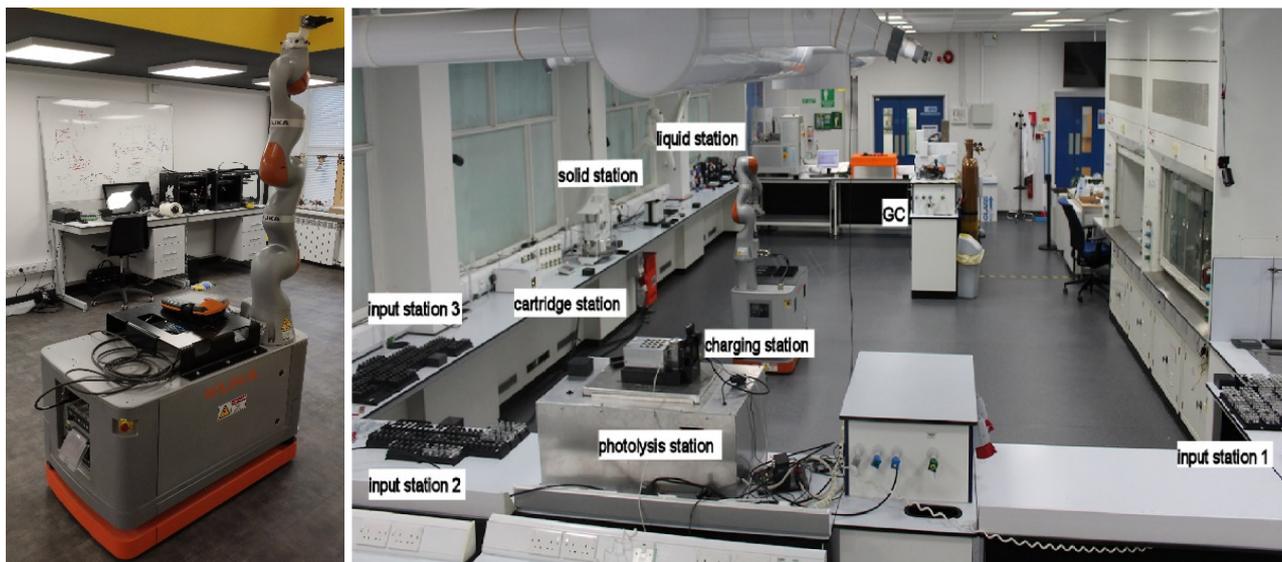


Рис. 1. Автономный робот *KMR iiwa* от компании *KUKA* (слева), роботизированная химическая лаборатория, состоящая из нескольких рабочих станций (справа)

Было найдено интересное решение, реализованное в автоматизации фотокатализа в лаборатории (рис.1) Ливерпульского университета. В этой публикации упоминается решение проблемы позиционирования робота при помощи калибровки неподвижным черным кубом, расположенным на каждой рабочей станции. Таким способом точность позиционирования была увеличена с  $\pm 10$  мм и  $\pm 2.5$  до  $\pm 0.12$  мм и  $\pm 0.005$  [2]. И ещё одним интересным элементом автоматизации, найденного в статье, было использование маркеров (QR-кодов) на станциях, предназначенных для понимания роботом какие операции необходимо совершить при подъезде к одной из них [3].

Перед тем как приступить к автоматизации данного химического исследования, необходимо проанализировать какие основные физические действия будут включены в процесс и с какими предметами придется взаимодействовать в ходе всего эксперимента. Одним из действий, с которым предстоит столкнуться роботу, является дозирование жидкости при помощи пипеточного дозатора (рис.2,а) в различные емкости, такие как стеклянная колба, кювета и эппендорфа. И также роботу необходимо будет совершать операции захвата и перемещения емкостей в соответствующие оборудования, показанные на рисунке 2.

Исходя из перечисленных выше операций, в качестве рабочих инструментов, для манипуляционной руки следует рассмотреть: захват для пипеточного дозатора, способный держать его и нажимать на соответствующую клавишу дозирования, затем пальцевый захват, приводящийся в движение за счет электродвигателя и также пневматический вакуумный захват. На рисунке 3 представлена спроектированная система дозирования в Миланском политехническом университете. Преимущество такой системы в том, что задействована только одна рука, и также стоит заметить, что в данном решении для нажатия на клавишу задействована пневматическая система, которая находится вне робота (рис.3).

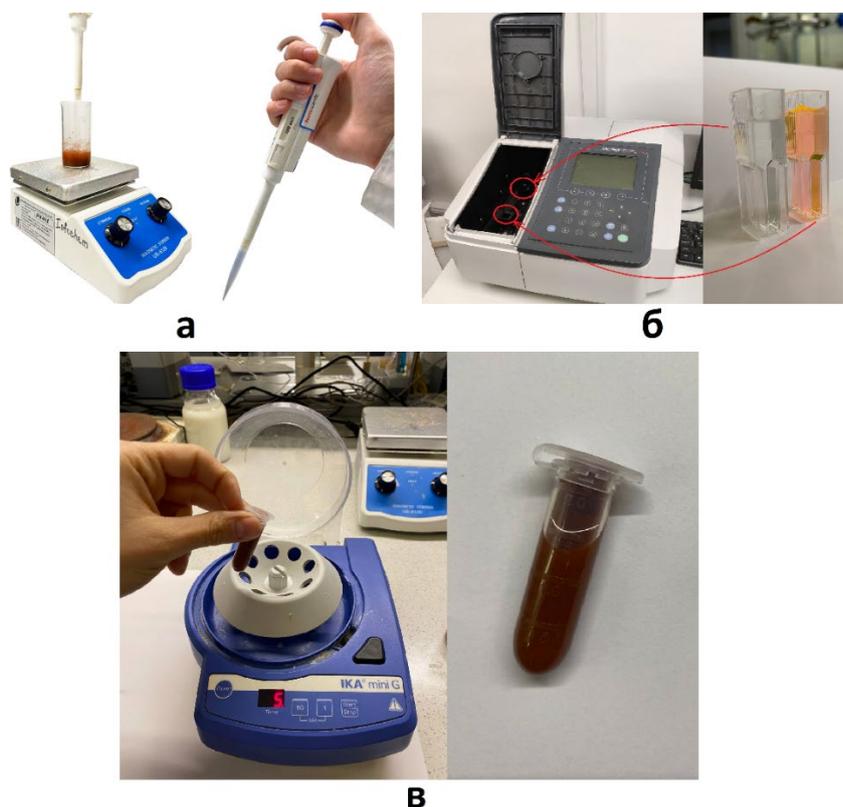


Рис. 2. Экспериментальные станции: а) колба с раствором, расположенная на магнитной мешалке и пипет-дозатор, б) спектрофотометр и 2 кюветы, в) центрифуга и пробирка типа Эппендорф

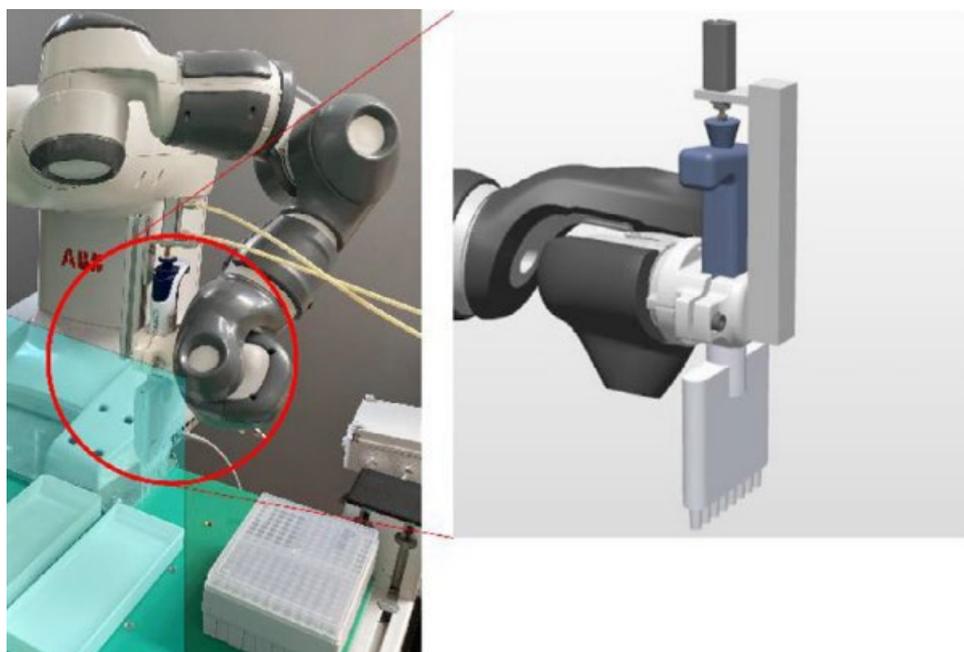


Рис. 3. Спроектированная система дозирования: установлена на работе ABB YuMi (слева), визуализация в программе ABB RobotStudio (справа) [4]

Под наши задачи было найдено гибкое трехпальцевое захватное устройство (рис.4). Преимуществом выбранного варианта является способность задавать различные ориентации пальцев захвата, и благодаря такой конструкции, происходит автоматическое центрирование цилиндрических объектов. И в качестве вакуумного захвата была найдена модель, представленная на рисунке 4 (справа), подходящая для работы как с гладкими, так и с пористыми поверхностями и не требующая к себе подвода воздуха, т.к. является электрической, что является преимуществом перед пневматическим типом устройства.



Рис. 4. Трехпальцевый захват OnRobot 3FG15 (слева) и электрический вакуумный захват Robotiq Epick (справа)

Исходя из того, что у модели робота *KUKA KMR* имеется только одна рабочая манипуляционная рука, а необходимых захватов – несколько, то для облегчения и упрощения взаимодействия с различными предметами и оборудованием имеет смысл рассмотреть автоматическую систему смены рабочего инструмента. Стоит отметить, что набор инструментов целесообразно закрепить на подвижной платформе робота с целью экономии времени на передвижении. Очевидно, что в данной системе все используемые инструменты должны иметь одинаковый механический и электрический интерфейсы подключения к энд-эффектору робота. Одной из компаний, занимающихся производством таких систем, является *Nordbo Robotics*. Принцип устройства наглядно виден на рисунке 5,а. Можно заметить, что система центрируется за счет трех металлических штырей и крепится к ответной части при помощи электромагнита, расположенного в центре [5]. Передача электрического сигнала осуществляется путем соединения контактных площадок (выделены красным цветом на рисунке 5,а). Также найдено решение от компании *TripleA robotics* (рис.5). Отличие от вышеупомянутого экземпляра состоит в том, что крепление происходит за счет механической защелки, которая срабатывает при вынимании и вставки рабочего инструмента в исходное крепление станции [6].

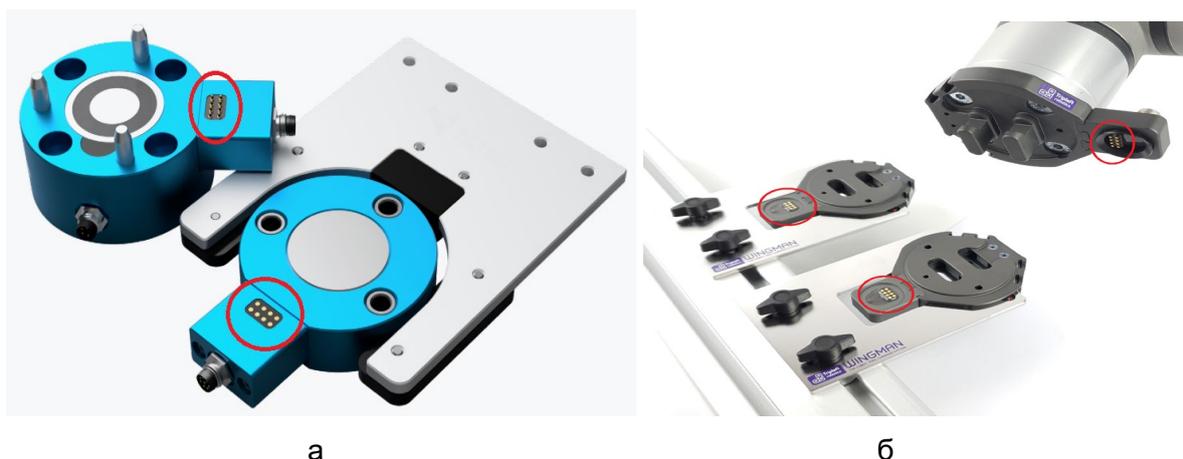


Рис. 5. Система автоматической смены захватного устройства от компаний:  
а) Nordbo Robotics; б) TripleA robotics

В данной обзорной статье были рассмотрены подготовительные этапы автоматизации процесса фотокатализа, в ходе которых выяснилось, что для дальнейшего упрощения физического взаимодействия с элементами рабочего пространства необходимо интегрировать систему автоматической смены захватного устройства для манипуляционной руки.

В будущем планируется создание LaaS (англ. Lab as a Service), т.е. предоставление химической лаборатории в качестве услуги/сервиса с налаженным автоматизированным процессом. И планируется внедрение машинного обучения в данную область исследования, при помощи которой будет происходить анализ созданной базы данных синтеза и его дальнейшая оптимизация.

### Литература

1. KUKA KMR iiwa Технические характеристики. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: [https://pdf.directindustry.com/pdf/kuka-ag/kuka-kmr-iiwa/17587-749979-\\_2.html](https://pdf.directindustry.com/pdf/kuka-ag/kuka-kmr-iiwa/17587-749979-_2.html) (дата обращения: 15.10.2022).
2. Burger B., Maffettone P.M., Gusev V.V., Aitchison C.M., Bai Y. A mobile robotic chemist // Журнал Nature. – 2020. – С. 237–241.
3. Wolf A., Woltonc D., Trapl J. Towards robotic laboratory automation Plug & Play // Журнал Elsevier. – 2022. – С. 18–24.
4. Zanchettin A.M., Facciotti F. A collaborative robotic solution to partly automate SARS-CoV-2 serological tests in small facilities // Журнал Nature. – 2020. – С. 100–103.
5. Magnetic Tool Changer NTC-E10 Datasheet. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.tdstech.com/wp-content/uploads/2022/03/MAGNET-Tool-Changer.pdf> (дата обращения: 15.10.2022).
6. Tool Changer TripleA Robotics Datasheet. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: [http://triplea-robotics.com/wp-content/uploads/TripleA-robotics\\_WINGMAN\\_DATA-SHEET\\_Tool-Changer\\_V1\\_6.pdf](http://triplea-robotics.com/wp-content/uploads/TripleA-robotics_WINGMAN_DATA-SHEET_Tool-Changer_V1_6.pdf) (дата обращения: 15.10.2022).

УДК 004.896

### **ПЕРСПЕКТИВЫ РОБОТИЗАЦИИ ЭЛЕКТРООРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА НА ОСНОВЕ НИКЕЛЕВЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ И ПЕРЕМЕННОГО ТОКА**

**Рудакова М.Д.** (студент, Университет ИТМО), **Лисина Е.И.** (студент, Университет ИТМО),

**Потапов В.В.** (студент, Университет ИТМО), **Скорб Е.В.** (Университет ИТМО)

**Научный руководитель: к.т.н., доцент Громов В.С.** (Университет ИТМО)

*e-mail:* [rudakova@infochemistry.ru](mailto:rudakova@infochemistry.ru)

*В работе рассмотрены примеры полной автоматизации различных химических синтезов: создание роботов, способных заменить человека в лаборатории; оптимизация процессов при помощи методов машинного обучения в анализе данных. Запланировано создание собственной беспилотной лаборатории для более подробного изучения механизмов никель-катализируемых реакций кросс-сочетания при помощи автономного роботизированного поиска.*

**Ключевые слова:** *роботизация, автономная лаборатория, оптимизация, робот-химик, электроорганический синтез, электрокатализ.*

Роботы активно внедряются во все сферы нашей жизни, не исключением стала и химическая лаборатория. В отличие от человека робот не ошибается, работает 24/7, без больничных и отпусков, может работать в темноте, позволяя проводить эксперименты, чувствительные к наличию света.

Роботы-манипуляторы способны выполнять функции аналогичные функциям человеческой руки: взвешивание, дозирование, смешение реагентов, транспортировка образцов к дополнительным модулям.

Помимо этого, робот способен самостоятельно решить, что делать дальше. То есть он адаптируется на основании полученных результатов и планирует следующий эксперимент.

Когда мы имеем дело со сложной многокомпонентной системой, человек не может оценить влияние каждого параметра, для этого нужно провести миллионы экспериментов. Робот же работает непрерывно и способен эффективнее справиться с этой задачей, используя алгоритмы искусственного интеллекта.

Ученые из Ливерпульского университета автоматизировали таким образом процесс фотокатализа – получение водорода из воды под действием света и катализаторов. Робот провел 688 экспериментов за 8 дней и нашел оптимальные условия проведения синтеза [1].

Трудности возникают, когда существуют две и более конфликтующие целевые функции, например электропроводность и температура обработки плёнок. Горение плёнок целесообразней проводить при более низких температурах, чтобы использовать недорогие полимерные подложки. Однако проводимость пленки падает при уменьшении температуры обработки. Возникает вопрос, насколько проводимость может быть велика, а температура обработки мала?

Ученые из университета Британской Колумбии использовали беспилотную лабораторию, чтобы определить компромиссные соотношения между этими функциями, оптимальными по Парето [2].

Ученые из Массачусетского Технологического создали роботизированную платформу для синтеза органических соединений, имеющих медицинское значение: аспирин, секнидазол, лидокаин и др. В этом случае манипулятор собирает модульные технологические блоки (реакторы и сепараторы) в непрерывный поток в соответствии с желаемой конфигурацией процесса. Робот также подключает линии реагентов и управляемые компьютером насосы к входным отверстиям реактора. Когда синтез завершится, система промывает линии очищающим растворителем, а робот-манипулятор отсоединяет линии реагентов и перемещает технологические модули в соответствующие места хранения [3].

Целью наших исследований является роботизация электроорганического синтеза на основе никелевых катализаторов и переменного тока, оптимизация условий проведения реакций для получения максимального выхода целевого продукта.

На сегодняшний день механизмы никель-катализируемых реакций кросс-сочетания не в полной мере изучены: не определены оптимальные условия проведения реакций, к которым относится подбор лигандов и параметров тока (частоты, пикового напряжения, формы волны) [4]. Роботизация процесса подбора условий позволит существенно сократить время на оптимизацию и исследование механизмов, что позволит в дальнейшем масштабировать процессы до промышленного уровня.



а



б



в

Рисунок. Проведение эксперимента человеком и предназначенный для этого робот: а) подключение к электродам электрохимической ячейки источника переменного тока и осциллографа; б) настройка параметров переменного тока; в) мобильный робот KMR iiwa

В качестве начальных условий функционирования робототехнического комплекса необходимо подготовить экспериментальную установку, которая состоит из источника переменного тока, осциллографа, низкоомного резистора и электрохимической ячейки. Электрохимическая ячейка собирается из небольшого стеклянного стакана, крышки с вырезанными в ней отверстиями для электродов и двух цилиндрических графитовых электродов (рисунок,а). В ячейку через шприц подается аргон для создания инертной атмосферы.

Методика проведения эксперимента следующая. Сначала взвешиваем и переносим в стакан электролит LiBr и катализатор:  $\text{NiBr}_2 \cdot \text{DME}$  (DME – диметоксиэтан), лиганд (ди-трет-бутилбипиридин/пиридин). С помощью шприца отбираем 4 мл растворителя ДМФА (диметилформамид) и добавляем в стакан. Включаем мешалку (1400 об/мин).

Спустя минуту с помощью дозатора добавляем к смеси реагенты: морфолин и бромбензол или 1-бромнафталин. Закрываем крышкой стакан, погружая электроды в раствор на 1 см. Затем включаем источник электрического тока, настраиваем параметры переменного тока: частоту, пиковое напряжение, форму волны (рисунок,б).

Через 4 часа выключаем источник, отбираем 4 мл продукта и переливаем в пробирку. К раствору добавляем 2 части воды и 1 часть смеси гексана и этил ацетата (соотношение 1:1), встряхиваем минуту и с помощью шприца отбираем нижнюю фазу. К ней добавляем сульфат калия для избавления от остатков воды в смеси. Полученную смесь исследуем методом ВЭЖХ.

Для выполнения вышеперечисленных задач предполагается использовать мобильный робот KUKA (рисунок,в). KMR iiwa – это комбинация чувствительного робота легкой конструкции LBR iiwa и мобильной гибкой платформы [5]. Робот осуществляет дозирование как твердых, так и жидких веществ; контролирует параметры переменного тока, скорость вращения мешалки; отбирает пробы на анализ. За счет подвижности платформы возможно транспортировать образцы к хроматографической колонке и другим дополнительным модулям. Предполагается, что робот будет задействован и в других процессах, таким образом, он сможет свободно перемещаться по лаборатории, обеспечивая ее автономность и многозадачность.

Планируется оптимизировать систему, сделать ее способной к самообучению, используя для этого методы машинного обучения в анализе данных. Робот, получая данные о выходе целевого продукта реакции и отталкиваясь от них, будет планировать следующий эксперимент: подберет оптимальные параметры тока и выберет лиганд.

Таким образом, за счет автономного роботизированного поиска возможно существенно сократить время на исследование механизмов реакций кросс-сочетания, освободив при этом человека для поиска новых идей.

В дальнейшем эта система может быть применена ко многим другим реакциям, катализируемым электричеством.

## Литература

1. Burger B., Maffettone Ph.M., Gusev V.V. et al. A mobile robotic chemist // *Nature*. – 2020. – V. 583. – Pp. 237–241.
2. MacLeod B.P., Parlane F.G.L., Rupnow C.C. et al. A self-driving laboratory advances the Pareto front for material properties // *Nature Communications*. – 2022. – V. 13. – №. 995. <https://doi.org/10.1038/s41467-022-28580-6>.
3. Coley C.W., Thomas III D.A., Lummiss J.A.M. et al. A robotic platform for flow synthesis of organic compounds informed by AI planning // *Science*. – 2019. – V. 365. – №. 6453. DOI: 10.1126/science.aax1566.
4. Evgeniy O. Bortnikov and Sergey N. Semenov Coupling of Alternating Current to Transition-Metal Catalysis: Examples of Nickel-Catalyzed Cross-Coupling // *The Journal of Organic Chemistry*. – 2021. – V. 86. – №. 1. – Pp. 782-793. DOI: 10.1021/acs.joc.0c02350.
5. Mobile robots from KUKA. KMR iiwa. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.kuka.com/en-us/products/mobility/mobile-robot-systems/kmr-iiwa> (дата обращения: 10.10.2022).

УДК 62.523

## РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ ДЛЯ МАНИПУЛЯТОРА

Соловьёв М.Р. (студент, ИТМО), Николаев А.А. (студент, ИТМО),

Вахрушев Б.С. (магистрант, ИТМО), Матюшова О.А. (студент, ИТМО)

Научный руководитель: к.т.н., доцент Цветкова М.Х. (Университет ИТМО)

e-mail: [onisoris@yandex.ru](mailto:onisoris@yandex.ru)

*Разрабатываемая система использует метод параметров Денавита-Хартенберга, позволяющий сократить количество параметров, которые нужны для задания однозначного положения и ориентации твердого тела в пространстве с шести до четырех. Система управления испытывается на манипуляторе, состоящим из шести сочленений, которые приводятся в движение шаговыми двигателями.*

**Ключевые слова:** манипулятор, автоматизация, teensy, шаговые двигатели, 3D-печать, параметры Денавита-Хартенберга.

В наше время возрастает потребность в автоматизации повседневных задач, экспериментов в науке, в сокращении эксплуатационных расходов на производствах, в чём заключается основа мотивации развития в сфере робототехники. Роботы позволяют освободить людей от выполнения простых технологических операций, при этом, они выполняют задачи эффективнее и стабильнее. Основные производители роботов-манипуляторов в промышленности — компании KUKA, HANWHA, FANUC. Кроме того, существуют модели, которые предназначены для работы с людьми, например, Universal Robots [1–3]. К сожалению, для задач в образовании в университетах такие устройства недостаточно актуальны, поскольку они имеют высокую цену.

В данной статье ставится задача разработки системы управления для шестиосевого манипулятора AR3.

Конструкция манипулятора изготавливалась на основе проекта в открытом доступе. Манипулятор имеет набор энкодеров, которые позволяют следить за углами, звенья изготовлены из фрезерованного алюминия и приводятся в движение с помощью ременного привода.

### Определение параметров Денавита-Хартенберга

Метод Денавита-Хартенберга позволяет сократить количество координат, однозначно определяющих систему координат в пространстве с шести до четырех:

$a_i$  — расстояние вдоль оси  $x_i$  от  $z_{i-1}$  до  $z_i$ ;

$\alpha_i$  — угол вокруг оси  $x_i$  от  $z_{i-1}$  до  $z_i$ ;

$d_i$  — расстояние вдоль оси  $z_{i-1}$  от  $x_{i-1}$  до  $x_i$ ;

$\theta_i$  — угол вокруг оси  $z_{i-1}$  до  $x_i$ .

Получившиеся параметры, которые используются в управлении манипулятором, представлены в таблице 1.

Таблица 1

Параметры Денавита-Хартенберга

№	$a_i$ , [рад]	$\alpha_i$ , [рад]	$d_i$ , [м]	$\theta_i$ , [рад]
1	0.0642	$-\frac{\pi}{2}$	0.16977	$\theta_1$
2	0.305	0	0	$\theta_2$
3	0	$\frac{\pi}{2}$	0	$\theta_3 - \frac{\pi}{2}$
4	0	$-\frac{\pi}{2}$	-0.22263	$\theta_4$
5	0	$\frac{\pi}{2}$	0	$\theta_5$
6	0	0	-0.03625	$\theta_6 + \pi$

Прямая задача кинематики (ПЗК) заключается в расчете шести координат по положению и ориентации системы координат, нулевая точка которой связана с последним звеном манипулятора, при этом расчет происходит на основе обобщенных координат манипулятора, в нашем случае в качестве обобщенных координат взяты углы между звеньями. В алгоритме, использованном в данном манипуляторе, используются матричные вычисления. На основе параметров Денавита-Хартенберга строятся матрицы однородного преобразования по формуле из [1]:

$$T_i = \begin{bmatrix} \cos(\theta_i) & -\sin(\theta_i)\cos(\alpha_i) & \sin(\theta_i)\sin(\alpha_i) & \alpha_i\cos(\theta_i) \\ \sin(\theta_i) & \cos(\theta_i)\cos(\alpha_i) & -\cos(\theta_i)\sin(\alpha_i) & \alpha_i\sin(\theta_i) \\ 0 & \sin(\alpha_i) & \cos(\alpha_i) & d_i \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Далее для нахождения итоговой матрицы, связывающей все системы координат в нашем манипуляторе, перемножаются все матрицы однородного преобразования:

$$T_6^0 = T_1T_2T_3T_4T_5T_6 = \begin{bmatrix} R_6^0 & p_6^0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

где матрица  $R_6^0$  – матрица вращения, а  $p_6^0$  – вектор, содержащий координаты схвата манипулятора (нуля последней системы координат) в глобальной системе координат.

Если с вектором  $p_6^0$  ясно, что

$$p_6^0 = \begin{bmatrix} x_6^0 \\ y_6^0 \\ z_6^0 \end{bmatrix},$$

где содержатся декартовы координаты, то, чтобы достать углы Эйлера из  $R_6^0$ , нужно провести некоторые расчеты:

$$R_6^0 = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ r_{21} & r_{22} & r_{23} \\ r_{31} & r_{32} & r_{33} \end{bmatrix},$$

если  $r_{33} \neq \pm 1$ , то:

$$\theta = \text{atan2}\left(\pm\sqrt{1-r_{33}^2}, r_{33}\right),$$

$$\phi = \text{atan2}(\pm r_{23}, \pm r_{13}),$$

$$\psi = \text{atan2}(\pm r_{32}, \mp r_{31}),$$

если  $r_{33} = 1$ , то:

$$\phi + \psi = \text{atan2}(r_{21}, r_{11}),$$

если  $r_{33} = -1$ , то:

$$\phi - \psi = \text{atan2}(-r_{12}, -r_{11}).$$

Далее  $\psi$  принимаем за 0 и решаем уравнения относительно  $\phi$  (рис.1).

Обратная задача кинематики (ОЗК). Исходными данными для ОЗК являются параметры Денавита-Хартенберга, три линейные координаты схвата или три угловые координаты.

Решается ПЗК для уточнения координат последнего сочленения.

Далее производится решение ОЗК по положению, находятся координаты четвертого сочленения по данным из ПЗК и далее по алгоритму, изложенному в [1] считаются первые три обобщенные координаты.



Рис. 1. UML схема состояний для ПЗК

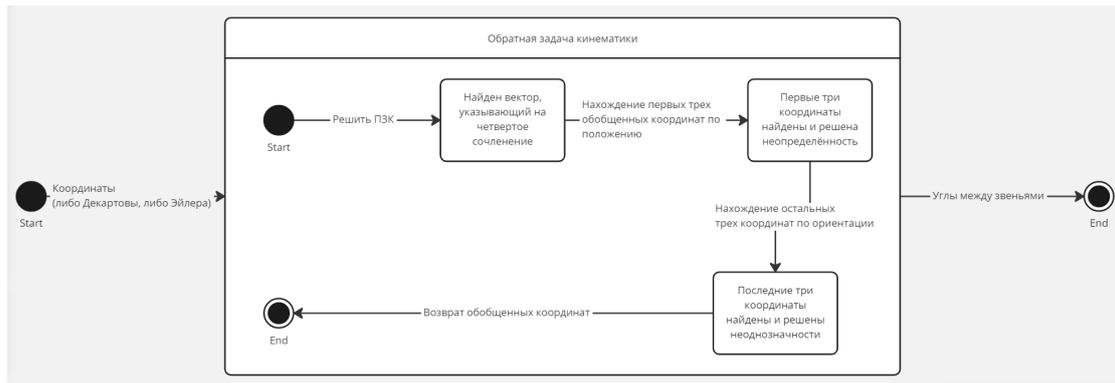


Рис. 2. UML схема состояний для ОЗК

При решении ОЗК по ориентации находятся остальные три обобщенные координаты (рис.2). Приложение для управления манипулятором написано на языке Python. Все расчеты по ограничению поворота звеньев, ОЗК, ПЗК, производятся на компьютере, далее команды по USB кабелю передаются на микроконтроллер teensy, который управляет шаговыми двигателями манипулятора и получает данные с энкодеров и концевых датчиков.

### Проверка алгоритма

На картинках ниже представлен эксперимент по перемещению манипулятора в координаты  $x_1 = -40$  мм,  $y_1 = 231$  мм,  $z_1 = 502$  мм и в  $x_2 = -0,4$  мм,  $y_2 = -234$  мм,  $z_2 = 502$  мм, достижение нужных точек замерялось с помощью лазерной указки и линейки.

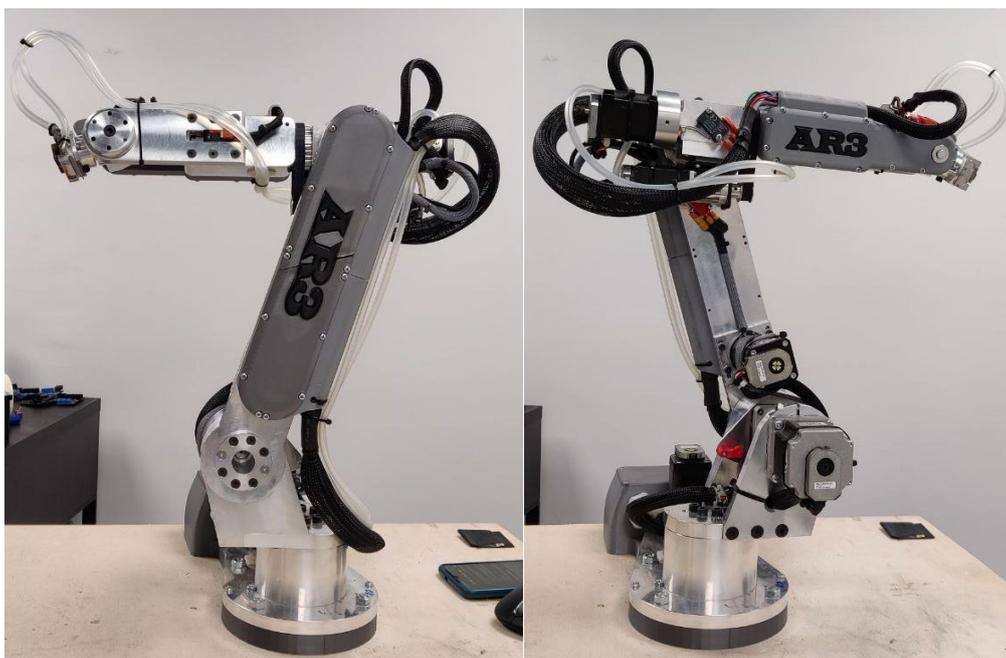


Рис. 3. Проведение эксперимента

**Литература**

1. Борисов О.И., Громов В.С., Пыркин А.А. Методы управления робототехническими приложениями // СПб.: Университет ИТМО. – 2016. – 108 с.
2. Spong M.W. et al. Robot modeling and control. – New York: Wiley, 2006. – Т. 3. – С. 75-118.
3. Салбиев Д.Г. РОБОТЫ МАНИПУЛЯТОРЫ И ОБЛАСТИ ИХ ПРИМЕНЕНИЯ //Научные исследования в современном мире. Теория и практика. – 2021. – С. 56-59.

## Биоинженерия от цифровых решений до практического применения

УДК 544.016.2, 535.012

### МЕЗОМОРФНЫЕ СВОЙСТВА И СИНТЕЗ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОЛИГОМЕРОВ НА БАЗЕ ПОЛИУРЕТАНОВ СЛОЖНОЙ ГЕОМЕТРИИ

Горбачев С.А. (аспирант, Университет ИТМО; преподаватель, Военно-медицинская академия им. С.М. Кирова)

Научный руководитель: д.х.н., доцент Зуев В.В. (Университет ИТМО)

e-mail: [stas89755@mail.ru](mailto:stas89755@mail.ru)

*Синтезирован набор соединений, содержащих фрагмент бифенила в качестве мезогенного фрагмента и структурой, моделирующей жидкокристаллические (ЖК) димеры, полимеры с мезогенными группами боковой цепи и звездообразной структуры. Разработан подход к синтезу подобных соединений в мягких условиях и без сложной процедуры очистки с количественным выходом, являющийся реализацией методов «click-chemistry» для синтеза ЖК-соединений.*

**Ключевые слова:** олигомеры, метод «click-chemistry», уретаны, смектический мезоморфизм, димеры.

Жидкокристаллические (ЖК) соединения, как материалы, широко используемые в различных областях оптоэлектроники, привлекают повышенное внимание как перспективные инновационные продукты. Важной задачей в области синтеза ЖК-соединений является развитие новых методов синтеза и создание молекул с нетривиальной архитектурой, что открывает возможности получения новых типов мезофаз, либо новых видов супрамолекулярной организации. Одним из путей самоорганизации на надмолекулярном уровне является построение сетки водородных связей, что используется и в области ЖК-соединений [1]. Использование подобного подхода позволяет значительно разнообразить архитектуру ЖК-соединений. С точки зрения доступности и простоты привлекательным архитектурным элементом для построения ЖК-соединений является фрагмент бифенила. Однако недостаточное анизотропное отношение этого структурного элемента приводит к тому, что для низкомолекулярных соединений получить структуры, проявляющие ЖК-свойства, не удастся [2]. Мезоморфное состояние наблюдается для полимеров на основе 4,4'-диоксибифенила, причем только по достижении определенной предельной молекулярной массы [3, 4]. Таким образом, включение структурных факторов позволяет реализовать ЖК-мезоморфизм и для соединений на основе бифенила. Можно полагать, что подобным фактором может стать и введение межмолекулярного водородного связывания. С точки зрения препаративной органической химии синтетически простой, протекающей с количественными выходами, является реакция изоцианатов со спиртами. Эта реакция хорошо известна для получения полиуретанов [5]. Мономерные изоцианаты с различной функциональной структурой легко доступны на рынке [6]. При этом образующиеся в результате реакции со спиртами уретановые группы образуют сетку межмолекулярных водородных связей [7]. Все это стимулировало нас для поискового синтеза производных полиуретанов с фрагментами бифенила и вариацией их геометрии для получения ЖК соединения, мезоморфное состояние которых стабилизировано межмолекулярными водородными связями.

#### Экспериментальная часть

Все растворители перед использованием сушили над молекулярными ситами и перегоняли. 1,6-гексаметилендиизоцианат, уретдион (Dismodur 3400), биурет (Dismodur 75) и изоцианурат (Dismodur 3300) были получены от Evonic (ФРГ) и использовали без дальнейшей очистки.

Синтез соединений I-II. [(4'-окси-[1,1'-бифенил]-4-ил) окси]алкилы (I) и 6-[(4'-алкилокси-[1,1'-бифенил]-4-ил)окси]гексанол (II) были получены по реакции Вильямсона (рис.1).

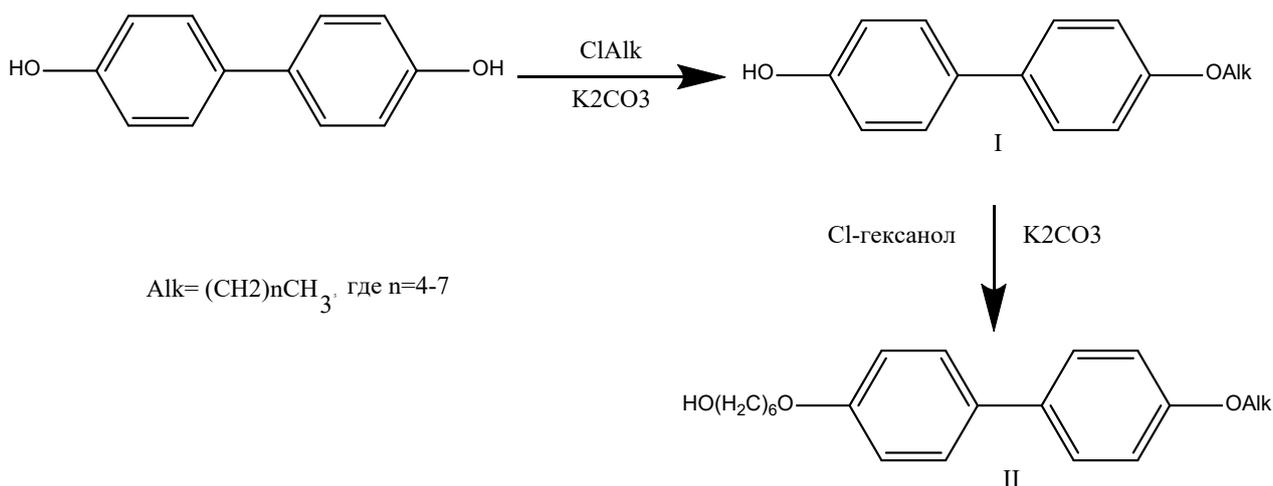


Рис. 1. Схема синтеза соединений I–II

[(4'-окси-[1,1'-бифенил]-4-ил)окси]алкилы (**I**) были синтезированы по следующей общей методике на примере 4-амил-4'-окси-1,1'-бифенила (**I**) ( $n = 4$ ). В 40 мл циклогексанона помещали 1 г (54 ммоль) дигидроксибифенила, 0,57 г (54 ммоль) хлористого амила, 5 г карбоната калия. Реакционную смесь нагревали в течение 4 ч при 200°C при интенсивном перемешивании 1000 обор/мин. Полученную смесь отфильтровывали на фильтре Шотта, далее растворитель отгоняли частично. К смеси добавляли тяжелый петролейный эфир, отгонку продолжали. Выпавший белый кристаллический осадок отфильтровывали, промывали гексаном, сушили при комнатной температуре и перекристаллизовывали из метанола. Выход 0,92 г (67%).

6-[(4'-алкилокси-[1,1'-бифенил]-4-ил)окси]гексанола (**II**) были синтезированы по следующей общей методике на примере 6-[(4'-амилокси-[1,1'-бифенил]-4-ил)окси]гексанола ( $n = 4$ ). В 40 мл циклогексанона помещали 1 г (39 ммоль) полученного продукта (**I**) на первом этапе, 0,53 г (39 ммоль) 1-хлоргексанола, 6,5 г карбоната калия. Реакционную смесь нагревали в течение 4 ч при 200°C при интенсивном перемешивании 1000 обор/мин. Полученную смесь отфильтровывали на фильтре Шотта, далее растворитель отгоняли частично. К смеси добавляли тяжелый петролейный эфир, отгонку продолжали. Выпавший белый кристаллический осадок отфильтровывали, промывали гексаном, сушили при комнатной температуре и перекристаллизовывали из метанола. Выход 1,0 г (72%).

Синтез соединений **III–X**. 100 мг 1,6-гексаметилендиизоцианата или соответствующего уретидона, биурета или изоцианурата и соответствующее количество (**II**) в расчете 1,05 моля на каждую изоцианатную группу смешивают в 20 мл сухого толуола и нагревают при 100°C 20 мин. После этого растворитель упаривают и остаток дважды перекристаллизовывают из метанола. Выход количественный. Синтезированные олигомеры показаны на рисунке 2.

Олигомеры **III–X** были охарактеризованы данными элементного анализа, ИК,  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  ЯМР-спектроскопии. Были использованы следующие приборы для характеристики вновь синтезированных соединений **III–X**. Элементный анализ был выполнен на приборе Carlo Erba Strumentazione E-lemental Analyzer, Modell 1106. ЯМР: Bruker Avance 400 ( $^1\text{H}$ , 400 MHz;  $^{13}\text{C}$ , 100 MHz). Отнесение сигналов было подтверждено снятием 2D спектров и расчетом химических сдвигов соединений с использованием стандартных программ. Для  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  ЯМР-спектров в качестве внутреннего стандарта использовался сигнал растворителя ( $\text{CDCl}_3$ ). ИК: Bruker Vertex FT-IR спектрометр с приставкой для НПВО. Дифференциальная сканирующая калориметрия (ДСК): Netsch DSC 214 (скорость нагрева и охлаждения 5  $\text{K}\cdot\text{мин}^{-1}$ ). Поляризационный микроскоп с нагревательным столиком Voetius (ГДР).

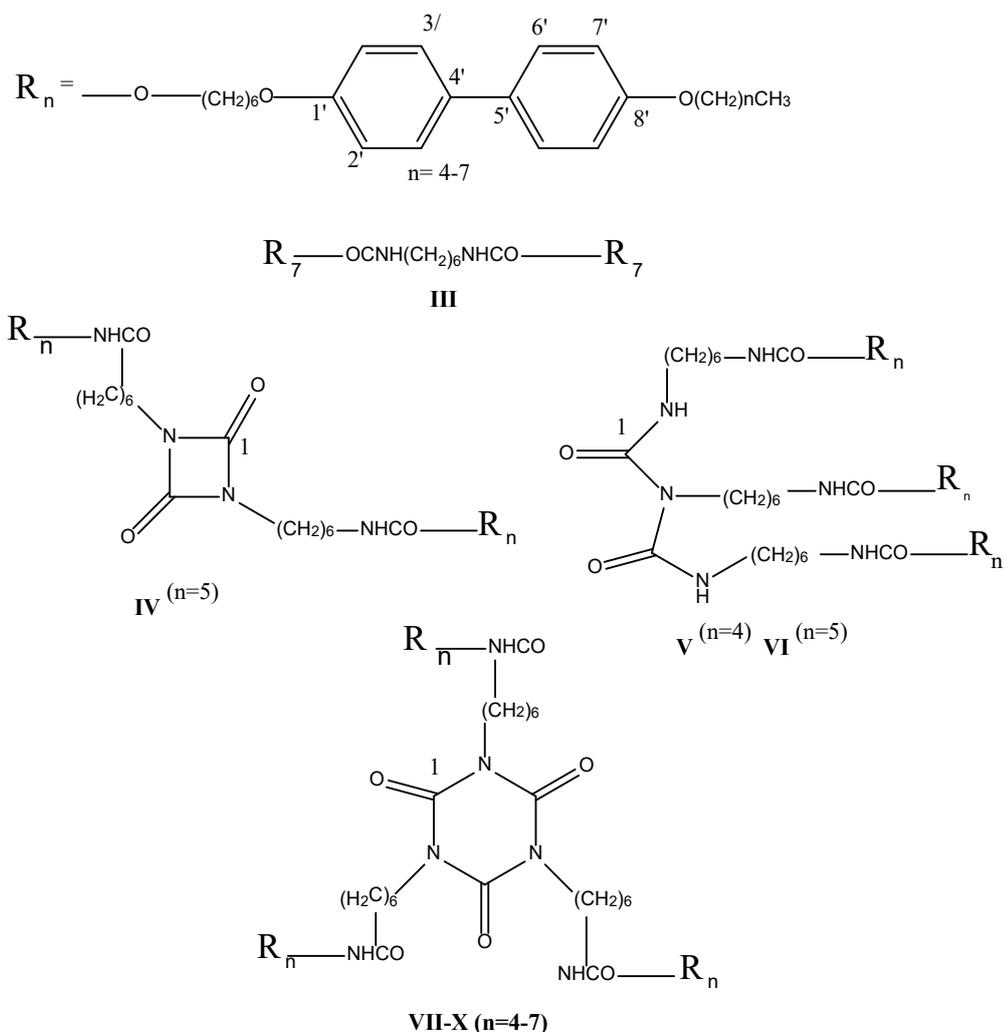


Рис. 2. Схемы синтеза соединений III–X

Методом поляризационной микроскопии было исследовано фазовое поведение полученных соединений. Были получены микрофотографии олигомеров с характерными текстурами для жидкокристаллических соединений. Текстуры олигомеров показаны на рисунке 3.

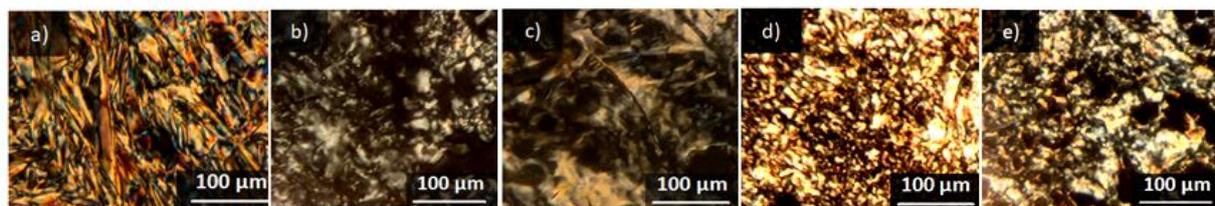


Рис. 3. Текстуры, наблюдаемые в поляризационном оптическом микроскопе для соединения **V** при температуре 122°C (a) и 90°C (b); для соединения **VII** при температуре 122°C (c); для соединения **IX** при температуре 108°C (d); для соединения **X** при температуре 106°C (e)

Одна из основных проблем в химии жидких кристаллов, как и в химии промышленных и фармацевтических продуктов вообще, является сложность синтетических процедур и как результат сложность конвертации для промышленного синтеза разработанных продуктов. Одним из возможных путей решения данной проблемы является внедрение протоколов так называемой «click-chemistry» [8], которые подразумевают использование синтетических процедур с количественным выходом желаемых продуктов без формирования побочных продуктов и реализуемых в неагрессивных растворителях при умеренных температурах без необходимости очистки конечных продуктов хроматографическими методами. В качестве такого подхода нами реализован метод синтеза ЖК-соединений с использованием химии

изоцианатов. Преимуществом этого подхода является то, что получение полиуретанов взаимодействием изоцианатами хорошо изучено [5], эта реакция приводит к получению высокомолекулярных продуктов при отсутствии побочных реакций. Трансфер методов химии высокомолекулярных соединений в область химии ЖК-соединений является перспективным именно с точки зрения реализации подходов «click-chemistry». Нами в качестве исходного синтона для синтеза ЖК-соединений был выбран 1,6-гексаметилендиизоцианат, который путем простых превращений может быть преобразован в набор соединений (рис.4), позволяющих получить структуры с разнообразной геометрией и дипольной архитектурой.

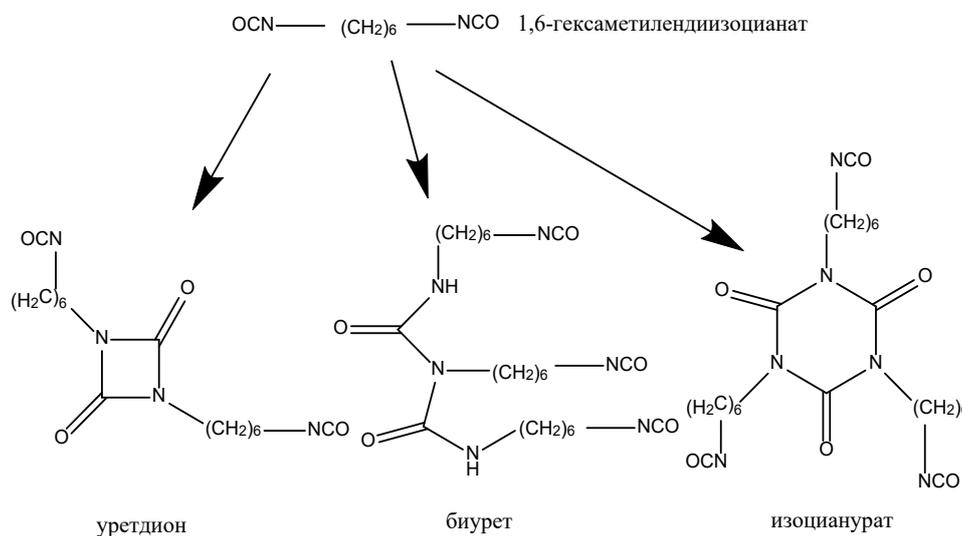


Рис. 4. Схема 1,6-гексаметилендиизоцианата и его производных

### Выводы

1. Синтезирован набор соединений с бифенилом в качестве мезогенного фрагмента и структурой, моделирующей ЖК-димеры, полимеры с мезогенными группами боковой цепи и звездообразной структурой.
2. Разработан подход к синтезу подобных соединений в мягких условиях и без сложной процедуры очистки с количественным выходом, являющийся реализацией методов «click-chemistry» для синтеза ЖК-соединений.
3. Показано, что для соединений с бифенилом в качестве мезогенного фрагмента ЖК-состояние наблюдается только в том случае, если число бифенилов в одном соединении составляет три, т.е. соединения оказываются подобными полиэфирам с бифенилом в качестве мезогенного фрагмента, у которых наблюдается ЖК-поведение.
4. Определяющим фактором в формировании ЖК-состояния и смектического мезоморфизма у соединений с таким потенциально «слабым» мезогеном, как бифенил, является формирование межмолекулярных водородных связей.

### Литература

1. Luger S.J.D., Houben S.J.A., Foelen Y., Debije M.G., Schenning A.P.H.J., Mulder D.J. Hydrogen-bonded liquid crystal polymers: smart materials with stimuli-responsive, self-healing, and recyclable properties // *Chem.Rev.* – 2021. – №. 121 – 30 p.
2. Goodby J.W., Collings P.J., Kato T., Tschierske C., Gleeson H., Raynes P. 2-nd ed. *Fundamentals of Liquid Crystals. Handbook of Liquid Crystals.* – Weinheim: Wiley-VCH, 2014. – 944 p.
3. Guan S., Chen A. Influence of spacer lengths on the morphology of biphenyl-containing liquid crystalline block copolymer nanoparticles via polymerization-induced self-assembly // *Macromolecules.* – 2020. – №. 53. – Pp. 6235–6245.
4. Cigl M., Hampl F., Svoboda J., Podoliak N., Stulov S., Kohout M., Novotná V. Laterally substituted biphenyl benzoates – synthesis and mesomorphic properties // *Liq. Cryst.* – 2021. – №. 48. – Pp. 526–536.
5. Aguirresarobe R.H., Nevejans S., Reck B., Irusta L., Sardon H., Asua J.M., Ballard N. Healable and self-healing polyurethanes using dynamic chemistry // *Prog. Polym. Sci.* – 2021. – №. 114. – P. 101362.
6. Thomas S., Datta J., Hoponiuk J.T., Raghunadhan A. *Polyurethane polymers: Composites and nanocomposites* // Elsevier: Amsterdam. – 2017. – 634 p.

7. Yildirim E., Yurtsever M., Yilgor E., Yilgor I., Garth L., Wilkes G.L. Temperature dependent changes in the hydrogen bonded hard segment network and microphase morphology in a model polyurethane: experimental and simulation studies // J. Polym. Sci. Part B: Polym. Phys. – 2018. – №. 56. – Pp. 182–192.
8. Battigelli A., Almeida B., Shukla A. Recent advances in biorthogonal click chemistry for biomedical applications // Bioconjugate Chem. – 2022. – №. 33. – Pp. 263–271.

УДК 004.415.2.031.43

## РАЗРАБОТКА БИОНИЧЕСКОГО ПРОТЕЗА И СЛОЖНОСТИ ПОСТРОЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ОБРАЗЦА

**Маркин К.А.** (аспирант, Университет ИТМО)

**Научный руководитель: к.п.н., доцент Авксентьева Е.Ю.** (Университет ИТМО)

*e-mail:* [kirill1997\\_markin@mail.ru](mailto:kirill1997_markin@mail.ru)

*В работе будет рассмотрен процесс разработки прототипа бионического протеза руки с расширенными интерфейсами взаимодействия с пользователем. Рассматриваются проблемы построения экспериментального образца, его принцип работы. Обосновываются применяемые архитектурные и конструктивные решения, а также применение комбинированного управления в виде графических интерфейсов, голосового и миоэлектрического управления.*

**Ключевые слова:** бионический протез, комбинированная система управления, построение экспериментального образца, встраиваемые системы, биоинженерия.

Ввиду различных аспектов жизни человека область протезирования является важной и неотъемлемой ее составляющей. Она помогает людям, получившим серьезную травму, вновь почувствовать себя полноценными членами общества. Помочь им в этом могут такие технические средства как протезы. К сожалению, современные протезы ограничены в своей функциональности, возможностях управления и их стоимость очень высока. В пример можно привести высокотехнологичный продукт Британской компании RSL Steeper BeBionic 3 [1]. Это протез кисти воспроизводит ранее запрограммированные в него исполняемые команды, его стоимость может достигать нескольких миллионов рублей. Все это обусловлено сложностью разработки изделия. На каждом ее этапе происходит наложение множества ограничений и лишь единицы проходят такой процесс от идеи до экспериментального образца [2]. В качестве альтернативного подхода к разработке бионических протезов, предлагается выделение основных исполняющих устройств, элементов системы и формирование архитектуры, поддерживающей горизонтальное масштабирование.

Такая система может состоять из управляющего устройства, а взаимодействие со всеми ее компонентами будет осуществляться на основании ранее оговоренного протокола передачи данных.

Первым и, пожалуй, самым важным ограничением является целевая аудитория продукта. Это именно те самые люди, которые будут пользоваться бионическим протезом. Крайне важно сразу определить для какой области ампутации будет предназначено данное изделие (кисть, предплечье или вся рука, включая локтевой сустав [3]. Вернее всего будет опираться на статистику проводимых операций по ампутациям и их количеству (табл.1) [4].

Таблица 1

**Статистика ампутаций частей тела**

Ампутруемая часть	Вероятность
Нижние конечности	92%
Верхние конечности	8%
<b>Ампутация верхней конечности</b>	<b>Вероятность</b>
Плечо на различных уровнях	24,5%
Предплечье	29,4%
Кисть	3,9%
Пальцы кисти	42,2%

Для разрабатываемого экспериментального образца бионического протеза верхней конечности была определена область ампутации предплечья в соотношении к утраченной составляющей 1:3. При выборе большей области ампутации было бы необходимо учитывать сложный механизм движений локтевого сустава [5] и оказываемую нагрузку на пользователя ввиду веса изделия. В случае же с выбором меньшей области ампутации критическим аспектом, оказывающим влияние, являются элементы энергоносителей, активные механизмы (приводов пальцев) и их компоновка в макете протеза.

Вторым, и не менее важным ограничением, является определение областей подвижности дистальных составляющих протеза. Результирующим фактором такого ограничения станет формирование списка компонентов, способных выполнить и/или оказать воздействие для выполнения такого действия на определенном референтном интервале.

В соответствии с выбранным подходом разработки протеза были определены следующие неотъемлемые составляющие:

1. Устройство управления.
2. Блок приводов.
3. Блок энергоносителя.
4. Блоки обратной связи.

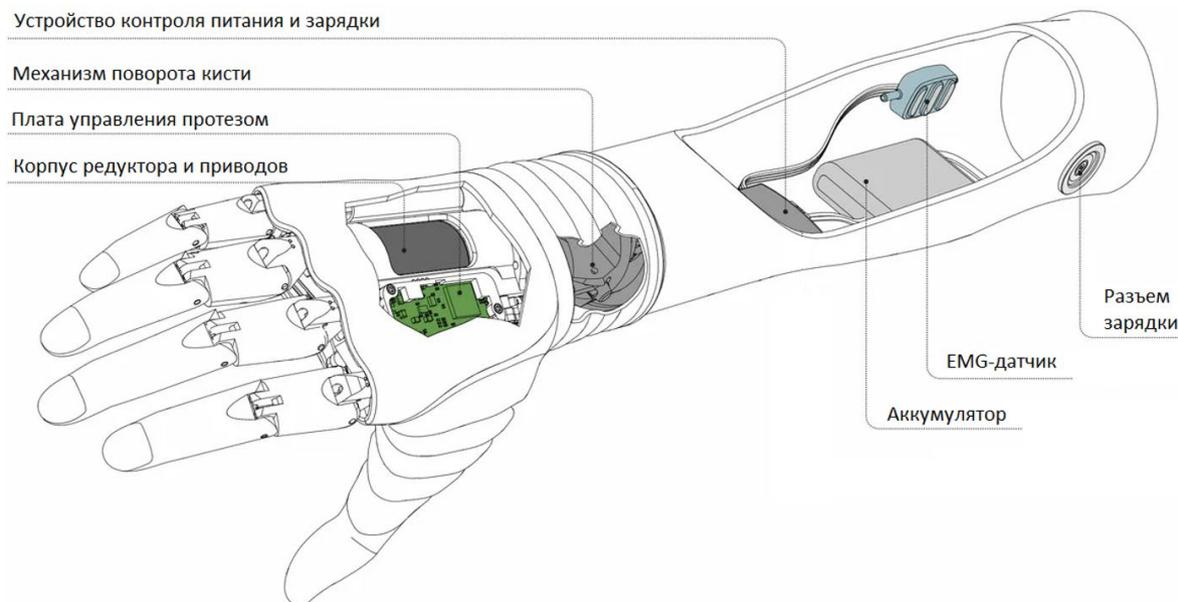


Рис. 1. Структура бионического протеза

При рассмотрении структуры бионического протеза (рис.1) его компоненты можно распределить по составляющим следующим образом: к устройству управления относится плата управления протезом; к блоку приводов относятся приводы с корпусом редукторов и драйверами управления; к блоку энергоносителя относятся устройства контроля питания и зарядки, аккумулятор; к блокам обратной связи относятся электромиографический датчик и его драйвер. Таким образом, была сформирована структура системы, которая имеет блоковое представление и единое устройство управления всеми блоками. Каждый из блоков имеет свой формат общения с устройством управления и, при замене одного/нескольких блоков или установке дополнительных, их формат взаимодействия остается прежним. При таком подходе пользователю не обязательно иметь электромиографический датчик, так как возможно подключить к устройству телефон и через графический интерфейс приводить в движение протез. По аналогии осуществляется управление на основе голосовых команд.

Такой подход очень важен для такой подгруппы людей, у которой отсутствуют электромагнитные импульсы в нервных окончаниях (ввиду условий получения травмы или врожденных болезней). Данная система позволит людям с более сложным типом травм не только получить доступ к самым современным средствам реабилитации, но и выполнить индивидуальную настройку исполняемых протезом жестов.

Дальнейшее развитие системы будет происходить за счет горизонтального масштабирования компонентов взаимодействия (блоков обратной связи), повышения компактности используемых элементов и совершенствования их механизмов и алгоритмов работы.

## Литература

1. THE BEBIONIC HAND Valeeva D.R., Zaichko M.V. В сборнике: Материалы Международной научно-практической конференции молодых исследователей им. Д.И. Менделеева, посвященной 10-летию Института промышленных технологий и инжиниринга. Ответственный редактор А. Н. Халин. – 2019. – С. 278–279.
2. Petrov V.G. Tehnologija izgotovljenija protezov verhnih konechno-stej [The technology of fabrication of upper limb prostheses.]. Gipokrat, 2008. – 128 p.
3. Прокопьев Н.Я. Медико-педагогические подходы в оценке типов конституции человека: учебно-методическое пособие / Н.Я. Прокопьев, В.И. Назмутдинова. — Тюмень: ТюмГУ, 2017. — 60 с. — Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/110178>.
4. Гринин В.М., Шестемирова Э.И. О Качестве жизни инвалидов-ампутантов в Российской Федерации // The problems of social hygiene, public health and history of medicine. – 2020. – 380 с.
5. Гайворонский И.В. Нормальная анатомия человека [Текст]: учебник для студентов медицинских вузов и факультетов: [в 2 т.] / И. В. Гайворонский. - 7-е изд., перераб. и испр. - Санкт-Петербург: СпецЛит, 2011. - 24 см. - (Учебник для медицинских вузов).; ISBN 978-5-299-00496-0.

УДК 542.06

## МЕТОД ПОЛУЧЕНИЯ СИНТЕТИЧЕСКОГО ГИДРОКСИАПАТИТА С ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ ТЕРМООБРАБОТКОЙ

Назин М.А. (аспирант, Университет ИТМО)

Научный руководитель: к.т.н., доцент Пономарева А.А. (Университет ИТМО)

e-mail: [maksim1997naz@gmail.com](mailto:maksim1997naz@gmail.com)

*В работе был разработан метод синтеза порошка гидроксиапатита методом осаждения из раствора солей кальция, и использованием аммония фосфорнокислого. Гидроксиапатита (ГА) - материал, активно используемый в стоматологии для покрытия имплантов и улучшения биосовместимости с костной тканью. Опытные эксперименты, проведённые с помощью ИК спектроскопии, показали, что полученный порошок является однофазным, морфологически однородным.*

**Ключевые слова:** гидроксиапатит, синтез, ИК-спектроскопия, растворы солей кальция, термообработка.

Последние несколько лет, из-за ухудшения экологической обстановки в мире, резко увеличилось число людей со стоматологическими заболеваниями и челюстными дефектами, потеря зубов, кариес, заражение и многое другое. Решением этой проблемы зачастую является использование различных имплантов, в частности титановых. Однако существует сложность с биосовместимостью таких имплантов [1], что затрудняет их использование.

Актуальность исследования и поиск методов получения синтетического гидроксиапатита, обусловлены огромным значением его для биологических исследований. Гидроксиапатит (ГА) является основной, неорганической составляющей костной ткани живых организмов, обладает высокой биосовместимостью. Зубная эмаль - наиболее минерализованная ткань человеческого организма. Ее состав это – 96 мас. % неорганического материала и 4 мас.% органического материала и воды. Известно, что на данный момент для создания биосовместимых композитов преимущественно используется биологический гидроксиапатит, полученный из костей [2]. Однако получение таких материалов трудоемко и связано с рядом непреодолимых трудностей, которые снижают возможность их использования для нужд протезирования.

Неорганический материал в основном состоит из фосфата кальция, связанного с гексагональным гидроксиапатитом, химическая формула которого  $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6 \cdot 2(\text{OH})$  [3].

Одним из главных методов синтеза синтетического гидроксиапатита является осаждение. Несмотря на то, что было разработано много методов синтеза, получение ГА со специфическими характеристиками все еще остается сложной задачей из-за возможности образования токсичных промежуточных продуктов во время синтеза [4].

Поэтому исследования новых параметров синтеза ГА все еще продолжаются. По сравнению с синтетическим, природный ГА нестехиометричен [5].

Целью данной работы является поиск оптимальных параметров синтеза нанокристаллического ГА. В работе были использованы следующие реактивы: кальциевая соль соляной кислоты ( $\text{CaCl}_2$ ), аммоний фосфорнокислый  $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ , водный раствор аммиака  $\text{NH}_4\text{OH}$ , дистиллированная вода. Контроль pH производился на приборе pH-150МИ. Инфракрасный спектр регистрировался на спектрофотометре UV-VIS РВ 2201.

На рисунке 1 представлена технологическая схема получения ГА.

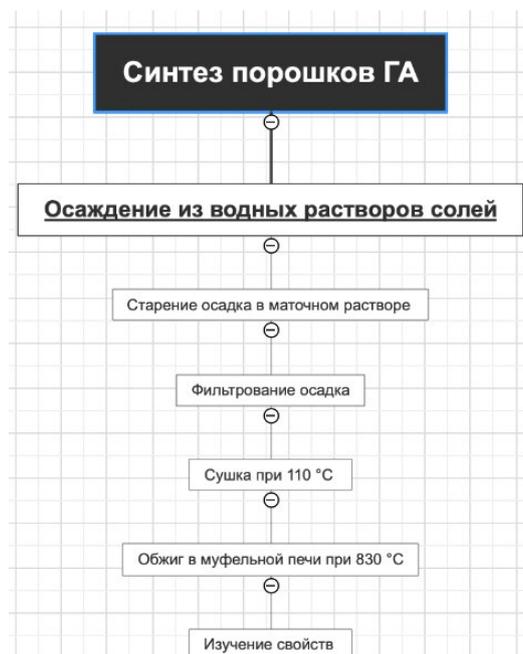


Рис. 1. Технологическая схема получения гидроксиапатита

Основная методика получения синтетического гидроксиапатита, проходила в следующей последовательности. В реакционный сосуд, содержащий 0,1М раствора  $\text{CaCl}_2$  и 20 мл водного раствора аммиака, подогретой до температуры  $30^\circ\text{C}$ , при постоянном помешивании (300 об/мин) добавляли раствор аммония фосфорнокислого, необходимого для соблюдения стехиометрического соотношения  $\text{Ca/P} = 1,67$ .

Полученная суспензия подвергалась старению в течение 48 часов при комнатной температуре. Далее осадок фильтровали, просушивали в сушильном шкафу при температуре  $110^\circ\text{C}$  в течение 1 часа. Затем прокалили в муфельной печи при температуре  $830^\circ\text{C}$  в течение 40 минут.

Также в ходе эксперимента был синтезирован экспериментальный образец гидроксиапатита с содержанием 0,15 М раствора  $\text{CaCl}_2$ . Продукт синтеза представляет собой порошок белого цвета.

Полученные образцы рисунках 2 и 3 проверялись на соответствие гидроксиапатиту с помощью инфракрасного анализа. Анализ проводили с использованием ИК-Фурье спектрометра. Анализ проводился в спектральном диапазоне  $450 - 4000 \text{ см}^{-1}$  с разрешением  $0,9 \text{ см}^{-1}$  и точностью по волновому числу  $0,01 \text{ см}^{-1}$ . ИК-спектры поглощения позволяют анализировать строение молекул. Количество пиков и расположение по волновым числам позволяет провести качественный анализ образцов, а анализ интенсивности пиков позволяет провести количественный анализ.

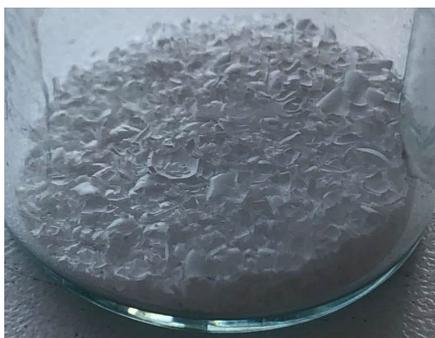


Рис. 2. Синтезированный образец №1



Рис. 3. Синтезированный образец №2

Благодаря анализу литературных источников были выявлены основные моды колебаний, характерные для гидроксиапатита, что позволило определить наличие характерных групп у синтезированного материала [6, 7]. Полосы ИК-поглощения с максимумами 574 и 604  $\text{cm}^{-1}$  обусловлены ассиметричными деформационными колебаниями связи О-Р-О. Инфракрасные спектры порошков имеют полосы поглощения, характерные для карбонат содержащих гидроксиапатитов. Поглощение при 655  $\text{cm}^{-1}$  соответствует характерным для гидроксиапатита ОН группам. Полосы с волновыми числами в интервалах 960–965  $\text{cm}^{-1}$  соответствуют модам колебаний фосфатных групп. Полосы в интервале 1210–1250  $\text{cm}^{-1}$  и 870–873  $\text{cm}^{-1}$  соответствуют модам колебаний карбонат групп. Колебательные частоты образцов синтезированного гидроксиапатита при различных концентрация и подвергнутых обжигу при температуре 830 $^{\circ}\text{C}$  в сравнении с литературными данными представлены в таблице 1.

Таблица 1

**ИК моды колебаний синтезированного ГА и литературные данные [6,7]**

Частоты синтезированных образцов	Колебательные частоты, $\text{cm}^{-1}$			
	Экспериментальные данные		Литературные данные по ГА	
	Образец 1	Образец 2	ГА [6]	ГА [7]
PO <sub>4</sub> изгиба	565	565	564	571
PO <sub>4</sub> изгиба	603	603	610	607
ОН структурная	–	655	650	635
CO <sub>3</sub> групповая	873	870	–	875
PO <sub>4</sub> растяжения	960	960	963	961
PO <sub>4</sub> изгиба	1022	1022	1029	1050
CO <sub>3</sub> групповая	1210	–	–	1429
CO <sub>3</sub> групповая	–	1250	–	1460

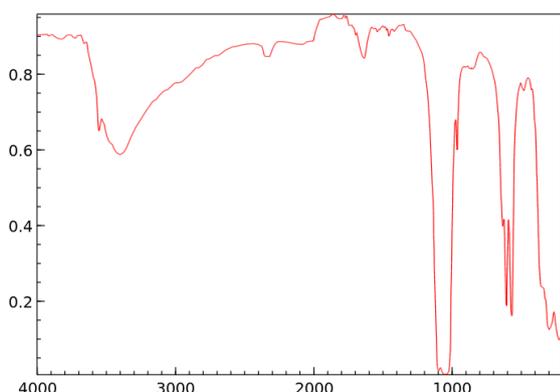


Рис. 4. Фрагмент типичного ИК-спектра ГА представленный в базе NIST

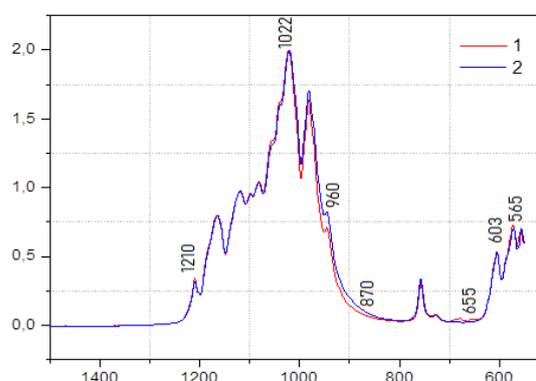


Рис. 5. ИК-спектры образцов ГА, отожженных при 830 $^{\circ}\text{C}$ : красная линия 1М – CaCl<sub>2</sub>, синяя линия 1.5М – CaCl<sub>2</sub>

Анализ экспериментальных и литературных данных показывает, что основные колебательные моды характерные для гидроксиапатита, присутствуют в спектре синтезированных материалов.

На рисунке 4 представлен типичный ИК-спектр гидроксиапатита. На рис. 5 изображены ИК-спектры порошков гидроксиапатита, синтезированных при различных количествах вещества  $\text{CaCl}_2$  и прокаленных при температуре  $830^\circ\text{C}$ .

Инфракрасные спектры обоих образцов не содержат дополнительных мод, что свидетельствует об их однофазности. В дальнейшем синтезированный материал будет использоваться в получении биосовместимых покрытий на титановых имплантах золь-гель методом.

Результат исследования методом инфракрасной спектроскопии показал, что синтезированный материал является гидроксиапатитом. Применение метода инфракрасной спектроскопии позволило обнаружить некоторые примеси в кристаллическом гидроксиапатите, полученном с использованием 0,15 М раствора  $\text{CaCl}_2$  в качестве источника кальция. Именно поэтому, в дальнейших исследованиях будет использоваться состав, содержащий 0,1 М раствора  $\text{CaCl}_2$ .

Данные исследования показали возможность получения ГА методом осаждения для будущего применения в качестве биосовместимых покрытий. При этом было выявлено, что условия синтеза, такие как соотношение компонентов и растворителя, даже при сохранении стехиометрического соотношения  $\text{Ca/P} = 1,67$ , могут сильно влиять на качество получаемых материалов.

### Литература

1. Григорьян А., Топоркова А. Проблемы интеграции имплантов в костную ткань. М.: Техносфера, 2007. – 128 р.
2. Matsumoto T., Tamine K., Kagawa R., et al. // Journal Ceramic Society of Japan. – 2006. – №. 114. – Pp. 760–762.
3. Moshaverina A., Ansari S., Moshaverina M., Roohpour N., Darr J.A., Rehman I. Effect of incorporation of hydroxyapatite and fluoroapatitenanobioceramics into conventional glass ionomer cements (GIC) // Acta Biomaterialia. 2008. – №. 4. – Pp. 432–440.
4. Sadat-Shojai M., Khorasani M.T., Dinpanah-Khoshdargi E., Jamshidi A. Synthesis methods for nanosized hydroxyapatite with diverse structures // Acta Biomater. – 2013. – №. 9. – Pp. 7592–7621.
5. Milovac D., Gamboa-martínez T.C., Ivankovic M., Gallego G., Ivankovic H. PCL-coated hydroxyapatite scaffold derived from cuttle fish bone: in vitro cell culture studies // Mater. Sci. Eng. – 2014. – №. 42. – Pp. 268–272.
6. Barralet J., Best S., Bonfield W.J. Carbonate substitution in precipitated hydroxyapatite: an investigation into the effects of reaction temperature and bicarbonate ion concentration // Mater. Res. – 1998. – Vol. 41. – Pp. 79–86.
7. Bouyer E., Citzhofer F., Morphological study of hydroxyapatite nanocrystal suspension // J. Mater Sci. – 2000. – №. 11. – Pp. 523–531.

УДК 004.056

### ОЦЕНКА СОДЕРЖАНИЯ БИОГЕННЫХ АМИНОВ В РЫБЕ И РЫБНЫХ ПРОДУКТАХ МЕТОДОМ ГАЗОЖИДКОСТНОЙ ХРОМАТОМАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

**Наумова А.В.** (аспирант, Университет ИТМО), **Утсаль В.А.** (старший научный сотрудник, лаборатория токсикологии органических соединений, ФГБУ НКЦТ им. С.Н. Голикова)

**Научный руководитель: д.т.н., профессор Ишевский А.Л.** (Университет ИТМО)

*e-mail:* [89818773842@mail.ru](mailto:89818773842@mail.ru)

*Загрязнение окружающей среды все больше и больше отражается на экосистеме человека и отрицательно сказывается на состоянии животного мира и растительности. Попадание токсичных веществ в организм человека с некачественной водой, загрязнённым воздухом и продуктами питания создают серьезную угрозу здоровья населения. В настоящей работе приведен новый метод контроля качественного и количественно содержания биогенных аминов в рыбе и рыбных продуктах.*

**Ключевые слова:** газо-жидкостная хромато-масс-спектрометрия, биогенные амины, тирамин, рыб.

Рыба и продукты ее переработки относятся к числу скоропортящихся продуктов. С увеличением сроков и температуры хранения происходят процессы окисления, и катализируются процессы разложения белка, которые проходят с участием тканевых и бактериальных ферментов. Одним из основных критериев оценки свежести рыбы – повышение концентрации биогенных аминов.

По Межгосударственному стандарту ГОСТ 32366–2013 «Рыба мороженая. Технические условия» пункту 7.3 биогенные амины - токсикологический показатель безопасности рыбы и рыбных продуктов. На сегодняшний день существует множество методов качественной и количественной оценки биогенных аминов, таких как, флюорометрический, иммуноферментный, колориметрический, хроматографический и др. [1].

Превышение массовой доли тирамина сверх допустимого уровня может не вызывать существенных изменений органолептических свойств рыбы, но значительно повышать уровень опасности рыбы и рыбных продуктов, поэтому очень важно контролировать содержание его в продукте. Тирамин накапливается в рыбе и рыбных продуктах в результате декарбокислирования тирозина, при участии ферментов микрофлоры, развивающейся вследствие целого ряда нарушений условий хранения [2]. В настоящей работе в обоих образцах был найден биогенный амин - тирамин, а также исследованы его количественные изменения во времени.

### Материалы и методы

В настоящей работе метод хроматомасс-спектропии используется для исследования токсикологических параметров по 7.3 ГОСТ 32366–2013 "Рыба мороженая. Технические условия".

Для исследования были взяты хек без головы мороженный ТУ 9261-002-51561792-2005 и сельдь с головой мороженая ТУ 10.20.13-002-51561792-2018.

### Экспериментальная часть

В качестве модели исследования был выбран фарш. Фарш заложили на хранение при комнатной температуре. Пробы отбирали на 0, 1, 2, 3, 6 сутки.

### Пробоподготовка

Фарш массой 1 г, шпателем переносили в чистый флакон, предварительно взвесив флакон без содержимого, добавили 2 мл ацетонитрила, затем содержимое флакона перемешали на Vortexe, перенесли жидкую фазу в чистый флакон. Экстракцию повторили дважды, экстракты объединили. Далее объединенный экстракт высушили безводным сульфатом натрия, перенесли в чистую виалу, после чего полностью удалили ацетонитрил в токе азота под тягой, затем добавили внутренний стандарт тридейтерометилловый эфир тридекановой кислоты в количестве 10 мкл  $C = 2$  мг/мл и высушиваем при температуре 30°C в течении 20 секунд в токе азота, затем добавляем 50 мкл силилирующего агента N,O-бистриметилселил-трифторацетамид (BSTFA), нагреваем 2 минуты при 50°C, после охлаждения разбавляем 100 мкл хлористого метилена. Вводили пробу в количестве 1 мкл.

### Результаты исследования

Проведены испытания образцов хека и сельди, отобранных по ГОСТ 7631-85. Полученные результаты приведены ниже на хроматограммах. На рисунке 1 указаны содержание тирамина в хеке на вторые, третьи и шестые сутки. Тенденция содержания тирамина относительно стандарта в хеке представлена на рисунке 2.

Аналогично представлены результаты исследования тирамина в сельди на рисунках 3 и 4.

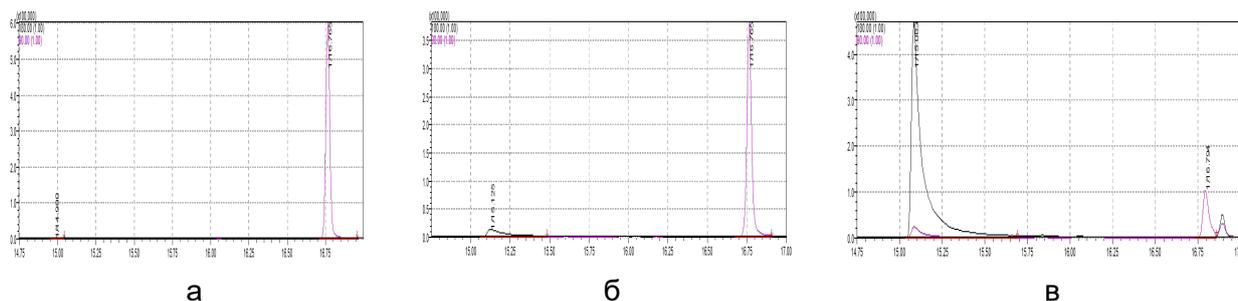
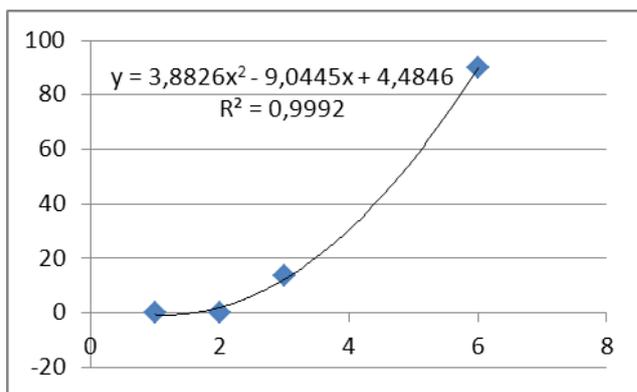


Рис. 1. Содержание тирамина в хеке на: а) вторые сутки; б) третьи сутки; в) шестые сутки



D	%
1	0
2	0,2
3	13,4
6	89,9

Рис. 2. Содержание тирамина относительно стандарта в хеке

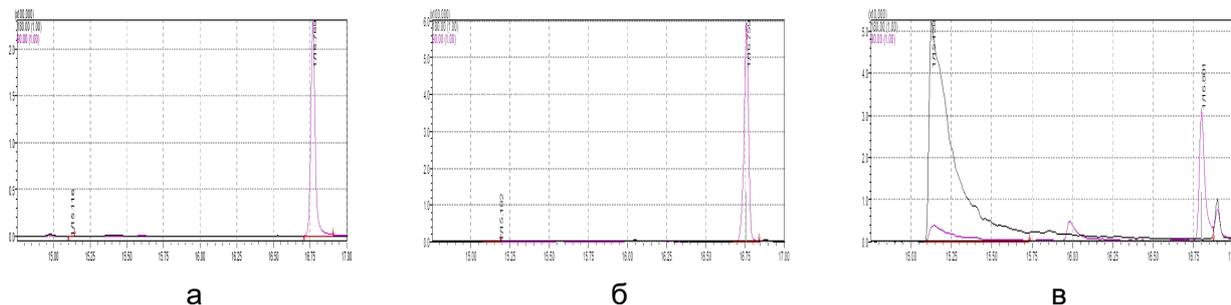
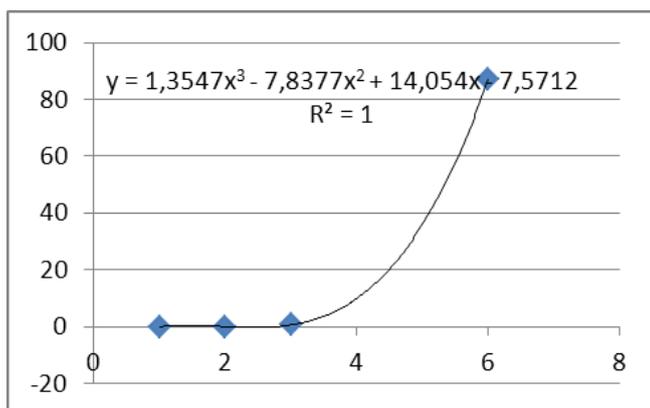


Рис. 3. Содержание тирамина в сельди на: а) вторые сутки; б) третьи сутки; в) шестые сутки



D	%
1	0
2	0,02
3	0,6
6	87,2

Рис. 4. Содержание тирамина относительно стандарта в сельди

Актуальность работы по изучению накопления биогенных аминов в рыбе и рыбных продуктах связана с множеством причин: несоблюдением условий хранения, транспортировки, нарушений асептических мероприятий на производстве – все вышеперечисленные факторы становятся причиной образования токсичных соединений.

В результате проделанной работы определены точки выработки биогенных аминов в рыбном сырье. Нарушение температурно-временных параметров выполнения операций дефростации и условий асептики, служит риском накопления тирамина в рыбе до критического уровня, превышающего нормативы.

Установлена специфика повышения уровня тирамина в рыбах различной жирности в различных температурных условиях.

Из представленных выше хроматограмм видно, что на вторые сутки в обоих образцах рыб наблюдается следовое количество тирамина. Значительное количество выработки тирамина, происходит на шестые сутки в обоих образцах рыб.

## Литература

1. Гу Дж., Лю Т., Хоу Дж., Пан Л., Садик Ф. А., Лей Ю. и др. Анализ бактериального разнообразия и содержания биогенных аминов во время ферментации вонючего тофу // Food Res. Int. 111. – 2018. – Рр. 689-698. DOI:10.1016/j.foodres.2018.05.065.
2. Ким Б., Бьон Б. Ю. и Ма Дж.-Х. Образование биогенных аминов и вклад бактерий в продукты Натто // Food Chem. 135. – 2012. – Рр. 2005-2011. DOI:10.1016/j.foodchem.2012.06.091.
3. Суцци Г. и Торриани С. (2015). Редакционная статья: биогенные амины в пищевых продуктах // Фронт. Микробиол. 6:472. DOI:10.3389/fmicb.2015.00472.

УДК 54.016

## ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ПОЛИГИДРОСИБУТИРАТА НА РЕОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РАСТВОРОВ И МОРФОЛОГИЮ ПОЛУЧЕННЫХ ВОЛОКОН

Нгуен Хоанг Тхань (аспирант, Университет ИТМО), Олехнович Р.О. (доцент, Университет ИТМО)  
Научный руководитель: д.х.н., профессор Успенская М.В. (Университет ИТМО)  
e-mail: [hongthanh tropical@gmail.com](mailto:hongthanh tropical@gmail.com)

*В представленной работе исследованы реологические характеристики органических растворов полигидросибутирата и морфология полученных волокон на его основе с целью определения оптимальной концентрации для разработки волокнистых мембран методом электроформования, применяемых в области фильтрации воды.*

**Ключевые слова:** полигидросибутират, реологические характеристики, морфология, электроформование, фильтрация.

В настоящее время хорошо известны методы очистки воды, такие как адсорбция, осаждение, фильтрация, обработка озоном, многоступенчатая коагуляция, флокуляция и т.д. Однако, у большинства из этих методов имеется ряд существенных недостатков, и прежде всего, высокие энергические и экономические затраты, технологические сложности изготовления и низкая эффективность для вторичной переработки. В последнее время все больше внимания уделяется мембранным технологиям, которые демонстрируют высокую эффективность и надежность при очистке воды от загрязняющих веществ с меньшей затратой энергии и выбросов углекислого газа [1, 2, 3].

Электроформование становится одним из наиболее распространенных методов получения нановолокнистых мембран для фильтрации жидкостей. В частности, нановолокнистые мембраны на основе синтетических полимеров демонстрируют наилучшие характеристики очистки сточных вод вследствие сверхвысокого соотношения площади поверхности к объему материала [4, 5]. По сравнению с традиционными мембранами, нановолокнистые мембраны обладают контролируемыми пористыми структурами в микрометровом и нанометровом масштабе, что обеспечивает большой поток и скорость отбраковки для очистки сточных вод [6]. Наибольшее внимание последнее время уделяется нановолокнистым мембранам из полиакрилонитрила [7], поли(винилиденфторид)а [8], поливинилового спирта [9], поливинилхлорида [10], полиуретана [11] и др. Преимущества использования синтетических полимеров для получения нановолокнистых мембран заключается и химической и механической стабильности во время эксплуатации.

Однако синтетические полимеры в основном получают из нефтяной промышленности и материалы не являются возобновляемыми, с одной стороны, и трудно разлагаются в естественной среде [12], вызывая сильное загрязнение пластиком, с другой стороны. Накопление отходов пластмасс долгое время преследовало людей как большая экологическая проблема, именно поэтому современная наука стремится к использованию зелёных технологий и замене искусственных полимеров природными.

К основным факторам, влияющих на процесс формирования волокнистых мембран, можно отнести: технологические параметры, характеристики раствора и окружающей среды. Одним из основных параметров процесса электроформования является концентрация раствора.

Хорошо известно, что увеличение концентрации раствора приводит к увеличению вязкости, а также увеличению диаметра волокна [13,14,15]. В представленной работе исследована зависимость вязкости раствора полигидросибутирата в хлороформе. Концентрация ПГБ варьировалась от 4% до 12 мас.%. Вязкости полимерных растворов измерялись с помощью реометра Physica MCR501 (Anton Paar® GmbH, Австрия). Динамическая вязкость определялась при температуре 25°C с использованием геометрии цилиндр-цилиндр. После измерения вязкостей было проведено электроформование и получены волокна. Для проведения исследований были выбраны следующие технологические параметры: напряжение между иглой и коллектором 30 кВ, скорость подачи раствора 0,5 мл/ч, расстояние между иглой и коллектором 15 см. Полученные волокна осаждались на предметные стёкла размером 75×25×1 мм, которые в дальнейшем анализировались и фотографировались с помощью оптической микроскопии в проходящем свете. Диаметр нановолокон был определен с использованием программы ImageJ.

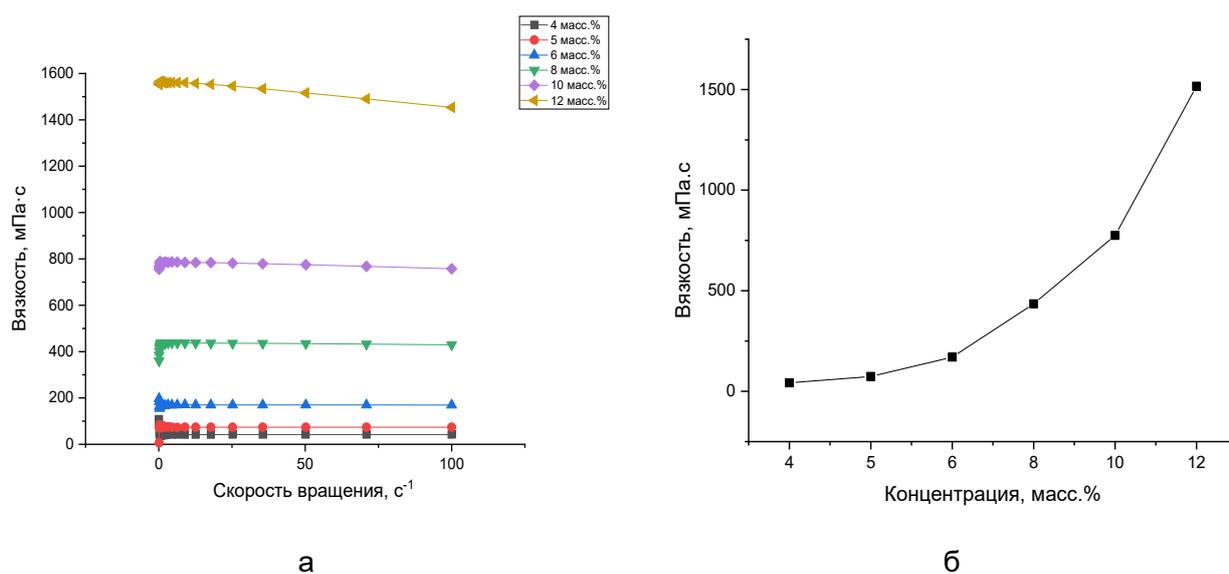


Рис. 1. Зависимость вязкости от скорости вращения (а) и концентрации (масс.%) (б)

На рисунке 1 показана зависимость вязкости от скорости вращения (а) и концентрации (б). Как видно из рисунка 1, при концентрации ПГБ, составляющей менее 8 мас.%, скорость вращения практически не влияет на величину вязкости. При повышении концентрации ПГБ более 8 мас.%, вязкость немного снижается по мере увеличения скорости сдвига. Вязкость растворов не зависит от скорости сдвига, что характерно для ньютоновских жидкостей. При дальнейшем повышении концентрации полимера вязкость раствора значительно увеличивается.

На рисунке 2 показана морфология нановолокон при изменении концентрации ПГБ от 4% до 12 мас.%. При низкой концентрации ПГБ (менее 8 мас.%) в результате процесса электроформования образуются нановолокна с множественными дефектами в виде частиц и «бусинок». При концентрации ПГБ от 8 мас.% до 12 мас.% процесс электроформования является наиболее стабильным, что подтверждается наличием бездефектных волокон. Однако с повышением концентрации ПГБ от 4 мас.% до 12 мас.% наблюдается увеличение диаметра нановолокна ПГБ от  $571 \pm 9,8$  нм до  $1156 \pm 137$  нм.

Для успешного создания бездефектных волокон с небольшим диаметром, прежде всего, необходимо определить оптимальный технологический режим, концентрацию раствора, а также условия окружающей среды. Результаты исследования являются основой для выбора оптимального режима для создания нановолокнистых мембран на основе ПГБ с характеристиками для дальнейшего применения в области фильтрации воды.

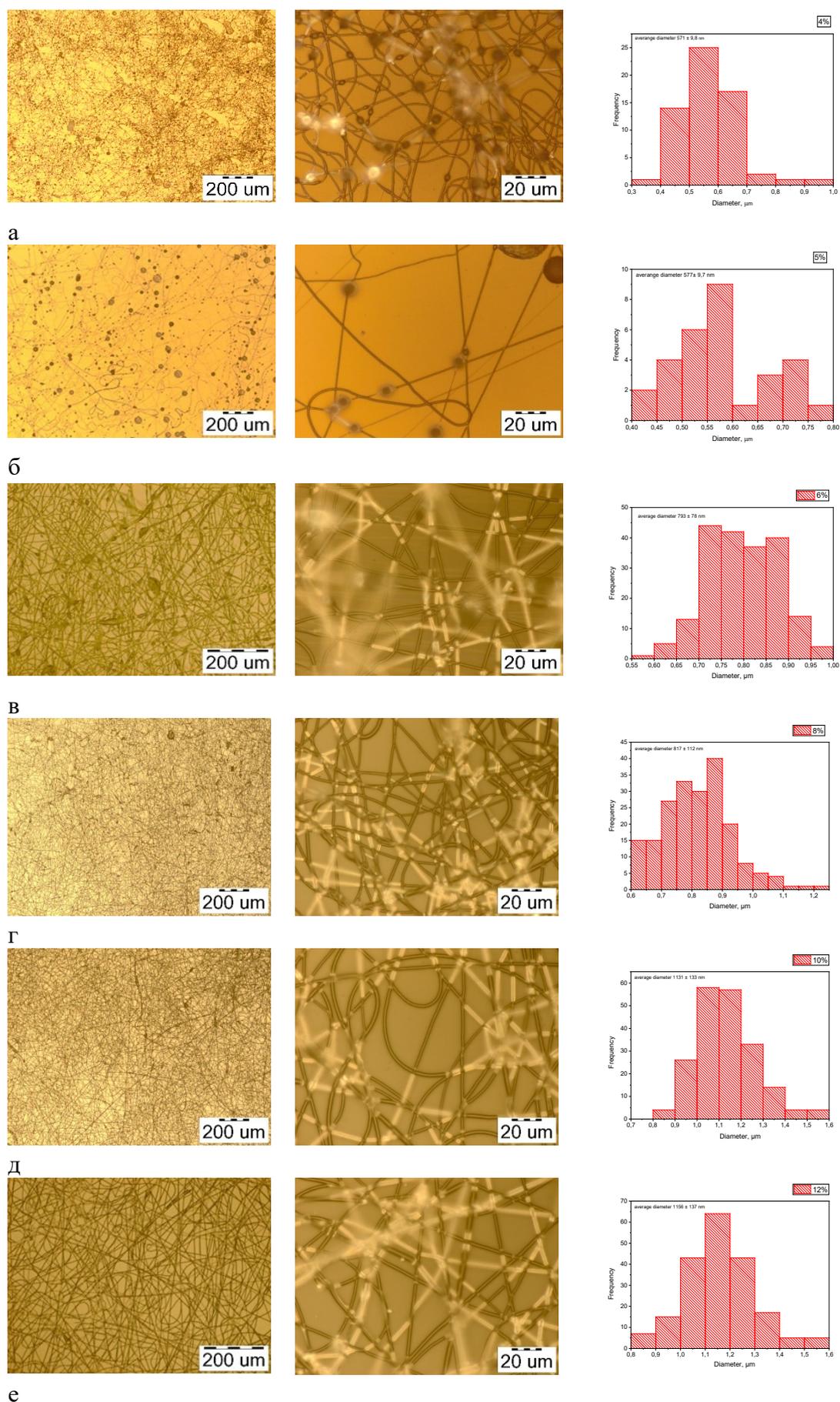


Рис. 2. Морфология нановолокон при изменении концентрации ПГБ а) 4 мас.%; б) 5 мас.%; в) 6 мас.%; г) 8 мас.%; д) 10 мас.%; е) 12 мас.%

## Литература

1. Fane A.G., Wang R., Hu M.X. Synthetic Membranes for Water Purification: Status and Future // *Angew. Chemie Int. Ed.* John Wiley & Sons, Ltd. – 2015. – Vol. 54. – №. 11. – Pp. 3368–3386.
2. Ismail N.H. et al. Hydrophilic polymer-based membrane for oily wastewater treatment: A review // *Sep. Purif. Technol.* Elsevier. – 2020. – Vol. 233. – Pp. 116007.
3. Dharupaneedi S.P. et al. Membrane-based separation of potential emerging pollutants // *Sep. Purif. Technol.* Elsevier. – 2019. – Vol. 210. – Pp. 850–866.
4. Brown T.D., Dalton P.D., Hutmacher D.W. Melt electrospinning today: An opportune time for an emerging polymer process // *Prog. Polym. Sci.* Pergamon. – 2016. – Vol. 56. – Pp. 116–166.
5. Zhang L. et al. A review: carbon nanofibers from electrospun polyacrylonitrile and their applications // *J. Mater. Sci.* 2013 492. Springer. – 2013. – Vol. 49. – №. 2. – Pp. 463–480.
6. Cui J. et al. Electrospun nanofiber membranes for wastewater treatment applications // *Sep. Purif. Technol.* Elsevier. – 2020. – Vol. 250. – P. 117116.
7. Zhao R. et al. Porous Aromatic Framework Modified Electrospun Fiber Membrane as a Highly Efficient and Reusable Adsorbent for Pharmaceuticals and Personal Care Products Removal // *ACS Appl. Mater. Interfaces.* American Chemical Society. – 2019. – Vol. 11. – №. 18. – Pp. 16662–16673.
8. Zhang J. et al. Taro leaf-inspired and superwetttable nanonet-covered nanofibrous membranes for high-efficiency oil purification // *Nanoscale Horizons.* The Royal Society of Chemistry. – 2019. – Vol. 4. – №. 5. – Pp. 1174–1184.
9. Tian H. et al. Electrospinning of polyvinyl alcohol into crosslinked nanofibers: An approach to fabricate functional adsorbent for heavy metals // *J. Hazard. Mater.* Elsevier. – 2019. – Vol. 378. – P. 120751.
10. Pham L.Q. et al. A Review on Electrospun PVC Nanofibers: Fabrication, Properties, and Application // *Fibers* 2021, Vol. 9, Page 12. Multidisciplinary Digital Publishing Institute. – 2021. – Vol. 9. – №. 2. – 12 p.
11. Sundaran S.P., Reshmi C.R., Sujith A. Tailored design of polyurethane based fouling-tolerant nanofibrous membrane for water treatment // *New J. Chem.* The Royal Society of Chemistry. – 2018. – Vol. 42. – №. 3. – Pp. 1958–1972.
12. Otake Y. et al. Biodegradation of low-density polyethylene, polystyrene, polyvinyl chloride, and urea formaldehyde resin buried under soil for over 32 years // *J. Appl. Polym. Sci.* John Wiley & Sons, Ltd. – 1995. – Vol. 56. – №. 13. – Pp. 1789–1796.
13. Ramakrishna S. et al. An introduction to electrospinning and nanofibers // *An Introd. to Electrospinning Nanofibers.* World Scientific Publishing Co. – 2005. – P. 1–382.
14. Kai D., Liow S.S., Loh X.J. Biodegradable polymers for electrospinning: towards biomedical applications // *Mater. Sci. Eng. C. Mater. Biol. Appl. Mater Sci Eng C Mater Biol Appl.* – 2014. – Vol. 45. – Pp. 659–670.
15. Ingavle G.C., Leach J.K. Advancements in electrospinning of polymeric nanofibrous scaffolds for tissue engineering // *Tissue Eng. Part B. Rev. Tissue Eng Part B Rev.* 2014. Vol. 20. – №. 4. – Pp. 277–293.

УДК 62.4

## ПРИМЕНЕНИЕ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ IMAGEJ И ORIGINPRO ДЛЯ АНАЛИЗА ДИСПЕРСНОГО СОСТАВА МИКРОЧАСТИЦ ПЛАСТМАССЫ НА ПРИМЕРЕ СУСПЕНЗИОННОГО ПВХ

Носова А.О. (аспирант, Университет ИТМО)

Научный руководитель: д.т.н., профессор Успенская М.В. (Университет ИТМО)

e-mail: [aonosova@itmo.ru](mailto:aonosova@itmo.ru)

*Микропластик представляет собой совокупность пластиковых частиц различного химического состава и размера, чаще всего, до 5 миллиметров. Информация о размерах и форме частиц пластмассы важна для формирования наиболее полного представления результатов анализа пробы. В работе рассмотрено применение программного обеспечения ImageJ (NIH) и OriginPro для анализа дисперсного состава микрочастиц суспензионного ПВХ.*

**Ключевые слова:** микропластик, анализ дисперсного состава, ImageJ, OriginPro.

Проблема загрязнения микропластиком различных сред в последние годы становится все актуальнее. Микропластиком принято считать полимерные частицы различного химического состава, формы и размера в среднем до 5 мм [1]. Разработка методик определения размеров и формы рассматриваемых частиц актуальна, потому как наличие этих данных важно для формирования наиболее полного представления результатов анализа пробы [2]. Оценка формы частиц пластика может быть крайне важным этапом, так как некоторые исследования показывают, что токсичность данных частиц зависит не только от их размера (микропластик

размером более 50 мкм может обладать более высокой токсичностью, чем менее 50 мкм), но и формы, потому как токсичность микрочастиц пластмассы неправильной и вытянутой формы (т.е. фрагментов и волокон) может быть выше, чем у округлых [3]. В зависимости от оснащения лаборатории для определения данных показателей могут быть использованы, например, методы оптической микроскопии с последующей обработкой данных, лазерная дифракция, СЭМ, ИК-Фурье или рамановская микроскопия и др. [3, 4, 5]. Каждый из методов имеет свои преимущества и недостатки. Конечно, использование дорогостоящего оборудования может дать наиболее качественные результаты, а также, в некоторых случаях, позволит определить химическую природу полимера, но зачастую выполнение работы на таком оборудовании требует высокой квалификации оператора. Результаты оптической микроскопии могут быть не такими точными, но сам метод достаточно прост в использовании и не требует наличия дорогостоящего оборудования, которого может не быть в лаборатории [6]. В данной работе рассматривается возможность использования программного обеспечения ImageJ (National Institutes of Health) и OriginPro (OriginLab Corporation) для анализа распределения размеров и формы микрочастиц ПВХ, микрофотографии которых были получены с помощью оптического микроскопа [7].

Для выполнения поставленных задач необходимо было:

- 1) обработать 10 изображений (микрофотографий) с помощью ImageJ;
- 2) получить необходимые результаты измерений в ImageJ;
- 3) перенести полученные данные в OriginPro и произвести необходимые расчеты для определения закона распределения микрочастиц ПВХ по размерам;
- 4) построить графики в OriginPro;
- 5) сделать выводы о размерах микрочастиц ПВХ, законе распределения, а также дать оценку формы этих микрочастиц.

### **Материалы и методы**

Исследование проводили с использованием микрофотографий микрочастиц ПВХ, полученных с помощью оптического микроскопа STM6 (OLYMPUS, Япония) и объективов с увеличением 5x и 10x. Обработка изображений, измерения диаметров Ферета и значений дескрипторов формы производились с использованием программного обеспечения ImageJ. Обработку результатов, расчеты и построение графиков проводили с помощью программы OriginPro (версия 2022b, 9.9.5.167).

### **Результаты и обсуждение**

Во-первых, было необходимо было определить параметр, который бы мог предоставить необходимые размерные характеристики. При выполнении анализа частицы методом микроскопии визуализируется её плоская проекция, и охарактеризовать частицу можно при помощи различных размерных параметров, таких как, к примеру, диаметр (линейный размер), диаметры Ферета и Мартина [8]. В данной работе для определения размеров частиц был выбран максимальный диаметр Ферета ( $D_{F_{max}}$ ) – максимальное расстояние между двумя параллельными касательными к поверхности частицы, так как частицы ПВХ не имеют правильной геометрической формы, а также по причине того, что для отнесения частицы пластмассы к микропластику важно знать ее максимальный линейный размер, т.е. длину, чем и является максимальный диаметр Ферета [1, 8, 9, 10].

Обработка изображения и измерения производились с помощью программного обеспечения ImageJ, программного обеспечения для анализа и обработки изображений с открытым исходным кодом, которое написано на языке Java сотрудниками НИИ и распространяется без лицензионных ограничений в открытом доступе. Данный факт делает данное программное обеспечение привлекательным для использования. Есть и другие программы с отличными возможностями для обработки изображений, например, программное обеспечение MIPAR. Однако использование этого программного обеспечения требует покупки лицензии, поэтому для некоторых людей становится невозможным его использование.

В рассматриваемом случае на микрофотографиях необходимо было выделить определенную область – частицы и дать количественную интерпретацию полученных данных. В ImageJ для выделения интересующей области необходимо получение бинарного изображения, т. е. изображения, в котором каждый пиксель может представлять только один из двух цветов – черного и белого. Методов бинаризации существует достаточно много [11]. В данном случае обработка микрофотографий производилась методом автоматической пороговой бинаризации (метод `getAutoThreshold()` – вариант алгоритма `IsoData`, при котором происходит несколько итераций, при этом часть пикселей переходит из одного класса в другой). Метод `getAutoThreshold()` подразумевает определение порогового значения, которое можно использовать для разделения изображения на объекты и фон. Для этого ImageJ использует тестовое значение порога и вычисляет среднее значение пикселей ниже (`average background`) и выше (`average objects`) данного тестового значения. Далее вычисляется среднее между полученными диапазонами, увеличивается значение тестового порогового значения и процесс повторяется. Увеличение тестового значения порога прекращается и принимается за необходимое для разделения тогда, когда оно начинает превышать составное среднее значение [12].

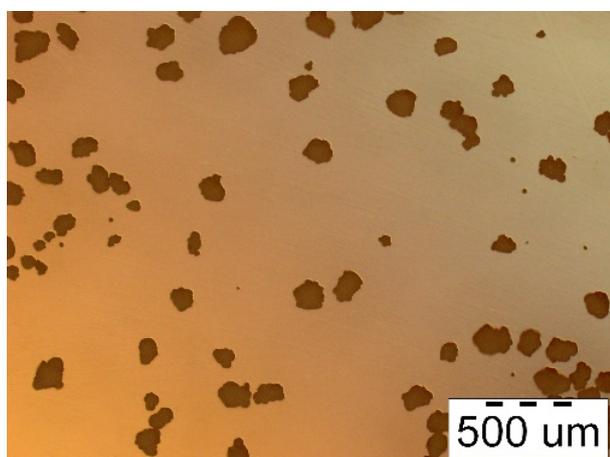


Рис. 1. Исходное изображение микрочастиц ПВХ

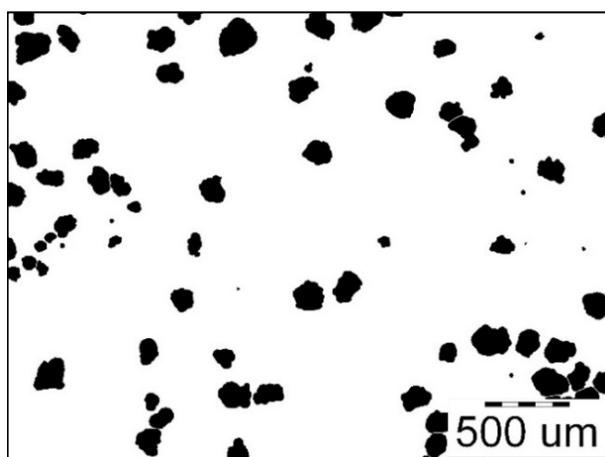


Рис. 2. Изображение после обработки

Первым шагом являлось преобразование изображения из RGB в 8-bit (Image – Type – 8-bit) и установление масштаба (Analyze – Set Scale), далее производилась его бинаризация, то есть перевод в двухцветное черно-белое (Process – Binary – Make binary). Пример исходного и двухцветного изображений представлены на рисунке 1. Данные действия позволили получить четкие контурные изображения частиц. При появлении «отверстий» внутри частиц из-за световых искажений при получении микрофотографий использовалась функция «Fill Holes» (Process – Binary – Fill Holes). В том случае, если на исходном изображении несколько частиц располагались близко друг к другу и их контуры после выполнения вышеизложенных шагов сливались в один, производилось их разделение с помощью функции `Watershed` (Process – Binary – Watershed). Сегментация с помощью `Watershed` — это способ автоматического разделения или разрезания соприкасающихся частиц методом вычисления евклидовых расстояний и нахождения локальных максимумов (пиков). Затем области найденных пиков максимально расширяются либо до достижения края частицы, либо до края области другого пика [13]. Сегментация `Watershed` лучше всего работает для гладких выпуклых объектов, которые не слишком сильно перекрываются и не всегда корректно определяла границы между частицами при выполнении данной работы. В этом случае дополнительно использовалось программное обеспечение Adobe Photoshop для ручной прорисовки границ. Пример изображения после обработки представлен на рисунке 2. Далее с помощью функции порога `Threshold` (Image – Adjust – Threshold) выполнялось выделение той части изображения, которая требовалась для получения результатов измерений, то есть проекций частиц.

Далее были выбраны необходимые параметры измерения (Analyze – Set Measurements): Feret’s diameter, shape descriptors. С помощью функции Analyze particles (Analyze – Analyze Particles), которая позволяет автоматически, в соответствии с пороговым выделением, определить границы частиц и произвести необходимые измерения, были получены необходимые данные о максимальном диаметре Ферета частиц и значениях дескриптора формы. В результате были получены данные измерения максимального диаметра Ферета 177 частиц ПВХ.

В ImageJ возможно получение гистограммы распределения, однако, формируемая гистограмма имеет недостаточно удобный для последующего анализа вид [11]. По этой причине полученные данные переносились в программу OriginPro (OriginLab Corporation), в которой осуществлялась дальнейшая обработка и анализ. ImageJ позволяет выгрузить полученные результаты в формате CSV-файла для их переноса в необходимую для последующего анализа среду.

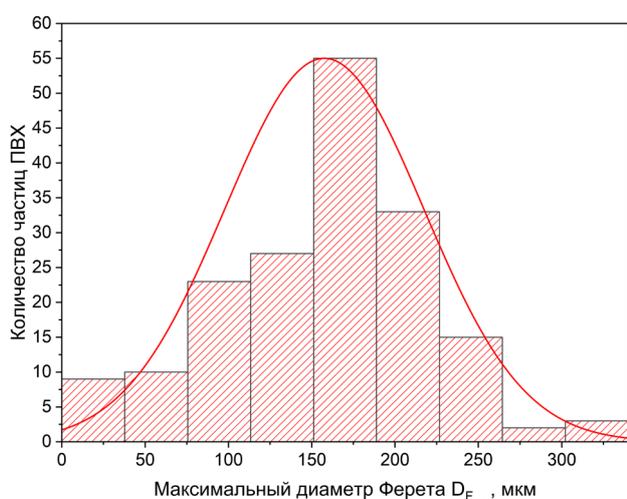


Рис. 3. Гистограмма распределения полученных значений максимального диаметра Ферета  $D_{F_{max}}$  частиц ПВХ

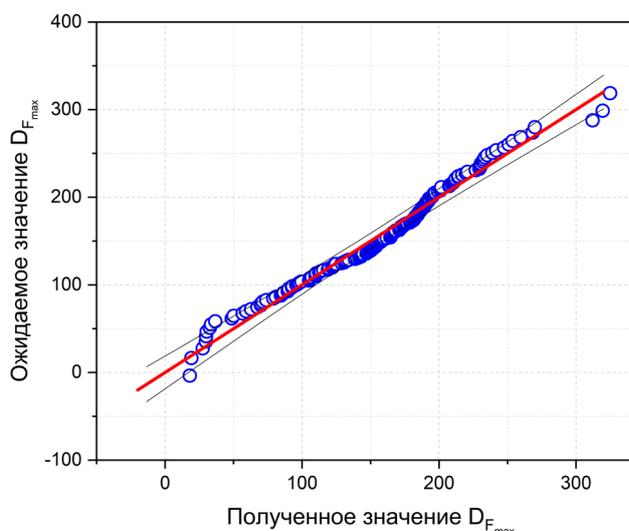


Рис. 4. График квантиль-квантиль

В OriginPro был определен средний максимальный диаметр Ферета частиц ПВХ  $\bar{D}_{F_{max}}$ , который составил  $157 \pm 59$  мкм. Для визуальной оценки принадлежности данных нормальному закону распределения были построены гистограмма распределения значений максимального диаметра Ферета, представленная на рисунке 3, и график квантиль-квантиль, который показывает связь между наблюдаемыми значениями переменных (ось X) и теоретическими квантилями нормального распределения (ось Y) (рис.4) [11]. Также, дополнительно была проведена проверка с помощью функции NormalityTest (Statistics – Descriptive statistics – NormalityTest) по критерию Колмогорова-Смирнова ( $P = 0,05$ ). После визуальной оценки графиков и получения результатов NormalityTest был сделан вывод о том, что полученные данные подчиняются нормальному закону распределения.

NormalityTest

Kolmogorov\_Smirnov

	DF	Statistic	p-value	Decision at level(5%)
MaxFeret	177	0,07501	0,2669	Can't reject normality

MaxFeret: At the 0.05 level, the data was significantly drawn from a normally distributed population.

Рис. 5. Результаты NormalityTest

Важно было попытаться дать оценку формы частиц ПВХ, так как это необходимая характеристика. Получение полноценной характеристики формы частиц, которые являются объемными телами, по имеющимся проекциям невозможно, поэтому в целях быстрой и

приблизительной оценки формы было принято решение использовать показатель Circularity (C) в ImageJ. Circularity — это параметр формы, который связывает площадь и периметр, а также комбинированный показатель неравномерности (анизометрия и негладкость) для выпуклых и невыпуклых частиц. Данный показатель автоматически рассчитывается по формуле (1):

$$C = \frac{4\pi \cdot A}{P^2}, \quad (1)$$

где A — площадь частицы, мкм<sup>2</sup>; P — периметр частицы, мкм.

Значение 1,0 указывает на идеальный круг. Когда значение приближается к 0,0, оно указывает на все более вытянутую форму частицы. При выполнении данной работы среднее значение данного показателя было равно  $0,702 \pm 0,088$ , что указывает на то, что форму частиц ПВХ можно охарактеризовать как стремящуюся к округлой. Гистограмма распределения по рассматриваемому показателю представлена на рисунке 6.

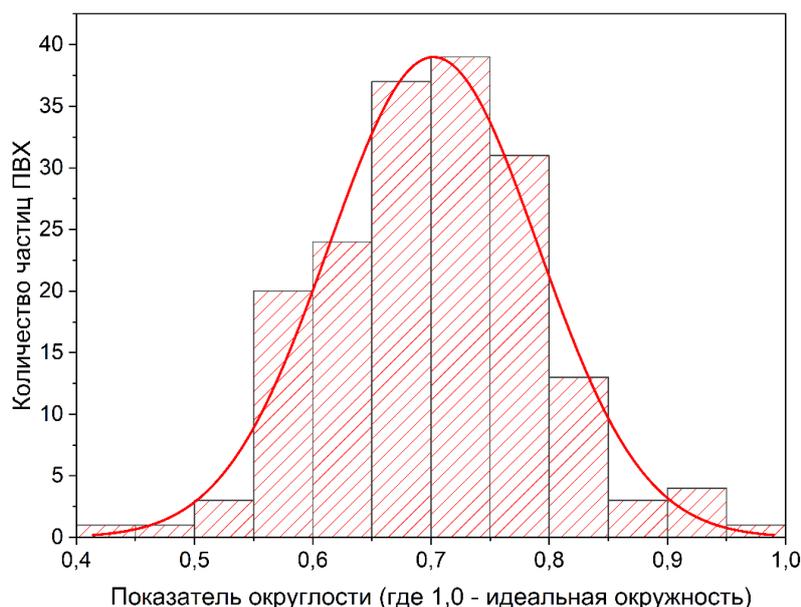


Рис. 6. Гистограмма распределения по показателю Circularity

Микропластик — относительно новая экологическая проблема. Методы анализа размера и формы таких микрочастиц разнообразны и выбор метода зависит от оснащённости лаборатории и квалификации оператора. При этом, в связи с тем, что есть предположения о взаимосвязи токсичности частиц и их размера и формы, данные показатели становятся крайне важными для определения.

В данной работе была рассмотрена возможность применения программного обеспечения ImageJ и OriginPro для анализа дисперсного состава микрочастиц пластмассы на примере суспензионного ПВХ. В ImageJ обработано 10 микрофотографий, получены значения максимальных диаметров Ферета 177 частиц. Средний максимальный диаметр Ферета частиц ПВХ  $\bar{D}_{F_{max}}$  составил  $157 \pm 59$  мкм. С помощью OriginPro построена гистограмма распределения полученных значений максимального диаметра Ферета частиц ПВХ, а также проведена проверка подчинения данных нормальному распределению и построен график квантиль-квантиль. С помощью показателя Circularity в ImageJ проведена приблизительная оценка формы частиц. Можно сказать, что форма частиц стремится к округлой.

Данный подход можно использовать для оценки размеров и формы частиц такого загрязнителя, как микропластик, если в лаборатории имеется оптический микроскоп.

## Литература

1. Courtney A., Joel B., Holly B. Proceedings of the International Research Workshop on the Occurrence, Effects and Fate of Microplastic Marine Debris (англ.) // NOAA Technical Memorandum: journal. — 2009. — January.

2. Wu M., Yang C., Du C., Liu H. Microplastics in waters and soils: Occurrence, analytical methods and ecotoxicological effects. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. – 2020. – №. 202. – P. 110910.
3. Jung J.W. et al. Ecological risk assessment of microplastics in coastal, shelf, and deep sea waters with a consideration of environmentally relevant size and shape // *Environmental Pollution*. – 2021. – Т. 270. – С. 116217.
4. Сидоров В.Н., Ширина Н.Ю., Мурашов А.А. Изменение дисперсного состава твердых частиц при диспергировании в аппарате роторного типа // *Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований*. – 2019. – №. 7. – С. 124–129.
5. Тимошук Е.И. и др. Применение лазерной дифракции для определения размеров частиц наполнителей и пресс-порошков в производстве тонкозернистых графитов // *Заводская лаборатория. Диагностика материалов*. – 2010. – Т. 76. – №. 5. – С. 26–29.
6. Wang W., Wang J. Investigation of microplastics in aquatic environments: an overview of the methods used, from field sampling to laboratory analysis // *TrAC Trends in Analytical Chemistry*. – 2018. – Т. 108. – Pp. 195-202.
7. Schneider C.A., Rasband W.S., Eliceiri K.W. (2012). NIH Image to ImageJ: 25 years of image analysis. *Nature Methods*. – №. 9(7). – Pp. 671–675. DOI:10.1038/nmeth.2089.
8. Домкин К.И., Трусов В.А., Гусев А.М. Физические основы измерения размера частиц // *Труды Международного симпозиума «Надежность и качество»*. – 2011. – Т. 2. – С. 256–259.
9. Блынская Е.В., Буева В.В., Алексеев К.В., Алексеев В.К., Минаев С.В., Тишков С.В. Оценка размера и формы гранул ГСБ-106, полученных влажным гранулированием, с использованием метода анализа изображений // *Вопросы обеспечения качества лекарственных средств* – 2021. – №2(32) – С. 47–53.
10. Исходжанова И.В., Бондаренко Ю.А., Лаптева М.А. Оценка структуры монокристаллического жаропрочного никелевого сплава, полученного при различных условиях направленной кристаллизации, с использованием методов количественного анализа видеоизображений // *Труды ВИАМ*. – 2015. – №. 12. – С. 44–52.
11. Зильберглейт М.А., Темрук В.И. Применение пакета IMAGEJ для обработки изображений, полученных электронной сканирующей микроскопией (на примере анализа бумаги) // *Полимерные материалы и технологии*. – 2017. – Т. 3. – №. 1. – С. 71.
12. Frequently Asked Questions. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://imagej.nih.gov/ij/docs/faqs.html#auto> (дата обращения: 13.10.2022).
13. Ferreira T., Rasband W. ImageJ user guide // *ImageJ/Fiji*. – 2012. – 187 с.
14. Сорока Я.А. Разработка алгоритма работы с ошибками неоднородности выборочной совокупности данных с использованием нейрореподобных структур // *Глобальный научный потенциал*. – 2013. – №. 2. – С. 48–53.

УДК 544.773.43

## **БИОМАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ЖЕЛАТИН-ТАННИНОВЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ**

**Осетров К.О.** (аспирант, Университет ИТМО)

**Научный руководитель: д.х.н., профессор Успенская М.В.** (Университет ИТМО)

*e-mail:* [ko\\_osetrov@itmo.ru](mailto:ko_osetrov@itmo.ru)

*В докладе предложены принципы создания перспективных желатин-танниновых гидрогелей, предназначенных для синтеза непосредственно перед применением в области раневых повязок. Рассмотрены сорбционные, термические, физико-механические свойства, а также структурные особенности.*

**Ключевые слова:** желатин, таннин, биоматериалы.

На данный момент разработан широкий спектр биоматериалов различного функционального назначения. Тем не менее актуальным остается запрос на разработку новых материалов в большей степени отвечающих запросам, выдвигающимся к применяемым в области медицины гидрогелям.

Для соответствия требованиям материалы должны обладать рядом свойств: физико-механической прочностью, сорбционной емкостью, проницаемостью для влаги и воздуха, стерильностью, а также множеством других варьирующихся в зависимости от специфики применения. В общем случае биоматериалы должны быть максимально приближены по своим характеристикам к функциональным аналогам природного происхождения. Это касается в первую очередь протезов, раневых повязок и имплантов.

Новым витком развития стало появление “умных” материалов, обладающих специальными свойствами – самовосстановлением, адгезивностью к влажным поверхностям,

чувствительностью к физическим и иным факторам. Одним из представителей этого интенсивно развиваемого направления являются гидрогели на основе таннина, сшитые координационными связями. Именно о них и пойдет речь в текущем докладе.

При взаимодействии с белками и другими веществами, имеющими в своем составе группы первичных аминов, таннины после окисления обладают способностью образовывать вторичные амина и иминосвязи (рисунок). Кроме того, таннины являются отличными комплексообразователями и могут формировать связанные структуры с многими металлами. В зависимости от pH могут образовываться довольно сильно различающиеся структуры с разными характеристиками. Так, в интервале pH до 5.5 образуются преимущественно монокомплексы таннина и металла (что не позволяет сформировать сшитую структуру), при pH 5.5÷9 – бис-комплексы, а при pH превышающих 9 формируются трис-комплексы [1]. В свою очередь это естественно сказывается на прочности, сорбционной емкости и других характеристиках образующихся гидрогелей. Наличие же большого количества аминогрупп в мономере обеспечивает формирование сильных ковалентных связей по механизмам присоединения Михаэля и образования оснований Шиффа. Таким образом, как нельзя лучше на роль мономеров для синтеза биоматериалов с использованием таннина подходят белковые структуры. Желатин в данном случае является одним из наиболее предпочтительных белков. Он широко распространен, схож во многом своему исходному компоненту (коллагену), обладает низкой стоимостью, а его модификации, предназначенные для медицинских целей, характеризуются стерильностью.

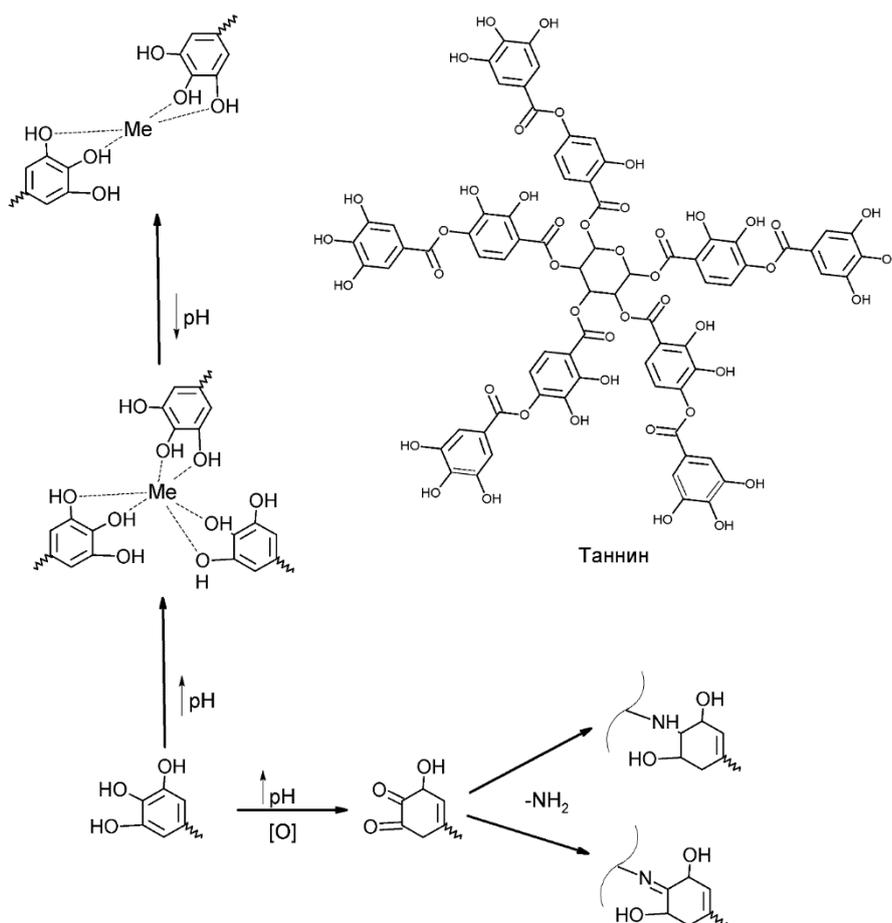


Рисунок. Схема реакций

Комбинирование же обоих методов сшивки и контроль реакции с помощью изменения pH позволяет получать продукты со специфическими свойствами. Сшивка с металлами обеспечивает обратимый характер связей, ковалентные связи прочную структуру, а наличие не затронутых реакциями внутренних гидроксильных групп возможность реакции на стимулы (pH, температура, ионная сила раствора и др.). Так, были получены гидрогели способные

самовосстанавливаться после повреждений, обладающие системой обратимых связей, на основе допамина (функциональный аналог танина) и полиаллиламина [2]. Такие материалы показали значительно превосходящие механические характеристики в сравнении с аналогами, сшитыми только по одному из механизмов. Кроме того, они обладали антибактериальной активностью к довольно широкому спектру бактериальных культур. Синтезированы гидрогели поливинилового спирта и танина с эффектом памяти формы [3], который может найти широкое применение при изготовлении протезов, имплантатов. Адгезивные к мокрым поверхностям гидрогели на основе полиаллиамина и галловой кислоты были получены для медицинских целей [4]. Позволяя таким гидрогелям стать предтечей для разработки мукоадгезивных систем адресной доставки лекарств, что, в следствие, сложности задачи является довольно острой проблемой в сфере терапии ряда заболеваний. Клеточная адгезия была продемонстрирована у гидрогелей на основе полиакриламида и танина [5], что безусловно найдет применение и в области раневых повязок и имплантов. Кроме того, были синтезированы материалы на основе полипиррола и танина, обладающие электропроводимостью и предлагающиеся для восстановления функциональности спинного мозга [6]. Также подобные материалы были получены не только с использованием электропроводящего мономера, но и с использованием металлических наночастиц. Такие гидрогели могут найти применение не только для замены утраченных или поврежденных нервов, но и для контроля раневых полостей, а также моделирования тканей.

Широкое распространение гидрогелевых материалов обуславливает повышенный интерес обширного круга исследователей. Несмотря на относительно высокий интерес к тематике разработки гидрогелей с использованием танина эта тема является довольно новой и требует значительно более глубокой проработки.

Гидрогели, сшитые с помощью танина предлагают множество заманчивых перспектив, позволяющих с помощью их уникальной структуры решить многие задачи стоящие перед биоматериалами сегодня. Усиливающийся с каждым годом запрос на разработку “умных” материалов обеспечивает желатин-таниновым гидрогелям место среди одного из интенсивно разрабатываемых направлений.

## Литература

1. Krogsgaard M., Behrens M.A., Pedersen J.S., Birkedal H. Self-Healing Mussel-Inspired Multi-pH-Responsive Hydrogels // *Biomacromolecules*. – 2013. – Vol. 14. – №. 2. – Pp. 297-301.
2. Birkedal H., Chen Y. Mussel inspired self-healing materials : Coordination chemistry of polyphenols // *Advances in inorganic chemistry*. – 2020. – Vol. 76. – Pp. 269-298.
3. Chen Y.N., Peng L., Liu T. et al. Poly(vinyl alcohol)-Tannic Acid Hydrogels with Excellent Mechanical Properties and Shape Memory Behaviors // *ACS Applied Materials and Interfaces*. – 2016. – Vol. 8. – №. 40. – Pp. 27199-27206.
4. Lee S.Y., Lee J.N., Chathuranga K. et al. Tunicate-inspired polyallylamine-based hydrogels for wet adhesion: A comparative study of catechol- and gallol-functionalities // *Journal of Colloid and Interface Science*. – 2021. – Vol. 601. – Pp. 143-155.
5. Hu X., Wang Y., Zhang L., Xu M. Morphological and mechanical properties of tannic acid/PAAm semi-IPN hydrogels for cell adhesion // *Polym Test*. – 2017. – Vol. 61. – Pp. 314-323.
6. Zhou L., Fan L., Yi X., Zhou Z., Liu C., Fu R., Dai C., Wang Z., Chen X., Yu P., Chen D., Tan G., Wang Q., Ning C. Soft Conducting Polymer Hydrogels Cross-Linked and Doped by Tannic Acid for Spinal Cord Injury Repair // *ACS Nano*. – Vol. 12. – №. 11 – Pp.10957–10967.

## Предиктивная аналитика для углеводородной энергетики

---

УДК 519.254; 519.876.5; 004.891; 004.942

### **ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРЕДИКТИВНОЙ АНАЛИТИКИ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ НЕФТЕГАЗОВОГО КОМПЛЕКСА**

**Касмынин К.А.** (студент, Пятигорский институт (филиал) «Северо-Кавказский федеральный университет»)

**Научный руководитель: к.т.н., доцент Цаплева В.В.** (Пятигорский институт (филиал) «Северо-Кавказский федеральный университет»)

*e-mail:* [kirill.kas@mail.ru](mailto:kirill.kas@mail.ru)

*В работе рассмотрены методы и подходы к использованию данных о состоянии оборудования и параметрах скважины для оптимизации технологических процессов нефтегазовой отрасли, таких как добыча и переработка нефти. Объединение нескольких методов позволяет повысить точность прогнозирования дебита нефти и возможных поломок оборудования. Описаны инструменты для работы с данными, процесс подготовки и анализа данных, а также эффект от использования предиктивной аналитики в нефтегазовой отрасли.*

**Ключевые слова:** анализ данных, предиктивная аналитика, дебит нефти, временной ряд, скважина, модель, нефть, оборудование, оптимизация.

Предиктивная аналитика сегодня активно внедряется во все сферы жизни человека. Стремительно развивается сфера Data Science, которая позволяет извлекать полезную информацию из больших массивов данных. Анализ данных дает возможность решить огромное количество задач, в том числе и в нефтегазовой отрасли. Например, с помощью предиктивной аналитики можно предсказать поломки оборудования, добывающего или перерабатывающего углеводородное сырье, дебит нефти или иные параметры нефтяных скважин, что позволит повысить эффективность их использования и снизить издержки нефтегазовых компаний. Существует множество методов и подходов к анализу данных, каждый из которых обладает своими плюсами и минусами. В зависимости от рассматриваемой задачи используется наиболее подходящий метод или группа методов.

В первую очередь, ответим на вопрос, что такое предиктивная аналитика и зачем нам нужен анализ данных. Предиктивная аналитика — это совокупность методов анализа данных и технологий их интерпретации, позволяющих принимать эффективные решения в будущем на основе исторических данных [1].

В свою очередь, анализ данных – это область математики и информатики, в которой используются различные математические подходы и алгоритмы получения полезной информации из рассматриваемых данных с целью принятия решений. Процесс исследования, фильтрации, преобразования и моделирования данных с целью извлечения полезных знаний и принятия решений, также является анализом данных [1].

Использование предиктивной аналитики позволит оптимизировать технологические процессы нефтегазовой отрасли. В настоящее время уже внедряются системы мониторинга нефтедобывающего оборудования и прогнозирующие системы.

Предсказание дебита нефти и газа является одним из наиболее значимых факторов в нефтяной промышленности. Прогноз добычи позволяет понять рентабельность проектов, инвестиций, принять решение о бурении новых и режиме эксплуатации существующих скважин [2].

Благодаря предиктивной аналитике появляется возможность предугадать неисправности и сбои в работе оборудования еще до того, как они произойдут, составлять графики ремонтных работ и технического обслуживания. Это позволит повысить безотказность работы оборудования и обеспечить значительную экономическую выгоду за счет сокращения внеплановых простоев скважин, нефтеперерабатывающих заводов и эффективным использованием оборудования [3].

Оптимизировать можно не только процесс добычи нефти, но также и ее переработки. Первичная переработка подразумевает разделение нефтяного сырья на разнообразные вещества. Для этого используется печь и ректификационная колонна. Процесс разделения сырья является достаточно дорогим, поэтому существует необходимость оптимизации данного процесса [4]. Уже сегодня применяются системы автоматизации, кроме того можно использовать системы предиктивной аналитики. Для этого можно находить аномальные данные во временных рядах температуры, давления в различных частях колонны и датчиках расхода. Отклонения от нормы могут свидетельствовать о неисправности оборудования [4].

Для предсказания дебита нефти помимо анализа данных параметров работы скважины, можно применять геологическое и гидродинамическое моделирование. Геологическая модель создается, основываясь на параметрах скважины. Строится трехмерный массив нефтегазоносных пластов. Далее каждому элементу задаются такие характеристики породы как пористость, проницаемость, обводненность, газонасыщенность, давление и другие.

Затем основываясь на геологическую модель, рассчитывается динамическая модель, которая отличается от статической тем, что она вычисляет, как меняются параметры скважины во времени в каждой элементе трехмерного массива. Динамическая модель предоставляет информацию о том, в каком месте бурить новые скважины и сколько возможно добыть нефти [2].

Используя метод моделирования, можно ответить на вопросы о месте бурения и предполагаемом количестве нефти в пласте, однако так или иначе существует необходимость использовать аналитический метод, для решения некоторых задач оптимизации технологических процессов.

Таким образом, наиболее оптимальным является применение гибридного подхода, то есть моделирование процесса добычи и анализ данных по историческим и текущим параметрам скважины и оборудования. Однако необходимо учесть, что создание высокоточной гидродинамической модели трудоёмкий процесс. Для построения модели может понадобиться несколько месяцев, а в некоторых случаях год и больше. Это зависит от числа скважин и имеющихся информации по месторождению. Скважины используются не только для добычи, но также для получения информации. Месторождения обладают большой протяженностью, а скважины обычно находятся друг от друга на расстоянии в несколько сотен метров, а их диаметр около 15 сантиметров. При условии того, что созданная модель нефтяного пласта представляет собой сложную систему с большой чувствительностью к исходным данным, тогда неточные данные способны стать причиной ошибочных результатов. В итоге процесс моделирования проводится по неполным данным [2].

Ограниченность исходных данных не позволяет построить прогноз на длительное время, кроме того в данном случае прогноз может быть корректен только если внешняя среда остается неизменной [2].

Эти данные можно использовать в аналитическом методе. Для предсказания дебита нефти необходимо найти зависимость этого параметра скважины от других ее параметров, то есть построить корреляционную таблицу и на ее основе определить, с какими данными взаимодействовать для построения прогноза. Также и с другими параметрами. Предсказанный дебит позволит скорректировать режим работы насосов и определить необходимость бурения новых скважин. Для определения технического состояние нефтяной скважины используется показатель обводненности.

Работа с данными проводится в несколько этапов. В первую очередь это определение проблем и постановка задач, затем сбор данных и их подготовка, после чего можно перейти к самому анализу [5]. Полученный результат можно представить в различном виде, например, это могут быть визуальные элементы, либо табличные данные.

Полученный прогноз должен быть преобразован в удобный для оператора вид. В данном случае, оператор — это человек, который принимает решение на основе прогноза. Для этого создается прогнозирующая система, включающая в себя сам предсказывающий модуль и модуль для работы оператора с ним. Это может быть компьютерное приложение или веб-сайт, которые обладают понятным интерфейсом. Кроме того, может быть внедрен модуль, позволяющий оператору управлять режимом работы оборудования.

В настоящее время во все сферы жизни человека внедряются цифровые технологии, происходит автоматизация технологических процессов и важным условием оптимизации процессов считаются своевременная обработка и анализ крупных объемов данных для помощи в принятии решений и их автоматизации, что даст возможность существенно повысить эффективность технологий, оборудования и транспортировки углеводородов [6].

Существует множество групп методов анализа данных, такие как: описательный анализ, многомерный статический анализ, временные ряды и метод поиска связей и закономерностей [5].

Использование этих групп методов актуально в связи накоплением больших объемов данных. Для решения задач предиктивной аналитики в нефтегазовой отрасли применяются методы моделирования и исследования процессов, а также сопряженные с ними модели и методы, рассматривающие временные ряды, то есть изменение данных во времени. Сегодня существует огромное число подобных методов, которые выбираются в процессе исследования под каждую отдельную проблему, адаптируются под них и используются зачастую совместно с другими подходами и методами [6].

Большинство методов базируются на статистическом аппарате, предполагающем нахождения зависимостей для создания новых элементов временного ряда. Для предсказания не всегда хватает только исторических данных временного ряда. В таком случае, для адекватной точности требуется вводить в модель новые параметры, которые влияют на исследуемый параметр. Необходимо ввести сопутствующие параметры, например, в случае дебита нефти это давление буферное и забойное, расстояние между скважинами и так далее. Нахождение закономерностей во временных рядах без понимания технологического процесса и его контекста способно внести значительную погрешность [6].

Статистический аппарат включает в себя множество способов анализа данных, например метрический, который включает в себя следующие методы: метод ближайших соседей, эталонов и оптимизации метрики. Логический способ включает в себя: закономерности, решающие списки и деревья. Линейные методы – это градиентный и метод опорных векторов. Байесовская статистика, включает в себя: оптимальный байесовский классификатор, оценку плотности, логистическую регрессию. Регрессионный анализ включает в себя: линейную и нелинейную регрессию, предсказание временных рядов, параметрическую и непараметрическую регрессию. Композиционный подход регрессии – это например, линейные и нелинейные методы, бустинг, а также случайные и эвристические алгоритмы. Подход обучение без учителя, включает в себя: кластерный анализ, таксономию, нейронные сети Кохонена, коллаборативную фильтрацию, обучение ассоциативным правилам, частичное обучение, тематическое моделирование, обучение с подкреплением. Для наиболее эффективного решения задач оптимизации помимо предметной области нужно знать методы и подходы исследования и обработки информации [5].

Для применения этих методов нужно подготовить исходные данные. Подготовка подразумевает очистку и оптимизацию данных. Можно составить прогноз, используя необработанные данные, но тогда точность будет гораздо ниже, в сравнении с обработанными данными. Собранные сведения должны соответствовать определенным критериям качества. Данные должны быть полными, точными и актуальными. Это дает возможность извлечь полезные знания, которые помогут принять решение для оптимизации технологического процесса [1].

Информация плохого качества – это недостающие, некорректные или бессмысленные данные. Частые причины наличия таких данных: пропущенные элементы временного ряда, дублирование информации данных, шумы и выбросы [1].

Решить проблему пропущенных значений можно, путем удаления объекта из анализа, также можно высчитать другие значения для отсутствующих элементов, можно пренебрегать отсутствующими элементами во время прогнозирования или заменить отсутствующие данные возможными данными, это может быть, например, среднее арифметическое [1].

Данные могут содержать дубликаты. Есть два способа убрать дублированные данные. Первый предполагает удаление всех элементов, которые содержат дублирования, а второй способ предполагает их объединение в один элемент [1].

Выбросы и шумы – это сильно выделяющиеся показатели в наборе данных. Необходимо обнаружить такие данные и посмотреть на уровень их влияния на результаты прогноза. Обычно проводится двухэтапный анализ с выбросами и без них. Обычно шум не используется в анализе, так как снижает точность прогноза, либо не увеличивает его точность [1].

Для мониторинга состояния оборудования также используются анализ временных рядов, кроме того можно использовать и другие подходы, например, машинное зрение. Обычно при работе с временными рядами нужно найти период с отклоняющимися показателями. Это могут быть данные с датчика технологических объектов системы, которые передают сведения, отклоняющиеся от нормы, либо со значительной амплитудой между показателями. Такой период можно назвать аномальным. Таким образом, находя подобные аномалии во временных рядах, обнаруживаются дефекты в нефтедобывающем или нефтеперерабатывающем оборудовании. Своевременно обнаружение отклонений во временных рядах позволяет избежать аварий и простоев оборудования, составить наиболее эффективное расписание технического обслуживания оборудования [6].

Существует два основных подхода к выявлению аномалий на основе временного ряда: использование статистических методов для поиска аномалий на рассматриваемом временном ряде и нахождение отклонений на основе сопоставления исследуемых данных с эталонными [6].

Наиболее популярным языком программирования, используемым при работе с данными, является Python, также используется язык программирования R. Компилируемые языки программирования C++ и C#, которые обладают более высокой производительностью в сравнении с Python и некоторые алгоритмы для задач оптимизации можно реализовать в них, однако существуют библиотеки, которые позволяют показывать такую же производительность на интерпретируемых языках.

В Python для работы с данными используются различные библиотеки, такие как: pandas, scikit-learn, matplotlib, numpy, statsmodels [7, 8, 9].

Pandas — пакет используемый для работы с данными, является одной из основных библиотек для исследования данных. Он позволяет создать и изменить массивы NumPy в собственные объекты, которые называются DataFrame. Они специализируются на работе с табличными данными. В процессе анализа Pandas может использовать возможности NumPy и SciPy, в том числе статистические расчеты. Pandas работает с большими объемами информации. Может производить слияние датафреймов, формировать срезы данных, визуализировать и группировать их. Библиотека способна функционировать с разнообразными источниками информации, будь то базы данных, либо CSV таблицы. Обычно используются CSV или JSON файлы. Для этого в библиотеке есть встроенные функции преобразование иных форматов в формат CSV [8,9].

Numpy — математический пакет, где встроено большое число вычислительных механизмов, библиотека использует собственные структуры данных. Многомерные массивы, используемые в этом пакете, существенно увеличивают способности Python по осуществлению вычислений [9]. Многомерные массивы работают в пакете Numpy гораздо быстрее, чем интегрированные структуры данных. Кроме того, данные массивы используются для обмена информацией между программами [7]. Обычно для создания многомерных моделей скважин также используется библиотека Numpy.

Matplotlib — пакет позволяющий визуализировать данные. Он используется для создания графиков [8].

Scikit-Learn — это библиотека для машинного обучения. В нее интегрированы модули, позволяющие работать с разнообразными методами машинного обучения. Это, например, метод обучения с учителем «случайный лес», метод кросс-валидации, метод разбиения на кластеры, метод k-средних и многие другие. Эта библиотека содержит алгоритмы регрессии, и дает возможность генерировать модели машинного обучения с учителем и без учителя [9].

Keras — это библиотека, осуществляющая алгоритмы глубокого обучения, которая массово применяется при разработке нейросетевых моделей. Она может функционировать различными типами данных, включая изображения [9]. Данную библиотеку можно использовать совместно с библиотекой OpenCV для мониторинга состояния оборудования

технических систем добычи и переработки углеводородного сырья с использованием машинного зрения.

Statsmodels — библиотека статистического анализа. В нее встроены следующие алгоритмы: линейные модели и регрессия, дисперсионный анализ, анализ временных рядов и непараметрические методы [7].

Эти инструменты позволят проводить эффективную оптимизацию технологических процессов нефтегазового комплекса.

В настоящее время активно внедряются прогнозирующие системы во всех отраслях жизни человека. Для оптимизации и автоматизации технологических процессов анализируется крупный объем исторических данных, что помогает принять решения о режиме работы оборудования, бурении новых скважин, составить оптимальный график ремонтных работ. Все это даст возможность существенно повысить эффективность работы нефтеперерабатывающих заводов и нефтедобывающих скважин, избежать остановки оборудования и его поломку, таким образом, снизить издержки предприятия. Кроме того, оптимизируются трудозатраты персонала, так как есть эффективный план технического обслуживания и автоматическое нахождение неисправностей на основе данных. В дополнение для визуального контроля оборудования можно использовать машинное зрение, а в некоторых случаях это необходимый способ, так как скважины находятся в труднодоступных местах. В таком случае, оптимизируются затраты нефтегазовых компаний на персонал и устранение аварий и их последствий. Для осуществления оптимизации технологических процессов используются множество различных инструментов и методов анализа данных.

## Литература

1. Шнарева Г.В., Пономарева Ж.Г. Анализ данных – Симферополь : Университет экономики и управления, 2019. – 129 с.
2. Прогнозирование обводненности скважин с помощью методов машинного обучения. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://habr.com/ru/post/533470/> (дата обращения: 14.10.2020).
3. Как предиктивную аналитику уже сегодня применяют в промышленности и энергетике. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://mcs.mail.ru/blog/prediktivnaya-analitika-v-promyshlennosti-i-energetike> (дата обращения: 14.10.2020).
4. Гладких Т.Д. Автоматизация технологических процессов в нефтегазовой отрасли – Москва, Вологда : Инфра-Инженерия, 2022. – 152 с.
5. Замятин А.В. Интеллектуальный анализ данных – Томск : Издательский Дом Томского государственного университета, 2020. – 194 с.
6. Ярушкина Н.Г., Андреев И.А., Гуськов Г.Ю. Интеллектуальный предиктивный мультимодальный анализ слабоструктурированных больших данных – Ульяновск : Ульяновский государственный технический университет, 2020. – 221 с.
7. Маккини У. (Wes McKinney) Python и анализ данных / пер. с англ. А. А. Слинкина – М.: ДМК Пресс, 2020. – 540 с.
8. Анализ данных с использованием Python. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://habr.com/ru/post/353050/> (дата обращения: 14.10.2020).
9. Python-пакеты для Data Science. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://habr.com/ru/company/ruvds/blog/525834/> (дата обращения: 14.10.2020).

УДК 004.056.53

## **О ПОДХОДАХ К ОБЕСПЕЧЕНИЮ ИНФОРМАЦИОННОЙ БЕЗОПАСНОСТИ ЦИФРОВЫХ ДВОЙНИКОВ**

Лазорин Д.С. (студент, РГУ нефти и газа (НИУ) И. М. Губкина)

**Научный руководитель: к.т.н., зав. каф. Комплексной безопасности критически важных объектов Правиков Д.И.** (РГУ нефти и газа (НИУ) И.М. Губкина)

*e-mail:* [lazorindanya@yandex.ru](mailto:lazorindanya@yandex.ru)

*Научная работа посвящена рассмотрению существующих подходов к обеспечению информационной безопасности цифровых двойников и формулированию предложений по выбору средств противодействия различным угрозам, прежде всего угрозе искажения цифрового двойника. Показано, что ни один из существующих подходов и методов не обеспечивает полноценной безопасности цифровых двойников. Предложена реализация комплексного подхода для обеспечения безопасности цифровых двойников в рамках актуальных для них специфических моделей угроз и нарушителя.*

**Ключевые слова:** цифровой двойник, цифровизация, информационная безопасность, модель угроз и нарушителя, компьютерная модель, многоуровневая система, цифровой сертификат, шифрование данных, криптографические алгоритмы, машинное обучение, токенизация, криптомодули.

Сегодня понятие цифровой двойник прочно заняло позиции в современных технологиях. Данный термин многогранен. Так или иначе — это виртуальная или компьютерная модель, способная выполнять и воспроизводить действия исходного объекта. Термин цифровой основан на математических формулах, описывающих рассматриваемый объект и его действия, либо же процессы. Отсюда вытекает термин цифровизация. Это внедрение современных технологий в определенные области компании, которые позволяют автоматизировать её деятельность. Именно цифровизация позволяет вывести промышленность на абсолютно новый уровень [1].

Цифровой двойник связывает виртуальный (программный) мир с физическим. Это возможно с помощью информации, которая должна передаваться с различного рода оборудования. На помощь приходит огромное количество современных датчиков. Они могут быть установлены на объекте, конструкции или же на нефтеперерабатывающем заводе. Однако количество поступаемой информации велико, требуются огромные вычислительные мощности для их обработки. На помощь приходит цифровой двойник, который позволяет имитировать и предсказывать параметры того или иного объекта (конструкции, установки). Его особенность — обработка и обновление информации, получаемой с объекта, в реальном времени [2].

Документация Министерства Энергетики Российской Федерации подчеркивает востребованность цифровых двойников на рынке [3].

При помощи технологий цифрового двойника появляется возможность контролировать, следовательно, и устранять негативные последствия еще до того, как они могут произойти. Однако новые решения на производстве должны обладать определённой мерой защиты, которая должна быть детализирована и продумана до мелочей. Исходя из этого приоритетной задачей ставится необходимость обеспечения информационной безопасности цифровых двойников, применяемых на технологических процессах.

*Элементы системы «Физический Объект – Цифровой Двойник» (ФОЦД).* Обозначим главные части системной целостности, которые включают виртуальный и физический объект.

1. Физический объект (ФО).
2. Виртуальный объект или специальная модель, которая должна соответствовать физическому объекту по определённым параметрам (цифровой двойник, ЦД).
3. Взаимосвязи в системе, рассматриваемые в рамках виртуального и физического объекта.

*Специфические свойства цифровых двойников.* Необходимо рассмотреть специфические свойства и общие требования, которые должны относиться к ФОЦД.

Наиболее важным свойством является целостность, которая подразумевает под собой неразрывную взаимосвязь вышеперечисленных компонентов. Ведь именно от неё зависит

полноценная работа целого комплекса процессов. Другое свойство, актуальность параметров, которые передаются цифровому двойнику.

Технология цифрового двойника может не соответствовать тому устройству, комплексу или физическому объекту, который управляется с его помощью.

Отметим важный момент: отличие стандартной математической модели и цифрового двойника, которое состоит в том, что модель цифрового двойника основывается не на идеализации, а на действительном поведении самого объекта.

*Подходы и методы обеспечения информационной безопасности цифровых двойников.* В данной научной работе были проанализированы научные источники и выбраны основные современные подходы и методы обеспечения информационной безопасности, которые могут быть применены к технологии цифровых двойников: блокчейн-структура, подход к организации информационного взаимодействия в многоуровневой системе, система иерархической токенизации элементов системы, Digital ID (цифровой сертификат доверия), технология распределённых реестров, средства шифрования данных при передаче по каналам связи, комплексный подход с использованием машинного обучения и искусственного интеллекта, обеспечение безопасности ЦД в рамках концепции многоуровневой платформы [4–7].

В результате была построена таблица «Одни из способов и методов обеспечения комплексной безопасности цифровых двойников».

Таблица 1

**Одни из способов и методов обеспечения комплексной безопасности цифровых двойников**

Блокчейн-структура	✓
Организация взаимодействий в многоуровневой системе	✓
Цифровой сертификат доверия (Digital ID)	✓
Технология распределённых реестров	✓
Шифрование данных при передаче по каналам связи	✓
Использование машинного обучения и искусственного интеллекта	✓
Информационное взаимодействие в многоуровневой системе	✓
Соответствие модели реальному объекту	X

*Отечественные индустриальные криптомодули ViPNet SIES Core & Pack.* На данный момент большинство нефтегазовых месторождений находятся на завершающей стадии эксплуатации и не оснащены порой элементарными средствами автоматики. Следовательно, некоторые АИУС нефтегазовые Общества, а также АСУ ТП месторождения используют отечественное оборудование фирмы Infotecs. Существуют решения по анализу информационной безопасности АСУ ТП от компании Infotecs.

Нами было протестировано следующее программное обеспечение от данной фирмы: ViPNet Client 4. Это программное обеспечение для защиты трафика на рабочих местах пользователей. Оно фильтрует весь входящий и исходящий трафик компьютера и позволяет обмениваться данными с другими узлами ViPNet по защищенному VPN-каналу (сокр. Virtual Private Network). В программе имеется доступ к сетевым фильтрам, которые предназначены для использования или блокировки трафика по различным признакам. По умолчанию они ограничивают входящий незашифрованный трафик за исключением некоторые протоколов (DHCP, NetBIOS, WINS). Сетевые фильтры являются настраиваемыми. Программа контролирует сетевую активность приложений, которые установлены на устройстве. При попытке какого-либо приложения получить доступ к сети, появляется соответствующее предупреждение. Помимо этого, появляется возможность отправлять сообщения электронной почты и вложения пользователям других узлов ViPNet. Стандартно сообщения зашифрованы и подписаны электронной подписью.

Стоит обратить внимание на криптографический модуль ViPNet SIES Core. Это средства защиты данных интеллектуальных устройств автоматики, входящие в состав комплекса продуктов ViPNet SIES, предназначенные для защиты информации, обрабатываемой

устройствами автоматизации промышленных систем. Они обеспечивают защиту данных в устройствах автоматизации, например, программируемые логические контроллеры (PLC), устройства сбора и передачи информации (RTU), промышленные контроллеры автоматизации (РАС), сенсоры, датчики, счетчики, различные исполнительные устройства.

Защищаемое устройство со встроенным ViPNet SIES Core может реализовывать различные сценарии защиты данных в зависимости от модели угроз и нарушителя информационной безопасности, разработанной для защищаемого устройства или промышленной системы. Например, с помощью ViPNet SIES Core можно реализовать следующие сценарии: обеспечение целостности при передаче данных по существующим каналам связи; обеспечение конфиденциальности при передаче данных по существующим каналам связи; защита от навязывания промышленной системе ложных данных, защита от повторов и навязывания промышленной системе устаревших данных, доверенное обновление программного обеспечения (ПО) и конфигурации защищаемого устройства, доверенное хранение данных о функционировании защищаемого устройства [8].

На данный момент нами проводится тестирование криптографического модуля ViPNet SIES Core.

Проведенный анализ выяснил, что ни один из рассматриваемых способов, подчеркнем, в отдельности не обеспечивает комплексной безопасности в рамках актуальных для цифровых двойников моделей угроз и нарушителя. Перспективным направлением является методология обеспечения информационной безопасности ЦД в соответствии с концепцией многоуровневой платформы.

Применение некоторых технологий защиты на сегодняшний день оправдано, но направлено на решение частных случаев. Для части методов (соответствие виртуальной модели реальному объекту) необходимо использовать другие подходы и средства, которые будут предложены в следующих работах.

Помимо вышеперечисленного, был разработан веб-сайт проекта (<https://securedt.ru>), на котором будет актуализироваться информация о научной работе, проведена демонстрация результатов тестирования вышеперечисленных способов и методов обеспечения информационной безопасности цифровых двойников.

## Литература

1. Намиот Д.Е., Покусав О.Н., Куприяновский В.П., Жабицкий М.Г. Цифровые двойники и системы дискретно-событийного моделирования // International Journal of Open Information Technologies. – 2021. – Vol. 9. – №. 2. – С. 70-75.
2. Цифровое зеркало, «Газпром Нефть». [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.gazprom-neft.ru/press-center/sibneft-online/archive/2018-september-projects/1863687/> (дата обращения: 12.01.2022).
3. Паспорт: «Программы инновационного развития» ПАО «Газпром» до 2025 года. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://minenergo.gov.ru/node/4844> (дата обращения: 13.01.2022).
4. Дрогозов П.А., Кошкин М.В. Проекты внедрения технологий блокчейн и интернета вещей в трансграничных цепочках поставок // Управление научно-техническими проектами: сб. материалов III междунар. науч. техн. конференции. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана. – 2019. – С. 153–156.
5. Mandolla C., Petruzzelli A.M., Percoco G., Urbinati A. Building a digital twin for additive manufacturing through the exploitation of blockchain. Comput. Ind. – 2019. – Vol. 109. – Pp. 134–152.
6. Воробьев А.В. Концепция информационного пакетного взаимодействия в многоуровневой системе цифровых двойников // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Математика. Механика. Информатика. – 2021. – Т. 21. – Вып. 4. – С. 532-543. DOI: 10.18500/1816-9791-2021-21-4-532-543.
7. Правиков Д.И., Глейм А.В., Егоров В.И., Рязанова А.А., Щербаков А.Ю. К вопросу о формулировании системного подхода к исследованиям в области цифровых платформ, распределенных реестров и цифровых активов // Вестник современных цифровых технологий. – 2021. – №. 9. – С. 5-14.
8. Защита информации для АСУ ТП и М2М. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://infotecs.ru/resheniya/zashchita-informatsii-dlya-asu-tp-i-m2m.html> (дата обращения: 11.09.2022).

УДК 504.064

## **ПРИМЕНЕНИЕ ПРЕДИКТИВНЫХ СИСТЕМ КОНТРОЛЯ ВЫБРОСОВ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ В НЕФТЕГАЗОВОЙ ОТРАСЛИ**

**Фахртдинова С.З.** (аспирант, Университет ИТМО)

**Научный руководитель: к.т.н., доцент Кустикова М.А.** (Университет ИТМО)

*e-mail:* [sabinafaxry@itmo.ru](mailto:sabinafaxry@itmo.ru)

*В работе рассмотрено применение предиктивных систем контроля выбросов в нефтегазовой отрасли. Приведены нормативные документы, регламентирующие работу предиктивных систем в области охраны атмосферного воздуха в США и Европе. Проанализирован НДТ ИТС 22.1-2021 на предмет использования предиктивной аналитики в области мониторинга состояния атмосферного воздуха. Представлены контролируемые предиктивными системами газы, а также установки, на которых данные системы могут быть применимы.*

**Ключевые слова:** *предиктивные системы, промышленные выбросы, мониторинг, атмосфера, источники выбросов.*

В 2017 г. антропогенные выбросы парниковых газов в мире составили 47 Гт CO<sub>2</sub>-экв., из них почти три четверти (74%) приходится на топливно-энергетический сектор, в котором они обусловлены, в основном, сжиганием ископаемых видов топлива в различных отраслях и утечками метана при добыче, транспортировке и распределении ископаемых видов топлива). Эмиссия непосредственно нефтегазового сектора (сферы охвата 1 и 2) в 2017 г. составила 5668 Мт CO<sub>2</sub>-экв., то есть 16% от всех выбросов топливно-энергетического сектора и около 12% от суммарных мировых выбросов (что сопоставимо с выбросами от сельского хозяйства). Может показаться, что 12% от суммарной эмиссии парниковых газов — не так много, но за последние 15 лет доля нефтегазового сектора в мировой эмиссии парниковых газов увеличилась с 7 до 12%. Отчасти рост выбросов парниковых газов связан с увеличением потребления нефти и газа, и, соответственно, с ростом их добычи, однако, анализ показывает, что если с 2005 по 2009 гг. добыча выросла в 1,3 раза, то выбросы парниковых газов за тот же период — в 1,8 раза [1].

Из-за роста показателей выбросов промышленный сектор находится под огромным давлением зеленой политики касательно сокращения выбросов и соблюдения экологических норм. Многие компании находятся в поисках современных методов мониторинга выбросов в окружающую среду. Нельзя недооценивать важность наличия эффективных и надежных инструментов для получения данных о выбросах с точки зрения производства. Для решения задач мониторинга выбросов нередко используются предиктивные системы контроля выбросов загрязняющих веществ в атмосферу [2].

Предиктивные системы контроля выбросов загрязняющих веществ представляют собой программные устройства, которые способны обеспечить надежную оценку выбросов в режиме реального времени с использованием передовых математических или статистических моделей на основе параметров процесса (например, температуру, расход, давление) в качестве входных переменных. Программное обеспечение данных систем обрабатывает входные переменные и генерирует оценки выбросов.

Предиктивные системы контроля выбросов могут обеспечивать точный мониторинг выбросов, сокращая капитальные вложения и текущие эксплуатационные расходы предприятий. Данные системы мониторинга выбросов подходят для оценки наиболее распространенных загрязняющих выбросов в современной промышленности от котлов, работающих на газе или жидком топливе, печей, установок риформинга или газовых турбин [3].

Предиктивные системы контроля выбросов получили широкое распространение в Европе, США, Саудовской Аравии, Малайзии и ОАЭ. Это связано с наличием в указанных регионах нормативной документации, регламентирующей работу и сферу применения этих систем контроля: в США — Свод федеральных нормативных актов, раздел 40 «Охрана окружающей среды», Часть 60 «Стандарты функциональной способности для новых

стационарных источников» (40 CFR part 60), а в Европе – CEN/TS 17198:2018 «Выбросы из стационарных источников - Системы прогнозирования выбросов – Применимость, исполнение и обеспечение качества» (Stationary source emissions – PEMS – Applicability, execution, and quality assurance). В указанных документах предиктивные системы контроля выбросов имеют аббревиатуру PEMS (Predictive Emission Monitoring Systems).

Согласно CEN/TS 17198, предиктивные системы контроля выбросов представляют собой альтернативу инструментальным системам непрерывного мониторинга в процессах, где существует надежная и предсказуемая связь между условиями эксплуатации оборудования и выбросами. Эти условия обычно прослеживаются в нефтегазовой сфере. Тем не менее, спецификация не исключает применение данных систем и на других установках, если показано, что системы соответствуют требованиям CEN/TS 17198.

Справочные документы Европы по наилучшим доступным технологиям (Best Available Techniques reference documents, далее - BREF) представляют собой результат «Севильского процесса» – обмена информацией о характеристиках (технологических параметрах) решений, направленных на защиту окружающей среды [4].

Большинство BREF охватывают конкретные виды агропромышленной деятельности – такие документы называются «отраслевыми BREF». В рамках директивы о промышленных выбросах 2010/75/EU «Комплексное предотвращение и контроль загрязнения» от Европейского парламента и Совета ЕС были изданы несколько BREF.

В справочнике BREF EUR 28836 EN:2017 «Reference Document for Large Combustion Plants» по работе крупных установок сжигания предиктивную систему контроля выбросов предлагается использовать как косвенный метод мониторинга эмиссий с использованием косвенных измерений [4].

В крупных установках сжигания предиктивная система контроля выбросов может быть использована для прогнозирования выбросов таких соединений, как SO<sub>2</sub> или CO<sub>2</sub>. Определение присутствия определенных элементов в топливе, таких как сера и металлы, может быть использовано для расчета их присутствия в потоке дымовых газов. Предполагая полную конверсию серы, выбросы SO<sub>2</sub>, например, при сжигании нефти, могут быть рассчитаны на основе содержания серы, присутствующей в нефти. Справочник также допускает возможность использования предиктивных систем контроля для мониторинга выбросов NO<sub>x</sub> и CO в процессе сжигания газа на оффшорных платформах. При анализе методов для предотвращения и/или сокращения выбросов NO<sub>x</sub> и CO для оффшорных установок предиктивные системы контроля выбросов рассматривается как лучшая система для мониторинга эмиссий, требующая высокого опыта работы с данными у оператора. В этом анализе предиктивные системы контроля выбросов признаны применимыми для новых и существующих оффшорных установок. Для будущей работы в этой сфере создатели справочника рекомендуют рассмотреть и другие области применения предиктивных систем контроля выбросов, помимо газовой установки открытого цикла, а также следить за изменениями европейских стандартов, связанных с предиктивными системами [4].

В справочнике BREF EUR 27140 EN:2015 «Reference Document for the Refining of Mineral Oil and Gas» по переработке минеральной нефти и газа предиктивная система контроля выбросов рекомендуется к использованию для непрерывного мониторинга таких технологических параметров, как расход топливного газа, соотношение воздух/топливо, а также для получения данных о качестве топлива или сырья источника выбросов.

Для мониторинга эмиссий предиктивная система контроля выбросов рекомендована к применению в следующих документах:

- справочнике BREF EUR 29362 EN:2018 по обработке отходов;
- справочнике BREF EUR 29971 EN:2019 по сжиганию отходов;
- справочном отчете EUR 29261 EN:2018 Объединенного исследовательского центра о мониторинге выбросов в атмосферу и воду от установок по Директиве о промышленных выбросах.

Несмотря на то, что в РФ не существует нормативных документов, регламентирующих разработку, применение и метрологическое обеспечение предиктивных систем контроля

выбросов, данный тип систем активно исследуется компетентными органами. Предиктивные системы контроля выбросов в ИТС НДТ 22.1-2021 «Общие принципы производственного экологического контроля и его метрологического обеспечения» предлагаются к применению как один из перспективных методов контроля промышленных выбросов.

По ИТС НДТ 22.1-2021 предиктивные системы контроля выбросов могут применяться в качестве альтернативы инструментальному контролю в обоснованных случаях, например, при отсутствии технической возможности оснащения определенных стационарных источников (например, гранбашни при производстве минеральных удобрений), а также на некоторых предприятиях (например, угольных разрезах), оснащение системами которых невозможно. Документ содержит информацию о преимуществах и недостатках данных систем [5].

Согласно этому документу, предиктивные системы контроля выбросов могут использоваться при определении показателей выбросов NO, NO<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, углеводородов и других загрязняющих веществ на газотурбинных и угольных электростанциях, на установках каталитического крекинга, синтеза метанола, установках производства серы, печах пиролиза, стекловаренных печах.

Компания по производству предиктивных систем контроля выбросов CMC Solutions выделила источники выбросов по трудозатратам на установку данных систем мониторинга к этим источникам:

- источники выбросов, которые легко поддаются оснащению предиктивными системами контроля выбросов – это новые установки с качественными приборами и интерфейсами передачи данных, передовыми системами управления и оптимальным дизайном существующей системы управления;
- источники выбросов, которые требуют усилий по разработке соответствующей предиктивной системы контроля выбросов – устаревшие устройства с ограниченным функционалом, запатентованной системой управления без стандартных интерфейсов, без системной документации и существующего контроля качества, а также устройства с неверно функционирующей системой управления.

Предиктивные системы контроля выбросов способны прогнозировать выбросы NO<sub>x</sub>, SO<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, углеводородов и окисляющих компонентов (O<sub>2</sub>). В таблице по источникам выбросов указано, какие выбросы могут быть спрогнозированы предиктивными системами контроля выбросов и в каких областях могут быть применены данные системы.

Таблица

**Прогнозируемые выбросы от различных источников**

№	Источник выбросов	Область применения источника	Какие выбросы источника могут быть спрогнозированы предиктивной системой
1	2	3	4
1	Газовые турбины	Производство энергии, нефтегазодобывающая промышленность, муниципальные образования, стационарные газотурбинные установки (ГТУ), парогазовые установки (ПГУ) и др.	CO, CO <sub>2</sub> , SO <sub>x</sub> , NO, NO <sub>2</sub>
2	Котлы	Строительство и производство стройматериалов, нефтегазовая отрасль, тяжелая промышленность, пищевая промышленность и др.	NO <sub>2</sub> , NO, CO, SO <sub>2</sub>

Продолжение таблицы

№	Источник выбросов	Область применения источника	Какие выбросы источника могут быть спрогнозированы предиктивной системой
3	Топочные устройства	Сжигание твердого, жидкого и газообразного топлива, промышленная теплоэнергетика, нефтяная промышленность и др.	CO, CO <sub>2</sub> , NO <sub>x</sub>
4	Биогазовые установки	Крупные агропромышленные комплексы, фермы крупного рогатого скота, птицефабрики, рыбные заводы, хлебобулочные комбинаты, предприятия пищевой промышленности, мяскокомбинаты, спиртовые заводы, пивоваренные заводы, молочные заводы и др.	NO <sub>x</sub>
5	Производственные сушилки	Деревообрабатывающие предприятия, химическая промышленность, горная промышленность и др.	NO <sub>2</sub> , CO, CO <sub>2</sub> , O <sub>2</sub>
6	Химические реакторы	Химическая, фармацевтическая, целлюлозная, парфюмерная промышленности и других и др.	SO <sub>2</sub> , NO <sub>x</sub> , CO <sub>2</sub>
7	Производственные печи	Медицина, металлургия, химическая промышленность, космическое ракетостроение и др.	NO <sub>x</sub> , SO <sub>2</sub> , CO, CO <sub>2</sub>
8	Установки регенеративного химического окисления	Химическая, нефтехимическая, полимерная, лакокрасочная промышленности и др.	SO <sub>2</sub> , NO <sub>x</sub>
9	Факельные установки	Нефтегазодобывающая, нефтехимическая, нефтеперерабатывающая, химическая промышленности и др.	CO, NO <sub>x</sub> , SO <sub>2</sub>
10	Гранбашни	Химическая промышленность	NO <sub>x</sub> , SO <sub>2</sub>
11	Установки каталитического крекинга	Нефтегазовая промышленность	NO <sub>x</sub> , SO <sub>x</sub> , CO
12	Оффшорные платформы	Нефтегазовая промышленность	NO <sub>x</sub> , CO <sub>2</sub>

Для оснащения системами предиктивной аналитики установка должна быть надлежащим образом оснащена приборами (датчиками температуры, давления, расхода, управляющие блоки) и автоматизирована. Кроме того, используемое топливо установки должно иметь стабильный состав или измеряться в режиме реального времени.

Несмотря на то, что применение предиктивных систем контроля загрязняющих веществ может обеспечить хорошие результаты в экологических проектах, это не означает, что эти системы станут полной альтернативой автоматическим измерительным системам контроля. Выбор системы будет зависеть от таких факторов, как схема процесса, оборудование и условия эксплуатации. Эффективное для применения решение должно включать в себя как программные, так и аппаратные стратегии мониторинга выбросов, которые обеспечат возможность охвата всех аспектов контроля выбросов.

## Литература

1. Декарбонизация нефтегазовой области: международный опыт и приоритеты России. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: [https://energy.skolkovo.ru/downloads/documents/SEneC/Research/SKOLKOVO\\_EneC\\_Decarbonization\\_of\\_oil\\_and\\_gas\\_RU\\_22032021.pdf](https://energy.skolkovo.ru/downloads/documents/SEneC/Research/SKOLKOVO_EneC_Decarbonization_of_oil_and_gas_RU_22032021.pdf) (дата обращения: 01.10.2022).
2. Predictive Emissions Monitoring System: Elevating Emission Analytics with Machine Learning. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://eleks.com/blog/predictive-emissions-monitoring-system/> (дата обращения: 01.10.2022).
3. Predictive Emission Monitoring Systems (PEMS). Measurement & analytics. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: [https://library.e.abb.com/public/f3074a6bbdf14344be1af56fbd6dc9a0/PEMS\\_FAQ\\_07062021\\_V3.pdf](https://library.e.abb.com/public/f3074a6bbdf14344be1af56fbd6dc9a0/PEMS_FAQ_07062021_V3.pdf) (дата обращения: 01.10.2022).
4. BAT reference documents. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://eirpcb.jrc.ec.europa.eu/reference> (дата обращения: 01.10.2022).
5. ИТС НДТ 22.1-2021 Общие принципы производственного экологического контроля и его метрологического обеспечения. – [Электронный ресурс]. Режим доступа: [http://burondt.ru/NDT/NDTDocsDetail.php?UrlId=1647&etkstructure\\_id=1872](http://burondt.ru/NDT/NDTDocsDetail.php?UrlId=1647&etkstructure_id=1872) (дата обращения: 01.10.2022).

## Оглавление

Введение .....	4
Искусственный интеллект .....	5
Авдюшина А.Е., Шелемеха К.С. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОГО АНАЛИЗА ДАННЫХ В МОДЕЛИ ГЕТТОИЗАЦИИ СПАЛЬНЫХ РАЙОНОВ .....	5
Диденко Е.С. АЛГОРИТМ ИДЕНТИФИКАЦИИ ЛИЧНОСТИ ПО РИСУНКУ ВЕН ПАЛЬЦЕВ НА ОСНОВЕ ПРЕДОБУЧЕННОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ .....	9
Добрынин В.Ю., Абрамович Р.К., Горшков А.Д. ОПТИМИЗАЦИЯ СТРУКТУРЫ ПОЛНОТЕКСТОВОГО ПОИСКОВОГО ИНДЕКСА, ИСПОЛЬЗУЮЩЕГО НЕЙРОННЫЕ СЕТИ АРХИТЕКТУРЫ "ТРАНСФОРМЕР" .....	15
Некрасова Д.В. ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ В РАБОТЕ НЕКОММЕРЧЕСКИХ ОРГАНИЗАЦИЙ .....	17
Стёба О.В. АНАЛИЗ НЕЙРОСЕТЕВЫХ МОДЕЛЕЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ СУДЕБНЫХ РЕШЕНИЙ .....	20
Топчий Д.В. СОЗДАНИЕ И ОБУЧЕНИЕ НЕЙРОСЕТИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВОПЛОЩЕННОГО АГЕНТА В ОТКРЫТОМ ВИРТУАЛЬНОМ МИРЕ НА ДАННЫХ ВСЕМИРНОЙ ПАУТИНЫ .....	24
Шебут Д.А. РАЗРАБОТКА МОБИЛЬНЫХ АНАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ РАСПОЗНАВАНИЯ ОБЪЕКТОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ ТЕХНОЛОГИЙ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА .....	35
Шуваева В.А., Гюнинен Е.А. ТЕХНОЛОГИИ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА В ОБРАЗОВАНИИ .....	43
Щиголев Н.А. РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА ВЫЯВЛЕНИЯ ДОКУМЕНТОВ, СОДЕРЖАЩИХ ЧУВСТВИТЕЛЬНУЮ ИНФОРМАЦИЮ, НА ОСНОВЕ МЕТОДОВ РАСПОЗНАВАНИЯ ОБРАЗОВ .....	47
Интеллектуальные технологии в инфохимии .....	53
Беляев В.Е., Петрова М.С., Домарева Н.П., Алиев Т.А. ИДЕНТИФИКАЦИЯ БИОЛОГИЧЕСКИХ КОМПОНЕНТОВ СЛОЖНЫХ СМЕСЕЙ ПРИ ПОМОЩИ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ .....	53
Вахрушев Б.С., Соловьёв М.Р., Гончаров Е.М., Матюшова О.А. РАЗРАБОТКА МОДИФИКАЦИИ ДЛЯ OPEN-SOURCE МАНИПУЛЯТОРА «VCN 3D MOVEVO» .....	55
Домарева Н.П., Балдина А.А., Беляев В.Е., Петрова М.С., Евдокимов А.Е. МОДИФИКАЦИЯ ПОВЕРХНОСТИ ГРАФИТОВОГО СЛОЯ ЭЛЕКТРОДА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОГО БИОСЕНСОРА .....	58
Дягиль Д.А., Муталлибзода Ш. ПРИМЕНЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКИНГА ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СВЯЗЫВАНИЯ ВКУСОВОГО РЕЦЕПТОРНОГО БЕЛКА TAS <sub>1</sub> R <sub>3</sub> И СЛАДКИХ МОЛЕКУЛ .....	61
Евдокимов А.А., Алиев Т.А., Беляев В.Е., Домарева Н.П. СОЗДАНИЕ ТРЁХЭЛЕКТРОДНОЙ ТЕСТ-ПОЛОСКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЧЕРНИЛ НА ОСНОВЕ ГРАФИТОВЫХ НАНОЧАСТИЦ И АЦЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ .....	65

Зырянова П.И., Носкова У.В., Королев И.С., Пивень А.О. БИОСЕНСОРЫ ДЛЯ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ ИОННЫХ ТОКОВ В БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ.....	67
Королев И.С., Зырянова П.И. ОПРЕДЕЛЕНИЕ КАЧЕСТВЕННОГО И КОЛИЧЕСТВЕННОГО СОСТАВА ЭЛЕКТРОЛИТА ПО ОСОБЕННОСТЯМ ОСЦИЛЛЯЦИЙ КАВИТАЦИОННОГО ПУЗЫРЯ С ПРИМЕНЕНИЕМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ .....	70
Кутырев М.А., Ненашкина А.В., Силин Д.В. САМООРГАНИЗАЦИОННЫЕ СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ ДНК В ГИДРОГЕЛЕВОЙ МАТРИЦЕ .....	72
Лисина Е.И., Рудакова М.Д., Потапов В.В., Скорб Е.В. ВОЗМОЖНЫЕ МЕТОДЫ АВТОМАТИЗАЦИИ ПРОЦЕССА ЭЛЕКТРООРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА .....	74
Матюшова О.А., Пивень А.О., Соловьев М.Р., Николаев А.А. ГЕНЕРАЦИЯ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ХИРАЛЬНЫХ СТРУКТУР НА КРАЮ ЭЛЕКТРОДА В ОБРАЗЦЕ ДВУХЧАСТОТНОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА.....	77
Николаев А.А., Соловьёв М.Р., Зенкин А.М., Матюшова О.А. РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ МАНИПУЛЯТОРОВ ДЛЯ АВТОМАТИЗАЦИИ СОЗДАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ РАСТВОРОВ .....	79
Носкова У.В., Зырянова П.И., Пивень А.О. СОЗДАНИЕ ГИБКОЙ БИОСЕНСОРНОЙ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ УГЛЕВОЛОКНА ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ ФИЗИОЛОГИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ ЧЕЛОВЕКА.....	87
Петрова М.С., Беляев В.Е., Домарева Н.П. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО МЕТОДА В ОЦЕНКЕ СОДЕРЖАНИЯ ИНГИБИТОРА КОРРОЗИИ В ПЛАСТОВОЙ ВОДЕ И ВОДОНЕФТЯНОЙ ЭМУЛЬСИИ .....	90
Пивень А.О., Матюшова О.А., Зырянова П.И., Носкова У.В. СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ФОРМИРОВАНИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ СТРУКТУР В ФОТОАКТИВНОМ ХИРАЛЬНОМ НЕМАТИЧЕСКОМ ЖИДКОМ КРИСТАЛЛЕ.....	92
Потапов В. В., Юрова В. Ю., Лисина Е.И., Рудакова М.Д. АВТОМАТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА СМЕНЫ РАБОЧЕГО ИНСТРУМЕНТА МАНИПУЛЯЦИОННОГО УСТРОЙСТВА В ЗАДАЧАХ ФОТОКАТАЛИЗА .....	94
Рудакова М.Д., Лисина Е.И., Потапов В.В., Скорб Е.В. ПЕРСПЕКТИВЫ РОБОТИЗАЦИИ ЭЛЕКТРООРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА НА ОСНОВЕ НИКЕЛЕВЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ И ПЕРЕМЕННОГО ТОКА.....	98
Соловьёв М.Р., Николаев А.А., Вахрушев Б.С., Матюшова О.А. РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ ДЛЯ МАНИПУЛЯТОРА.....	101
Биоинженерия от цифровых решений до практического применения .....	105
Горбачев С.А. МЕЗОМОРФНЫЕ СВОЙСТВА И СИНТЕЗ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОЛИГОМЕРОВ НА БАЗЕ ПОЛИУРЕТАНОВ СЛОЖНОЙ ГЕОМЕТРИИ.....	105
Маркин К.А. РАЗРАБОТКА БИОНИЧЕСКОГО ПРОТЕЗА И СЛОЖНОСТИ ПОСТРОЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ОБРАЗЦА .....	109
Назин М.А. МЕТОД ПОЛУЧЕНИЯ СИНТЕТИЧЕСКОГО ГИДРОКСИАПАТИТА С ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ ТЕРМООБРАБОТКОЙ.....	111

Наумова А.В., Утсаль В.А. ОЦЕНКА СОДЕРЖАНИЯ БИОГЕННЫХ АМИНОВ В РЫБЕ И РЫБНЫХ ПРОДУКТАХ МЕТОДОМ ГАЗОЖИДКОСТНОЙ ХРОМАТОМАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ....	114
Нгуен Хоанг Тхань, Олехнович Р.О. ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ПОЛИГИДРОСИБУТИРАТА НА РЕОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РАСТВОРОВ И МОРФОЛОГИЮ ПОЛУЧЕННЫХ ВОЛОКОН .....	117
Носова А.О. ПРИМЕНЕНИЕ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ IMAGEJ И ORIGINPRO ДЛЯ АНАЛИЗА ДИСПЕРСНОГО СОСТАВА МИКРОЧАСТИЦ ПЛАСТМАССЫ НА ПРИМЕРЕ СУСПЕНЗИОННОГО ПВХ .....	120
Осетров К.О. БИОМАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ЖЕЛАТИН-ТАННИНОВЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ .....	125
Предиктивная аналитика для углеводородной энергетики .....	128
Касмынин К.А. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРЕДИКТИВНОЙ АНАЛИТИКИ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ НЕФТЕГАЗОВОГО КОМПЛЕКСА .....	128
Лазорин Д.С. О ПОДХОДАХ К ОБЕСПЕЧЕНИЮ ИНФОРМАЦИОННОЙ БЕЗОПАСНОСТИ ЦИФРОВЫХ ДВОЙНИКОВ .....	133
Фахртдинова С.З ПРИМЕНЕНИЕ ПРЕДИКТИВНЫХ СИСТЕМ КОНТРОЛЯ ВЫБРОСОВ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ В НЕФТЕГАЗОВОЙ ОТРАСЛИ.....	136

**Молодые профессионалы**  
**Всероссийская конференция**  
**Сборник научных трудов**

Редакционно-издательский отдел Университета ИТМО

Зав. РИО

Дизайн обложки

Вёрстка

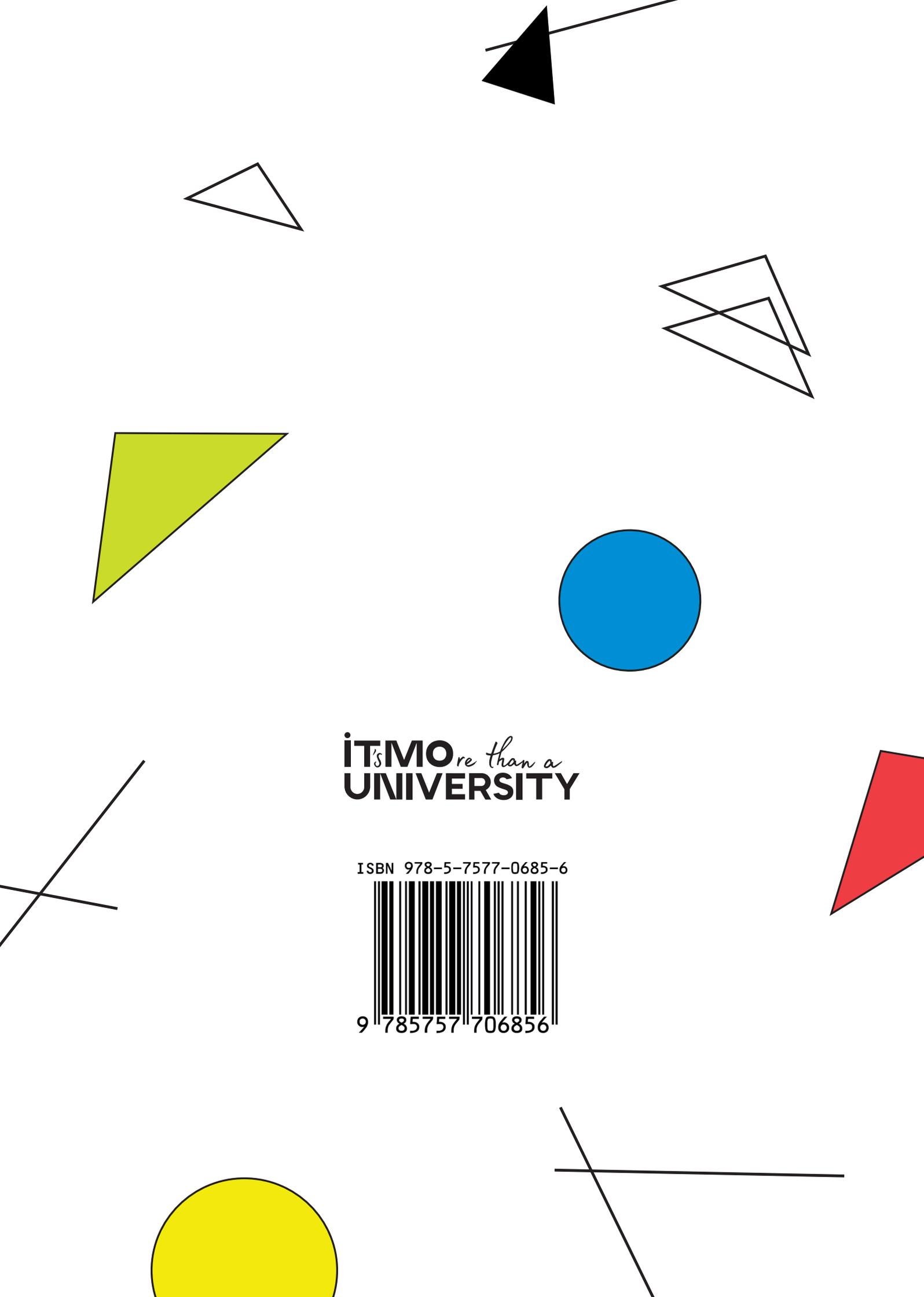
Подписано к печати 16.12.2022

Заказ № 4688 от 16.12.2022

Н.Ф. Гусарова

Н.О. Терещенко

К.Д. Бутылкина



**it's** **MO** *re than a*  
**UNIVERSITY**

ISBN 978-5-7577-0685-6



9 785757 706856