

PL-4

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ИНФОХИМИИ

Е. В. Скорб¹¹Университет ИТМО, 191002, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Ломоносова, 9

E-mail: skorb@itmo.ru

Предложены подходы к разработке методов анализа поверхностей и микрочастиц с использованием различных математических методов, а также начаты эксперименты в потоке по нахождению оптимальных методов анализа сложных смесей в потоке, например, по форме кавитационных пузырей¹ и созданию систем анализа вольт-амперных характеристик сложных смесей²⁻⁴ с использованием систем наноструктурированных электродов⁵ и процессов, протекающих на их поверхности.

Ультразвуковое облучение жидкостей, таких как водные растворы, приводит к кавитации или образованию мелких пузырьков. Применим математический метод разделения движений для интерпретации акустического воздействия на пузыри. Показано применение алгоритма искусственной нейронной сети. Алгоритм был обучен обнаруживать концентрацию спирта в водном растворе на основе изображений пузырьков. Так методы искусственного интеллекта (ИИ) могут дополнять детерминированный анализ неравновесных систем¹.

Разработаны гидрогелевые приводы и полиэлектролитные слои для сборов данных в сложных смесях и их анализа с использованием алгоритмов машинного обучения (по результатам готовятся статьи)²⁻⁴. Для повышения эффективности диагностики как вирусных инфекций, белков, так и малых молекул предложена методика нековалентной иммобилизации антител, антигенов и их комплексов, аптомеров в слоях заряженных макромолекул с достижением эффекта макромолекулярного концентрирования и изменения констант связывания молекул «ключ-замок». Преимуществом биосенсоров также является широкий линейный диапазон обнаружения, чувствительность и селективность.

Шероховатые поверхности имеют сложную топографию, которую нельзя охарактеризовать одним параметром. Выбор соответствующих параметров шероховатости зависит от конкретного применения. Большие наборы данных, представляющие топографию поверхности, обладают упорядоченностью, которая может быть выражена в терминах «топологические особенности в высокомерных пространствах данных», отражающие такие свойства, как анизотропия и количество направлений прокладки и могут быть связаны со сбором мультимодальных данных⁵ для функциональных поверхностей, электродов.

Библиографический список

1. Korolev, I. When Bubbles Are Not Spherical: Artificial Intelligence Analysis of Ultrasonic Cavitation Bubbles in Solutions of Varying Concentrations / I. Korolev, T. A. Aliev, T. Orlova, S. A. Ulasevich, M. Nosonovsky, E. V. Skorb // Journal of Physical Chemistry B. – 2022 – Vol. 126 – P. 3161–3169.
2. Lavrentev F. V. Soft Hydrogel Actuator for Machine-Learning-Assisted Bacteria Detection / F. V. Lavrentev, I. S. Rumyantsev, A. S. Ivanov, V. V. Shilovskikh, O. Yu. Orlova, K. G. Nikolaev, D. V. Andreeva, E. V. Skorb // ACS Applied Materials and Interfaces. – 2022 – DOI: 10.1021/acsami.1c22470.
3. Ivanov A. S. Tick-borne Encephalitis Electrochemical Detection by Multilayer Perceptron on Liquid Metal Interface / A. S. Ivanov, K. G. Nikolaev, A. A. Stekolshikova, W. T. Tesfatsion, S. O. Yurchenko, K. S. Novoselov, D. V. Andreeva, M. Yu. Rubtsova, M. F. Vorovitch, A. A. Ishmukhametov, A. M. Egorov, E. V. Skorb // ACS Applied Bio Materials. – 2020 – Vol. 11 – P. 7352–7356.
4. Ivanov A. S. Programmable Soft-matter Electronics / A. S. Ivanov, K. G. Nikolaev, A. S. Novikov, S. O. Yurchenko, K. S. Novoselov, D. V. Andreeva, E. V. Skorb // Journal Physical Chemical Letters. – 2021 – Vol. 12 – P. 2017–2022.
5. Zhukov, M. Topological data analysis of nanoscale roughness in brass samples / M. Zhukov, S. Hasan, P. Nesterov, M. Sabboukh, O. Burdulenko, E. V. Skorb, M. Nosonovsky // ACS Applied Materials and Interfaces. – 2022 – Vol. 14 – P. 2351–2359.

Работа выполнена в лаборатории «Исследование интеллектуальных технологий в инфохимии для промышленного применения», грант FSER-2021-0013.