

**ТЕХТ-ТО-IMAGE ГЕНЕРАТИВНАЯ СИСТЕМА ПРЕДСКАЗАНИЯ
МОРФОЛОГИИ НАНОМАТЕРИАЛОВ, ОСНОВАННАЯ НА МОДЕЛИ
ОБРАБОТКИ ЕСТЕСТВЕННОГО ЯЗЫКА И ПРОЦЕДУРАХ СИНТЕЗОВ
НАНОЧАСТИЦ, ПОЛУЧАЕМЫХ МЕТОДАМИ РАСТВОРНОЙ ХИМИИ**

Дубровский И.С., Серов Н.С., Виноградов В.В.

Университет ИТМО

197101, г. Санкт-Петербург, Кронверкский пр., д. 49

Наноматериалы применяются в разработке катализаторов, оптических приборов и даже фармацевтических препаратов, диагностических систем, а также систем адресной доставки лекарств. Эффективность наноматериалов во многих из этих приложений зависит от их морфологии, а именно линейных размеров, формы и структуры поверхности; ярким примером служит влияние геометрии наноматериалов на их эндоцитоз клетками иммунитета. Поэтому часто есть необходимость в контроле данных параметров в процессе синтеза. Однако синтез наноматериалов подразумевает наличие большого количества взаимозависимых параметров синтеза, например концентраций реагентов, температур, скоростей перемешивания и т. д. Это означает, что на практике оказывается тяжело предсказать результат конкретного синтеза и экспериментаторам приходится тратить большое количество времени и ресурсов для создания наноматериала с желаемыми морфологическими свойствами.

Глубокое обучение потенциально может позволить справиться с данной проблемой, однако решения, разработанные на данный момент, позволяют предсказывать геометрические формы лишь качественно, а размеры - лишь по одной из осей; при этом, характер отображения данных принципиально не позволяет расширять данные подходы на большее количество химических систем.

Нами была создана система, способная генерировать изображения наноматериалов со сканирующего электронного микроскопа, основываясь на процедурах синтеза данных наноматериалов. Данная система использует предобученную модель обработки естественного языка BERT для получения более сжатого векторного представления текстов синтезов. Далее генеративная система, основанная на архитектуре автоэнкодера позволяет создавать изображения наноматериалов.

Охватывая все детали морфологии наноматериала, разработанный подход также позволит значительно сократить затраты на их разработку, а также является универсальным, так как любой наноматериал потенциально может быть отображен в виде процедуры синтеза. Таким образом, становится возможным обратный дизайн наноматериалов с заранее заданными морфологическими свойствами.

Работа выполнена при поддержке программы «Приоритет-2030».