

## УДК 637.047

### Качественное и количественное определение антибиотиков в сухом молоке при помощи методов глубокого машинного обучения

Яснов Михаил Андреевич (ГБОУ Гимназия №261 Кировского района Санкт-Петербурга)

Научный руководитель – аспирант, Алиев Тимур Алекберович (Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО»)

#### Введение.

На данный момент следят за антибиотиками в молоке, как предприятия, так и люди, поскольку молоко с антибиотиками для предприятий - это убыток, оно не может перейти в последующие формы(сыр, творог и т.п.). Людям же молоко с антибиотиками вредно, так как, во-первых, это влияет на человеческий организм отрицательно (Например, могут быть аллергии, побочные эффекты из-за реакции с препаратами, который человек принимает), во-вторых постоянное использование антибиотиков приводит к образованию устойчивых форм микроорганизмов к этим антибиотикам.

Гипотеза: Существует возможность с высокой точностью определять наличие антибиотиков в сухом молоке при помощи методов машинного обучения.

Задачи:

1. Сбор данных
2. Анализ данных
3. Обучение моделей машинного обучения для качественного определения антибиотиков в сухом молоке
4. Тестирование и выбор лучшей модели
5. Обучение моделей машинного обучения для количественного определения антибиотиков в сухом молоке
6. Тестирование и выбор лучшей модели
7. Создание программного обеспечения для удобства использования данного алгоритма

#### Основная часть.

Данные были получены при помощи метода вольтамперометрии в лаборатории инфохимии в университете ИТМО. На первом этапе электрохимический датчик, представляющий собой много электродную систему, вводится в раствор молока. Для образца молока регистрируются три последовательные циклические вольтамперограммы (CVs). Полученный набор дискретных значений ( $dI/dE$ ) обрабатывается путем обращения к статистической модели, основанной на ранее собранной базе данных, и прогноз отображается на интерфейсе компьютера. Для сбора базы данных по 5 антибиотикам и чистому молоку мы зарегистрировали в общей сложности 1377 (CVs).

Для качественного определения содержания антибиотика в молоке: сверточная нейронная сеть для табличных данных, CatBoostClassifier, XGBClassifier.

В результате тестирования было выявлено, что лучше всего на данной задаче показывает себя разработанная нами сверточная нейронная сеть для табличных данных. При оценке точности модели мы ориентировались на метрику Ассигасу (чем ближе значение к 1, тем качественнее модель делает предсказание)

Для задачи количественного определения антибиотика в молоке были выбраны такие модели машинного обучения, как Linear Regression, CatBoostRegressor, XGBRegressor и Lama (Light Auto ML)

Из результатов обучения, можно сделать вывод, что существует линейная зависимость между концентрацией и исходными данными. Это подтверждает и тестирование, так как лучший результат показала линейная регрессия (Linear Regression). При оценивании качества моделей мы ориентировались на метрику  $r^2$  (Чем ближе значение к 1, тем качественнее модель делает предсказание)

#### **Вывод.**

Проведя большое количество тестов обеих моделей, лучшие их них выдали результат:

- Accuracy: 0.9557 — модель для качественного определения наличия антибиотиков в сухом молоке
- R2 score: 0.9275 — модель для количественного определения наличия антибиотиков в сухом молоке

В итоге, было разработано решение для качественного и количественного определения антибиотиков в сухом молоке. Гипотеза, которая была изначально выдвинута, была подтверждена, так как используемые модели дают достаточно точные результаты.

В дальнейшем планируется увеличить количество определяемых антибиотиков и попробовать другие модели машинного обучения. Для этого требуется большее количество данных. Также планируется внедрение данной системы в промышленные компании.

#### **Список использованных источников.**

1. The development of an electrochemical sensor for antibiotics in milk based on machine learning algorithm. Timur A. Aliev, Vadim E. Belyaev, Anastasiya V. Pomytkina, Pavel V. Nesterov, Sergei V. Shityakov, Roman V. Sadovnychiy, Alexander S. Novikov, Olga Yu. Orlova, Maria S. Masalovich, Ekaterina V. Skorb.
2. Tick-Borne Encephalitis Electrochemical Detection by Multilayer Perceptron on Liquid–Metal Interface. ACS Appl. Bio Mater. 2020, 3, 11, 7352–7356
3. Milk and milk products. Immunological methods for determination of antibiotics. МКС 67.100.10