

УДК 544.08

ПОСТРОЕНИЕ СИСТЕМЫ АНАЛИЗА ПРОЦЕССОВ КРИСТАЛЛООБРАЗОВАНИЯ В УСЛОВИЯХ ЛЕВИТИРУЮЩЕГО КЛАСТЕРА МИКРОКАПЕЛЬ

Кольцов С.И. (Университет ИТМО)

Научный руководитель – к.х.н., ведущий профессор, директор НОЦ Инфохимии
университета ИТМО Скорб Е.В.

Введение. Процессы супрамолекулярного взаимодействия, то есть взаимодействия без ковалентных связей, ведущее к возникновению упорядоченных структур, являются предметом плотных исследований и встречаются в сферах от вопросов жизни¹ до материаловедения². При введении дополнительного ограничения на химическую реакцию в виде диффузионного лимитирования, то есть, когда скорость образования конечного вещества лимитирована количеством вещества, поступающем в ходе диффузии, возможен контроль кристаллообразования вплоть до периодических структур на макроуровне³. Соединения на основе меламина (1,3,5-триазин-2,4,6-триамин), циануровой (2,4,6-тригидрокси-1,3,5-триазин) и барбитуровой (2,4,6-тригидроксипиримидин) кислот при этом являются отличными модельными системами для инжиниринга структур^{4,5}. Мы с коллегами из ТюмГУ решили провести реакции построения супрамолекулярных ансамблей в условиях левитирующего кластера микрокапель⁶. Диаметр капель в таких условиях составляет 2-15 микрон, что соответствует разделу химии «микрофлюидика». Особенность данных систем в том, что в них практически либо полностью отсутствует перемешивание и массоперенос происходит только вследствие диффузии. Таким образом, мы имеем множество диффузионно-лимитированных химических реакторов, расположенных близко друг к другу и подвешенных в равномерном потоке насыщенного водой воздуха.

При всей потенциальной научной значимости данного метода исследования как модельной системы живых микрообъектов, возникает закономерный вопрос: как именно отслеживать формирование кристаллических супрамолекулярных структур из меламина и циануровой кислоты в условиях левитирующих микрофлюидных объектов? Переменное положение капель и необходимость равномерности воздушных потоков исключает почти все методы наблюдения, кроме визуального. Поэтому все эксперименты были детально засняты на черно-белую камеру, с итоговым количеством фотографий свыше 20 тыс. за один эксперимент. Очевидно, необходим автоматический метода анализа.

Основная часть. Решением стал комплексный алгоритм на основе нейросетей и классических методов машинного обучения. Алгоритм состоит из нескольких частей: а) поиск исходных объектов наблюдения, б) отслеживание их положения на протяжении эксперимента, в) сбор данных о светимости на протяжении эксперимента, г) кластеризация объектов наблюдения по типам светимости.

Итогом инженерного поиска стала 5-слойная нейронная сеть, состоящая из трёх свёрточных слоёв с техникой MaxPool и нормализацией по батчу, один полносвязный слой и один классифицирующий. Во всех слоях функция активации представляет собой leakyRelu. В нейронную сеть приходит одномерная матрица, первый свёрточный слой даёт на выходе матрицу 40x40x8, второй и третий слой увеличивают третью размерность ещё в два раза каждый до x16 и x32 соответственно.

По итогам отслеживания капель с помощью скользящего окна и нахождения их центров, производим подсчёт интенсивности методом сложения интенсивности всех пикселей капли. Возможно домножение на константу для удобства отображения. Данные представляем в виде квадратного массива, отбросив по необходимости некоторое количество точек до ближайшего квадрата. Меняем размер изображения на 224x224 пикселя без интерполяции, и отправляем в предобученную открытую модель VGG16 без последнего классифицирующего слоя. На выходе имеем 4096 признаков, к которым применяем метод главных компонент, и затем проводим классификацию по методу K-средних.

Выводы. В результате объединённой работы частей алгоритма имеем проиндексированные капли с известным характером свечения, разбитые не общие группы по типам колебаний. По желанию возможно представление данных в формате видеозаписи. По мере накопления данных планируется дообучение модели для работы с флуоресцентными данными и на ускорение анализа.

Таким образом, в ходе работы мы подготовили нейросетевой метод анализа протекающих в микрокаплях процессов на основе визуальных данных.

Список использованных источников:

1. Cafferty B., Hud N. Was a Pyrimidine-Pyrimidine Base Pair the Ancestor of Watson-Crick Base Pairs? Insights from a Systematic Approach to the Origin of RNA // *Israel Journal of Chemistry*. – 2015 – №55(8). – С. 891-905
2. Zhou J., Li J., Du X., Xu B. Supramolecular biofunctional materials // *Biomaterials*. – 2017. -- №129. – С1-27.
3. Kukhtenko E., Lavrentev F., Shilovskikh V., Zyrianova P., Koltsov S.I., Ivanov A.S., Novikov A., Muravev A.A., Nikolaev K.G., Andreeva D.V., Skorb E.V. Periodic Self-Assembly of Poly(ethyleneimine)–poly(4-styrenesulfonate) Complex Coacervate Membranes // *Polymers*. – 2023. – №15(1). – С. 45-56.
4. Shilovskikh V.V., Timralieva A.A., Belogub E.V., Konstantinova E.A., Kokorin A.I., Skorb E.V. Radical Activity of Binary Melamine-Based Hydrogen-Bonded Self-Assemblies // *Applied Magnetic Resonance*. – 2020. – №51. – С.939–949
5. Shilovskikh V.V., Timralieva A.A., Nesterov P.V., Novikov A.S., Sitnikov P.A., Konstantinova E.A., Kokorin A.I., Skorb E.V. Melamine–Barbiturate Supramolecular Assembly as a pH-Dependent Organic Radical Trap Material // *Chemistry. A European Journal*. – 2020. – №26(70). – С.16603-16610.
6. Fedorets A.A., Bormashenko E., Dombrovsky E.A., Nosonovsky M. Symmetry of small clusters of levitating water droplets // *Physical Chemistry Chemical Physics*. – 2020. – 22. – С. 12239-12244.