

ПРИМЕНЕНИЕ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ПЕРЕНОСА МНОГОМЕРНЫХ ГРАДУИРОВОК МЕЖДУ БИК И ЯМР СПЕКТРОМЕТРАМИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СРЕДНЕЧИСЛОВОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МАССЫ ОБРАЗЦОВ ЛИГНИНА

Деев В.А.¹

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор Кирсанов Д.О.^{1,2}

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии

²Университет ИТМО

hitcherv@mail.ru

Введение

Изучение возможностей использования возобновляемых природных источников веществ для химического синтеза новых веществ является важной практической задачей. Наиболее перспективными для этих целей является использование биополимеров в первую очередь растительного происхождения, самым распространенным из которых является лигнин. Возможная область применения лигнина обусловлена величиной среднечисловой молекулярной массы. Для определения данной характеристики наиболее распространенным является метод гелепроникающей хроматографии (ГПХ), требующий наличие дорогостоящего оборудования и стандартов известной молекулярной массы [1].

Альтернативным является использование многомерных градуировочных зависимостей, построенных по спектрам ядерного магнитного резонанса на ядрах ¹H (¹H-ЯМР) [2], что также затруднено дороговизной и малой доступностью данного оборудования. Интересным является построение многомерной градуировки по небольшому набору ¹H-ЯМР спектров с последующим использованием ее для данных, полученных на ином, более доступном аналитическом оборудовании. В литературе уже показана возможность переноса многомерных градуировок не только между схожими приборами, но и между различными спектральными методами анализа [3].

Основная часть

Целью данной работы является оценка возможности использования искусственных нейронных сетей типа автоэнкодер для переноса данных между БИК и ЯМР спектрометрами для определения среднечисловой молекулярной массы образцов лигнина и сравнение данного подхода с классическим методом прямой стандартизации.

Использовались образцы лигнина, полученные методом безкатализаторного вываривания в этаноле из сырья *Miscanthus x giganteus*, *Paulownia tomentosa* и *Silphium perfoliatum* (campus Klein-Altendorf, Rheinbach, Germany). Для определения среднечисловой молекулярной массы использован метод ГПХ. ¹H-ЯМР спектры получены с использованием спектрометра Bruker AVANCE III (Bruker Biospin, Rheinstetten, Germany) с резонансной частотой 600 МГц. Для получения БИК спектров использован спектрометр Vector 22/N (Bruker, Ettlingen, Germany), диапазон от 4000 до 9000 см⁻¹, разрешение 8 см⁻¹.

Многомерная градуировка строилась методом ПЛС по данным ¹H-ЯМР. Перенос данным между БИК и ЯМР осуществлялся с помощью автоэнкодера и метода прямой стандартизации. В ходе работы рассмотрено влияние выбора образцов для обучения моделей переноса данных, архитектуры нейронной сети типа автоэнкодера.

Выводы

Предложена архитектура нейронной сети типа автоэнкодер для переноса многомерной градуировки между БИК и ЯМР спектрометрами. Проведено сравнение данного подхода с методом прямой стандартизации. Показано, что использование автоэнкодера позволяет добиться большей точности определения среднечисловой молекулярной массы образцов лигнина по перенесенным из БИК в ЯМР спектрам по сравнению с методом прямой стандартизации.

Литература

1. Yu S., Hu Y., Cao T., et al. Revealing the molecular interactions between lignin and carbohydrates towards improved lignocellulose utilization // *Progress in Polymer Science*. 2026. Vol. 173. 102070. <https://doi.org/10.1016/j.progpolymsci.2025.102070>
2. Arrabal-Campos F.M., González-Lázaro M., Pérez J.M., et al. Concentration-independent molecular weight determination of polymers via diffusion NMR: A universal approach across solvents // *European Polymer Journal*. 2025. Vol. 226. 113710. <https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2024.113710>
3. Roger J.M., Diaz V.F., Nikzad-Langerodi R. Cloning instruments, model maintenance and calibration transfer // *Trends in Analytical Chemistry*. 2025. Vol. 191. 118319. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2025.118319>