

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Физико-механический институт

Работа допущена к защите
Руководитель ОП
_____ К.Н. Козлов
« _____ » _____ 2023 г.

**ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА
МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ
РАСПОЗНАВАНИЕ ХИМИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЫ
МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ**

по направлению подготовки 01.04.02 Прикладная математика и информатика
Направленность (профиль) 01.04.02_02 Математические методы анализа и визуализации данных

Выполнил
студент гр. 5040102/10201

К.А. Дамасинский

Руководитель
старший преподаватель ВШПМиВФ

В.С. Чуканов

Консультант
по нормоконтролю

Л.А. Арефьева

Санкт-Петербург
2023

**САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ПЕТРА ВЕЛИКОГО
Физико-механический институт**

УТВЕРЖДАЮ

Руководитель ОП

_____ К.Н. Козлов

« _____ » _____ 2023г.

**ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы**

студенту Дамаскинскому Константину Александровичу гр. 5040102/10201

1. Тема работы: Распознавание химической структуры молекулы методами машинного обучения.
2. Срок сдачи студентом законченной работы 13.05.2023.
3. Исходные данные по работе¹: статистические данные с сайта [gosstat], а также из репозитория [uci]; основным источником литературы является монография [Book] и статья [Article].
4. Содержание работы (перечень подлежащих разработке вопросов):
 - 4.1. Обзор литературы по теме ВКР.
 - 4.2. Исследование программных продуктов.
 - 4.3. Разработка метода/алгоритма/программы.
 - 4.4. Апробация разработанного метода/алгоритма/программы.
5. Перечень графического материала (с указанием обязательных чертежей):
 - 5.1. Схема работы метода/алгоритма.
 - 5.2. Архитектура разработанной программы/библиотеки.
6. Консультанты по работе²:
 - 6.1. Должность, степень, Л.А. Арефьева (нормоконтроль).
7. Дата выдачи задания: 13.02.2023.

¹Текст, который подчеркнут и/или выделен в отдельные элементы нумерационного списка, приведён в качестве примера.

²Подпись консультанта по нормоконтролю пока не требуется. Назначается всем по умолчанию.

Руководитель ВКР _____ В.С. Чуканов

Задание принял к исполнению 13.02.2023

Студент _____ К.А. Дамасинский

РЕФЕРАТ

На 30 с., 6 рисунков, 6 таблиц, 2 приложения

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: ЗАДАЧА РАСПОЗНАВАНИЯ, ХИМИЯ, INCHI, МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ.³

Тема выпускной квалификационной работы: «Распознавание химической структуры молекулы методами машинного обучения»⁴.

В данной работе изложена сущность подхода к созданию динамического информационного портала на основе использования открытых технологий Apache, MySQL и PHP. Даны общие понятия и классификация IT-систем такого класса. Проведен анализ систем-прототипов. Изучена технология создания указанного класса информационных систем. Разработана конкретная программная реализация динамического информационного портала на примере портала выбранной тематики...⁵

В данной работе изложена сущность подхода к созданию динамического информационного портала на основе использования открытых технологий Apache, MySQL и PHP. Даны общие понятия и классификация IT-систем такого класса. Проведен анализ систем-прототипов. Изучена технология создания указанного класса информационных систем. Разработана конкретная программная реализация динамического информационного портала на примере портала выбранной тематики...

ABSTRACT

30 pages, 6 figures, 6 tables, 2 appendices

KEYWORDS: OBJECT DETECTION, CHEMISTRY, INCHI, MACHINE LEARNING.

³Всего **слов**: от 3 до 15. Всего **слов и словосочетаний**: от 3 до 5. Оформляются в именительном падеже множественного числа (или в единственном числе, если нет другой формы), оформленных по правилам русского языка. *Внимание! Размещение сноски после точки является примером как запрещено оформлять сноски.*

⁴Реферат **должен содержать**: предмет, тему, цель ВКР; метод или методологию проведения ВКР; результаты ВКР: область применения результатов ВКР; выводы.

⁵ОТ 1000 ДО 1500 печатных знаков (ГОСТ Р 7.0.99-2018 СИБИД) на русский или английский текст. Текст реферата повторён дважды на русском и английском языке для демонстрации подхода к нумерации страниц.

The subject of the graduate qualification work is «Molecular structure detection by machine learning methods».

In the given work the essence of the approach to creation of a dynamic information portal on the basis of use of open technologies Apache, MySQL and PHP is stated. The general concepts and classification of IT-systems of such class are given. The analysis of systems-prototypes is lead. The technology of creation of the specified class of information systems is investigated. Concrete program realization of a dynamic information portal on an example of a portal of the chosen subjects is developed...

In the given work the essence of the approach to creation of a dynamic information portal on the basis of use of open technologies Apache, MySQL and PHP is stated. The general concepts and classification of IT-systems of such class are given. The analysis of systems-prototypes is lead. The technology of creation of the specified class of information systems is investigated. Concrete program realization of a dynamic information portal on an example of a portal of the chosen subjects is developed...

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	7
Глава 1. Название первой главы: всестороннее изучение объекта и предмета исследования, анализ результатов, полученных другими авторами...	13
1.1. Название параграфа	13
1.1.1. Название первого подпараграфа первого параграфа первой главы для демонстрации переноса слов в содержании.....	13
1.2. Название параграфа	13
1.3. Выводы	15
Глава 2. Название второй главы: разработка метода, алгоритма, модели исследования.....	15
2.1. Название параграфа	15
2.2. Название параграфа	16
2.2.1. Название подпараграфа	16
2.3. Название параграфа	17
2.4. Выводы	24
Глава 3. Название третьей главы: разработка программного обеспечения..	25
3.1. Название параграфа	25
3.2. Название параграфа	25
3.3. Выводы	25
Глава 4. Название четвёртой главы. Апробация результатов исследования, а именно: метода, алгоритма, модели исследования	25
4.1. Название параграфа	26
4.2. Название параграфа	26
4.3. Выводы	26
Заключение	27
Список сокращений и условных обозначений	28
Словарь терминов.....	29
Список использованных источников.....	30
Приложение 1. Краткие инструкции по настройке издательской системы \LaTeX	31
Приложение 2. Некоторые дополнительные примеры	35

ВВЕДЕНИЕ

Данный пример выпускной квалификационной работы (далее — ВКР) создан для того, чтобы продемонстрировать возможности шаблонов SPbPU–student-templates, выполненных с помощью издательской системы L^AT_EX [spbpu-student-thesis-template]. В примере отображены некоторые обязательные элементы ВКР [spbpu-student-thesis-specification]. Для того, чтобы подробнее ознакомиться с требованиями к наполнению этих элементов, а также с общими требованиями к структуре и оформлению ВКР, пожалуйста, ознакомьтесь с [spbpu-student-thesis-template-author-guide; spbpu-student-thesis-specification].

Пример может быть использован для подготовки отчета по практике с учетом корректировки требований к титульному листу, структуре и содержанию конкретной практики в соответствии с планом её проведения (рабочей программы дисциплины).

Технология написания ВКР на L^AT_EX подробно изложена в [spbpu-student-thesis-template-author-guide]. В рекомендациях приведены ссылки на учебно-справочные материалы L^AT_EX (под L^AT_EX в документе может подразумеваться также T_EX, L^AT_EX 2_ε).

Авторам, использующим L^AT_EX, необходимо последовательно заменять текст данного шаблона в файлах «thesis.tex» на текст своей ВКР, избегая при этом ошибок (errors) при компиляции. Синтаксические конструкции L^AT_EX, которые задействованы в формировании того или иного текста выделены машинописным шрифтом. Иные шрифты в тексте ВКР (за исключением математических) использовать запрещено.

Светлым курсивом выделены *важные* элементы текста (ключевые слова определений, интонационные выделения словосочетаний), полужирным шрифтом — **служебные** элементы текста («определение», «теорема», «лемма» и т.п), а также при необходимости ключевые слова в алгоритмах. В соотношении к основному тексту курсив и полужирный шрифт не может превышать 1 % текста на странице.

Полужирный курсив разрешено использовать только в *названиях подпараграфов (пунктов)* и запрещено использовать в основном тексте. Подчеркивание допускается использовать только в задании в местах, где данные вписываются студентом, а также в математических формулах при необходимости.

Введение *не должно превышать 4 страницы*. Во введении необходимо обосновать выбор темы, охарактеризовать современное состояние изучаемой проблемы, ее актуальность, практическую и теоретическую значимость, степень разработанности данной проблемы.

Актуальность исследования заключается в N фактах и явлениях, а также в их состоянии, связанных с ними нерешенных проблемах, слабо освещенных и требующих уточнения или дальнейшей разработки вопросов.

Объект исследования — это то, на что направлен процесс познания (индивид, коллектив, общность людей, сфера деятельности и т.п.). Связь объекта и предмета легко запоминаются по формуле: «исследуем такой-то объект на предмет чего-то». Это процесс или явление, порождающее проблемную ситуацию, и избранное для изучения в целом. Всегда в объекте содержится предмет, а не наоборот.

Предмет исследования — один из аспектов, часть рассматриваемого объекта (свойства, состояния, процессы, направления и особенности деятельности структур по связям с общественностью, их сотрудников в конкретных сферах общественных отношений и т.д.). Предмет исследования частично совпадает с названием работы и содержится в цели сразу после сказуемого («выявить . . . что?», «определить . . . что?», «сформировать . . . что?»). Именно предмет исследования определяет тему выпускной квалификационной работы. Объект и предмет исследования соотносятся между собой как целое и частное, общее и частности.

Цель исследования формулируется, исходя из проблемы, которую следует разрешить студенту в процессе выполнения выпускной квалификационной работы и представляет собой в самом сжатом виде тот результат (результаты), который должен быть получен в итоге исследования. Формулировку цели рекомендуется начинать со слов: «сформировать/создать», «разработать», «провести», «подготовить».

Цель исследования — краткий ожидаемый результат, то есть решение практических задач и новые знания о рассматриваемом предмете исследования. В соответствии с целью исследования, логически определяются следующие **задачи работы** (должно быть *не менее четырех задач, но не более шести задач*):

- А. Первая задача.
- В. Вторая задача.
- С. Третья задача.
- Д. Четвертая задача.

Задачи отражают *поэтапное достижение цели, при этом уточняют границы проводимого исследования*. Рекомендуется формулировать задачи с глаголов в форме перечисления: «изучить . . . », «выявить . . . », «проанализировать . . . », «разработать . . . », «описать . . . » и т.п. Заголовки выпускной квалификационной работы должны отражать суть поставленной задачи.

Общая направленность исследования задается до его начала сформулированными **гипотезами**, которыми могут быть:

- научное предположение, выдвигаемое для объяснения каких-либо факторов, явлений и процессов, которые надо подтвердить или опровергнуть (т. е. требующее верификации);
- вероятностное знание, научно обоснованная догадка по объяснению действительности;
- прогноз ожидаемого решения проблемы, ответ на вопрос, поставленный в задаче;
- условно-категорическое умозаключение по схеме «если . . . , то . . . », основными элементами которого являются условие (причина) и результат (следствие).

Гипотеза — это предполагаемое решение проблемы. В ходе исследования гипотезу проверяют и либо подтверждают, либо опровергают. Формулировка гипотезы *обязательна только для магистров*.

Теоретическая и методологическая база исследования. В теоретической базе необходимо перечислить источники, которые использовались для написания работы. Приведём примеры ключевых фраз:

- «Теоретической основой выпускной квалификационной работы послужили исследования . . . (перечисляются конкретные документы)».
- «Практическая часть работы выполнялась на основании документов . . . ».
- «При написании выпускной квалификационной работы использовалась работы отечественных и зарубежных специалистов . . . ».
- «Для выполнения анализа в практической части были использованы материалы . . . ».
- «При подготовке ВКР были использованы материалы таких учебных дисциплин, как "Технология конструкционных материалов", "Экономика" "Начертательная геометрия" . . . ».
- «При выполнении ВКР использовались материалы N организации . . . (ссылка на официальный сайт)».

Методологическая база исследования должна содержать указание на методы и подходы, на которых основывается данная ВКР.

Среди методов исследования студенту необходимо обратить внимание на общенаучные методы, включающие эмпирические (наблюдение, эксперимент, сравнение, описание, измерение), теоретические (формализация, аксиоматический, гипотетико-дедуктивный, восхождение от абстрактного к конкретному) и общелогические (анализ, абстрагирование, обобщение, идеализация, индукция, аналогия, моделирование и др.) методы. Также следует назвать конкретно-научные (частные) методы научного познания, представляющие собой специфические методы конкретных наук: экономики, социологии, психологии, истории, логики и проч.

Информационной базой для разработки ВКР служат материалы, собранные студентом в процессе обучения в ВУЗе, в ходе прохождения учебной и производственной практик, а также во время прохождения преддипломной практики. Дополнительная информационная база может включать информацию официальных статистических публикаций (например, Госкомстата России), материалы, получаемые из Интернета, информацию международных организаций и ассоциаций.

Степень научной разработанности проблемы — это состояние теоретической разработанности проблемы, анализ работ отечественных и зарубежных авторов, исследующих эту проблему. Здесь важно подчеркнуть исторические, экономические, политические или профессиональные явления, повлиявшие на выбор темы. Также в данной части введения проводится критический обзор современного состояния и освещения исследуемой темы в научной, профессиональной литературе и СМИ, обобщаются и оцениваются точки зрения различных авторов по теме исследования.

Научная новизна выявляется в результате анализа литературных источников, уточнения концептуальных положений, обобщения опыта решения подобных проблем. Это принципиально новое знание, полученное в науке в ходе проведенного исследования (теоретические положения, впервые сформулированные и обоснованные, собственные методические рекомендации, которые можно использовать в практике). Научная новизна выпускной квалификационной работы может состоять:

- в изучении фактов и явлений с помощью специальных научных методов и междисциплинарных подходов;

- в изучении уже известного в науке явления на новом экспериментальном материале;
- в переходе от качественного описания известных в науке фактов к их точно определяемой количественной характеристике;
- в изучении известных в науке явлений и процессов более совершенными методами;
- в сопоставлении, сравнительном анализе протекания процессов и явлений;
- в изменении условий протекания изучаемых процессов;
- в уточнении категориального аппарата дисциплины, определение типологии, признаков, специфики изучаемого явления.

Практическая значимость подробно отражается в:

- практических рекомендациях или разработанном автором выпускной квалификационной работы проекте (как основная часть выпускной квалификационной работы);
- выявлении важности решения избранной проблемы для будущей деятельности магистра по выбранному направлению подготовки.

Практическая значимость выпускной квалификационной работы может заключаться в возможности:

- решения той или иной практической задачи в сфере профессиональной деятельности;
- проведения дальнейших научных исследований по теме ВКР;
- разработки конкретного проекта, направленного на интенсификацию работы исследуемой организации, предприятия.

Апробация результатов исследования включает:

- участие в конференции, семинарах и т. д.;
- публикации по теме выпускной квалификационной работы;
- применение результатов исследования в практической области;
- разработку и внедрение конкретного проекта;
- выступления на научных конференциях, симпозиумах, форумах и т.п. (*обязательно*);
- публикации студента, включенные в список использованных источников.

В силу ограниченности объема необходимо очень тщательно подойти к написанию введения, которое должно стать «визитной карточкой», кратко, но емко характеризующей работу. Во введение не включают схемы, таблицы, описания, рекомендации и т.п.

Целью первой главы, как правило, является всесторонний анализ предмета и объекта исследования, второй — разработка предложений (алгоритмов, технологий и т.п.) по улучшению какого-либо процесса, протекающих с участием предмета и объекта исследования, третьей — практическая реализация (имплементация) — предложений (алгоритмов, технологий и т.п.) в виде программного (или иного) продукта, четвертой — апробация разработанных в работе предложений и выводы целесообразности их дальнейшей разработки (использованию). Содержание глав в данном шаблоне приведено только для демонстрации возможностей L^AT_EX.

ГЛАВА 1. НАЗВАНИЕ ПЕРВОЙ ГЛАВЫ: ВСЕСТОРОННЕЕ ИЗУЧЕНИЕ ОБЪЕКТА И ПРЕДМЕТА ИССЛЕДОВАНИЯ, АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ, ПОЛУЧЕННЫХ ДРУГИМИ АВТОРАМИ

Хорошим стилем является наличие введения к главе, которое *начинается непосредственно после названия главы, без оформления в виде отдельного параграфа*. Во введении может быть описана цель написания главы, а также приведена краткая структура главы. Например, в параграфе 1.1 приведены примеры оформления одиночных формул, рисунков и таблицы. Параграф 1.2 посвящён многострочным формулам и сложносоставным рисункам.

Текст данной главы призван привести *краткие* примеры оформления текстово-графических объектов. Более подробные примеры можно посмотреть в следующей главе, а также в рекомендациях студентам [spbpu-student-thesis-template-author-guide].

1.1. Название параграфа

1.1.1. Название первого подпараграфа первого параграфа первой главы для демонстрации переноса слов в содержании

Содержание первого подпараграфа первого параграфа первой главы.

Одиночные формулы оформляют в окружении `equation`, например, как указано в следующей одиночной нумерованной формуле:

$$\pi \approx 3,141. \tag{1.1}$$

На рис.1.1 изображена гидробашня СПбПУ, а в табл.2.2 приведены данные, на примере которых коротко и наглядно будет изложена суть ВКР.

1.2. Название параграфа

Формулы могут быть размещены в несколько строк. Чтобы выставить номер формулы напротив средней строки, используйте окружение `multlined` из пакета



Рис.1.1. Вид на гидробашню СПбПУ [spbpu-gallery]

mathtools следующим образом [Ganter1999]:

$$\begin{aligned}
 (A_1, B_1) &\leq (A_2, B_2) \Leftrightarrow \\
 &\Leftrightarrow A_1 \subseteq A_2 \Leftrightarrow \\
 &\Leftrightarrow B_2 \subseteq B_1.
 \end{aligned}
 \tag{1.2}$$

Используя команду `\labelcref` из пакета `cleveref`, допустимо следующим образом оформлять ссылку на несколько формул: (1.1 и 1.2). На рис.1.2 приведены три картинki под общим номером и названием, но с отдельной нумерацией подрисунков посредством пакета `subcaption`.

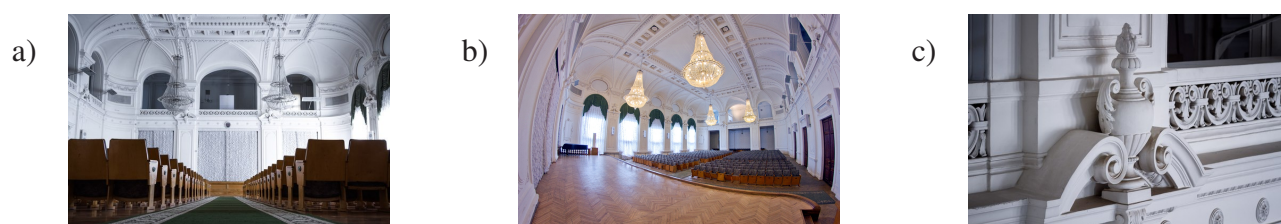


Рис.1.2. Фотографии Белого зала СПбПУ [spbpu-gallery], в том числе: *a* — со стороны зрителей; *b* — со стороны сцены; *c* — барельеф

Далее можно ссылаться на три отдельных рисунка: рис.1.2а, рис.1.2b и рис.1.2с.

Пример ссылок [Article; Book; Booklet; Conference; Inbook; Incollection; Manual; Mastersthesis; Misc; Phdthesis; Proceedings; Techreport; Unpublished; badiou:briefings], а также ссылок с указанием страниц, на котором отображены номера страниц [Naidenova2017] или в виде мультицитаты на несколько источ-

ников [Naidenova2017; Ganter1999]. Часть библиографических записей носит иллюстративный характер и не имеет отношения к реальной литературе.

1.3. Выводы

Текст выводов по главе 1.

Кроме названия параграфа «выводы» можно использовать (единообразно по всем главам) следующие подходы к именованию последних разделов с результатами по главам:

- «выводы по главе N», где N — номер соответствующей главы;
- «резюме»;
- «резюме по главе N», где N — номер соответствующей главы.

Параграф с изложением выводов по главе *является обязательным*.

ГЛАВА 2. НАЗВАНИЕ ВТОРОЙ ГЛАВЫ: РАЗРАБОТКА МЕТОДА, АЛГОРИТМА, МОДЕЛИ ИССЛЕДОВАНИЯ

Глава посвящена более подробным примерам оформления текстово-графических объектов.

В параграфе 2.1 приведены примеры оформления многострочной формулы и одиночного рисунка. Параграф 2.2 раскрывает правила оформления перечислений и псевдокода. В параграфе 2.3 приведены примеры оформления сложносоставных рисунков, длинных таблиц, а также теоремоподобных окружений.

2.1. Название параграфа

Все формулы, размещенные в отдельных строках, подлежат нумерации, например, как формулы (2.1) и (2.2) из [Ganter1999].

$$A^\uparrow = \{m \in M \mid gIm \ \forall g \in A\}; \quad (2.1)$$

$$B^\downarrow = \{g \in G \mid gIm \ \forall m \in B\}. \quad (2.2)$$

Обратим внимание, что формулы содержат знаки препинания и что они выровнены по левому краю (с помощью знака & окружения align).

На рис.2.1 приведёна фотография Нового научно-исследовательского корпуса СПбПУ.



Рис.2.1. Новый научно-исследовательский корпус СПбПУ [spbpu-gallery]

2.2. Название параграфа

Название параграфа оформляется с помощью команды `\section{...}`, название главы — `\chapter{...}`.

2.2.1. Название подпараграфа

Название подпараграфа оформляется с помощью команды `\subsection{...}`.

Использование подпараграфов в основной части крайне не рекомендуется. В случае использования, необходимо вынести данный номер в содержание. Название подпараграфа оформляется с помощью команды `\subsubsection{...}`.

Вместо подпараграфов рекомендовано использовать перечисления.

Перечисления могут быть с нумерационной частью и без неё и использоваться с иерархией и без иерархии. Нумерационная часть при этом формируется следующим способом:

1. в перечислениях *без иерархии* оформляется арабскими цифрами с точкой (или длинным тире).
2. В перечислениях *с иерархией* — в последовательности сначала прописных латинских букв с точкой, затем арабских цифр с точкой и далее — строчных латинских букв со скобкой.

Далее приведён пример перечислений с иерархией.

- A. Первый пункт.
- B. Второй пункт.
- C. Третий пункт.

D. По ГОСТ 2.105–95 [**gost-russian-text-documents**] первый уровень нумерации идёт буквами русского или латинского алфавитов (*для определенности выбираем английский алфавит*), а второй — цифрами.

1. В данном пункте лежит следующий нумерованный список:

- а) первый пункт;
- б) третий уровень нумерации не нормирован ГОСТ 2.105–95 (*для определенности выбираем английский алфавит*);
- с) обращаем внимание на строчность букв в этом нумерованном и следующем маркированном списке:
 - первый пункт маркированного списка.

E. Пятый пункт верхнего уровня перечисления.

Маркированный список (без нумерационной части) используется, если нет необходимости ссылки на определенное положение в списке:

- первый пункт с *маленькой буквы* по правилам русского языка;
- второй пункт с *маленькой буквы* по правилам русского языка.

Оформление псевдокода необходимо осуществлять с помощью пакета `algorithm2e` в окружении `algorithm`. Данное окружение интерпретируется в шаблоне как рисунок. Пример оформления псевдокода алгоритма приведён на рис.2.2.

Обратим внимание, что можно сослаться на строчку 1 псевдокода из рис.2.2.

2.3. Название параграфа

Одиночные формулы также, как и отдельные формулы в составе группы, могут быть размещены в несколько строк. Чтобы выставить номер формулы напротив средней строки, используйте окружение `multlined` из пакета `mathtools` следующим образом [**Ganter1999**]:

$$\begin{aligned}
 (A_1, B_1) &\leq (A_2, B_2) \Leftrightarrow \\
 &\Leftrightarrow A_1 \subseteq A_2 \Leftrightarrow \\
 &\Leftrightarrow B_2 \subseteq B_1.
 \end{aligned}
 \tag{2.3}$$

Используя команду `\labelcref{...}` из пакета `cleveref`, допустимо оформить ссылку на несколько формул, например, (2.1–2.3).

Algorithm

Input: the many-valued context $M \stackrel{\text{def}}{=} (G, M, W, J)$, the class membership $\varepsilon : G \rightarrow K$

Output: positive and negative binary contexts $\overline{K}_+ \stackrel{\text{def}}{=} (\overline{G}_+, M, I_+)$, $\overline{K}_- \stackrel{\text{def}}{=} (\overline{G}_-, M, I_-)$ such that i-tests found in \overline{K}_+ are diagnostic tests in M , and objects from \overline{K}_- are counter-examples

```

1. for  $\forall g_i, g_j \in G$  do
2.   if  $i < j$  then
3.      $\overline{G} \leftarrow (g_i, g_j);$ 
4.   for  $\forall (g_i, g_j) \in \overline{G}$  do
5.     if  $m(g_i) = m(g_j)$  then
6.        $(g_i, g_j)Im;$ 
7.     if  $\varepsilon(g_i) = \varepsilon(g_j)$  then
8.        $\overline{G}_+ \leftarrow (g_i, g_j);$ 
9.     else  $\overline{G}_- \leftarrow (g_i, g_j);$ 
10.   $I_+ = I \cap (\overline{G}_+ \times M), I_- = I \cap (\overline{G}_- \times M);$ 
11.  for  $\forall \overline{g}_+ \in \overline{G}_+, \forall \overline{g}_- \in \overline{G}_-$  do
12.    if  $\overline{g}_+^\uparrow \subseteq \overline{g}_-^\uparrow$  then
13.       $\overline{G}_+ \leftarrow \overline{G}_+ \setminus \overline{g}_+;$ 

```

Рис.2.2. Псевдокод алгоритма DiagnosticTestsScalingAndInferring
[Naidenova2017]

Пример оформления четырёх иллюстраций в одном текстово-графическом объекте приведён на рис.2.3. Это возможно благодаря использованию пакета subcaption.

Далее можно ссылаться на составные части данного рисунка как на самостоятельные объекты: рис.2.3а, рис.2.3b, рис.2.3с, рис.2.3d или на три из четырёх изображений одновременно: рис.2.3а–2.3с.

Приведём пример табличного представления данных с записью продолжения на следующей странице на табл.2.1.

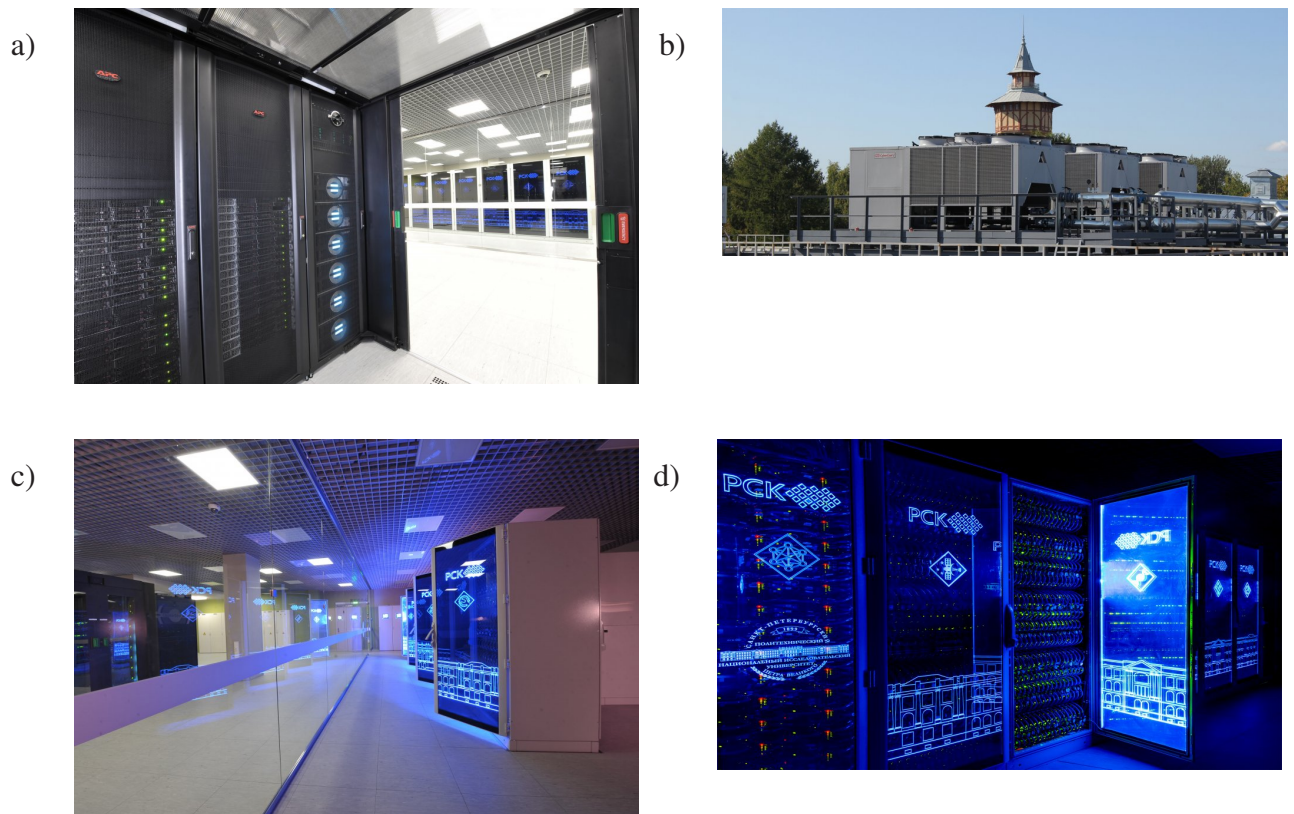


Рис.2.3. Фотографии суперкомпьютерного центра СПбПУ [spbpu-gallery]: *a* — система хранения данных и узлы NUMA-вычислителя; *b* — холодильные машины на крыше научно-исследовательского корпуса; *c* — машинный зал; *d* — элементы вычислительных устройств

Таблица 2.1

Пример задания данных из [Peskov2004] (с повтором для переноса таблицы на новую страницу)

G	m_1	m_2	m_3	m_4	K
1	2	3	4	5	6
g_1	0	1	1	0	1
g_2	1	2	0	1	1
g_3	0	1	0	1	1
g_4	1	2	1	0	2
g_5	1	1	0	1	2
g_6	1	1	1	2	2
g_1	0	1	1	0	1
g_2	1	2	0	1	1
g_3	0	1	0	1	1
g_4	1	2	1	0	2
g_5	1	1	0	1	2
g_6	1	1	1	2	2
g_1	0	1	1	0	1
g_2	1	2	0	1	1
g_3	0	1	0	1	1

Продолжение табл. 2.1

1	2	3	4	5	6
g_4	1	2	1	0	2
g_5	1	1	0	1	2
g_6	1	1	1	2	2
g_1	0	1	1	0	1
g_2	1	2	0	1	1
g_3	0	1	0	1	1
g_4	1	2	1	0	2
g_5	1	1	0	1	2
g_6	1	1	1	2	2
g_1	0	1	1	0	1
g_2	1	2	0	1	1
g_3	0	1	0	1	1
g_4	1	2	1	0	2
g_5	1	1	0	1	2
g_6	1	1	1	2	2
g_1	0	1	1	0	1
g_2	1	2	0	1	1
g_3	0	1	0	1	1
g_4	1	2	1	0	2
g_5	1	1	0	1	2
g_6	1	1	1	2	2
g_1	0	1	1	0	1
g_2	1	2	0	1	1
g_3	0	1	0	1	1
g_4	1	2	1	0	2
g_5	1	1	0	1	2
g_6	1	1	1	2	2

Таблица 2.2

Пример представления данных для сквозного примера по ВКР [Peskov2004]

G	m_1	m_2	m_3	m_4	K
g_1	0	1	1	0	1
g_2	1	2	0	1	1
g_3	0	1	0	1	1
g_4	1	2	1	0	2
g_5	1	1	0	1	2
g_6	1	1	1	2	2

Таблица 2.3

Пример задания данных в табличном виде из [Peskov2004] (с помощью окружения minipage)

G	m_1	m_2	m_3	m_4	K
g_1	0	1	1	0	1
g_2	1	2	0	1	1
g_3	0	1	0	1	1
g_4	1	2	1	0	2
g_5	1	1	0	1	2
g_6	1	1	1	2	2



Рис.2.4. Новый научно-исследовательский корпус СПбПУ [spbpu-gallery] (с помощью окружения minipage)

Вопросы форматирования текстово-графических объектов (окружений) не регламентированы в известных нам ГОСТах, поэтому предлагаем придерживаться следующих правил:

- **полужирный текст** рекомендуем использовать только для названий стандартных окружений с нумерационной частью, например, для представления *впервые*: **определение 1.1, теорема 2.2, пример 2.3, лемма 4.5**;
- *курсив* рекомендуем использовать только для выделения переменных в формулах, служебной информации об авторах главы (статьи), важных терминов, представляемых по тексту, а также для всего тела окружений, связанных с получением *новых существенных результатов и их доказательством*: теорема, лемма, следствие, утверждение и другие.

По аналогии с нумерацией формул, рисунков и таблиц нумеруются и иные текстово-графические объекты, то есть включаем в нумерацию номер главы, например: теорема 3.1. для первой теоремы третьей главы монографии. Команды \LaTeX выставляют нумерацию и форматирование автоматически. Полный перечень

команд для подготовки текстово-графических и иных объектов находится в подробных методических рекомендациях [**spbpu-bci-template-author-guide**].

Для удобства авторов названия стандартных окружений, рекомендованных к использованию, приведены в табл.2.4, а в табл.2.5 перечислены имена специально разработанных окружений для шаблонов SPbPU.

Таблица 2.4

Стандартные окружения

Название окружения	Назначение
center	центрирование, аналог команды <code>\centering</code> , но с добавлением нежелательного пробела, поэтому лучше избегать применения <code>center</code>
itemize	перечисления, в которых нет необходимости нумеровать пункты (немаркированные списки)
enumerate	перечисления с нумерацией (немаркированные списки)
refsection	создание отдельных библиографических списков для глав
tabular	оформление таблиц
table	автоматическое перемещение по тексту таблиц, оформленных, например, с помощью <code>tabular</code> , для минимизации пустых пространств
longtable	оформление многостраничных таблиц
tikzpicture	создание иллюстраций с помощью пакета <code>tikz</code> [ctan-tikz]
figure	автоматическое перемещение по тексту рисунков, оформленных например, с помощью <code>tikz</code> или подключенных с помощью команды <code>\includegraphics</code> , для минимизации пустых пространств
subfigure	оформление вложенных рисунков в составе <code>figure</code>
algorithm	оформление псевдокода на основе пакета <code>algorithm2e</code> [ctan-algorithm2e]
minipage	оформление рисунков и таблиц без функций автоматического перемещения по тексту для минимизации пустых пространств
equation	оформление выключенных (не встроенных в текст с помощью <code>\$...\$</code>) одиночных формул на одной строке
multilined	оформление выключенных (не встроенных в текст с помощью <code>\$...\$</code>) одиночных формул в несколько строк
aligned	оформление нескольких формул с выравниванием по символу <code>&</code> .

На базе пакета `tikz` разработано большое количество расширений [**ctan-tikz**], например, `tikzcd`, которые мы рекомендуем использовать для оформления иллюстраций.

В случае, если авторам потребовалось новое окружение, то создать его можно в файле `my_folder/my_settings.tex` согласно правилам, приведённым ниже.

1. Для перехода в режим создания окружений следует указать:

Таблица 2.5

Специальные окружения

Название окружения	Текстово-графический объект
abstr	реферат (abstract)
m-theorem	теорема
m-corollary	следствие
m-proposition	утверждение
m-lemma	лемма
m-axiom	аксиома
m-example	пример
m-definition	определение
m-condition	условие
m-problem	проблема
m-exercise	упражнение
m-question	вопрос
m-hypothesis	гипотеза

- `\theoremstyle{myplain}` — окружения с доказательствами или аксиомами
- `\theoremstyle{mydefinition}` — окружения, не связанные с доказательствами или аксиомами.

2. В команде создания окружения следует ввести краткий псевдоним (`m-new-env`) и отображаемое в pdf имя окружения (Название_окружения):

- `\newtheorem{m-new-env-second}{Название_окружения} - [chapter]`.

Теорема 2.1 (о чем-то конкретном). *Текст теоремы полностью выделен курсивом. Допустимо математические символы не выделять курсивом, если это искажает их значения. Используется абзацный отступ, так как “Абзацы в тексте начинают отступом” в соответствии с ГОСТ 2.105–95. Название теоремы допустимо убрать. Доказательство окончено.*

Доказательство теоремы 2.1, леммы, утверждений, следствий и других подобных окружений (в последнем абзаце) завершаем предложением в котором сказано, что доказательство окончено. Например, доказательство теоремы 2.1 окончено.

Тело доказательства не выделяется курсивом. Тело следующих окружений также не выделяется сплошным курсивом: определение, условие, проблема, пример, упражнение, вопрос, гипотеза и другие.

Определение 2.1 (термин). В тексте определения только *важные термины* выделяются курсивом. Если определение носит лишь вспомогательный характер, то допустимо не использовать окружение `m-definition`, представляя текст определения в обычном абзаце. Ключевые термины при этом обязательно выделяются курсивом.

Вместо теоремо-подобных окружений для вставки небольших текстово-графических объектов иногда используются команды. Типичным примером такого подхода является команда `\footnote{text}`⁶, где в аргументе `text` указывают текст *подстрочной ссылки (сноски)*. В них *нельзя добавлять веб-ссылки или цитировать литературу*. Для этих целей используется список литературы. Нумерация сносок сквозная по ВКР без точки на конце выставляется в шаблоне автоматически, однако в каждом приложении к ВКР нумерация, зависящая от номера приложения, выставляется префикс «П», например «П1.1» — первая сноска первого приложения.

2.4. Выводы

Текст заключения ко второй главе. Пример ссылок [**Article; Book; Booklet; Conference; Inbook; Incollection; Manual; Mastersthesis; Misc; Phdthesis; Proceedings; Techreport; Unpublished; badiou:briefings**], а также ссылок с указанием страниц, на котором отображены те или иные текстово-графические объекты [**Naidenova2017**] или в виде мультицитаты на несколько источников [**Naidenova2017; Ganter1999**]. Часть библиографических записей носит иллюстративный характер и не имеет отношения к реальной литературе.

Короткое имя каждого библиографического источника содержится в специальном файле `my_biblio.bib`, расположенном в папке `my_folder`. Там же находятся исходные данные, которые с помощью программы `Viber` и стилевого файла `Biblatex-GOST` [**ctan-biblatex-gost**] приведены в списке использованных источников согласно ГОСТ 7.0.5-2008. Многообразные реальные примеры исходных библиографических данных можно посмотреть по ссылке [**ctan-biblatex-gost-examples**].

Как правило, ВКР должна состоять из четырех глав. Оставшиеся главы можно создать по образцу первых двух и подключить с помощью команды `\input`

⁶Внимание! Команда вставляется непосредственно после слова, куда вставляется сноска (без пробела). Лишние пробелы также не указываются внутри команды перед и после фигурных скобок.

к исходному коду ВКР. Далее в приложении 1 приведены краткие инструкции запуска исходного кода ВКР [**latex-miktex**; **latex-texstudio**].

В приложении 2 приведено подключение некоторых текстово-графических объектов. Они оформляются по приведенным ранее правилам. В качестве номера структурного элемента вместо номера главы используется «П» с номером главы. Текстово-графические объекты из приложений не учитываются в реферате.

ГЛАВА 3. НАЗВАНИЕ ТРЕТЬЕЙ ГЛАВЫ: РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ

Хорошим стилем является наличие введения к главе. Во введении может быть описана цель написания главы, а также приведена краткая структура главы.

3.1. Название параграфа

3.2. Название параграфа

3.3. Выводы

Текст выводов по главе 3.

ГЛАВА 4. НАЗВАНИЕ ЧЕТВЁРТОЙ ГЛАВЫ. АПРОБАЦИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ИССЛЕДОВАНИЯ, А ИМЕННО: МЕТОДА, АЛГОРИТМА, МОДЕЛИ ИССЛЕДОВАНИЯ

Хорошим стилем является наличие введения к главе. Во введении может быть описана цель написания главы, а также приведена краткая структура главы.

4.1. Название параграфа

4.2. Название параграфа

Пример ссылки на литературу [avtonomova:fy; Peskov2004-ru; Kotelnikov2004-ru; Kotelnikov2004].

4.3. Выводы

Текст выводов по главе 4.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Заключение (2 – 5 страниц) обязательно содержит выводы по теме работы, *конкретные предложения и рекомендации* по исследуемым вопросам. Количество общих выводов должно вытекать из количества задач, сформулированных во введении выпускной квалификационной работы.

Предложения и рекомендации должны быть органически увязаны с выводами и направлены на улучшение функционирования исследуемого объекта. При разработке предложений и рекомендаций обращается внимание на их обоснованность, реальность и практическую приемлемость.

Заключение не должно содержать новой информации, положений, выводов и т. д., которые до этого не рассматривались в выпускной квалификационной работе. Рекомендуются писать заключение в виде тезисов.

Последним абзацем в заключении можно выразить благодарность всем людям, которые помогали автору в написании ВКР.

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

DOI Digital Object Identifier.

WoS Web of Science.

ВКР Выпускная квалификационная работа.

ТГ-объект Текстово-графический объект.

СЛОВАРЬ ТЕРМИНОВ

TeX — язык вёрстки текста и издательская система, разработанные Дональдом Кнутом.

LaTeX — язык вёрстки текста и издательская система, разработанные Лэсли Лампортом как надстройка над TeX.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

Приложение 1

Краткие инструкции по настройке издательской системы L^AT_EX

В SPbPU-BCI-template автоматически выставляются необходимые настройки и в исходном тексте шаблона приведены примеры оформления текстово-графических объектов, поэтому авторам достаточно заполнить имеющийся шаблон текстом главы (статьи), не вдаваясь в детали оформления, описанные далее. Возможный «быстрый старт» оформления главы (статьи) под Windows следующий^{П1.1}:

- A. Установка полной версии MikTeX [latex-miktex]. В процессе установки лучше выставить параметр доустановки пакетов «на лету».
- B. Установка TexStudio [latex-texstudio].
- C. Запуск TexStudio и компиляция my_chapter.tex с помощью команды «Build&View» (например, с помощью двойной зелёной стрелки в верхней панели). Иногда, для достижения нужного результата необходимо несколько раз скомпилировать документ.
- D. В случае, если не отобразилась библиография, можно
 - воспользоваться командой Tools → Commands → Biber, затем запустив Build&View;
 - настроить автоматическое включение библиографии в настройках Options → Configure TexStudio → Build → Build&View (оставить по умолчанию, если сборка происходит слишком долго): txs:///pdflatex | txs:///biber | txs:///pdflatex | txs:///pdflatex | txs:///view-pdf.

В случае возникновения ошибок, попробуйте скомпилировать документ до последних действий или внимательно ознакомьтесь с описанием проблемы в log-файле. Бывает полезным переход (по подсказке TexStudio) в нужную строку в pdf-файле или запрос с текстом ошибки в поисковиках. Наиболее вероятной проблемой при первой компиляции может быть отсутствие какого-либо установленного пакета L^AT_EX.

В случае корректной работы настройки «установка на лету» все дополнительные пакеты будут скачиваться и устанавливаться в автоматическом режиме. Если доустановка пакетов осуществляется медленно (несколько пакетов за один запуск

^{П1.1} Вниманию! Пример оформления подстрочной ссылки (сноски).

компилятора), то можно попробовать установить их в ручном режиме следующим образом:

1. Запустите программу: меню → все программы → MikTeX → Maintenance (Admin) → MiKTeX Package Manager (Admin).
2. Пользуясь поиском, убедитесь, что нужный пакет присутствует, но не установлен (если пакет отсутствует воспользуйтесь сначала MiKTeX Update (Admin)).
3. Выделив строку с пакетом (возможно выбрать несколько или вообще все неустановленные пакеты), выполните установку Tools → Install или с помощью контекстного меню.
4. После завершения установки запустите программу MiKTeX Settings (Admin).
5. Обновите базу данных имен файлов Refresh FNDB.

Для проверки текста статьи на русском языке полезно также воспользоваться настройками Options → Configure TexStudio → Language Checking → Default Language. Если русский язык «ru_RU» не будет доступен в меню выбора, то необходимо вначале выполнить Import Dictionary, скачав из интернета любой русскоязычный словарь.

Далее приведены формулы (П1.2), (П1.1), рис.П1.2, рис.П1.1, табл.П1.2, табл.П1.1.

$$\pi \approx 3,141. \quad (\text{П1.1})$$



Рис.П1.1. Вид на гидробашню СПбПУ [spbpu-gallery]

Представление данных для сквозного примера по ВКР [Peskov2004]

G	m_1	m_2	m_3	m_4	K
g_1	0	1	1	0	1
g_2	1	2	0	1	1
g_3	0	1	0	1	1
g_4	1	2	1	0	2
g_5	1	1	0	1	2
g_6	1	1	1	2	2

П1.1. Параграф приложения

П1.1.1. Название подпараграфа

Название подпараграфа оформляется с помощью команды `\subsection{...}`.
Использование подподпараграфов в основной части крайне не рекомендуется.

П1.1.1.1. Название подподпараграфа

$$\pi \approx 3,141. \quad (\text{П1.2})$$



Рис.П1.2. Вид на гидробашню СПбПУ [spbpu-gallery]

Представление данных для сквозного примера по ВКР [Peskov2004]

G	m_1	m_2	m_3	m_4	K
g_1	0	1	1	0	1
g_2	1	2	0	1	1
g_3	0	1	0	1	1
g_4	1	2	1	0	2
g_5	1	1	0	1	2
g_6	1	1	1	2	2

Приложение 2

Некоторые дополнительные примеры

В приложении^{П2.1} приведены формулы (П2.2), (П2.1), рис.П2.2, рис.П2.1, табл.П2.2, табл.П2.1

$$\pi \approx 3,141.$$

(П2.1)



Рис.П2.1. Вид на гидробашню СПбПУ [spbpu-gallery]

Таблица П2.1

Представление данных для сквозного примера по ВКР [Peskov2004]

G	m_1	m_2	m_3	m_4	K
g_1	0	1	1	0	1
g_2	1	2	0	1	1
g_3	0	1	0	1	1
g_4	1	2	1	0	2
g_5	1	1	0	1	2
g_6	1	1	1	2	2

^{П2.1}Внимание! Пример оформления подстрочной ссылки (сноски).

П2.1. Подраздел приложения

$$\pi \approx 3,141.$$

(П2.2)



Рис.П2.2. Вид на гидробашню СПбПУ [spbpu-gallery]

Таблица П2.2

Представление данных для сквозного примера по ВКР [Peskov2004]

G	m_1	m_2	m_3	m_4	K
g_1	0	1	1	0	1
g_2	1	2	0	1	1
g_3	0	1	0	1	1
g_4	1	2	1	0	2
g_5	1	1	0	1	2
g_6	1	1	1	2	2