1. *Проблема конечного потребителя, которую решает продукт, который создается в результате выполнения НИОКР (функциональное назначение, основные потребительские качества)*

Использование спектрометров для качественного и количественного элементного анализа во всех индустриальных областях постоянно расширяется благодаря таким их неоспоримым достоинствам по сравнению с традиционными химическими методами как

* высокая скорость получения результатов
* одновременное определение концентраций нескольких элементов
* возможность анализировать вещества в любом агрегатном состоянии и широком диапазоне концентраций от 100 до 10-6 %
* исследуемый материал не разрушается
* технологичность (нет необходимости использования реактивов, химической посуды, дополнительного оборудования и т.д.)
* низкая удельная стоимость анализов
* химическая безопасность
* возможность встраивать спектрометры непосредственно в технологический процесс в качестве датчика
* невысокие требования к квалификации персонала, непосредственно проводящего анализ

Тем не менее, существует ряд проблем, связанных с использованием спектрометров. Одной из них является необходимость градуировки спектрометра.

Градуировка представляет собой программный объект, в котором содержатся:

* Значения настроек спектрометра, при которых должен быть отснят спектр (экспозиция в секундах, коэффициент усиления детектора и т.д.),
* Математическая модель - градуировочное уравнение, по которому определяются концентрации.

Градуировочное уравнение имеет, как правило, вид полиномиальной регрессии:

где I – сумма фотонов в линиях характеристического излучения, зафиксированных детектором, k – коэффициенты регрессии.

Для разработки градуировки требуется специалисты высокой квалификации. Для создания некоторых «сложных» градуировок могут требоваться недели работы дорогостоящих высококлассных специалистов. Кроме того, в реальных условиях очень часто требуется скорректировать имеющиеся градуировки, что тоже требует участия специалистов. Как правило, градуировку спектрометра производят специалисты непосредственно фирм-производителей спектрометра либо их авторизованные представители.

В процессе разработки градуировки специалист вручную выбирает в спектрах базовый пик, определяет наличие влияющих пиков, принимает решение о включении их в математическую модель градуировки, подбирает варианты нормировки спектров, конструирует искусственные независимые признаки.

Качество применяемой градуировки критически важно для обеспечения требуемой точности анализа.

В представленном мной проекте разработан и реализован метод создания градуировочной модели при помощи технологий машинного обучения, вообще не требующий участия квалифицированных специалистов.

Для создания градуировки предложенным методом требуется только загрузить в программное обеспечение файлы спектров материалов с известными химическими концентрациями. Далее, программное обеспечение само создает градуировку.

На тестовой версии разработанной программы были получены градуировочные модели различной сложности, включая градуировку, для создания которой «классическим» методом высококвалифицированный специалист работал несколько недель. Качество градуировочных моделей было выше, чем у моделей, созданных «классическим» методом. Время, за которое нейросеть создает модель составляет несколько минут, что является вполне приемлемым показателем.

1. *Способы защиты интеллектуальной собственности*

В настоящее время изучается возможность патентования как самого метода, так и отдельных методик определения химических концентраций, построенных на его основе.

Однако, основное ноу-хау метода заключается в методах обучения модели и способе создания архитектуры нейросети. Всё это может быть «спрятано» в коде программного обеспечения. Поэтому реверс-инжиниринговый анализ архитектуры ML-структур для раскрытия ноу-хау с целью повторения – малоэффективен.

1. *Объем и емкость рынка*
2. *Современное состояние и перспективы отрасли, к которой принадлежит представленный в ВКР продукт*
3. *Себестоимость продукта*
4. *Конкурентные преимущества создаваемого продукта*
5. *Сравнение технико-экономических характеристик продукта с отечественными и мировыми аналогами*
6. *Целевые сегменты потребителей создаваемого продукта*
7. *Бизнес-модель проекта*
8. *Производственный план*
9. *План продаж*