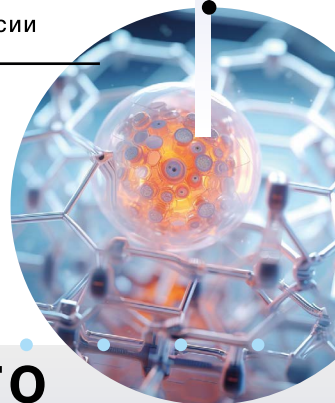




Аналитический доклад по итогам стратегической сессии

Цифровые роботизированные лаборатории экспериментального формата



● САНКТ-ПЕТЕРБУРГ

АВГУСТ

2023

Цифровые роботизированные лаборатории экспериментального формата

Аналитический доклад по итогам стратегической сессии

Над материалом работали: В. Н. Княгинин, М. С. Липецкая, Д. В. Санатов, С. В. Салкуцан, Е. М. Холоднова, М. С. Мулюкин, К. Т. Еременко, М. Г. Медведев, М. А. Харитонов

Доклад подготовлен Фондом «Центр стратегических разработок „Северо-Запад“» совместно с Фондом поддержки инноваций и молодежных инициатив Санкт-Петербурга на основе материалов стратегической сессии «Цифровые роботизированные лаборатории экспериментального формата». Мероприятие проходило на площадке Корпоративного университета Санкт-Петербурга при участии представителей институтов развития, органов власти и сотрудников отечественных вузов в июле 2023 года.

В докладе представлены основные идеи молодых ученых — участников стратегической сессии, которые закладывают концептуальную основу развития и поддержки цифровых роботизированных лабораторий в России. Дано понятие цифровых роботизированных лабораторий, особенностей и архитектуры их деятельности. Изложена глобальная повестка развития цифровых лабораторий как формата научной работы.

Один из основных тезисов доклада заключается в том, что в основе нового поколения лабораторий должны лежать отраслевые базисные модели, позволяющие трансформировать подходы к получению научных и практических результатов, развитие и расширение функционала которых становится основным процессом деятельности лаборатории.

Доклад может быть полезен руководителям научных коллективов и заведующим сектором научных исследований и разработок, стремящимся осуществлять качественные изменения организационных форм, методологии научной деятельности, для достижения нового уровня эффективности лабораторий.

Дизайн: М. И. Хейсина по заказу Фонда поддержки инноваций и молодежных инициатив Санкт-Петербурга

ISBN 978-5-6048892-5-1

Санкт-Петербург, 2023

Содержание

Цифровые роботизированные
лаборатории: в фокусе
внимания государства
и институтов развития

4

Рамочные процессы,
определяющие задачи
проектирования цифровых
лабораторий

6

Глобальные практики
организации цифровых
лабораторий на базу
искусственного интеллекта

9

Ключевые вопросы
проектирования цифровых
роботизированных
лабораторий

15

Апробация подхода
к проектированию
цифровых роботизированных
лабораторий

16

Дискуссионные вопросы
при обсуждении цифровых
роботизированных
лабораторий

18

Ключевые шаги по созданию
цифровых роботизированных
лабораторий: задачи
для дальнейшей работы
в рамках эксперимента

19

Приложение 1. Эксперимен-
тальные цифровые лабо-
ратории, рекомендованные
к финансированию,
и планы работы с ними

20

Цифровые роботизированные лаборатории: в фокусе внимания государства и институтов развития

Под цифровыми роботизированными лабораториями понимаются научно-исследовательские структуры, базирующиеся на применении робототехнических комплексов и технологий искусственного интеллекта. Ключевые процессы — деятельности цифровых роботизированных лабораторий — создание и развитие цифровых моделей (в т. ч. цифровых двойников) исследуемых объектов и явлений.

Подробно рассмотрен вопрос о том, как именно создание цифровых лабораторий влияет на ход научной деятельности. В цифровых лабораториях происходит изменение порядка организации исследований, появляются новые кадровые позиции, а центральным объектом и одновременно исходной точкой работы становится базисная модель. При этом стратегическая сессия¹ показала, что процесс внедрения цифровых лабораторий выходит из сферы теории в область конкретной практической работы вузов и научных организаций, например в формате self-driving labs.

Поддержка создания цифровых роботизированных лабораторий во фронтальных сферах науки и инженерии — часть комплексного проекта по развитию науки в новых форматах «Проект — лаборатория — институт». Первый этап — конкурс «Blue Sky Research — искусственный интеллект в науке» реализуется с 2022 года в виде экспериментального конкурса грантовой поддержки прорывных исследовательских проектов ученых, применяющих ИИ для решения перспективных научных задач и проведения поисковых исследований².

Второй этап стартовал в 2023 году и связан с организационным оформлением и выращиванием экспериментальных цифровых лабораторий. На этой стадии предполагается поддержать устойчивую проектно ориентированную деятельность коллективов на стыке предметных профессий и специалистов по работе с данными, оптимизировать оформление цифровых научных процессов, стимулировать цифровые эксперименты, предложить рынку востребованные услуги и сервисы на основе данных в предметных областях знаний. Лаборатории будут создаваться с учетом таких критериев, как новизна, оригинальность, междисциплинарность, применение искусственного интеллекта, направленность на общественно значимые проблемы, возможность вовлечения общества в исследования (открытость для «гражданской науки»).

Третий этап (с 2024) предполагает формирование серии институтов перспективных исследований, программа которых будет включать создание комплексных технологических платформ для новых отраслей и рынков.

1. Сессия «Цифровые роботизированные лаборатории экспериментального формата» была организована Фондом поддержки инноваций и молодежных инициатив Санкт-Петербурга, Фондом «ЦСР „Северо-Запад“» при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, Правительства Санкт-Петербурга и Корпоративного университета Санкт-Петербурга. В работе сессии участвовали сотрудники ИТМО, СПбПУ, Самарского университета, СФУ, ДГТУ.

2. Blue Sky Research — искусственный интеллект в науке / URL: blueskyresearch.ru.

Цифровые роботизированные лаборатории – это шаг в новую индустрию. В России утверждена Стратегия развития в области робототехники до 2030 года, и развитие таких форматов лабораторий в полной мере отвечает ее задачам.

Проект нестандартно подходит к созданию новых научных подразделений и к их выращиванию.



Андрей Владимирович Омельчук,
заместитель министра
науки и высшего
образования РФ

Сейчас наука опирается на сложившиеся структуры. Для новых направлений исследований понадобится материальная база, и строиться она должна на новых основаниях – в отличие от предыдущего цикла развития. Новые направления и форматы научных исследований следует совмещать с повесткой в регионально значимых отраслях. Современные формы организации научной деятельности нужно учесть в том числе и при реализации крупной федеральной программы строительства кампусов.

Новая наука сегодня – это вариант междисциплинарного использования технологий предметного знания и искусственного интеллекта. Размышляем, как сделать этот подход именно системным решением, чтобы это могло рождать новые направления, приносить результаты в виде появления новых научных групп, устойчивого роста лабораторий в дальнейшем.



Владимир Николаевич Княгинин,
вице-губернатор
Санкт-Петербурга



Сергей Владимирович Салкуцан,
генеральный директор
Фонда поддержки
инноваций и молодежных
инициатив

Организационный эксперимент, результаты которого будут востребованы, должен быть замечен на уровне страны. Он может стать предметом диалога с представителями политических кругов и организаций науки, руководителями вузов, регионами. Проект должен сформировать площадку для обсуждения развития науки в новых форматах.



Марина Сергеевна Липецкая,
директор Фонда
«ЦСР „Северо-Запад“»

Рамочные процессы, определяющие задачи проектирования цифровых лабораторий³

3.
На основе выступления
вице-губернатора Санкт-
Петербурга В. Н. Княгина

Интерес научного сообщества к новому формату лабораторий обусловлен текущим контекстом, в котором можно выделить четыре рамочных процесса.

1. Смена материальной базы и «перепроектирование» лабораторий под новые форматы деятельности



«Битва за таланты» идет по всему миру. Ключевым инструментом привлекательности становится слом традиционных парадигм, акцент на фронтальные исследования, новые организационные форматы деятельности. Для актуальных направлений исследований требуется материальная база, спроектированная на новых основаниях.

2. Тотальная цифровизация науки



Создание «обобществленных» стандартизированных баз данных и знаний, платформ разработки и хабов готовых моделей. Внутри лабораторий формируется новая цифровая среда, в которую погружены инструменты для экспериментальной работы исследователей, интегрированные и подключенные устройства, цифровые результаты деятельности. С развитием высокопроизводительных технологий НИОКР в лабораторных работах наблюдается сдвиг парадигмы — от небольших проектов с участием одного или нескольких исследователей к крупномасштабным, охватывающим ряд лабораторий, с сотнями и тысячами результатов научных экспериментов.

3. Роботизация всех технологических процессов



В лаборатории интегрируются промышленные роботы для выполнения технических операций. Цифровая среда и подключенное оборудование дают основание для строительства гибких экспериментальных или лабораторных систем. В современной индустриальной роботизированной среде граница между исследовательской лабораторией и производством стирается. Скорость получения результата, точность и достоверность данных во многом будут зависеть от того, сможет ли лаборатория развернуть гибкие роботизированные лабораторные системы.

4. Смена поколений исследователей



Все острее встает вопрос о том, кто и как будет работать в лаборатории, каким способом, на основании каких предложений научный сектор станет удерживать и выращивать молодое поколение ученых. Передовая научная среда должна быть динамичной, развиваться опережая рынок, чтобы молодые специалисты не уходили в другие сферы ради быстрого карьерного роста и более высоких зарплат.

Кроме того, выделяются такие важные факторы, как междисциплинарность, в т.ч. применение искусственного интеллекта в различных научных областях, и возможность совместной работы территориально разобщенных коллективов, что позволяет по-новому взглянуть на характер организации научной деятельности именно благодаря внедрению новых форматов — цифровых лабораторий.

Указанные факторы и рамочные процессы актуальны для науки уже больше десятилетия. Рынок информационных систем для лабораторных исследований и разработок вполне зрелый, его объём превышает 3,5 млрд долларов США в 2023 году, а к 2028-му может перевалить за 5 млрд⁴. Ключевым продуктом на рынке являются системы управления лабораторной информацией. В конце 2010-х годов здесь произошла ИИ-революция, которая позволила реорганизовать исследуемый объект и предмет науки.

4. По данным Grandview Research / URL: grandviewresearch.com/industry-analysis/laboratory-informatics-market.

Однако в России уровень проникновения информационных систем для исследований и разработок остается низким. Так, специализированными системами управления лабораториями в 2018 году пользовался примерно 1% ученых, а низкая инфраструктурная обеспеченность была второй по важности причиной ухода специалистов из сферы науки (рис. 1).

Используете ли вы цифровые решения в исследовательской деятельности? Если да, то какие?

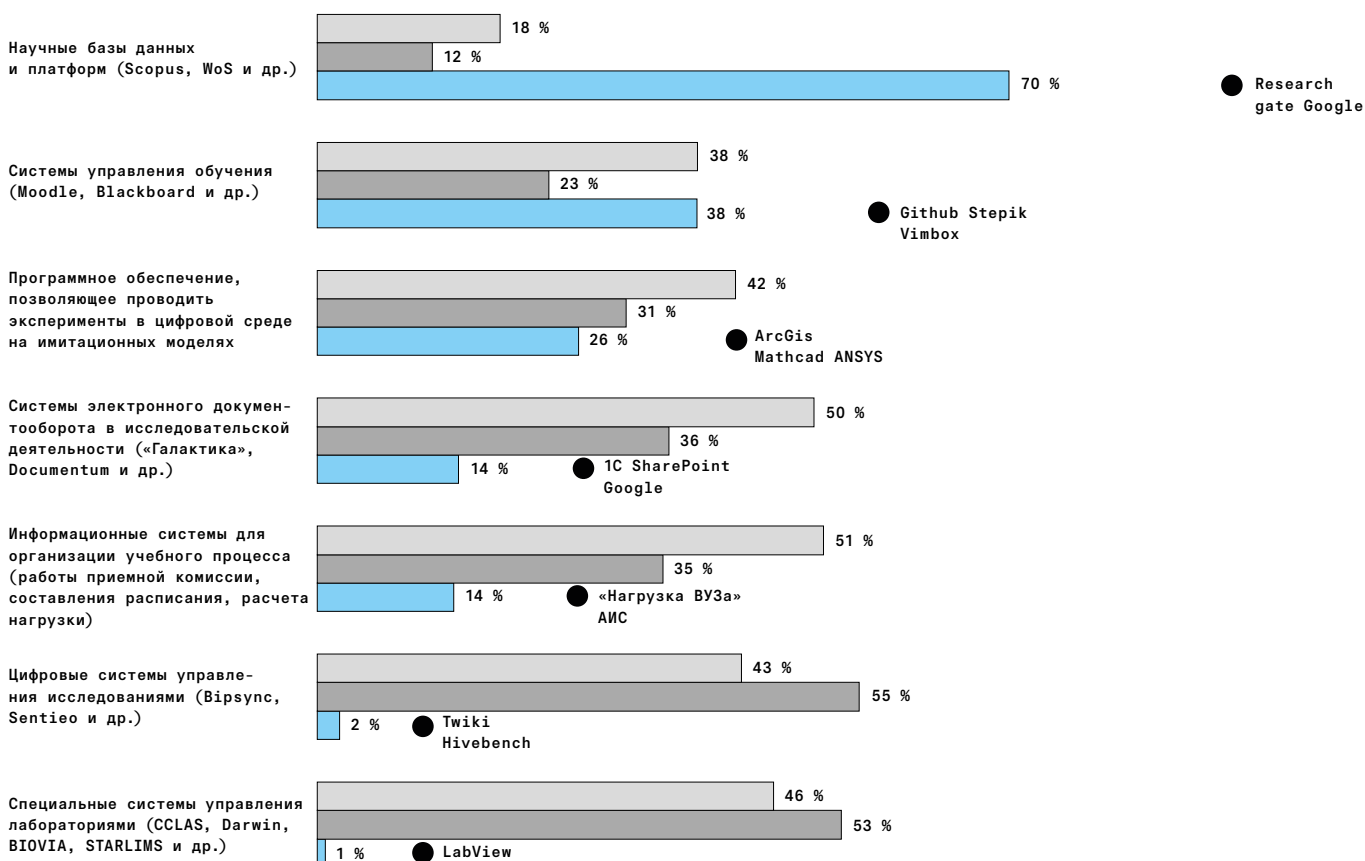
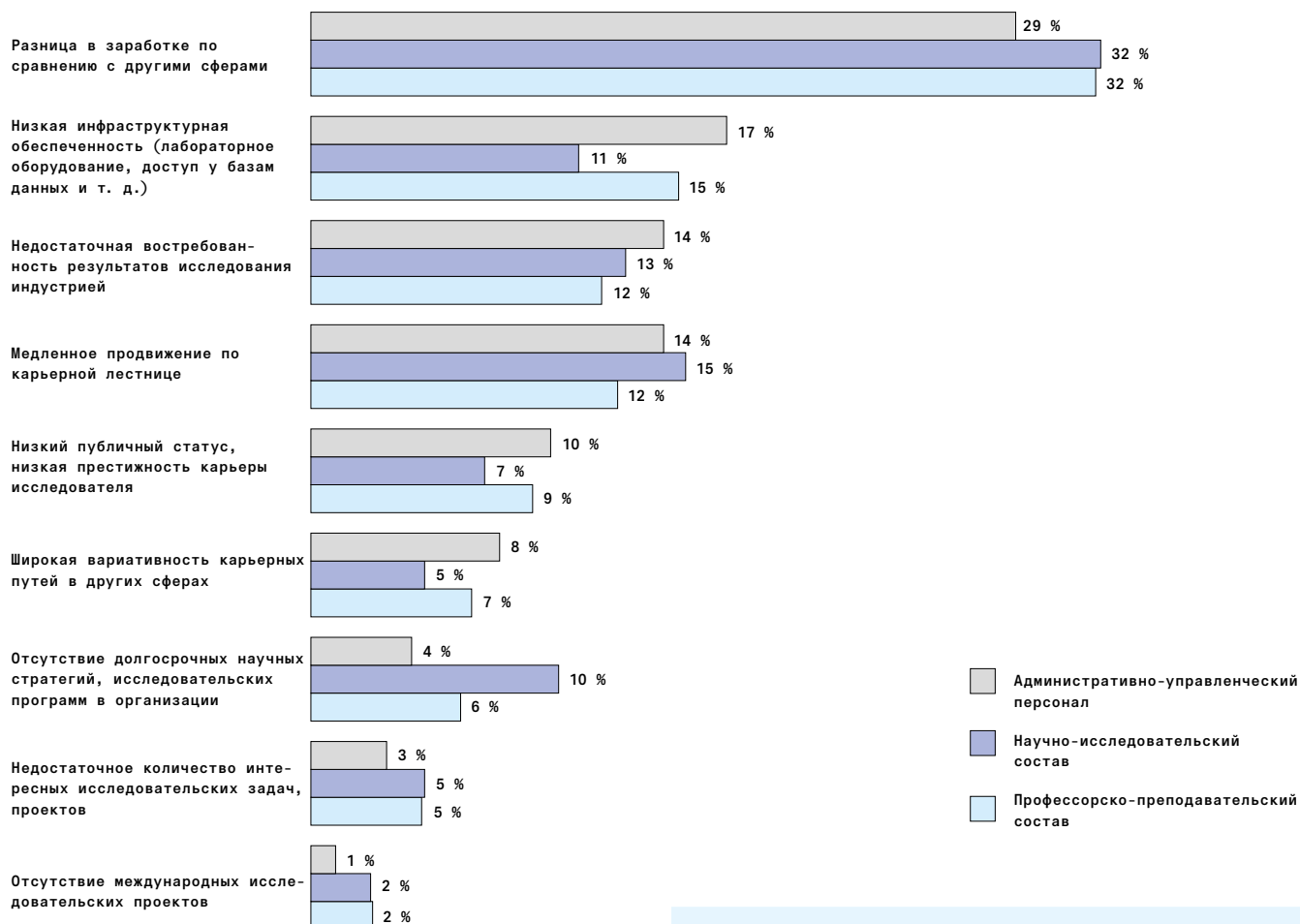


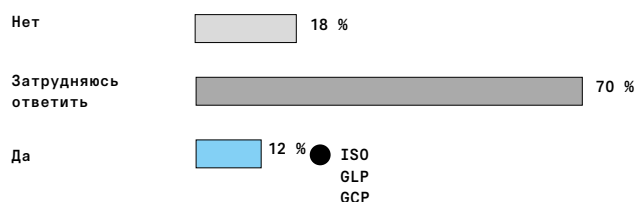
Рис. 1. Результаты опроса российских исследователей об использовании цифровых решений в исследовательской деятельности, соответствии международным стандартам и о причинах ухода из сферы науки
Источник: ЦСР «Северо-Запад», опрос 2018, N=413

Нет, не использую, т.к. нет необходимости
 Нет, не использую, т.к. не сталкивался в своей практике
 Да

Как вы считаете, по каким причинам исследователи уходят из сферы науки?



Руководствуетесь ли вы международными стандартами ведения исследовательской деятельности?



Метаболизм всех технологических процессов будет расти. Начнется соревнование по производительности лабораторных комплексов. Конечно, останутся гении, интуиция, эвристика. Однако поломать огромные инертные производственные машины гениям не под силу. И в этом отношении мы получим конкуренцию другого типа в научной сфере.

Мы находимся в конце истории «чистой» науки эйнштейновского типа. Наука уже не открывает законы, по которым устроен мир. Она производит работоспособные модели для решения конкретных задач. Причем вопрос об истинности этих моделей часто даже не стоит. Модель сменяется не следующей «истинной», а следующей «более работоспособной» моделью.

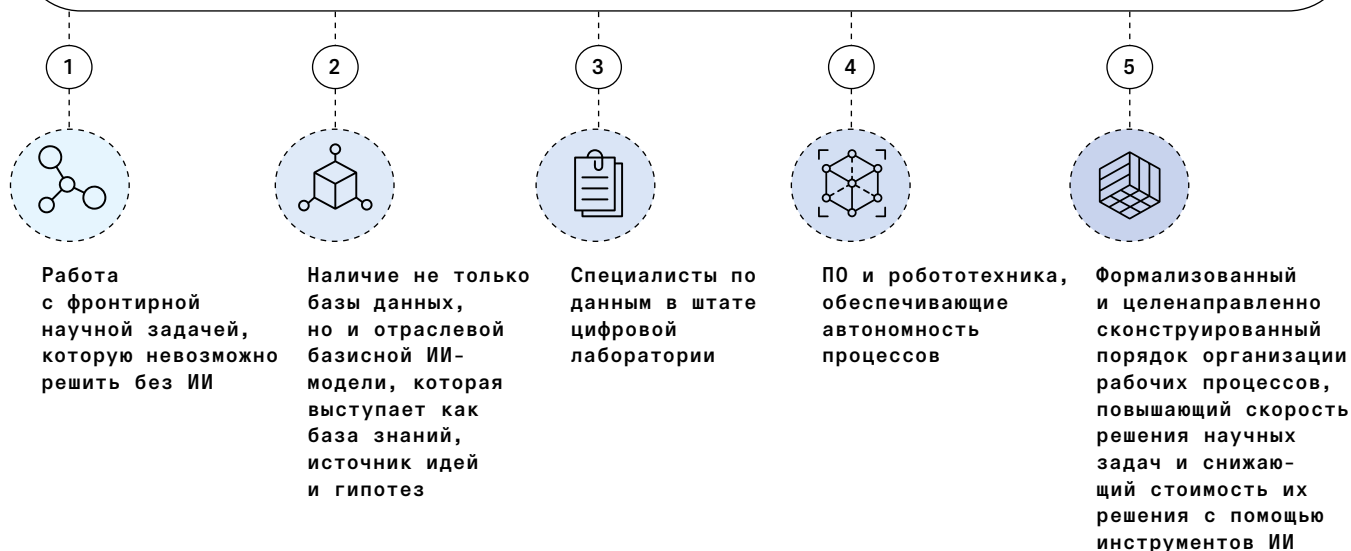


Владимир Николаевич Княгинин,
вице-губернатор
Санкт-Петербурга

Глобальные практики организации цифровых лабораторий на базе искусственного интеллекта⁵

5. На основе доклада «Зачем создают лаборатории на основе ИИ и как они устроены?», представленного во вводной части сессии Д. С. Санатовым, руководителем головного офиса, партнером Фонда «ЦСР „Северо-Запад“».

На основе обобщения мирового опыта можно сформулировать 5 ключевых характеристик цифровой лаборатории



Цифровые лаборатории, обеспечившие минимальный набор требований к организации исследований на основе ИИ, как правило, выходят на построение партнерских экосистем, вовлекая в свои задачи всё больше ученых, поставщиков данных и разработчиков программного обеспечения. С этой точки зрения цифровые лаборатории начинают использовать методы организации исследования, близкие по характеру к «гражданской науке», которая строится на широком участии профессиональных сообществ, активно обменивающихся данными и результатами экспериментов в рамках выбранной предметной области.

Появляется подкласс цифровых лабораторий, работающих над созданием специализированных цифровых платформ, «внутри» которых научные коллективы могут проводить свои исследования и разработки.

Изменение общего порядка организации рабочих процессов научных исследований

Цифровая лаборатория предполагает серьезное изменение исследовательского цикла в сравнении с традиционной лабораторией, которая использует научный метод (рис. 2).

Деятельность цифровой лаборатории основывается на создании отраслевых базисных моделей в предметных научных областях. Отраслевые базисные модели строятся на колоссальных объемах неразмеченных данных, по примеру GPT-моделей. Это позволяет создать «суперхимика» или «супердвигателестроителя». Эмерджентные свойства больших базисных моделей также приведут к возникновению новых научных гипотез и закономерностей, которые не были открыты учеными ранее.

Не все отраслевые модели являются базисными. К отраслевым моделям могут также относиться имитационные и суррогатные модели конкретных изделий или классов изделий, например газотурбинных двигателей или их отдельных узлов, а также прогнозные и аналитические модели, направленные на решение конкретных отраслевых задач.

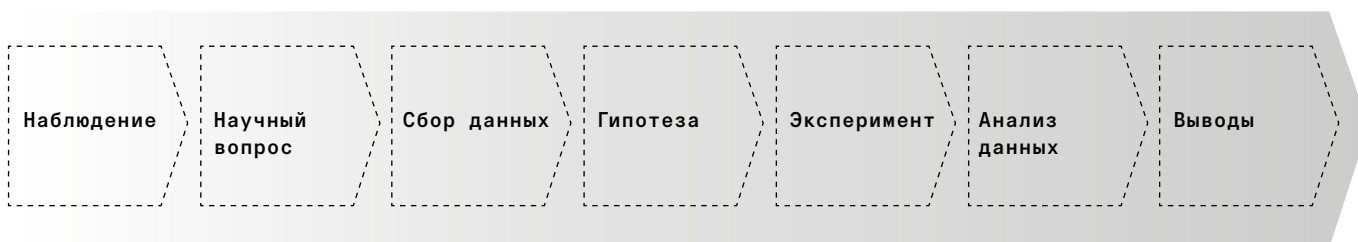
Так, в Аргоннской национальной лаборатории создан Институт виртуального исследования двигателей и топлива, в основе деятельности которого лежит первая в мире сквозная имитационная модель двигателя внутреннего сгорания, включающая визуализацию и симуляцию всего силового агрегата, физическую и кинетическую модель поведения топлива в камере сгорания. Модель используется для создания таких научных продуктов, как инструменты сооптимизации эффективности топлив (включая топливо с пониженным углеродным следом) и двигателей, а также концептуальных решений в области низкотемпературного сгорания для двигателей нового поколения. Институт работает с оригинальными производителями оборудования, помогая добиваться существенной экономии при разработке новых двигателей⁶.

6. Virtual Engine Research Institute and Fuels Initiative, Argonne National Laboratory.

Именно такие модели позволяют осуществлять автоматизированную подготовку гипотезы, проводить виртуальные и роботизированные эксперименты, автономный анализ данных и формулировать выводы.



Цепочка исследования в традиционной лаборатории



Цепочка исследования в цифровой лаборатории



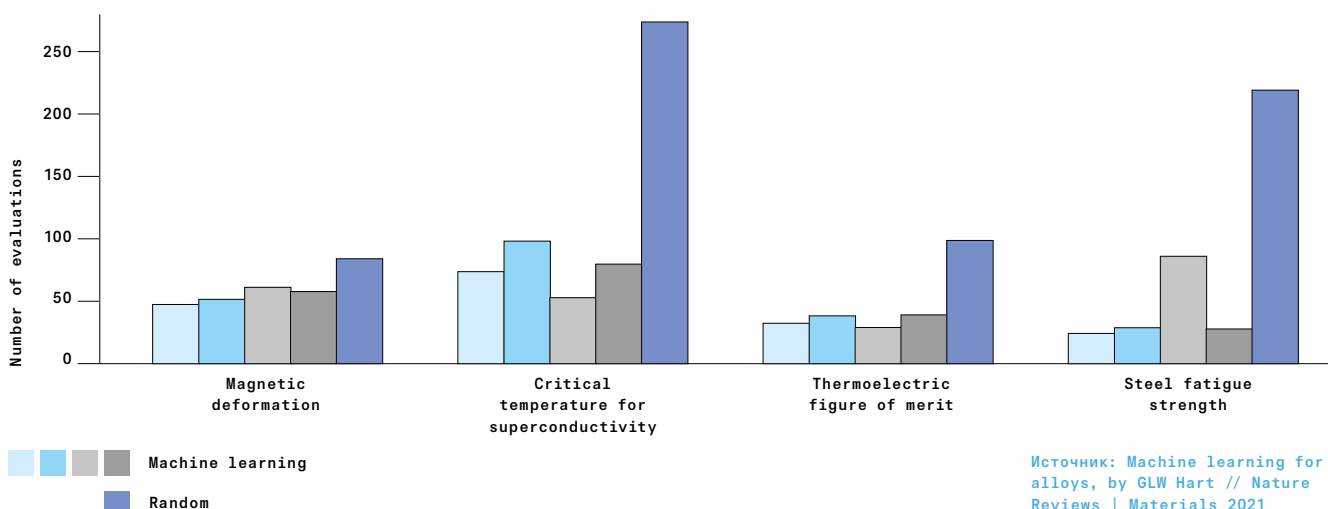
Рис. 2. Порядок организации труда в традиционной и цифровой лабораториях
Источник: ЦСР «Северо-Запад»

Изменение процессов в ходе научного эксперимента

Цифровые лаборатории также трансформируют подход к проведению экспериментов. Во-первых, появляется возможность проведения полностью виртуальных экспериментов с использованием базисных и имитационных отраслевых моделей. Во-вторых, могут осуществляться киберфизические эксперименты, которые заключаются в комбинировании виртуальных и реальных исследований и испытаний. В-третьих, возникает перспектива создания автономной лаборатории, которая позволяет за счет автоматизации и роботизации проводить множество циклов экспериментов без участия человека.

Ключевая область, где сейчас развиваются цифровые роботизированные лаборатории, и, в частности, лаборатории искусственного интеллекта, — это материаловедение. Таким лабораториям удается добиться существенных показателей скорости достижения результата и точности соответствия получаемых материалов целевым. При этом значительно сокращается количество циклов экспериментов до получения результата (рис. 3).

Количество испытаний, необходимых для подбора материалов с конкретными целевыми свойствами, с использованием четырех методов, основанных на машинном обучении, по сравнению со случайным угадыванием



Сравнение рабочих процессов синтеза материалов, ускоренных с помощью бейсовской оптимизации (IBO accelerated), и процессов без этого ускорения

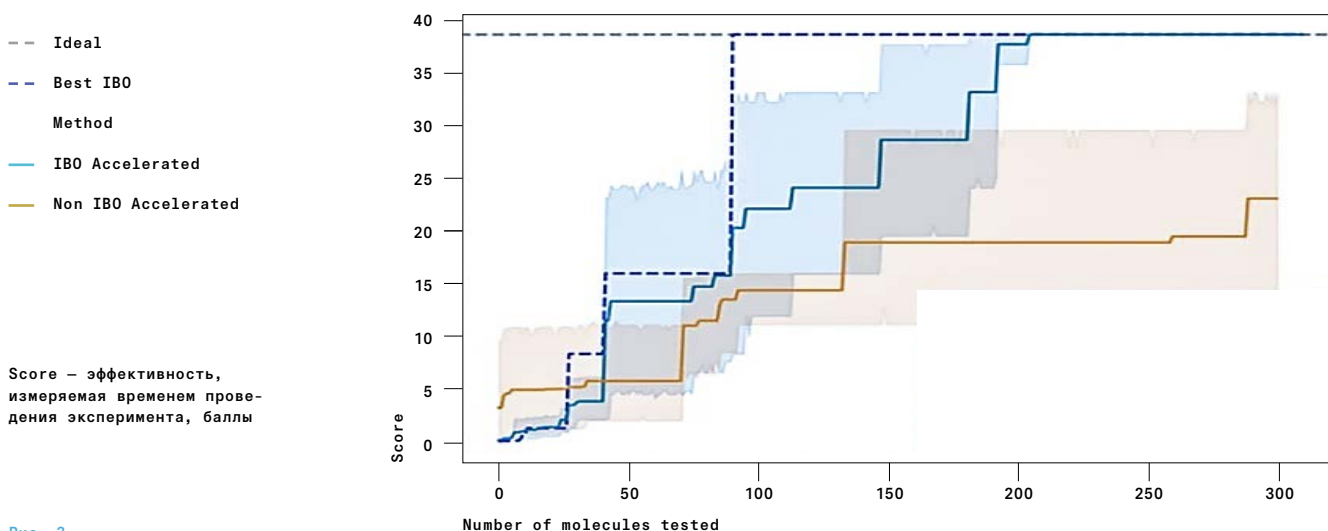


Рис. 3. Влияние искусственного интеллекта на скорость и точность получения результатов в задачах по разработке новых материалов

Изменение ключевых кадровых ролей в лаборатории

Несмотря на возможность исключения человека из экспериментальной цепочки, его роль в лаборатории становится всё более значимой. В обычной лаборатории важнейшими фигурами были исследователь, который непосредственно осуществлял научный процесс, и руководитель научной группы, который определял программу исследований, отвечал за трансфер технологий и коммуникацию с внешними контрагентами. Другие позиции для традиционной лаборатории были опциональными. В цифровой лаборатории возникает третья ключевая позиция, без которой цифровая лаборатория не может существовать, — это специалист по данным (рис. 4).

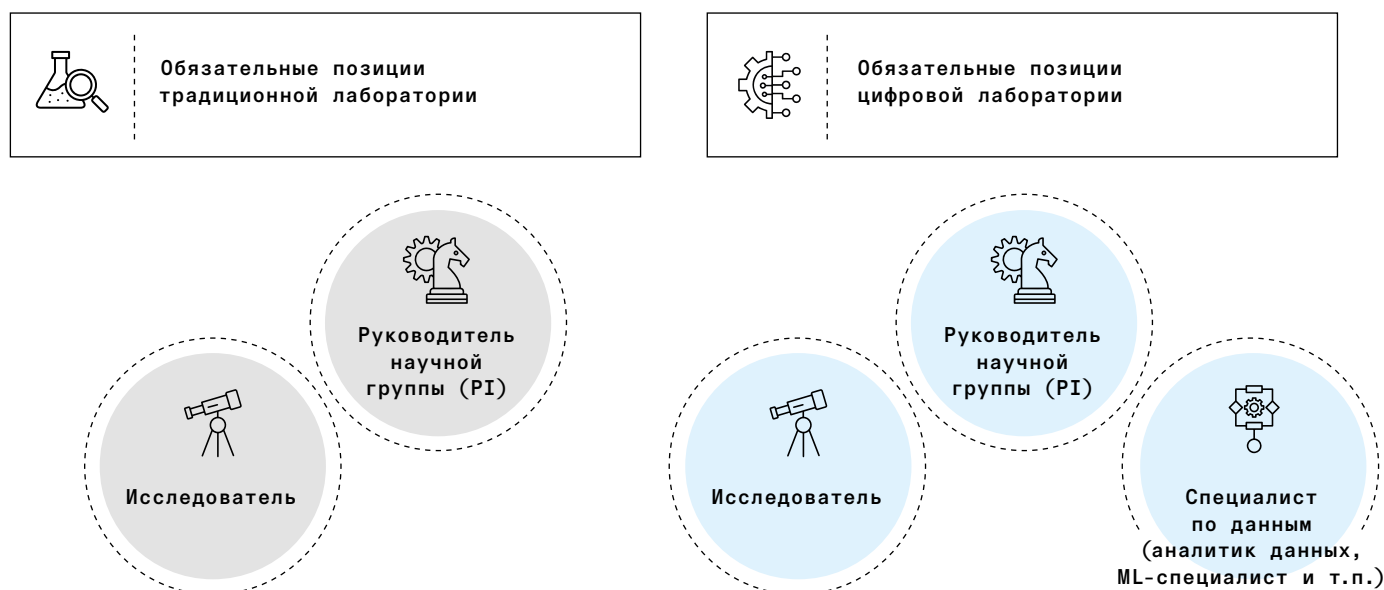


Рис. 4.
Обязательные позиции в традиционной и цифровой лабораториях
Источник: ЦСР «Северо-Запад»

Крупные исследовательские структуры, например Oak Ridge National Laboratory, могут позволить себе создавать целые сквозные подразделения, состоящие из специалистов по данным, которые обслуживают отраслевые научные коллективы. В перечень задач такого сотрудника входит сбор научных данных, преобразование данных, конструирование признаков, крупномасштабное моделирование моделей обработки естественного языка и т. д. Такие эксперты не должны обладать компетенциями в конкретных областях науки, кроме непосредственно машинного обучения, но при этом от них требуется выстраивать совместную работу с исследователями предметных областей для создания сервисов в области данных и процессов машинного обучения для решения конкретных научных задач⁷.

7. На основе кейса Oak Ridge National Laboratory.

Еще один пример — TU Delft с инициативой AI Lab, предполагающей открытие множества междисциплинарных лабораторий с сильной ИИ-составляющей в различных отраслях специализации университета. В TU Delft уже работают 24 лаборатории, четыре из них были открыты в 2023 году. Тематики включают биомедицину, химическую инженерию, IT и социальные науки. Совместно с инициативой AI Lab была запущена масштабная программа развития ИИ-тантов, предполагающая создание около 150 специализированных рабочих мест для отраслевых исследователей с навыками в области ИИ⁸.

8. TU Delft AI Labs & Talent Programme / URL: tudelft.nl/en/ai/tu-delft-ai-labs.

ИИ-трансформация науки формирует новые требования к инфраструктуре данных и вычислений. Можно выделить главные вызовы в этой области, которые будут наиболее актуальны в ближайшие годы⁹.

9. [Advanced research directions on AI for science, energy, and security, DOE, 2023.](#)



1

Увеличение размерности моделей сделает применение суперкомпьютеров обязательным требованием для создания конкурентоспособных моделей.



2

Увеличение требований к размерам баз данных и подготовке мультимодальных данных в потоковом режиме потребует выстроенных систем и регламентов управления данными.



3

Переход соотношения данных и моделей от 1:1 к 1:N, когда одна база данных может быть основой сразу нескольких моделей для разных задач, увеличит требования к качеству баз данных.



4

Масштабирование искусственного интеллекта потребует увеличения доверия к решениям, принимаемым ИИ. Для этого понадобится в каждом случае создавать объяснительные модели и применять этические регламенты и кодексы, системы контроля рисков.



5

Консолидация научного сообщества вокруг общеотраслевых базисных моделей даст возможность владельцам таких моделей занимать позицию отраслевого научно-технологического центра, а тем, у кого такой модели нет, придется вступать с ними в альянсы.

Изменение способов верификации результатов исследований и расширение требований к ИИ-инструментарю

В традиционной лаборатории верификация происходила путем публикации научных статей, участия в конференциях. Для такой лаборатории статья — крайне важное доказательство эффективности работы. А для цифровой лаборатории важность обретают инструменты анализа качества и точности ИИ-моделей — объяснительные методы ИИ, которые позволяют понять, почему модель приходит к тем или иным результатам, не содержится ли в ней ошибок, насколько она этична — а в конечном счете, работоспособна и применима.

В этом контексте на первый план выходит инструментарий и инфраструктура машинного обучения. Большое внимание уделяется инструментам автоматического машинного обучения, унифицированным платформам, созданным на их основе. Это понижает порог вхождения для осуществления исследований в области ИИ, а также создает устойчивую базу для их верификации и масштабирования за счет использования общих подходов, регламентов и стандартов.

Частный пример создания цифровых лабораторий – Self-Driving Labs

Один из наиболее заметных частных примеров создания цифровых лабораторий — Self-Driving Lab (автономная лаборатория). Основная особенность таких лабораторий — замкнутость экспериментального цикла и возможность его многократного повторения без участия человека. Таким образом, растет роль единичного исследователя, который может добиться существенно большего объема проводимых исследований за счет автоматизации и виртуализации. Первой организацией, запустившей подобный формат, стала Аргоннская национальная лаборатория США, но сейчас автономные лаборатории существуют во многих странах мира, включая Россию. Яркий пример автономной лаборатории в нашей стране — Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов в Ростове-на-Дону¹⁰.

10. [Self-Driving Laboratories for Development of New Functional Materials and Optimizing Known Reactions / Soldatov M.A. et al. / URL: pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/33801472.](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/33801472)

В одной лаборатории невозможно собрать все доступные варианты данных и моделей. То, над чем работают ведущие лаборатории за рубежом, представляет собой экосистему обмена данными, которая позволит обучать модели быстрее, шире и точнее. Это также откроет возможности для входа в науку большому числу ученых.



Дмитрий Васильевич Санатов,
руководитель головного офиса, партнер Фонда «ЦСР „Северо-Запад“»

Ключевые вопросы проектирования цифровых роботизированных лабораторий

1

Как меняется методология исследования? (Процессы планирования экспериментальной работы, выдвижения базовых гипотез, способы их проверки, цифровые стенды и полигоны, через которые прогоняются модели, сочетания экспериментальных данных, полученных из реальных натуральных экспериментов с эмулируемыми или симулируемыми данными.)

2

Какие новые кадровые роли должны появиться в лаборатории? Как изменяется система разделения труда, в каких областях требуется специализация и какая модель компетенций должна быть у специалистов такой лаборатории на каждой из позиций?

3

Каков продукт деятельности лаборатории? Если продукт – это модель, то кому она доступна, каков порядок доступа, и для каких целей она может использоваться?

4

Какова позиция и деятельность лаборатории на рынке в условиях стирания границ между исследовательской деятельностью и проектированием работоспособных моделей в интересах промышленности?

Ключевым элементом, который лежит в основе цифровой лаборатории нового формата, является цифровая модель исследуемого объекта или научной области

Именно такая модель определяет порядок организации рабочих процессов в цифровой лаборатории и ее кадрово-ресурсное обеспечение.

Появление первой работоспособной версии такой модели можно назвать точкой возникновения цифровой лаборатории (рис. 5).

Дальнейшее развитие цифровой лаборатории предполагает эволюцию модели: увеличение объемов обрабатываемых данных, насыщение новыми данными, переобучение модели, извлечение из нее полезных знаний, решений научных проблем, оказание научных услуг на основе моделей.

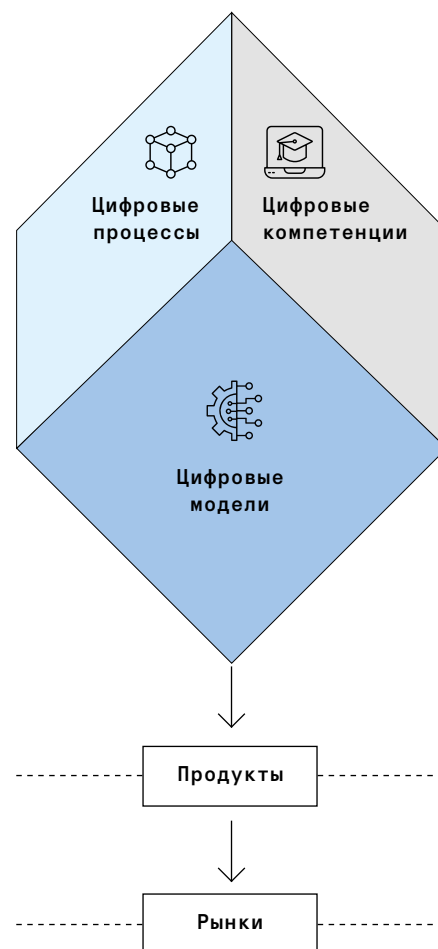


Рис. 5. Базовая модель-схема цифровой лаборатории
Источник: ЦСР «Северо-Запад»

Апробация подхода к проектированию цифровых роботизированных лабораторий¹¹

11.
По материалам групповой работы и презентаций участников стратегической сессии.

В рамках стратегической сессии участники предложили подходы к определению цифровой лаборатории в своей научной сфере. На рисунке 6 показаны обобщенные предложения по отличиям традиционной лаборатории от цифровой.

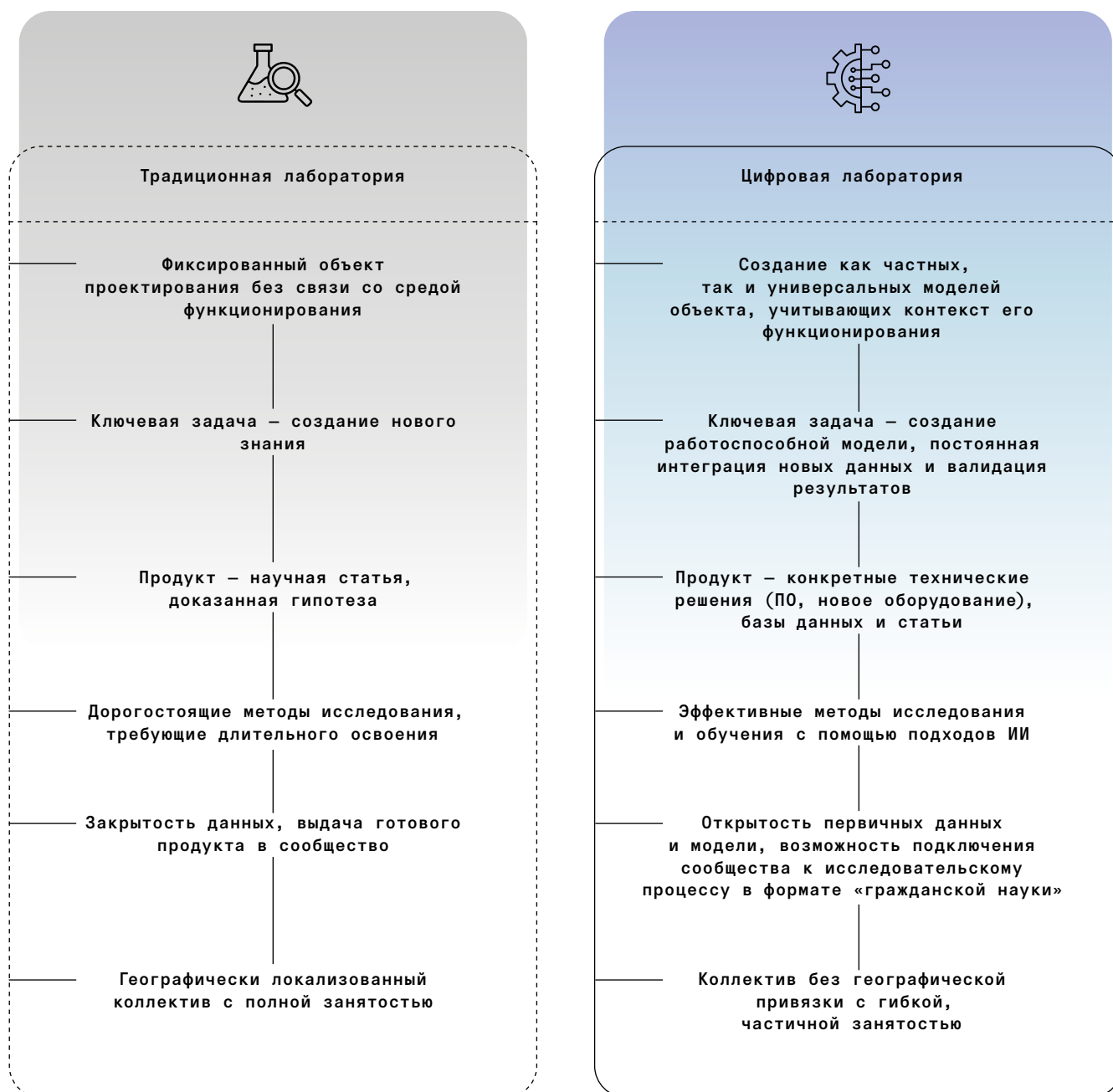


Рис. 6.
Основные отличия традиционных и цифровых лабораторий, по мнению участников стратегической сессии
ЦСР «Северо-Запад»

Участники также спроектировали подходы к проведению исследования в цифровой роботизированной научной лаборатории, типы возможных научных проектов и их ключевые показатели. Главная особенность предложенных подходов заключалась в применении методов искусственного интеллекта для обработки, анализа и интерпретации данных об исследуемых объектах и процессах.

Одной из наиболее важных практических задач научной команды при создании цифровой лаборатории было названо создание баз данных и библиотек данных. Именно качество и полнота данных должны обеспечивать эффективность создаваемых моделей.

В ходе второго такта обсуждения были предложены версии объектов, предметов и методов деятельности лабораторий. По мнению участников, цифровая модель — ключевой объект исследования цифровой лаборатории. В качестве предмета выступают свойства этой модели, различающиеся в зависимости от отраслевой направленности, в т. ч. выражающиеся в виде частных, практически ориентированных моделей. Методы исследования во многом связаны с расширением применения технологий искусственного интеллекта, роботизации и цифровых технологий. Обобщенные результаты работы участников представлены на рисунке 7.

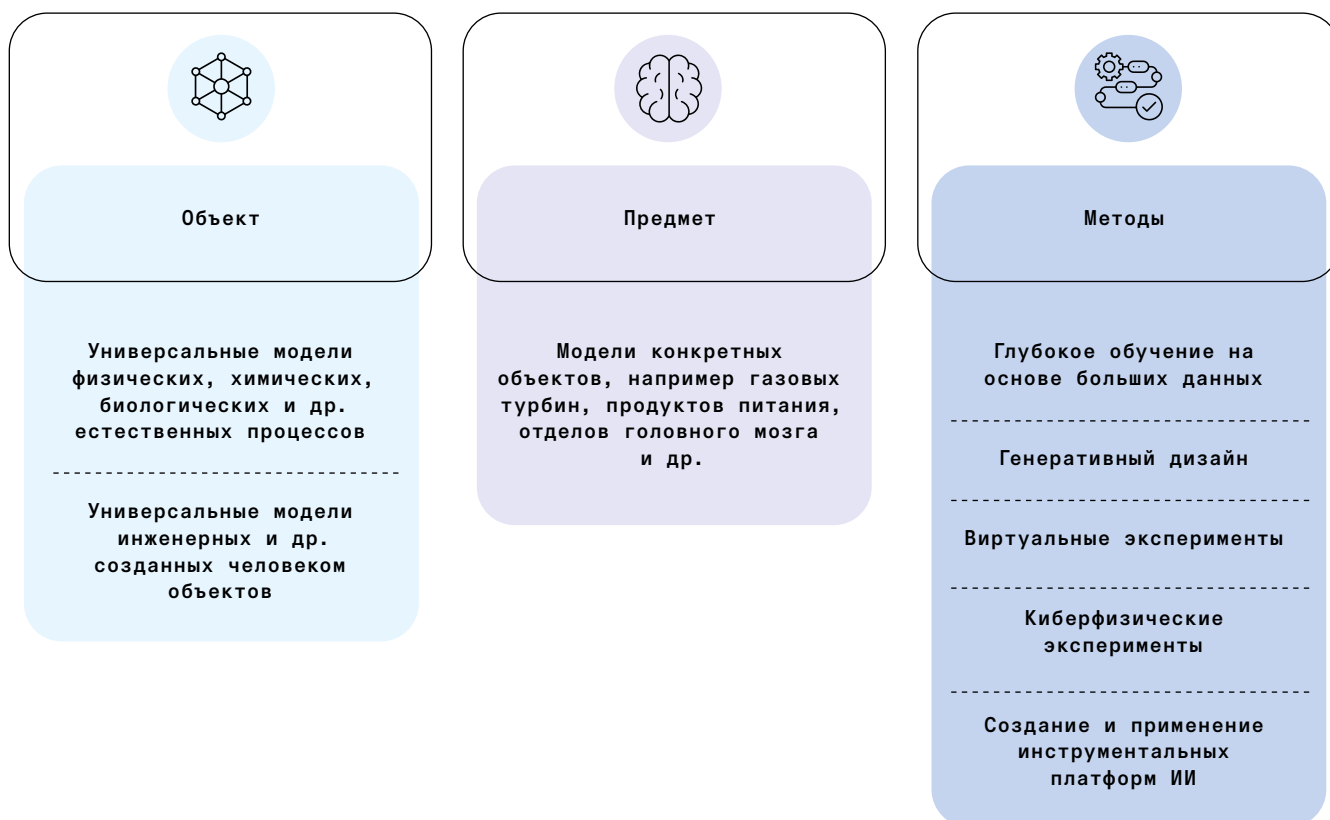


Рис. 7. Объект, предмет и методы деятельности цифровой лаборатории, по мнению участников стратегической сессии ЦСР «Северо-Запад»

Дискуссионные вопросы при обсуждении цифровых роботизированных лабораторий

В ходе обсуждения был поднят ряд дискуссионных вопросов, связанных с концептуальными аспектами создания цифровых роботизированных лабораторий, среди которых могут быть выделены следующие.

- 1 Подходы к определению базисной отраслевой модели, лежащей в основе цифровой роботизированной лаборатории, и ее архитектуре. Ключевой вопрос — является ли такая модель единым продуктом или представляет собой набор отдельных модулей, предполагается ли в ней обязательное наличие элементов искусственного интеллекта, таких как алгоритмы машинного обучения, и какова их роль.
- 2 Фокусировка лаборатории на типах деятельности, среди которых можно выделить непосредственно исследовательский процесс, образование, а также решение конкретных бизнес-задач в интересах индустриальных заказчиков. В настоящее время последняя группа задач наиболее актуальна. По остальным направлениям также должны быть определены существенные результаты, которых позволит добиться применение отраслевых базисных моделей.
- 3 Определение ключевых отличительных особенностей нового, экспериментального типа лаборатории от традиционной с точки зрения изменения порядка организации труда, решаемых задач и достигаемых результатов. Необходимость появления принципиально новых качественных данных и увеличения их объемов для перехода к цифровой лаборатории.
- 4 Порядок доступа третьих сторон к модели — возможность для бизнеса и общества вовлекаться в процессы цифровой лаборатории, получать доступ к модели, данным и результатам исследований.
- 5 Бизнес-модель цифровой лаборатории как крупного исследовательского подразделения, способного осуществлять эффективную деятельность в условиях рынка, достигая окупаемости.

Указанные вопросы остаются открытыми. Поиск вариантов ответа на них во многом определяет задачи, которые стоят перед научными коллективами, стремящимися создать новые экспериментальные цифровые лаборатории.

Ключевые шаги по созданию цифровых роботизированных лабораторий: задачи для дальнейшей работы в рамках эксперимента

Тематика цифровых роботизированных лабораторий распространяется в научном сообществе довольно быстро. Чтобы цифровые лаборатории обеспечили импульс роста научным коллективам и университетам, первые результаты создания таких лабораторий должны быть получены в течение следующего года (к августу 2024). Для этого участникам эксперимента потребуется выполнить определенные действия.



Приложение 1.

Экспериментальные цифровые лаборатории, рекомендованные к финансированию, и планы работы с ними

<p>1 Лаборатория «Генеративный дизайн ферментов и аптамеров»</p>	<p>2</p>	<p>3</p>	<p>4</p>
<p> Университет ИТМО / Химико-биологический кластер (ХБК)</p>	<p> Руководитель лаборатории:</p> <p> Никита Сергеевич Серов, младший научный сотрудник ХБК Университета ИТМО</p>		
<p>Научные отрасли:</p> <ul style="list-style-type: none">• химия• молекулярная биология• data science• искусственный интеллект	<p>Направление НИОКР:</p> <ul style="list-style-type: none">• разработка новых ферментов, диагностических ДНК-машин, альтернативных пестицидов и молекулярных лекарственных средств	<p>Структура лаборатории:</p> <ul style="list-style-type: none">• Группа «Разработка передовых алгоритмов»• Группа «Разработка глобальных цифровых решений»	

1

2

Лаборатория «Вычислительная нейробиология»

3

4



СПбПУ / Институт
биомедицинских систем
и биотехнологий



Руководитель лаборатории:

Екатерина Игоревна Пчицкая,
доцент Высшей школы биомедицинских
систем и технологий СПбПУ, научный
сотрудник Научно-исследовательского
комплекса «Цифровые технологии в медико-
биологических системах» СПбПУ, научный
сотрудник Лаборатории молекулярной
нейродегенерации (ЛМН) СПбПУ

Научный руководитель лаборатории
(консультант):

Илья Борисович Безпрозванный,
заведующий лабораторией молекулярной
нейродегенерации (ЛМН) СПбПУ, д.б.н.

Научные отрасли:



- вычислительная биология
- нейробиология

Направления НИОКР:

- нейробиология
- вычислительная нейробиология
- вычислительная биология
- анализ биологических данных и изображений
- разработка научного программного обеспечения
- нейронные сети
- прикладная математика
- искусственный интеллект

Структура лаборатории:

- Группа анализа нейронных сетей
- Группа анализа морфологии нейронов и синапсов
- Группа обработки микроскопических биологических изображений

1	2	<p>3 Лаборатория «Теоретическая химия» (филиал Группы теоретической химии в ИОХ РАН)</p>	4
<p>Университет ИТМО / НОЦ Инфохимии</p>		<p>Руководители лаборатории (предполагаемые):</p> <div data-bbox="603 293 874 562">  </div> <p>Михаил Геннадьевич Медведев, руководитель Группы теоретической химии, с.н.с. Института органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, доцент базовой кафедры органической химии Института органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН в НИУ ВШЭ, н.с. НИУ ИТМО, преподаватель МГУ</p> <hr/> <div data-bbox="603 651 874 920">  </div> <p>Иван Владимирович Москаленко, н.с. Лаборатории интеллектуальных технологий Университета ИТМО, н.с. НОЦ Инфохимии Университета ИТМО</p>	
<p>Научные отрасли:</p> <ul style="list-style-type: none"> • молекулярное моделирование • теоретическая и вычислительная химия 	<p>Направления НИОКР:</p> <ul style="list-style-type: none"> • моделирование химических процессов • тестирование и программная реализация новых алгоритмов • машинное обучение, в т. ч. нейроморфные алгоритмы • анализ новых областей науки, в т. ч. с помощью AI-инструментов 	<p>Структура лаборатории:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Центр моделирования химических процессов • Центр разработки алгоритмов теоретической химии • Центр решения комплексных задач и трансфера технологий 	

1

2

3

4

Лаборатория «Прикладная оптика и приборостроение»



СПбПУ



Руководители лаборатории
(предполагаемые):

Александр Вячеславович Семенча,
доцент кафедры прикладной химии
СПбПУ, доцент Высшей школы физики
и технологий материалов СПбПУ



Виктор Артёмович Клинок,
старший преподаватель Высшей школы
физики и технологий материалов СПбПУ,
заведующий учебной лабораторией
прикладной химии СПбПУ

Научные отрасли:

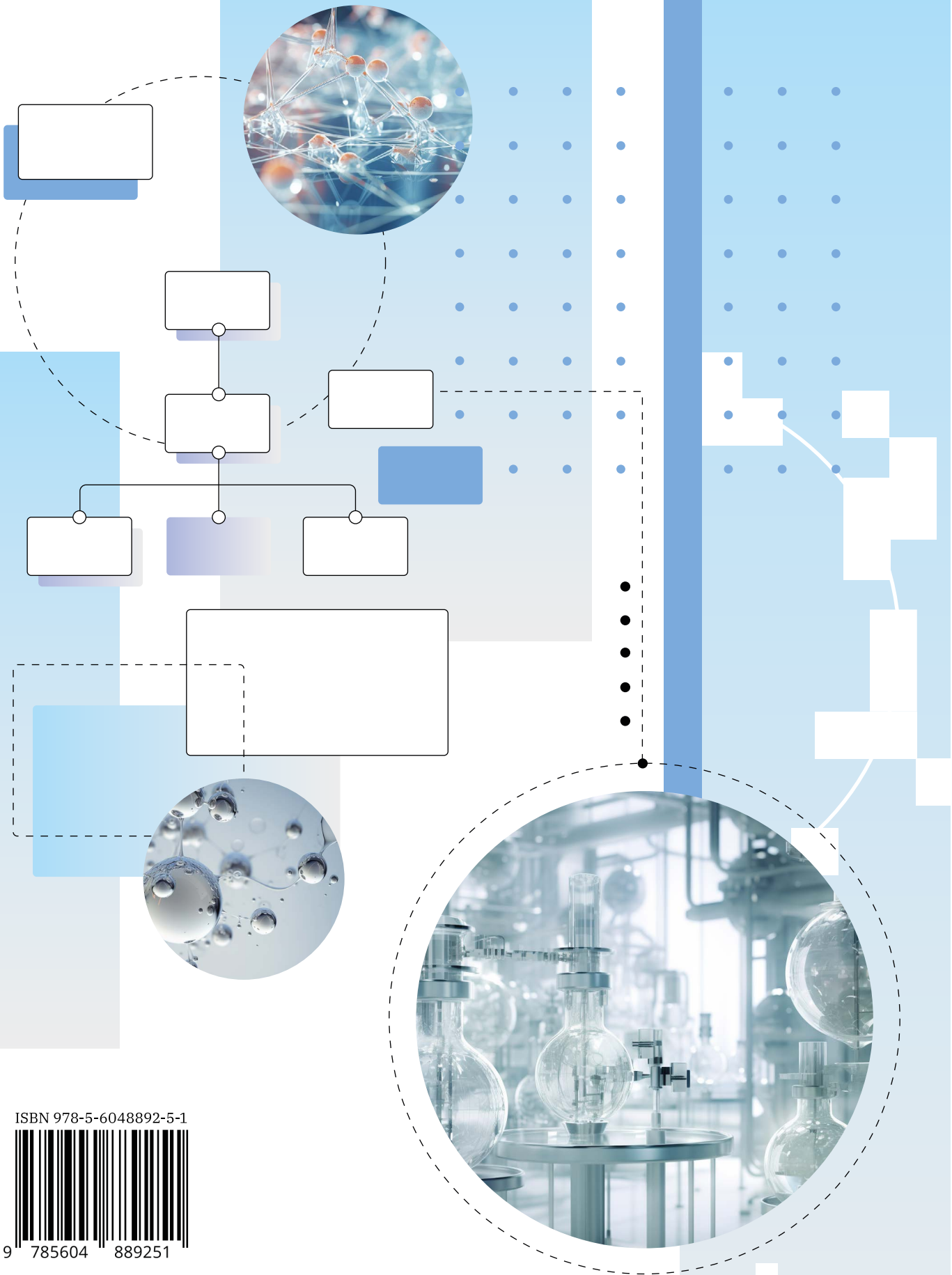
- химическая технология
- оптика
- приборостроение

Направления НИОКР:

- комплексная разработка технологий по нанесению и формованию объемных стеклообразных покрытий и микролинз, включая автоматизацию этого процесса с использованием технологии машинного зрения с уклоном на инфракрасную оптику
- разработка и синтез низкофононных люминесцирующих стекол и стеклокерамик для лазерной техники, фотоники и оптической термометрии
- проведение процедур по синтезу особо чистых химических соединений: сульфиды, галогениды, нитриды, хлориды
- формирование специальных оптических покрытий на основе диэлектриков, полупроводников и проводников методами термического и магнетронного распыления
- разработка оборудования с элементами машинного обучения под существующую или разрабатываемые технологии: вакуумная техника, CVD-процессы, многозонные температурные печи, аналитические приборы по термическому и спектральному анализу

Структура лаборатории:

- Группа синтеза и исследование материалов
- Группа проектирования установок под технологию



ISBN 978-5-6048892-5-1



9 785604 889251