

На правах рукописи



**Шадрина Гузель Руслановна**

**АНАЛИЗ СВЯЗИ «СТРУКТУРА – ТЕМПЕРАТУРА СТЕКЛОВАНИЯ  
ОРГАНИЧЕСКИХ ГОМОПОЛИМЕРОВ» В РАМКАХ ТЕОРИИ  
ХИМИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ  
СОЕДИНЕНИЙ И ТЕОРИЙ СТЕКЛОВАНИЯ ПОЛИМЕРОВ**

1.4.3. Органическая химия

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата технических наук

Казань-2026

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет» (ФГБОУ ВО «КНИТУ»).

**Научный руководитель:**

доктор химических наук, профессор  
**Улитин Николай Викторович**

**Официальные оппоненты:**

**Колчина Галина Юрьевна**

доктор технических наук, доцент, Стерлитамакский филиал федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий», кафедра химии и химической технологии, профессор

**Межуев Ярослав Олегович**

доктор химических наук, доцент, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», кафедра биоматериалов, заведующий кафедрой

**Ведущая организация:**

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет», г. Казань

Защита диссертации состоится 3 июля 2026 года в 12<sup>30</sup> на заседании диссертационного совета 24.2.312.03, созданного на базе ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» (420015, г. Казань, ул. К. Маркса, д. 68, корп. А, ауд. 330).

Отзывы на автореферат в 2-х экземплярах с подписями, заверенными печатью, просим направлять по адресу: 420015, г. Казань, ул. К. Маркса, д. 68, ученый совет. В отзыве указываются фамилия, имя, отчество, ученая степень (с указанием шифра и наименования научной специальности), ученое звание, должность с указанием структурного подразделения, телефон и адрес электронной почты (при наличии), наименование организации, почтовый адрес (п. 28 Положения о присуждении ученых степеней).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» и на сайте <https://www.kstu.ru/servlet/contentblob?id=587064>

Автореферат разослан « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2026 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета 24.2.312.03,  
кандидат химических наук, доцент



Н.М. Нуруллина

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность и степень разработанности темы исследования

В настоящее время среди химических объектов повышенный интерес в аспекте моделирования «структура-свойство» методами машинного обучения<sup>1</sup> вызывают полимеры. Причина этому заключается в многообразии полимеров, огромной и сложно прогнозируемой вариативности их свойств и практической востребованности полимеров. Свойства полимеров зависят от большого числа факторов: химической структуры мономеров, молекулярно-массовых характеристик полимеров, разветвленности и стереорегулярности макромолекул, степени кристалличности и др. Эти зависимости являются нелинейными и часто сложно интерпретируемыми. Небольшое изменение в химической структуре мономера способно принципиально изменить свойства полимера. А даже малое улучшение свойств полимеров или снижение стоимости мономеров имеет большое коммерческое значение, поскольку полимеры являются сырьем для более сложных материалов (пластмасс, композитов, эластомеров и др.). Исследователю сложно, а зачастую невозможно, уловить такие зависимости в многомерном пространстве данных, в то время как модели «структура-свойство», построенные на основе методов машинного обучения, идеально подходят для этого. Кроме того, следует отметить, что синтез нового полимера, его выделение, очистка и определение комплекса его свойств могут требовать существенных финансовых затрат и занимать длительное время. Модели «структура-свойство», построенные на основе методов машинного обучения и обученные на существующих данных, позволяют значительно ускорить разработку новых полимеров и оптимизировать их свойства под необходимые эксплуатационные требования.

Гомополимеры – это полимеры, макромолекулы которых состоят из одинаковых повторяющихся звеньев. Исследовательский интерес к гомополимерам в аспекте моделирования «структура-свойство» методами машинного обучения обусловлен тем, что гомополимеры достаточно просты, чтобы моделировать связь «структура-свойство» с помощью ограниченного набора данных (дескрипторы описывают повторяющееся звено одного типа), но и одновременно достаточно сложны для интерпретации проявления свойств в зависимости от химического строения их повторяющихся звеньев и их многоуровневой структуры. В этой связи гомополимеры являются идеальными объектами для выявления базовых принципов, понимание которых необходимо в дальнейшем при установлении и анализе связи «структура-свойство» для более сложных объектов (сополимеров, смесей полимеров, композитов и др.). Большинство крупнотоннажных полимеров – это именно

---

<sup>1</sup> Методы машинного обучения – это математические алгоритмы, общей идеей которых является построение статистической модели за счет ее так называемого обучения на большом наборе данных (обучающей выборке), причем модель в дальнейшем должна быть способна прогнозировать требуемые данные для новых объектов (объектов тестовой выборки).

гомополимеры, причем органические: полиэтилен, полипропилен, поливинилхлорид, полистирол. Следует отметить, что органические гомополимеры представляют собой наиболее широкий класс полимеров. Оптимизация их свойств – это актуальнейшая задача органической химии, где модели «структура-свойство», построенные на основе методов машинного обучения, уже дают оптимистичные результаты. Важнейшим свойством, на величину которого опираются при подборе полимера под требуемые условия эксплуатации, является температура стеклования – температурная граница между их стеклообразным (упруготвердым) и высокоэластическим физическими состояниями. При температурах ниже температуры стеклования полимеры используются как конструкционные материалы, при температурах выше температуры стеклования, но ниже температуры текучести полимеры применяются как эластичные материалы. То есть, другими словами, температура стеклования полимеров является предельной температурой, до которой не проявляется ползучесть.

Анализ обзора работ по моделированию «структура – температура стеклования органических полимеров» методами машинного обучения показал, что все они носят чисто методический характер, то есть посвящены поиску наилучших параметров структуры, оптимального метода машинного обучения с точки зрения повышения прогностической способности модели, и совершенно не анализируют полученные результаты в рамках теории химического строения органических соединений и существующих теорий стеклования полимеров. Это делает проведение такого исследования **актуальным**, и оно может осуществляться с привлечением инкрементального подхода к расчету свойств полимеров исходя из строения их повторяющихся звеньев – подхода, основанного на идее о том, что свойства полимера определяются суммой инкрементов атомов повторяющегося звена и инкрементов межмолекулярных взаимодействий.

В связи с чем **целью настоящей работы** стало построение модели машинного обучения, описывающей связь «структура – температура стеклования органических гомополимеров» и содержащей параметры, которые интерпретируются в рамках теории химического строения органических соединений и теорий стеклования полимеров.

Для достижения данной цели были поставлены и решены следующие **задачи**:

1) рассмотрение различных методов машинного обучения и выбор среди них обеспечивающего наибольшую достоверность модели, способной прогнозировать температуру стеклования органических гомополимеров через параметры, которые определяют ее на основе строения их повторяющихся звеньев по аналогии с инкрементальным подходом;

2) уточнение значений параметров, определяющих температуру стеклования органических гомополимеров на основе строения их повторяющихся звеньев по аналогии

с инкрементальным подходом, за счет применения при моделировании на основе машинного обучения комбинированных дескрипторов<sup>2</sup> для обеспечения более достоверных прогнозов;

3) установление корреляций параметров, определяющих температуру стеклования органических гомополимеров на основе строения их повторяющихся звеньев по аналогии с инкрементальным подходом, с квантово-химическими параметрами, относящимися к повторяющимся звеньям полимеров; анализ установленных корреляций в рамках теории химического строения органических соединений и теорий стеклования полимеров.

### **Научная новизна работы**

**I (п. 7 паспорта специальности 1.4.3.).** На основе молекулярных отпечатков Морганана как характеристик молекулярной структуры повторяющихся звеньев полимеров и метода случайного леса как метода машинного обучения построена модель, способная прогнозировать температуру стеклования органических гомополимеров через параметры, которые определяют ее по аналогии с инкрементальным подходом.

**II (п. 4 и 7 паспорта специальности 1.4.3.).** На примере полистиролов с различными положениями (2-, 3-, 4-) заместителя (фтор-, хлор-, бром-, метил- и этил-) в ароматическом кольце показано, что учет химического строения повторяющихся звеньев органических гомополимеров (в данном случае учет положения заместителя в ароматическом кольце) является определяющим фактором повышения точности прогнозирования температуры стеклования органических гомополимеров: модели, построенные без учета и с учетом положения заместителя, имеют коэффициенты детерминации 0.12 и 0.81 соответственно.

**III (п. 7 паспорта специальности 1.4.3.).** По результатам моделирования на количественном уровне показано, что температура стеклования органических гомополимеров:

- прямо пропорциональна параметру, связанному с молекулярным объемом повторяющегося звена полимера и интерпретируемому как мера гибкости макромолекул (эта закономерность согласуется с термодинамическими теориями стеклования полимеров и кинетическими теориями М.В. Волькенштейна-О.Б. Птицына и Ю.Я. Готлиба-О.Б. Птицына);

- обратно пропорциональна сумме двух параметров, один из которых характеризует совокупность всех типов межмолекулярных взаимодействий (эта закономерность согласуется с теорией межмолекулярных связей С.Н. Журкова и

---

<sup>2</sup> Под дескрипторами понимаются характеристики химического объекта, которые представляют его структуру в числовой форме, понятной алгоритмам машинного обучения.

флуктуационной теорией стеклования полимеров), а второй – долю свободного объема (эта закономерность согласуется с теорией свободного объема).

**IV (п. 4 и 7 паспорта специальности 1.4.3.).** Показано, что электронные свойства повторяющихся звеньев органических гомополимеров (средняя поляризуемость, дипольный момент, потенциал ионизации, сродство к электрону, энергетический зазор между высшей занятой молекулярной орбиталью и низшей свободной молекулярной орбиталью, химический потенциал, химическая жесткость, электрофильность) обладают статистически значимой корреляцией с параметром, который в связи «структура – температура стеклования органических гомополимеров» характеризует совокупность всех типов межмолекулярных взаимодействий, включая диполь-дипольные (слабые взаимодействия), водородные связи (сильные взаимодействия) и электростатические (сильные взаимодействия).

#### **Теоретическая и практическая значимость работы**

Теоретическая значимость работы заключается в том, что построенная модель «структура – температура стеклования органических гомополимеров» позволяет получать результаты, которые могут быть проанализированы в рамках теории химического строения органических соединений и теорий стеклования полимеров.

Практическая значимость работы заключается в том, что: 1) разработано программное обеспечение для прогнозирования температуры стеклования органических гомополимеров; 2) модель может применяться в качестве прогностического модуля при технологическом моделировании промышленных процессов синтеза органических гомополимеров.

#### **Методология и методы исследования**

Исследование провели по следующей методологии: 1) формирование базы данных для модели «структура – температура стеклования органических гомополимеров», построенной на основе машинного обучения; 2) выбор дескрипторов для описания химических структурных формул повторяющихся звеньев органических гомополимеров; 3) выбор метода машинного обучения для моделирования связи «структура – температура стеклования органических гомополимеров»; 4) первый этап моделирования связи «структура – температура стеклования органических гомополимеров» на основе машинного обучения: проверка возможности прогнозирования температуры стеклования органических гомополимеров с помощью модели, построенной на основе методов машинного обучения, не напрямую, а через параметры, определяющие температуру стеклования на основе химического строения их повторяющихся звеньев по аналогии с инкрементальным подходом; 5) второй этап моделирования связи «структура – температура стеклования органических гомополимеров» на основе машинного обучения: уточнение значений параметров,

определяющих температуру стеклования органических гомополимеров на основе химического строения их повторяющихся звеньев по аналогии с инкрементальным подходом, за счет применения комбинированных дескрипторов для обеспечения более достоверных прогнозов; 6) установление корреляций уточненных параметров, определяющих температуру стеклования органических гомополимеров на основе химического строения их повторяющихся звеньев по аналогии с инкрементальным подходом, с квантово-химическими параметрами, относящимися к повторяющимся звеньям полимеров; 7) анализ установленных корреляций в рамках теории химического строения органических соединений и теорий стеклования полимеров.

Моделирование на основе машинного обучения реализовывали на языке программирования Python 3.13.7. При моделировании рассмотрели 3 метода машинного обучения: метод случайного леса, метод k ближайших соседей и многослойный перцептрон. Для описания химических структурных формул повторяющихся звеньев органических гомополимеров выбрали и протестировали структурные ключи и молекулярные отпечатки Моргана. Показали, что модель на основе метода случайного леса, использующая молекулярные отпечатки Моргана, обладает наибольшей точностью прогнозирования температуры стеклования органических гомополимеров. Для метода случайного леса, продемонстрировавшего максимальную точность прогнозов среди испытанных, провели подбор гиперпараметров с помощью алгоритма GridSearchCV из библиотеки scikit-learn. Комбинированные дескрипторы получали, объединяя информацию о химическом строении повторяющихся звеньев органических гомополимеров и их экспериментальных и рассчитанных в рамках инкрементального подхода значениях температуры стеклования.

В качестве объектов исследования на этапе установления корреляций уточненных параметров, определяющих температуры стеклования органических гомополимеров на основе химического строения их повторяющихся звеньев по аналогии с инкрементальным подходом, с квантово-химическими параметрами, относящимися к повторяющимся звеньям полимеров, выбрали полистиролы с различными положениями (2-, 3-, 4-) заместителя (фтор-, хлор-, бром-, метил- и этил-) в ароматическом кольце. В качестве моделей молекулярной структуры объектов исследования в квантово-химических расчетах использовали повторяющиеся звенья, в которых открытую валентность концевых групп закрывали атомами водорода. Оптимизацию структур объектов исследования выполняли в программном пакете Gaussian 16, Rev. C.01 с использованием гибридного функционала B3LYP и валентно-расщепленного базисного набора Попла 6-31G(d,p). Стабильность рассчитанных структур характеризовалась отсутствием отрицательных частот колебаний в матрице вторых производных. Рассчитывали следующие квантово-химические параметры: средняя поляризуемость, дипольный момент, потенциал ионизации, сродство к

электрону, энергетический зазор между высшей занятой молекулярной орбиталью и нижней свободной молекулярной орбиталью, химический потенциал, химическая жесткость, электрофильность, молекулярный объем. Степень корреляции параметров оценивали с помощью коэффициента Пирсона.

### **Положения, выносимые на защиту**

1. Методология построения модели машинного обучения, способной прогнозировать температуру стеклования органических гомополимеров через параметры, которые определяют ее на основе химического строения их повторяющихся звеньев по аналогии с инкрементальным подходом.

2. Закономерности, выявленные при анализе связи «структура – температура стеклования органических гомополимеров», построенной на основе машинного обучения, в рамках теории химического строения органических соединений и теорий стеклования полимеров.

**Достоверность полученных результатов и обоснованность положений, выносимых на защиту**, обеспечивается корректностью используемых методов моделирования, верификацией модели по обширной базе экспериментальных данных, согласованием результатов моделирования с положениями общепринятых теорий.

**Личный вклад автора** заключается в сборе и анализе литературных данных, реализации решения задач исследования, анализе результатов, формулировании заключения и участии в написании и подготовке публикаций. Работа выполнена на кафедре общей химической технологии ФГБОУ ВО «КНИТУ».

### **Соответствие специальности**

Диссертация соответствует п. 4. Развитие теории химического строения органических соединений и п. 7. Выявление закономерностей типа «структура – свойство» паспорта специальности 1.4.3. Органическая химия.

### **Апробация результатов работы**

Результаты обсуждались на XXXIV Российской молодежной научной конференции с международным участием, посвященной 190-летию со дня рождения Д.И. Менделеева «Проблемы теоретической и экспериментальной химии» (Екатеринбург, 2024), IX Всероссийской научной конференции «Теоретические и экспериментальные исследования процессов синтеза, модификации и переработки полимеров» (Уфа, 2024), IV Всероссийской научной конференции (с международным участием) преподавателей и студентов вузов «Актуальные проблемы науки о полимерах» (Казань, 2024), Международной научной конференции «Актуальные вопросы естествознания и функциональные полимеры для фармацевтики, нефтяной промышленности, экологии, био- и нанотехнологии», посвященной 125-летию профессора К. Жубанова (Казахстан, г. Актобе, 2024).

## Публикации

Результаты работы представлены в 2 статьях в рецензируемых изданиях, рекомендованных ВАК для размещения материалов диссертаций, и 5 публикациях в сборниках материалов конференций.

**Структура и объем работы.** Диссертация изложена на 150 страницах, содержит 18 рисунков и 14 таблиц (13 – в основной части, 1 – в приложении), состоит из введения, 3 глав, заключения, списка литературы, насчитывающего 147 наименований, 2 приложений.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**В главе 1** проведен аналитический обзор литературы. Рассмотрена история развития исследований «структура-свойство» в химии, этапы построения моделей «структура-свойство» на основе методов машинного обучения (формирование базы данных, выбор дескрипторов, выбор метода машинного обучения, оценка качества моделей). Представлен обзор моделей «структура-свойство», построенных на основе методов машинного обучения, для разных типов химических объектов. В качестве объекта исследования выбраны и обоснованы органические гомополимеры, а в качестве прогнозируемого свойства – температура стеклования. Особое внимание уделено обзору исследований связи «структура – температура стеклования полимеров»: основные представления о стекловании, экспериментальные методы определения температуры стеклования, теории стеклования (термодинамические, кинетические), подходы к расчету свойств полимеров (в том числе, температуры стеклования) исходя из строения их повторяющихся звеньев: подход, основанный на аддитивности вкладов химических групп в свойства полимеров (подход Д.В. ван Кревелена); подход индексов связанности (подход Дж. Бицерано); инкрементальный подход (подход А.А. Аскадского). Выполнен обзор существующих моделей «структура – температура стеклования органических гомополимеров», построенных на основе методов машинного обучения. Показано, что эти модели носят методический характер и не анализируют полученные результаты в аспекте теории химического строения органических соединений и существующих теорий стеклования полимеров, что определяет актуальность, цель и задачи настоящего исследования.

**В главе 2** изложена методология и описаны использованные методы исследования. Исходной базой данных послужили сведения о химических структурах повторяющихся звеньев и температурах стеклования 1050 органических гомополимеров [1]. Структуры повторяющихся звеньев органических гомополимеров в базе данных представлены в виде SMILES. Для числового описания химических структурных формул повторяющихся звеньев органических гомополимеров из базы данных протестированы два вида дескрипторов – структурные ключи MACCS и молекулярные отпечатки Моргана. Моделирование осуществляли на языке Python 3.13.7 с использованием библиотеки scikit-learn. При

моделировании рассмотрели 3 метода машинного обучения: метод случайного леса, метод k ближайших соседей и многослойный перцептрон. Для метода, показавшего наилучшую точность (метод случайного леса), выполнена оптимизация гиперпараметров с помощью GridSearchCV.

Исследование включало два этапа моделирования связи «структура – температура стеклования органических гомополимеров» на основе машинного обучения. На первом этапе проверяли принципиальную возможность прогнозирования температуры стеклования не напрямую, а через параметры, определяющие температуру стеклования органических гомополимеров по аналогии с инкрементальным подходом. На втором этапе уточняли значения параметров с использованием комбинированных дескрипторов, что позволило отразить структурные особенности, в частности положение заместителей в ароматическом кольце, не различаемое в инкрементальном подходе.

В качестве объектов исследования на этапе установления корреляций уточненных параметров, определяющих температуры стеклования органических гомополимеров на основе химического строения их повторяющихся звеньев по аналогии с инкрементальным подходом, с квантово-химическими параметрами, относящимися к повторяющимся звеньям полимеров, выбрали полистиролы с различными положениями (2-, 3-, 4-) заместителя (фтор-, хлор-, бром-, метил- и этил-) в ароматическом кольце. В качестве моделей молекулярной структуры объектов исследования в квантово-химических расчетах использовали повторяющиеся звенья, в которых открытую валентность концевых групп закрывали атомами водорода. Оптимизацию структур объектов исследования выполняли в программном пакете Gaussian 16, Rev. C.01 с использованием гибридного функционала B3LYP и валентно-расщепленного базисного набора Попла 6-31G(d,p). Стабильность рассчитанных структур характеризовалась отсутствием отрицательных частот колебаний в матрице вторых производных. Рассчитывали следующие квантово-химические параметры: средняя поляризуемость, дипольный момент, потенциал ионизации, сродство к электрону, энергетический зазор между высшей занятой молекулярной орбиталью и низшей свободной молекулярной орбиталью, химический потенциал, химическая жесткость, электрофильность, молекулярный объем. Степень корреляции параметров оценивали с помощью коэффициента Пирсона.

**В главе 3** изложены результаты построения, уточнения и физико-химической интерпретации модели «структура – температура стеклования органических гомополимеров», основанной на сочетании инкрементального подхода и методов машинного обучения.

Формулу (1) инкрементального подхода [1] для применения в модели машинного обучения преобразовали к виду (2).

$$T_{g \text{ inc}} = \frac{\sum_i \Delta V_i}{\sum_i a_i \Delta V_i + \sum_j b_j}, \quad (1)$$

где  $\Delta V_i$  – ван-дер-ваальсовы объемы атомов повторяющегося звена полимера;  $a_i$  – инкременты, характеризующие энергию слабого дисперсионного взаимодействия каждого атома;  $b_j$  – инкременты, характеризующие энергию сильного специфического межмолекулярного взаимодействия (например, диполь-дипольного, водородных связей).

$$T_{g \text{ inc}} = \frac{A_{\text{inc}}}{B_{\text{inc}} + C_{\text{inc}}}, \quad (2)$$

где  $A_{\text{inc}} = \sum_i \Delta V_i$ ,  $B_{\text{inc}} = \sum_i a_i \Delta V_i$ ,  $C_{\text{inc}} = \sum_j b_j$ .

Модель на основе методов машинного обучения должна прогнозировать температуру стеклования органических гомополимеров, исходя из параметров, определяющих ее в рамках инкрементального подхода:

$$T_{g \text{ calc}} = \frac{A}{B + C}, \quad (3)$$

где  $A \approx A_{\text{inc}}$ ,  $B \approx B_{\text{inc}}$ ,  $C \approx C_{\text{inc}}$ . Параметры  $A$ ,  $B$ ,  $C$  на первом этапе моделирования по физическому смыслу соответствуют  $A_{\text{inc}}$ ,  $B_{\text{inc}}$ ,  $C_{\text{inc}}$ , однако численно им не равны.

Перед моделированием базу данных разделили на обучающую (80%) и тестовую (20%) выборки. Обучение модели осуществляли на обучающей выборке, а тестовую выборку использовали для проверки точности прогнозирования параметров, определяющих температуру стеклования полимеров в рамках инкрементального подхода. Для оценки точности прогнозирования температуры стеклования моделью, построенной на основе машинного обучения, проводили сравнение экспериментальных значений температуры стеклования органических гомополимеров  $T_{g \text{ exp}}$  и соответствующих значений  $T_{g \text{ calc}}$  с использованием коэффициента детерминации  $R^2$ . Алгоритм моделирования на первом этапе схематически представлен на рис. 1.

Для повышения скорости расчетов реализовали алгоритм поиска фрагментов (атомов и их окружения) в повторяющемся звене органического гомополимера. В основе алгоритма лежит кодирование и распознавание структуры этих фрагментов в формате SMARTS (от англ. SMiles ARbitrary Target Specification). Следует отметить, что SMARTS имеет ограничения, связанные с неоднозначной идентификацией атомов с переменной валентностью, таких как атомы серы, что может приводить к некорректной интерпретации структуры полимера. Для минимизации риска получения

ложноположительных результатов и обеспечения надежности последующего анализа данных было принято решение об исключении из исходной базы данных, содержащей сведения о 1050 полимерах, 228 полимеров, структура которых могла быть интерпретирована неоднозначно. В результате данной процедуры итоговая выборка для дальнейшего исследования составила 822 гомополимера.

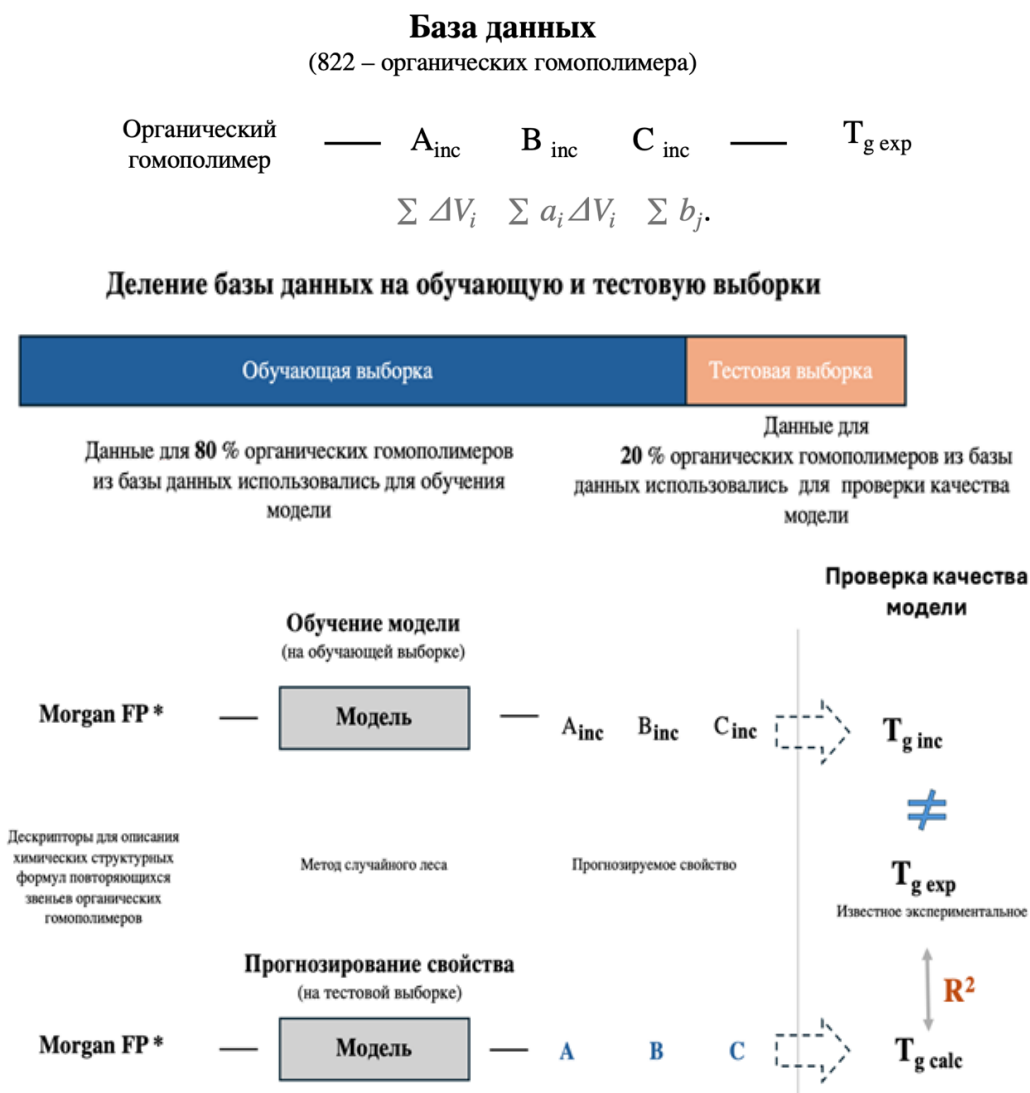


Рис. 1. Схема первого этапа моделирования связи «структура – температура стеклования органических гомополимеров» на основе машинного обучения

Нормальное (гауссово) распределение данных полагается важным условием для высокой прогностической способности модели на основе машинного обучения. Анализ распределения значений температуры стеклования полимеров в исходной базе данных [1] показал, что они соответствуют закону нормального распределения (рис. 2).

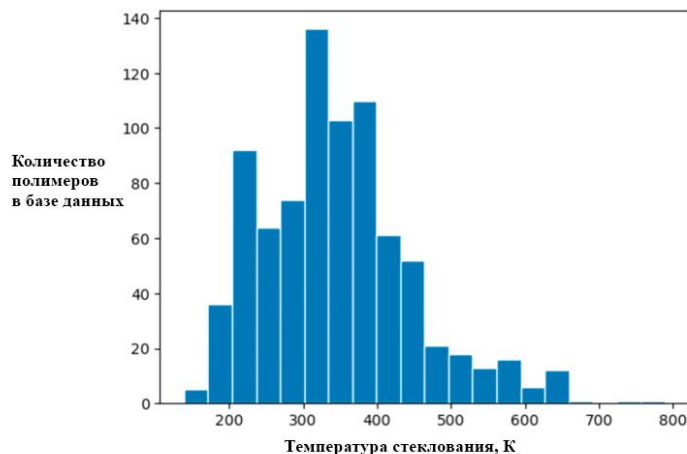


Рис. 2. Распределение значений температуры стеклования полимеров в базе данных

Сравнительная характеристика (без оптимизации гиперпараметров) методов машинного обучения, использованных в модели для прогнозирования параметров, которые определяют температуру стеклования органических гомополимеров в рамках инкрементального подхода, представлена в табл. 1. Точность модели, оцененную с помощью коэффициента детерминации  $R^2$ , определяли путем сравнения значений  $A$ ,  $B$  и  $C$ , спрогнозированных моделью на основе машинного обучения, со значениями  $A_{inc}$ ,  $B_{inc}$  и  $C_{inc}$ , рассчитанными в рамках инкрементального подхода.

Табл. 1. Сравнительная характеристика (без оптимизации гиперпараметров) методов машинного обучения, использованных в модели для прогнозирования параметров, которые определяют температуру стеклования органических гомополимеров в рамках инкрементального подхода

Метод машинного обучения	Дескрипторы	$R^2$
Метод случайного леса	молекулярные отпечатки Моргана	0.739
	структурные ключи	0.757
Метод k ближайших соседей	молекулярные отпечатки Моргана	0.660
	структурные ключи	0.690
Многослойный перцептрон	молекулярные отпечатки Моргана	0.490
	структурные ключи	0.450

Анализ результатов, представленных в табл. 1, демонстрирует, что наибольшую точность прогнозирования температуры стеклования органических гомополимеров продемонстрировала модель, основанная на методе случайного леса.

Далее с использованием модели на основе метода случайного леса и молекулярных отпечатков Моргана рассчитали  $T_{g\text{ calc}}$ , исходя из параметров А, В и С, спрогнозированных совместно, и провели прямое прогнозирование параметров А, В и С (по отдельности) – см. табл. 2.

Табл. 2. Коэффициенты детерминации  $R^2$  для различных параметров, прогнозируемых моделью на основе метода случайного леса

Прогнозируемый параметр	$R^2$
А, В, С	0.739
$T_{g\text{ calc}}$	0.770 (с $T_{g\text{ inc}}$ ) 0.810 (с $T_{g\text{ exp}}$ )
А	0.770
В	0.730
С	0.720

Использование прямого прогнозирования параметров А, В и С (по отдельности) не приводит к существенному повышению точности прогноза по сравнению с их совместным прогнозированием (табл. 2). Это может быть связано с тем, что раздельное прогнозирование параметров А, В и С (по отдельности) не учитывает взаимодействия между ними.

В связи с этим для достижения более высокой точности прогнозирования температуры стеклования органических гомополимеров отказались от прямого прогнозирования параметров А, В и С (по отдельности) в пользу совместного прогнозирования параметров А, В и С (такой подход позволяет учитывать возможную взаимосвязанность между параметрами А, В и С и более точно оценивать вклад каждого структурного фрагмента повторяющегося звена в температуру стеклования полимера). После чего с целью повышения коэффициента детерминации  $R^2$  на обучающей выборке провели процедуру оптимизации гиперпараметров модели на основе метода случайного леса.

Для более детальной и наглядной оценки качества прогнозов разработанной модели на конкретных примерах выбрали полистиролы с различными положениями (2-, 3-, 4-) заместителя (фтор-, хлор-, бром-, метил- и этил-) в ароматическом кольце (табл. 3). Данный выбор обусловлен тем, что разное положение заместителя в ароматическом кольце обеспечивает разные значения температуры стеклования изомеров полистирола.

Спрогнозированные исходя из структурных ключей значения температуры стеклования являются практически одинаковыми для изомеров, отличающихся положением заместителя в ароматическом кольце (табл. 3). Это связано с тем, что структурные ключи в отличие от молекулярных отпечатков Моргана предоставляют информацию только о наличии или отсутствии определенных структурных фрагментов в молекуле, не учитывая их взаимное расположение, относительную ориентацию и другие важные структурные

особенности. То есть структурные ключи не позволяют различить рассматриваемые изомеры. Модель, использующая молекулярные отпечатки Моргана, обладает большей точностью прогнозирования температуры стеклования для рассматриваемых изомеров полистиролов (табл. 3), поскольку молекулярные отпечатки Моргана отражают связность атомов и их окружения, а значит, модель способна различать положение заместителя в ароматическом кольце и учитывать его влияние на температуру стеклования. Таким образом, несмотря на то, что общая точность прогнозов модели, использующей молекулярные отпечатки Моргана, несколько ниже по сравнению с моделью, использующей структурные ключи (табл. 1), использование для моделирования молекулярных отпечатков Моргана предпочтительнее из-за их возможности учитывать нюансы строения изомерных молекул.

Табл. 3. Результаты прогнозирования температуры стеклования для полистиролов с различными положениями заместителя в ароматическом кольце

Органический гомо-полимер	T <sub>g exp</sub> , К [1]	T <sub>g inc</sub> , К [1]	T <sub>g calc</sub> , К			
			молекулярные отпечатки Моргана до оптимизации гиперпараметров	молекулярные отпечатки Моргана после оптимизации гиперпараметров	структурные ключи до оптимизации гиперпараметров	структурные ключи после оптимизации гиперпараметров
поли-2-фторстирол (П-2-ФС)	-	402	400.6	402.1	400.8	402.1
поли-3-фторстирол (П-3-ФС)	-	402	397.8	397.3	400.8	402.1
поли-4-фторстирол (П-4-ФС)	368	402	384.9	383.2	395.2	396.0
поли-2-хлорстирол (П-2-ХС)	392	410	405.0	402.7	405.1	405.3
поли-3-хлорстирол (П-3-ХС)	363	410	400.0	376.0	400.0	403.0
поли-4-хлорстирол (П-4-ХС)	388-401	410	403.0	400.0	403.0	403.0
поли-2-бромстирол (П-2-БрС)	-	423	402.3	397.8	389.4	401.4
поли-3-бромстирол (П-3-БрС)	-	423	404.3	398.6	413.6	422.6
поли-4-бромстирол (П-4-БрС)	391, 414-430	423	385.3	381.6	376.7	381.1
поли-2-метилстирол (П-2-МеС)	409	400	394.1	375.5	396.0	399.9
поли-3-метилстирол (П-3-МеС)	370	400	395.5	403.2	396.4	400.0
поли-4-метилстирол (П-4-МеС)	366, 374, 382	400	386.1	399.1	388.8	400.0
поли-2-этилстирол (П-2-ЭтС)	376	354	355.8	356.3	298.9	339.5
поли-3-этилстирол (П-3-ЭтС)	> 303	354	350.7	355.8	364.6	367.7
поли-4-этилстирол (П-4-ЭтС)	300, 351	354	357.7	345.3	364.6	367.6

На втором этапе моделирования провели процедуру уточнения параметров  $A$ ,  $B$  и  $C$ , то есть присвоения параметрам  $A$ ,  $B$  и  $C$  новых значений, которые позволят получить по формуле (3) более точные значения температур стеклования органических гомополимеров. Алгоритм процедуры уточнения параметров  $A$ ,  $B$  и  $C$  схож с алгоритмом перекрестной проверки (кросс-валидации) (рис. 3). В настоящей диссертации алгоритм кросс-валидации использовали для последовательного уточнения параметров  $A$ ,  $B$  и  $C$ . Для этого базу данных разделили на выборку для уточнения (90% базы данных) и тестовую выборку (10% базы данных), которая не участвовала в процедуре уточнения. Выборка для уточнения, как и в общем случае кросс-валидации, делилась на  $k = 8$  частей (на рис. 3 представлен принцип деления базы данных для уточнения параметров  $A$ ,  $B$  и  $C$  при  $k = 5$ ).

В процедуре уточнения параметров  $A$ ,  $B$  и  $C$  использовали два варианта комбинированных дескрипторов. Каждый комбинированный дескриптор, построенный по первому варианту, представлял собой вектор, состоящий из битовой строки молекулярного отпечатка Моргана, экспериментального  $T_{g \text{ exp}}$  и рассчитанного по формуле (2)  $T_{g \text{ inc}}$  значений температуры стеклования органических гомополимеров (рис. 4). Разность между  $T_{g \text{ exp}}$  и  $T_{g \text{ inc}}$  давала модели информацию о «степени неточности» инкрементального подхода. Комбинированные дескрипторы, построенные по первому варианту, использовали в качестве входных значений модели в обучающей выборке. Комбинированные дескрипторы, построенные по второму варианту, отличались от комбинированных дескрипторов, построенных по первому варианту, использованием экспериментального значения  $T_{g \text{ exp}}$  на месте значения  $T_{g \text{ inc}}$  (рис. 4). Комбинированные дескрипторы, построенные по второму варианту, использовали в качестве входных значений модели в обучающей выборке.



Рис. 3. Принцип деления базы данных для уточнения параметров  $A$ ,  $B$  и  $C$

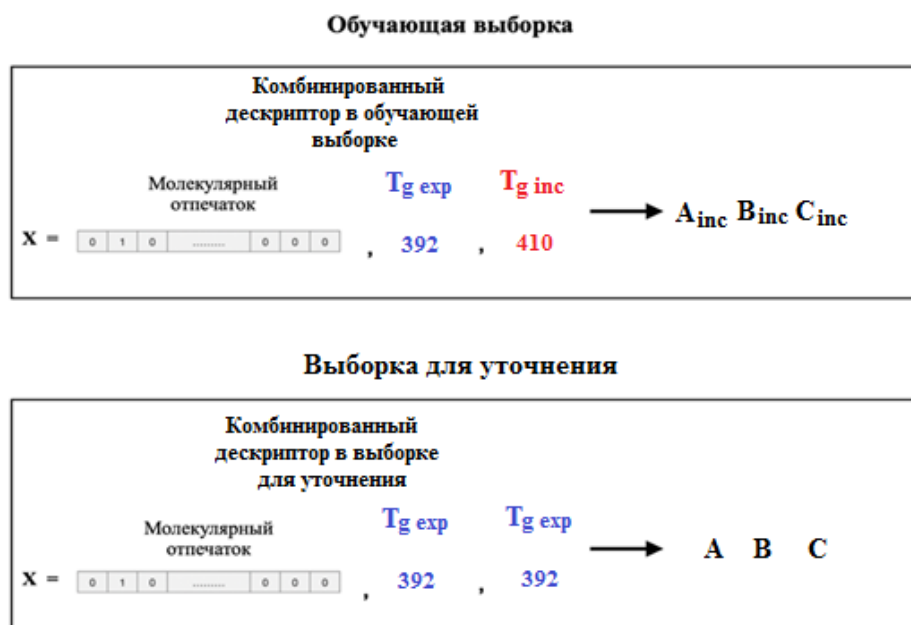


Рис. 4. Комбинированный дескриптор

Для получения статистически достоверных результатов провели 50 независимых вычислительных экспериментов заключающихся в повторении второго этапа моделирования: снова случайным образом выборка для уточнения (составляет 90% от исходной базы данных) делилась на  $k$  частей, далее проводилась процедура уточнения A, B и C, на основе результатов которой обучалась модель для более точного прогнозирования температуры стеклования органических гомополимеров. В качестве итоговых уточненных значений параметров A, B, C для каждого полимера принимались медианные значения по результатам 50 экспериментов. В ходе 50 независимых вычислительных экспериментов обнаружили, что в ряде случаев коэффициент детерминации  $R^2$  на тестовой выборке достигал 0.90, что соответствует уровню точности результатов расчета с использованием инкрементального подхода. При этом среднее значение  $R^2$  по результатам всех экспериментов составило 0.85, что свидетельствует о существенном повышении точности модели по сравнению с исходным вариантом ( $R^2 = 0.81$ , см. табл. 2).

Сопоставление значений температуры стеклования полистиролов с различными положениями заместителя в ароматическом кольце: экспериментальных, рассчитанных с помощью инкрементального подхода и рассчитанных с помощью модели на основе метода случайного леса при использовании молекулярных отпечатков Моргана в качестве дескрипторов и совместно прогнозируемых уточненных параметров A, B и C (табл. 4) наглядно демонстрирует, что разработанная модель позволяет получать значительно более точные прогнозы  $T_g$  для рассмотренных органических гомополимеров по сравнению с инкрементальным подходом.

Табл. 4. Значения температуры стеклования полистиролов с различными положениями заместителя в ароматическом кольце: экспериментальные ( $T_{g \text{ exp}}$ ), рассчитанные с помощью инкрементального подхода ( $T_{g \text{ inc}}$ ) и рассчитанные с помощью модели на основе метода случайного леса при использовании молекулярных отпечатков Моргана в качестве дескрипторов и совместно прогнозируемых уточненных параметров А, В и С ( $T_{g \text{ calc}}$ )

Органический гомополимер	$T_{g \text{ exp}}$ , К [1]	$T_{g \text{ inc}}$ , К [1]	$T_{g \text{ calc}}$ , К
П-2-ФС		402	384
П-3-ФС		402	389
П-4-ФС	368	402	380
П-2ХС	392	410	397
П-3ХС	363	410	387
П-4ХС	388-401	410	397
П-2-БpС		423	398
П-3-БpС		423	398
П-4-БpС	391, 414-430	423	422
П-2-МеС	409	400	399
П-3-МеС	370	400	380
П-4-МеС	366, 374, 382	400	375
П-2-ЭтС	376	354	365
П-3-ЭтС	> 303	354	332
П-4-ЭтС	300, 351	354	335

Далее провели статистический анализ с использованием диаграммы размаха (также известной как «ящик с усами», от англ. box and whisker plot). Данный тип диаграммы выбрали для визуализации распределения спрогнозированных значений А, В и С на примере полистиролов с различными положениями заместителя в ароматическом кольце (рис. 5).

Анализ диаграмм размаха показал, что после уточнения параметров А, В и С соотношение между значениями параметров В и С существенно изменилось по сравнению с исходным соотношением между значениями параметров  $V_{\text{inc}}$  и  $C_{\text{inc}}$ , полученными в рамках инкрементального подхода (значения параметров  $A_{\text{inc}}$ ,  $V_{\text{inc}}$  и  $C_{\text{inc}}$  показаны на рис. 5 красной пунктирной линией). Данный факт может свидетельствовать о том, что в результате уточнения произошло изменение факторов, оказывающих влияние на значения параметров А, В и С, и, как следствие, изменился их смысл.

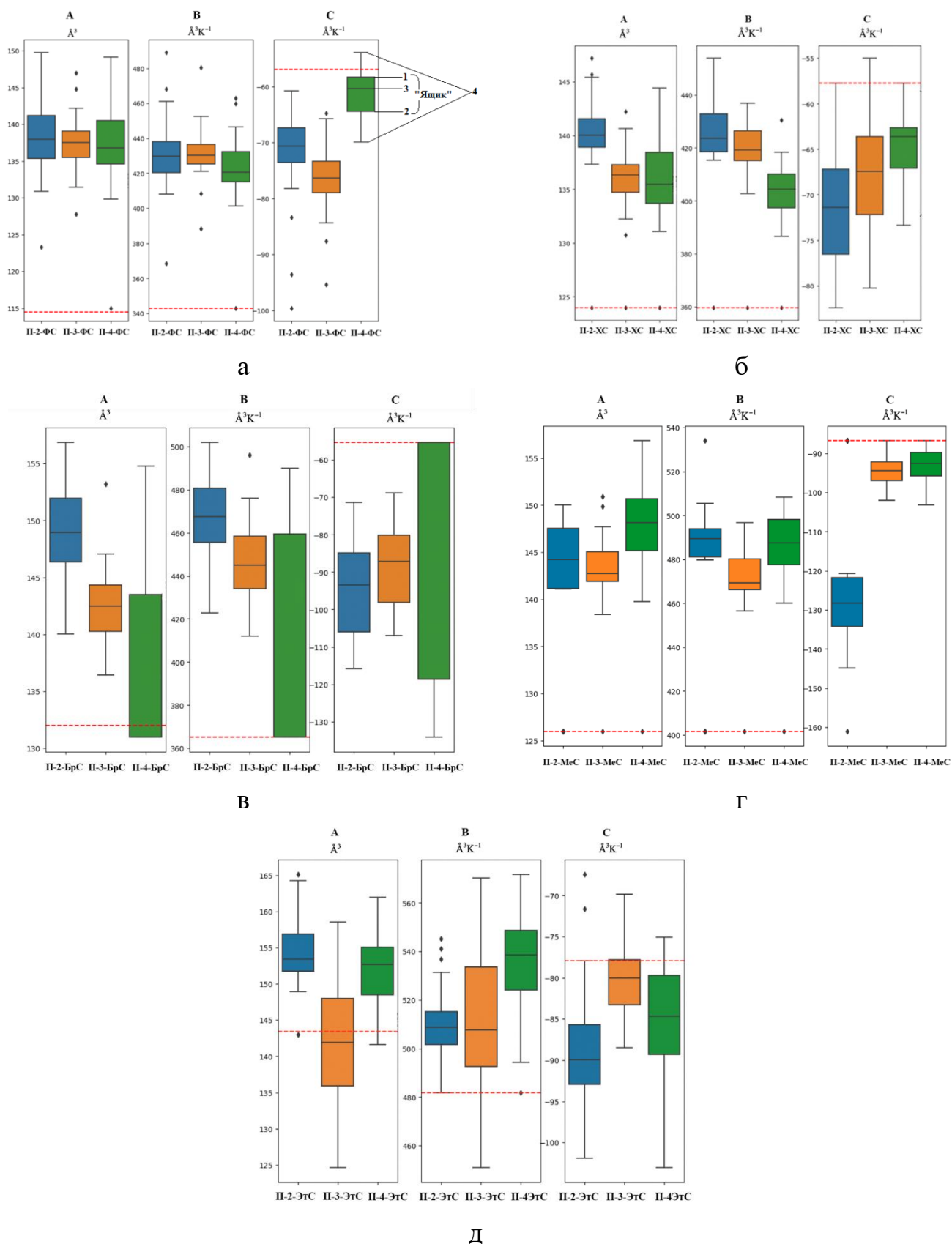


Рис. 5. Диаграммы размаха значений параметров А, В и С для полистиролов: а – фтор-, б – хлор-, в – бром-, г – метил-, д – этилзамещенных; 1, 2 – верхний и нижний квартили соответственно; 3 – медиана; 4 – «усы»; красная пунктирная линия – значения  $A_{inc}$ ,  $B_{inc}$  и  $C_{inc}$

Предположительно, это связано с тем, что разработанная модель на основе метода случайного леса в отличие от инкрементального подхода учитывает не только наличие или отсутствие определенных структурных фрагментов, но и их взаимное расположение, а также другие структурные особенности повторяющихся звеньев органических гомополимеров. Это приводит к тому, что параметры А, В и С начинают отражать не только вклад отдельных структурных фрагментов, но и влияние их взаимодействий на температуру стеклования органических гомополимеров.

Для установления физического смысла уточненных параметров А, В, С был проведен корреляционный анализ между их медианными значениями и квантово-химическими параметрами, рассчитанными для повторяющихся звеньев рассматриваемых замещенных полистиролов методом V3LYP/6-31G(d,p). Степень корреляции оценивалась с помощью коэффициента Пирсона.

Анализ данных, представленных в табл. 5, выявил наличие статистически значимой обратной корреляции между значениями параметра А и такими характеристиками повторяющегося звена органического гомополимера, как молекулярный объем ( $V_M$ ) и дипольный момент (d). Установленный факт позволяет выдвинуть предположение о том, что параметр А, по всей видимости, характеризует ван-дер-ваальсовый объем повторяющегося звена органического гомополимера и, вероятно, отражает влияние слабых межмолекулярных взаимодействий на температуру стеклования. Данное предположение подтверждается тем, что для метил- и этилзамещенных полистиролов, в которых метильные и этильные группы не являются полярными и оказывают слабое влияние на дипольный момент молекулы, значения коэффициента корреляции между параметром А и молекулярным объемом уменьшаются (табл. 5). Это свидетельствует о том, что вклад диполь-дипольных взаимодействий в параметр А незначителен и основной вклад вносит именно ван-дер-ваальсовый объем повторяющегося звена органического гомополимера. Таким образом, параметр А можно интерпретировать как меру гибкости макромолекул.

Все значения электронных свойств повторяющихся звеньев исследуемых органических гомополимеров, полученные на основе квантово-химических расчетов, обладают статистически значимой корреляцией с параметром В (табл. 6).

Этот факт позволяет выдвинуть предположение о том, что параметр В характеризует совокупность всех типов межмолекулярных взаимодействий, включая как слабые взаимодействия (диполь-дипольные), так и более сильные взаимодействия (водородные связи и электростатические взаимодействия).

Важным наблюдением является наличие обратной корреляции между параметром С и параметром В (рис. 5). Поскольку с увеличением сил межмолекулярных взаимодействий, характеризующихся параметром В, уменьшается плотность молекулярной упаковки, можно

предположить, что параметр  $C$  связан с коэффициентом молекулярной упаковки. Данная взаимосвязь может быть объяснена тем, что сильные межмолекулярные взаимодействия приводят к образованию более жестких и устойчивых связей между макромолекулами. Это, в свою очередь, может затруднять их плотную упаковку и приводить к увеличению свободного объема в органическом гомополимере.

Табл. 5. Значения молекулярных объемов и дипольных моментов (B3LYP/6-31G(d,p)) для повторяющихся звеньев полистиролов с различными положениями заместителя в ароматическом кольце и их корреляции с параметром  $A$

Повторяющееся звено органического гомополимера	Параметр $A$ , $\text{Å}^3$	$V_M$ , $\text{см}^3/\text{моль}$	Коэффициент корреляции Пирсона параметра $A$ с $V_M$	$d$ , Д	Коэффициент корреляции Пирсона параметра $A$ с $d$
2-фторстирол	137.770	104.230	-0.46	1.07	-0.99
3-фторстирол	136.848	101.501		1.67	
4-фторстирол	136.787	126.356		1.85	
2-хлорстирол	140.035	107.720	-0.81	1.65	-0.99
3-хлорстирол	136.325	110.330		2.28	
4-хлорстирол	135.666	116.870		2.51	
2-бромстирол	149.679	121.870	-0.99	1.57	-0.94
3-бромстирол	141.861	124.076		2.19	
4-бромстирол	131.000	126.356		2.42	
2-метилстирол	144.245	109.656	-0.75	0.67	-0.63
3-метилстирол	142.733	118.398		0.37	
4-метилстирол	148.153	109.022		0.14	
2-этилстирол	153.548	120.402	-0.99	0.75	-0.10
3-этилстирол	142.126	120.726		0.48	
4-этилстирол	153.499	120.402		0.08	

Несмотря на значимость коэффициента молекулярной упаковки для понимания физико-химических свойств органических гомополимеров, его количественная оценка представляет собой сложную задачу. Экспериментальные значения коэффициента молекулярной упаковки доступны лишь для ограниченного числа органических гомополимеров, входящих в использованную в настоящей диссертации базу данных.

В связи с этим для анализа влияния параметра  $C$  на коэффициент молекулярной упаковки органических гомополимеров использовали метод аналогии. В частности, для изомерного ряда поли-2-хлорстирол, поли-3-хлорстирол, поли-4-хлорстирол предположили, что плотность молекулярной упаковки уменьшается в указанном порядке по аналогии с известными данными о плотности молекулярной упаковки в соответствующих

кристаллических органических гомополимерах. При этом отметили, что параметр  $S$  увеличивается в том же порядке, что свидетельствует об обратной пропорциональности между параметром  $S$  и коэффициентом молекулярной упаковки.

Табл. 6. Значения электронных свойств (B3LYP/6-31G(d,p)) для повторяющихся звеньев полистиролов с различными положениями заместителя в ароматическом кольце и их корреляции с параметром  $B$

Повторяющееся звено органического гомополимера	$\alpha$ , а.е.	$I$ , эВ	$a$ , эВ	$E_g$ , эВ	$\omega$ , эВ	$\mu$ , эВ	$\eta$ , эВ	$d$ , Д
2-фторстирол	78.95	-6.40	-0.05	-0.05	-1.64	-3.23	-3.18	1.07
3-фторстирол	79.11	-6.48	-0.20	-0.20	-1.77	-3.34	-3.14	1.67
4-фторстирол	79.14	-6.31	-0.18	-0.18	-1.72	-3.25	-3.06	1.85
2-хлорстирол	89.56	-6.53	-0.24	-0.24	-1.82	-3.39	-3.15	1.65
3-хлорстирол	90.43	-6.58	-0.31	-0.31	-1.89	-3.44	-3.13	2.28
4-хлорстирол	90.88	-6.42	-0.15	-0.15	-1.72	-3.29	-3.13	2.51
2-бромстирол	96.55	-6.45	-0.27	-0.27	-1.82	-3.36	-3.09	1.57
3-бромстирол	97.81	-6.47	-0.32	-0.32	-1.87	-3.40	-3.08	2.19
4-бромстирол	98.43	-6.33	-0.32	-0.32	-1.84	-3.33	-3.01	2.42
2-метилстирол	90.45	-6.21	0.21	0.21	-1.40	-3.00	-3.21	0.67
3-метилстирол	91.33	-6.23	0.17	0.17	-1.44	-3.03	-3.20	0.37
4-метилстирол	91.81	-6.11	0.20	0.20	-1.39	-2.96	-3.16	0.14
2-этилстирол	101.72	-6.25	0.12	0.12	-1.48	-3.07	-3.19	0.75
3-этилстирол	102.64	-6.25	0.12	0.12	-1.48	-3.07	-3.19	0.48
4-этилстирол	103.18	-6.09	0.23	0.23	-1.36	-2.93	-3.16	0.08
Коэффициент корреляции Пирсона с параметром $B$	0.50	0.67	0.80	-0.65	0.79	0.77	-0.65	-0.86

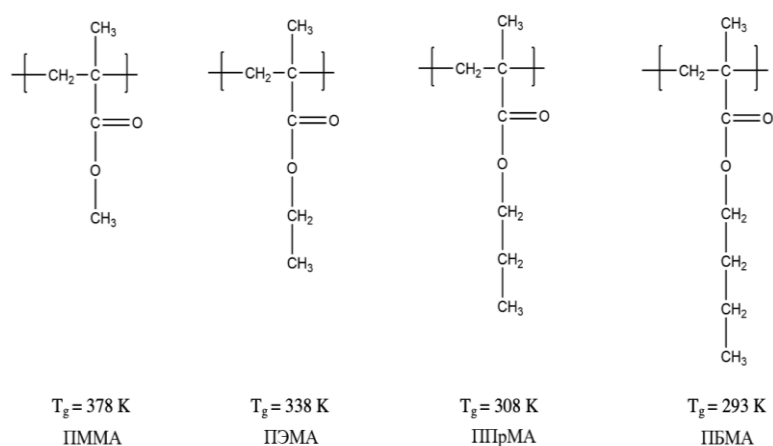
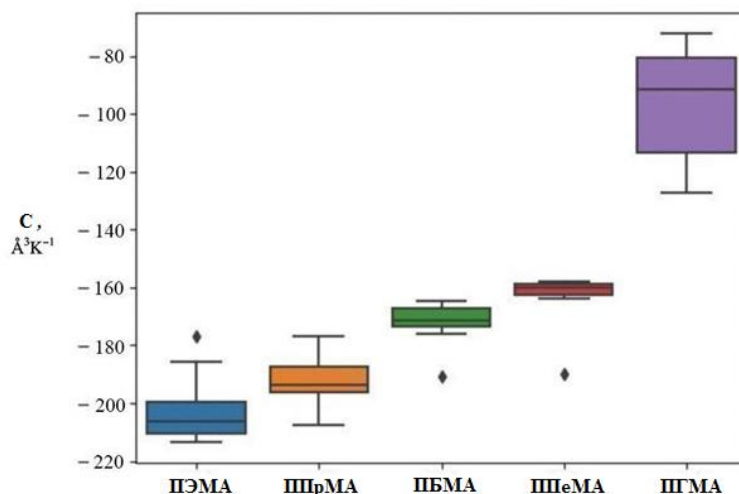


Рис. 6. Значения  $T_{g \text{ exp}}$  в гомологическом ряду полиметакрилатов: ПММА – полиметилметакрилат, ПЭМА – полиэтилметакрилат, ППрМА – полипропиленметакрилат, ПБМА – полибутилметакрилат

Для подтверждения этой особенности выбрали гомологический ряд полиметакрилатов (рис. 6), для которых известно, что уменьшение температуры стеклования с увеличением длины алифатической цепи обусловлено преимущественно уменьшением плотности

молекулярной упаковки. В связи с чем ожидали, что на диаграмме размаха значение параметра  $C$  будет возрастать с увеличением длины алифатического заместителя в гомологическом ряду полиметакрилатов, что соответствовало бы уменьшению плотности молекулярной упаковки. Чтобы подтвердить данную гипотезу, рассчитали значения параметра  $C$  для данного гомологического ряда с помощью построенной в настоящей диссертации модели на основе метода случайного леса (рис. 7).

Рис. 7. Диаграмма размаха прогнозируемых значений параметра  $C$  для гомологического ряда полиметакрилатов: ПЭМА – полиэтилметакрилат, ППрМА – полипропиленметакрилат, ПБМА – полибутилметакрилат, ППеМА – полипентилметакрилат, ПГМА – полигексилметакрилат



Результаты расчетов (рис. 7) подтвердили выдвинутую гипотезу о наличии обратной пропорциональности между параметром  $C$  и коэффициентом молекулярной упаковки и, как следствие, о наличии прямой пропорциональности между параметром  $C$  и долей свободного объема. Следовательно, при идентичной скорости охлаждения образец полимера, характеризующийся более высокой долей свободного объема в высокоэластическом состоянии, переходит в стеклообразное состояние при более низкой температуре вследствие запаздывания релаксационных процессов.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По результатам диссертационного исследования можно сделать следующие выводы.

1. На основе методов машинного обучения построена модель, способная прогнозировать температуру стеклования органических гомополимеров через параметры, которые определяют ее на основе химического строения их повторяющихся звеньев по аналогии с инкрементальным подходом. При моделировании рассмотрено 3 метода машинного обучения: метод случайного леса, метод  $k$  ближайших соседей и многослойный перцептрон. Для описания химических структурных формул повторяющихся звеньев органических гомополимеров выбраны и протестированы структурные ключи и молекулярные отпечатки Моргана. Показано, что модель на основе метода случайного леса, использующая молекулярные отпечатки

Моргана, обладает наибольшей достоверностью прогнозирования температуры стеклования органических гомополимеров.

2. Для обеспечения более достоверных прогнозов уточнены значения параметров, определяющих температуру стеклования органических гомополимеров на основе химического строения их повторяющихся звеньев по аналогии с инкрементальным подходом, за счет применения в модели на основе метода случайного леса комбинированных дескрипторов. Комбинированные дескрипторы получены путем объединения информации о химическом строении повторяющихся звеньев органических гомополимеров и их экспериментальных и рассчитанных в рамках инкрементального подхода значениях температуры стеклования. На примере полистиролов с различными положениями (2-, 3-, 4-) заместителя (фтор-, хлор-, бром-, метил- и этил-) в ароматическом кольце показано, что модель, построенная на основе комбинированных дескрипторов и метода случайного леса, в отличие от модели, построенной в рамках инкрементального подхода, достаточно точно (коэффициент детерминации в среднем  $R^2 = 0.81$ ) прогнозирует значения температуры стеклования органических гомополимеров с различным положением заместителя в ароматическом кольце.

3. По результатам моделирования на количественном уровне показано, что температура стеклования органических гомополимеров:

- прямо пропорциональна параметру, связанному с молекулярным объемом повторяющегося звена полимера и интерпретируемому как мера гибкости макромолекул (эта закономерность согласуется с термодинамическими теориями стеклования полимеров и кинетическими теориями М.В. Волькенштейна-О.Б. Птицына и Ю.Я. Готлиба-О.Б. Птицына);

- обратно пропорциональна сумме двух параметров, один из которых характеризует совокупность всех типов межмолекулярных взаимодействий (эта закономерность согласуется с теорией межмолекулярных связей С.Н. Журкова и флуктуационной теорией стеклования полимеров), а второй – долю свободного объема (эта закономерность согласуется с теорией свободного объема).

Показано, что электронные свойства повторяющихся звеньев органических гомополимеров (средняя поляризуемость, дипольный момент, потенциал ионизации, сродство к электрону, энергетический зазор между высшей занятой молекулярной орбиталью и низшей свободной молекулярной орбиталью, химический потенциал, химическая жесткость, электрофильность) обладают статистически значимой корреляцией с параметром, который в связи «структура – температура стеклования органических гомополимеров» характеризует совокупность всех типов межмолекулярных взаимодействий, включая диполь-дипольные (слабые взаимодействия), водородные связи (сильные взаимодействия) и электростатические (сильные взаимодействия).

Перспективы дальнейшей разработки темы диссертации: 1) учет в построенной модели стереорегулярности макромолекул, молекулярно-массовых характеристик и степени

кристалличности органических гомополимеров; 2) развитие предложенной методологии построения модели на сополимеры.

### Цитируемые работы

1. Askadskii, A.A. Computational materials science of polymers / A.A. Askadskii. – Cambridge: Cambridge International Science Publishing, 2003. – 696 p.

**Основное содержание диссертации изложено в следующих работах:**

*Статьи в рецензируемых изданиях, рекомендованных*

*ВАК Минобрнауки России для размещения материалов диссертаций*

1. **Шадрина, Г.Р.** Гибридный подход при прогнозировании температур стеклования органических гомополимеров: сочетание модели QSPR и метода инкрементов / Г.Р. Шадрина, В.И. Анисимова, И.С. Родионов, А.А. Балдинов, Н.В. Улитин, Я.Л. Люлинская, К.А. Терещенко, Д.А. Шиян // Вестник технологического университета. – 2025. – Т. 28, №3. – С. 68-74.

2. Улитин, Н.В. Интерпретация закономерности «структура-температура стеклования» для органических гомополимеров с использованием методов инкрементов и «случайного леса», а также теории функционала плотности / Н.В. Улитин, **Г.Р. Шадрина**, В.И. Анисимова, И.С. Родионов, А.А. Балдинов, Я.Л. Люлинская, К.А. Терещенко, Д.А. Шиян // Журнал структурной химии. – 2025. – Т. 66, №5. – Статья 147275. (англ. версия: Ulitin, N.V. Interpretation of the structure–glass transition temperature relationship for organic homopolymers with the use of increment, random forest, and density functional theory methods / N.V. Ulitin, G.R. Shadrina, V.I. Anisimova, I.S. Rodionov, A.A. Baldinov, Ya.L. Lyulinskaya, K.A. Tereshchenko, D.A. Shiyan // Journal of Structural Chemistry. – 2025. – V. 66, №5. – P. 1095-1109.)

### *Материалы конференций*

1. **Шадрина, Г.Р.** Прогнозирование температуры стеклования органических гомополимеров с использованием молекулярных отпечатков и алгоритма случайного леса / Г.Р. Шадрина, Н.В. Улитин, А.Д. Лифанов, К.А. Терещенко, А.А. Балдинов, И.С. Родионов, М.Г. Казанская, А.О. Софьин, Д.А. Шиян // XXXIV Рос. молодеж. науч. конф. с междунар. уч-м, посвящ. 190-летию со дня рожд. Д.И. Менделеева «Проблемы теоретической и экспериментальной химии» (Екатеринбург, Уральский федеральный университет, 23-26 апреля 2024 г.): сб. тез. докл. – Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2024. – С. 61.

2. **Шадрина, Г.Р.** О влиянии межмолекулярных взаимодействий на температуру стеклования органических гомополимеров / Г.Р. Шадрина, А.А. Балдинов, Н.В. Улитин, В.И. Анисимова, А.Д. Лифанов, Д.А. Шиян, К.А. Терещенко, И.С. Родионов, М.Г. Казанская, Е.С. Воробьев, И.А. Суворова // IX Всерос. науч. конф. «Теоретические и экспериментальные исследования процессов синтеза, модификации и переработки полимеров» (Уфа, Уфимский университет науки и технологий, 3-4 июня 2024 г.): сб. тез. докл. – Уфа: РИЦ УУНиТ, 2024. – С. 38-40.

3. **Шадрина, Г.Р.** Анализ факторов, влияющих на температуру стеклования органических гомополимеров, с привлечением машинного обучения/ Г.Р. Шадрина, Н.В. Улитин, А.Д. Лифанов, К.А. Терещенко, Д.А. Шиян, М.Г. Казанская, А.А. Балдинов, И.С. Родионов, Е.С. Воробьев // IX Всерос. науч. конф. «Теоретические и экспериментальные исследования процессов синтеза, модификации и переработки полимеров» (Уфа, Уфимский университет науки и технологий, 3-4 июня 2024 г.): сб. тез. докл. – Уфа: РИЦ УУНиТ, 2024. – С. 75-77.

4. **Шадрина, Г.Р.** Модель для прогнозирования температуры стеклования органических гомополимеров на основе метода инкрементов с использованием алгоритма случайного леса / Г.Р. Шадрина, Н.В. Улитин, В.И. Анисимова, А.А. Балдинов, И.С. Родионов, Д.А. Шиян, К.А. Терещенко, Я.Л. Люлинская// IV Всерос. науч. конф. (с междунар. уч-м) преп-й и студ-в вузов «Актуальные проблемы науки о полимерах» (Казань, Казанский национальный исследовательский технологический университет, 23-26 сентября 2024 г.): сб. тез. докл. – Казань: Изд-во КНИТУ, 2024. – С. 202-205.

5. **Шадрина, Г.Р.** Использование дескрипторов и алгоритма случайного леса для прогнозирования температуры стеклования органических гомополимеров / Г.Р. Шадрина, А.Д. Лифанов, Н.В. Улитин, А.А. Балдинов, И.С. Родионов, Д.А. Шиян, М.Г. Казанская, А.А. Кулыгин, А.О. Софьин, К.А. Терещенко // Междунар. науч. конф. «Актуальные вопросы естествознания и функциональные полимеры для фармацевтики, нефтяной промышленности, экологии, био- и нанотехнологии», посвященная 125-летию проф. К. Жубанова (Казахстан, г. Актобе, Актюбинский региональный университет им. К. Жубанова, 25-27 сентября 2024 г.): сб. мат-в. – Актобе: Изд-во Актюб. рег. ун-та им. К. Жубанова, 2024. – С. 160-161.