

Г. Р. Шадрина, В. И. Анисимова, И. С. Родионов, А. А. Балдинов,
Н. В. Улитин, Я. Л. Люлинская, К. А. Терещенко, Д. А. Шиян

ГИБРИДНЫЙ ПОДХОД ПРИ ПРОГНОЗИРОВАНИИ ТЕМПЕРАТУР СТЕКЛОВАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ГОМОПОЛИМЕРОВ: СОЧЕТАНИЕ МОДЕЛИ QSPR И МЕТОДА ИНКРЕМЕНТОВ

Ключевые слова: алгоритмы машинного обучения, метод инкрементов, модель QSPR, органические гомополимеры.

Точное прогнозирование температуры стеклования, одной из важнейших характеристик полимеров, имеет ключевое значение для разработки и применения полимеров с требуемыми свойствами. Прогнозирование температур стеклования полимеров традиционно основывалось на полумпирических методах, таких как метод инкрементов А.А. Аскадского, однако развитие вычислительных технологий и алгоритмов машинного обучения открывает новые перспективы для повышения точности прогнозов. Целью настоящей работы стало создание гибридного подхода к прогнозированию температуры стеклования органических гомополимеров на основе сочетания метода А.А. Аскадского и модели QSPR. Это позволит объединить преимущества теоретического анализа температур стеклования гомополимеров с возможностями машинного обучения для более точного прогнозирования свойств полимеров. В рамках исследования были использованы следующие алгоритмы машинного обучения: случайный лес (Random Forest), метод *k* ближайших соседей (K-Nearest Neighbors) и многослойный перцептрон (MLP). Молекулярная структура полимеров была представлена в виде дескрипторов двух типов: структурные ключи (MACCSKeys) и отпечатки Моргана (Morgan fingerprints), отражающие различные аспекты строения повторяющихся звеньев органических гомополимеров. Для повышения точности прогнозов была проведена оптимизация гиперпараметров алгоритма случайного леса, что позволило достичь коэффициента детерминации (R^2) до 0.77 на тестовой выборке. Проведен сравнительный анализ эффективности различных алгоритмов машинного обучения и типов дескрипторов. Установлено, что использование отпечатков Моргана, учитывающих пространственное расположение фрагментов молекул, обеспечивает более высокую точность прогнозов по сравнению со структурными ключами, которые отражают только наличие или отсутствие определенных структурных элементов. Особое внимание уделено прогнозированию температур стеклования изомерных органических гомополимеров, для которых учет пространственного расположения заместителей является критически важным. Результаты работы демонстрируют перспективность применения методов машинного обучения для прогнозирования температур стеклования полимеров на основе теорий стеклования, а также указывают на необходимость дальнейшего исследования подобных гибридных моделей.

G. R. Shadrina, V. I. Anisimova, I. S. Rodionov, A. A. Baldinov,
N. V. Ulitin, Ya. L. Lyulinskaya, K. A. Tereshchenko, D. A. Shiyan

A HYBRID APPROACH FOR PREDICTING GLASS TRANSITION TEMPERATURES OF ORGANIC HOMOPOLYMERS: QSPR MODELING COMBINED WITH THE INCREMENTAL METHOD

Keywords: machine learning algorithms, incremental method, QSPR model, organic homopolymers.

Accurate prediction of the glass transition temperature, one of the most critical characteristics of polymers, is key to developing and applying polymers with desired properties. Traditionally, polymer glass transition temperature prediction has relied on semi-empirical methods, such as the A.A. Askadskii incremental method; however, the development of computational technologies and machine learning algorithms is opening new avenues for improving prediction accuracy. The aim of this work was to create a hybrid approach for predicting the glass transition temperature of organic homopolymers by combining the A.A. Askadskii method and a QSPR model. This combines the advantages of theoretical analysis of homopolymer glass transition temperatures with the capabilities of machine learning for more accurate polymer property prediction. The following machine learning algorithms were used in this study: Random Forest, K-Nearest Neighbors, and Multilayer Perceptron (MLP). The molecular structure of the polymers was represented using two types of descriptors: MACCSKeys and Morgan fingerprints, which reflect different aspects of the structure of the repeating units of organic homopolymers. To improve prediction accuracy, the hyperparameters of the Random Forest algorithm were optimized, achieving a coefficient of determination (R^2) of up to 0.77 on the test set. A comparative analysis of the effectiveness of various machine learning algorithms and descriptor types was performed. It was found that the use of Morgan fingerprints, which account for the spatial arrangement of molecular fragments, provides higher prediction accuracy compared to structural keys, which only reflect the presence or absence of certain structural elements. Special attention was paid to predicting the glass transition temperatures of isomeric organic homopolymers, for which accounting for the spatial arrangement of substituents is critical. The results demonstrate the promise of using machine learning methods for predicting polymer glass transition temperatures based on glass transition theories, and indicate the need for further research into similar hybrid models.

Введение

Температура стеклования полимера (T_g) – это важная характеристика, которая определяет его переход из стеклообразного состояния в высокоэластическое [1]. Этот переход связан с

изменением подвижности макромолекул: ниже T_g макромолекулы зафиксированы в пространстве, а выше – приобретают подвижность, что приводит к значительным изменениям механических и физических свойств. Различают два типа стеклования: структурное и механическое [2, 3].

Структурное стеклование характеризуется фиксацией положения цепей при охлаждении, тогда как механическое стеклование характеризуется фиксацией положения макромолекул в пространстве, прежде всего, за счет действия силового поля, что позволяет полимеру перейти в стеклообразное состояние при более высоких температурах [2, 3]. В рамках данного исследования основное внимание уделяется температуре структурного стеклования, которая далее будет называться просто температурой стеклования.

Температура стеклования играет важную роль в определении области применения полимеров [1, 4-6]. При температурах ниже T_g полимеры демонстрируют высокую жесткость и хрупкость, что делает их подходящими для использования в качестве конструкционных материалов [1, 4-6]. В диапазоне температур выше T_g , но ниже температуры текучести, полимеры переходят в высокоэластическое состояние и могут применяться как эластичные [1, 4-6]. Таким образом, T_g является предельной температурой, до которой материал сохраняет свои механические свойства без проявления ползучести [7].

Определение температуры стеклования осуществляется с использованием статических и динамических методов [8-10]. Статические методы включают термомеханический анализ (измерение деформации под нагрузкой) [11], дифференциальную сканирующую калориметрию (измерение теплового потока) [12] и дилатометрические методы (измерение изменений объема или линейных размеров) [13]. Динамические методы, такие как динамический термомеханический анализ [14] и диэлектрический анализ [15], позволяют учитывать влияние внешних периодических воздействий на свойства материала. Каждый из этих методов имеет свои преимущества и ограничения, что делает их выбор зависимым от исследуемых свойств и условий эксперимента.

Для объяснения природы стеклования разработаны различные теории стеклования. Термодинамические теории рассматривают этот процесс как фазовый переход второго рода [1]. Кинетические теории связывают стеклование с замедлением перестройки структуры полимера при изменении температуры или давления [1]. Теория локальных межмолекулярных связей предполагает «замораживание» сегментов макромолекул из-за межмолекулярных взаимодействий [1].

Для расчета T_g на основе структуры полимеров используются такие методы, как метод ван Кревелена [16], метод Бицерано [17] и метод А.А. Аскадского [18-20]. Метод ван Кревелена основан на аддитивности вкладов химических групп в свойства полимера, но не учитывает межмолекулярные взаимодействия [16]. Метод Бицерано использует регрессионные корреляции между индексами связанности атомов в повторяющемся звене полимера [17].

Метод А.А. Аскадского учитывает как вклады (инкременты) отдельных атомов, так и вклады межмолекулярных взаимодействий, что делает его

наиболее универсальным подходом для анализа свойств линейных, разветвленных и сетчатых полимеров [18-20].

Современные исследования все чаще используют методы машинного обучения для прогнозирования температуры стеклования [21, 23, 25]. Эти методы представляют структуру молекул в виде числовых дескрипторов, которые затем используются для построения моделей связи «структура-свойство» (Quantitative Structure-Property Relationship, или QSPR) [21, 23, 25]. Однако существующие подходы редко учитывают физико-химические теории стеклования, что ограничивает их точность.

Целью настоящей работы стало создание гибридного подхода к прогнозированию температуры стеклования органических гомополимеров на основе сочетания метода А.А. Аскадского и модели QSPR.

Экспериментальная часть

В качестве теоретической основы для реализации модели QSPR использовали формулу метода инкрементов А.А. Аскадского [18-20]:

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

где ΔV_i – инкременты ван-дер-ваальсовых объемов атомов, входящих в структуру повторяющегося звена макромолекулы, который определяется на основе ван-дер-ваальсовых радиусов атомов и длин связей с ближайшими их соседями; a_i – константы для каждого атома, которые характеризуют энергию слабых дисперсионных взаимодействий; b_j – константы для полярных групп, которые характеризуют вклад специфического межмолекулярного взаимодействия.

Модель QSPR прогнозировала не саму температуру стеклования, а значения инкрементов $\sum_i \Delta V_i$, $\sum_i a_i \Delta V_i$, $\sum_j b_j$. Инкременты прогнозировали двумя способами – совместно (результат прогнозирования – все три инкремента $\sum_i \Delta V_i$,

$\sum_i a_i \Delta V_i$, $\sum_j b_j$) и прямо (по отдельности каждый).

Исходная база данных [18-20] включала сведения о структурах 1055 органических гомополимеров и их температурах стеклования.

Значения инкрементов $\sum_i \Delta V_i$, $\sum_i a_i \Delta V_i$, $\sum_j b_j$ рассчитывали по формулам, приведенным в работе [18].

Для проведения расчетов значений инкрементов реализовали алгоритм идентификации фрагментов – атомов и их окружения [18-20] – в структуре повторяющегося звена полимера с использованием шаблонов подструктур SMARTS [22].

Недостатком данного алгоритма является его неспособность отличать фрагменты, содержащие атомы переменной валентности (например, серу), поскольку шаблон SMARTS в таком случае

описывает сразу несколько различных фрагментов. Поэтому было принято решение исключить 233 органических гомополимера из базы данных (822 вошли в итоговую базу данных).

Необходимо отметить, что экспериментальные значения температур стеклования, приведенные в [18-20] были получены различными методами, имеющими разные погрешности. Однако объем базы данных позволяет модели воспринимать погрешности не как выбросы, а как дисперсию данных, что в конечном итоге позволяет модели прогнозировать корректные зависимости.

В задачах прогнозирования свойств полимеров широко применяются структурные ключи (MACCSKeys, МК) [24] и молекулярные отпечатки Моргана (Morgan fingerprints, MF) [26]. В данной работе провели сравнительный анализ эффективности этих дескрипторов для прогнозирования температуры стеклования полимеров с целью выбора наиболее точного варианта.

Структурные ключи MACCSKeys представляют собой битовую строку фиксированной длины (обычно 136 бит), где каждому биту соответствует определенный фрагмент из заранее заданной библиотеки [24]. Значение «1» в строке указывает на наличие данного фрагмента в молекуле, а «0» – на его отсутствие (рис. 1).

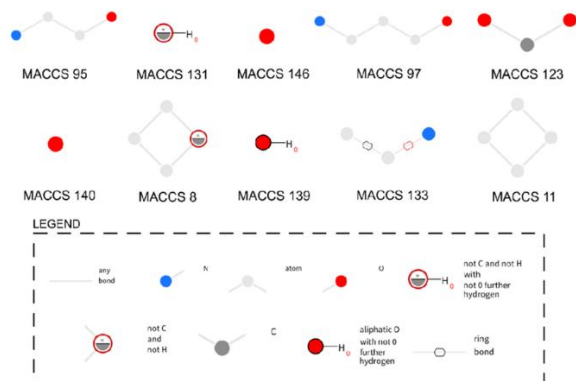


Рис. 1 – Кодирование химических структур для анализа данных с помощью дескрипторов MACCSKeys

Fig. 1 – Encoding of chemical structures for data analysis using MACCSKeys descriptors

Молекулярные отпечатки Моргана используют более сложную кодировку, учитывающую не только присутствие определенных фрагментов, но и их расположение относительно друг друга. Расчет этих дескрипторов основан на итеративном расширении фрагментов молекулы и применении хеш-функций для их представления в виде числовых векторов (рис. 2).

В работе провели тестирование обеих групп дескрипторов для определения их эффективности в прогнозировании температуры стеклования органических гомополимеров.

Любой метод машинного обучения представляет собой алгоритм, определяющий принципы обработки данных и принятия решений. На практике чаще используются готовые алгоритмы из

специализированных библиотек, написанных на языке программирования Python. Для выбора наиболее эффективного метода машинного обучения при моделировании зависимости «дескрипторы, описывающие химические структурные формулы повторяющихся звеньев полимеров – значения инкрементов для определения температуры стеклования» было проведено тестирование следующих функций из библиотеки scikit-learn [27].

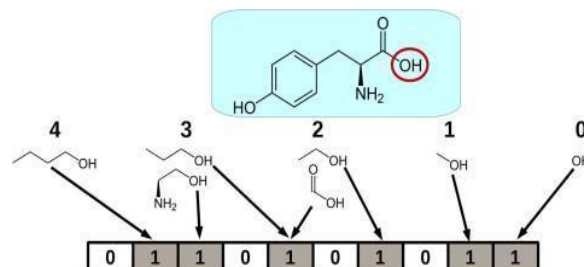


Рис. 2 – Кодирование химических структур для анализа данных с помощью дескрипторов Morgan fingerprints

Fig. 2 – Encoding of chemical structures for data analysis using Morgan fingerprints

RandomForestRegressor – метод случайного леса, представляющий собой ансамбль решений на основе множества деревьев решений [28].

KNeighborsRegressor – метод k ближайших соседей, основанный на принципе, что объекты с похожими характеристиками имеют схожие значения целевой переменной [29].

MLPRegressor – многослойный перцептрон (вариант нейронной сети), представляющий собой искусственную нейронную сеть с одним или несколькими скрытыми слоями [30].

Каждый из этих алгоритмов имеет гиперпараметры, которые можно настраивать для улучшения точности модели. В разных задачах оптимальные значения гиперпараметров могут отличаться, поэтому их подбор является важным этапом моделирования.

Для метода машинного обучения, продемонстрировавшего максимальную точность прогнозов среди испытанных, провели подбор гиперпараметров (параметров метода машинного обучения, которые используются для контроля процесса обучения) с помощью алгоритма GridSearchCV из библиотеки scikit-learn [27]. GridSearchCV систематически перебирает все возможные комбинации заданных гиперпараметров, оценивая качество модели для каждого варианта.

В ходе моделирования базу данных делили на обучающую выборку (80% гомополимеров из базы данных) и тестовую выборку (20% гомополимеров из базы данных). Обучение модели производили на обучающей выборке, а проверку качества прогнозируемых параметров – на тестовой выборке. По результатам моделирования получили прогнозируемые значения инкрементов $\sum_i \Delta V_i$,

$\sum_i a_i \Delta V_i$, $\sum_j b_j$ и рассчитали по формуле (1)

прогнозируемое значение температуры стеклования $T_{g \text{ calc}}$. Качество модели оценивали путем сравнения $T_{g \text{ calc}}$ с $T_{g \text{ lnk}}$ и экспериментальными данными температур стеклования $T_{g \text{ exp}}$ с помощью коэффициента детерминации R^2 .

Результаты и их обсуждение

Результаты прогнозирования инкрементов с использованием модели QSPR, основанной на различных алгоритмах машинного обучения без оптимизации гиперпараметров и дескрипторов, представлены в таблице. Точность модели R^2 определяли путем сравнения спрогнозированных значений инкрементов с рассчитанными значениями инкрементов, полученных методом А.А. Аскадского [18-20].

По таблице 1 видно, что наибольшую точность прогнозирования продемонстрировала модель QSPR на основе алгоритма случайного леса. При этом точность модели R^2 составила 0.757 для структурных ключей и 0.739 для молекулярных отпечатков Моргена, что указывает на высокую прогностическую способность данной модели.

Таблица 1 – Сравнительная характеристика алгоритмов машинного обучения для прогнозирования температуры стеклования органических гомополимеров

Table 1 – Comparative characterization of machine learning algorithms for predicting the glass transition temperature of organic homopolymers

Алгоритм машинного обучения из библиотеки scikit-learn	Дескриптор	R^2
RandomForestRegressor	MF	0.739
	MK	0.757
KNeighborsRegressor	MF	0.660
	MK	0.690
MLPRegressor	MF	0.490
	MK	0.450

Алгоритм k ближайших соседей продемонстрировал значения R^2 , равные 0.69 и 0.66 для структурных ключей и молекулярных отпечатков Моргена соответственно, что также свидетельствует о приемлемом уровне точности, но существенно уступает показателям алгоритма случайного леса. В свою очередь, многослойный перцептрон, являющийся представителем нейронных сетей, показал гораздо более низкие значения R^2 – 0.45 и 0.49 для структурных ключей и молекулярных отпечатков Моргена соответственно. Это связано с тем, что нейронные сети требуют гораздо большего разнообразия данных для качественного обучения и более тщательный подбора как слоев, так и числа нейронов.

Таким образом, алгоритм случайного леса оказался наиболее эффективным для прогнозирования инкрементов, определяющих температуру стеклования полимеров. В связи с этим, на следующих этапах исследования использовали

алгоритм случайного леса для дальнейшего анализа модели.

Далее с использованием модели QSPR и алгоритма случайного леса провели совместное прогнозирование инкрементов ($\sum_i \Delta V_i$, $\sum_i a_i \Delta V_i$,

$\sum_j b_j$), рассчитали $T_{g \text{ calc}}$ на основе

спрогнозированных инкрементов и провели прямое прогнозирование инкрементов по отдельности (табл. 2).

Таблица 2 – Коэффициенты детерминации R^2 для различных прогнозируемых параметров с использованием модели QSPR и алгоритма случайного леса

Table 2 – Determination coefficients R^2 for different predicted parameters using QSPR model and random forest algorithm

Прогнозируемый параметр	R^2
$(\sum_i \Delta V_i, \sum_i a_i \Delta V_i, \sum_j b_j)$	0.740
$T_{g \text{ calc}}$	0.770 (с $T_{g \text{ lnk}}$) 0.810 (с $T_{g \text{ exp}}$)
$\sum_i \Delta V_i$	0.770
$\sum_i a_i \Delta V_i$	0.730
$\sum_j b_j$	0.720

Предварительные результаты показали (табл. 2), что прямое прогнозирование инкрементов не обеспечивает существенного повышения точности прогнозов. В целях повышения точности прогнозирования температуры стеклования полимеров приняли решение отказаться от прямого прогнозирования инкрементов и дальнейшие исследования сосредоточить на разработке модели, прогнозирующей три взаимосвязанных инкремента (совместное прогнозирование).

Первоначально была предпринята попытка оптимизации гиперпараметров (ГП) алгоритма случайного леса. Подбор гиперпараметров осуществлялся с целью максимизации коэффициента детерминации R^2 на обучающей выборке. В результате получили следующие оптимальные значения гиперпараметров: 'bootstrap': False, 'criterion': 'squared_error', 'max_depth': None, 'max_features': 'sqrt', 'min_samples_leaf': 1, 'min_samples_split': 4, 'n_estimators': 500.

Несмотря на то, что оптимизация гиперпараметров обеспечила незначительное увеличение точности модели R^2 для всей выборки (на 0.01), она позволила увеличить точность прогнозирования $T_{g \text{ calc}}$ для отдельных гомополимеров, что указывает на потенциальную возможность повышения точности модели за счет индивидуальной настройки для различных классов соединений. Для более детальной оценки качества прогнозов на конкретных примерах был выбран

изомерный ряд полихлорстиролов, включающий поли-2-хлорстирол (П-2-ХС), поли-3-хлорстирол (П-3-ХС) и поли-4-хлорстирол (П-4-ХС). Результаты прогнозирования температуры стеклования для

данного изомерного ряда представлены в таблице. Поскольку П-2-ХС был учтен в обучающей выборке, в таблице он не представлен.

Таблица 3 – Результаты прогнозирования температуры стеклования для изомерного ряда полихлорстиролов на основе дескрипторов MACCSKeys (МК) и Morgan fingerprints (MF)

Table 3 – Glass transition temperature prediction results for the isomeric range of polychlorostyrenes based on MACCSKeys (MK) and Morgan fingerprints (MF) descriptors

Повторяющееся звено гомополимера	$T_{g \text{ exp}}, \text{ K [18]}$	$T_{g \text{ lnk}}, \text{ K [18]}$	$T_{g \text{ calc}}, \text{ K}$			
			MF до подбора ГП	MF после подбора ГП	МК до подбора ГП	МК после подбора ГП
П-3-ХС	363	410	400	376	400	403
П-4-ХС	388-401	410	403	400	400	403

Как видно по данным таблицы 3, модель QSPR на основе молекулярных отпечатков Моргана демонстрирует большую точность прогноза температуры стеклования.

Полученные результаты соответствуют теоретическим ожиданиям: метод структурных ключей, в отличие от отпечатков Моргана, предоставляет информацию только о наличии или отсутствии определенных структурных фрагментов, не учитывая их взаимное расположение. В связи с этим, для изомеров П-3-ХС и П-4-ХС спрогнозированные температуры стеклования на основе структурных ключей оказываются одинаковыми. В то же время, молекулярные отпечатки Моргана позволяют учесть влияние структуры гомополимеров на температуру стеклования и модель на их основе обладает большей точностью прогнозирования.

Несмотря на то, что общая точность прогнозов модели на основе молекулярных отпечатков Моргана несколько ниже по сравнению с моделью на основе структурных ключей (табл. 1), использование молекулярных отпечатков Моргана более предпочтительно за счет их возможности учитывать нюансы строения изомеров гомополимеров.

Стоит отметить интересное наблюдение – температура стеклования $T_{g \text{ calc}}$, рассчитанная с использованием прогнозируемых моделью QSPR значений инкрементов $\sum_i \Delta V_i$, $\sum_i a_i \Delta V_i$, $\sum_j b_j$, имеет большую корреляцию с экспериментальными значениями температур стеклования $T_{g \text{ exp}}$, чем с температурой стеклования, рассчитанной по методу инкрементов $T_{g \text{ lnk}}$ (табл. 2).

Данный факт дает основания полагать, что модель в ходе прогнозирования значений инкрементов $\sum_i \Delta V_i$, $\sum_i a_i \Delta V_i$, $\sum_j b_j$ может учитывать определенные закономерности структуры повторяющегося звена, изменяя исходный физический смысл инкрементов метода А.А. Аскадского, за счет чего увеличивается точность прогноза относительно именно реальных экспериментальных данных температур стеклования. Данная гипотеза может стать базой для дальнейших исследований.

Выводы

В представленной работе проведено исследование, направленное на создание гибридного подхода к прогнозированию температуры стеклования органических гомополимеров на основе сочетания метода инкрементов А.А. Аскадского и модели QSPR. В качестве базовых алгоритмов машинного обучения были выбраны случайный лес (Random Forest), метод k ближайших соседей (K-Nearest Neighbors), а также многослойный перцептрон (Multilayer Perceptron). Для представления и кодирования молекулярной структуры полимеров использовались два различных подхода: дескрипторы на основе структурных ключей (MACCSKeys) и молекулярных отпечатков Моргана (Morgan fingerprints).

В ходе исследования была выполнена процедура оптимизации гиперпараметров алгоритма случайного леса с целью достижения максимальной точности прогнозирования. В результате оптимизации удалось достичь коэффициента детерминации R^2 на уровне 0.77, что свидетельствует об удовлетворительной прогностической способности полученной модели QSPR. Анализ результатов показал, что учет пространственного расположения фрагментов молекул, обеспечиваемый применением дескрипторов на основе отпечатков Моргана, является существенным фактором, влияющим на точность прогнозирования температуры стеклования органических гомополимеров. Данный вывод особенно важен для изомерных полимеров, характеризующихся идентичным элементарным составом, но различным расположением атомов в пространстве и, как следствие, различной температурой стеклования.

Полученные результаты свидетельствуют о необходимости дальнейшего исследования гибридных подходов прогнозирования температур стеклования полимеров, основанных на модели QSPR и на теориях стеклования полимеров. В частности, следует детальнее изучить, как модель QSPR «интерпретирует» структуру повторяющегося звена полимера и какие именно закономерности она выявляет на основе теорий стеклования, для улучшения прогнозирования температуры

стеклования. Это может привести к более глубокому пониманию связи между структурой полимера и его физическими свойствами.

Литература

1. Sperling, L. H. Introduction to Physical Polymer Science / L. H. Sperling. – Wiley, 2005. – 845 p.
2. Rieger, J. The glass transition temperature T_g of polymers—Comparison of the values from differential thermal analysis (DTA, DSC) and dynamic mechanical measurements (torsion pendulum) / J. Rieger // Polymer Testing. – 2001. – Vol. 20. – № 2. – P. 199-204.
3. Mechanical glass transition revealed by the fracture toughness of metallic glasses / J. Ketkaew, W. Chen, H. Wang [et al.] // Nature Communications. – 2018. – V. 9. – № 1. – Article 3271.
4. Physical Properties of Polymers Handbook / ed. J. E. Mark. – 2nd ed. – New York, NY : Springer New York, 2007. – 1076 p.
5. Young, R. J. Introduction to polymers / R. J. Young, P. A. Lovell. – 3rd ed. – Boca Raton : CRC Press, 2011. – 668 p.
6. Ehrenstein, G. W. Polymeric materials: structure - properties - applications : Hanser eLibrary. Polymeric materials / G. W. Ehrenstein. – München : Hanser Verlag, 2001. – 292 p.
7. Menard, K. P. Dynamic Mechanical Analysis: A Practical Introduction, Second Edition. Dynamic Mechanical Analysis / K. P. Menard. – CRC Press, 2008. – 240 p.
8. Wunderlich, B. Thermal analysis of polymeric materials / B. Wunderlich, B. Wunderlich. – Berlin : Springer, 2005. – 894 p.
9. Glass transition temperature from the chemical structure of conjugated polymers / R. Xie, A. R. Weisen, Y. Lee [et al.] // Nature Communications. – 2020. – V. 11. – № 1. – Article 893.
10. Prediction of Glass Transition Temperature of Polymers Using Simple Machine Learning / J. F. Fatriansyah, B. D. P. Linuwih, Y. Andreano [et al.] // Polymers. – 2024. – V. 16. – № 17. – Article 2464.
11. Films Based on a Blend of PVC with Copolymer of 3-Hydroxybutyrate with 3-Hydroxyhexanoate / E. V. Belukhichev, V. E. Sitnikova, E. O. Samuylova [et al.] // Polymers. – 2020. – V. 12. – № 2. – Article 270.
12. Challenge and Solution of Characterizing Glass Transition Temperature for Conjugated Polymers by Differential Scanning Calorimetry / Z. Qian, L. Galuska, W. W. McNutt [et al.] // Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics. – 2019. – V. 57. – № 23. – P. 1635-1644.
13. Kamasa, P. Experimental aspects of temperature-modulated dilatometry of polymers / P. Kamasa, P. Myśliński, M. Pyda // Thermochimica Acta. – 2006. – V. 442. – № 1-2. – P. 48-51.
14. Kutnar, A. Preliminary studies for use of dynamic mechanical analysis (DMA) to verify intensity of thermal wood modifications / A. Kutnar, R. Widmann, I. Brémaud // International Wood Products Journal. – 2013. – V. 4. – № 3. – P. 158-165.
15. Schultz, J. W. Dielectric Spectroscopy in Analysis of Polymers / J. W. Schultz // Encyclopedia of Analytical Chemistry / ed. R. A. Meyers. – Wiley, 2000. – P. 19.
16. Krevelen, D. W. Properties of polymers: their correlation with chemical structure their numerical estimation and prediction from additive group contributions. Properties of polymers / D. W. Krevelen, K. te Nijenhuis. – 4th, completely rev. ed. – Amsterdam : Elsevier, 2009. – 1004 p.
17. Bicerano, J. Prediction of Polymer Properties / J. Bicerano. – 1st ed. – CRC Press, 2002. – 784 p.
18. Askadskii, A. A. Computational materials science of polymers / A. A. Askadskii. – Cambridge : Cambridge International Science Publishing, 2003. – 711 p.
19. Askadskii, A. A. Further research on the improvement of models and computer programs for the prediction and analysis of the physical properties of polymers / A. A. Askadskii, T. A. Matseevich // Physics-Uspekhi. – 2023. – V. 66. – № 06. – P. 586-627.
20. Machine Learning with Enormous “Synthetic” Data Sets: Predicting Glass Transition Temperature of Polyimides Using Graph Convolutional Neural Networks / I. V. Volgin, P. A. Batyr, A. V. Matseevich [et al.] // ACS Omega. – 2022. – V. 7. – № 48. – P. 43678-43691.
21. Prediction of the Formulation Dependence of the Glass Transition Temperatures of Amine-Epoxy Copolymers Using a QSPR Based on the AM1 Method / J. A. Morrill, R. E. Jensen, P. H. Madison, C. F. Chabalowski // Journal of Chemical Information and Computer Sciences. – 2004. – V. 44. – № 3. – P. 912-920.
22. SMARTS - A Language for Describing Molecular Patterns.
23. Characterising the glass transition temperature-structure relationship through a recurrent neural network / C. Borredon, L. A. Miccio, S. Cervený, G. A. Schwartz // Journal of Non-Crystalline Solids: X. – 2023. – V. 18. – Article 100185.
24. Reoptimization of MDL Keys for Use in Drug Discovery / J. L. Durant, B. A. Leland, D. R. Henry, J. G. Nourse // Journal of Chemical Information and Computer Sciences. – 2002. – V. 42. – № 6. – P. 1273-1280.
25. Khan, P. M. QSPR modelling for prediction of glass transition temperature of diverse polymers / P. M. Khan, K. Roy // SAR and QSAR in Environmental Research. – 2018. – V. 29. – № 12. – P. 935-956.
26. Rogers, D. Extended-Connectivity Fingerprints / D. Rogers, M. Hahn // Journal of Chemical Information and Modeling. – 2010. – V. 50. – № 5. – P. 742-754.
27. Scikit-learn: Machine Learning in Python / F. Pedregosa, G. Varoquaux, A. Gramfort [et al.]. – 2012. – Scikit-learn.
28. Breiman, L. Random Forests / L. Breiman // Machine Learning. – 2001. – V. 45. – № 1. – P. 5-32.
29. Cover, T. Nearest neighbor pattern classification / T. Cover, P. Hart // IEEE Transactions on Information Theory. – 1967. – V. 13. – № 1. – P. 21-27.
30. Rumelhart, D. E. Learning representations by back-propagating errors / D. E. Rumelhart, G. E. Hinton, R. J. Williams // Nature. – 1986. – V. 323. – № 6088. – P. 533-536.

References

1. Sperling, L. H. Introduction to Physical Polymer Science / L. H. Sperling. – Wiley, 2005. – 845 p.
2. Rieger, J. The glass transition temperature T_g of polymers—Comparison of the values from differential thermal analysis (DTA, DSC) and dynamic mechanical measurements (torsion pendulum) / J. Rieger // Polymer Testing. – 2001. – Vol. 20. – № 2. – P. 199-204.
3. Mechanical glass transition revealed by the fracture toughness of metallic glasses / J. Ketkaew, W. Chen, H. Wang [et al.] // Nature Communications. – 2018. – V. 9. – № 1. – Article 3271.
4. Physical Properties of Polymers Handbook / ed. J. E. Mark. – 2nd ed. – New York, NY : Springer New York, 2007. – 1076 p.
5. Young, R. J. Introduction to polymers / R. J. Young, P. A. Lovell. – 3rd ed. – Boca Raton : CRC Press, 2011. – 668 p.
6. Ehrenstein, G. W. Polymeric materials: structure - properties - applications : Hanser eLibrary. Polymeric materials / G. W. Ehrenstein. – München : Hanser Verlag, 2001. – 292 p.

7. Menard, K. P. Dynamic Mechanical Analysis: A Practical Introduction, Second Edition. Dynamic Mechanical Analysis / K. P. Menard. – CRC Press, 2008. – 240 p.
8. Wunderlich, B. Thermal analysis of polymeric materials / B. Wunderlich, B. Wunderlich. – Berlin : Springer, 2005. – 894 p.
9. Glass transition temperature from the chemical structure of conjugated polymers / R. Xie, A. R. Weisen, Y. Lee [et al.] // Nature Communications. – 2020. – V. 11. – № 1. – Article 893.
10. Prediction of Glass Transition Temperature of Polymers Using Simple Machine Learning / J. F. Fatriansyah, B. D. P. Linuwih, Y. Andreano [et al.] // Polymers. – 2024. – V. 16. – № 17. – Article 2464.
11. Films Based on a Blend of PVC with Copolymer of 3-Hydroxybutyrate with 3-Hydroxyhexanoate / E. V. Belukhichev, V. E. Sitnikova, E. O. Samuylova [et al.] // Polymers. – 2020. – V. 12. – № 2. – Article 270.
12. Challenge and Solution of Characterizing Glass Transition Temperature for Conjugated Polymers by Differential Scanning Calorimetry / Z. Qian, L. Galuska, W. W. McNutt [et al.] // Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics. – 2019. – V. 57. – № 23. – P. 1635-1644.
13. Kamasa, P. Experimental aspects of temperature-modulated dilatometry of polymers / P. Kamasa, P. Myśliński, M. Pyda // Thermochimica Acta. – 2006. – V. 442. – № 1-2. – P. 48-51.
14. Kutnar, A. Preliminary studies for use of dynamic mechanical analysis (DMA) to verify intensity of thermal wood modifications / A. Kutnar, R. Widmann, I. Brémaud // International Wood Products Journal. – 2013. – V. 4. – № 3. – P. 158-165.
15. Schultz, J. W. Dielectric Spectroscopy in Analysis of Polymers / J. W. Schultz // Encyclopedia of Analytical Chemistry / ed. R. A. Meyers. – Wiley, 2000. – P. 19.
16. Krevelen, D. W. Properties of polymers: their correlation with chemical structure their numerical estimation and prediction from additive group contributions. Properties of polymers / D. W. Krevelen, K. te Nijenhuis. – 4th, completely rev. ed. – Amsterdam : Elsevier, 2009. – 1004 p.
17. Bicerano, J. Prediction of Polymer Properties / J. Bicerano. – 1st ed. – CRC Press, 2002. – 784 p.
18. Askadskii, A. A. Computational materials science of polymers / A. A. Askadskii. – Cambridge : Cambridge International Science Publishing, 2003. – 711 p.
19. Askadskii, A. A. Further research on the improvement of models and computer programs for the prediction and analysis of the physical properties of polymers / A. A. Askadskii, T. A. Matseevich // Physics-Uspekhi. – 2023. – V. 66. – № 06. – P. 586-627.
20. Machine Learning with Enormous “Synthetic” Data Sets: Predicting Glass Transition Temperature of Polyimides Using Graph Convolutional Neural Networks / I. V. Volgin, P. A. Batyr, A. V. Matseevich [et al.] // ACS Omega. – 2022. – V. 7. – № 48. – P. 43678-43691.
21. Prediction of the Formulation Dependence of the Glass Transition Temperatures of Amine-Epoxy Copolymers Using a QSPR Based on the AM1 Method / J. A. Morrill, R. E. Jensen, P. H. Madison, C. F. Chabalowski // Journal of Chemical Information and Computer Sciences. – 2004. – V. 44. – № 3. – P. 912-920.
22. SMARTS - A Language for Describing Molecular Patterns.
23. Characterising the glass transition temperature-structure relationship through a recurrent neural network / C. Borredon, L. A. Miccio, S. Cerveny, G. A. Schwartz // Journal of Non-Crystalline Solids: X. – 2023. – V. 18. – Article 100185.
24. Reoptimization of MDL Keys for Use in Drug Discovery / J. L. Durant, B. A. Leland, D. R. Henry, J. G. Nourse // Journal of Chemical Information and Computer Sciences. – 2002. – V. 42. – № 6. – P. 1273-1280.
25. Khan, P. M. QSPR modelling for prediction of glass transition temperature of diverse polymers / P. M. Khan, K. Roy // SAR and QSAR in Environmental Research. – 2018. – V. 29. – № 12. – P. 935-956.
26. Rogers, D. Extended-Connectivity Fingerprints / D. Rogers, M. Hahn // Journal of Chemical Information and Modeling. – 2010. – V. 50. – № 5. – P. 742-754.
27. Scikit-learn: Machine Learning in Python / F. Pedregosa, G. Varoquaux, A. Gramfort [et al.]. – 2012. – Scikit-learn.
28. Breiman, L. Random Forests / L. Breiman // Machine Learning. – 2001. – V. 45. – № 1. – P. 5-32.
29. Cover, T. Nearest neighbor pattern classification / T. Cover, P. Hart // IEEE Transactions on Information Theory. – 1967. – V. 13. – № 1. – P. 21-27.
30. Rumelhart, D. E. Learning representations by back-propagating errors / D. E. Rumelhart, G. E. Hinton, R. J. Williams // Nature. – 1986. – V. 323. – № 6088. – P. 533-536.

© **Г. Р. Шадрина** – аспирант каф. общей химической технологии (ОХТ), Казанский национальный исследовательский технологический университет (КНИТУ), Казань, Россия, mindubaeva.gr@yandex.ru; **В. И. Анисимова** – доцент, каф. ОХТ, КНИТУ, anisimova.vvika@gmail.com; **И. С. Родионов** – ассистент, каф. ОХТ, КНИТУ, vip.ilya.00@mail.ru; **А. А. Балдинов** – ассистент, каф. ОХТ, КНИТУ, baldinov.andrei@yandex.ru; **Н. В. Улитин** – зав. каф., каф. ОХТ, КНИТУ, n.v.ulitin@mail.ru; **Я. Л. Люлинская** – ассистент, каф. ОХТ, КНИТУ, m23.lyulinskaya.y.l@inhn.ru, **К. А. Терешенко** – профессор, каф. ОХТ, КНИТУ, nucleurmind@yandex.ru; **Д. А. Шиян** – доцент, каф. ОХТ, КНИТУ, daria-shiyan@yandex.ru.

© **G. R. Shadrina** – PhD-Student, Department of General Chemical Technology (GCT) Kazan National Research Technological University (KNRTU), Kazan, Russia, mindubaeva.gr@yandex.ru; **V. I. Anisimova** – Associate Professor, the GCT department, KNRTU, anisimova.vvika@gmail.com; **I. S. Rodionov** – Assistant, the GCT department, KNRTU, vip.ilya.00@mail.ru; **A. A. Baldinov** – Assistant, the GCT department, KNRTU, baldinov.andrei@yandex.ru; **N. V. Ulitin** – Head of the GCT department, KNRTU, n.v.ulitin@mail.ru; **Ya. L. Lyulinskaya** – Assistant, the GCT department, KNRTU, m23.lyulinskaya.y.l@inhn.ru, **K. A. Tereshchenko** – Professor, the GCT department, KNRTU, nucleurmind@yandex.ru; **D. A. Shiyan** – Associate Professor, the GCT department, KNRTU, daria-shiyan@yandex.ru.

Дата поступления рукописи в редакцию – 15.03.25.

Дата принятия рукописи в печать – 22.03.25.