

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Шадриной Гузель Руслановны на тему «Анализ связи "структура – температура стеклования органических гомополимеров" в рамках теории химического строения органических соединений и теорий стеклования полимеров», представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 1.4.3 – Органическая химия

Развитие вычислительной химии, хемоинформатики и методов машинного обучения в последние годы существенно изменило подходы к исследованию взаимосвязей между химическим строением веществ и их физико-химическими свойствами. При этом одной из наиболее сложных и практически значимых задач остается прогнозирование характеристик полимерных материалов, определяющих область их применения. Температура стеклования относится к числу ключевых параметров, определяющих эксплуатационные свойства полимеров, однако ее экспериментальное определение требует значительных временных и материальных затрат. В связи с этим разработка вычислительных методов прогнозирования температуры стеклования на основании химического строения представляет собой актуальную научную задачу.

Особенность представленной диссертационной работы заключается в том, что автор не ограничивается построением очередной прогностической модели, а предлагает подход, объединяющий методы машинного обучения с классическими физико-химическими представлениями о природе стеклования полимеров. Подобная постановка задачи соответствует современным тенденциям развития хемоинформатики, согласно которым на первый план выходит не только достижение высокой точности прогнозирования, но и получение моделей, допускающих физическую интерпретацию и способных выявлять закономерности, лежащие в основе наблюдаемых свойств.

Научная новизна исследования определяется тем, что методы машинного обучения использованы не как самостоятельный инструмент прогнозирования, а как средство определения параметров, имеющих содержательный физический смысл в рамках инкрементальной модели А.А. Аскадского. Такой подход позволяет объединить преимущества статистического анализа больших массивов данных с накопленными представлениями химии высокомолекулярных соединений о влиянии строения макромолекул на температуру стеклования. Следует отметить, что подобные гибридные модели в настоящее время рассматриваются как одно из наиболее перспективных направлений развития вычислительного материаловедения.

Методическая часть исследования производит благоприятное впечатление. Автором проведено сравнение нескольких алгоритмов машинного обучения, выполнена оптимизация параметров моделей, рассмотрены различные варианты признакового описания химического строения повторяющихся звеньев полимеров и проведен анализ их влияния на качество прогнозирования. Такой подход свидетельствует о корректной постановке вычислительного эксперимента и понимании ограничений отдельных методов машинного обучения.

Несмотря на высокую научную ценность выполненного исследования, по автореферату возникают отдельные замечания и вопросы, имеющие преимущественно дискуссионный характер.

1. Автором показано преимущество молекулярных отпечатков Моргана по сравнению со структурными ключами при прогнозировании температуры стеклования. Вместе с тем остается открытым вопрос о влиянии радиуса отпечатка и длины бинарного вектора на устойчивость модели. Представление анализа чувствительности качества

прогнозирования к данным параметрам позволило бы более полно обосновать выбор используемого признакового описания.

2. При построении моделей используется случайное разделение данных на обучающую и тестовую выборки. Для задач прогнозирования свойств химических соединений существенное значение имеет структурная независимость тестового множества. В этой связи представляет интерес оценка разработанной модели при разделении данных по химическим семействам или с использованием кластеризации структур, что позволило бы более объективно оценить способность модели к прогнозированию свойств ранее не встречавшихся классов полимеров.
3. В работе проведена интерпретация параметров инкрементальной модели посредством корреляционного анализа с квантово-химическими характеристиками. Однако использование только коэффициентов корреляции не позволяет однозначно судить о причинно-следственной связи между выявленными зависимостями. Дополнительное применение методов оценки вклада отдельных структурных фрагментов или анализа важности признаков позволило бы усилить физико-химическую интерпретацию разработанной модели.
4. Предлагаемый подход ориентирован на прогнозирование температуры стеклования исходя исключительно из химического строения повторяющегося звена. Между тем известно, что существенное влияние на данную характеристику оказывают молекулярная масса, молекулярно-массовое распределение, степень кристалличности, регулярность строения макромолекулы и условия получения полимера. Более подробное обсуждение области применимости разработанной модели и факторов, остающихся за пределами рассмотрения, повысило бы практическую ценность исследования.

Важным достоинством работы является стремление автора к содержательной интерпретации результатов моделирования. В современных исследованиях нередко встречаются высокоточные вычислительные модели, внутренний механизм работы которых остается недоступным для анализа. В рассматриваемой диссертации, напротив, предпринята попытка установить связь между параметрами модели и фундаментальными характеристиками химического строения, включая молекулярный объем повторяющегося звена, интенсивность межмолекулярных взаимодействий и особенности электронной структуры молекул. Проведенный корреляционный анализ с использованием квантово-химических характеристик позволяет существенно повысить научную ценность полученных результатов, поскольку переводит исследование из области исключительно вычислительного прогнозирования в область анализа физико-химической природы изучаемых закономерностей.

Практическая значимость выполненного исследования также представляется несомненной. Предложенный подход может быть использован при цифровом проектировании новых полимерных материалов, предварительном отборе перспективных мономеров, сокращении объема дорогостоящих экспериментальных исследований и создании интеллектуальных систем поддержки разработки материалов с заданными эксплуатационными характеристиками. Особенно важно, что предложенная методика может быть адаптирована для прогнозирования и других свойств полимеров при наличии достаточного объема достоверных экспериментальных данных.

**Руководитель лаборатории искусственного интеллекта в новых материалах
АНО ВО «Университет Иннополис»**

Руслан Юрьевич Лукин

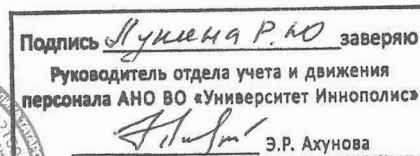
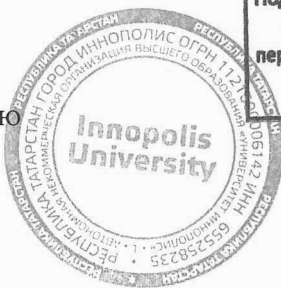
E-mail: r.lukin@innopolis.ru

Тел.: +7 (954) 584-43-14

Подпись 

«01» июня 2026 г.

Подпись Р.Ю. Лукина удостоверяю



Вход. № 05-9099
« 02 » 07 20 26 г.
подпись 