

УДК 541.6

ПРИМЕНЕНИЕ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ФАЗОВОГО ПОВЕДЕНИЯ ИНТЕРПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНЫХ КОМПЛЕКСОВ В ВОДНО-СОЛЕВЫХ СРЕДАХ

© 2025 г. И. В. Григорян^{1, 2, *}, Л. А. Антюфриева³, А. П. Григорян^{1, 4},
А. А. Коригодский⁵, Ц. Чень⁵, Ш. Ян.⁵, В. А. Пигарева⁶, А. Е. Тищенко¹,
Г. Б. Хомутов^{1, 2}, А. В. Сыбачин^{5, *}

¹ *Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова,
Ленинские горы, 1-2, Москва, 199991, Россия*

² *Институт радиотехники и электроники имени В.А. Котельникова РАН,
Россия, Москва, 125009*

³ *Сколковский институт науки и технологий, Инновационный центр Сколково,
Москва, 121205, Россия*

⁴ *Факультет космических исследований МГУ имени М.В. Ломоносова,
Ленинские горы, 1-52, Москва, 199991, Россия*

⁵ *Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова,
Ленинские горы, 1-3, Москва, 199991, Россия*

⁶ *Институт элементоорганических соединений имени А.Н. Несмеянова,
Вавилова, 28-1, Москва, 119334, Россия*

**e-mail: sybatchin@mail.ru*

Поступила в редакцию 30.01.2025 г.

После доработки 02.03.2025 г.

Принята к публикации 05.03.2025 г.

Водно-солевые растворы интерполиэлектrolитных комплексов (ИПЭК) представляют собой классический пример “умных” систем, фазовое равновесие в которых регулируется множеством факторов, связанных как с параметрами полимерных компонентов, так и с физическими и химическими свойствами среды. В данной работе представлена модель, созданная на основе машинного обучения, для прогнозирования области существования водорастворимых ИПЭК. Предложен подход независимого учёта физико-химических свойств полиэлектролитов и свойств среды. Разработанная модель универсальна и может быть использована для прогнозирования свойств многокомпонентных систем различной химической природы.

Ключевые слова: машинное обучение, ИИ, интерполиэлектrolитные комплексы, ИПЭК, IPESnet, polyBERT, фазовые разделения, полиэлектролиты, водно-солевые растворы, растворы полимеров

APPLICATION OF MACHINE LEARNING TO PREDICT PHASE BEHAVIOR OF INTERPOLYELECTROLYTE COMPLEXES IN WATER-SALT MEDIA

© 2025 г. I. V. Grigoryan, L. A. Antiufrieva, A. P. Grigoryan, A. A. Korigodsky, J. Chen, S. Yang, V. A. Pigareva, A.E.Tishchenko, G. B. Khomutov, A. V. Sybachin

Water-salt solutions of interpolyelectrolyte complexes (IPEC) are a classic example of “smart” systems, the phase equilibrium in which is regulated by many factors associated with both the parameters of the polymer components and the physical and chemical properties of the environment. This paper presents a model created on the basis of machine learning for predicting the region of existence of water-soluble IPECs. An approach is proposed for independently taking into account the physicochemical properties of polyelectrolytes and the properties of the environment. The developed model is universal and can be used to predict the properties of multicomponent systems of various chemical natures.

Keywords: Machine learning, AI, interpolyelectrolyte complexes, IPEC, IPECnet, phase separation, polyelectrolytes, water-salt media, polymer solutions

ВВЕДЕНИЕ

Водно-солевые растворы интерполиэлектrolитных комплексов (ИПЭК) – продуктов взаимодействия противоположно заряженных полиэлектролитов, представляют собою класс так называемых “умных полимеров”, поскольку их формирование и физико-химические свойства можно обратимо регулировать путём изменения множества внешних факторов, таких как: pH, ионная сила, температура среды и пр. [1–6]. Традиционный интерес к таким “умным полимерам” вызван возможностью их применения в широком спектре задач, включая выделение белков и нуклеиновых кислот, внутриклеточную доставку ДНК, создание биоцидных покрытий, функциональных мембран, использование в качестве структурообразователей сыпучих систем, систем очистки воды и т.д. [1, 4, 7–20].

Электростатические нестехиометрические интерполиэлектrolитные комплексы в водно-солевых растворах могут быть сформированы, когда полиэлектролит заданного заряда, именуемый “лиофилизующим”, (ЛПЭ) имеет мольный избыток мономерных звеньев по отношению к противоположно заряженному полиэлектролиту, именуемому “блокирующим”, (БПЭ). Данный комплекс содержит как области нескомпенсированного заряда, являющиеся гидрофильными, так и гидрофобные блоки, обусловленные областями, где реализуются кулоновские взаимодействия мономерных звеньев противоположно заряженных полиэлектролитов, а растворимость данных комплексов определяется в первую очередь гидрофобно-гидрофильным балансом системы [1, 3, 5, 18, 21, 22]. Также, растворимость комплексов зависит от природы функциональных групп полимеров, плотности заряда на макромолекулах, степеней полимеризации БПЭ и ЛПЭ и их соотношения [3, 23–29]. Отдельно стоит отметить, что одно и то же значение состава ИПЭК, выраженное в молярном отношении мономерных звеньев [БПЭ]/[ЛПЭ], может соответствовать принципиально различной структуре комплекса в зависимости от соотношений длин цепей макромолекул (см. рис. 1) [30]. Последний фактор является

принципиально важным, поскольку энергия Гиббса формирования электростатических комплексов с одинаковым значением [БПЭ]/[ЛПЭ] но с различными значениями степеней полимеризации реагирующих полиэлектролитов будет иметь одинаковую энтальпийную составляющую, т.к. число формирующихся солевых связей одинаково, но при этом различную энтропийную составляющую. В свою очередь, энтропийный фактор является ключевым в процессе формирования ИПЭК [3, 21].

Рис. 1. Схема ИПЭК, сформированных парами ЛПЭ и БПЭ с различными соотношениями степеней полимеризации. Длина цепи ЛПЭ больше длины цепи БПЭ (а), длина цепи ЛПЭ соизмерима с длиной цепи БПЭ (b), длина цепи ЛПЭ меньше длины цепи БПЭ (с) и длина цепи ЛПЭ много меньше длины цепи БПЭ (d). Воспроизведено из статьи [30] с разрешения правообладателя.

Одним из ключевых свойств, которые позволяют относить ИПЭК к “умным” полимерам, является способность обратимо претерпевать фазовое разделение в водно-солевых средах [1, 6, 25, 30–34]. Это реализуется за счёт возможности переноса цепей БПЭ как внутри ИПЭК, так и между отдельными ИПЭК и свободными ЛПЭ [34]. Введение низкомолекулярного электролита в систему, т.е. повышение ионной силы раствора, в первую очередь оказывает влияние на конформацию ЛПЭ, а также частично разрушает интерполиэлектролитные солевые связи [35–40]. В результате, в системе начинают сосуществовать стехиометричный водонерастворимый полиэлектролитный комплекс (СПЭК) и водорастворимый комплекс, состав которого может отличаться от исходного состава комплекса в гомогенной системе. Дальнейшее увеличение ионной силы приводит к смещению равновесия в сторону формирования нерастворимого СПЭК [6, 41]. Последующий рост ионной силы в конечном итоге приводит к разрушению

интерполиэлектролитных солевых связей и формированию гомогенной системы в которой ЛПЭ и БПЭ находятся в растворе, но не взаимодействуют [1, 3, 6, 23].

В ходе нашей работы в качестве мы будем анализировать влияние низкомолекулярного электролита NaCl в качестве параметра, определяющего ионную силу раствора. Другим ключевым параметром, влияющим на фазовые равновесия в водно-солевых растворах ИПЭК является состав исходной смеси $\phi = [\text{БПЭ}]/[\text{ЛПЭ}]$, отражающий соотношение противоположно заряженных полиэлектролитов в системе- в частных случаях состав смеси может соответствовать составу ИПЭК. В ранних исследованиях было продемонстрировано, что при последовательном добавлении раствора БПЭ к раствору ЛПЭ формирование водорастворимого комплекса наблюдается вплоть до критического значения $\phi < 1$, при этом с ростом значения ϕ концентрация низкомолекулярного электролита, приводящая к фазовому разделению в системе значительно снижается [1, 21, 24].

Несмотря на тот факт, что фазовые равновесия в водно-солевых растворах ИПЭК исследованы и описаны во множестве публикаций, предсказание возможности формирования водорастворимого ИПЭК в смесях заданного состава ϕ и заданной ионной силы всё ещё является неразрешённой задачей, которая может быть решена путём анализа данных и построения предсказательной модели.

Машинное обучение (Machine Learning, ML) – передовой метод, который существенно меняет современные подходы к исследованиям и разработкам в различных научных областях, включая химию[42–54]. Традиционные методы расчёта и моделирования в химии (например, квантово-механические расчёты, молекулярная динамика) зачастую оказываются недостаточно гибкими и производительными для решения сложных многопараметрических задач. Во-первых, химические процессы нередко протекают на разных масштабах (от атомарного до макроскопического), что требует учёта

большого числа взаимодействующих факторов. Во-вторых, многие явления слабо описываются строгими аналитическими уравнениями, так как содержат нелинейные зависимости и многоступенчатые механизмы. В-третьих, объёмы доступных экспериментальных и вычислительных данных стремительно растут, делая классические методы (опирающиеся на заранее известные формулы или упрощённые модели) всё менее эффективными в плане времени расчёта и точности прогноза.

В отличие от традиционных подходов, машинное обучение (ML) не пытается напрямую вывести универсальную формулу для описания системы. Вместо этого знание о сложных закономерностях «кодируется» в структуре обученной модели (например, нейронной сети), которая формируется на основе реальных данных. Это позволяет обрабатывать и анализировать многомерные, часто неоднородные наборы данных, обнаруживая скрытые корреляции, которые трудно, а порой и невозможно выявить классическими методами. Благодаря этому ML помогает быстрее находить оптимальные решения, прогнозировать свойства материалов или реакций, а также выявлять ключевые факторы, влияющие на эффективность химических процессов. Таким образом, гибкость и способность работать с большими объёмами сложных данных делают машинное обучение перспективным инструментом в тех ситуациях, когда традиционные методы оказываются недостаточными

Использование методов машинного обучения в химических исследованиях и в химической промышленности становится все более востребовано в связи с быстро растущим объемом экспериментальных данных и необходимости решения задач, требующих низкой затраты вычислительных ресурсов при сохранении высокой точности [55-62]. Машинное обучение открывает новые горизонты для прогнозирования физико-химических свойств веществ, моделирования сложных химических процессов, что

позволяет существенно ускорять разработки новых материалов и способствует оптимизация технологий производства.

Использование машинного обучения может значительно снизить временные и финансовые затраты при выполнении обычных химических задач. В результате удастся автоматизировать рутинные задачи, что делает использование машинного обучения необходимым условием.

Целью данной работы является разработка модели машинного обучения для определения области водорастворимости ИПЭК, образованных различными парами заряженных полиэлектролитов, в зависимости от условий среды формирования комплексов и свойств полимерных компонент. Разработка такой модели позволит сократить время на подбор состава ИПЭК для решения научных и прикладных задач и выявить ключевые факторы, влияющие на их формирование.

Анализ литературы показывает перспективность использования методов машинного обучения в химии для автоматизации обработки данных и прогнозирования свойств молекул и материалов. Однако на данный момент нет работ, решающих проблему прогнозирования свойств ИПЭК с использованием методов машинного обучения. Вероятно, это связано с трудностями, возникающими при попытках применить методы машинного обучения для работы с многокомпонентными системами. Это проявляется в сложности выбора дескрипторов для многокомпонентной системы, а также в отсутствии предварительно обученных моделей.

Наша работа направлена на демонстрацию возможности применения методов машинного обучения для работы с многокомпонентными химическими системами, в частности, для работы с ИПЭК.

ЭСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Материалы

В работе были использованы полистиролсульфонат натрия (ПССNa) со средними степенями полимеризации 340 и 2430; неалкилированный поли-4-винилпиридин (ПВП) со средними степенями полимеризации 570 и 1520, а также полиаллиламин гидрохлорид (ПАА) со средней степенью полимеризации 190 (все Sigma-Aldrich, США). При приготовлении водных растворов к ПВП был добавлен 1 эквивалент по молям мономерных звеньев HCl. Химические формулы использованных полимеров представлены в Приложении.

Ацетат натрия, хлорид натрия, соляная кислота – все Реахим (Россия) марки ч.д.а. использовали без дополнительной очистки. Во всех экспериментах была использована бидистиллированная вода.

Методы

Фазовые равновесия в водно-солевых растворах противоположно заряженных полиэлектролитов исследовали методом турбидиметрии по стандартной методике [30]. Турбидиметрические измерения осуществляли на УФ-спектрофотометре ПЭ-5400УФ (Экрос, Россия) в кварцевых кюветах при длине волны 320 нм. Экспериментальное определение границ существования водорастворимых комплексов проводили в рамках Государственного задания № 075-00276-25-00 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Модель для машинного обучения

ИПЭК является многокомпонентной системой, водорастворимость которой определяется разнообразными свойствами. Хорошо известно, что для предсказания свойств полимеров можно использовать информацию, содержащуюся в химической структуре мономерных звеньев, а также физико-химические свойства самих молекул [63]. Логично предположить, что для предсказания свойства водорастворимости двухкомпонентной полимерной системы, коей является ИПЭК, допустимо использовать физико-химическими свойствами полимерных компонент комплекса, свойства среды, в которой наблюдается формирование комплексы, а также химические структуры мономерных звеньев полимерных компонент.

Одной из ключевых задач, которую необходимо решить при построении модели, является отсутствие разработанных алгоритмов и предобученных моделей машинного обучения для работы со сложными многокомпонентными химическими системами, в том числе интерполиэлектродитными комплексами. Таким образом, решение задачи предсказания свойств интерполиэлектродитных комплексов побуждает авторов разрабатывать общие подходы работы с многокомпонентными химическими системами с использованием методов машинного обучения.

Еще одной задачей, которую необходимо решить при разработке модели, является проблема размерности. Одновременный учёт свойств обеих полимерных компонент комплекса приводит к существенному повышению размерности признакового пространства. В рамках решаемой задачи размерность признакового пространства сопоставима по порядку с размером тренировочной выборки (188 свойств и 296 точек), что осложняет применение классических методов машинного обучения.

Кроме того, отсутствует единый подход по учёту как свойств компонент сложной системы, так и свойств среды, общих для системы в целом. Данная проблема становится еще более актуальной при работе с полимерами, отличающихся своей сложной структурой.

Выбор методов, используемых в данном исследовании, определяется вышеописанными трудностями, возникающими при постановке задачи.

Задача предсказания свойства водорастворимости ИПЭК представляет собой задачу бинарной классификации, где 0 – комплекс водорастворим при данных условиях, 1 – комплекс водонерастворим и наблюдается частичное фазовое разделение.

Для решения задачи предсказания свойств индивидуальных полимеров также могут быть использованы разнообразные эмбединги химической структуры мономерного звена. Передовым подходом для получения эмбедингов на основе химии мономера является использование модели трансформера polyBERT [64]. Эта модель используется для предсказания свойств полимеров на основе их структуры и для генерации новых потенциально синтезируемых полимеров с заданными свойствами. На данный момент, polyBERT является наиболее значительной моделью для генерации эмбедингов полимеров. Однако учёт химических фингерпринтов предполагает существенное расширение признакового пространства, допустимого при возможности кратного увеличения размера датасета, что не представляется возможным в рамках выполнения нашей задачи.

Таким образом, признаковое пространство формируется на основе физико-химических свойств среды и физико-химических свойств полимеров. Первая категория включает концентрацию низкомолекулярной соли в водном объеме, отношение степеней полимеризации блокирующего и лиофилизирующего полимеров. В данной модели мы ограничиваем данные использованием только одной простой соли - хлорида натрия - как наиболее используемым 1:1 электролитом, добавляемым в интерполиэлектролитные системы.

Вторая категория включает степени полимеризации полимеров, а также физико-химические свойства мономеров блокирующего и лиофилизирующего полимеров,

полученные с использованием библиотеки RDKit на основе SMILES представления химической структуры мономера. Выбор признаков представляет собой набор наиболее востребованных признаков из библиотеки RDKit, которые могли быть получены для полимеров, использованных в работе.

Общее число использованных в модели свойств такой природы = 181. Полный список использованных свойств представлен на GitHub проекта (см. Сопроводительные материалы).

Параметры модели

Модели были обучены с использованием Yandex DataSphere в среде c1.8 (8 vCPU, 0 GPU) с 64 Гб оперативной памяти в течение 200 эпох. В качестве функции потерь использовалась BCEWithLogitsLoss. Для защиты от переобучения были использованы оптимизатор AdamW ($\text{lr} = 1 \text{e-}3$), планировщик ReduceLROnPlateau (factor = 0.5, patience = 3).

Полносвязная нейронная сеть была построена на основе nn.Linear с функцией активации nn.ReLU() из библиотеки torch. В качестве дополнительного регуляризатора использовался nn.Dropout(0.5). Переобучение моделей контролировалось с использованием TensorBoard(). В DataLoader использовались батчи размером 32.

Контрольная модель

В качестве контрольной модели для решения задачи классификации была исследована модель, основанная на физико-химических характеристиках мономеров и особенностях окружающей среды. Характеристики окружающей среды и физико-химические характеристики мономеров были преобразованы в единый вектор размером (188 x 1), который подавался на входе модели. Модель состоит из трех полносвязных слоёв,

в качестве функции активации используется ReLU(), Dropout(0.5) в качестве дополнительного метода регуляризации. Качественная структура модели представлена на рис. 2. Подробная структура модели и код представлены на GitHub проекта (см. Приложение).

Рис. 2. Принципиальная схема контрольной модели

IPECnet

В данной модели предлагается подход на основе независимого учёта признаков каждого полимера. Так, что физико-химические свойства каждого полимера после нормализации (StandardScaler()) были независимо поданы на вход полносвязных сетей с целью уменьшения их размерностей. Далее объединенный вектор на основе эмбедингов каждого полимера был пропущен через единый полносвязный слой и сконкатенирован с вектором свойств среды, который содержит признаки, общие для системы. Объединенный вектор пропускается через полносвязные слои, на выходе которых нормализованный таргет 1 или 0. Качественная структура модели представлена на рис. 3. Подробная структура модели и код представлены на GitHub проекта (см. Приложение).

Рис. 3. Принципиальная схема модели IPECnet

База данных

В качестве источников данных использовались публикации различных групп за длительный период времени, начиная с 1980-х годов [5, 21, 24, 65–68]. Также были использованы экспериментальные данные из фазовых диаграмм, полученных для пар противоположно заряженных полиэлектролитов, описанных в экспериментальной части

(см. данные в приложении). Параметром, определяющим водорастворимость ИПЭК, был критический состав смеси $\varphi = [\text{БПЭ}]/[\text{ЛПЭ}]$, отражающий молярное отношение заряженных мономерных звеньев БПЭк заряженным звеньям ЛПЭ, которое соответствует разделению фаз в растворе ИПЭК в водно-солевой среде.

Для построения моделей машинного обучения учитывалось взаимодействие полностью заряженных цепочек линейных синтетических полиэлектролитов. Пары противоположно заряженных полиэлектролитов были либо сильными рН-независимыми полиэлектролитами пар сильных полиэлектролитов, либо слабыми полиэлектролитами в среде с рН, соответствующим полностью заряженной форме этого слабого полиэлектролита.

База данных содержит 296 критических значений φ – 296 пар поликатион/полианион с физико-химическими свойствами полимеров, химическими структурами мономерных звеньев, а также значением таргета. Данные были отобраны для достижения большей вариативности выборки и обеспечения универсальности модели. Собранный набор данных состоит из данных о полимерах различной химической природы с разной степенью полимеризации, а также об условиях окружающей среды, которые обеспечивают растворимость комплексов в воде. Как поликатионы, так и полианионы представлены в наборе данных (ЛПЭ и БПЭ соответственно), что обеспечило повышение обобщающей способности модели.

Список исследованных в работе полимеров можно найти в Таблице 1 в Приложении.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Ограничения модели

Модель была разработана для линейных полностью заряженных пар ЛПЭ и БПЭ. Для сильных полиэлектролитов, таких как поликатионы с кватернизованными аминогруппами или полианионы на основе сульфоната, рН среды не влияет диссоциацию их функциональных групп, но полианионы на основе карбоксилата или поликатионы с первичными, вторичными и третичными аминогруппами остаются полностью заряженными только в сильнощелочных или кислых средах соответственно. Несмотря на то, что комплексообразование слабого полиэлектролита с противоположно заряженным полиэлектролитом смещает степень ионизации при определенном рН среды, расширяя диапазон рН существования полностью заряженных мономерных звеньев в полимерной цепи [21] в предложенной нами модели для набор данных были использованы только комплексы, сформированные при таких рН среды, которые гарантировали, что как ЛПЭ, так и БПЭ заряжены на 100%. Другими словами, ИПЭК, соответствующие модели, должны быть образованы либо обоими сильными ЛПЭ и БПЭ независимо от рН среды, либо парой сильных и слабых противоположно заряженных полиэлектролитов в кислой среде для слабых поликатионов на основе аминов и в щелочной среде для слабых полианионов соответственно. Формирование ИПЭК на основе двух слабых полиэлектролитов не рассматривалось в ходе машинного обучения.

Анализ данных

Выбор пар поликатионов и полианионов был обусловлен их востребованностью в качестве объектов изучения различными научными группами по всему миру. Кроме того, значительная часть исследуемых полимеров является коммерчески доступными. Общие правила выбора пар полимеров были следующими: структура гомополимера, содержание заряда в каждом мономерном звене, известные степени полимеризации, хлорид натрия в виде простой соли в водной среде.

Для проверки обобщающей способности модели в тестовую выборку была включена пара полиэлектролитов- полиметилметакрилат натрия и поли-N-этил-4-винилпиридиний бромид,- как обладающая большой вариативностью выборки по степеням полимеризации ЛПЭ и БПЭ. В дополнение была проанализирована система на основе полидиаллилдиметиламмоний хлорида в качестве ЛПЭ и полиакрилата натрия в качестве БПЭ [65], как объектов, чьи пары ИПЭК не были включены в тренировочную выборку.

Для анализа качества моделей были использованы классические метрики классификации AUC, F1-score и Accuracy с оптимальными порогами. Для оценки значимости различий в показателях различных моделей был использован подход, основанный на бутстрэп, таким образом были получены 90%-доверительные интервалы для каждой метрики. Результаты сравнения метрик моделей представлены ниже на рис. 4.

Рис.4. Значения метрик AUC, F1-score, Accuracy для Контрольной модели и IPESnet

Обе рассмотренные модели продемонстрировали относительно высокое качество. При этом обнаружены значимые различия между средними значениями метрик Bootstrap-выборок ($p < 0.05$) согласно непараметрическому U-критерию Манна-Уитни. Так, контрольная модель, основанная на объединении физико-химических свойств мономеров и свойств среды без независимого учёта свойств полимеров, уступает модели IPESnet, что может говорить о важности независимого учёта свойств компонент системы, а также о важности добавления вектора свойств среды на последних слоях в ходе обучения модели.

Модель IPESnet предназначена для решения задачи прогнозирования растворимости ИПЭК в воде для решения широкого круга прикладных задач. Однако описанные в данной работе подходы для независимого учета физико-химической структуры полимеров и их химической структуры, по мнению авторов, могут быть

применены и для решения других задач прогнозирования свойств многокомпонентных химических систем.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе работы удалось построить две модели, с достаточной точностью позволяющие предсказывать свойство водорастворимости ИПЭК.

Результаты анализа моделей продемонстрировали, что модель IPESnet превосходит контрольную модель по всем исследованным метрикам: AUC, F1-score и Accuracy. Средние значения метрик у модели IPESnet значимо выше, что свидетельствует об её лучшей обобщающей способности в задаче бинарной классификации. Кроме того, модель IPESnet показывает меньший разброс значений, что указывает на её более высокую стабильность.

Контрольная модель, напротив, демонстрирует большую вариативность метрик и наличие выбросов с низкими значениями, что свидетельствует о нестабильности её работы. Особенно заметны слабые результаты контрольной модели по метрике F1-score, которая отражает баланс между точностью и полнотой, а также наличие низких значений AUC в отдельных случаях.

Для оценки F1-score и Accuracy используются пороги (трэшхолды), подобранные на основе валидационной выборки. Модель IPESnet имеет порог 0.5, что делает её оптимальной для работы с несбалансированными выборками. В то же время для контрольной модели оптимальный порог составляет 0.7, что говорит о завышенном Precision и заниженном Recall.

Вопрос о необходимости использования при построении модели эмбедингов химических структур полимерных компонент остается открытым и может быть дополнительно исследован с увеличением количества данных в наборе данных.

Анализ полученных результатов позволяет авторам предположить, что несмотря на ограниченный объём экспериментальных данных и сложности системы, можно достичь необходимой обобщающей способности модели при решении узкопрофильной задачи предсказания водорастворимости ИПЭК и без рассмотрения химической структуры мономеров с использованием специфических дескрипторов, в частности polyBERT. Согласно литературным данным, это может быть связано, среди прочего, с большим влиянием свойств среды на формирование водорастворимой системы или появление фазового разделения. Другими словами, параметр окружающей среды (например, концентрация соли) в большей степени определяет возможность образования водорастворимого комплекса для выбранной пары полиэлектролитов. Однако модель PRESnet построена с учетом возможности модификации для использования всех параметров, которые могут повлиять на работу системы, что может представлять интерес для исследователей в области применения искусственного интеллекта в химии полимеров и многокомпонентных системах. Открытый код модели, ссылка на который приведена в приложении, позволяет исследователям самостоятельно дополнять массив данных для обучения модели за счёт собственных результатов, повышая таким образом точность расчётов.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Исследование выполнено при финансовой поддержке Некоммерческого Фонда развития науки и образования «Интеллект». Молодой ученый И.В. Григорян благодарит за поддержку Фонд развития теоретической физики и математики «БАЗИС». Молодой учёный И.В. Григорян благодарит за поддержку Фонд содействия инновациям. Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ имени М.В.Ломоносова.

Часть работы, включающая в себя экспериментальное исследование фазового равновесия в системах выполнена в рамках Государственного задания №075-00276-25-00 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации с использованием научного оборудования Центра коллективного пользования ИНЭОС РАН.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Izumrudov V.A., Mussabayeva B.K., Kassymova Z.S., Klivenko A.N., Orazzhanova L.K.* Interpolyelectrolyte complexes: advances and prospects of application // *Russ. Chem. Rev.* 2019. V. 88. P. 1046–1062.
<https://doi.org/10.1070/RCR4877>
2. *Fares H.M., Schlenoff J.B.* Equilibrium overcompensation in polyelectrolyte complexes // *Macromolecules.* 2017. V. 50. № 10. P. 3968–3978.
<https://doi.org/10.1021/acs.macromol.7b00665>
3. *Fu J., Schlenoff J.B.* Driving forces for oppositely charged polyion association in aqueous solutions: enthalpic, entropic, but not electrostatic // *J. Am. Chem. Soc.* 2016. V. 138. № 3. P. 980–990.
<https://doi.org/10.1021/jacs.5b11878>
4. *Meka V.S., Sing M.K.G., Pichika M.R., Nali S.R., Kolapalli V.R.M., Kesharwani P.* A comprehensive review on polyelectrolyte complexes // *Drug Discov. Today.* 2017. V. 22. № 11. P. 1697–1706.
<https://doi.org/10.1016/j.drudis.2017.06.008>
5. *Dautzenberg H.* Polyelectrolyte complex formation in highly aggregating systems. 1. Effect of salt: polyelectrolyte complex formation in the presence of NaCl // *Macromolecules.* 1997. V. 30. № 25. P. 7810–7815.
<https://doi.org/10.1021/ma970803f>
6. *Kabanov V. A.* Fundamentals of polyelectrolyte complexes in solution and the bulk // In: Decher G., Schlenoff J. B. (Eds.) *Multilayer thin films: sequential assembly of nanocomposite materials.* Weinheim: Wiley-VCH. 2003. P. 47–86.
<https://doi.org/10.1002/3527600574.ch2>

7. *Prajapati B.G., Sharma J.B., Sharma S., Trivedi N.D., Gaur M., Kapoor D.U.* Harnessing polyelectrolyte complexes for precision cancer targeting: a comprehensive review // *Med Oncol.* 2024. V. 41. № 6. P. 145.
<https://doi.org/10.1007/s12032-024-02354-0>
8. *Bertin A.* Polyelectrolyte complexes of DNA and polycations as gene delivery vectors // In: Müller M. (Ed.) *Polyelectrolyte complexes in the dispersed and solid state II. Advances in polymer science.* Berlin: Springer. 2013. V. 256. P. 155–188.
https://doi.org/10.1007/12_2013_218
9. *Durmaz E.N., Baig M.I., Willott J.D., de Vos W.M.* Polyelectrolyte complex membranes via salinity change induced aqueous phase separation // *ACS Appl. Polym. Mater.* 2020. V. 2. № 7. P. 2612–2621.
<https://doi.org/10.1021/acsapm.0c00255>
10. *Chen J., He R., Chen H., Hu B., Tokay B., Zhang Y.-B., He T.* Kinetic aspects of salinity stability of layer-by-layer polyelectrolyte nanofiltration membranes: Impact of soaking time, types of ions and crosslinking // *J. Membrane Sci.* 2024. V. 709. P. 123087.
<https://doi.org/10.1016/j.memsci.2024.123087>
11. *Bediako J.K., El Ouardi Y., Massima Mouele E.S., Mensah B., Repo E.* Polyelectrolyte and polyelectrolyte complex-incorporated adsorbents in water and wastewater remediation – A review of recent advances // *Chemosphere.* 2023. V. 325. P. 138418.
<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2023.138418>
12. *Li J., van Ewijk G., van Dijken D.J., van der Gucht J., de Vos W.* Single-step application of polyelectrolyte complex films as oxygen barrier coatings // *ACS Appl. Mater. Interfaces.* 2021. V. 13. № 18. P. 21844–21853.
<https://doi.org/10.1021/acsami.1c05031>

13. *Panova I.G., Sybachin A.V., Spiridonov V.V., Kydralieva K., Jorobekova S., Zezin A.B., Yaroslavov A.A.* Non-stoichiometric interpolyelectrolyte complexes: Promising candidates for protection of soils // *Geoderma*. 2017. V. 307. P. 91–97.
<https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2017.08.001>
14. *Chen M., Xu R., Wu Y., Xiong J., Keleş S.Z., Hankins N.P.* Application of polyelectrolytes for contaminant removal and recovery during water and wastewater treatment: A critical review // *J. Water Proc. Eng.* 2024. V. 64. P. 105528.
<https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2024.105528>
15. *Zezin A.B., Mikheikin S.V., Rogacheva V.B., Zansokhova M.F., Sybachin A.V., Yaroslavov A.A.* Polymeric stabilizers for protection of soil and ground against wind and water erosion // *Adv. Colloid Interface Sci.* 2015. V. 226. P. 17–23.
<https://doi.org/10.1016/j.cis.2015.06.006>
16. *Akintola J., Chen Y., Digby Z.A., Schlenoff J.B.* Antifouling coatings from glassy polyelectrolyte complex films // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 2023. V. 15. № 43. P. 50058–50068.
<https://doi.org/10.1021/acsami.3c11744>
17. *Grigoriev D.O., Kohler K., Skorb E., Shchukin D.G., Mohwald H.* Polyelectrolyte complexes as a “smart” depot for self-healing anticorrosion coatings // *Soft Matter*. 2009. V. 5. № 7. P. 1426–1432.
<https://doi.org/10.1039/B815147D>
18. *Pigareva V.A., Senchikhin I.N., Bolshakova A.V., Sybachin A.V.* Modification of polydiallyldimethylammonium chloride with sodium polystyrenesulfonate dramatically changes the resistance of polymer-based coatings towards wash-off from both hydrophilic and hydrophobic surfaces // *Polymers*. 2022. V. 14. № 6. P. 1247–1260.
<https://doi.org/10.3390/polym14061247>

19. *Mkrtchyan K.V., Pigareva V.A., Zezina E.A., Kuznetsova O.A., Semenova A.A., Yushina Y.K., Tolordava E.R., Grudistova M.A., Sybachin A.V., Klimov D.I., Abramchuk S.S., Yaroslavov A.A., Zezin A.A.* Preparation of biocidal nanocomposites in x-ray irradiated interpolyelectrolyte complexes of polyacrylic acid and polyethylenimine with Ag-ions // *Polymers*. 2022. V. 14. № 20. P. 4417.
<https://doi.org/10.3390/polym14204417>
20. *Donath E., Sukhorukov G. B., Caruso F., Davis S.A., Möhwald H.* Novel hollow polymer shells by colloid-templated assembly of polyelectrolytes // *Angew. Chem. Int. Ed.* 1998. V. 37. № 16. P. 2201–2205.
[https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1521-3773\(19980904\)37:16%3C2201::AID-ANIE2201%3E3.0.CO;2-E](https://doi.org/10.1002/(SICI)1521-3773(19980904)37:16%3C2201::AID-ANIE2201%3E3.0.CO;2-E)
21. *Pergushov D.V., Zezin A.A., Zezin A.B., Müller A.H.E.* Advanced functional structures based on interpolyelectrolyte complexes // In: Müller M. (Ed.) *Polyelectrolyte complexes in the dispersed and solid state I. Advances in polymer science*. Berlin: Springer. 2013. V. 255. P. 129–160.
https://doi.org/10.1007/12_2012_182
22. *Tirrell M.* Polyelectrolyte complexes: Fluid or solid? // *ACS Cent Sci.* 2018. V. 4. № 5. P. 532–533.
<https://doi.org/10.1021/acscentsci.8b00284>
23. *Kabanov V.A.* Polyelectrolyte complexes in solution and in bulk // *Russ. Chem. Rev.* 2005. V. 74. № 1. P. 3–20.
<https://doi.org/10.1070/RC2005V074N01ABEH001165>
24. *Mende M., Buchhammer H.M., Schwarz S., Petzold G., Jaeger W.* The stability of polyelectrolyte complex systems of poly(diallyldimethyl-ammonium chloride) with different polyanions // *Macromol. Symp.* 2004. V. 211. № 1. P. 121–133.

<https://doi.org/10.1002/masy.200450709>

25. *Izumrudov V.A., Paraschuk V.V., Sybachin A.V.* Controlled phase separations in solutions of polyelectrolyte complexes—Potential for gene delivery // *J. Drug Delivery Sci. Technol.* 2006. V. 16. № 4. P. 267–274.

[https://doi.org/10.1016/S1773-2247\(06\)50049-8](https://doi.org/10.1016/S1773-2247(06)50049-8)

26. *Izumrudov V.A., Lim S.K.* The effect of charge and length of a blocking polycation on phase separation in aqueous salt-containing solutions of nonstoichiometric polyelectrolyte complexes // *Polym Sci. Ser. B.* 1998. V. 40. P. 459–465.

27. *Pergushov D.V., Izumrudov V.A., Zezin A.B., Kabanov V.A.* Stability of interpolyelectrolyte complexes in aqueous saline solutions – effect of the degree of polymerization of polyions // *Polym Sci Ser. B.* 1995. V. 37. P. 1739–1746.

28. *Davydova O.V., Zelikin A.N., Kargov S.I., Izumrudov V.A.* Conformation of polyelectrolyte chains in dilute aqueous solutions investigated by conductometry, 1. influence of the degree of polymerization on the conformation of flexible vinylic polyanions and rigid native DNA // *Macromol. Chem. Phys.* 2001. V. 202. № 8. P. 1361–1367.

[https://doi.org/10.1002/1521-3935\(20010501\)202:8%3C1361::AID-](https://doi.org/10.1002/1521-3935(20010501)202:8%3C1361::AID-)

[MACP1361%3E3.0.CO;2-N](https://doi.org/10.1002/1521-3935(20010501)202:8%3C1361::AID-MACP1361%3E3.0.CO;2-N)

29. *Zhang Y., Yildirim E., Antila H.S., Valenzuela L.D., Sammalkorpi M., Lutkenhaus J.L.* The influence of ionic strength and mixing ratio on the colloidal stability of PDAC/PSS polyelectrolyte complexes // *Soft Matter.* 2015. V. 11. № 37. P. 7392–7401.

<https://doi.org/10.1039/c5sm01184a>

30. *Izumrudov V. A., Sybachin A. V.* Phase separation in solutions of polyelectrolyte complexes: The decisive effect of a host polyion // *Polym. Sci. Ser. A.* 2006. V. 48. № 10. P. 1098–10104.

<https://doi.org/10.1134/S0965545X06100117>

31. *Konyal E., Cengiz H.Y., Müftüler A., Deligöz H.* Monitoring the salt stability and solvent swelling behavior of PAH-based polyelectrolyte multilayers by quartz crystal microbalance with dissipation // *Polym. Eng. Sci.* 2023. V. 63. № 10. P. 3328–3342.
<https://doi.org/10.1002/pen.26447>
32. *Jha P.K., Desai P.S., Li J., Larson R.G.* pH and salt effects on the associative phase separation of oppositely charged polyelectrolytes // *Polymers.* 2014. V. 6. № 5. P. 1414–1436.
<https://doi.org/10.3390/polym6051414>
33. *Saikaew R., Meesorn W., Zoppe J.O., Weder C., Dubas S.T.* Influence of the salt concentration on the properties of salt-free polyelectrolyte complex membranes // *Macromol. Mater. Eng.* 2019. V. 304. № 9. P. 1900245.
<https://doi.org/10.1002/mame.201900245>
34. *Изумрудов В.А., Касакин В.А., Ермакова Л.Н., Зезин А.Б.* Исследование водорастворимых полиэлектролитных комплексов неэквивомольного состава // *Высокомогл. соед.* 1978. Т. А20. №2. с. 400–406.
35. *Perry S.L., Li Y., Priftis D., Leon L., Tirrell M.* The effect of salt on the complex coacervation of vinyl polyelectrolytes // *Polymers.* 2014. V. 6. № 6. P. 1756–1772.
<https://doi.org/10.3390/polym6061756>
36. *Stevens M., Plimpton S.* The effect of added salt on polyelectrolyte structure // *Eur. Phys. J. B.* 1998. V. 2. P. 341–345.
<https://doi.org/10.1007/s100510050257>
37. *Carrillo J.M.Y., Dobrynin A.V.* Polyelectrolytes in salt solutions: molecular dynamics simulations // *Macromolecules.* 2011. V. 44. № 14. P. 5798–5816.
<https://doi.org/10.1021/ma2007943>

38. *Chituru S.V., Das S., Majumdar S.* Impact of specific ion effects and electrostatic interactions on a polyelectrolyte-polyampholyte complex // *Discov. Chem. Eng.* 2024. V. 4. P. 6.
<https://doi.org/10.1007/s43938-024-00043-y>
39. *Zelikin A.N., Litmanovich A.A., Paraschuk V.V., Sybatchin A.V., Izumrudov V.A.* Conformational changes of aliphatic ionenes in water-salt solutions as a factor controlling stability of their complexes with calf thymus DNA // *Macromolecules.* 2003. V. 36. № 3. P. 2066–2071.
<https://doi.org/10.1021/ma021361x>
40. *Pergushov D.V., Izumrudov V.A., Zezin A.B., Kabanov V.A.* Effect of low-molecular-mass salts on the behaviour of water-soluble nonstoichiometric polyelectrolyte complexes // *Poly. Sci. Ser. B.* 1993. V. 35. № 7. P. 844–849.
41. *Izumrudov V.A., Kharenko O.A., Kharenko A.V., Gulyayeva Zh.G., Kasaikin V.A., Zezin A.B., Kabanov V.A.* Behaviour of non-stoichiometric polyelectrolyte complexes in aqueous salt solutions // *Polymer Science U.S.S.R.* 1980. V. 22. P. 767–776.
42. *Digby Z.A., Yang M., Lteif S., Schlenoff J.B.* Salt resistance as a measure of the strength of polyelectrolyte complexation // *Macromolecules.* 2022. V. 55. № 3. P. 978–988.
<https://doi.org/10.1021/acs.macromol.1c02151>
43. *Boiko D.A., Kozlov K.S., Burykina J.V., Ilyushenkova V.V., Ananikov V.P.* Fully automated unconstrained analysis of high-resolution mass spectrometry data with machine learning // *J. Am. Chem. Soc.* 2022. V. 144. № 32. P. 14590–14606.
<https://doi.org/10.1021/jacs.2c03631>
44. *Shi Y.-F., Yang Z.-X., Ma S., Kang P.-L., Shang C., Hu P., Liu Z.-P.* Machine learning for chemistry: basics and applications // *Engineering.* 2023. V. 27. P. 70–83.
<https://doi.org/10.1016/j.eng.2023.04.013>

45. *LeCun Y., Bengio Y., Hinton G.* Deep learning // *Nature*. 2015. V. 521. P. 436–444.
<https://doi.org/10.1038/nature14539>
46. *Jumper J., Evans R., Pritzel A., Green T., Figurnov M., Ronneberger O., Tunyasuvunakool K., Bates R., Židek A., Potapenko A., et al.* Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold // *Nature*. 2021. V. 596. P. 583–589.
<https://doi.org/10.1038/s41586-021-03819-2>
47. *Dobbelaere M.R., Plehiers P.P., van de Vijver R., Stevens C.V., van Geem K.M.* Machine learning in chemical engineering: strengths, weaknesses, opportunities, and threats // *Engineering*. 2021. V. 7. № 9. P. 1201–1211.
<https://doi.org/10.1016/j.eng.2021.03.019>
48. *Zhou T., Song Z., Sundmacher K.* Big Data creates new opportunities for materials research: a review on methods and applications of machine learning for materials design // *Engineering*. 2019. V. 5. № 6. P. 1017–1026.
<https://doi.org/10.1016/j.eng.2019.02.011>
49. *Chen W., Iyer A., Bostanabad R.* Data centric design: a new approach to design of microstructural material systems // *Engineering*. 2022. V. 10. P. 89–98.
<https://doi.org/10.1016/j.eng.2021.05.022>
50. *Delaney J.S.* ESOL: Estimating aqueous solubility directly from molecular structure // *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 2004. V. 44. № 3. P. 1000–1005.
<https://doi.org/10.1021/ci034243x>
51. *Thebelt A., Wiebe J., Kronqvist J., Tsay C., Misener R.* Maximizing information from chemical engineering data sets: Applications to machine learning // *Chem. Eng. Sci.* 2022. V. 252. P. 117469.
<https://doi.org/10.1016/j.ces.2022.117469>

52. Keith J.A., Vassilev-Galindo V., Cheng B., Chmiela S., Gastegger M., Müller K.-R., Tkatchenko A. Combining machine learning and computational chemistry for predictive insights into chemical systems // *Chem. Rev.* 2021. V. 121. № 16. P. 9816–9872.
<https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.1c00107>
53. Lengauer T., Sander O., Sierra S., Thielen A., Kaiser R. Bioinformatics prediction of HIV coreceptor usage // *Nature Biotechnology.* 2007. V. 25. P. 1407–1410.
<https://doi.org/10.1038/nbt1371>
54. Senior A.W., Evans R., Jumper J., Kirkpatrick J., Sifre L., Green T., Qin C., Židek A., Nelson A.W., Bridgland A., et al. Improved protein structure prediction using potentials from deep learning // *Nature.* 2020. V. 577. P. 706–710.
<https://doi.org/10.1038/s41586-019-1923-7>
55. Tkatchenko A. Machine learning for chemical discovery // *Nature Communications.* 2020. V. 11. P. 4125.
<https://doi.org/10.1038/s41467-020-17844-8>
56. Coe J. P. Machine learning configuration interaction // *J. Chem. Theory Comput.* 2018. V. 14. № 11. P. 5739–5749.
<https://doi.org/10.1021/acs.jctc.8b00849>
57. Zaspel P., Huang B., Harbrecht H., von Lilienfeld O. A. Boosting quantum machine learning models with a multilevel combination technique: Pople diagrams revisited // *J. Chem. Theory Comput.* 2019. V. 15. № 3. P. 1546–1559.
<https://doi.org/10.48550/arXiv.1808.02799>
58. Snyder J. C., Rupp M., Hansen K., Blooston L., Müller K.-R., Burke K. Orbital-free bond breaking via machine learning // *J. Chem. Phys.* 2013. V. 139. P. 224104.
<https://doi.org/10.1063/1.4834075>

59. *Snyder J. C., Rupp M., Hansen K., Müller K.-R., Burke K.* Finding density functionals with machine learning // *Phys. Rev. Lett.* 2012. V. 108. P. 253002.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.253002>
60. *Bogojeski M., Vogt-Maranto L., Tuckerman M. E., Müller K.-R., Burke K.* Quantum chemical accuracy from density functional approximations via machine learning // *Nat. Commun.* 2020. V. 11. P. 5223.
<https://doi.org/10.1038/s41467-020-19093-1>
61. *de la Torre J. G., Hern J. G., Lopez Martinez M. C.* Prediction of solution properties of flexible-chain polymers // *Eur. J. Phys.* 2008. V. 29. P. 945–956.
<https://doi.org/10.1088/0143-0807/29/5/008>
62. *Gribova V., Navalikhina A., Lysenko O., Calligaro C., Lebaudy E., Deiber L., Senger B., Lavallo P., Vrana N. E.* Prediction of coating thickness for polyelectrolyte multilayers via machine learning // *Sci Rep.* 2021. V. 11. P. 18702.
<https://doi.org/10.1038/s41598-021-98170-x>
63. *Dral P. O., von Lilienfeld O. A., Thiel W.* Machine learning of parameters for accurate semiempirical quantum chemical calculations // *J. Chem. Theory Comput.* 2015. V. 11. № 5. P. 2120–2125.
<https://doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00141>
64. *Kuenneth C., Ramprasad R.* polyBERT: A chemical language model to enable fully machine-driven ultrafast polymer informatics // *Nature Communications.* 2023. V. 14. P. 4099.
<https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-2116998/v1>
65. *Pigareva V. A., Bolshakova A. V., Marina V. I., Sybachin A. V.* Water-soluble interpolyelectrolyte complex based on poly(diallyldimethylammonium chloride) and

sodium polyacrylate as a component for creating stable biocidal coatings // *Colloid Journal*. 2023. V. 85. P. 433–441.

<https://doi.org/10.1134/S1061933X23600100>

66. *Dautzenberg H., Karibyants N.* Polyelectrolyte complex formation in highly aggregating systems: Effect of salt – response to subsequent addition of NaCl // *Macromolecular Chemistry and Physics*. 1999. V. 200. P. 118–125.

[https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1521-3935\(19990101\)200:1%3C118::AID-MACP118%3E3.0.CO;2-K](https://doi.org/10.1002/(SICI)1521-3935(19990101)200:1%3C118::AID-MACP118%3E3.0.CO;2-K)

67. *Gulyaeva Z. G., Aldoshina I. V., Zansokhova M. F., Rogacheva V. B., Zezin A. B., Kabanov V. A.* Phase separation in water-salt solutions of polyelectrolyte complexes // *Polymer Science U.S.S.R.* 1990. V. 32. P. 714–722.

68. *Jukić J., Korade K., Milisav A.-M., Marion I. D., Kovačević D.* Ion-specific and solvent effects on PDADMA–PSS complexation and multilayer formation // *Colloids and Interfaces*. 2021. V. 5. № 3. P. 38.

<https://doi.org/10.3390/colloids5030038>

ПОДПИСИ К РИСУНКАМ

Рис. 1. Схема ИПЭК, сформированных парами ЛПЭ и БПЭ с различными соотношениями степеней полимеризации. Длина цепи ЛПЭ больше длины цепи БПЭ (а), длина цепи ЛПЭ соизмерима с длиной цепи БПЭ (б), длина цепи ЛПЭ меньше длины цепи БПЭ (с) и длина цепи ЛПЭ много меньше длины цепи БПЭ (д). Воспроизведено из статьи [30] с разрешения правообладателя.

Рис. 2. Принципиальная схема Контрольной модели.

Рис. 3. Принципиальная схема модели IPESnet

Рис. 4. Значения метрик AUC, F1-score, Accuracy для Контрольной модели и IPESnet

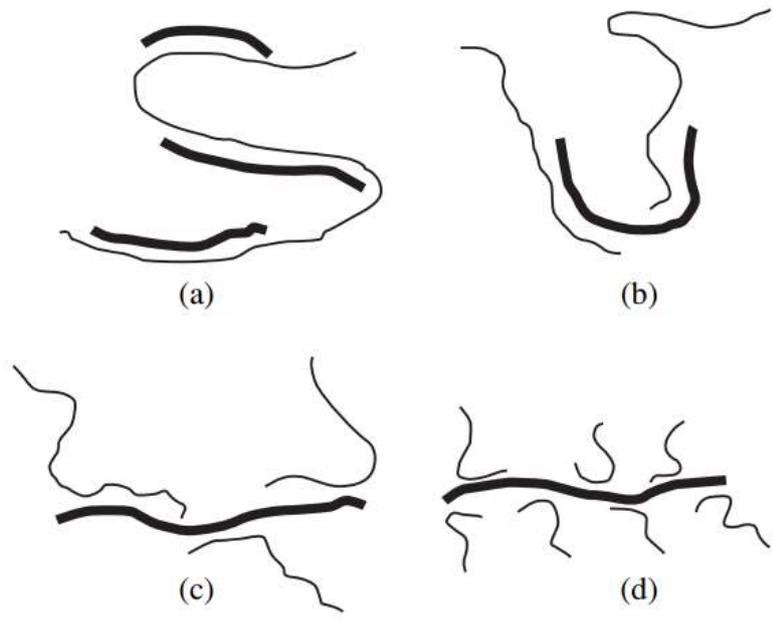


Рисунок 1. Григорян и др.

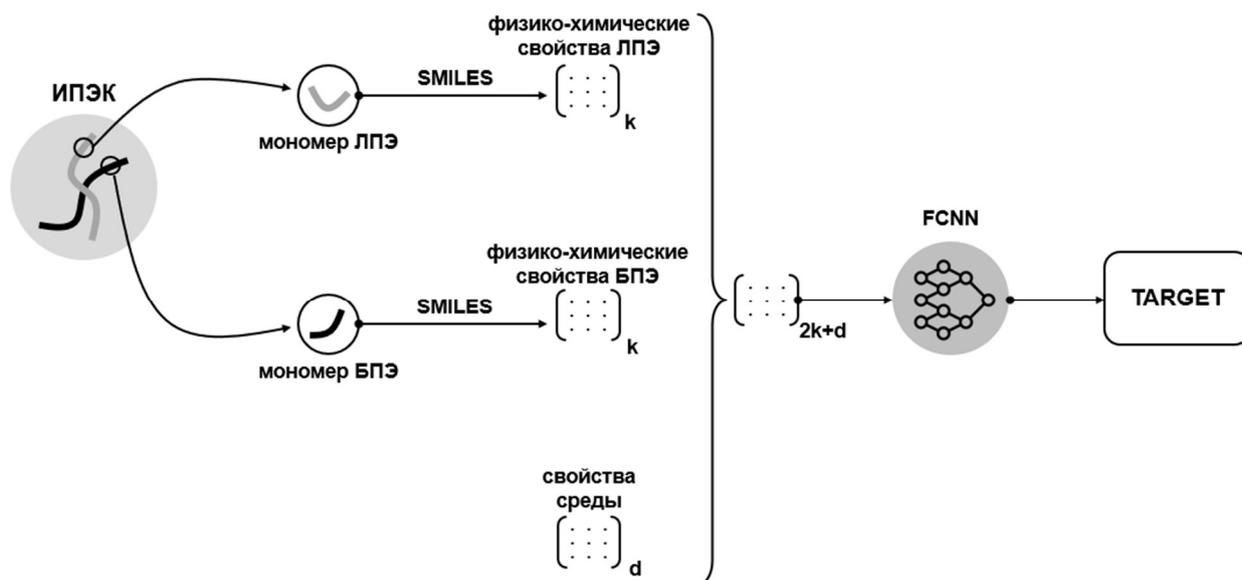


Рисунок 2. Григорян и др.

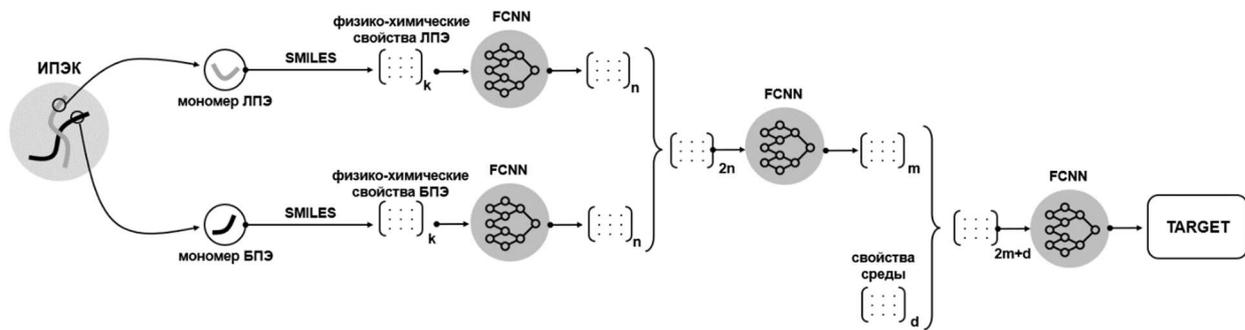


Рисунок 3. Григорян и др.

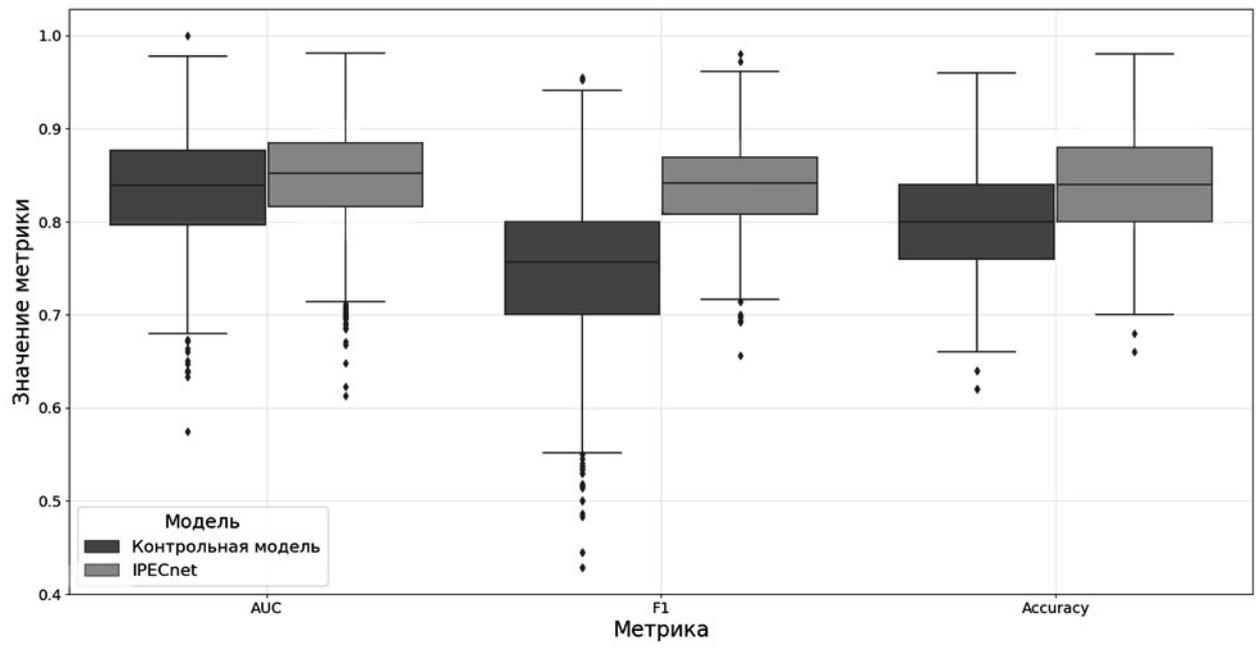


Рисунок 4. Григорян и др.

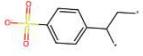
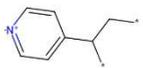
ПРИЛОЖЕНИЕ

Датасет и структуры модели доступны в репозитории проекта на GitHub

<https://github.com/IlyaBoss2414/IPECnet>

Таблица 1. Структурные формулы полиэлектролитов, использованные в работе:

PC/PA index	Полимер	
1	Полиакрилат натрия [*]C(C[*])C(=O)[O-]	
2	Полиметакрилат натрия [*]C(C)(C[*])C(=O)[O-]	
3	Поли-N-этил-4-винилпиридиний бромид [*]CC([*])c1cc[n+](CC)cc1	
4	3,3-ионен бромид [*][N+](C)(C)CCC[N+](C)(C)CCC[*]	
5	Поли-N-винилпиридиний метилсульфат [*]CC([*])c1[n+](C)c(C)ccc1	
6	2,4-ионен бромид [*][N+](C)(C)CC[N+](C)(C)CCCC[*]	
7	2,8-ионе бромид [*][N+](C)(C)CC[N+](C)(C)CCCCCCCC[*]	
8	Полиаллиламин гидрохлорид [*]CC([*])C[N+]	

PC/PA index	Полимер	
9	Полистиролсульфонат натрия [*]CC[*]c1ccc(S(=O)(=O)[O-])cc1	
10	Поли-4-винилпиридиний гидрохлорид [*]CC[*]c1cc[n+](c1)	

Фазовые диаграммы для пар противоположно заряженных полиэлектролитов, представленных в Экспериментальной части.

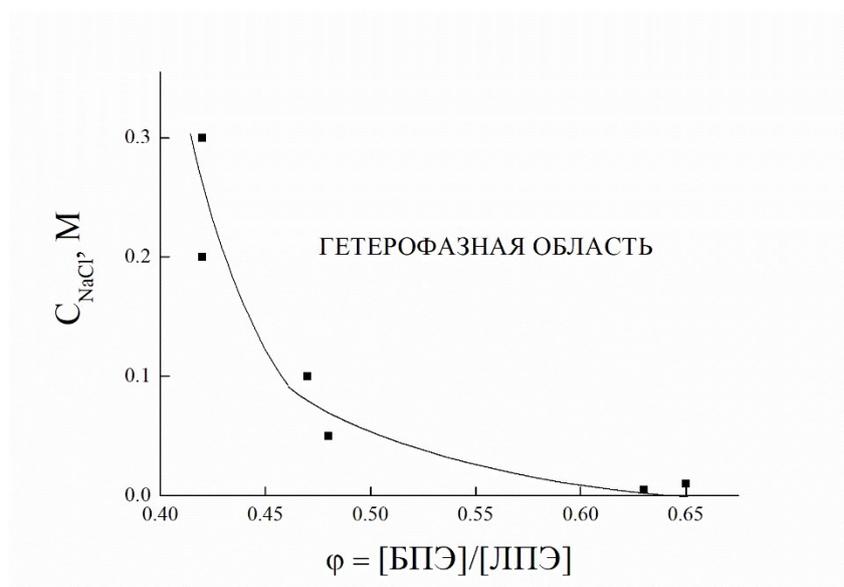


Рис. П1. Зависимость концентрации соли NaCl, вызывающей фазовое разделение в водно-солевых растворах ИПЭК различного состава. БПЭ – ПАА, ЛПЭ – ПССNa со степенью полимеризации 340. Ацетатный буфер, pH 5.

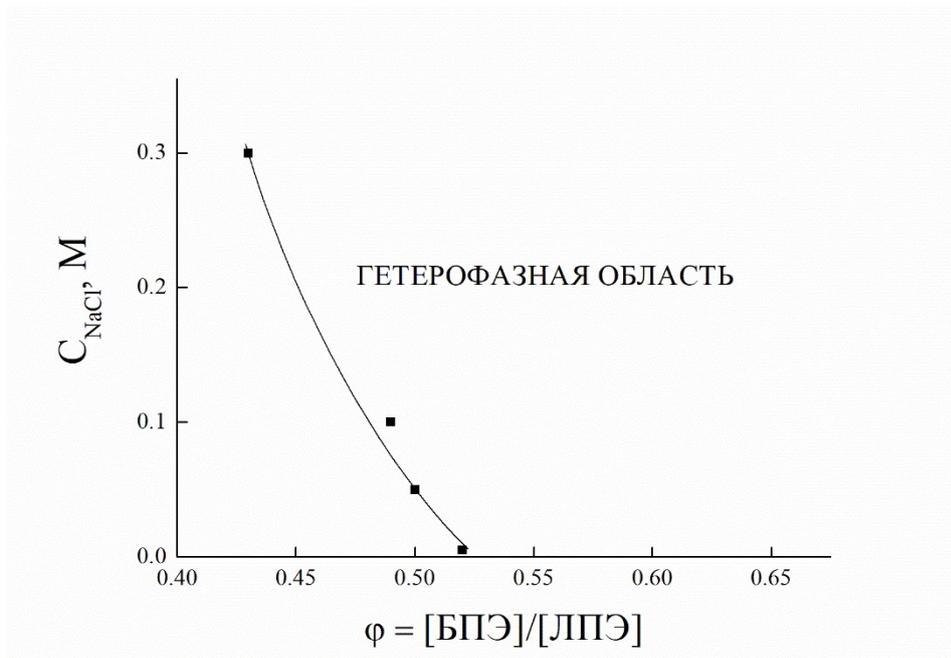


Рис.П2. Зависимость концентрации соли NaCl, вызывающей фазовое разделение в водно-солевых растворах ИПЭК различного состава смеси. БПЭ – ПЭП со степенью полимеризации 570, ЛПЭ – ПССNa со степенью полимеризации 2430. Ацетатный буфер, pH 5.

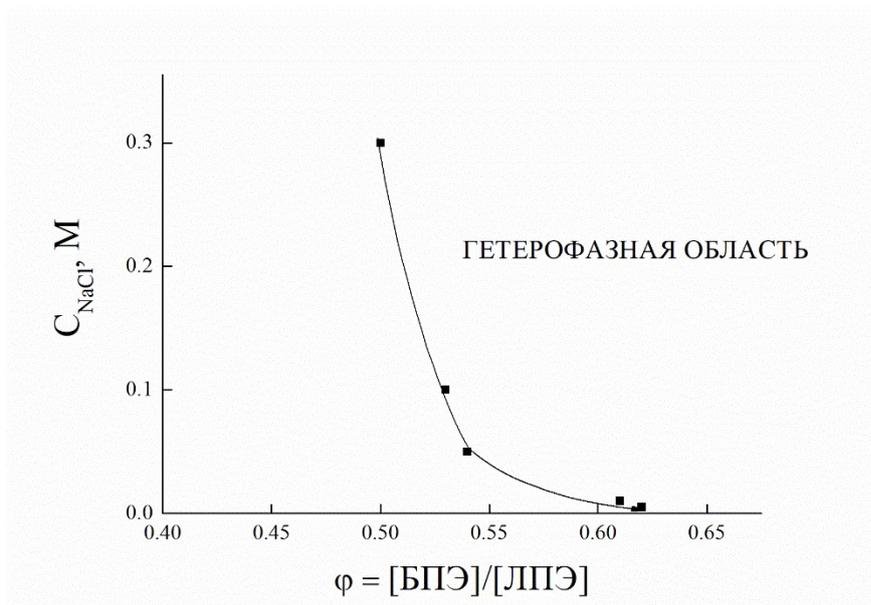


Рис. П3. Зависимость концентрации соли NaCl, вызывающей фазовое разделение в водно-солевых растворах ИПЭК различного состава смеси. БПЭ - ПЭП со степенью

полимеризации 1520, ЛПЭ – ПССNa со степенью полимеризации 2430. Ацетатный буфер, рН 5.

Детализированные схемы моделей, представленных в работе

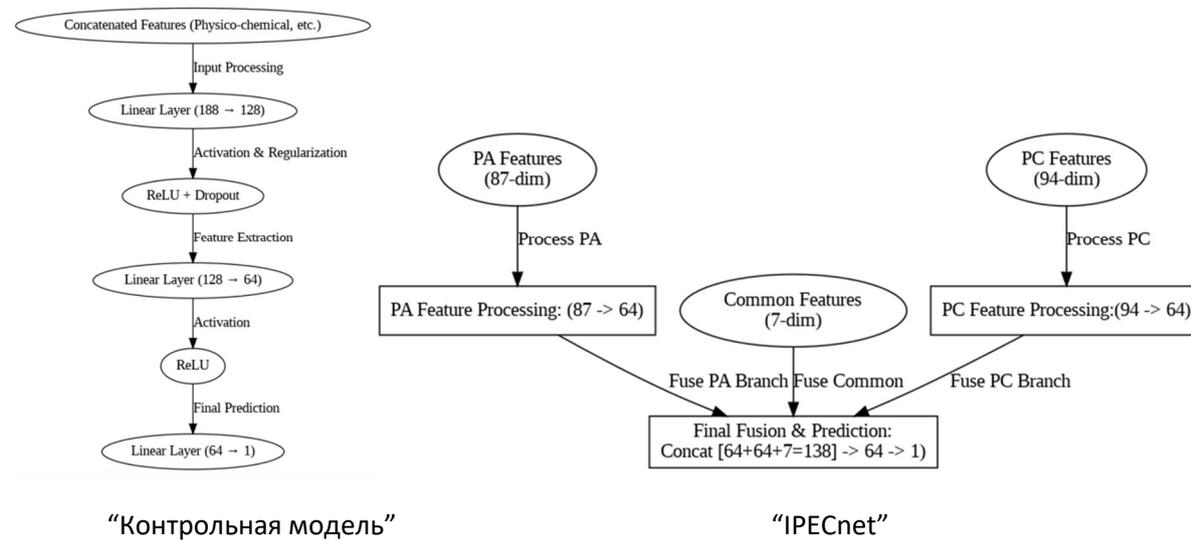


Рис. ПЗ. Схемы моделей “Контрольная модель”(слева) и “IPECnet”(справа)