

ПРЕДСКАЗАНИЕ ДЕГРАДАЦИИ ПОЛИМЕРА В БИОЛОГИЧЕСКИХ СРЕДАХ С ПОМОЩЬЮ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Габдорахманова Е.А. (ИТМО)

Научный руководитель – PhD, ведущий инженер Зун П.С. (ИТМО)

Введение.

Дегградация полимеров в биологических средах является критически важной проблемой в разработке медицинских изделий, таких как сосудистые стенты, импланты и шовные материалы. Традиционные методы прогнозирования дегградации полигидроксиалканозтов (ПГА) основаны на физико-химических экспериментах, которые требуют значительных временных и ресурсных затрат. Современные исследования в области машинного обучения (МО) демонстрируют потенциал для ускорения и повышения точности таких прогнозов, однако их применение в материаловедении остается ограниченным. Анализ отечественного и зарубежного опыта показывает, что использование алгоритмов МО для моделирования дегградации полимеров находится на начальной стадии, что открывает возможности для инновационных решений.

Основная часть.

Предложено решение на основе машинного обучения для прогнозирования параметров дегградации ПГА (масса, кристалличность, полидисперсия) в зависимости от типа полимера, среды, pH, времени и других факторов. В ходе работы были применены методы обработки данных (PCA, KNNImputer, TargetEncoder) и алгоритмы: Random Forest, Gradient Boosting, LSTM, ансамбли. Наибольшую эффективность показали модели для кристалличности ($R^2 = 0.98$), тогда как прогнозирование массы требует доработки ($R^2 < 0.7$). Ключевыми признаками, влияющими на дегградацию, оказались длительность воздействия (дни) и тип биологической среды.

Для улучшения результатов предложено:

- Увеличение объема данных (до 1000+ образцов).
- Использование ансамблевых моделей и оптимизация гиперпараметров.
- Интеграция данных *in vitro* и *in vivo* для повышения точности.

Выводы.

Предложенный подход к прогнозированию дегградации полимеров с использованием методов машинного обучения демонстрирует свою эффективность, особенно в задачах, связанных с прогнозированием полидисперсии. Однако для улучшения прогнозирования массы требуется дальнейшая работа с данными и оптимизация моделей. Практическое применение результатов исследования может быть реализовано в разработке медицинских устройств и материалов, что позволит ускорить процесс их тестирования и внедрения в клиническую практику. Для внедрения необходимы дальнейшие испытания на реальных образцах и совершенствование качества входных данных.