**IPECnet: модель машинного обучения для предсказания свойств водорастворимости интерполиэлектролитных комплексов**

***Григорян И.В.1,2, Антюфриева Л.А3, Кравцов И.Д. 1,2, Сыбачин А.В.4***

*Студент, 2 курс магистратуры*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

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

*3Сколковский институт науки и технологий, физический факультет, Москва, Россия*

*4Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: grigorian.iv19@physics.msu.ru*

Работа посвящена разработке модели машинного обучения для предсказания свойств водорастворимости интэрполиэлектролитных комплексов (ИПЭК). Растворимость ИПЭК в водно-солевых средах определяется множеством факторов, связанных с параметрами полимерных компонентов и составом среды. [1-5]

Данная работа посвящена разработке одной из первых моделей на основе подходов машинного обучения для прогнозирования области существования водорастворимых ИПЭК для решения биомедицинских задач. Предложен новый подход независимого рассмотрения физико-химических свойств полиэлектролитов, а также химической структуры их мономерных звеньев. На основе описанного подхода разработана модель IPECnet.

Результаты работы были применены для выбора оптимального состава ИПЭК для различных условий окружающей среды с целью создания бактерицидных покрытий. Разработанный подход является универсальным и потенциально может быть использован для прогнозирования свойств многокомпонентных систем различной химической природы.

*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».*

**Литература**

1. Hu C.-M.J., Zhang L. Nanoparticle-based combination therapy toward overcoming drug resistance in cancer // Biochemical pharmacology, 2012, 83, 8, 1104

2. Lankalapalli S, Kolapalli VR. Polyelectrolyte Complexes: A Review of their Applicability in Drug Delivery Technology // Indian J Pharm Sci. 2009 Sep;71(5):481-7.

3. Pigareva V.A., Bol’shakova 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, Vo.85, N.3, p.441

4. Giaouri, E., Heir, E., Desvaux, M., et al., Intra- and inter-species interactions within biofilms of important foodborne bacterial pathogens, Front. Microbiol., 2015, vol. 6, p. 841.

5. Kuenneth, C., Ramprasad, R. polyBERT: a chemical language model to enable fully machine-driven ultrafast polymer informatics // Nat Commun, 2023, 14, 4099