Краткая информация о проекте

Наименование	AP22684289 Гидрофобно-гидрофильные ассоциаты как основа для формирования программируемых нейронных сетей на основе гидрофильных полимеров
Актуальность	Актуальность проекта определяется необходимостью более глубокого понимания процессов в системах на основе гидрофильных полимеров. Сам факт существования гидрофобно-гидрофильных ассоциатов и их аналогов показывает, что полимерные растворы являются более сложными системами, чем это следует из классических представлений о гомогенной фазе. Работа лежит на стыке физической химии полимеров и информационных технологий и создает предпосылки для разработки новых квазибиологических информационных систем, нейроморфных материалов и программируемых полимерных структур. Дополнительную значимость проекту придает возможность описания выявленных эффектов в терминах нейронных сетей, многозначной логики и конечных алгебраических структур.
Цель	Цель проекта – разработка принципов дизайна интеллектуальных систем на основе гидрофильных полимеров, способных реагировать на изменения температуры и pH среды в соответствии с заданной программой.
Задачи	- Синтез новых водорастворимых термочувствительных полимеров с регулируемым гидрофобно-гидрофильным балансом макроцепи и исследование их стимул-чувствительного поведения. - Установление основных закономерностей межмакромолекулярных реакций в водных растворах с участием термочувствительных полимеров и поликарбоновых кислот; изучение стимул-чувствительного поведения комплексно-связанных полимеров. - Установление основных принципов макромолекулярного дизайна термочувствительных полимерных гидрогелей с регулируемым гидрофобно-гидрофильным балансом макроцепи, изучение физико-химического поведения полученных полимеров в зависимости от структурных характеристик при варьировании параметров внешней среды. - Установление основных закономерностей синтеза и функционирования новых гибридных ионных полимерных гидрогелей, проявляющих чувствительность одновременно к воздействию температуры и pH-среды. - Исследование межмакромолекулярных реакций, протекающих на границе раздела стимул-чувствительный гидрогель – раствор линейного полимера; изучение

	стимул-чувствительного поведения комплексно-связанных полимерных гидрогелей. - Исследование взаимодействия стимул-чувствительных гидрогелей с ионными поверхностно-активными веществами; изучение стимул-чувствительного поведения полимерных гидрогелей, модифицированных комплексообразованием с поверхностно-активными веществами.
Ожидаемые и достигнутые результаты	Обоснована целесообразность изучения нейросетевых свойств гидрофобно-гидрофильных ассоциатов и их аналогов. За отчетный период показано, что для понимания возникновения таких процессов как жизнь недостаточно простых биологических теорий эволюции, и необходима более обширная теория, которая будет учитывать как биологические, так и информационные аспекты. Жизнь должна быть рассмотрена как информационная система в целом и процессы эволюции требуют философского анализа, особенно с точки зрения диалектики. Показано, что гидрофильные полимеры образуют нейроноподобные структуры, что подтверждает возможность спонтанного возникновения информационных систем. Таким образом, физическая химия полимеров может способствовать построению более общей эволюционной теории, объясняющей механизмы происхождения жизни через коэволюцию материи и информации. Результаты работ будут опубликованы в статьях, которые запланированы на следующих этапах реализации проекта. Построена нейросетевая модель формирования гидрофобно-гидрофильных ассоциатов и их аналогов, применимая, в том числе, к растворам карбоновых кислот. За отчетный период по данному пункту календарного плана показана возможность спонтанного формирования аналогов нейронных сетей в растворах гидрофильных полимеров. Показана возможность применения макромолекул, которые могут проходить фазовый переход, выполняя роль нейронов с логическими состояниями 0 и 1. Эти молекулы способны влиять друг на друга через различные типы взаимодействий, например, гидрофобные или электростатические, создавая сеть в растворе, аналогичную нейронной. Такие структуры имеют свойства обработки информации и могут использоваться для моделирования ранних эволюционных механизмов и механизмов самоорганизации, способных привести к формированию сложных информационных систем. Результаты работ будут опубликованы в статьях,

	которые запланированы на следующих этапах реализации проекта. За отчетный период показано, что данная модель допускает переход к описанию в терминах конечных алгебраических структур, в частности, полей Галуа. За отчетный период показано, что вышеуказанная данная модель допускает переход к описанию в терминах конечных алгебраических структур, в частности, полей Галуа. Переход к описанию модели через конечные алгебраические структуры, такие как поля Галуа, возможен благодаря дискретным состояниям макромолекул (например, 0 и 1), которые взаимодействуют по определённым правилам. Конечные поля позволяют описывать такие дискретные взаимодействия, используя операции сложения и умножения, аналогичные логическим функциям в модели. Это помогает более точно представить структуру системы с фазовыми переходами и логическими состояниями в виде конечных алгебраических структур. Разработана методика проведения экспериментов, позволяющих выявить свойства аналогов гидрофобно-гидрофильных ассоциатов, формирующихся в растворах карбоновых кислот. Работы по данному пункту календарного плана продолжаются. За отчетный период разработана методика проведения экспериментов, позволяющих выявить свойства аналогов гидрофобно-гидрофильных ассоциатов, формирующихся в растворах карбоновых кислот. Методика проверки применимости модели включает: создание условий для формирования гидрофобно-гидрофильных ассоциатов, наблюдение фазовых переходов (для моделирования логических состояний), изучение взаимного влияния ассоциатов (аналог "нейронов"), анализ стабильности и динамического поведения. По результатам проведения экспериментов по данной методике будет проверена модель, которая лучше всего позволит описать систему через логические функции и конечные алгебраические структуры. В отчетный период проведен комплекс экспериментов по измерению pH водных растворов полиакриловой кислоты различной молекулярной массы и их смесей в широком диапазоне концентраций и температур. Установлены существенные отрицательные отклонения от аддитивной зависимости pH, однозначно свидетельствующие о наличии эффективных межмакромолекулярных взаимодействий. Показано, что в системе

	формируются динамические гидрофильные интерполимерные ассоциаты, которые могут быть интерпретированы как аналоги нейронных сетей и потенциальные основы для нейроморфных материалов. Экспериментальные данные подтвердили адекватность предложенной модели, учитывающей неоднородное распределение зарядов и функциональных групп в объеме раствора. Выполнено сопоставление полученных экспериментальных зависимостей pH от концентрации, состава смесей и температуры с теоретическими моделями, основанными на модифицированном аналоге уравнения Пуассона–Больцмана для неоднородных полимерных систем. Показано, что учет флуктуаций плотности функциональных групп и распределения электростатического потенциала позволяет количественно объяснить наблюдаемые отклонения от аддитивного поведения. Обосновано, что формирующиеся динамические сети ассоциатов корректно интерпретируются как аналоги нейросетевых структур, обеспечивающих коллективный отклик системы на внешние воздействия. Тем самым подтверждена адекватность предложенной нейросетевой модели формирования гидрофильных и гидрофобно-гидрофильных ассоциатов и их аналогов. Основные выводы отражены в материалах статьи по растворам полиакриловой кислоты и развиты в обзоре по нейросетевым свойствам гидрофильных полимеров. Проведен теоретико-методологический анализ, показавший, что описываемые нейросетевые аналоги на основе гидрофильных полимеров естественно формализуются в терминах многозначной логики. Состояния динамических ассоциатов, распределения зарядов и информационных объектов в таких системах образуют не два, а множество устойчивых и переходных уровней, что требует выхода за рамки бинарного описания. Показано, что коэволюция материальной (полимерной) и информационной подсистем может быть интерпретирована через категории диалектики и многозначной логики, что усиливает теоретическую базу предлагаемой модели. На основе разработанной физико-химической и информационно-теоретической модели предложены алгоритмические схемы численного анализа аналогов нейронных сетей в растворах гидрофильных полимеров, учитывающие неоднородное распределение функциональных групп, динамику ассоциатов и многозначные логические состояния.

	Сформулированы подходы к моделированию коллективного отклика системы и эволюции ее архитектуры связей, которые могут быть реализованы в программных средствах для анализа гидрофобно-гидрофильных ассоциатов и их аналогов. Результаты выполненных работ по проекту опубликованы в статье: Kabdushev S.B., Gabrielyan O., Kopishev E., Suleimenov I. Neural network properties of hydrophilic polymers as a key for development of the general theory of evolution. Royal Society Open Science, 2025, Vol. 12, Article 242149. DOI: 10.1098/rsos.242149, ссылка на статью: royalsocietypublishing.org/doi/10.1098/rsos.242149, Scopus Q1 (multidisciplinary), процентиль JCR 72.6% Будут разработаны алгоритмы программных средств, позволяющие проводить логический анализ нейронных сетей, моделирующих гидрофобно-гидрофильные ассоциаты и их аналоги, в том числе, с использованием полей Галуа и инструментов многозначных логик. Будут выполнены численные расчёты, доказывающие возможность конвертации нейронных сетей рассматриваемого типа в программируемые структуры. Будут реализованы программные продукты, позволяющие проводить численный и логический анализ нейронных сетей, моделирующих гидрофобно-гидрофильные ассоциаты и их аналоги. Будут выработаны рекомендации по созданию программируемых структур на основе гидрофильных полимеров, предназначенных, в том числе, для контролируемой доставки лекарственных препаратов.
Имена и фамилии членов исследовательской группы с их идентификаторами (Scopus Author ID, Researcher ID, ORCID, при наличии) и ссылками на соответствующие профили	Кабдушев Шернияз, руководитель проекта (Индекс Хирша Scopus – 11, ORCID 0000-0002-2834-883X, Scopus Author ID 57194510359) Мун Григорий Алексеевич, научный консультант (Индекс Хирша Scopus – 29, Индекс Хирша Web of Science – 26, ORCID ID: 0000-0002-4984-7937, Scopus Author ID: 7006862276, Web of Science ResearcherID: I-3732-2017)
Использование	Полученные результаты могут использоваться для проектирования нейроморфных и квазибиологических информационных систем на основе гидрофильных полимеров; - для разработки умных гидрогелей и программируемых полимерных структур, в том числе в задачах контролируемой доставки веществ;

	- для построения теоретических моделей предбиологической эволюции и систем хранения/обработки информации на молекулярном и супрамолекулярном уровнях; - для логического и вычислительного анализа сложных систем с применением многозначной логики, полей Галуа и алгебраических колец; - для перспективных решений в цифровой обработке сигналов и изображений, а также при создании специализированных логических схем.
Приоритет в сравнении с реальными аналогами	- В отличие от большинства нейроморфных материалов, которые специально конструируются для имитации нейронных сетей, в данном проекте показана возможность спонтанного формирования аналогов нейронных сетей в полимерных растворах. - Впервые введено и теоретически обосновано понятие гидрофобно-гидрофильных ассоциатов как нового типа супрамолекулярных образований из одинаковых макромолекул. - Показано, что аналог нейронной сети может возникать не только в многокомпонентных системах и за счет прямых межмакромолекулярных взаимодействий, но и в однокомпонентном растворе слабой поликислоты за счет флуктуаций распределения зарядов. - Проект имеет междисциплинарный приоритет: он связывает физическую химию полимеров, нейросетевые модели, проблематику происхождения жизни, конечные алгебраические структуры и многозначную логику в единой исследовательской рамке. - Отдельным преимуществом является наличие не только концептуальных выводов, но и алгебраического аппарата и схемотехнической верификации операций многозначной логики, что делает результаты ближе к прикладной реализации.
Список публикаций с ссылками на них	1. Kabdushev S. et al. Formation of Hydrophobic-Hydrophilic Associates in the N-Vinylpyrrolidone and Vinyl Propyl Ether Copolymer Aqueous Solutions. Polymers, 2023, 15, 3578. DOI: 10.3390/polym15173578 2. Suleimenov I.E., Vitulyova Y.S., Kabdushev S.B., Bakirov A.S. Improving the efficiency of using multivalued logic tools. Scientific Reports, 2023, 13, 1108. DOI: 10.1038/s41598-023-28272-1 3. Suleimenov I.E., Vitulyova Y.S., Kabdushev S.B., Bakirov A.S. Improving the efficiency of using multivalued logic tools: application of algebraic rings. Scientific Reports, 2023, 13, 22021. DOI: 10.1038/s41598-023-49593-1 4. Kabdushev S., Gabrielyan O., Kopishev E., Suleimenov I. Neural network properties of hydrophilic polymers as a key for development of the general theory of evolution. Royal Society Open Science, 2025, 12, 242149. DOI: 10.1098/rsos.242149 5. Kabdushev S. et al. Polyacid Solutions as an Analogue of a Neural Network. Polymers, 2026, 18, 279. DOI: 10.3390/polym18020279
Информация о патентах	Патентов на данный момент не имеется