

# Ключевые глобальные тренды рынка цифрового инверсного проектирования

**Крутов Антон Антонович** 

студент,

Ярославский государственный технический университет, г. Ярославль, Российская Федерация

E-mail: ffaniik@mail.ru

**Бычков Евгений Александрович** 

студент,

Ярославский государственный технический университет, г. Ярославль, Российская Федерация

E-mail: evgenybychkov3@gmail.com

**Воеводина Елена Ивановна** 

Аспирант,

Ярославский государственный технический университет, г. Ярославль, Российская Федерация

E-mail: vovodinaei@ystu.ru

**Сальников Александр Михайлович** 

кандидат экономических наук, доцент

Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации (Ярославский филиал), Ярославль, Россия

E-mail: AMSalnikov@fa.ru

## КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

цифровое инверсное проектирование; цифровая трансформация промышленности; рынок полимерных материалов; аддитивные технологии; экономика инноваций; искусственный интеллект в промышленности; платформенные бизнес-модели; научно-исследовательские и опытно-конструкторские работы (НИОКР); высокотехнологичные рынки

## АННОТАЦИЯ

В статье проведён комплексный анализ глобальных технологических, рыночных и институциональных трендов развития цифрового инверсного проектирования полимерных материалов, ориентированного на применение в аддитивных технологиях. Показано, что традиционные эмпирические методы разработки полимеров не соответствуют современным требованиям промышленности, характеризующимся ростом сложности изделий, сокращением жизненных циклов продукции и необходимостью быстрого вывода материалов с заданными свойствами на рынок. Особое внимание уделено концепции инверсного проектирования, в рамках которой исходной точкой разработки выступают целевые эксплуатационные характеристики, а подбор структуры и состава материала осуществляется с использованием вычислительного моделирования и методов искусственного интеллекта. В работе рассмотрены ключевые технологические драйверы цифрового материаловедения, включая методы машинного обучения, генеративные модели, графовые нейронные сети и обработку естественного языка для формализации инженерных требований. Проанализирована роль платформенных решений, реализующих замкнутый цифровой цикл «запрос — модель — материал», а также их интеграция с CAD/CAE-, PLM- и ELN-системами, и роботизированными лабораториями. Отдельное внимание уделено экономическим аспектам развития рынка, включая снижение издержек на НИОКР, ускорение коммерциализации новых материалов и демократизацию доступа к материаловедческим компетенциям для малого и среднего бизнеса. Выявлены основные барьеры развития рынка цифрового инверсного проектирования полимеров, связанные с ограниченностью данных, проблемой интерпретируемости моделей искусственного интеллекта и разрывом между лабораторными и промышленными условиями. Сформулированы перспективные направления развития, включая автономные R&D-контуры, расширение подходов на композитные и функциональные материалы, а также интеграцию экологических и регуляторных критериев. Полученные результаты могут быть использованы для формирования стратегий развития цифровых платформ проектирования материалов и оценки инвестиционного потенциала отрасли.

JEL codes: I21, J24, O33

DOI: <https://doi.org/10.52957/2221-3260-2025-11-163-181>

Для цитирования: Крутов, А.А. Ключевые глобальные тренды рынка цифрового инверсного / А.А. Крутов, Е.А. Бычков, Е.И. Воеводина, А.М. Сальников. – Текст : электронный // Теоретическая экономика. – 2025. – №11. – С.164-181. – URL: <http://www.theoreticaleconomy.ru> (Дата публикации: 30.11.2025)

## Введение

Современная промышленность переживает трансформацию, обусловленную масштабным внедрением цифровых технологий и систем искусственного интеллекта. Данный процесс затрагивает все звенья производственных цепочек, включая сферу разработки и создания новых материалов [4]. Полимерная индустрия, являющаяся одним из базовых секторов мировой экономики, оказывается в центре этих изменений, поскольку полимерные материалы формируют технологическую основу множества отраслей — от автомобилестроения и аэрокосмической промышленности до медицины и электроники.

Рынок аддитивных технологий показывает устойчивый рост, находясь на стыке быстрорастущих областей: промышленного инжиниринга, цифрового моделирования и новых материалов. Полимерные материалы при этом остаются ключевым компонентом, благодаря широкому спектру свойств и гибкости настройки под конкретные задачи. Однако, несмотря на развитие аддитивных технологий, разработка новых полимерных материалов всё ещё требует значительных затрат — как временных, так и интеллектуальных. Процесс разработки и подбора рецептур основывается в основном на эмпирике, опыте и методе проб и ошибок, что делает его малодоступным для малого и среднего бизнеса, не обладающего собственными лабораториями и штатами химиков. Также, зачастую, сроки и бюджеты достаточно сильно сжаты и подобные отклонения от графика могут стать неблагоприятными.

Традиционные методы разработки полимерных материалов, основанные на эмпирическом подходе и последовательном экспериментальном поиске, демонстрируют ограничения в условиях возросшей сложности задач. Классический цикл «синтез — тестирование — анализ — модификация» требует значительных временных и финансовых ресурсов, при этом не гарантируя получения оптимального результата в разумные сроки. Пространство возможных композиций и структур полимеров практически безгранично, что делает систематический перебор вариантов невозможным, а интуитивный подход специалистов — недостаточно эффективным для решения многопараметрических оптимизационных задач. На фоне этих проблем возникает большой интерес к цифровым платформам инверсного проектирования, где состав материала подбирается не вручную, а автоматически — исходя из заданных свойств, технологических ограничений и условий печати. Если объединить такой подход с современными нейросетевыми моделями, можно получить гибкий инструмент генерации новых материалов, способный значительно сократить цикл разработки [3]. Несмотря на очевидный потенциал цифровых методологий, между запросами промышленности и возможностями традиционных исследований и разработок сохраняется значительный разрыв. Промышленные предприятия нуждаются в материалах с точно определёнными свойствами, разработанных в сжатые сроки и при оптимальных затратах. Однако существующая система научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области материаловедения преимущественно ориентирована на фундаментальные исследования и длительные циклы разработки, что создаёт разность между скоростью технологических изменений в прикладных отраслях и темпами создания новых материалов. Экономические факторы также усугубляют данную проблему [1]. Полный цикл экспериментальной разработки нового полимерного материала может занимать от 6 до 24 месяцев и требовать инвестиций в миллионы рублей. Такие временные и финансовые затраты возможны для крупных химических корпораций, работающих над материалами массового применения, однако становятся барьером для проектов, ориентированных на узкие специализированные ниши или требующих быстрого вывода продукта на рынок. Особенно острой проблема доступности материаловедческих компетенций оказывается для предприятий малого и среднего бизнеса [2]. Формирование собственных исследовательских подразделений экономически нецелесообразно

для большинства таких компаний, а обращение к внешним научным организациям часто связано со сложностями коммерциализации результатов, защиты интеллектуальной собственности и адаптации академических разработок к промышленным условиям. Эта ситуация ограничивает инновационный потенциал значительного сегмента промышленности и замедляет распространение передовых материалов в практических применениях.

Статья направлена на выявление и систематизация ключевых глобальных трендов рынка цифрового инверсного проектирования полимеров. Понимание данных трендов необходимо для формирования обоснованных стратегических решений участниками отрасли, оценки перспектив развития технологий и определения приоритетных направлений инвестиций. Данная статья также посвящена описанию концепции архитектуры системы, основанной на принципах инверсного проектирования и машинного обучения, а также её потенциала с экономической, проектной и технологической точек зрения. Для достижения поставленной цели в работе решаются следующие задачи. Во-первых, проводится анализ технологических трендов, определяющих развитие методов цифрового проектирования полимеров, включая достижения в области машинного обучения, молекулярного моделирования и высокопроизводительных вычислений [7]. Во-вторых, исследуются рыночные и институциональные факторы, влияющие на коммерциализацию цифровых технологий проектирования материалов, включая структуру спроса, модели бизнеса и регуляторную среду. В-третьих, оценивается роль искусственного интеллекта и цифровых платформ как ключевых инструментов трансформации процессов создания материалов. Наконец, выявляются основные барьеры, препятствующие развитию рынка, а также точки роста, которые могут обеспечить его ускоренное расширение в среднесрочной перспективе.

### Методы исследования

В работе использован комплекс аналитических и модельных методов, направленных на исследование технологических и рыночных аспектов цифрового инверсного проектирования полимерных материалов.

Эмпирическую базу исследования составили данные научных публикаций в области цифрового материаловедения и полимерной информатики, отраслевые аналитические отчёты международных исследовательских агентств, материалы профильных консалтинговых компаний, а также открытые статистические и прогнозные данные по рынкам полимерных материалов и аддитивных технологий. Отбор источников осуществлялся по критериям релевантности тематике цифрового инверсного проектирования, актуальности (период преимущественно 2015–2024 гг.) и цитируемости.

Для анализа эволюции подходов к разработке полимерных материалов применён сравнительный метод, позволивший сопоставить традиционную эмпирическую методологию прямого проектирования («структура → свойства») и концепцию инверсного проектирования («свойства → структура»). Сравнение проводилось по таким параметрам, как логика проектирования, роль вычислительного моделирования, степень формализации требований и воспроизводимость результатов.

Исследование технологической основы инверсного проектирования выполнено с использованием структурно-функционального анализа, в рамках которого были выделены и систематизированы ключевые вычислительные методы, применяемые в современных цифровых платформах проектирования материалов. К ним отнесены методы квантово-химического моделирования, молекулярной динамики и мезомасштабного моделирования, а также алгоритмы машинного обучения, включая глубинные нейронные сети, графовые нейронные сети и генеративные модели. Анализ носил концептуальный характер и был направлен на выявление функций указанных методов в архитектуре инверсного проектирования, а не на их экспериментальную реализацию.

Для описания логики цифрового инверсного проектирования использован метод концептуального моделирования [8], в рамках которого сформирована обобщённая модель процесса «целевые свойства → вычислительная генерация структуры → верификация → отбор решений».

Данная модель использовалась как аналитический инструмент для интерпретации технологических трендов и оценки потенциала платформенных решений в области цифрового материаловедения.

Анализ рынка полимерных материалов и аддитивных технологий проведён с применением методов рыночной аналитики, включая анализ отраслевых отчётов, прогнозирование на основе опубликованных оценок исследовательских агентств, а также метод PAM-TAM-SAM-SOM для оценки потенциальной ёмкости рынка. Полученные результаты были использованы для выявления экономических драйверов внедрения цифрового инверсного проектирования и оценки его инвестиционной привлекательности.

Методы систематизации и обобщения результатов включали качественный контент-анализ научных и аналитических источников, а также логико-структурный анализ, позволивший интегрировать технологические, экономические и институциональные аспекты в единую аналитическую рамку исследования.

### **Основные результаты исследования**

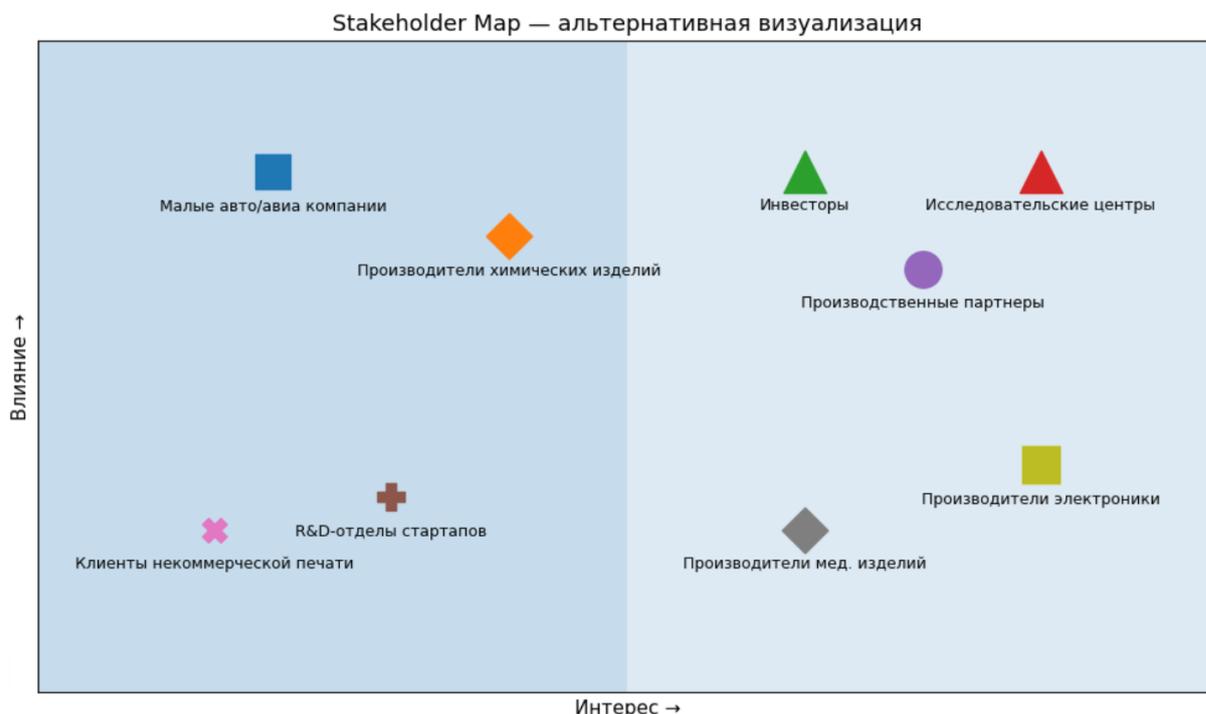
Глобальный рынок полимерных материалов демонстрирует устойчивую динамику роста, характеризующуюся среднегодовым темпом увеличения на уровне пяти процентов. Данная траектория обусловлена комплексом отраслевых драйверов, среди которых особое значение имеют структурные изменения в ключевых секторах промышленного потребления. Растущая стоимость энергоносителей и ужесточение экологических стандартов стимулируют замещение традиционных материалов полимерными композитами, обладающими меньшей массой при сохранении или улучшении эксплуатационных характеристик. Одновременно происходит расширение функциональных возможностей полимеров, что открывает доступ к новым областям применения, ранее недоступным для полимерных материалов [5].

Экономические и рыночные характеристики развития рынка полимерных материалов и аддитивных технологий

Рынок автомобилестроения представляет собой один из наиболее динамичных сегментов потребления полимеров, где масса полимерных компонентов в современном автомобиле достигает двухсот килограммов и продолжает возрастать. Переход к электрической мобильности усиливает данную тенденцию, поскольку снижение массы конструкции становится важным фактором обеспечения приемлемого запаса хода. Медицинский сектор формирует спрос на специализированные биосовместимые полимеры для имплантатов, систем доставки лекарств и диагностического оборудования, где требования к чистоте, стерильности и функциональности материалов предельно высоки [11]. Электронная промышленность нуждается в полимерах с контролируемыми диэлектрическими свойствами, термостабильностью и способностью к миниатюризации компонентов. Упаковочная индустрия, являясь крупнейшим потребителем полимеров по объёму, переживает трансформацию под влиянием требований перерабатываемости и снижения экологического следа. Особое внимание занимает сегмент биополимеров и функциональных материалов, демонстрирующий темпы роста, существенно опережающие рынок в целом. Биополимеры, получаемые из возобновляемого сырья или способные к биологическому разложению, отвечают на растущий запрос общества к устойчивому развитию и циркулярной экономике. Функциональные полимеры, обладающие специфическими свойствами такими как электропроводность, фотохромность, способность к самовосстановлению или адаптивность к внешним условиям, формируют основу для инновационных продуктов в различных отраслях. Развитие этих направлений требует качественно нового подхода к проектированию материалов, поскольку традиционные рецептуры не способны обеспечить требуемые комбинации свойств. Рынок аддитивных технологий интенсивно расширяется, перемещаясь от нишевого применения в прототипировании к масштабному производству конечных изделий [12]. Наиболее значительный

рост наблюдается в сегментах послойного наплавления полимера, селективного лазерного спекания и стереолитографии, каждый из которых характеризуется специфическими требованиями к материалам. Технология послойного наплавления требует полимеров с определённым температурным профилем плавления и контролируемой вязкостью расплава. Селективное лазерное спекание предъявляет жёсткие требования к размеру частиц порошка и его способности к равномерному плавлению под воздействием лазерного излучения. Стереолитография опирается на фотополимеризующиеся составы с точно настроенной реакционной способностью [10].

Чтобы упорядочить данные о заинтересованных сторонах в подобном подходе или проектах в этой сфере, была создана матрица заинтересованных лиц. Она изображена на рисунке 1. Самые активные, мотивированные и обладающие наибольшим воздействием на проект стейкхолдеры расположены в правом верхнем квадранте матрицы. Масштаб фигурки отражает степень их важности в проектной экосистеме — от уровня участия до объема решений и ресурсов под их контролем. В эту категорию входят инвесторы, научные центры и производственные союзники. Участники с малым влиянием, но сильным интересом (к примеру, изготовители электроники) нуждаются в интенсивном информировании и постоянном общении, чтобы сформировать прочное доверие на перспективу. В свою очередь, группы с низкой заинтересованностью, но значительным влиянием (например, небольшие фирмы в автомобилестроении и авиации), способны стать ценными поставщиками отзывов и проверяющими удобства пользовательского интерфейса. Следовательно, необходимо брать во внимание нужды всех участников как при разработке платформы, так и при ее расширении на промышленные мощности.



**Рисунок 1** – Матрица стейкхолдеров

Источник: составлено авторами

Ограничением развития аддитивного производства выступает недостаточное разнообразие доступных материалов. Существующие стандартные рецептуры разработаны для широкого круга применений и не всегда способны удовлетворить специфические требования конкретных проектов. Инженеры и дизайнеры сталкиваются с ситуацией, когда геометрическая свобода, обеспечиваемая аддитивными технологиями, оказывается ограничена скудным выбором материалов с подходящими механическими, термическими или функциональными характеристиками. Данное несоответствие между возможностями технологии формообразования и доступностью материалов замедляет более

широкое промышленное внедрение трёхмерной печати.

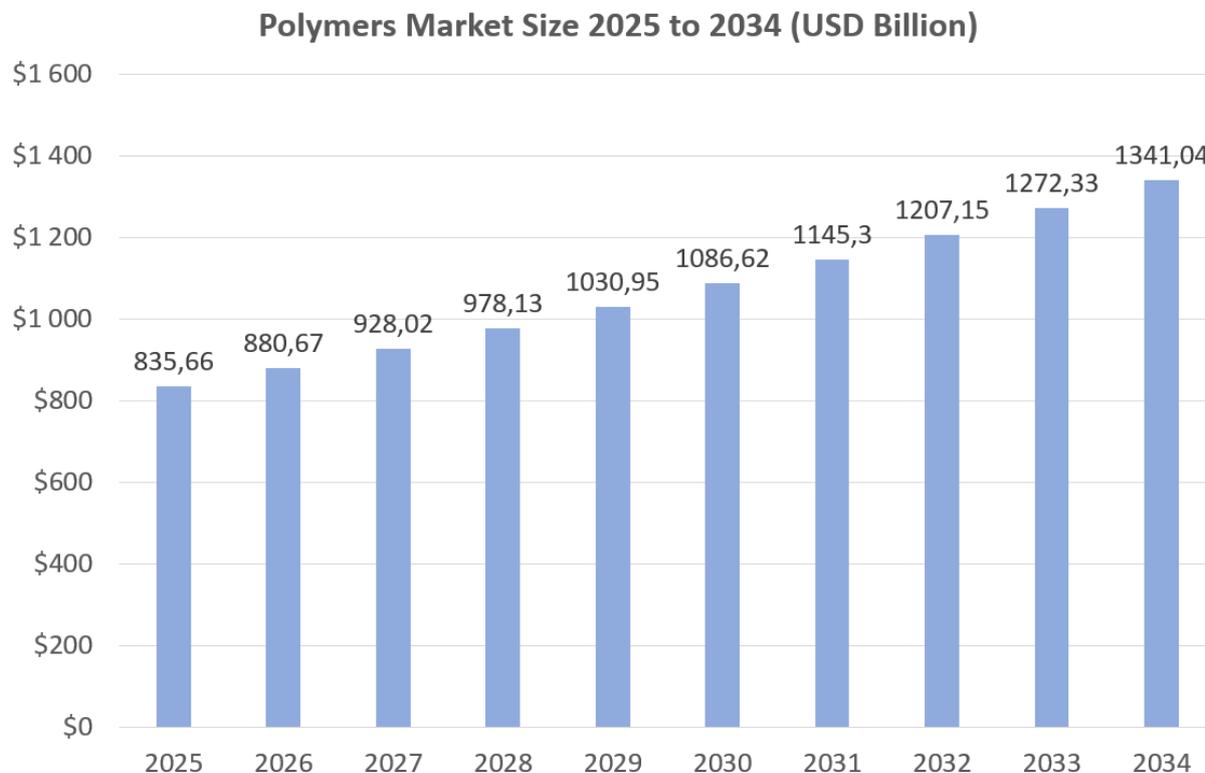
Современные аддитивные технологии накладывают многоуровневые требования к физико-химическим характеристикам печатных материалов, включая параметры термопластичности, реологического поведения, адгезионных свойств, термостойкости, кинетики отверждения, а также их совместимость с конструктивными и кинематическими особенностями оборудования. Вместе с тем существующий рынок полимерных материалов в значительной степени представлен ограниченным числом типовых композиций, которые не учитывают специфику конкретных изделий, эксплуатационных условий и сложной геометрии. В результате в среднесрочной перспективе ожидается рост потребности в высокопрочных, биосовместимых и функционализированных полимерах, а также в развитии аддитивных подходов, ориентированных на целенаправленное формирование таких материалов. Учитывая ускоряющееся развитие нейросетевых методов и экспоненциальный рост рынка интеллектуальных систем, внедрение технологий искусственного интеллекта в процессы 3D-печати становится объективной необходимостью для интенсификации задач проектирования и рационального подбора печатных материалов. [13].

Экономическое обоснование перехода к цифровым методам проектирования полимеров базируется на трёх взаимосвязанных факторах, каждый из которых формирует существенное конкурентное преимущество для компаний, осваивающих данный подход. Снижение издержек на исследования и разработки достигается за счёт сокращения количества необходимых экспериментальных итераций. Вычислительный скрининг позволяет оценить десятки тысяч кандидатных структур за время, которое ранее требовалось для синтеза и тестирования нескольких образцов. Экономия ресурсов становится особенно значительной на ранних стадиях разработки, где отсеивание неперспективных вариантов может происходить полностью в цифровой среде, без затрат на реактивы, оборудование и время специалистов. Ускорение вывода продуктов на рынок представляет важное преимущество в условиях сокращающихся жизненных циклов технологий. Компании, способные быстрее конкурентов создавать материалы с требуемыми свойствами, получают возможность первыми занять новые рыночные ниши и установить отраслевые стандарты. Цифровое проектирование сокращает время от формулирования требований до получения валидированного материала с нескольких лет до нескольких месяцев, обеспечивая значительное стратегическое преимущество. Данный фактор особенно важен для отраслей с высокой скоростью инноваций, таких как электроника и медицинская техника, где задержка с выводом продукта может означать потерю рыночной возможности. Демократизация доступа к передовым материалам открывает возможности для предприятий, не обладающих собственными материаловедческими подразделениями. Цифровые платформы проектирования материалов, работающие по модели «материалы как услуга», позволяют малым и средним компаниям получать индивидуально разработанные полимеры без необходимости создания дорогостоящей исследовательской инфраструктуры. Это снижает входные барьеры для инноваций и позволяет сконцентрироваться на разработке конечных продуктов, делегируя создание материалов специализированным провайдерам. Такая модель способствует распространению передовых материалов значительно более широкому кругу потребителей, стимулируя общий рост инноваций в промышленности.

По данным Precedence Research мировой рынок полимеров — \$835 млрд в 2025 году, с прогнозом роста до \$1,34 трлн к 2034 [27]. Подробнее, схема представлена на Рисунке 2.

Ключевыми игроками российского рынка полимерных материалов и аддитивных технологий являются несколько крупных промышленных компаний [6]. В частности, ПАО «СИБУР» осуществляет выпуск биоразлагаемых полимеров и сырья для FDM-печати, а также оказывает институциональную поддержку стартапам, работающим в области аддитивного производства. ПАО «Нижнекамскнефтехим» специализируется на производстве полистиролов и АБС-пластиков, востребованных при создании композитных материалов для технологий SLS и SLA. АО «Казаньоргсинтез» выпускает полиамидные материалы, используемые в составе высокопрочных

порошковых композиций для селективного лазерного спекания. Компания «Уралхим» разрабатывает и производит специализированные полимерные материалы на основе экспериментальных рецептов, ориентированные на промышленное аддитивное применение.



**Рисунок 2** – Прогноз рынка полимеров к 2034 году

*Источник: составлено исследовательской организацией Precedence Research*

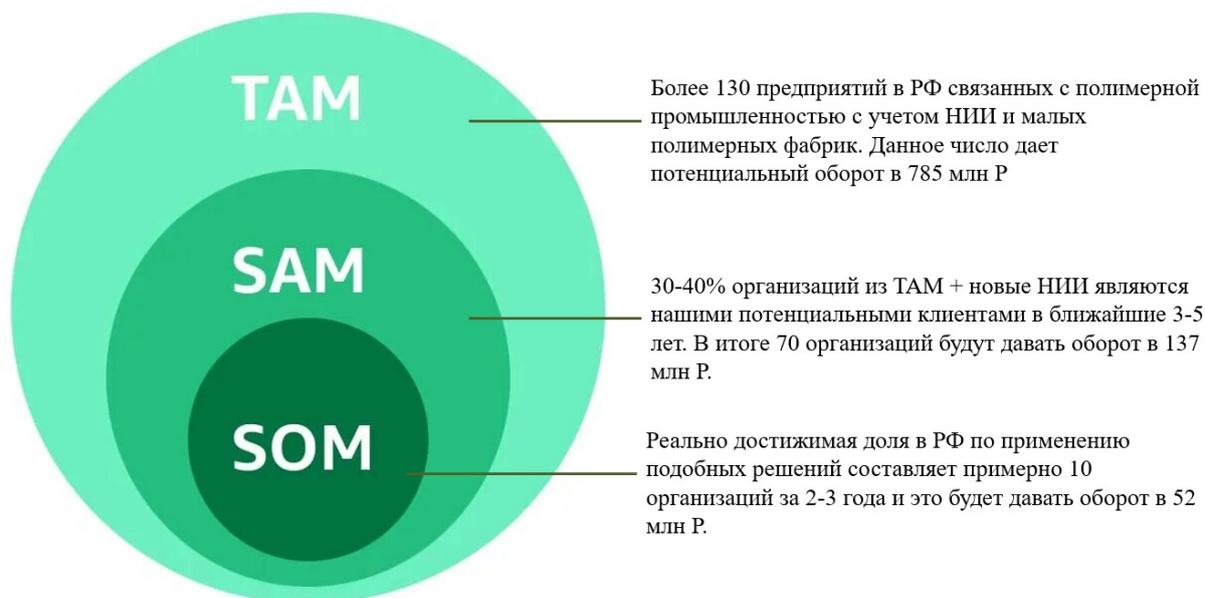
Для количественной оценки рыночного потенциала в сегменте полимеров и аддитивных технологий был выполнен анализ по методологии PAM-TAM-SAM-SOM, позволяющий определить ёмкость смежных рынков и степень их доступности. В качестве исходных параметров использовались показатели объёма рынка полимерных материалов и аддитивного производства. Согласно аналитическим оценкам McKinsey & Company, к апрелю 2025 года стоимость линейного полиэтилена и полипропилена составит порядка 900 долларов США за тонну на условиях CFR Северо-Восточная Азия и в диапазоне 1,3–1,5 тыс. долларов США за тонну на условиях CFR Европа [29]. На основе указанных данных, а также результатов предыдущего анализа, была рассчитана TAM-SAM-SOM-диаграмма, представленная на рисунке 3.

### **Ключевые технологические тренды цифрового инверсного проектирования полимеров**

Современный рынок цифрового инверсного проектирования полимеров формируется под влиянием нескольких взаимосвязанных технологических трендов, определяющих архитектуру и функциональность перспективных решений. Анализ этих трендов позволяет выявить направления развития отрасли и обосновать архитектурные решения, реализуемые в рамках настоящего проекта.

Глубинное обучение стало фундаментальным инструментом для решения задач «свойства → структура». Многослойные нейронные сети способны выявлять сложные нелинейные зависимости между молекулярными дескрипторами и целевыми характеристиками материалов, что принципиально недостижимо классическими регрессионными методами. В контексте инверсного проектирования полимеров глубинные модели обеспечивают работу модуля генерации, преобразующего векторы свойств в кандидатные структуры. Графовые нейронные сети (GNN) представляют особый интерес для полимерного материаловедения, поскольку естественным образом отражают топологию

молекулярных структур. В отличие от последовательных представлений (SMILES, SELFIES), графовые модели оперируют атомами как узлами и химическими связями как рёбрами, что позволяет учитывать трёхмерную конфигурацию макромолекул и их конформационные особенности [19]. Трансформерные архитектуры, первоначально разработанные для задач обработки естественного языка, демонстрируют выдающиеся результаты при работе с молекулярными последовательностями. Механизм внимания (attention) позволяет модели учитывать дальнедействующие взаимодействия между удалёнными фрагментами полимерной цепи, что важно для прогнозирования механических и термических свойств высокомолекулярных соединений [28].



**Рисунок 3** – TAM-SAM-SOM диаграмма

Источник: составлено авторами

Интерпретация технических заданий на естественном языке представляет собой один из наиболее значимых трендов, направленных на демократизацию доступа к инструментам компьютерного материаловедения. NLP-модуль, реализуемый в рамках проекта, выполняет синтаксический и семантический анализ пользовательского запроса, извлекая структурированные требования к свойствам материала из неформализованного текстового описания. Векторизация свойств обеспечивает преобразование извлечённых параметров в унифицированное числовое представление [29]. Этап нормализации приводит разнородные характеристики (температура стеклования, модуль упругости, химическая стойкость) к единому масштабу, формируя вектор свойств, пригодный для обработки генеративными моделями. Современные подходы используют обученные эмбединги, отражающие семантическую близость различных материаловедческих терминов. Снижение барьера входа для пользователей без химического образования является стратегическим преимуществом NLP-интерфейсов. Инженер-конструктор может сформулировать требования в терминах эксплуатационных характеристик изделия («устойчивость к агрессивным средам при температурах до 150°C»), не обладая знаниями о конкретных классах полимеров. Система автоматически транслирует эти требования в формализованные материаловедческие параметры.

Генерация новых полимерных цепей осуществляется с применением вариационных автоэнкодеров (VAE), генеративно-состязательных сетей (GAN) и авторегрессионных моделей. Модуль генерации проекта принимает вектор целевых свойств и синтезирует множество кандидатных структур в латентном пространстве, которые затем декодируются в молекулярные представления. Поиск нетривиальных решений составляет ключевое преимущество генеративного подхода перед традиционным скринингом баз данных. Модели способны предлагать структуры, не представленные

в обучающей выборке, открывая доступ к химическому пространству, не исследованному экспериментально. Это особенно ценно для создания полимеров с уникальными комбинациями свойств. Ограничения генеративных подходов связаны с проблемами химической валидности и синтетической доступности генерируемых структур [15]. Значительная доля предлагаемых моделями молекул может нарушать базовые правила валентности или содержать нестабильные функциональные группы, что обуславливает необходимость последующей верификации.

Синтезируемость является первичным критерием фильтрации [19]. Модуль проверки валидности анализирует предложенные структуры на соответствие правилам химии полимеров, оценивает доступность мономеров и реалистичность механизмов полимеризации. Современные подходы используют ретросинтетический анализ на основе машинного обучения. Технологичность определяет возможность промышленного масштабирования. Оцениваются условия синтеза, требования к оборудованию, воспроизводимость свойств при серийном производстве [32]. Обратная проверка свойств дает финальную проверку на валидность, которая покажет какие варианты наиболее подходят к пользовательскому запросу. Вероятностный расчёт на финальном этапе ранжирует кандидатов, наиболее подходящий по свойствам будет выведен пользователю, как верный. Экологические и регуляторные ограничения приобретают возрастающее значение в контексте устойчивого развития. Система верифицирует соответствие предлагаемых материалов требованиям REACH, RoHS и аналогичных регламентов, исключая структуры, содержащие запрещённые или ограниченные компоненты [17]. Интеграция этих критериев обеспечивает практическую применимость результатов инверсного проектирования.

### **Платформизация и экосистемный характер рынка**

Эволюция рынка цифрового инверсного проектирования полимеров характеризуется переходом от разрозненных специализированных инструментов к комплексным платформенным решениям. Данная тенденция отражает общую логику цифровой трансформации промышленности и создаёт новые требования к архитектуре разрабатываемых систем.

End-to-end подход становится определяющей характеристикой конкурентоспособных решений на рынке компьютерного материаловедения. В отличие от традиционной парадигмы, предполагающей использование отдельных программных продуктов для каждого этапа разработки материала, современные платформы обеспечивают непрерывный процесс от формулирования требований до получения готовых рекомендаций [29]. Архитектура проекта инверсного проектирования полимеров полностью соответствует данному тренду: последовательность модулей (NLP-обработка, нормализация, генерация, валидация, обратная проверка, ранжирование) реализует сквозной процесс без необходимости ручного переноса данных между компонентами. Пользователь взаимодействует с единым интерфейсом, получая результат в формате, готовом к практическому применению [16]. Замкнутый цифровой цикл «запрос, модель, материал» представляет собой концептуальную основу платформенного подхода. Цикл включает следующие стадии: формализация пользовательского запроса средствами NLP, построение вектора целевых свойств, генерация кандидатных структур, их верификация и вероятностный отбор оптимального решения. Замкнутость цикла обеспечивается механизмами обратной связи: результаты экспериментальной проверки рекомендованных материалов могут использоваться для дообучения моделей, повышая точность последующих прогнозов. Платформенная модель создаёт значительные преимущества для пользователей: сокращение времени от идеи до материала, снижение требований к квалификации персонала, стандартизация процессов разработки. Для поставщиков решений платформы обеспечивают устойчивые бизнес-модели на основе подписки и возможности монетизации накопленных данных.

Интеграция с CAD/CAE-системами обеспечивает бесшовное встраивание инверсного проектирования в процессы конструкторской разработки. Инженер, проектирующий изделие в среде CATIA, SolidWorks или ANSYS, получает возможность непосредственно из рабочего окружения сформулировать требования к материалу и получить рекомендации по выбору

полимера. Двухнаправленный обмен данными позволяет автоматически учитывать геометрические и нагрузочные характеристики детали при формировании вектора целевых свойств. Современные САЕ-платформы интегрируют результаты инверсного проектирования в симуляционные модели, обеспечивая верификацию рекомендованных материалов на этапе виртуального прототипирования. Это существенно сокращает итерационный цикл «проектирование → испытание → корректировка». Интеграция с PLM (Product Lifecycle Management) и ELN (Electronic Laboratory Notebooks) обеспечивает прослеживаемость материаловедческих решений на протяжении всего жизненного цикла продукта. PLM-системы фиксируют обоснование выбора материала, параметры запроса и характеристики рекомендованных кандидатов, что важно для сертификации продукции и управления изменениями. Электронные лабораторные журналы аккумулируют экспериментальные данные, которые могут использоваться для валидации прогнозов системы инверсного проектирования и формирования обучающих выборок. Интеграция с ELN превращает рутинную лабораторную работу в источник ценных данных для совершенствования алгоритмов. Роботизированные лаборатории представляют наиболее перспективное направление интеграции, обеспечивающее автоматическое экспериментальное подтверждение результатов цифрового проектирования. Платформы инверсного проектирования могут напрямую передавать спецификации синтеза рекомендованных полимеров на роботизированные синтезаторы, а результаты автоматизированных испытаний — возвращаться в систему для калибровки моделей. Такой подход реализует концепцию «самоуправляемых лабораторий» (self-driving labs), где цикл «гипотеза → эксперимент → анализ» выполняется с минимальным участием человека. Ведущие исследовательские центры и корпорации активно инвестируют в создание подобных инфраструктур, что формирует устойчивый спрос на платформы инверсного проектирования с развитыми интеграционными возможностями.

Масштабируемость решений обеспечивается модульной архитектурой, при которой каждый функциональный компонент системы (NLP-модуль, модуль нормализации, генеративная модель, валидатор) реализован как независимый сервис с определённым программным интерфейсом [26]. Такой подход позволяет гибко масштабировать отдельные компоненты в зависимости от нагрузки и заменять их улучшенными версиями без переработки всей системы. API-ориентированная архитектура создаёт возможности для построения экосистемы вокруг базовой платформы. Сторонние разработчики могут создавать специализированные модули для отдельных классов полимеров, отраслевых применений или региональных регуляторных требований, расширяя функциональность платформы без участия её создателей [9]. Микросервисная организация системы инверсного проектирования соответствует современным стандартам облачной разработки и обеспечивает развёртывание как в публичных облачных средах, так и в контролируемых корпоративных инфраструктурах, что важно для заказчиков с высокими требованиями к конфиденциальности данных.

Межотраслевая применимость достигается за счёт параметризации и настраиваемости платформенных решений. Базовая архитектура «запрос → свойства → структура → валидация» сохраняет универсальность, тогда как отраслевая специфика реализуется через конфигурируемые компоненты: словари NLP-модуля адаптируются под терминологию конкретной отрасли, модуль валидации настраивается на соответствующие регуляторные требования, система ранжирования учитывает отраслевые приоритеты. Единая платформа с отраслевыми профилями может обслуживать производителей автомобильных компонентов, медицинских изделий, упаковочных материалов и электронных устройств, обеспечивая эффект масштаба для поставщика и снижая совокупную стоимость владения для заказчиков. Данная модель формирует значительные барьеры для входа новых участников рынка и укрепляет позиции платформ.

### **Рыночные и институциональные тренды**

Развитие рынка цифрового инверсного проектирования полимеров определяется не только технологическими факторами, но и трансформацией институциональной среды, изменением

структуры спроса и усилением регуляторного давления. Понимание этих трендов необходимо для позиционирования разрабатываемых решений и формирования устойчивых бизнес-моделей.

Аутсорсинг R&D становится преобладающей стратегией для компаний среднего размера, не располагающих ресурсами для содержания собственных материаловедческих лабораторий. Традиционно разработка новых полимерных материалов требовала значительных инвестиций в оборудование, реактивы и квалифицированный персонал, что ограничивало инновационный потенциал небольших производителей. Платформы инверсного проектирования радикально меняют эту парадигму, предоставляя доступ к передовым вычислительным методам по модели «как услуга» (Materials-as-a-Service). Компания, производящая специализированные полимерные изделия, может сформулировать требования к материалу через NLP-интерфейс и получить обоснованные рекомендации без необходимости проведения масштабных экспериментальных исследований. Верификация ограниченного числа наиболее перспективных кандидатов заменяет трудоёмкий перебор вариантов. Снижение капитальных затрат достигается за счёт перехода от владения инфраструктурой к потреблению сервисов. Облачное развёртывание платформ инверсного проектирования устраняет необходимость инвестиций в вычислительное оборудование и специализированное программное обеспечение. Подписная модель трансформирует капитальные расходы в операционные, что улучшает финансовые показатели и снижает риски для малого бизнеса. Демократизация доступа к инструментам компьютерного материаловедения формирует новый сегмент рынка с высоким потенциалом роста. Аналитики прогнозируют опережающий рост спроса именно со стороны SME-сектора, что определяет приоритетность разработки интуитивных интерфейсов и гибких тарифных планов.

Университеты играют ключевую роль в развитии методологической базы инверсного проектирования. Академические исследовательские группы разрабатывают новые архитектуры нейронных сетей, методы молекулярного представления и алгоритмы оптимизации, которые впоследствии коммерциализируются промышленными партнёрами. Университетские лаборатории также служат источником экспериментальных данных и площадками для валидации вычислительных подходов. Модель открытой науки способствует ускоренному распространению инноваций: публикация предобученных моделей, датасетов и программных библиотек снижает барьеры входа для новых участников рынка. Ведущие платформы активно интегрируют результаты академических исследований, обеспечивая трансфер технологий из лабораторий в промышленность. Промышленные партнёрства формируют экосистему совместного создания ценности. Производители полимеров, переработчики и конечные потребители объединяются в консорциумы для формирования отраслевых баз данных, разработки стандартов обмена информацией и совместного финансирования предконкурентных исследований. Такие инициативы, как Materials Genome Initiative в США или аналогичные программы в ЕС и Азии, создают инфраструктуру для масштабирования цифровых материаловедческих решений. Государственные программы обеспечивают стратегическую поддержку развития отрасли. Правительства технологически развитых стран рассматривают компьютерное материаловедение как важное направление, определяющее конкурентоспособность национальной промышленности. Грантовое финансирование, налоговые льготы и государственные закупки стимулируют инвестиции частного сектора и ускоряют внедрение инновационных решений.

Устойчивое развитие становится императивом для химической и полимерной промышленности. Глобальные обязательства по декарбонизации и переходу к циркулярной экономике создают спрос на материалы с улучшенным экологическим профилем. Платформы инверсного проектирования способны интегрировать показатели устойчивости непосредственно в вектор целевых свойств, обеспечивая поиск материалов с заданным углеродным следом или потенциалом рециклинга. Экологичность материалов учитывается на этапе валидации генерируемых структур. Модуль проверки может автоматически исключать кандидатов, содержащие токсичные компоненты или требующие экологически неприемлемых технологий синтеза. Интеграция баз данных по экотоксичности

и биоразлагаемости позволяет ранжировать рекомендации с учётом экологических критериев. Регуляторные требования (REACH, TSCA, аналогичные национальные регламенты) существенно ограничивают пространство допустимых решений [23]. Встраивание регуляторных фильтров в архитектуру платформы исключает рекомендацию материалов, не соответствующих нормативным требованиям целевых рынков. Трассируемость данных приобретает большое значение в контексте ESG-отчётности и ответственного ведения бизнеса. Платформы инверсного проектирования должны обеспечивать полную прослеживаемость процесса принятия решений: от исходного запроса через промежуточные этапы обработки до финальной рекомендации. Аудируемость алгоритмов и документирование использованных данных становятся обязательными требованиями для применения в регулируемых отраслях. Соответствие ESG-стандартам трансформируется из фактора репутации в условие доступа к капиталу и рынкам, что усиливает спрос на платформенные решения с развитыми функциями устойчивого проектирования.

### Основные риски и ограничения развития рынка

Несмотря на значительный потенциал цифрового инверсного проектирования полимеров, развитие рынка сдерживается рядом системных ограничений технологического, методологического и организационного характера. Объективная оценка этих рисков необходима для формирования реалистичных ожиданий и разработки стратегий их митигации.

Проблема «чёрного ящика» представляет фундаментальное ограничение для широкого внедрения нейросетевых методов в материаловедческую практику. Глубинные модели, обеспечивающие работу модуля генерации и модуля проверки свойств, оперируют миллионами параметров, логика взаимодействия которых не поддаётся человеческой интерпретации. Система способна рекомендовать полимер с заданными характеристиками, однако не может объяснить, какие именно структурные особенности обуславливают прогнозируемые свойства. Данная проблема особенно остро проявляется в контексте инверсного проектирования, где генеративные модели синтезируют новые структуры, не представленные в обучающих данных. Отсутствие причинно-следственного обоснования рекомендаций затрудняет их экспертную оценку и создаёт риски предложения химически некорректных или практически нереализуемых решений. Современные подходы к объяснимому ИИ (Explainable AI, XAI) — карты внимания, анализ значимости признаков, методы SHAP и LIME — обеспечивают частичную интерпретируемость, однако их применение к задачам молекулярной генерации остаётся предметом активных исследований [25]. Интеграция XAI-компонентов в архитектуру платформы инверсного проектирования требует дополнительных вычислительных ресурсов и может снижать производительность системы. Ограничения доверия со стороны инженеров формируют поведенческий барьер для принятия технологии. Специалисты-материаловеды, обладающие глубокой экспертизой в области полимерной химии, склонны скептически относиться к рекомендациям системы, механизм формирования которых им непонятен. Парадоксально, но наиболее квалифицированные потенциальные пользователи демонстрируют наибольшее сопротивление внедрению. Преодоление этого барьера требует не только технических решений по повышению интерпретируемости, но и организационных мер: обучения персонала, накопления успешных кейсов применения, постепенного встраивания ИИ-рекомендаций в существующие рабочие процессы как вспомогательного, а не замещающего инструмента. Формирование доверия — длительный процесс, сдерживающий темпы коммерциализации решений.

Смещение выборок представляет системную проблему для всех data-driven подходов в материаловедении. Исторически экспериментальные исследования концентрировались на ограниченном числе коммерчески успешных классов полимеров, что привело к выраженной неоднородности доступных данных. Модели, обученные на таких выборках, демонстрируют высокую точность для хорошо изученных материалов и значительные ошибки для редких или новых химических классов [20]. Проблема смещения проецируется на все этапы пайплайна инверсного проектирования. NLP-модуль может неадекватно интерпретировать запросы, относящиеся к малоизученным областям

применения. Модуль генерации склонен воспроизводить структуры, сходные с преобладающими в обучающей выборке. Модуль проверки свойств даёт менее надёжные прогнозы для атипичных кандидатов. Кумулятивный эффект смещения снижает ценность системы именно в тех случаях, где она потенциально наиболее полезна — при поиске нетривиальных решений. Ограниченность экспериментальных данных усугубляется спецификой полимерного материаловедения. В отличие от низкомолекулярных соединений, свойства полимеров существенно зависят от условий синтеза, молекулярно-массового распределения, морфологии и истории термомеханической обработки. Два образца номинально идентичного полимера могут демонстрировать значительно различающиеся характеристики, что создаёт шум в обучающих данных. Проприетарный характер значительной части промышленных данных дополнительно ограничивает доступные ресурсы. Компании неохотно публикуют результаты внутренних исследований, рассматривая их как конкурентное преимущество. Инициативы по созданию открытых баз данных (Polymer Genome, PolyInfo, CRIPT) частично решают эту проблему, однако объём и качество доступной информации остаются недостаточными для полноценного обучения универсальных моделей [31].

Расхождение лабораторных и реальных свойств составляет ограничение практической применимости инверсного проектирования. Модели обучаются преимущественно на данных, полученных в контролируемых лабораторных условиях: стандартизированные методики синтеза, чистые реагенты, оптимизированные протоколы испытаний. Промышленное производство характеризуется неизбежными вариациями параметров процесса, примесями в сырье, отличающимися режимами переработки. Полимер, демонстрирующий целевые свойства в лабораторном масштабе, может существенно отличаться по характеристикам при промышленном производстве. Вероятностный расчёт на финальном этапе пайплайна ранжирует кандидатов по близости к целевому вектору свойств, однако этот расчёт базируется на лабораторных корреляциях и не учитывает технологические факторы масштабирования. Масштабирование и воспроизводимость формируют практический разрыв между рекомендацией системы и её реализацией. Генеративная модель может предложить структуру с оптимальными прогнозируемыми свойствами, синтез которой в промышленном масштабе технически невозможен или экономически нецелесообразен. Модуль проверки валидности оценивает принципиальную синтезируемость, но не способен полноценно учесть ограничения конкретного производственного оборудования и доступной сырьевой базы. Воспроизводимость результатов между различными производственными площадками также остаётся проблемой. Рекомендованный материал, успешно освоенный на одном предприятии, может требовать существенной адаптации технологии при переносе на другое. Платформы инверсного проектирования пока не обеспечивают достаточного уровня детализации технологических рекомендаций для гарантированного воспроизведения результатов. Преодоление данного разрыва требует интеграции производственных данных в обучающие выборки, разработки моделей, учитывающих технологические параметры, и тесного взаимодействия с промышленными партнёрами для валидации рекомендаций в реальных условиях.

### **Перспективные направления развития рынка**

Анализ текущих трендов и технологических возможностей позволяет выделить ключевые направления, которые будут определять развитие рынка цифрового инверсного проектирования полимеров в среднесрочной и долгосрочной перспективе. Эти направления формируют стратегические ориентиры для развития платформенных решений и расширения их функциональности.

Автономные R&D-контуры представляют следующий эволюционный этап развития систем инверсного проектирования. Концепция предполагает создание замкнутых циклов, в которых результаты экспериментальной верификации автоматически используются для совершенствования вычислительных моделей. Полимер, рекомендованный системой и синтезированный в роботизированной лаборатории, проходит автоматизированные испытания, результаты которых сопоставляются с прогнозами и направляются на дообучение нейросетевых компонентов.

Архитектура проекта инверсного проектирования создаёт предпосылки для реализации такого контура. Вероятностный расчёт на финальном этапе пайплайна может быть расширен модулем обратной связи, принимающим экспериментальные данные и корректирующим параметры модуля генерации и модуля проверки свойств. Итеративное накопление верифицированных результатов повышает точность прогнозов и расширяет область применимости системы. Автономные контуры минимизируют участие человека в рутинных операциях, концентрируя экспертизу на стратегических решениях и интерпретации нетривиальных результатов. Это принципиально меняет роль материалововеда — от исполнителя экспериментов к куратору интеллектуальных систем [27]. Ускорение инновационного цикла достигается за счёт параллелизации и автоматизации. Традиционная последовательность «гипотеза → планирование → синтез → испытание → анализ → корректировка» растягивается на месяцы и годы. Автономные R&D-контуры способны выполнять десятки итераций в сутки, радикально сокращая время от формулирования требований до получения валидированного материала. Прогнозы отраслевых аналитиков указывают на возможное сокращение цикла разработки новых полимерных материалов с типичных от 1-3 лет до 10-12 месяцев при полноценном внедрении автономных систем [15]. Это создаёт значительные конкурентные преимущества для ранних последователей технологии и трансформирует динамику инноваций в отрасли.

Композитные материалы представляют естественное направление расширения применимости методов инверсного проектирования. Композиты объединяют полимерную матрицу с наполнителями различной природы, что многократно усложняет пространство возможных решений. Архитектура «свойства → структура» может быть адаптирована для одновременной оптимизации состава матрицы, типа и морфологии наполнителя, межфазного взаимодействия. Модуль генерации в этом случае оперирует расширенным представлением, включающим как молекулярную структуру полимера, так и характеристики армирующих компонентов. Модуль проверки валидности дополняется оценкой совместимости компонентов и технологичности формирования композита. Рынок высокопроизводительных композитов для аэрокосмической, автомобильной и энергетической отраслей формирует устойчивый спрос на подобные решения. Металлы и сплавы демонстрируют значительный потенциал для применения аналогичных подходов. Инверсное проектирование металлических материалов направлено на оптимизацию химического состава и микроструктуры для достижения целевых механических, термических и коррозионных характеристик. Методологическая база, разработанная для полимеров, может быть перенесена на металлургическую область с соответствующей адаптацией молекулярных представлений и физических моделей. Керамические материалы и функциональные оксиды расширяют спектр применений в электронике, энергетике и биомедицине. Специфика керамик — кристаллическая структура, дефектная химия, высокотемпературные процессы — требует существенной модификации генеративных моделей, однако общая логика инверсного проектирования сохраняет применимость [28]. Универсализация платформ для работы с различными классами материалов создаёт эффект масштаба и укрепляет рыночные позиции ведущих разработчиков.

Цифровые паспорта материалов становятся инструментом обеспечения прослеживаемости и качества в глобальных цепочках поставок. Паспорт содержит исчерпывающую информацию о материале: химический состав, структурные характеристики, свойства, условия производства, экологический профиль, регуляторный статус. Стандартизированный формат обеспечивает интероперабельность между различными участниками отрасли. Платформы инверсного проектирования интегрируются в экосистему цифровых паспортов как источник верифицированных данных о рекомендованных материалах. Результат работы системы — полимер с наиболее близкими свойствами — может автоматически оформляться в формате цифрового паспорта, готового для передачи в PLM-системы и цепочки поставок [24]. Это обеспечивает сквозную цифровизацию от проектирования до эксплуатации. Базы знаний нового поколения объединяют экспериментальные

данные, результаты вычислительного моделирования и экспертные знания в единые семантически связанные структуры. Онтологии материаловедения обеспечивают машиночитаемое представление отношений между структурой, свойствами и применениями, создавая основу для интеллектуального поиска и автоматизированного рассуждения. NLP-модуль системы инверсного проектирования может использовать такие базы знаний для обогащения интерпретации пользовательских запросов и расширения контекста генерации. Интеграция с глобальными репозиториями материаловедческих данных повышает качество рекомендаций и обеспечивает доступ к актуальной информации о новых разработках.

### Заключение

Проведённый анализ глобальных трендов рынка цифрового инверсного проектирования полимеров позволяет систематизировать ключевые факторы, определяющие текущее состояние и перспективы развития данной области.

Систематизация выявленных трендов демонстрирует многоуровневый характер происходящих трансформаций. На технологическом уровне определяющую роль играют нейросетевые методы — глубинное обучение, графовые сети и трансформерные архитектуры, — обеспечивающие решение задачи «свойства → структура». Интеграция NLP-модулей для обработки инженерных требований на естественном языке снижает барьеры входа и расширяет круг потенциальных пользователей. Генеративные модели открывают доступ к неизученным областям химического пространства, тогда как многоуровневая верификация обеспечивает практическую применимость рекомендаций. На организационном уровне наблюдается переход от разрозненных инструментов к интегрированным платформам, реализующим сквозной цикл «запрос → модель → материал». Экосистемная интеграция с CAD/CAE, PLM, ELN и роботизированными лабораториями формирует инфраструктуру автономных R&D-контуров. API-ориентированные архитектуры обеспечивают масштабируемость и межотраслевую применимость решений. На институциональном уровне фиксируется расширение спроса со стороны малого и среднего бизнеса, активизация консорциумов и открытых инициатив, усиление влияния регуляторных и ESG-факторов на требования к материалам.

Экономическая и технологическая значимость цифрового инверсного проектирования определяется его потенциалом радикального сокращения сроков и стоимости разработки новых материалов. Традиционный цикл создания полимера с заданными свойствами, занимающий годы и требующий значительных экспериментальных ресурсов, может быть сжат до месяцев при сохранении или повышении качества результата [22]. Экономический эффект масштабируется на все отрасли, использующие полимерные материалы, — от упаковки и строительства до аэрокосмической техники и медицины. Технологическая значимость выходит за рамки оптимизации существующих процессов. Инверсное проектирование открывает возможности создания материалов с комбинациями свойств, недостижимыми при традиционном подходе. Генеративные модели способны предлагать структуры, не рассматривавшиеся исследователями, расширяя границы инженерных решений.

Роль искусственного интеллекта в развитии рынка носит инфраструктурный характер. ИИ не является отдельным продуктом или сервисом, но выступает сквозной технологией, пронизывающей все компоненты системы инверсного проектирования: от обработки естественного языка на входе до вероятностного ранжирования на выходе. Каждый модуль архитектуры — NLP-обработка, нормализация параметров, генерация структур, проверка валидности, расчёт соответствия — опирается на методы машинного обучения. Инфраструктурная природа ИИ определяет специфику конкуренции на рынке: преимущество получают не разработчики отдельных алгоритмов, но создатели комплексных платформ, интегрирующих множество ИИ-компонентов в единый рабочий процесс. Накопление данных и непрерывное совершенствование моделей формируют кумулятивные конкурентные преимущества, усиливающиеся со временем.

Перспективы формирования новой парадигмы материаловедения связаны с переходом от эмпирического поиска к целенаправленному проектированию. Классическая парадигма

предполагала синтез материала с последующим изучением его свойств и поиском применений. Инверсная парадигма исходит из требуемых свойств, выводя из них оптимальную структуру. Этот концептуальный разворот трансформирует логику исследований и разработок, роль эксперимента и место человека-исследователя. В формирующейся парадигме эксперимент не исчезает, но меняет функцию: из инструмента поиска он становится инструментом верификации. Роботизированные лаборатории, интегрированные с платформами инверсного проектирования, обеспечивают автоматизированное подтверждение вычислительных прогнозов. Материаловед трансформируется из экспериментатора в архитектора интеллектуальных систем и интерпретатора их результатов.

Реализация проекта инверсного проектирования полимеров «от свойств к структуре» вписывается в описанные глобальные тренды и отвечает формирующемуся рыночному спросу. Архитектура системы — от NLP-обработки пользовательского запроса через генерацию и верификацию к вероятностному отбору оптимального кандидата — соответствует передовым практикам отрасли и создаёт основу для интеграции в экосистему цифрового материаловедения.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Воеводина, Е. И. Области применения технологий искусственного интеллекта в бизнесе / Е. И. Воеводина, В. А. Кваша, А. Д. Бурыкин // Мягкие измерения и вычисления. – 2022. – Т. 61, № 12. – С. 75–83.
2. Воеводина, Е. И. Современные системы поддержки принятия решений и проблемы использования в них нейронных сетей / Е. И. Воеводина, Ю. М. Гуляева, Д. Е. Варахтин [и др.] // Экономика и управление: проблемы, решения. – 2023. – Т. 2, № 2(134). – С. 69–74.
3. Кичатов, К. Г. Применение цифровых инструментов для создания полимеров с заданными свойствами / К. Г. Кичатов, Т. Р. Просочкина, Р. Ф. Хамадалиев [и др.] // Башкирский химический журнал. – 2023. – Т. 30, № 2. – С. 56–59. – DOI: 10.17122/бсж-2023-2-56-59.
4. Кудрявцев, И. В. Исследование технологии послойного синтеза при создании изделий из термопластичных полимеров с заданными свойствами / И. В. Кудрявцев, К. Д. Кузнецова, Д. С. Котов // Оптические технологии, материалы и системы («Оптотех 2022»): сборник докладов конференции, Москва, 05–10 декабря 2022 года. – Москва: МИРЭА – Российский технологический университет, 2022. – С. 321–324.
5. Объем мирового рынка полимеров к 2030 году [Электронный ресурс]. – URL: <https://www.icrowdru.com/2024/08/27/объем-мирового-рынка-полимеров-к-2030-год/> (дата обращения: 24.11.2025).
6. СИБУР. Объем производства полимеров в России [Электронный ресурс]. – URL: <https://www.sibur.ru/ru/> (дата обращения: 20.10.2025).
7. Audus, D. J. Polymer informatics: Opportunities and challenges / D. J. Audus, J. J. de Pablo // ACS Macro Letters. – 2017. – Vol. 6, No. 10. – P. 1078–1082.
8. Butler, K. T. Machine learning for molecular and materials science / K. T. Butler, D. W. Davies, H. Cartwright [et al.] // Nature. – 2018. – Vol. 559. – P. 547–555.
9. Citrine Informatics. AI-driven materials design and inverse design platforms [Электронный ресурс]. – URL: <https://citrine.io/resources/> (дата обращения: 26.11.2025).
10. Copolymer informatics with multi-task deep neural networks [Электронный ресурс]. – URL: <https://www.researchgate.net/publication/350456853> (дата обращения: 25.11.2025).
11. Court, C. J. Auto-generated materials discovery pipelines using text mining / C. J. Court, J. M. Cole // Advanced Materials. – 2018. – Vol. 30, No. 20. – Art. 1704944.
12. European Commission. Digital Product Passport under the Ecodesign Regulation [Электронный ресурс]. – URL: [https://environment.ec.europa.eu/topics/circular-economy/digital-product-passport\\_en](https://environment.ec.europa.eu/topics/circular-economy/digital-product-passport_en) (дата обращения: 26.11.2025).
13. Gibson, I. Additive Manufacturing Technologies / I. Gibson, D. Rosen, B. Stucker. – Springer, 2021. – 498 p.
14. Gilmer, J. Neural message passing for quantum chemistry / J. Gilmer, S. S. Schoenholz, P. F. Riley [et al.] // Proceedings of ICML. – 2017. – P. 1263–1272.
15. Häse, F. Next-generation experimentation with self-driving laboratories / F. Häse, L. M. Roch, A. Aspuru-Guzik // Trends in Chemistry. – 2019. – Vol. 1, No. 3. – P. 282–291.
16. Jain, A. The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation / A. Jain, S. P. Ong, G. Hautier [et al.] // APL Materials. – 2013. – Vol. 1, No. 1. – Art. 011002.
17. Kearnes, S. Molecular graph convolutions: moving beyond fingerprints / S. Kearnes, K. McCloskey, M. Berndl [et al.] // Journal of Computer-Aided Molecular Design. – 2016. – Vol. 30. – P. 595–608.
18. Kim, C. Polymer informatics: Current status and critical next steps / C. Kim, T. J. Webb, J. J. de Pablo // Materials Science and Engineering R. – 2021. – Vol. 147. – Art. 100627.
19. Kuenneth, C. PolyBERT: a chemical language model for polymer property prediction / C. Kuenneth, G. Ramakrishnan, M. Häse [et al.] // Nature Communications. – 2023. – Vol. 14. – Art. 4098.
20. Materials Genome Initiative [Электронный ресурс]. – URL: <https://www.mgi.gov> (дата

обращения: 26.11.2025).

21. McKinsey & Company. The future of materials informatics and R&D digitalization [Электронный ресурс]. – URL: <https://www.mckinsey.com/industries/chemicals/our-insights> (дата обращения: 27.11.2025).

22. McKinsey & Company. The state of the chemicals industry: Time for bold action and innovation [Электронный ресурс]. – URL: <https://www.mckinsey.com/industries/chemicals/our-insights/the-state-of-the-chemicals-industry-time-for-bold-action-and-innovation> (дата обращения: 27.11.2025).

23. Ngo, T. D. Additive manufacturing (3D printing): A review of materials, methods, applications / T. D. Ngo, A. Kashani, G. Imbalzano [et al.] // *Composites Part B*. – 2018. – Vol. 143. – P. 172–196.

24. OECD. Advanced materials for sustainability and industrial competitiveness [Электронный ресурс]. – URL: <https://www.oecd.org/innovation/advanced-materials/> (дата обращения: 27.11.2025).

25. Olson, G. B. Designing a new material world // *Science*. – 2000. – Vol. 288, No. 5468. – P. 993–998.

26. polyOne Data Set: 100 million hypothetical polymers including 29 properties [Электронный ресурс]. – URL: <https://zenodo.org/records/7766806> (дата обращения: 25.11.2025).

27. Precedence research. Polymers Market Strengthen industrial application with bio-based materials, lightweight thermoplastics, and Asia-Pacific scale [Электронный ресурс]. – URL: <https://www.precedenceresearch.com/polymers-market> (дата обращения: 27.11.2025).

28. Rajan, K. Materials informatics: The materials “gene” and big data // *Annual Review of Materials Research*. – 2015. – Vol. 45. – P. 153–169.

29. Schmidt, J. Recent advances and applications of machine learning in solid-state materials science / J. Schmidt, M. R. G. Marques, S. Botti, M. A. L. Marques // *npj Computational Materials*. – 2019. – Vol. 5. – Art. 83.

30. Schwaller, P. Molecular transformer: A model for uncertainty-calibrated chemical reaction prediction / P. Schwaller, T. Laino, T. Gaudin [et al.] // *ACS Central Science*. – 2019. – Vol. 5, No. 9. – P. 1572–1583.

31. Training data set for the property predictors [Электронный ресурс]. – URL: <https://www.nature.com/articles/s41467-023-39868-6/tables/1> (дата обращения: 25.11.2025).

32. Tshitoyan, V. Unsupervised word embeddings capture latent knowledge from materials science literature / V. Tshitoyan, J. Dagdelen, L. Weston [et al.] // *Nature*. – 2019. – Vol. 571. – P. 95–98.

# Key global trends in the digital inverse engineering market

## Krutov Anton Antonovich

Student  
Yaroslavl State Technical University, Yaroslavl, Russia  
E-mail: ffaniik@mail.ru

## Bychkov Evgeniy Aleksandrovich

Student  
Yaroslavl State Technical University, Yaroslavl, Russia  
E-mail: evgenybychkov3@gmail.com

## Voevodina Elena Ivanovna

Postgraduate Student,  
Yaroslavl State Technical University, Yaroslavl, Russian Federation,  
E-mail: voevodinaei@ystu.ru

## Salnikov Aleksandr Mikhailovich

Candidate of Economic Sciences, Associate Professor  
Financial University under the Government of the Russian Federation (Yaroslavl Branch), Yaroslavl, Russian Federation  
E-mail: AMSalnikov@fa.ru

---

### KEYWORDS

digital inverse engineering; industrial digital transformation; polymer materials market; additive manufacturing; innovation economics; artificial intelligence in industry; platform-based business models; research and development (R&D); high-tech markets

### ABSTRACT

The article provides a comprehensive analysis of global technological, market, and institutional trends in the development of digital inverse engineering of polymer materials, with a particular focus on applications in additive manufacturing. It is demonstrated that traditional empirical approaches to polymer development increasingly fail to meet modern industrial requirements, which are characterized by growing product complexity, shortened innovation cycles, and the need for rapid delivery of materials with precisely defined properties. The concept of inverse engineering is examined as an alternative paradigm, where material development starts from target performance characteristics, and the selection of structure and composition is carried out using computational modeling and artificial intelligence methods. The study reviews key technological drivers of digital materials science, including machine learning techniques, generative models, graph neural networks, and natural language processing for the formalization of engineering requirements. Special attention is given to platform-based solutions that implement a closed digital loop “request — model — material” and their integration with CAD/CAE, PLM, ELN systems, and robotic laboratories. The economic rationale for adopting digital inverse engineering is analyzed, highlighting reduced R&D costs, accelerated commercialization of new materials, and the democratization of access to advanced materials design capabilities for small and medium-sized enterprises. The paper identifies major barriers to market development, including data scarcity, limited interpretability of AI models, and discrepancies between laboratory-scale predictions and industrial-scale performance. Perspective directions are outlined, such as autonomous R&D loops, extension of inverse design approaches to composite and functional materials, and the integration of sustainability and regulatory constraints into digital platforms. The results of the study can support strategic decision-making in the development of digital materials design platforms and in assessing the long-term growth potential of the industry.

---