 **Какво е температура на встъкляване?**  
Температурата на встъкляване е важен параметър, който се взема предвид при избора на материали за битови и промишлени цели.

 **Експериментални методи за определяне на температурата на встъкляване:**

* Диференциален термичен анализ (DTA)
* Диференциална сканираща калориметрия (DSC)

 **Алтернативни подходи:**

* Молекулярни симулации
* Машинно обучение

 **Източници на данни и тяхната обработка:**

* Събиране на експериментални данни
* Предварителна обработка и анализ на данните

 **Използване на Isolation Forest:**  
Метод за откриване на аномалии в данните и подобряване на качеството на обучаващата извадка.

 **Какво представляват графовите невронни мрежи?**  
Те са тип дълбоки невронни мрежи, които работят с графови структури, вместо с класически таблични или изображенчески данни.

 **Какво представляват графите?**  
Графите са структури от върхове и ребра, които описват връзките между различни елементи – например атоми и връзки в молекули.

 **Обучение на модела:**  
Процесът включва подаване на молекулни структури, представени като графи, към графова невронна мрежа, която се тренира да предсказва температурата на встъкляване.

 **Добавяне на молекулярни дескриптори:**  
Допълнителни числови характеристики на молекулите, които подобряват точността на модела.

 **Хиперпараметри и история на обучението:**  
Проследяване на метрики като загуба, точност и други показатели по време на обучението за оптимизация на модела.

 **Точност на модела и неговото предимство спрямо други модели:**  
Оценка чрез сравнение с други методи за предсказване; графовите мрежи често показват по-добра обобщаваща способност.

 **Използване на този подход в други области:**  
Методологията може да бъде приложена за предсказване на други свойства в областта на полимерните науки, материалознанието и други химични направления.