

ISSN 1561-8358 (Print)  
ISSN 2524-244X (Online)

## ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ И СИСТЕМЫ INFORMATION TECHNOLOGIES AND SYSTEMS

<https://doi.org/10.29235/1561-8358-2024-69-1-65-75>  
УДК 678.7;621.7.011



Оригинальная статья

А. Б. Лаптев<sup>1</sup>, А. М. Коган<sup>1</sup>, Е. В. Николаев<sup>1</sup>, А. А. Рогачев<sup>2</sup>,  
Ж. В. Игнатович<sup>2\*</sup>, Ю. В. Матвеев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» –  
Федеральное государственное унитарное предприятие  
«Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов»,  
ул. Радио, 17, 105005, Москва, Российская Федерация

<sup>2</sup>Институт химии новых материалов Национальной академии наук Беларуси,  
ул. Ф. Скорины, 36, 220084, Минск, Республика Беларусь

### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПОЛУЧЕНИЯ И СТАРЕНИЯ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

**Аннотация.** На основе анализа литературных данных о возможности использования нейросетей для создания новых материалов с высокими функциональными свойствами рассматривается решение проблемы определения эксплуатационной устойчивости полимерных композиционных материалов путем создания физико-химически обоснованных математических моделей прогнозирования. В качестве матрицы модельного композиционного материала выбраны эпоксидные смолы марок УП-637 и ЭА с отвердителем изофорондиамин, а в качестве модификатора – олигобутадиеновый каучук марки СКН-10 КТР. Обоснованы направления исследований, необходимые для разработки методологии создания новых материалов с оптимальными свойствами, построения модели изменения свойств материалов при варьировании состава и осуществления полномасштабного математического моделирования физико-химических процессов старения полимерных композиционных материалов при изменении уровня и времени воздействия климатических факторов. Верификация полученной зависимости служебных характеристик от состава материала и уровня воздействующих климатических факторов производилась на основании данных натуральных испытаний в умеренном климате. Предложенная методика моделирования свойств полимерных композиционных материалов позволит сократить сроки разработки новых материалов и создать полимерные композиты на основе эпоксидной смолы, содержащие наполнители различной природы (углеродные, минеральные и полимерные) с высокими эксплуатационными параметрами.

**Ключевые слова:** полимерные композиционные материалы, компьютерное моделирование, искусственные нейронные сети, климатическое старение

**Благодарности:** работа поддержана Российским научным фондом (грант № 23-49-10 047) и частично выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Климатические испытания» НИЦ «Курчатовский институт» – ВИАМ.

**Конфликт интересов:** авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

**Информация об авторах:** Лаптев Анатолий Борисович – доктор технических наук, доцент, главный научный сотрудник Всероссийского научно-исследовательского института авиационных материалов, НИЦ «Курчатовский институт». <https://orcid.org/0000-0002-6680-1607>. E-mail: [laptsev@bk.ru](mailto:laptsev@bk.ru); Коган Алексей Маркович – инженер, Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов, НИЦ «Курчатовский институт». <https://orcid.org/0009-0006-6707-1390>. E-mail: [alekseikogan@yandex.ru](mailto:alekseikogan@yandex.ru); Николаев Евгений Владимирович – кандидат технических наук, заместитель начальника Испытательного центра Всероссийского научно-исследовательского института авиационных материалов, НИЦ «Курчатовский институт». <https://orcid.org/0009-0003-1464-5694>. E-mail: [arx.86@mail.ru](mailto:arx.86@mail.ru); Рогачев Александр Александрович – член-корреспондент Национальной академии наук Беларуси, доктор технических наук, профессор, директор Института химии новых материалов Национальной академии наук Беларуси. <https://orcid.org/0009-0003-1464-5694>.

\* Автор, ответственный за переписку / Corresponding author.

orcid.org/0000-0003-4993-0519. E-mail: rogachev78@mail.ru; *Игнатович Жанна Владимировна\** – кандидат химических наук, заместитель директора по научной работе Института химии новых материалов Национальной академии наук Беларуси. <https://orcid.org/0000-0002-3837-6877>. E-mail: ignatovichz@inbox.ru; *Матвеев Юрий Вячеславович* – кандидат химических наук, ведущий научный сотрудник, заведующий лабораторией Института химии новых материалов Национальной академии наук Беларуси. E-mail: yurma@ichnm.mail.ru

**Вклад авторов:** *Лаптев Анатолий Борисович* – обоснование и планирование методологии исследования, анализ экспериментальных данных, интерпретация результатов исследования, редактирование текста рукописи; *Коган Алексей Маркович* – проведение эксперимента, написание текста рукописи, сбор экспериментальных данных, систематизация экспериментальных и модельных данных; *Николаев Евгений Владимирович* – проведение инструментальных исследований, анализ и систематизация данных, сбор данных моделирования; *Рогачев Александр Александрович* – обсуждение и интерпретация результатов исследования, редактирование текста рукописи; *Игнатович Жанна Владимировна* – редактирование текста рукописи, анализ и обобщение литературных данных, анализ и систематизация результатов; *Матвеев Юрий Вячеславович* – работа с графическим материалом, анализ результатов исследования.

**Для цитирования:** Математическое моделирование процессов получения и старения полимерных композиционных материалов / А. Б. Лаптев [и др.] // Вест. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-тэхн. навук. – 2024. – Т. 69, № 1. – С. 65–75. <https://doi.org/10.29235/1561-8358-2024-69-1-65-75>

Поступила в редакцию: 15.06.2023

Утверждена к публикации: 30.11.2023

Подписана в печать: 15.03.2024

### Original article

Anatoly B. Laptev<sup>1</sup>, Aleksei M. Kogan<sup>1</sup>, Evgeniy V. Nikolaev<sup>1</sup>, Alexander A. Rogachev<sup>2</sup>,  
Zhanna V. Ihnatovich<sup>2\*</sup>, Yuri V. Matveenko<sup>2</sup>

<sup>1</sup>National Research Center “Kurchatov Institute” – Federal State Unitary Enterprise “All-Russian Scientific Research Institute of Aviation Materials”,

17, Radio Str., 105005, Moscow, Russian Federation

<sup>2</sup>Institute of Chemistry of New Materials of the National Academy of Sciences of Belarus,

36, F. Skorina Str., 220141, Minsk, Republic of Belarus

## MATHEMATICAL MODELING OF THE CREATION PROCESS AND AGING OF POLYMER COMPOSITE MATERIALS

**Abstract.** Based on the analysis of the literature on the possibility of using neural networks to create new materials with high functional properties, the article considers a solution to the problem of determining the operational stability of polymeric composite materials by creating physical and chemically sound mathematical prediction models. Epoxy resins of the UP-637 and EA brands with an isophorone diamine hardener were chosen as the matrix of the model composite material, and oligobutadiene rubber of the SKN-10 KTR brand was chosen as the modifier. It justifies directions of work necessary for development of new materials creation methodology with optimal characteristics, building a model for changing the properties of materials at variation of composition and implementation of full-scale mathematical modeling of physical and chemical processes of polymer composite materials aging at changing level and time of climatic factors influence. Verification of the obtained dependence of service characteristics on the composition of the material and the level of influencing climatic factors was carried out on the basis of data from full-scale tests in a temperate climate. The proposed methodology for modelling the properties of polymer composite materials will reduce the development time of new materials and allow creation of polymer composites based on epoxy resin containing fillers of various natures (carbon, mineral and polymer) with high performance parameters.

**Keywords:** polymer composite materials, computer modeling, artificial neural networks, climatic aging

**Acknowledgments:** the work was supported by the Russian Scientific Foundation (grant № 23-49-10 047) and was partially performed using the equipment of the Center for Collective Use “Climatic Tests” of the Kurchatov Institute Research Center – VIAM.

**Conflict of interest:** the authors declare that there is no conflict of interest.

**Information about the authors:** *Anatoly B. Laptev* – Dr. Sci. (Engineering), Associate Professor, Chief Researcher at National Research Center “Kurchatov Institute” – Federal State Unitary Enterprise “All-Russian Scientific Research Institute of Aviation Materials”. <https://orcid.org/0000-0002-6680-1607>. E-mail: laptev@bk.ru; *Aleksei M. Kogan* – Engineer at National Research Center “Kurchatov Institute” – Federal State Unitary Enterprise “All-Russian Scientific Research Institute of Aviation Materials”. <https://orcid.org/0009-0006-6707-1390>. E-mail: alekseikogan@yandex.ru; *Evgeniy V. Nikolaev* – Cand. Sci. (Engineering), Deputy Head of the Testing Center at National Research Center “Kurchatov Institute” – Federal State Unitary Enterprise “All-Russian Scientific Research Institute of Aviation Materials”. <https://orcid.org/0009-0003-1464-5694>. E-mail: arx.86@mail.ru; *Alexander A. Rogachev* – Corresponding Member of the National Academy of Sciences of Belarus, Dr. Sci. (Engineering), Professor, Director at Institute of Chemistry of New Materials of the National Academy of Sciences of Belarus. <https://orcid.org/0000-0003-4993-0519>. E-mail: rogachev78@mail.ru; *Zhanna V. Ihnatovich\** – Cand. Sci. (Chemistry), Deputy Director of Science at Institute of Chemistry of New Materials of the National Academy of Sciences

of Belarus. <https://orcid.org/0000-0002-3837-6877>. E-mail: [ignatovichz@inbox.ru](mailto:ignatovichz@inbox.ru); Yuri V. Matveenko – Cand. Sci. (Chemistry), Leading Researcher, Head of the Laboratory at Institute of Chemistry of New Materials of the National Academy of Sciences of Belarus. E-mail: [yurma@ichnm.mail.ru](mailto:yurma@ichnm.mail.ru)

**Contribution of the authors:** *Anatoly B. Laptev* – substantiation and planning of research methodology, analysis of experimental data, interpretation of research results, editing of the text of the manuscript; *Alexei M. Kogan* – conducting an experiment, writing the text of the manuscript, collecting experimental data, systematization of experimental and model data; *Evgeniy V. Nikolaev* – conducting instrumental research, analysis and systematization of data, collection of modeling data; *Alexander A. Rogachev* – discussion and interpretation of research results, editing of the text of the manuscript; *Zhanna V. Ihnatovich* – editing the text of the manuscript, analysis and generalization of literary data, analysis and systematization of results; *Yuri V. Matveenko* – work with graphic material, analysis of research results.

**For citation:** Laptev A. B., Kogan A. M., Nikolaev E. V., Rogachev A. A., Ihnatovich Zh. V., Matveenko Yu. V. Mathematical modeling of the creation process and aging of polymer composite materials. *Vestsi Natsyyanal'nai akademii navuk Belarusi. Seryya fizika-tekhnichnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physical-technical series*, 2024, vol. 69, no. 1, pp. 65–75 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8358-2024-69-1-65-75>

Received: 15.06.2023

Approved for publication: 30.11.2023

Signed to the press: 15.03.2024

**Введение.** В настоящее время общемировым трендом является постепенная замена металлических материалов, подверженных коррозии, полимерными композиционными материалами (ПКМ), которые имеют большую прочность при низкой плотности, высокую химическую стойкость. Использование ПКМ предполагает значительное повышение эффективности технических устройств за счет, например, снижения их веса, что приводит к уменьшению потребления энергоресурсов при создании и эксплуатации таких устройств. Если процесс создания металлических материалов методом проб и ошибок занял длительное время (в течение нескольких тысячелетий), то при разработке новых материалов появилась возможность значительно ускорить этот процесс путем использования цифровых моделей.

Создание материалов с заданными, порой уникальными, свойствами, а также определение работоспособности изделий из ПКМ выполняется с использованием интуитивных методов, основанных на опыте исследователей и научных данных. Оценка полученных материалов, в том числе на основе полимеров, и поиск оптимальных решений осуществляются с помощью компьютерного моделирования и искусственного интеллекта (нейронных сетей) [1].

Как правило, при создании ПКП учитывают влияние наполнителей различной природы, внешних факторов (излучение различной длины волны и интенсивности, температуры) на структурно-фазовые изменения и физико-механические свойства, а также на эксплуатационные характеристики получаемых материалов. Большой объем экспериментального материала в таких работах не подвергается дополнительной математической обработке, что не позволяет систематизировать данные об изменении свойств полученных материалов при длительном воздействии на них различных комплексных факторов, имеющих место в реальных условиях эксплуатации.

В [2] представлен метод прогнозирования свойств ПКМ с использованием нейросетевого моделирования на основе данных томографии. В качестве объекта исследования рассматриваются углеродные волокна, изготовленные по технологии вакуумной инфузии с эпоксидным связующим, что обуславливает наличие большого количества случайных микро- и макродефектов. Разработана методика нейросетевого моделирования включающая алгоритм преобразования изображений томографа в данные структурно-фазового состава и физико-механические свойства объекта исследования.

Нейросетевое моделирование сложных неупорядоченных систем на основе высокомолекулярных соединений является непростой задачей, особенно при проектировании полимеров с желаемым фазовым поведением и точным прогнозированием их эксплуатационных характеристик [3]. Решение данной задачи вызывает затруднения при создании многокомпонентных систем на основе высокомолекулярных соединений, таких как инженерные пластмассы, которые находят широкое применение в промышленности. Влияние модификации мономера (повторяющейся единицы полимера) на полимеризацию и результирующие свойства полимера нелегко исследовать экспериментально, учитывая большое количество возможных изменений. Это обуславливает существенные ограничения при разработке новых полимеров со специфическими свойствами

конечного использования. В процессе создания следует учитывать длину макромолекул и их молекулярно-массовое распределение, а приемы регулирования данных параметров являются важным инструментом получения полимерных материалов с заданным физическими и химическими свойствами.

Для разработки новых материалов требуется глубокое понимание взаимосвязи между структурой и свойствами. Однако эта взаимосвязь в силу своей сложности не всегда исследуется всесторонне.

Теория функционала плотности (DFT) пригодна для оценки свойств аморфно-кристаллических полимеров, но требует больших вычислительных затрат. Она была применена к малым молекулам, и в рамках Гарвардского проекта по чистой энергии создана база данных насчитывающая 20 000 единиц хранения [4].

Использование подмножества данных, представления молекул в виде графов (с отдельными атомами в качестве вершин и связями в качестве ребер), а также подходов нейронной дактилоскопии, расширяющейся на основе упрощенной системы линейного ввода молекулярных данных (SMILES), позволило с большой вероятностью спрогнозировать высокие растворимость, эффективность лекарств и фотоэлектрическую эффективность ПКМ, исследованных в [5].

В [6] теоретически изучено влияние приложенной нагрузки, скорости скольжения на износостойкие свойства сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ) и ПКМ на его основе. Используя опубликованные ранее экспериментальные результаты, с помощью разработанной искусственной нейронной сети (ИНС) была проведена их валидация с результатами, полученными путем моделирования. Нейронная сеть прямого распространения (FFNN) с обратным распространением ошибки (BPNN) использовалась для прогнозирования износа композитов из СВМПЭ при сухом скольжении. При построении предлагаемой ИНС было применено 11 входных векторов. Углеродные нанотрубки, углеродные волокна, оксид графена и добавки волластонита в матрице СВМПЭ являлись основными входными параметрами, а объемный износ – выходным параметром для разработанной ИНС. Отмечено, что скорость скольжения и приложенная нагрузка оказывают большее влияние на объемный износ композитов из СВМПЭ по сравнению с другими входными параметрами, а условием для достижения желаемых характеристик износа таких материалов является подбор процентного содержания по массе, размеру и составу частиц наполнителя. Установлено, что предложенная модель ИНС и полученная математическая модель хорошо согласуются с результатами испытаний и могут применяться для прогнозирования объемного износа композитов на основе СВМПЭ [6].

Ненасыщенные полиэфирные смолы широко используются для получения композиционных материалов и удовлетворяют большинству практических требований для промышленного и бытового применения при низкой стоимости [6]. Эти смолы состоят из высоковязкого полиэфирного олигомера и реакционноспособного растворителя, что обеспечивает их технологическую способность к образованию пространственных связей. Вязкость исходного полиэфира и реакционноспособной смеси разбавителей имеет решающее значение для практического применения. Ранее этот параметр определялся методом проб и ошибок, что подразумевало трудоемкую последовательность манипуляций для достижения целевых значений вязкости. Исследователи разработали стратегию прогнозирования рецептуры ненасыщенных полиэфиров на основе нейронных сетей. На первом этапе 15 ненасыщенных полиэфиров были синтезированы путем высокотемпературной поликонденсации с использованием обычных мономеров. Экспериментальные значения параметра растворимости Хансена (HSP) были определены с помощью программного обеспечения, а температура стеклования ( $T_g$ ) – по данным дифференциальной сканирующей калориметрии (DSC). Количественная взаимосвязь структуры и свойств в сочетании со множественными линейными регрессиями использовалась для получения прогноза параметров растворимости Хансена  $\delta_d$ ,  $\delta_p$  и  $\delta_h$  по структурному составу и для температуры стеклования (прогноз по сравнению с экспериментальным коэффициентом определения  $R^2 = 0,93$ ) этих ненасыщенных полиэфиров. Затем они были разбавлены несколькими растворителями различной природы (эфиры, сложные эфиры, спирт, ароматические соединения) в разной концентрации. Благодаря нейронным сетям правильный подбор экологически чистых реакционноспособных растворителей значительно ускорился.

Методы машинного обучения показали многообещающие результаты в прогнозировании свойств, и при наличии достаточных обучающих данных такие подходы могут обеспечить быстрый высокопроизводительный виртуальный скрининг различных соединений [7]. Появившиеся в последние годы архитектуры нейронных сетей на основе графов представляют собой наиболее успешный подход к прогнозированию молекулярной структуры целевых соединений.

Приведенные исследования можно рассматривать в качестве примеров использования нейросетей для оценки свойств полимерных материалов. Важным является не только определение каких-то отдельных характеристик, но и возможность создавать материалы с оптимальными свойствами, что было неоднократно продемонстрировано при разработке смесевых материалов с использованием метода планирования эксперимента для создания ингибиторов коррозии и коррозионно-механического разрушения сталей в сероводородсодержащих минерализованных средах [7].

В связи с этим предлагается использование методов планирования эксперимента для поиска оптимальных решений и обработка данных с использованием нейросетевых программ при составлении целевых композиций полимерных материалов на основе эпоксидных смол и определении изменения свойств данных материалов при воздействии климатических и эксплуатационных факторов.

*Цель работы* – обоснование методологии создания новых материалов с оптимальными свойствами с использованием математических компьютеризированных методов.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

- 1) определить состав и концентрацию компонентов ПКМ;
- 2) оценить характеристики материалов в исходном состоянии и после ускоренных климатических испытаний (температура, влажность, солнечное излучение и др.), учитывая их потребительские свойства;
- 3) построить и верифицировать модели изменения свойств материалов при варьировании состава и при изменении уровня и времени воздействия климатических факторов; верификацию моделей провести на основании сравнения с контрольными образцами, экспонированными в натурных климатических условиях;
- 4) разработать методологию создания и прогнозирования свойств новых ПКМ.

**Материалы и методы исследования.** В качестве объектов исследования были выбраны следующие материалы: эпоксидные смолы марок УП-637 и ЭА, отвердитель изофорондиамин и модификатор – олигобутадиеновый каучук марки СКН-10 КТР. Температура фазовых превращений определялась методом ДМА на приборе Netzsch 242С (Германия) или ДСК на приборе Netzsch DSC 204 «Phoenix» (Германия), а прочность при изгибе – на испытательной машине ИР5282-50 (Россия).

Для каждого испытуемого образца рассчитывали массовую долю поглощенной в процессе испытаний воды ( $\varepsilon$ , %) по формуле

$$\varepsilon = \frac{m_2 - m_1}{m_1} 100, \quad (1)$$

где  $m_1$  – масса испытуемого образца после первоначального просушивания и перед погружением во влажную среду, мг;  $m_2$  – масса испытуемого образца после выдержки во влажной среде, мг.

За результат испытания принималось среднеарифметическое значение трех показателей, полученных при одинаковой продолжительности выдержки во влажной среде.

**Планирование эксперимента по оценке процесса старения материала с использованием ИНС.** Для оценки всех комбинаций параметров  $X_1$ ,  $X_2$ ,  $X_3$  достаточно проведения опытов при максимальных и минимальных

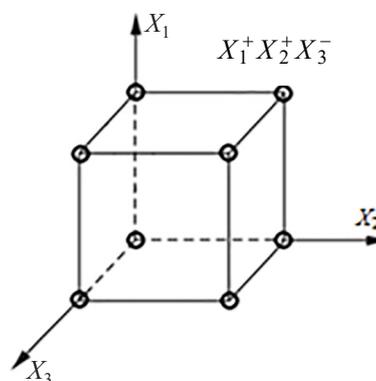


Рис.1. Схема вариаций факторов  $X_1$ ,  $X_2$ ,  $X_3$

Fig.1. Scheme of variations of factors  $X_1$ ,  $X_2$ ,  $X_3$

значениях параметров и всех их сочетаниях. На рис. 1 показан виртуальный куб возможных значений параметров.

В табл. 1 приведена матрица планирования для трехфакторного эксперимента с заранее задаваемыми значениями  $X_i$  и получаемыми характеристиками  $Y_i$ .

Т а б л и ц а 1. Рабочая матрица планирования эксперимента

Table 1. Work matrix of experimental planning

Номер опыта Experience number	Значение фактора Factor value			Значение характеристики $Y_i$ Characteristic value $Y_i$
	$X_1$	$X_2$	$X_3$	
1	+	+	+	$Y_1$
2	+	+	–	$Y_2$
3	+	–	–	$Y_3$
4	–	–	–	$Y_4$
5	–	–	+	$Y_5$
6	–	+	+	$Y_6$
7	–	+	–	$Y_7$
8	+	–	+	$Y_8$

Зависимость параметра оптимизации  $Y_i$  от выбранных факторов  $X_i$  выражается уравнением регрессии

$$Y = f(X_1 X_2 X_3). \quad (2)$$

Варьируемыми факторами в данном эксперименте будут процентные содержания эпоксидных смол марок УП-637 и ЭА (базовый состав – добавление до 100 %), отвердитель изофорондиамин (от 15 до 20 мас.%) и модификатор – олигобутадиеновый каучук марки СКН-10 КТР (от 1 до 15 мас.%).

В табл. 2 приведены составы полимерных композиций.

Т а б л и ц а 2. Значения концентраций веществ в полимерной композиции

Table 2. Concentrations of substances in the polymer composition

Партия Consignment	Смола УП-637 Resin УП-637	Смола ЭА Resin ЭА	Каучук СКН-10КТР Rubber СКН-10КТР	Значение служебной характеристики, $Y_i$ Service characteristic value, $Y_i$
1	–	100	0	$Y_1$
2			10	$Y_2$
3	30	70	0	$Y_3$
4			10	$Y_4$
5	70	30	0	$Y_5$
6			10	$Y_6$
7	100	–	0	$Y_7$
8			10	$Y_8$
9 (контрольная)	70	20	10	$Y_0^*$

Примечание. \* – значение служебной характеристики при произвольном выборе концентраций ингредиентов для проверки адекватности получаемой зависимости.

Note. \* – the value of the performance characteristic for an arbitrary choice of ingredient concentrations to check the adequacy of the resulting dependence.

После проведения экспериментов и получения данных о служебной характеристике материала с использованием нейросети формируется уравнение (2). Проверку адекватности данного уравнения планируется выполнять с использованием значений служебных характеристик композиции с содержанием 70 : 20 : 10 мас.% соответствующих ингредиентов. Влияние действующих факторов окружающей среды и времени будет оцениваться на трех рассчитанных по урав-

нению композициях с максимальными характеристиками: температурой стеклования, пределом прочности при изгибе либо большими величинами обеих характеристик.

Исследование климатической стойкости должно проводиться на композициях с оптимальными служебными характеристиками, то есть либо с максимальным пределом прочности на изгиб, либо с максимальной относительной деформацией, либо со средними значениями обеих характеристик.

Для оценки воздействия климатических факторов на полученные композиции связующего планируется использовать подход, аналогичный предыдущему опыту для каждого из трех типов образцов. При этом значения переменных  $X_4$ ,  $X_5$ ,  $X_6$ , аналогично табл. 1, будут принимать значения варьируемых параметров климата (температура  $X_4$  – от минус 10 до 30 °С, относительная влажность  $X_5$  – от 10 до 96 %, световой поток УФ-излучения  $X_6$  – от 0 до 30 Вт/м<sup>2</sup>).

**Основные приемы анализа данных с использованием обучаемых нейросетей.** Создание систем машинного обучения, кроме методов, моделей и технологий, традиционно используемых для решения сложных, трудно формализуемых, интеллектуальных задач (например, имитационного моделирования [8], исследования операций, кластеризации, искусственного интеллекта [9]) реализуется с помощью глубокого и гибридного обучения. Кроме того, ведутся интенсивные исследования в области разработки интеллектуальных информационных технологий, к которым в первую очередь относятся нейросетевые технологии. Особенно важным в этих исследованиях представляется изучение и использование на практике новых подходов и методов для решения сложных задач управления жизненным циклом материала, эволюционного и прогнозного моделирования [10], создания цифровых двойников материалов и машин.

Методы машинного обучения применяются в самых различных областях, например, в материаловедении при создании новых материалов, в том числе для прогнозирования прочностных и деформационных характеристик материалов в зависимости от их структуры, технологии изготовления и условий эксплуатации.

При решении задачи математического моделирования процесса создания и старения полимерных композиционных материалов необходимо описание таких алгоритмов машинного обучения, как ансамбли решающих деревьев и нейронные сети. Для получения расчетных зависимостей свойств полимерных материалов от их состава предпочтительно использовать абстрагированные от химической и физической природы величины – приведенные значения факторов. Применение при создании материалов ингредиентов с постоянными и стабильными свойствами позволяет избегать сложных квантово-химических расчетов и сосредоточиться на точном дозировании компонентов смесей полимерных материалов при проведении эксперимента.

**Искусственные нейронные сети.** ИНС являются одним из алгоритмов машинного обучения, который отличается большей сложностью и более широкой применимостью, чем другие алгоритмы.

В ИНС нейрон – это вычислительная единица, которая получает информацию, производит над ней простые вычисления и передает ее дальше. Один нейрон напоминает обобщенную логистическую регрессию. Обобщенную, потому что активационная функция у нейрона может быть произвольной, а не только сигмоидальной, как у логистической регрессии.

В остальном нейрон также получает входные сигналы (исходные данные либо выходные сигналы других нейронов) через несколько входных каналов, складывает полученные из входов числа и с учетом их значимости пропускает через активационную функцию для получения ответа. Таким образом, принцип работы нейронной сети заключается в преобразовании входных сигналов, в результате чего изменяется внутреннее состояние сети и формируются выходные значения [11].

На рис. 2 показана упрощенная схема ИНС, используемой для расчета служебных характеристик в течение длительного воздействия климатических факторов.

Предположим, что существует ряд нейронов (в нашем случае коэффициенты уравнения регрессии  $b_j$ ), которые передают информацию следующему. В таком случае набор коэффициентов, соответствующих каждому из этих нейронов. У нейронов с большим весом информация будет доминирующей в следующем нейроне. Таким образом, выбираются наиболее значимые факторы.

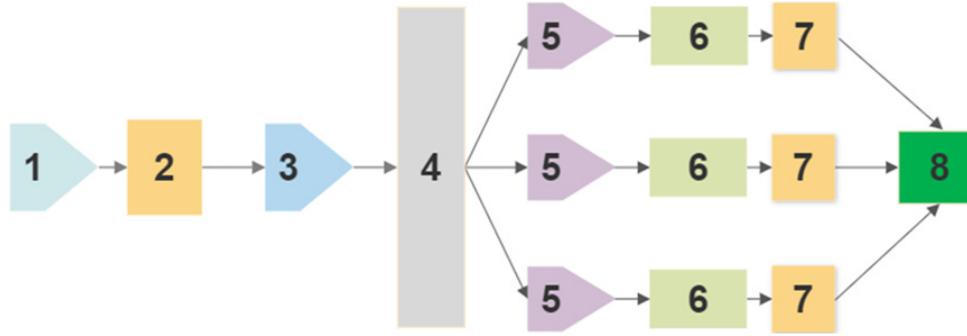


Рис. 2. Схема расчетно-экспериментальной зависимости свойств от состава полимерного материала и уровня действующих климатических факторов: 1 – приготовление девяти композиций различного состава и экспериментальная оценка служебных характеристик; 2 – расчетное получение зависимости характеристик от состава композиций; 3 – расчет оптимальных составов композиций с высокими характеристиками; 4 – изготовление рассчитанных составов и постановка на климатические испытания; 5 – проведение климатических испытаний трех композиций при воздействии восьми различных сочетаний климатических факторов в специализированных камерах и одной композиции в наружных условиях на климатической площадке, экспериментальная оценка служебных характеристик полимерных материалов; 6 – получение зависимости характеристик каждой композиции от уровня значений климатических факторов; 7 – расчетное определение с использованием ИНС зависимости свойств полимерных материалов от их состава и уровня действующих климатических факторов; 8 – верификация полученной зависимости

Fig. 2. Scheme of calculation and experimental development of dependence of properties on composition of polymer material and level of operating climatic factors: 1 – preparation of nine compositions of different content and experimental evaluation of performance; 2 – calculation of dependence of characteristics on content of compositions; 3 – calculation of optimal compositions with high characteristics; 4 – production of calculated formulations and climate testing; 5 – conducting climatic tests of three compositions under the influence of eight different combinations of climatic factors in specialized chambers and one composition in the outdoor environment on a climatic site, pilot performance evaluation of polymer materials; 6 – obtaining dependence of characteristics of each composition on the level of values of climatic factors; 7 – calculation using INS of dependence of properties of polymer materials on their composition and level of operating climatic factors; 8 – verification of the obtained dependency

Каждый сигнал  $X_i$  (1, рис. 2) умножается на свой вес  $b_i$ , после чего данное произведение преобразуется в сумматоре (3, рис. 2) и получается суммарный сигнал  $Y$  (4, рис. 2). Выходной сигнал можно определить по следующей формуле:

$$Y = f(b_0 X_0 + b_1 X_1 + \dots + C),$$

где  $X_i$  – входной сигнал;  $b_i$  – вес (настраиваемый параметр);  $C$  – смещение (настраиваемый параметр). В итоге с использованием ИНС можно получить уравнение вида (6, рис. 2)

$$Z_j = f(X_4 X_5 X_6),$$

где  $Z_j$  – значение служебной характеристики (например, предела прочности при изгибе) каждого из трех образцов, имеющей оптимальный состав после воздействия климатических факторов.

Методом факторного эксперимента построена регрессионная модель изменения твердости связующего при воздействии температуры и влажности (рис. 3). Коэффициент аргумента температуры имеет отрицательное значение, а коэффициент аргумента влажности – положительное, следовательно, варьируя значения температуры и влажности и их переменного воздействия можно обеспечивать стабильность свойств материала на требуемом уровне.

Дальнейшие расчеты с использованием ИНС позволят получить расчетную зависимость служебной характеристики материала (предела прочности при изгибе) от состава материала и уровня действующих климатических факторов (8, рис. 2), выражаемую уравнением

$$Z_j = f(X_4; X_5; X_6; Y). \quad (3)$$

Проверка адекватности полученного уравнения (3) будет производиться с использованием значений служебных характеристик материала после натурной экспозиции  $Z_{0i}$ , при которой ежедневно фиксируется изменение метеопараметров  $X_4, X_5, X_6$ .

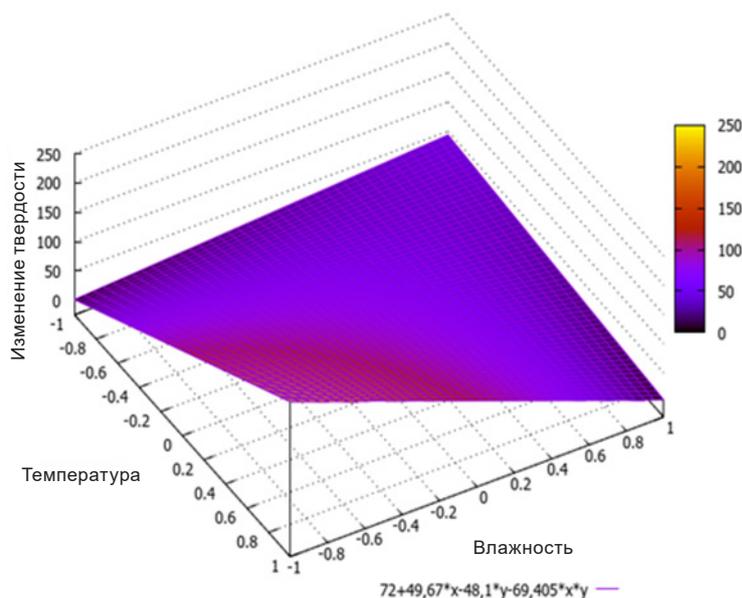


Рис. 3. Регрессионная модель изменения величины твердости связующего при воздействии температуры и влажности

Fig. 3. Regression model for the variation of the hardness of the binder under the influence of temperature and humidity

Для построения ИНС необходимо учесть архитектуру ИНС (модель сети, число элементов и их связи), функцию потерь (ее минимум будет соответствовать наилучшему решению), метод оптимизации, метрики (показывают точность решения задачи). В свою очередь архитектура нейронной сети построена на принципах сжатия, анализа и оптимизации данных [12].

Преимуществом нейронных сетей перед традиционными алгоритмами является возможность их обучения. Нейронные сети улучшаются на основе поступающих данных и произошедших ошибок. В случае оценки свойств материала обучение может производиться на основании снятия образцов материалов с натурной экспозиции в последующие годы [13].

Решающие правила в машинном обучении – это правила вида «если, то», которые определяют принадлежность объекта к заданному классу (используется в задачах классификации). Допустим, если значение  $Y$  отклоняется на  $\pm 50\%$  от проверочного значения в  $Y_0$ , то необходимо ввести дополнительный член в уравнения (1) и (2).

По аналогии с принципами построения решающих деревьев [14] выстроена схема расчетно-экспериментального определения зависимости свойств полимерного материала от его состава и действующих климатических факторов.

Известными ансамблями моделей, направленных на объединение «слабых» алгоритмов в группу «сильных», являются стекинг, бэггинг и бустинг.

В случае стекинга используются разнородные отдельно взятые модели, которые подаются на вход, а выходом является итоговый прогноз.

При использовании бэггинга рассматриваются однородные модели, обучающиеся независимо и параллельно, а затем их результаты усредняются. Примером такого метода является случайный лес.

Для решения нашей задачи использован метод бустинга, при котором строят последовательно обучаемые однородные модели. Алгоритм метода бустинга хорошо организован в нескольких специальных библиотеках, например в CatBoost, XGBoost, LightGBM [15].

**Заключение.** С использованием ИНС разработан план эксперимента по получению функциональной зависимости служебной характеристики полимерного материала, которая охватывает необходимое и достаточное количество сочетаний компонентов в композиции полимера. Анализ служебной характеристики материала произведен с использованием ИНС методом бустинга. Установлено, что включение в эксперимент второго этапа – климатического воздействия дает

возможность оценить и получить зависимость изменения служебных характеристик полимерного материала при любом сочетании климатических факторов, то есть определить климатическую стойкость полимера во всех климатических зонах. Верификация полученной зависимости служебных характеристик от состава материала и уровня воздействующих климатических факторов производится на основании данных натуральных (в естественном климате) условий. Это позволяет на протяжении длительного срока корректировать полученную зависимость после каждого снятия, получения характеристик образцов и их анализа.

Таким образом, разработка методики моделирования свойств ПКМ с использованием ИМС позволит сократить сроки разработки новых материалов и создать полимерные композиты на основе эпоксидной смолы, содержащие микро- и наноструктурные наполнители различной природы (углеродные, минеральные и полимерные) с высокими эксплуатационными параметрами.

### Список использованных источников

1. Дисперсно-наполненные полимерные композиты технического и медицинского назначения / Б. А. Люкшин [и др.]. – Новосибирск: Изд. СО РАН, 2017. – 311 с.
2. Method of Predicting the Polymer Composites' Properties Using Neural Network Modeling / D. Vdovin [et al.] // MATEC Web Conf. (ICMTMTE 2021). – 2021. – Vol. 346, № 2. – Art. ID 02015. <https://doi.org/10.1051/mateconf/202134602015>
3. Machine learning enables polymer cloud-point engineering via inverse design / J. N. Kumar [et al.] // npj Comput. Mater. – 2019. – Vol. 5. – Art. ID 73. <https://doi.org/10.1038/s41524-019-0209-9>
4. Kumar, J. N. Challenges and opportunities of polymer design with machine learning and high throughput experimentation / J. N. Kumar, Q. Li, Y. Jun // Communications. – 2019. – Vol. 9. – P. 537–544. <https://doi.org/10.1557/mrc.2019.54>
5. Xie, T. Hierarchical visualization of materials space with graph convolutional neural networks / T. Xie, J. C. Grossman // J. Chem. Phys. – 2018. – Vol. 149, № 17. – Art. ID 174111. <https://doi.org/10.1063/1.5047803>
6. Kurt, H. I. Application of a Neural Network Model for Prediction of Wear Properties of Ultrahigh Molecular Weight Polyethylene Composites / H. I. Kurt, M. Oduncuoglu // Int. J. Polym. Sci. – 2015. – Vol. 2015. – Art. ID 315710. <https://doi.org/10.1155/2015/315710>
7. Разработка механизма старения ПЭТФ в условиях воздействия тепла, влаги и ультрафиолетового излучения / А. Б. Лаптев [и др.] // Вopr. материаловедения. – 2021. – № 2 (106). – С. 146–160. <https://doi.org/10.22349/1994-6716-2021-106-2-146-160>
8. Полковникова, Н. А. Нейросетевые технологии, нечеткая кластеризация и генетические алгоритмы в экспертной системе / Н. А. Полковникова, В. М. Курейчик // Изв. ЮФУ. Техн. науки. – 2014. – № 7 (156). – С. 7–15.
9. Потенциал искусственного интеллекта при реализации генеративных образовательных технологий / К. Е. Романова [и др.] // Инженер. образование. – 2019. – № 26. – С. 75–83.
10. Мелихова, О. А. Применение генетических алгоритмов для построения систем искусственного интеллекта / О. А. Мелихова // Изв. ЮФУ. Техн. науки. – 2013. – № 7 (144). – С. 53–58.
11. Келлер, Ю. А. Разработка искусственных нейронных сетей для предсказания технологической эффективности от выравнивания профиля приемистости / Ю. А. Келлер // Изв. Том. политех. ун-та. Информ. технологии. – 2014. – Т. 325, № 5. – С. 60–65.
12. Van Veen, F. Neural Network Zoo [Electronic resource] / F. Van Veen, S. Leijnen // The Asimov Institute. – 2021. – Mode of access: [www.asimovinstitute.org/neural-network-zoo](http://www.asimovinstitute.org/neural-network-zoo). – Date of access: 15.09.2021.
13. Павлова А. И. Информационные технологии: основные положения теории искусственных нейронных сетей / А. И. Павлова. – Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т экономики и управления, 2017. – 191 с.
14. Баженов, Р. И. Интеллектуальные информационные технологии в управлении / Р. И. Баженов. – Саратов: Ай Пи Эр Медиа, 2018. – 117 с.
15. Николенко, С. Глубокое обучение / С. Николенко, А. Кадури, Е. Архангельская. – СПб.: Питер, 2021. – 480 с.

### References

1. Lyukshin B. A., Shil'ko S. V., Panin S. V., Mashkov Yu. K., Kornienko L. A., Lyukshin P. A., Pleskachevskii Yu. M. [et al.]. *Dispersed-filled polymer composites for technical and medical purposes*. Novosibirsk, Publ. House of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, 2017. 311 p. (in Russian).
2. Vdovin D., Abramochkin A., Borodulin A., Nelyub V. Method of Predicting the Polymer Composites' Properties Using Neural Network Modeling. *MATEC Web of Conferences (ICMTMTE 2021)*, 2021, vol. 346, no. 2, art. ID 02015. <https://doi.org/10.1051/mateconf/202134602015>
3. Kumar J. N., Qianxiao Li, Tang K. Y. T., Buonassisi T., Gonzalez-Oyarce A. L., Jun Ye. Machine learning enables polymer cloud-point engineering via inverse design. *npj Computational Materials*, 2019, vol. 5, art. ID 73. <https://doi.org/10.1038/s41524-019-0209-9>
4. Kumar J. N., Qianxiao Li, Ye Jun. Challenges and opportunities of polymer design with machine learning and high throughput experimentation, *Communications*, 2019, vol. 9, pp. 537–544. <https://doi.org/10.1557/mrc.2019.54>

5. Xie T., Grossman J. C. Hierarchical visualization of materials space with graph convolutional neural networks. *The Journal of Chemical Physics*, 2018, vol. 149, no. 17, art. ID 174111. <https://doi.org/10.1063/1.5047803>
6. Kurt H. I., Oduncuoglu M. Application of a Neural Network Model for Prediction of Wear Properties of Ultrahigh Molecular Weight Polyethylene Composites. *International Journal of Polymer Science*, 2015, vol. 2015, art. ID 315710. <https://doi.org/10.1155/2015/315710>
7. Laptev A. B., Nesterov A. S., Vardanyan A. M., Nikolaev E. V. Development of the PET aging mechanism under conditions of exposure to heat, moisture and ultraviolet radiation. *Voprosy materialovedeniya*, 2021, no. 2 (106), pp. 146–160 (in Russian). <https://doi.org/10.22349/1994-6716-2021-106-2-146-160>
8. Polkovnikova N. A., Kureichik V. M. Neural network technologies, fuzzy clustering and genetic algorithms in an expert system. *Izvestiya YuFU. Tekhnicheskiye nauki = Izvestiya SFedU. Engineering Science*, 2014, no. 7 (156), pp. 7–15 (in Russian).
9. Romanova K. E., Mishurov S. S., Rumyantsev E. V., Matrokhin A. Yu. The potential of artificial intelligence in the implementation of generative educational technologies. *Inzhenernoye obrazovaniye [Engineering Education]*, 2019, no. 26, pp. 75–83 (in Russian).
10. Melikhova O. A. Application of genetic algorithms for building artificial intelligence systems. *Izvestiya YuFU. Tekhnicheskiye nauki = Izvestiya SFedU. Engineering Science*, 2013, no. 7 (144), pp. 53–58 (in Russian).
11. Keller Yu. A. Development of artificial neural networks to predict technological efficiency from injectivity profile alignment. *Izvestiya Tomskogo politekhnicheskogo universiteta. Informatsionnyye tekhnologii [Bulletin of the Tomsk Polytechnic University. Information Technology]*, 2014, vol. 325, no. 5, pp. 60–65 (in Russian).
12. Van Veen F., Leijnen S. *Neural Network Zoo*. The Asimov Institute. Available at: [www.asimovinstitute.org/neural-network-zoo](http://www.asimovinstitute.org/neural-network-zoo) (accessed 15.09.2021) (in Russian).
13. Pavlova A. I. *Information Technology: the Main Provisions of the Theory of Artificial Neural Networks*. Novosibirsk, Novosibirsk State University of Economics and Management, 2017. 191 p. (in Russian).
14. Bazhenov R. I. *Intelligent Information Technologies in Management*. Saratov, IP Air Media, 2018. 117 p. (in Russian).
15. Nikolenko S., Kadurin A., Arkhangelskaya E. *Deep Learning*. St. Petersburg, Piter Publ., 2021. 480 p. (in Russian).