

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ  
ФЕДЕРАЦИИ  
федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
АЭРОКОСМИЧЕСКОГО ПРИБОРОСТРОЕНИЯ»

На правах рукописи



Петухова Екатерина Алексеевна

**МОДЕЛИ И МЕТОДИКА ДИАГНОСТИКИ СОСТАВА  
ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ**

Специальность 2.2.8. – «Методы и приборы контроля и диагностики  
материалов, изделий, веществ и природной среды»

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата технических наук

Научный руководитель:  
доктор технических наук, доцент  
Фролова Елена Александровна

Санкт-Петербург – 2025

## Содержание

Введение.....	6
Раздел 1. Анализ современного состояния диагностики состава полимерных композиционных материалов.....	16
1.1 Общие характеристики полимерных композиционных материалов.....	16
1.1.1 Полимерные связующее, использующиеся в композиционных материалах и их свойства.....	20
1.1.2 Наполнители, использующиеся в композиционных материалах, и их свойства.....	24
1.2 Анализ механических и электрических характеристик полимерных композиционных материалов.....	27
1.2.1 Механические характеристики полимерных композиционных материалов.....	27
1.2.2 Электрические характеристики полимерных композиционных материалов.....	30
1.3 Анализ проблем и ограничений существующих методов диагностики состава полимерных композиционных материалов.....	33
1.4 Методы разрушающего контроля полимерных композиционных материалов.....	34
Выводы по первому разделу.....	37
Раздел 2. Математическая модель определения механических и электрических свойств полимерных композиционных материалов.....	38
2.1 Сбор данных.....	41
2.2 Прогнозирование свойств полимерных композиционных материалов.....	45
2.2.1 Кластеризация данных.....	45
2.3 Определение свойств полимерных композиционных материалов.....	56
2.3.1 Выбор метода прогнозирования.....	56

2.3.2 Методы прогнозирования свойств полимерных композиционных материалов .....	59
2.4 Результаты применения модели определения свойств полимерных композиционных материалов.....	65
Выводы по 2 разделу.....	69
Раздел 3. Разработка модели автоматизации определения состава полимерных композиционных материалов .....	71
3.1 Исследование моделей и методов определения состава полимеров .....	71
3.1.1 Традиционные методы определения состава полимеров .....	71
3.2 Разработка математического обеспечения информационной модели... ..	75
3.2.1 Кластеризация набора данных .....	75
3.2.2 Выбор метода поиска расстояния для поиска похожих материалов в наборе данных .....	79
3.3 Результаты применения модели автоматизации определения состава полимерных композиционных материалов .....	86
Выводы по 3 разделу.....	88
Раздел 4. Разработка методики диагностики состава полимерных композиционных материалов.....	90
4.1 Недостатки существующих методов диагностики состава полимерных композиционных материалов.....	92
4.1.1 Количество образцов и его влияние на затраты .....	92
4.1.2 Экологические аспекты .....	98
4.1 Разработка методики диагностики состава полимерных композиционных материалов.....	99
Выводы по 4 разделу.....	108

Раздел 5. Экспериментальная апробация разработанных моделей и методики .....	109
5.1 Апробация математической модели определения свойств .....	109
5.1.1 Кластеризация набора данных .....	111
5.1.2 Применение линейной регрессии для определения свойств полимерных композиционных материалов .....	114
5.1.3 Проведение испытаний на растяжение .....	117
5.2 Апробация автоматизированной модели определения состава полимерных композиционных материалов .....	123
5.2.1 Испытания на растяжение .....	124
5.2.2 Испытания для определения электрических сопротивлений .....	125
Выводы по 5 разделу .....	128
Заключение .....	130
Список литературы .....	132
Приложение А. Методика диагностики состава полимерных композиционных материалов .....	149
Приложение Б. Свидетельство о государственной регистрации базы данных .....	150
Приложение В. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ .....	151
Приложение Г. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ .....	152
Приложение Д. Акт внедрения результатов диссертационной работы в АО «НИИ «Масштаб» .....	153
Приложение Е. Акт внедрения результатов диссертационной работы в ООО «ИндуТех» .....	154

Приложение Ж. <i>Акт внедрения результатов диссертационной работы в ООО «Центр инженерии, мехатроники и робототехники»</i> .....	155
Приложение З. <i>Акт внедрения результатов диссертационной работы в ООО «Пантес»</i> .....	156
Приложение И. <i>Акт внедрения результатов диссертационной работы в ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения»</i> .....	158

## Введение

**Актуальность темы исследования.** Указом Президента Российской Федерации от 7 мая 2024 года № 309 [1] были установлены ключевые цели развития страны до 2030 года с перспективой до 2036 года, среди которых можно выделить «Технологическое лидерство». Во время встречи Председателя Правительства Дениса Мантурова с Владимиром Путиным было объявлено о создании 8 национальных проектов [2], направленных на обеспечение технологического лидерства. Среди них вторым по значимости является проект, посвященный новым материалам и переходу к современным технологиям их проектирования и производства [3]. В условиях глобальной конкуренции и необходимости обеспечения независимости от иностранных технологий создание и внедрение инновационных полимерных композиционных материалов приобретает особую значимость для обрабатывающей промышленности и других секторов экономики.

Новые полимерные композиционные материалы обладают уникальными характеристиками, такими как высокая прочность, легкость и коррозионная стойкость, что делает их идеальными для применения в авиа- и судостроении [4]. Эти материалы могут значительно повысить эффективность и безопасность авиатехники, а также снизить их вес, что, в свою очередь, способствует экономии топлива и уменьшению выбросов.

Кроме того, развитие полимерных композиционных материалов открывает новые возможности в медицине и фармацевтике. Например, они могут быть использованы для создания биосовместимых имплантатов и медицинских устройств, что улучшит качество медицинского обслуживания и повысит уровень здоровья населения [5].

Таким образом, развитие полимерных композиционных материалов представляет собой перспективное направление, способствующее достижению технологического лидерства России и обеспечению независимости в ключевых отраслях экономики.

Усиленные механические свойства полимерных композиционных материалов необходимы для обеспечения их надежности и долговечности в различных условиях эксплуатации. Такие материалы способны выдерживать значительные нагрузки, что особенно важно в авиа- и судостроении, где безопасность и прочность конструкций имеют первостепенное значение [6]. Кроме того, полимеры с усиленными механическими и диэлектрическими свойствами находят применение в электронике, где требуется высокая прочность при низком весе, а также отличные изоляционные характеристики.

Однако увеличение прочности полимера часто достигается за счет добавления наполнителей или изменения структуры материала, что может отрицательно сказаться на его электрических свойствах. Например, добавление минералов или волокон для повышения жесткости может привести к снижению проводимости или ухудшению диэлектрических свойств.

Для создания композиционного материала необходимо разработать и провести диагностику состава, который сочетает различные компоненты таким образом, чтобы достичь заданных электрических и механических характеристик. Это требует проведения длительных, дорогостоящих исследований и экспериментов для определения пропорций и сочетаний компонентов.

Процесс производства полимерных композиционных материалов требует специализированного оборудования и навыков. Каждый этап создания материала имеет свои технологические особенности, что может потребовать значительных финансовых вложений и обучения персонала.

Особую важность в этом процессе приобретает диагностика составов полимерных композиционных материалов, поскольку от точного соблюдения рецептуры и однородности структуры зависят ключевые эксплуатационные свойства материала. Традиционные методы подбора оптимального состава, основанные на многочисленных физических экспериментах, требуют значительных временных и материальных затрат. Современные методы

анализа, такие как спектроскопия, термогравиметрия и хроматография, позволяют выявлять отклонения в составе на ранних стадиях, минимизируя риск брака и снижая затраты на переработку.

Тем не менее каждый из этих методов имеет свои ограничения, например спектроскопические методы, такие как ИК- и Рамановская спектроскопия, требуют тщательной подготовки образцов и могут давать искаженные результаты при исследовании сложных многокомпонентных систем из-за эффекта наложения пиков. Термогравиметрический анализ, является разрушающим методом и зависит от строгого соблюдения температурных режимов, а также не всегда способен точно идентифицировать отдельные компоненты в гетерогенных смесях. Хроматографические методы, включая газовую и жидкостную хроматографию отличаются трудо емкостью пробоподготовки, длительностью проведения анализа и необходимостью использования дорогостоящих реактивов.

В Российской Федерации активно развиваются экологическая политика и программы, направленные на создание комфортной и безопасной окружающей среды. Одной из основных задач указа Президента РФ от 07.05.2024 № 309 [1], помимо технологического лидерства, является «Экологическое благополучие». В числе таких программ — национальный проект «Экология», который реализовывался с 2018 по 2024 год, а также новый национальный проект «Экологическое благополучие», запланированный на период 2025-2030 годов. Национальный проект направлен на защиту окружающей среды и обеспечение комфортных условий для жизни людей. Работа ведется по разным направлениям, включая создание инфраструктуры для сортировки и переработки отходов, ликвидацию свалок и очистку водоемов, сохранение лесов, сокращение выбросов в атмосферу, а также развитие экологического туризма и сохранение исчезающих видов животных [7].

При разработке новых полимерных композиционных материалов традиционные методы диагностики состава, основанные на переборе

многочисленных образцов и их последующих испытаниях, создают значительную экологическую нагрузку. Каждый образец требует энергоемкого производства, а механические испытания приводят к образованию отходов. При масштабных исследованиях это может выливаться в сотни килограммов израсходованного материала, что противоречит принципам устойчивого развития и экологического благополучия, заложенным в национальных проектах.

Указом Президента Российской Федерации Путина В.В. от 09.05.2017 № 203 «О Стратегии развития информационного общества в Российской Федерации на 2017 - 2030 годы»[8] была разработана концепция «Цифровая трансформация 2030», цель которой - внедрение цифровых технологий и анализ больших данных, для перехода компаний на риск-ориентированное управление.

В связи с этим возрастает необходимость в разработки новой методики диагностики состава полимерных композиционных материалов, основанной на методах машинного обучения, внедрение которой, позволит определять состав материалов с требуемыми механическими свойствами при сохранении заданных электрических характеристик, что значительно сократит расходы на сырье и вспомогательные материалы для создания полимерных композиционных материалов, снизить необходимость в частом физическом тестировании и диагностировании образцов, а также минимизировать количество ненужных расходов ресурсов, брака и отходов.

Следует выделить ряд работ и авторов, которые внесли значительный вклад в разработку методов контроля и диагностики полимерных композиционных материалов. С.Н. Данилова, Т. А. Охлопкова, Р. В. Борисова, А. Ал. Охлопкова, А. А. Дьяконов [9], Р.А. Каюмов [10], Н.А. Новоженин [11], А. П. Васильев, Л. А. Бохоева [12-13], П. В. Новосельцев, В. Ю. Курохтин [14] исследовали методы разрушающего контроля полимерных композиционных материалов, такие как: испытания на растяжение, испытания на сжатие, испытания на изгиб, испытания на определение предела прочности при сдвиге.

М.Ю. Васильков, Е.А. Бусыгина, Л.В. Никитина, И.Д. Кособудский [15], Т. А. Тунеков, С. В. Жирнов, В. С. Лагунов, Ф. С. Сенатов [16] занимались изучением методов испытаний на электрические свойства полимерных композиционных материалов, таких как определение удельного объемного и поверхностного сопротивления, определение диэлектрической проницаемости и тд. Анализом диагностики полимерных композиционных материалов занимались В.В. Мурашов, А.Ф. Румянцев, Г.А. Иванова, Н.Г. Файзрахманов [17], А.С. Генералов, В.В. Мурашов, М.А. Далин , В. Ю. Чертищев А.С. Бойчук [18].

В. П. Корячко, профессор РГРТУ, исследовал методы кластерного анализа для изучения основных характеристик материалов. Авторы Lei Tao, Guang Chen и Ying Li [19] представили модель машинного обучения, способную количественно предсказать температуру стеклования полимера на основе его химической структуры. Kevin Breuer и Markus Stommel [20] разработали нейронную сеть, использующую данные RVE для прогнозирования упругих свойств пластиков, армированных короткими волокнами.

Несмотря на значительный объем работ, посвященных отдельным аспектам традиционных методов диагностики состава полимерных композиционных материалов, остается недостаточно разработанным комплексный подход, направленный на совершенствование диагностики состава полимерных композиционных материалов с целью минимизации недостатков, заключающихся в большом количестве экспериментальных испытаний, значительных затратах времени и ресурсов, а также в образовании большого количества отходов.

**Цель работы:** совершенствование диагностики состава полимерных композиционных материалов с заданными механическими свойствами при сохранении электрических характеристик, способствующее уменьшению трудоемкости, финансовых затрат проведения испытаний на растяжение,

повышению надёжности изделий и экологической безопасности окружающей среды.

**Объект исследования:** диагностика состава полимерных композиционных материалов.

**Предмет исследования:** модели и методики совершенствования диагностики состава полимерных композиционных материалов с заданными механическими свойствами при сохранении электрических характеристик.

Указанная цель определила постановку и решение следующих задач:

1. Разработать математическую модель определения механических, электрических свойств полимерных композиционных материалов, способствующую улучшению эксплуатационных характеристик изделий, повышению экологической безопасности окружающей среды.

2. Разработать модель автоматизации определения состава полимерных композиционных материалов с заданными механическими свойствами, при сохранении электрических характеристик, для снижения трудоемкости испытаний на растяжение, повышению уровня экологической безопасности окружающей среды.

3. Разработать методику диагностики состава полимерных композиционных материалов с заданными механическими свойствами, при сохранении электрических характеристик, способствующая уменьшению трудоемкости, финансовых затрат проведения испытаний на растяжение, повышению надёжности изделий и экологической безопасности окружающей среды.

**Положения, выносимые на защиту:**

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Математическая модель определения механических и электрических свойств полимерных композиционных материалов, способствующая улучшению эксплуатационных характеристик изделий и повышению экологической безопасности окружающей среды.

2. Модель автоматизации определения состава полимерного композиционного материала с заданными механическими свойствами при сохранении электрических характеристик, способствующая снижению трудоемкости испытаний на растяжение, повышению уровня экологической безопасности окружающей среды.

3. Методика диагностики состава полимерных композиционных материалов с заданными механическими свойствами при сохранении электрических характеристик, способствующая уменьшению трудоемкости, финансовых затрат проведения испытаний на растяжение, повышению надежности материалов и обеспечению экологической безопасности окружающей среды.

**Научная новизна:**

1. Разработанная математическая модель определения механических и электрических свойств полимерных композиционных материалов, в отличие от известных позволяет комплексно оценивать механические и электрические параметры материалов, учитывает их взаимосвязь, что способствует улучшению эксплуатационных характеристик изделий и повышению экологической безопасности окружающей среды.

2. Разработанная модель автоматизации определения состава полимерного композиционного материала, с заданными механическими свойствами, при сохранении электрических характеристик, в отличие от известных позволяет снизить трудоёмкость испытаний на растяжение, повышению уровня экологической безопасности окружающей среды.

3. Разработанная методика диагностики состава полимерных композиционных материалов с заданными механическими свойствами при сохранении электрических характеристик, в отличие от известных способствует уменьшению трудоемкости, финансовых затрат проведения испытаний на растяжение, повышению надёжности изделий и обеспечению экологической безопасности окружающей среды.

**Область исследования:** соответствует пп. 1,4,7 паспорта специальности – 2.2.8 «Методы и приборы контроля и диагностики материалов, изделий, веществ и природной среды»

#### Пункт 1

Научное обоснование новых и совершенствование существующих методов, аппаратных средств и технологий контроля, диагностики материалов, изделий, веществ и природной среды, способствующее повышению надежности изделий и экологической безопасности окружающей среды.

#### Пункт 4

Разработка методического, математического, программного, технического, приборного обеспечения для систем технического контроля и диагностирования материалов, изделий, веществ и природной среды, экологического мониторинга природных и техногенных объектов, способствующих увеличению эксплуатационного ресурса изделий и повышению экологической безопасности окружающей среды.

#### Пункт 7

Автоматизация технологий, приборов контроля и средств диагностирования, способствующая снижению трудоемкости, увеличению оперативности и достоверности оценки эксплуатационного ресурса изделий, повышению уровня экологической безопасности окружающей среды.

#### **Методы исследования:**

Методы линейной регрессии, случайный лес, градиентный бустинг, метод опорных векторов, методы кластеризации.

Программные средства реализации диссертационного исследования: Microsoft Office, Excel, Visio; PostgreSQL; Python.

#### **Практическая значимость**

1. Разработанная математическая модель определения механических и электрических свойств полимерных композиционных материалов продемонстрировала высокую эффективность при работе с данными

полимерных композиционных материалов, позволила определять значения свойств полимерных композиционных материалов и сократить число экспериментов на 35%, обеспечивая экономию 80% времени.

2. Внедрение информационной модели определения состава полимерного композиционного материала позволило сократить сроки подбора оптимального состава полимерного композиционного материала с 2 месяцев до 2 недель. Достигнуто ускорение процесса определения состава на 84-88%. Модель позволяет сократить объем лабораторных исследований на 60-62%.

3. Внедрение методики диагностики состава полимерных композиционных материалов позволило сократить время на разработку рецептур состава материала на 90-95%. Затраты на проведения испытаний на растяжение снизились на 80-90%.

### **Теоретическая значимость**

Выявление зависимости между составом материала и его механическими и электрическими свойствами при помощи линейной регрессии. Группировка материалов по схожим характеристикам для оптимизации выбора состава с помощью методов кластеризации.

**Достоверность результатов** диссертационной работы обеспечивается корректностью применяемого математического аппарата, алгоритмов компьютерного зрения, анализа данных с использованием федеральных нормативно-правовых и нормативно-технических документов, а также официальных статистических источников, подтверждается результатами практической апробации.

**Личный вклад автора** заключается в непосредственной разработке основных положений, выносимых на защиту

**Реализация работы.** Результаты диссертационного исследования внедрены в деятельность ООО «ИндуТех», ООО «Масштаб», ООО «Центр инженерии, механики и робототехники», ООО «ПАНТЕС», что подтверждено соответствующими актами. Результаты диссертационного исследования использованы в учебном процессе ФГАОУ ВО «ГУАП» по дисциплинам

«Физико-химические измерения» «Основы искусственного интеллекта в профессиональной деятельности».

### **Апробация работы**

Основные результаты исследования докладывались и обсуждались на VI международном форуме «Метрологическое обеспечение инновационных технологий» 2023, 2024г, 2025г.; Международном форуме «Математические методы и модели в высокотехнологичном производстве» 2024 г.

### **Публикации в ведущих рецензируемых научных изданиях**

По результатам диссертационного исследования опубликовано 24 научные работы, в том числе: 9 работ в рецензируемых научных изданиях ВАК, из них 5 без соавторов, 12 работ в других изданиях, получено 1 свидетельство о регистрации базы данных, получено 2 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ.

**Структура и объем диссертации:** Диссертация состоит из введения, пяти разделов, заключения, списка литературы, и приложений. Содержание работы изложено на 159 стр. (9,9 п.л.) машинописного текста, включая 41 рисунок и 22 таблицы.

## **Раздел 1. Анализ современного состояния диагностики состава полимерных композиционных материалов**

### **1.1 Общие характеристики полимерных композиционных материалов**

По ГОСТ 32794-2014 [21] Композит (композитный материал, композиционный материал) - сплошной продукт, состоящий из двух или более материалов, отличных друг от друга по форме и/или фазовому состоянию и/или химическому составу и/или свойствам, скрепленных, как правило, физической связью и имеющих границу раздела между обязательным материалом (матрицей, связующем) и ее наполнителями, включая армирующие наполнители.

Связующее и наполнитель композиционного материала образуют единую структуру и действуют совместно, обеспечивая наилучшим образом необходимые свойства конечного изделия по его функциональному назначению.

Полимерные композиционные материалы обладают высокой прочностью и легкостью, что делает их востребованными для использования в различных отраслях, таких как авиационная и автомобильная промышленность, строительство, машиностроение, электроника и другие

Полимерные композиционные материалы имеют широкое применение в различных областях из-за их уникальных свойств.

- Авиационная и автомобильная промышленность. Композиционные полимерные материалы играют значительную роль в авиации и являются ключевыми компонентами в создании легких, прочных и эффективных конструкций для самолетов. Эти материалы обычно состоят из двух основных компонентов: связующего (полимерной смолы) и армирующего наполнителя (часто стекловолокна, углеродные волокна или арамидные волокна).

- Медицинская промышленность. В медицине полимерные композиционные материалы используются для создания биосовместимых имплантов, протезов и других медицинских изделий.

Мировой рынок полимерных композиционных материалов демонстрирует устойчивый рост с 2015 по 2024 год (рис.1), что отражает растущий спрос на легкие, прочные и высокотехнологичные материалы в различных отраслях промышленности. В 2015 году общий объем рынка составил 1,8 трлн рублей, причем наибольшая доля приходилась на аэрокосмическую промышленность (0,8 трлн рублей), за которой следовали автомобилестроение (0,5 трлн рублей) и ветроэнергетика (0,2 трлн рублей). Строительство, спорт и досуг, а также другие отрасли имели меньший объем потребления — по 0,1 трлн рублей каждая.

К 2018 году рынок вырос до 2,4 трлн рублей, при этом наиболее значительный рост наблюдался в автомобильной промышленности (на 40%, до 0,7 трлн рублей) и ветроэнергетике (на 50%, до 0,3 трлн рублей). Аэрокосмический сектор увеличился на 25%, достигнув 1,0 трлн рублей, а строительство удвоило свои показатели (0,2 трлн рублей).

В 2020 году общий объем рынка достиг 3,0 трлн рублей. Аэрокосмическая отрасль продолжила лидировать (1,2 трлн рублей), а автомобильная промышленность и ветроэнергетика также показали рост, составив 0,8 и 0,4 трлн рублей соответственно. Строительный сектор увеличился до 0,3 трлн рублей, а спорт и досуг — до 0,2 трлн рублей.

К 2022 году рынок вырос до 3,6 трлн рублей. Аэрокосмическая промышленность достигла 1,4 трлн рублей, автомобильная — 1,0 трлн рублей, а ветроэнергетика — 0,5 трлн рублей. В других категориях изменения были менее значительными, за исключением сегмента "Другое", который удвоился до 0,2 трлн рублей.

2024 год указывает рост рынка до 4,6 трлн рублей. Аэрокосмическая отрасль увеличилась до 1,8 трлн рублей, автомобильная — до 1,3 трлн рублей,

а ветроэнергетика — до 0,6 трлн рублей. Строительство и спорт/досуг также покажут рост, достигнув 0,4 и 0,3 трлн рублей соответственно [22-24 ].

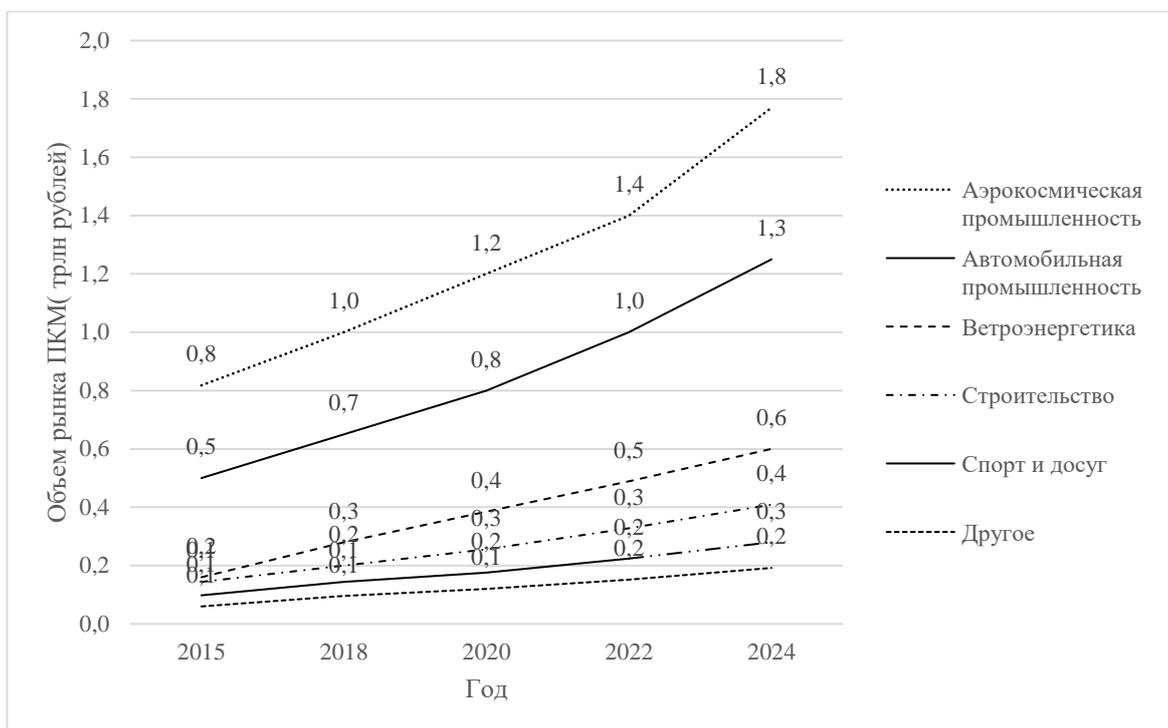


Рисунок 1 - Объем рынка композиционных материалов (в трлн рублей)

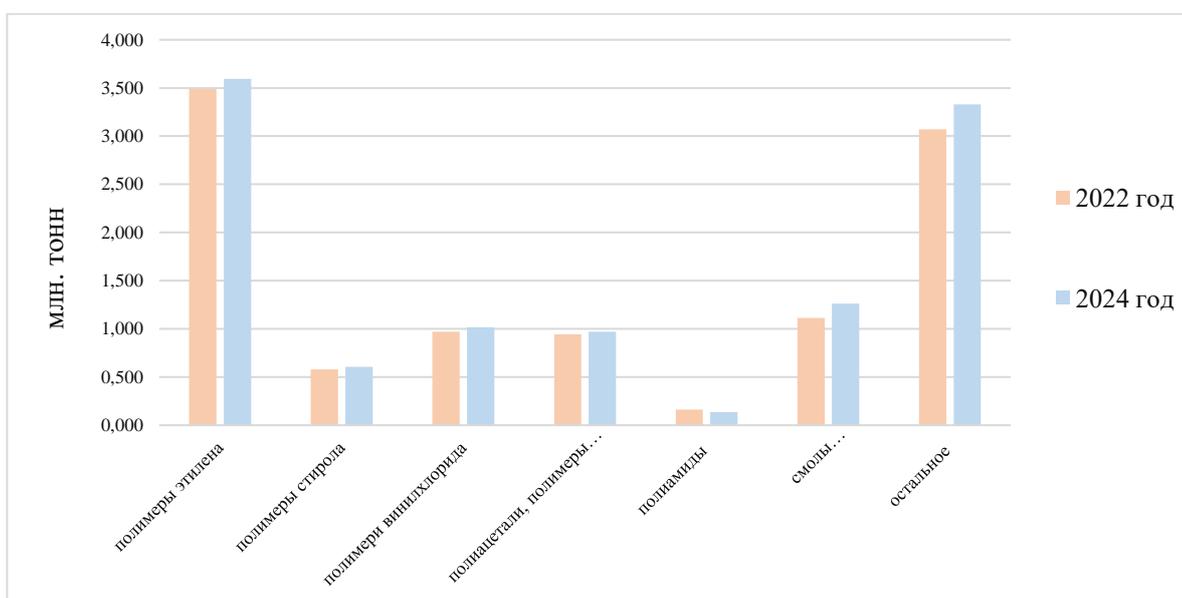
Производство полимеров в России в период с 2022 по 2024 год демонстрировало устойчивый рост, несмотря на внешнеэкономические вызовы. Общий объем выпуска пластмасс в первичных формах увеличился с 10,326 млн тонн в 2022 году до 10,911 млн тонн в 2024 году, что свидетельствует о постепенном развитии отрасли.

Наибольший вклад в общий объем производства вносят полимеры этилена, которые остаются ключевым сегментом. Их выпуск вырос с 3,488 млн тонн в 2022 году до 3,593 млн тонн в 2024 году, хотя темпы роста замедлились. Полимеры стирола после небольшого спада в 2023 году (0,573 млн тонн) показали восстановление до 0,606 млн тонн в 2024 году. Аналогичная динамика наблюдается у полимеров винилхлорида: после незначительного снижения в 2023 году производство выросло до 1,016 млн тонн в 2024 году.

Среди других полимеров стабильно растет выпуск полиацеталей, эпоксидных смол, поликарбонатов и аналогичных материалов – с 0,943 млн тонн в 2022 году до 0,970 млн тонн в 2024 году. В то же время производство

полиамидов сократилось на 19% в 2023 году (до 0,132 млн тонн) и лишь незначительно восстановилось в 2024 году.

Наиболее заметный рост продемонстрировали карбамидоформальдегидные смолы – их производство увеличилось с 1,112 млн тонн в 2022 году до 1,263 млн тонн в 2024 году, что, вероятно, связано с высоким спросом в строительной и мебельной отраслях. Прочие полимеры также показали значительный прирост – с 3,071 млн тонн в 2022 году до 3,328 млн тонн в 2024 году (рис 2.) [25].



*Рисунок 2- Производство полимеров в России, млн. тонн*

Назначение полимерных композиционных материалов включает в себя создание конструкций с улучшенными механическими свойствами, увеличение прочности и жесткости, уменьшение веса изделий, а также создание материалов с высокой стойкостью к коррозии и агрессивным средам.

Кроме того, полимерные композиционные материалы могут быть спроектированы так, чтобы обладать уникальными электрическими, тепловыми или оптическими свойствами, что делает их востребованными в электронике, оптике и других сферах.

Также полимерные композиционные материалы находят применение в производстве специальных материалов с высокой огнестойкостью, антикоррозионной защитой и другими специальными свойствами.

Из-за их разносторонних свойств и потенциала для инженерного улучшения, полимерные композиционные материалы продолжают привлекать внимание и находить новые области применения в различных отраслях промышленности и технологий.

### *1.1.1 Полимерные связующие, используемые в композиционных материалах и их свойства*

Полимерные матрицы, или полимерные связующие, представляют собой материалы, состоящие из полимерных цепей или макромолекул, связанных вместе. Они обладают различными свойствами, такими как прочность, гибкость, устойчивость к химическим воздействиям и теплоизоляционные свойства. Полимерные связующие широко используются в различных областях, включая строительство, авиацию, электронику, медицину и т.д. Они могут быть использованы как связующие материалы для волоконных композиционных материалов, материалов для печати 3D, пленок, покрытий и т.д. Технологии, связанные с полимерными связующими, постоянно развиваются, открывая новые возможности в области материалов и применений.

Полимеры в качестве связующего используют либо в чистом виде (порошки, гранулы, листы, пленки), либо в виде связующих.

#### *Терморезистивные полимеры*

Терморезистивные полимеры относятся к классу полимеров, которые полимеризуются при повышенных температурах. Это означает, что они могут претерпевать химические реакции полимеризации или твердения при нагревании. Эпоксидные смолы, например, обычно полимеризуются при воздействии отверждающего агента или при повышенной температуре [26].

Терморезистивные пластики подразделяются на фенопласты, аминопласты, полиэфирные, эпоксидные, полиуретановые, кремнийорганические и другие пластики (таблица 1).

## Основные характеристики терморезактивных полимеров

Тип пластика	Температура плавления (°C)	Плотность (г/см <sup>3</sup> )	Механическая прочность (МПа)	Ударная вязкость (Дж/м <sup>2</sup> )	Удельное сопротивление (Ом·м)
Фенопласты	150-180	1,2-1,5	50-100	20-60	10 <sup>10</sup> -10 <sup>15</sup>
Аминопласты	150-180	1,2-1,4	80-120	30-70	10 <sup>10</sup> -10 <sup>15</sup>
Полиэфирные	200-250	1,2-1,6	50-90	30-50	10 <sup>12</sup> -10 <sup>14</sup>
Эпоксидные	150-200	1,2-1,6	80-150	50-100	10 <sup>12</sup> -10 <sup>16</sup>
Полиуретановые	160-220	1,1-1,4	50-100	40-80	10 <sup>10</sup> -10 <sup>14</sup>
Кремнийорганические	250-300	1-1,4	30-80	30-50	10 <sup>12</sup> -10 <sup>16</sup>

Терморезактивные полимеры обладают высокой прочностью, твердостью и термостойкостью после полимеризации, что делает их отличным выбором в приложениях, где требуется высокая производительность композиционных материалов. Эпоксидные пластики демонстрируют наивысшую механическую прочность (80-150 МПа), что делает их идеальными для конструкций, требующих высокой прочности. Аминопласты также имеют хорошую прочность (80-120 МПа), что делает их конкурентоспособными в этой категории. Фенопласты и полиуретановые пластики имеют более низкие значения прочности (50-100 МПа), что может ограничивать их применение в высоконагруженных условиях.

Все типы пластика имеют высокие значения удельного сопротивления (от 10<sup>10</sup> до 10<sup>16</sup> Ом·м), что делает их хорошими изоляторами.

Кремнийорганические и эпоксидные пластики имеют наивысшие значения (10<sup>12</sup>-10<sup>16</sup> Ом·м), что может быть полезно в электрических и электронных приложениях.

*Термопластичные полимеры*

Термопластичные полимеры - это тип полимеров, который при нагревании становится пластичным и формоизменяемым, а при охлаждении затвердевает, сохраняя новую форму [26].

Главным отличием термопластичных от термореактивных полимеров является то, что термореактивные отвердевают единой массой и не могут быть снова расплавлены без разложения.

Термопластичные полимеры широко используются в различных областях из-за их удобства в обработке и переработке. Они могут быть повторно переработаны и использованы для создания новых изделий. К примеру, полиэтилен, полипропилен, поливинилхлорид (ПВХ), полистирол - все они являются термопластичными полимерами (таблица 2).

*Таблица 2*

*Основные характеристики термопластичных полимеров*

Тип пластика	Температура плавления (°C)	Плотность (г/см <sup>3</sup> )	Механическая прочность (МПа)	Ударная вязкость (Дж/м <sup>2</sup> )	Удельное сопротивление (Ом·м)
Полиэтилен (PE)	120 - 130	0,91 – 0,97	20-30	5-10	10 <sup>14</sup> -10 <sup>16</sup>
Полипропилен (PP)	160 - 170	0,85 – 0,90	30-50	15-30	10 <sup>15</sup> -10 <sup>17</sup>
Поливинилхлорид (PVC)	75 - 105	1,3-1,5	40-60	2-5	10 <sup>13</sup> -10 <sup>15</sup>
Полиамид (PA)	220 - 250	1,12-1,15	60-100	40-100	10 <sup>12</sup> -10 <sup>14</sup>
АБС-пластик (ABS)	210 - 250	1,05-1,15	40-50	15-25	10 <sup>12</sup> -10 <sup>15</sup>
Полиуретан (PU)	180 - 220	1,20-1,30	25-60	30-50	10 <sup>12</sup> -10 <sup>14</sup>
Этиленвинилацетат (EVA)	90 - 100	0,93-0,95	10-20	10-20	10 <sup>12</sup> -10 <sup>15</sup>

Полиамид (PA) демонстрирует наивысшую механическую прочность (60-100 МПа), что делает его идеальным для конструкций, требующих высокой прочности. Поливинилхлорид (PVC) и полипропилен (PP) имеют средние значения прочности (40-60 МПа и 30-50 МПа соответственно), что делает их подходящими для менее нагруженных приложений. Полиэтилен (PE) и этиленвинилацетат (EVA) имеют более низкие значения прочности (20-30 МПа и 10-20 МПа соответственно), что ограничивает их применение в высоконагруженных условиях. Все представленные материалы имеют высокие значения удельного сопротивления (от 10<sup>12</sup> до 10<sup>17</sup> Ом·м), что делает их хорошими изоляторами.

## *Эластомеры*

Эластомеры представляют собой класс полимерных материалов, обладающих выдающейся упругостью и возможностью возвращения к исходной форме после деформации. Эластомеры отличаются от обычных пластиков и термопластичных полимеров своей способностью поддаваться деформации без постоянного изменения своей формы. Эта уникальная характеристика делает их идеальными материалами для применения в упругих элементах, уплотнениях, упругих подшипниках и других приложениях, где требуется гибкость и восстановление формы.

Эластомеры могут быть синтетическими (например, стирол-бутадиеновые каучуки, полиуретаны) или естественными (например, каучук). Они часто используются в производстве резиновых изделий, таких как покрышки, прокладки, уплотнения, резиновые детали для автомобилей и другие изделия, где важными свойствами являются упругость и устойчивость к деформации (таблица 3).

*Таблица 3*

*Основные характеристики эластомеров полимеров*

Тип пластика	Температура плавления (°C)	Плотность (г/см <sup>3</sup> )	Механическая прочность (МПа)	Ударная вязкость (Дж/м <sup>2</sup> )	Удельное сопротивление (Ом·м)
Силиконовый каучук (Si)	200-250	1,1-1,3	7-12	30-60	10 <sup>12</sup> -10 <sup>14</sup>
Нитрильный каучук (NBR)	160-180	1,0-1,2	10-20	5-10	10 <sup>12</sup> -10 <sup>14</sup>
Стирол-бутадиеновый каучук (SBR)	230-270	0,9-1,2	15-25	10-20	10 <sup>12</sup> -10 <sup>15</sup>
Эпоксидный каучук (EPDM)	250-300	0,9-1,2	10-20	10-15	10 <sup>12</sup> -10 <sup>14</sup>
Синтетический каучук (CR)	180-200	1,2-1,5	15-30	10-20	10 <sup>12</sup> -10 <sup>15</sup>

Термопластический эластомер (ТРЕ)	220-230	0,9-1,5	20-40	20-30	$10^{12}$ - $10^{15}$
Полиизобутилен (PIB)	160-180	0,9-1,0	10-20	10-20	$10^{12}$ - $10^{15}$
Фторэластомер (ФКМ)	250-300	1,7-1,9	15-20	10-15	$10^{15}$ - $10^{16}$

Механическая прочность варьируется от 7 до 40 МПа.

Термопластический эластомер (ТРЕ) демонстрирует наивысшую прочность (20-40 МПа), что делает его подходящим для применения в условиях, требующих высокой прочности. Силиконовый и нитрильный каучуки имеют более низкие значения прочности (7-20 МПа).

Все представленные материалы имеют высокие значения удельного сопротивления (от  $10^{12}$  до  $10^{16}$  Ом·м), что делает их хорошими изоляторами. Фторэластомер имеет наивысшее значение ( $10^{15}$ - $10^{16}$  Ом·м), что может быть полезно в электронике и других областях, где требуется высокая электрическая изоляция.

### *1.1.2 Наполнители, использующиеся в композиционных материалах, и их свойства*

Наполнители - это материалы, которые добавляются к полимерам (пластикам) с целью улучшения их физических, механических и химических свойств. Наполнители могут включать в себя различные материалы, такие как стекловолокно, углеродное волокно, каолин, тальк, кремнезем, мрамор и многие другие.

Добавление наполнителей в полимерный материал может улучшить его прочность, жаропрочность, жесткость, устойчивость к ударам, термическую стабильность, а также снизить стоимость производства. Наполнители также могут улучшить электрические и теплопроводные свойства полимеров [27].

Выбор конкретного наполнителя зависит от требований к конечному продукту и его назначения. Например, стекловолокно часто используется для увеличения жесткости и прочности пластиков, тогда как каолин может быть добавлен для улучшения термостойкости рис.3

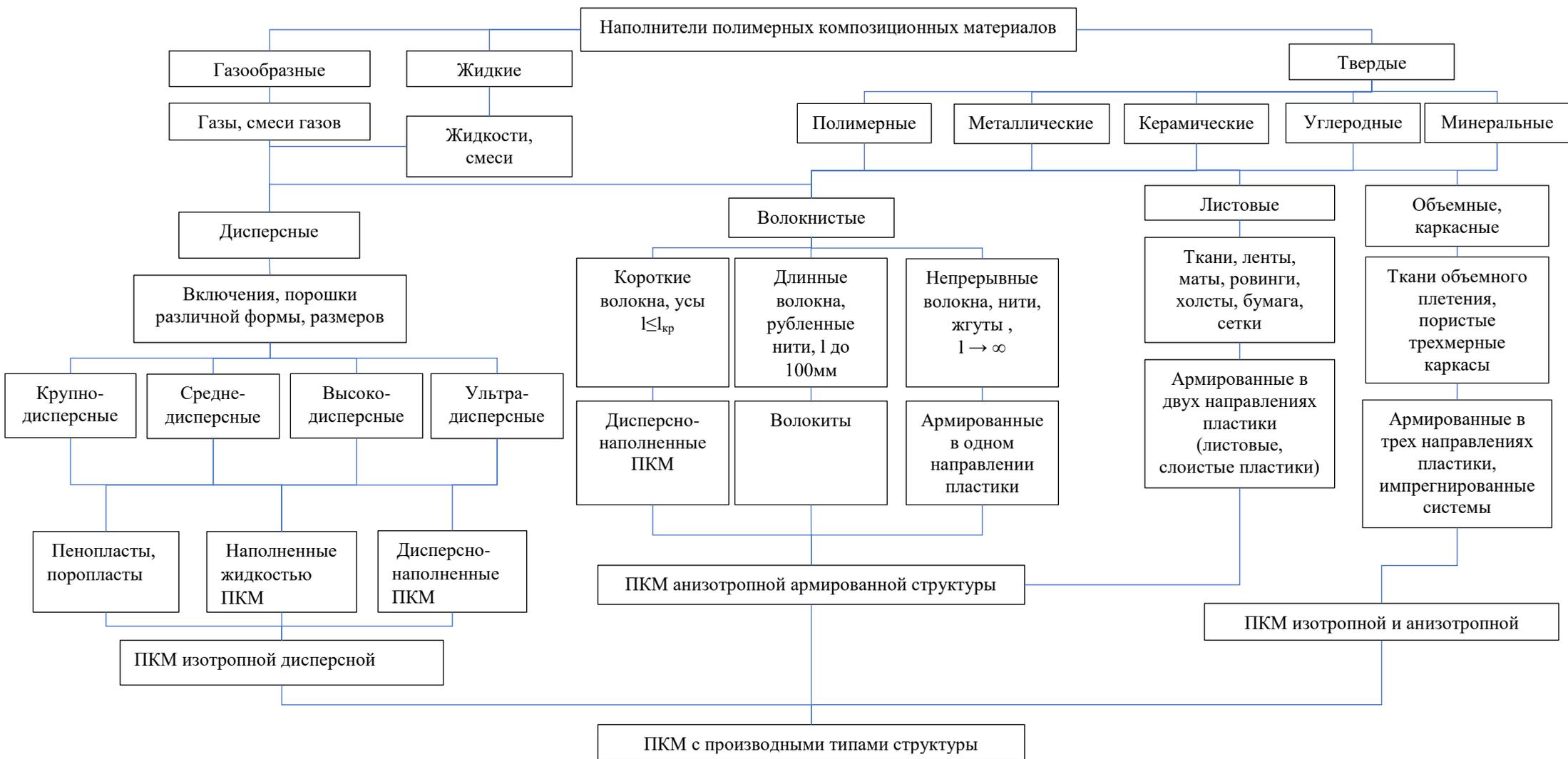


Рисунок 3- Основные виды наполнителей полимерных композиционных материалов

### *Дисперсные наполнители*

Дисперсные наполнители представляют собой твердые частицы, равномерно распределенные в полимерной матрице, что позволяет улучшить механические и эксплуатационные характеристики материала. К ним относятся минеральные (каолин, тальк, мел, кварц), синтетические (аэросил, технический углерод) и другие наполнители, классифицируемые по размеру частиц на ультрадисперсные (<1 мкм), высокодисперсные (1-10 мкм), среднедисперсные (10-40 мкм) и крупнодисперсные (>40 мкм). Их применение обеспечивает повышение прочности, термостойкости и снижение стоимости композиционных материалов. [24].

### *Волокнистые наполнители*

Волокнистые наполнители, такие как стеклянные, углеродные, арамидные и натуральные волокна, придают материалам анизотропные свойства, значительно улучшая их механические характеристики. Стеклянные волокна отличаются высокой прочностью и коррозионной стойкостью, углеродные – легкостью и электропроводностью, а арамидные – ударной вязкостью и термостойкостью. Натуральные волокна ценятся за экологичность и биоразлагаемость. Эти наполнители широко применяются в авиационной, автомобильной, строительной и других отраслях промышленности. [26].

### *Объемные наполнители*

Объемные наполнители, включая полимерные и стеклянные микросферы, а также минеральные порошки, используются для снижения плотности и стоимости материалов, улучшения их тепло- и звукоизоляционных свойств. Они находят применение в производстве легких композиционных материалов, строительных материалов и упаковки.

### *Листовые наполнители*

Листовые наполнители, такие как слюда, графитовые листы и полимерные пены, обеспечивают материалы дополнительными свойствами,

такими как электро- и теплоизоляция, гибкость и легкость. Их используют в электротехнике, строительстве и производстве упаковки. Выбор конкретного типа наполнителя зависит от требуемых характеристик конечного продукта и условий его эксплуатации. [27].

## **1.2 Анализ механических и электрических характеристик полимерных композиционных материалов**

### *1.2.1 Механические характеристики полимерных композиционных материалов*

Определение и измерение механических свойств полимерных композиционных материалов регламентируется стандартами (ГОСТ) и обеспечивают единообразие в проведении испытаний, методах определения механических свойств и интерпретации результатов.

Стандарт ГОСТ Р 56810-2015 «КОМПОЗИТЫ ПОЛИМЕРНЫЕ. Метод испытания на изгиб плоских образцов» [28] устанавливает метод испытания материалов на трехточечный изгиб и определяет такие параметры как:

Прочность определяет максимальную нагрузку, которую материал может выдержать до разрушения, измеряется в МПа.

Прочность при изгибе  $\sigma_{II}^B$ , МПа, вычисляют по формуле:

$$\sigma_{II}^B = \frac{3F_{max}L}{2bh^2}, \quad (1)$$

где:  $F_{max}$  — максимальная нагрузка, предшествующая разрушению образца, Н;

$L$  — пролет между опорами, мм;

$b$  — ширина образца, мм;

$h$  — толщина образца, мм.

Деформацию на внешней поверхности образца  $\varepsilon_{max}$  вычисляют по формуле:

$$\varepsilon_{max} = \frac{6\omega h}{L^2}, \quad (2)$$

где:  $\omega$  — прогиб (мм), при котором деформация на внешней поверхности образца достигнет 0,05 мм/мм.

Модуль упругости - показатель жесткости материала и описывает его способность деформироваться под действием нагрузки. Более высокий модуль указывает на более жесткий материал.

Модуль упругости при поперечном изгибе  $E_{II}''$ , МПа, вычисляют по формуле

$$E_{II}'' = \frac{L^3 m}{4bh^3}, \quad (3)$$

где:  $m$  — тангенс угла наклона касательной к первоначальному линейному участку диаграммы деформирования образца к оси деформаций.

ГОСТ 11262-2017 «Пластмассы. Метод испытания на растяжение» [29] устанавливает метод и условия определения свойств пластмасс при растяжении с учетом общих принципов, установленных в ГОСТ 34370 [30].

Значения прочности ( $\sigma$ ) в МПа (Н/мм<sup>2</sup>) вычисляют по формулам:  
Прочность при растяжении  $\sigma_{pm}$ :

$$\sigma_{pm} = \frac{F_{pm}}{A_0}, \quad (4)$$

Прочность при разрыве  $\sigma_{pp}$ :

$$\sigma_{pp} = \frac{F_{pp}}{A_0}, \quad (5)$$

Предел текучести при растяжении  $\sigma_{рт}$ :

$$\sigma_{pm} = \frac{F_{pm}}{A_0}, \quad (6)$$

Предел текучести при растяжении  $\sigma_{рту}$ :

$$\sigma_{pmu} = \frac{F_{pmu}}{A_0}, \quad (7)$$

где:  $F_{pm}$  - максимальная нагрузка при испытании на растяжение, Н;

$F_{pp}$  - нагрузка, при которой образец разрушился, Н;

$F_{рт}$  - растягивающая нагрузка при достижении предела текучести, Н;

$F_{рту}$  - растягивающая нагрузка при достижении условного предела текучести, Н;

$A_0$  - начальное поперечное сечение образца, мм<sup>2</sup>.

Удлинение  $\varepsilon$  в процентах вычисляют по формулам:

Относительное удлинение при максимальной нагрузке  $\varepsilon_{pm}$ :

$$\varepsilon_{pm} = \frac{\Delta l_{om}}{l_0} \times 100\%, \quad (8)$$

Относительное удлинение при пределе текучести  $\varepsilon_{pt}$ :

$$\varepsilon_{pt} = \frac{\Delta l_{om}}{l_0} \times 100\%, \quad (9)$$

где:  $\Delta l_{om}$  - изменение расчетной длины образца в момент достижения максимальной нагрузки, мм;

$\Delta l_{op}$  - изменение расчетной длины образца в момент разрыва, мм;

$\Delta l_{om}$  - изменение расчетной длины образца в момент достижения предела текучести, мм;

$l_0$  - начальная расчетная длина образца, мм.

Модуль Юнга при разрыве определяется как:

$$E = \frac{\sigma_{pm}}{\varepsilon_{pm}}, \quad (10)$$

ГОСТ 4651—2014 (ISO 604:2002) «Пластмассы. Метод испытания на сжатие» [31] устанавливает метод испытания пластмасс на сжатие и определяет такие параметры как:

Модуль упругости  $E$ , Мпа вычисляют по формуле:

$$E' = \frac{F \cdot 4l}{S \cdot \pi d^2} \cos \delta, \quad (11)$$

Модуль потерь  $E''$ , Мпа, вычисляют по формуле:

$$E' = \frac{F \cdot 4l}{S \cdot \pi d^2} \sin \delta, \quad (12)$$

Тангенс угла механических потерь  $\text{tg} \delta$  вычисляют по формуле:

$$\text{tg} \delta = \frac{E''}{E'}, \quad (13)$$

где:

$F$ - измеренная амплитуда динамической нагрузки, Н;

$s$  – измеренная амплитуда динамического смещения, м;

$L$  – расстояние между пластинами, м;

$d$  – диаметр образца, м;

$\delta$  – измеренный фазовый угол между нагрузкой и смещением, градус.

### 1.2.2 Электрические характеристики полимерных композиционных материалов

Удельное поверхностное сопротивление (Ом) и удельное объемное сопротивление (Ом·м (Ом·см)) описывает ГОСТ Р 50499-93 (МЭК 93-80) «МАТЕРИАЛЫ ЭЛЕКТРОИЗОЛЯЦИОННЫЕ ТВЕРДЫЕ. Методы определения удельного объемного и поверхностного сопротивления» [32].

Удельное объемное сопротивление измеряется в ом-метрах и определяет сопротивление проходящему электрическому току через единичный объем материала. Высокое удельное объемное сопротивление свидетельствует о хороших изоляционных свойствах материала.

Удельное объемное сопротивление  $\rho_v$  рассчитывают по формуле:

$$\rho_v = R_x \frac{A}{h}, \quad (14)$$

где  $R_x$  — объемное сопротивление, Ом;

$A$  — эффективная площадь защищенного электрода, м<sup>2</sup> (см<sup>2</sup>);

$h$  — средняя толщина образца, м (см).

объемное сопротивление  $R_x$  рассчитывается по формуле:

$$R_x = \frac{U_x}{j_s + j_0}, \quad (15)$$

где:  $U_x$  — прикладываемое напряжение, В;

$j_s$  — установившийся ток под напряжением или значения тока после 1, 10 и 100 мин, если ток под напряжением меняется, А;

$j_0$  — ток короткого замыкания до подачи напряжения, А.

Знак минус используют, если  $j_0$  имеет то же направление, что  $j_s$ , в противном случае используют знак плюс.

Удельное поверхностное сопротивление ( $\sigma$ ) измеряется в омах (Ом) и определяет сопротивление току, протекающему по поверхности материала. Это свойство особенно важно для изоляции, где важно предотвратить утечку тока через поверхность.

Удельное поверхностное сопротивление  $\rho_s$ , рассчитывают по формуле:

$$\rho_s = R_x \frac{p}{g}, \quad (16)$$

где:  $R_x$  — поверхностное сопротивление Ом;

$p$  — эффективный периметр защищенного электрода для конкретно используемого размещения электродов, м (см);

$g$  — ширина зазора между электродами, м (см).

Проводимость  $\sigma$ , С/м, определяется по формуле:

$$\sigma = \frac{1}{\rho_v}, \quad (17)$$

Относительная диэлектрическая проницаемость и тангенс угла диэлектрических потерь определяется по ГОСТ 22372-77 «Материалы диэлектрические. Методы определения диэлектрической проницаемости и тангенса угла диэлектрических потерь в диапазоне частот от 100 до  $5 \cdot 10^6$  Гц» [33].

Относительная диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon$  определяет способность материала накапливать электрический заряд в электрическом поле. Она выражается как отношение электрической емкости исследуемого образца к емкости вакуума:

$$\varepsilon = \frac{C_x}{C_0}, \quad (18)$$

В случае использования микрометрических электродов при применении контактных методов измерения диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon$  твердых образцов определяется по формуле:

$$\varepsilon = \frac{t'}{t''}, \quad (19)$$

где:  $t'$  — толщина образца;

$t''$  — расстояние между пластинами конденсатора без образца.

Тангенс угла диэлектрических потерь характеризует потери энергии в диэлектриках под воздействием переменного электрического поля. Он определяется как отношение потерянной мощности (в результате внутреннего сопротивления) к мощности, хранимой в диэлектрике:

$$\operatorname{tg} \delta = \frac{C_1}{C_x} (\operatorname{tg} \delta_1 - \operatorname{tg} \delta_2), \quad (20)$$

где:  $\operatorname{tg} \delta_1$  — тангенс угла диэлектрических потерь конденсатора с образцом;

$\operatorname{tg} \delta_2$  — тангенс угла диэлектрических потерь конденсатора без образца;

$C_1$  — полная емкость конденсатора с образцом, иФ;

$C_x$  — емкость образца, пФ. определяемая по формуле:

$$C_x = 0,0695 \frac{d^2}{t''}, \quad (21)$$

где:  $d$  — диаметр электрода.

При добавлении наполнителей в связующее полимерных композиционных материалов могут происходить изменения в их диэлектрических свойствах. Наполнители, такие как углеродные волокна, стекловолокно или другие материалы, могут влиять на распределение электрических полей внутри композиционного материала, что, в свою очередь, может привести к ухудшению изоляционных характеристик. Это связано с тем, что наполнители могут создавать пути для электрического тока, снижая общее удельное объемное сопротивление материала.

В связи с этим, проведение механических испытаний и определение электрических характеристик становится особенно важным.

Комплексный подход к испытаниям, включающий как механические, так и электрические характеристики, позволяет обеспечить надежность и безопасность полимерных композиционных материалов, используемых в высокотехнологичных приложениях.

### 1.3 Анализ проблем и ограничений существующих методов диагностики состава полимерных композиционных материалов

Современная практика диагностики состава полимерных композиционных материалов сталкивается с комплексом взаимосвязанных проблем, существенно ограничивающих эффективность контроля качества. Основные трудности связаны с тем, что разработка полимерных композиционных материалов по-прежнему во многом основывается на эмпирическом подходе, требующем многоэтапного перебора различных составов и их последующей экспериментальной проверки, а также с техническими возможностями существующих методов, их экономической целесообразностью и экологической безопасностью. В таблице 4 приведены основные методы диагностики полимерных композиционных материалов и их недостатки.

*Таблица 4 - Сравнительная характеристика методов диагностики состава полимерных композиционных материалов*

Метод диагностики	Основные недостатки	Влияние на точность	Влияние на экологию
Механические испытания (растяжение, изгиб)	Разрушение образца, необходимость множества тестов	Усредненные данные, не выявляет локальные дефекты	Высокий расход материалов, отходы
Термогравиметрия (ТГА)	Только общее содержание наполнителей	Не определяет распределение компонентов	Энергозатраты, выбросы при нагреве
ИК-спектроскопия	Требует подготовки образцов, референсных данных	Ограничена для сложных многокомпонентных систем	Использование химических реагентов
Хроматография	Длительный анализ, дорогие расходники	Чувствительность к примесям	Токсичные растворители, отходы
Электронная микроскопия	Малая площадь анализа, вакуумирование	Локальные данные не отражают весь объем	Высокое энергопотребление
Рентгеноструктурный анализ	Ограниченная информация о полимерах	Не определяет органические компоненты	Радиационная нагрузка

Главным ограничением диагностики материалов является разрушающий характер большинства аналитических методик. При

проведении механических испытаний образцы неизбежно повреждаются, что требует изготовления многочисленных дубликатов для комплексной оценки. Такой подход не только увеличивает материальные затраты, но и делает невозможным отслеживание изменения свойств одного и того же образца в динамике.

Серьезную проблему представляет низкая чувствительность стандартных методов к локальным неоднородностям распределения компонентов. Такие широко применяемые техники, как термогравиметрия или ИК-спектроскопия, дают усредненные данные по всему объему образца.

Методы хроматографии и спектроскопии, несмотря на их точность, требуют сложной пробоподготовки и наличия обширных баз референсных данных. Это существенно ограничивает их применение для новых, уникальных составов полимерных композиционных материалов, разработка которых особенно актуальна в современных условиях.

При этом одной из ключевых характеристик, определяющих надежность и безопасность изделий, является прочность материалов, в частности испытания на растяжение полимерных композиционных материалов. Однако существующие методы диагностики состава полимерных композиционных материалов требуют изготовления и тестирования большого количества образцов, в связи с чем возникает необходимость создания методики совершенствования диагностики состава полимерных композиционных материалов с заданными механическими свойствами, при сохранении электрических характеристик, способствующую уменьшению трудоемкости, финансовых затрат проведения испытаний на растяжение, повышению надежности изделий и экологической безопасности окружающей среды.

#### **1.4 Методы разрушающего контроля полимерных композиционных материалов**

Разрушающие методы контроля полимерных материалов, включая испытания на растяжение, сжатие, изгиб и ударную вязкость, позволяют оценить их прочностные характеристики и поведение под нагрузкой. Особое

значение имеют испытания на растяжение, которые определяют ключевые показатели: предел прочности, модуль упругости и пластичность материала.

В аэрокосмической отрасли эти параметры критически важны, так как конструкции подвергаются экстремальным нагрузкам - вибрациям, перепадам давления и температуры. Высокая прочность на растяжение обеспечивает надежность конструкций, а оптимальное сочетание жесткости (модуля упругости) и малого веса позволяет создавать легкие и прочные элементы, улучшающие топливную эффективность летательных аппаратов.

Пластичность материалов играет особую роль, позволяя композиционным материалам поглощать механические воздействия и адаптироваться к сложным условиям эксплуатации. Полученные в ходе испытаний данные помогают прогнозировать поведение материалов в реальных условиях и разрабатывать более эффективные инженерные решения.

Образцы для испытаний должны быть подготовлены в соответствии с ГОСТ 11262-2017 «Пластмассы. Метод испытания на растяжение» [14], чтобы обеспечить однородность и воспроизводимость результатов.

Образцы помещаются в растягивающий аппарат, который постепенно увеличивает нагрузку до момента разрушения. Машина регистрирует силу и удлинение (насколько растягивается образец) с течением времени. На основе этих данных можно рассчитать такие важные характеристики, как:

Прочность на разрыв: максимальное напряжение, которое может выдержать материал перед разрывом.

Удлинение при разрыве: на сколько материал может растянуться до разрыва, обычно выражается в процентах.

Модуль Юнга: мера жесткости материала.

Однако методы разрушающего контроля имеют ряд существенных ограничений:

- Многие существующие методы разрушающего контроля, требуют непосредственного разрушения образца для получения данных о его прочности, а также выявления возможных дефектов. При проведении

механических испытаний образец подвергается действию сил до момента разрушения. Этот процесс приводит к тому, что каждая тестируемая единица теряет свою эксплуатационную пригодность после испытаний. Таким образом, чтобы получить полное представление о состоянии материала, необходимо тестировать несколько образцов, что ведет к необходимости в дополнительных ресурсах: увеличивается расход сырья, необходимого для изготовления контрольных образцов; увеличению временных затрат: подготовка, тестирование и анализ каждого образца требуют значительного времени.

- **Количество образцов.** Чтобы достоверно оценить свойства полимерных композиционных материалов, обычно необходимо проводить испытания на значительном количестве образцов. Эта необходимость имеет ряд последствий в виде экономических и временных затрат:

**Затраты на материалы.** При массовом тестировании это может приводить к огромным расходам на производство образцов, особенно если композиционные материалы являются редкими или дорогостоящими.

**Времени на тестирования.** Организация и выполнение испытаний могут занимать значительное время, таким образом удлиняя процесс исследования и разработки новых продуктов.

**Дополнительные расходы на экспертизы.** Необходимость в дополнительных инструментах и персонале для обработки большего числа образцов также усиливает общие затраты.

Этот процесс может создавать преграды для ускоренного внедрения новых решений и технологий.

- **Экология.** Некоторые методы разрушающего контроля, такие как радиографический контроль, применение токсичных реагентов и химические анализы, могут иметь негативные последствия для окружающей среды:

Применение токсичных веществ может приводить к загрязнению почвы и воды, создавая долгосрочные проблемы для экосистем.

Образование опасных отходов требует дополнительной обработки и утилизации, что может увеличить затраты и усложнить процесс контроля.

Важно отметить, что соответствие современным экологическим стандартам становится все более актуальным, и предприятиям необходимо учитывать эти обязательства при выборе методов контроля.

### **Выводы по первому разделу**

Проведенный анализ современного состояния диагностики состава полимерных композиционных материалов выявил существенные технологические и методологические ограничения, сдерживающие развитие этого важного направления материаловедения. Несмотря на широкое применение полимерных композиционных материалов в критически важных отраслях - от аэрокосмической промышленности до медицины - существующие методы диагностики их состава остаются ресурсоемкими и недостаточно эффективными.

Ключевой проблемой является невозможность традиционных методов обеспечить комплексную диагностику без значительных материальных и временных затрат. Разрушающий характер большинства испытаний (механических, термических, химических) требует изготовления многочисленных образцов.

Особую озабоченность вызывает низкая информативность стандартных методов в отношении локальных неоднородностей материала. Даже современные аналитические техники (ИК-спектроскопия, хроматография, электронная микроскопия) дают либо усредненные данные по всему объему образца, либо информацию о крайне малых участках, не отражающую реальную картину распределения компонентов. Это существенно снижает достоверность прогноза эксплуатационных характеристик готовых изделий.

При этом сохраняется необходимость в точном контроле механических свойств полимерных композиционных материалов, особенно таких критически важных параметров, как прочность на растяжение и модуль упругости.

## Раздел 2. Математическая модель определения механических и электрических свойств полимерных композиционных материалов

В условиях современного промышленного производства особую актуальность приобретает разработка моделей и методик, позволяющих сократить затраты времени и ресурсов на создание новых полимерных композиционных материалов с заданными свойствами. Ключевым фактором, определяющим свойства полимерных композиционных материалов, является их компонентный состав, включающий связующее и наполнитель (рис 4.).



Рисунок 4- Влияние состава полимерного композиционного материала на свойства

Традиционные подходы, основанные на многоэтапных лабораторных исследованиях, требуют значительных финансовых вложений и временных затрат, что существенно замедляет процесс внедрения новых материалов в производство. Для решения указанных проблем предложена математическая модель (рис. 5), позволяющая определить механические и электрические свойства полимерных композиционных материалов. Такой подход обеспечивает точное определение эксплуатационных характеристик материалов при одновременном сокращении требуемых лабораторных испытаний.

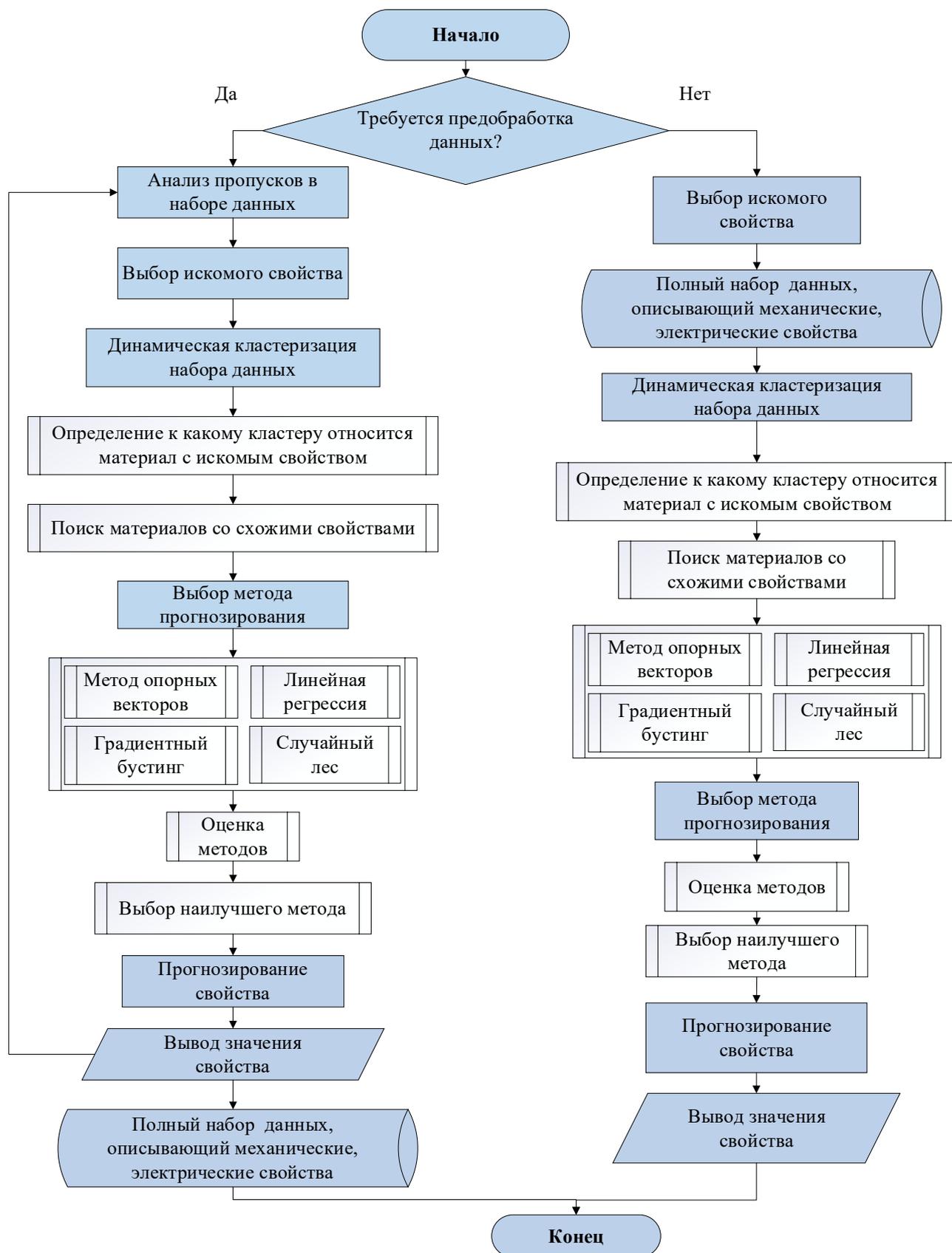


Рисунок 5– Математическая модель определения механических и электрических свойств полимерных композиционных материалов

Модель объединяет кластеризацию данных и прогнозирование целевых свойств ПКМ. Для разделения данных на кластеры применяется метод *k*-средних.

Для каждого кластера применяется регрессионная модель, выбираемая на основе минимизации среднеквадратичной ошибки (MSE). Разработанная математическая модель позволяет точно определить механических электрические свойства полимерных композиционных материалов

$$Y(t) = \left\{ \begin{array}{l} C(X) = \arg \min_s \sum_{i=1}^k \sum_{x \in S_i} \|x - \mu_i\|^2 \rightarrow \{S_1, S_2, \dots, S_k\} \\ \hat{y}_i = f_i(X_i) = \arg \min_{f \in F} MSE(f, X, y) \end{array} \right\}, \quad (22)$$

**Входные параметры:**

$X = \{x_1, x_2, \dots, x_i\}$ , где  $x_i$  — известные значения свойств полимерных композиционных материалов.

**Целевые переменные:**

$Y = \{y_1, y_2, \dots, y_i\}$ , где  $y_j$  — искомое свойство полимерного композиционного материала.

Где  $F$  — множество методов:

$C(X)$  — алгоритм кластеризации *K*-means;

$S_1, S_2, \dots, S_k$  — кластеры материалов с близкими свойствами;

$\mu_i$  - центроид кластера  $i$ ;

$f_j$  — выбранный метод прогнозирования (линейная регрессия, случайный лес, SVM и др.) ;

$\beta_0$  — свободный член (интерсепт);

$\beta_i$  — коэффициенты регрессии (влияние  $i$ -го параметра) ;

$\varepsilon$  — случайная ошибка ;

$T$  — количество деревьев в ансамбле ;

$f_t(X)$  — предсказание  $t$ -го дерева решений ;

$F_m(X)$  — модель после  $m$ -й итерации ;

$hm(X)$  — слабый предсказатель (обычно дерево решений) ;

$\gamma$  — скорость обучения (шаг градиентного спуска) ;

$ai$  — коэффициенты, найденные в ходе оптимизации ;

$yi$  — известные значения целевой переменной ;

$K(X, Xi)$  — ядро ;

$b$  — смещение.

Для корректной работы математической модели необходимо использовать набор данных, включающий в себя информацию о свойствах полимерных композиционных материалов, качество и полнота которых непосредственно определяют точность и надежность прогнозирования. Собранный массив информации позволяет выявить ключевые закономерности взаимосвязи между составом материалов и их эксплуатационными свойствами.

## 2.1 Сбор данных

Для правильного функционирования математической модели требуется набор данных, содержащий сведения о характеристиках полимерных композиционных материалах. В настоящее время существует большое количество наборов данных, посвященных полимерным композиционным материалам, которые содержат информацию о свойствах, характеристиках, составах и областях применения полимерных композиционных материалов.

Так, например база данных PoLyInfo [34] представляет собой специализированный ресурс, созданный для хранения, анализа и обмена информацией о полимерных композиционных материалах.

База данных состоит из информационных листов и словаря полимеров (polymer dictionary), информации о журналах и указателей для эффективного поиска. В словаре полимеров есть основная таблица полимеров, в которую вносится информация : название полимера, полимерная группа, структурные данные, формулы состава, а также основная таблица мономеров, в которой описана информация о мономерах.

База данных ChemProps с поддержкой RESTful API [35] оптимизирована для решения проблемы индексации полимеров с помощью легко обновляемого дизайна как по глубине, так и по ширине. RESTful API обеспечивает упрощенный обмен данными и простую интеграцию между системами данных. Чтобы обеспечить точность ChemProps, авторы присваивают весовой коэффициент каждому алгоритму, чтобы генерировать оценки для потенциальных химических названий и оптимизировать их, используя данные NanoMine. Авторы настраивали ChemProps с конвергентным набором весовых коэффициентов, используя обучающие данные, и протестировали его на пакетах поиска тестового набора.

Использование искусственных нейронных сетей для прогнозирования свойств полимерных композиционных материалов является одним из эффективных методов в области материаловедения. Нейронные сети позволяют установить сложные зависимости между различными входными параметрами и механическими свойствами композиционных материалов.

Несмотря на преимущества существующих наборов данных существуют определенные недостатки и ограничения, которые могут повлиять на ее эффективность и полезность для применения в математической модели определения свойств полимерных композиционных материалов.

- Надежность и точность представленных данных могут варьироваться. Если информация была получена из неподтвержденных источников или основана на непроверенных расчетах, это может привести к ошибкам в анализе и интерпретации [36];
- Для многих виртуальных материалов и спрогнозированных свойств могут отсутствовать экспериментальные данные, подтверждающие расчеты. Это может затруднить переход от теории к практике;
- Некоторые подобные базы данных могут требовать плату за доступ или подписку, что ограничивает доступ пользователей, особенно в

академических или исследовательских учреждениях с ограниченным бюджетом;

- Существующие наборы данных не позволяют комплексно оценивать механические и электрические параметры материалов;

В связи с этим возникает необходимость создания набора данных, включающего в себя результаты испытаний полимерных композиционных материалов как механических, так и электрических характеристик.

Для разработки модели определения состава полимерных композиционных материалов на основе заданных электрических и механических входных параметров был создан набор данных, включающий в себя характеристики, описанные в соответствующих ГОСТ (таблица 5).

Таблица 5

*Характеристики полимерных композиционных материалов*

ГОСТ	Параметр	Обозначение	Единицы измерения
ГОСТ 11262-2017 Пластмассы. Метод испытания на растяжение	Прочность при растяжении	$\sigma_{pm}$	МПа
	Прочность при разрыве	$\sigma_{pp}$	МПа
	Условный предел текучести при растяжении	$\sigma_{pту}$	МПа
	Удлинение при разрыве	$\epsilon_{pp}$	%
ГОСТ Р 50499-93 (МЭК 93-80) МАТЕРИАЛЫ ЭЛЕКТРОИЗОЛЯЦИОННЫЕ ТВЕРДЫЕ. Методы определения удельного объемного и поверхностного сопротивления	Удельное объемное сопротивление	$\rho$	Ом·м
	Удельное поверхностное сопротивление	$\sigma$	Ом
ГОСТ 22372-77 Материалы диэлектрические. Методы определения диэлектрической проницаемости и тангенса угла диэлектрических потерь в диапазоне частот от 100 до $5 \times 10^6$ в ст. 6 Гц	Относительная диэлектрическая проницаемость	$\epsilon$	
	Тангенс угла диэлектрических потерь	$tg\delta$	

Для обучения модели было рассмотрено более 200 различных источников, число полимерных композиционных материалов составило более 500 штук.

Одним из основных свойств полимерных композиционных материалов является проводимость, например у композиционных материалов на основе эпоксидной смолы и многостенных углеродных нанотрубок (МСНТ) она варьируется от 0,00008 до 0,1 См/м в зависимости от концентрации наполнителя и метода получения [37–39].

Также немаловажными характеристиками материала являются его прочностные характеристики, например для композиционного материала полисульфон/стекловолокно такие как напряжение при разрыве, составляют от 4000 до 15000 МПа [40]. Важную роль играет порог перколяции — минимальная концентрация наполнителя для образования непрерывной проводящей сети. Для композиционного материала полистирол/МСНТ он составляет 0,75 об.% [41]. Исследования показывают, что использование сегрегированной структуры, как в материале полипропилен/технический углерод, позволяет значительно снизить порог перколяции до 0,37 об.% и достичь баланса прочности, ударной вязкости и электропроводности [41].

Одним из методов одновременного улучшения механических и электрических свойств является модификация наполнителя; так, обработка МСНТ желатином для эпоксидных нанокомпозитов улучшает дисперсию и смачиваемость, что приводит к росту электропроводности на два порядка и значительному увеличению прочности и модуля упругости по сравнению с композиционными материалами на основе amino-модифицированных МСНТ [43].

В настоящее время не существует единого и полного набора данных, который бы охватывал механические и электрические свойства полимерных композиционных материалов, а также устанавливал взаимосвязь между этими характеристиками. Во-первых, полимеры представляют собой обширный класс материалов с различными химическими структурами и свойствами, и каждый полимер может обладать уникальными механическими и электрическими характеристиками, что затрудняет создание универсального набора данных.

Сбор информации о свойствах материалов проходил из открытых источников [44-128], в набор данных включались результаты исследований механических и электрических свойств полимерных композиционных материалов.

Следует отметить, что в некоторых источниках необходимые **данные характеристик полимерных композиционных материалов, не были предоставлены в полной мере** что привело к **возникновению пустых значений в наборе данных**. Для устранения этих пробелов было применено прогнозирование недостающих данных с использованием метода линейной регрессии [129-131].

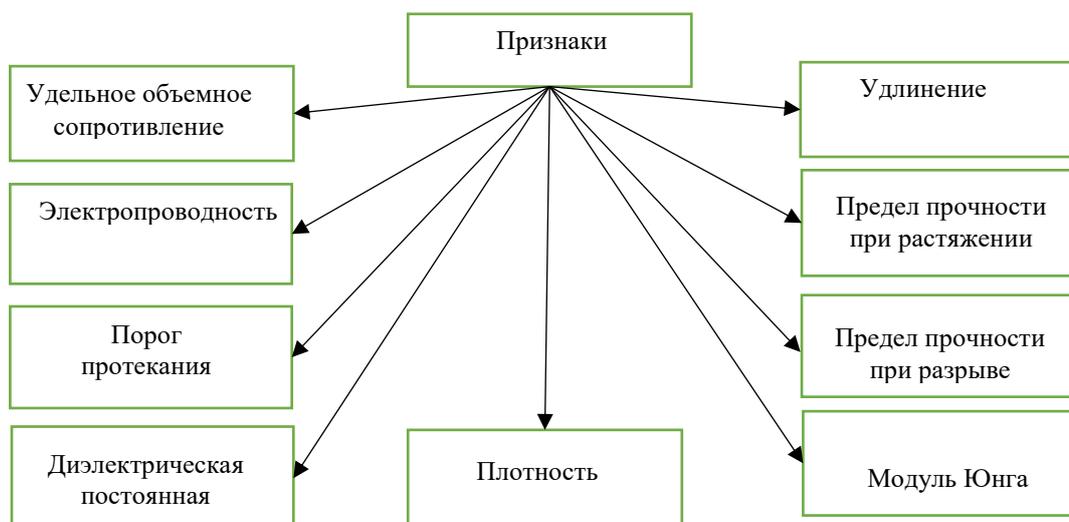
## **2.2 Прогнозирование свойств полимерных композиционных материалов**

### *2.2.1 Кластеризация данных*

Набор данных содержит большое количество признаков (свойств), поэтому для выявления возможных скрытых структур в данных и упрощения набора данных был проведен кластерный анализ. Существует множество алгоритмов кластеризации, которые могут быть использованы для решения различных задач. Среди них k-means, иерархическая кластеризация, DBSCAN, модель гауссовой смеси и другие. Выбор подходящего алгоритма зависит от характера данных, количества объектов и признаков, а также от целей исследования.

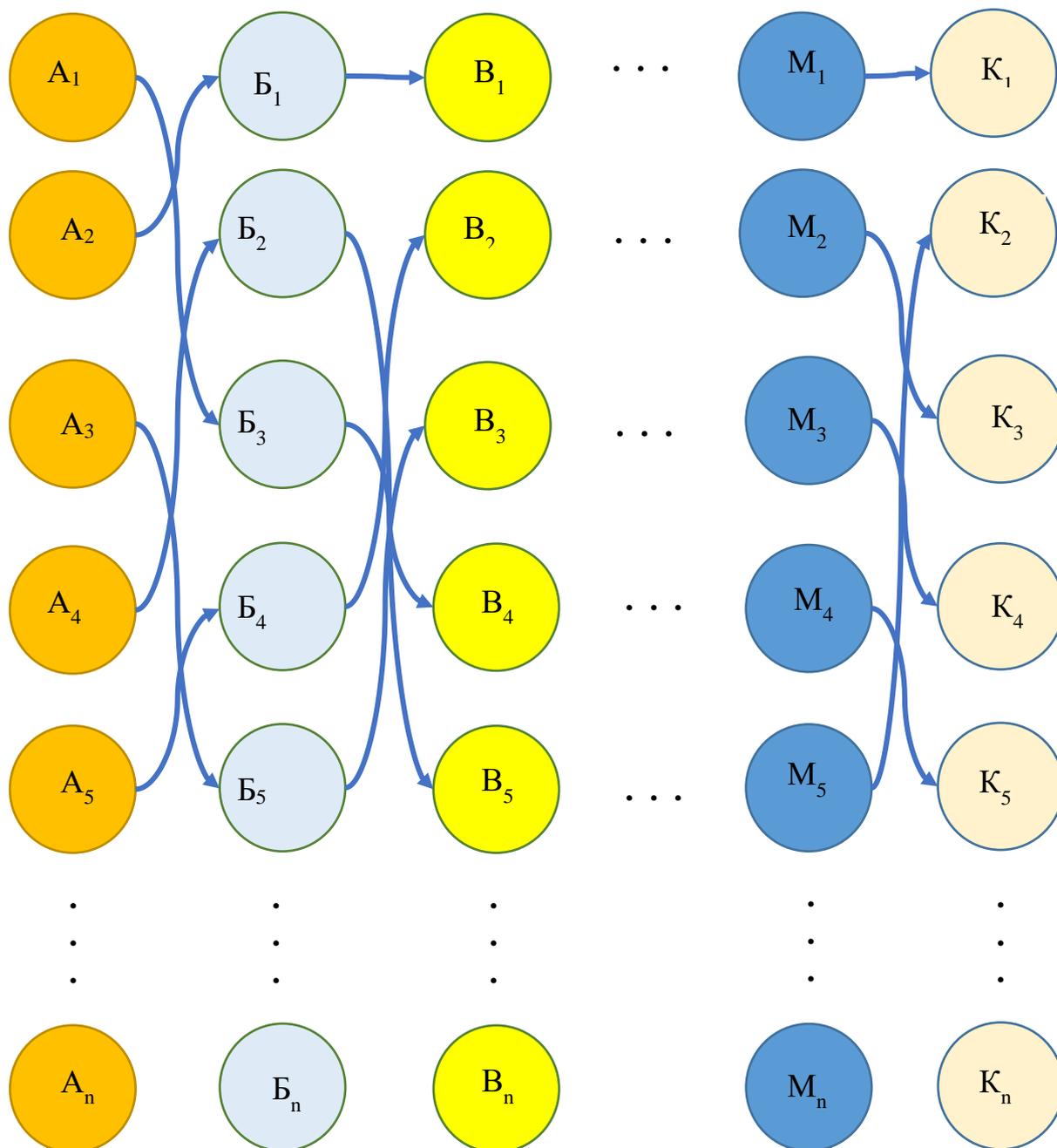
Для анализа многомерного набора данных (500 образцов  $\times$  9 характеристик) (рис. 6) был применен кластерный анализ методом k-means. Этот алгоритм оптимально подходит для задачи благодаря трем ключевым преимуществам: высокой интерпретируемости результатов (кластеры четко отражают группы материалов со схожими свойствами), устойчивости к экспериментальным погрешностям в данных и эффективной работе с большими массивами информации. В отличие от других методов позволяет наглядно представить сложные взаимосвязи между механическими и электрическими характеристиками полимерных композиционных материалов

в виде дискретных групп, что существенно упрощает дальнейший анализ и прогнозирование свойств материалов.



*Рисунок 6 – Признаки, описывающие свойства полимерных композиционных материалов в наборе данных*

Проведем кластеризацию механических свойств. Цель кластеризации — найти группы схожих объектов (векторов) в данных, для дальнейшего построения прогностических моделей. На основе выявленных закономерностей можно создать прогностические модели, которые позволяют прогнозировать свойства композиционных материалов. На рисунке 7 продемонстрирована схема кластеризации, в зависимости от значений свойств можно сделать выводы о кластерах и взаимосвязях свойств в них. Каждый кластер представляет собой уникальную комбинацию механических свойств, что позволяет выявить специфические характеристики материалов, которые могут быть критически важными при их практическом применении. Кроме того, понимание взаимосвязей свойств в каждом конкретном кластере позволяет и оптимизировать существующие формулы полимерных композиционных материалов, а также разрабатывать новые рецептуры для достижения целевых характеристик.



*Рисунок 7- Кластеризация свойств полимерных композиционных материалов, где: А,Б,В...М -свойства (признаки),к – номер кластера*

Перед кластеризацией необходимо выполнить предварительную обработку данных, чтобы убедиться, что все признаки вносят равный вклад в кластеризацию. Данные различаются по масштабу и единицам измерения, поэтому для минимизации этого эффекта проводится стандартизацию признаков. Например стандартизация признака «Удлинение,  $\epsilon$ » вычисляется по формуле:

$$z = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\text{среднее}}}{\sigma_{\varepsilon}}, \quad (23)$$

где:  $\varepsilon$  — значение удлинения,

$\varepsilon_{\text{среднее}}$  — среднее значение удлинения,

$\sigma_{\varepsilon}$  — стандартное отклонение удлинения.

Правильный выбор количества кластеров в алгоритмах позволяет достичь оптимального соотношения между ошибкой вычисляемой дисперсии и сложностью модели. Применение метода локтя помогает определить оптимальное число кластеров. Он заключается в построении графика зависимости сумма квадратов расстояний внутри кластера от числа кластеров и выбора числа кластеров, где график имеет "локоть".

Для набора данных механических свойств, содержащего 500 строк и 4 признака, метод локтя позволяет найти оптимальное число кластеров. Построение графика суммы квадратов расстояний (СКР) внутри кластера в зависимости от числа кластеров поможет определить "локоть" — точку, где при увеличении числа кластеров СКР начинает снижаться медленнее.

На первом этапе для различных значений числа кластеров  $k$  набора механических свойств вычисляется сумма квадратов расстояний каждой точки данных до их центроида:

$$СКР = \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^n \min(\|x_i^{(j)} - c_j\|)^2, \quad (24)$$

где  $k$  - число кластеров механических свойств,  $n$  - количество точек данных в  $i$ -ом кластере,  $x_i^{(j)}$  -  $i$ -я точка данных в  $j$ -том кластере,  $c_j$  - центроид  $j$ -того кластера.

На втором этапе построение графика зависимости значения целевой функции СКР от количества кластеров.

На третьем этапе осуществляется поиск излома "локтя" на графике — точка, в которой снижение значения целевой функции начинает замедляться.

Эта точка указывает на оптимальное количество кластеров для вашей модели.  
(рис.8).

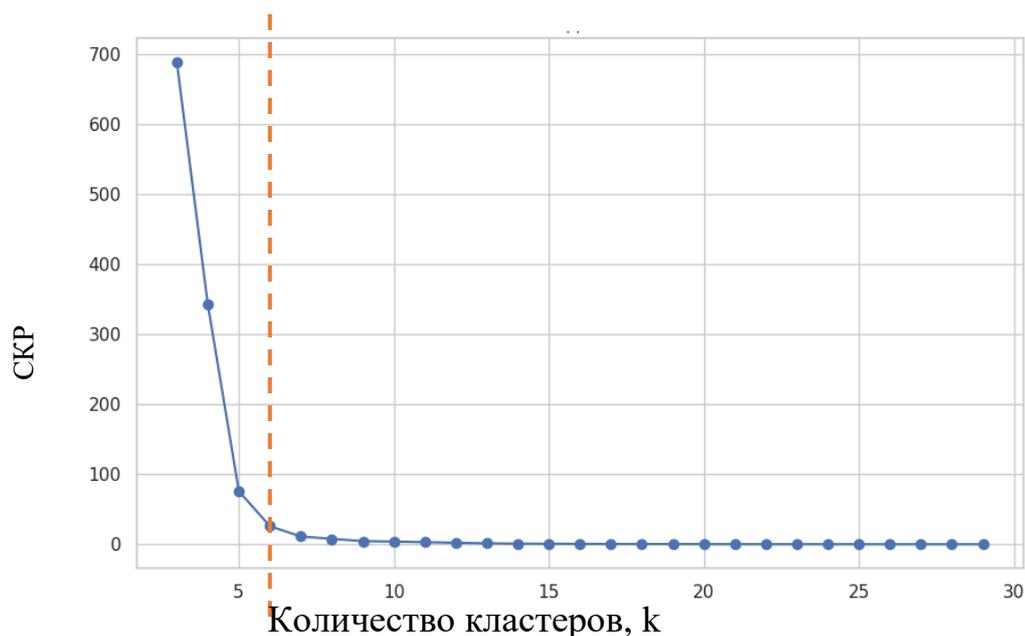


Рисунок 8– Определение «локтя» на графике зависимости значения целевой функции *WCSS* от количества кластеров

#### Метод *K*-средних

Метод *k*-средних пытается сгруппировать похожие элементы в три этапа:

- 1) Определение количества кластеров,  $k=6$ ;
- 2) Инициализация центроидов (разделительные линии);
- 3) Выбор группы и нахождение средних значений расстояния между точками.

Шаг 1. Имеется набор данных (рис. 9), выберем число кластеров методом «локтя» равным 6.

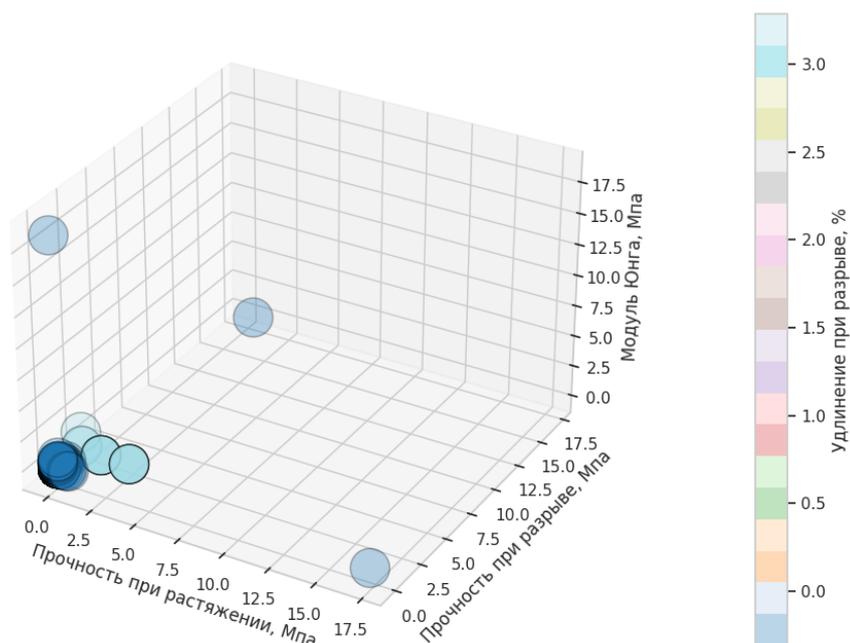


Рисунок 9– Набор данных

Шаг 2. Назначение точек данных. Каждая точка данных в наборе данных затем присваивается одному из  $k$  кластеров на основе ее близости к центрам кластеров (центроиды  $C_1, C_2, C_3, C_4, C_5$ ). Алгоритм измеряет расстояние между точкой данных и каждым центром, обычно используя евклидово расстояние или другие показатели расстояния.

$$d(x, c) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - c_i)^2}, \quad (25)$$

где:  $x, c$  - две точки в  $n$ -мерном евклидовом пространстве;

$x_i, c_i$  - векторы, координаты точек  $x$  и  $c$ ;

$n$ - количество точек данных.

Точка данных назначается кластеру с ближайшим центром(рис.10).

Шаг 3. Обновление центров кластеров. После того как все точки данных были назначены кластерам, алгоритм обновляет положение центров кластеров. Это делается путем расчета среднего значения всех точек данных в каждом кластере. Новая центральная позиция становится центроидом точек данных в этом кластере.

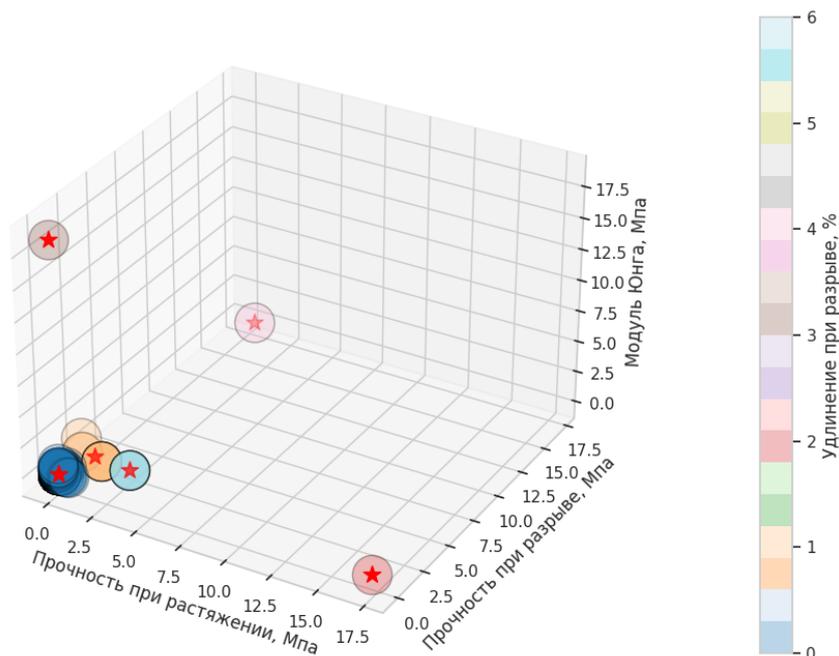


Рисунок 10 – Определение центров кластеров

Шаг 4. Повторять до сходимости. Шаги 2 и 3 повторяются итеративно, пока алгоритм не придет к устойчивому решению. Сходимость достигается, когда назначения точек данным кластерам больше не изменяются или когда изменение в центрах кластеров падает ниже заранее определенного порога. Этот итерационный процесс гарантирует, что точки данных оптимально сгруппированы вокруг центров кластеров (рис.11).

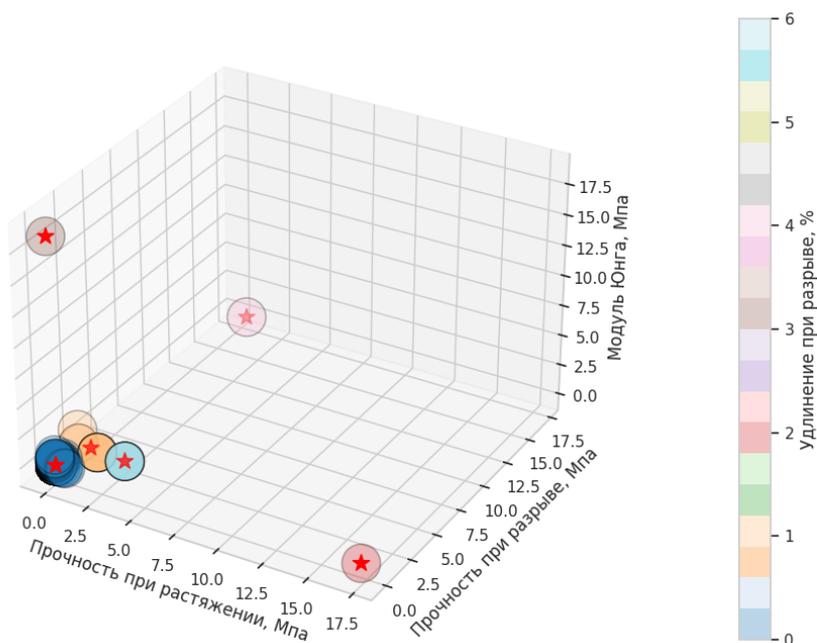


Рисунок 11 – Окончательное назначение кластеров

Шаг 5. Анализ результатов: после сходимости алгоритм предоставляет окончательные назначения кластеров для каждой точки данных. Центры кластеров представляют собой среднее значение точек данных внутри каждого кластера, что указывает на центральную тенденцию кластеров. Количество точек данных в каждом кластере также можно использовать для оценки относительного размера и важности кластеров (табл. 6).

*Таблица 6*

*Средние значения свойств для каждого кластера*

Кластер	Модуль Юнга, МПа	Показатель прочности при разрыве, МПа	Удлинение, %	Показатель прочности при растяжении, МПа
1	1283,03	300,94	453,94	79,21
2	51721,05	45469,87	1524,88	45338,93
3	566000	6,09	0,001	4,89
4	0,03	61	203333,33	51
5	24054,24	384084	1596,74	0
6	395,20	99,15	49,09	45421,6

Кластер 1 объединяет материалы с умеренной жесткостью (1283 МПа) и прочностью (300 МПа), но исключительной пластичностью (450% удлинения), что делает их идеальными для гибких конструктивных элементов.

В кластере 2 собраны сверхпрочные композиционные материалы с рекордными показателями (52 ГПа модуль упругости, 45 ГПа прочность) и аномальной деформационной способностью (1524%), представляющие особый интерес для аэрокосмической отрасли.

Керамикоподобные материалы кластера 3 демонстрируют высокую жесткость (566 ГПа) при хрупком разрушении (6 МПа прочности), тогда как кластер 4 представляет противоположный случай - сверхэластичные полимеры с ничтожной жесткостью (0.03 МПа), но способные выдерживать колоссальные деформации свыше 200000%.

Материалы кластера 5 сочетают высокую жесткость и прочность с абсолютной нерастяжимостью, характерную для специальных керамик. В свою очередь, кластер 6 включает технологичные композиционные материалы с уникальным сочетанием умеренной жесткости и исключительной прочности на растяжение, востребованные в ответственных инженерных конструкциях.

#### *Оценка качества кластеризации*

Коэффициент силуэта — это метрика, которая оценивает, насколько хорошо каждая точка данных соответствует своему кластеру по сравнению с другими кластерами.

Значение коэффициента силуэта варьируется от -1 до 1:

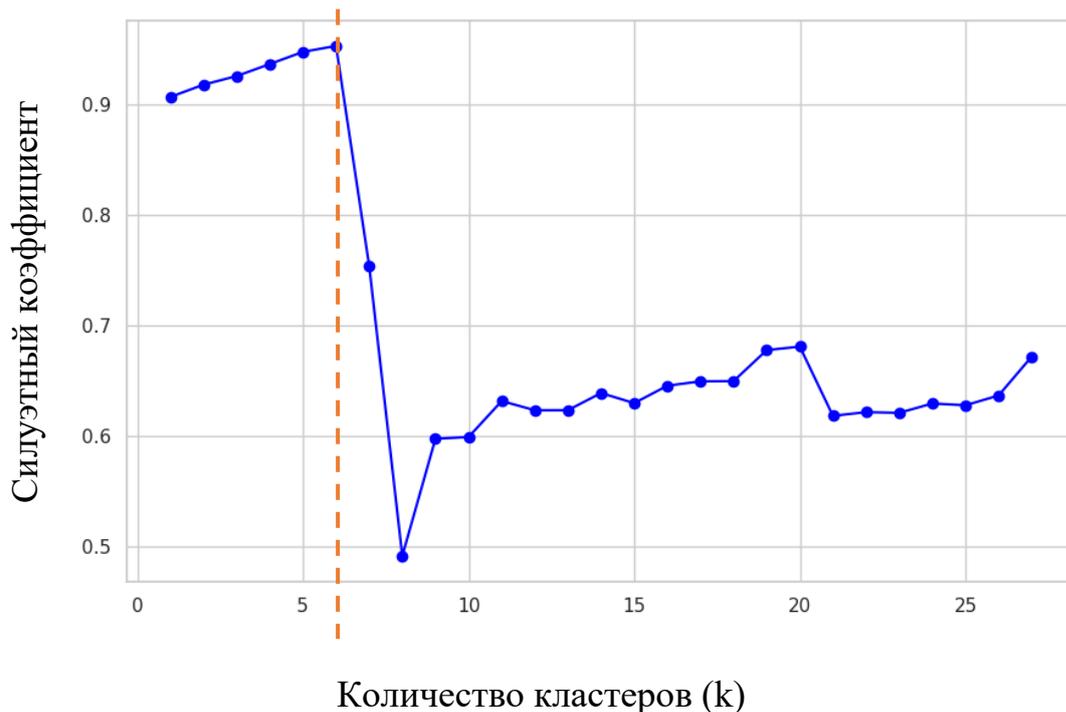
1. Значения близкие к 1 указывают на то, что объекты хорошо сгруппированы и находятся ближе к своим собственным кластерам, чем к другим.
2. Значения около 0 означают, что объекты находятся на границе между двумя кластерами.
3. Отрицательные значения указывают на то, что объекты могут быть неправильно классифицированы, так как они ближе к объектам другого кластера, чем к своему [132].

Коэффициент силуэта рассчитывается для каждого объекта и затем усредняется по всем объектам, что позволяет получить общее представление о качестве кластеризации (рис. 12) [133].

$$S_{(x_i)} = \frac{B(x_i) - A(x_i)}{\max(B(x_i), A(x_i))}, \quad (26)$$

где:  $A(x_i)$  — среднее расстояние от объекта до всех других объектов в том же кластере. Это значение показывает, насколько близки объекты внутри одного кластера.

$B(x_i)$  — минимальное среднее расстояние от объекта до объектов в ближайшем другом кластере. Это значение показывает, насколько далеко объект от ближайшего кластера.



*Рисунок 12- Визуализация силуэтного коэффициента*

Силуэтный коэффициент = 0,936

Силуэтный коэффициент равный 0,936 говорит о том, что объекты внутри одного кластера значительно ближе друг к другу, чем к объектам в других кластерах. В таком случае можно сделать вывод, что выбранный алгоритм кластеризации эффективно разделяет данные на группы.

#### *Метод иерархической кластеризации*

Метод иерархической кластеризации — это линейный метод анализа данных, который используется для группировки набора объектов в кластеры, так что объекты в одном кластере больше похожи друг на друга, чем на объекты из других кластеров. Этот метод создает иерархическую структуру кластеров и часто представляется в виде дендрограммы (рис. 13) [134].

Основные этапы метода иерархической кластеризации:

Инициализация – каждый материал считается отдельным кластером.

Расчет расстояний - вычисляется расстояние между всеми парами кластеров. Для этого могут использоваться различные метрики расстояния, такие как евклидово расстояние, манхэттенское расстояние и другие.

Слияние кластеров - на каждом итерационном шаге сливаются два ближайших кластера, и создается новый кластер. Этот процесс продолжается до тех пор, пока все объекты не будут объединены в один кластер или не будет достигнуто заданное количество кластеров.

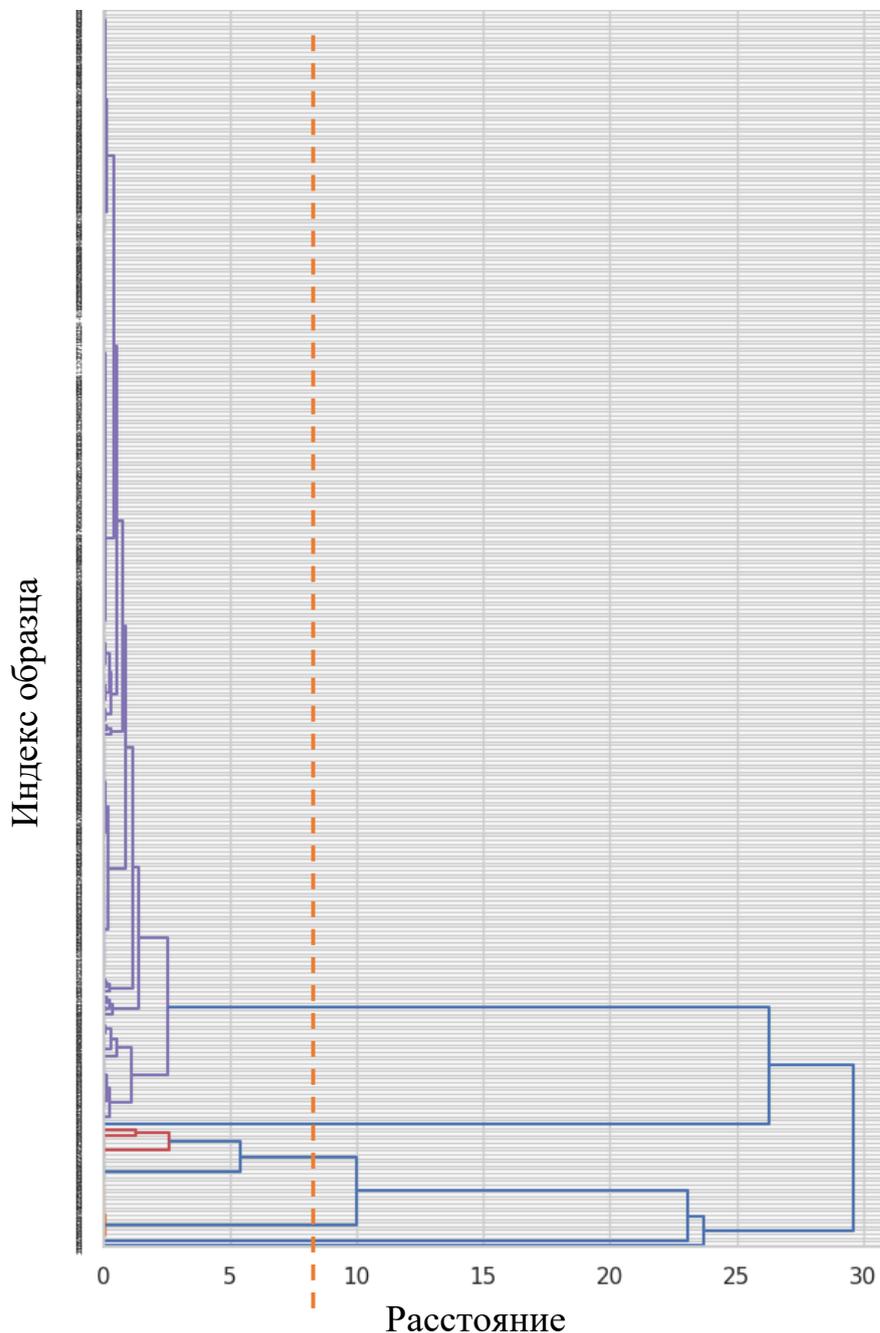


Рисунок 13 - Иерархическая структура кластеров

По рисунку 13 можно определить количество кластеров, равное 6, длина горизонтальной линии показывает расстояние между кластерами; более

длинные линии указывают на более значительное различие между сливаемыми кластерами.

## 2.3 Определение свойств полимерных композиционных материалов

### 2.3.1 Выбор метода прогнозирования

Для выбора метода прогнозирования проведем процесс прогноза уже известных значений свойств. Этот подход позволяет проверить, как предсказанные значения соотносятся с известными значениями, и помогает выбирать наиболее подходящую модель. В таблице 7 приведен пример набора данных, на основе которых будет проведено прогнозирование.

Таблица 7

Набор данных свойств полимерных композиционных материалов

№	Концентрация при порого протекания, об %	Диэлектрическая постоянная	Плотность г/см <sup>3</sup>	Прочность на разрыв, МПа	Удлинение %	Модулю упругости, МПа
1	0,2	0,0	1,01	22,0	120,0	870,0
2	0,2	0,0	0,96	35,0	<b>120,0</b>	1200,0
3	1,0	0,0	1,00	<b>15,0</b>	450,0	400,0
4	0,2	0,0	0,99	<b>25,0</b>	500,0	620,0
5	0,2	0,4	1,02	21,0	520,0	510,0
6	0,2	0,8	0,99	20,0	100,0	100,0
7	0,5	0,5	1,09	23,0	120,0	150,0
8	0,2	0,31	1,01	27,0	500,0	300,0
9	0,1	1	1,1	23,0	700,0	1200,0
10	0,3	0,4	0,96	<b>15,0</b>	450,0	1050,0
11	0,2	0,4	1	20,0	600,0	620,0
12	0,5	0,0	1,05	21,0	500,0	700,0
13	1,0	0,5	0,98	22,0	650,0	650,0
14	0,2	0,81	1,01	<b>16,0</b>	455,0	510,0
15	0,5	0,3	1	23,0	120,0	400,0

Для прогнозирования использовались следующие методы: линейная регрессия, случайный лес, метод "ближайших соседей", градиентный бустинг, метод опорных векторов, дерево принятия решений. В таблице 8 представлены результаты прогноза и их оценка.

Таблица 8  
Результаты прогнозирования и их оценка

Прогноз	Метод прогноза							
	Линейная регрессия		Случайный лес		Градиентный бустинг		Метод опорных векторов	
	Реальное значение	Прогноз	Реальное значение	Прогноз	Реальное значение	Прогноз	Реальное значение	Прогноз
Удлинение, %	120	110.3	120	91	120	105	120	51
Прочность на разрыв, Мпа	15	16.099	15	23.7	15	25	15	23.4
Диэлектрическая постоянная	0.31	0.3	0.31	0.24	0.31	0.12	0.31	0.29
Модуль упругости, МПа	1200	1150	1200	1117.3	1200	1030	1200	1000
Удлинение, %	700	703	700	711	700	690	700	735
Прочность на разрыв, Мпа	25	25.7	25	19.58	25	20.06	25	21
Диэлектрическая постоянная	0.4	0.387	0.4	0.8	0.4	0.32	0.4	0.26
Модуль упругости, МПа	870	873	870	890	870	836	870	877
Удлинение, %	450	455	450	432	450	430	450	440
Прочность на разрыв, Мпа	22	22.2	22	20	22	20.3	22	22.4
Диэлектрическая постоянная	0.8	0.9	0.8	0.75	0.8	0.9	0.8	0.751
Модуль упругости, МПа	620	610	620	587	620	515	620	400
Прочность на разрыв, Мпа	16	15.3	16	16.9	16	15.4	16	17.1
Диэлектрическая постоянная	0.81	0.8	0.81	0.65	0.81	0.8	0.81	0.65
Модуль упругости, МПа	510	500	510	545	510	648.3333	510	598.3333
<b>MAE</b>	6.42		16.24		28.58		42.7	
<b>MSE</b>	210.7		748.02		3225.66		7278.6	
<b>RMSE</b>	14.51550895		27.3499543		56.79489414		85.31471151	
<b>R<sup>2</sup></b>	0.998		0.995		0.9793		0.9534	
<b>MAPE</b>	3.9%		20.6%		18.9%		18.9%	

Средняя квадратичная ошибка (MSE)

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = 210,7$$

где: n — количество наблюдений (в этом случае 15),

$y_i$  — реальное значение,

$\hat{y}_i$  — прогнозируемое значение

Корень из средней квадратичной ошибки (RMSE)

$$RMSE = \sqrt{MSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} = \sqrt{210,7} \approx 14,51$$

Коэффициент детерминации ( $R^2$ )

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2} \approx 0,998$$

где:  $\bar{y}_i$  — среднее значение реальных значений.

Средняя абсолютная процентная ошибка (MAPE)

$$MAPE = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right| \approx 3,9\%$$

Линейная регрессия показывает наименьшую MAE = 6,42, что говорит о ее высокой точности по сравнению с другими методами. Случайный лес и метод "ближайших соседей" имеют значительно большие значения ошибки, указывая на худшую точность предсказаний.

Линейная регрессия также имеет наименьшее значение MSE = 210,7. Высокие значения MSE у моделей, таких как метод опорных векторов и градиентный бустинг, указывают на их меньшую эффективность в предсказаниях и на наличие значительных ошибок.

RMSE = 14,51 подтверждает предыдущие результаты — линейная регрессия демонстрирует лучшие показатели, в то время как модели случайного леса и "ближайших соседей" имеют значительно более высокие значения ошибки.

Высокие значения  $R^2=0,998$  у линейной регрессии указывают на то, что эти модель хорошо объясняют вариации в данных.

Модель линейной регрессии имеет наименьший показатель  $MARE = 3,9\%$ , показывая, что она наиболее точна в прогнозах по сравнению с остальными методами.  $MARE$  всех остальных моделей значительно выше, особенно у дерева принятия решений  $= 26,6\%$ , что свидетельствует о большей неопределенности в прогнозах.

Доверительный интервал для линейной регрессии равен:

$$\bar{x} \pm z_{\alpha/2} \cdot \frac{CKO}{\sqrt{n-1}}, \quad (27)$$

где:  $\bar{x}$  - среднее значение ошибки,

$z_{\alpha/2}$  - значение для выбранного уровня значимости 99%.

Подставим в формулу 26 значения для линейной регрессии, для 99% доверительного интервала и  $n-1=14$ , значение  $z_{\alpha/2}$  равно 2,97 [135].

$$4,48 \pm 2,97 \cdot \frac{13,46}{\sqrt{14}} = 4,48 \pm 10,68$$

Доверительный интервал  $[-6,22; 15,19]$  истинная ошибка (разница между реальными значениями и прогнозами) может варьироваться от -6,22 до 15,19.

Выбор оптимального метода прогнозирования осуществляется индивидуально для каждого конкретного случая, учитывая особенности прогнозируемых свойств и характеристики исследуемого материала. Такой адаптивный подход обусловлен необходимостью достижения максимальной точности прогноза при работе с разнородными полимерными композиционными материалами, обладающими сложными и нелинейными зависимостями свойств от состава и структуры.

### *2.3.2 Методы прогнозирования свойств полимерных композиционных материалов*

Перед тем как приступить к прогнозированию свойств полимеров, необходимо провести обработку и очистку данных в базе полимерных

композиционных материалов. Было проведено удаление дубликатов - повторяющихся записей для обеспечения уникальности данных, а также выявлены неправильные или аномальные значения (например, физически невозможные свойства) и их корректировка.

### *Линейная регрессия*

Линейная регрессия — это один из наиболее распространенных методов статистической обработки данных и машинного обучения, который используется для изучения взаимосвязей между переменными. Метод линейной регрессии может быть эффективно применен для прогнозирования различных физико-химических свойств, таких как прочность, жесткость, термостойкость, и других характеристик, влияющих на применение материалов в практике,

В общем виде формула линейной регрессии [136] выглядит так:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_n x_n + \varepsilon, \quad (28)$$

где:  $y$ -зависимая переменная (искомое значение);

$x_1, x_2, \dots, x_n$ - независимые переменные;

$\beta_0$  - свободный член (константа);

$\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n$ - коэффициенты, представляющие влияние каждой из независимых переменных на зависимую переменную;

$\varepsilon$  - ошибка (случайная ошибка)

Независимые переменные, также называемые предикторами, факторами или объясняющими переменными, — это переменные, которые мы контролируем или манипулируем в исследовании. Они используются, чтобы предсказать или объяснить изменения в зависимой переменной.

Зависимые переменные — это переменные, которые мы пытаемся предсказать или объяснить. Значение зависимой переменной зависит от значений независимых переменных.

Предположим, что мы хотим спрогнозировать некоторый интересующий нас параметр полимерного композиционного материала,

обозначаемый как  $y$  (например, электропроводность) на основе нескольких независимых переменных  $X_1, X_2 \dots X_n$ , которые представляют другие характеристики композиционного материала, например Прочность на разрыв  $R_m$ , МПа, Удлинение при растяжении  $d, \%$  и Модуль Юнга  $E$ , МПа .  
 Представим набор данных в виде вектора (рис. 14)

$$\left[ - \quad R_m \quad d \quad E \right]$$

*Рисунок 14- Пример вектора с пропущенным значением*

С применением методов кластеризации выявляем пять схожих векторов в наборе данных и представим их в виде матрицы (рис.15).

$$\begin{bmatrix} G_1 & \sigma_{pp1} & \varepsilon_{pm1} & E_1 \\ G_2 & \sigma_{pp2} & \varepsilon_{pm2} & E_2 \\ G_3 & \sigma_{pp3} & \varepsilon_{pm3} & E_3 \\ - & \sigma_{pp4} & \varepsilon_{pm4} & E_4 \\ G_5 & \sigma_{pp5} & \varepsilon_{pm5} & E_5 \end{bmatrix}$$

*Рисунок 15– Матрица с пятью похожими векторами.*

Воспользуемся методом линейной регрессии для нахождения зависимостей между электропроводностью и другими характеристиками полимеров.

Определим параметр  $y$ , значения которого необходимо спрогнозировать, в нашем случае это  $G$  – электропроводность, воспользуемся методом линейной регрессии и определим независимые переменные:

$x_1$  - прочность на разрыв  $\sigma_{pp}$ , МПа;

$x_2$  - относительное удлинение при максимальной нагрузке  $\varepsilon_{pm}, \%$ ;

$x_3$  - модуль Юнга  $E$ , МПа.

Запишем уравнение линейной регрессии, подставляя в формулу линейной регрессии (27), данные из формул (5), (8), (10):

$$G_4 = \beta_0 + \beta_1 \frac{F_{pp4}}{A_{pp4}} + \beta_2 \left( \frac{\Delta l_{om4}}{l_4} \times 100\% \right) + \beta_3 \frac{\sigma_{pm4}}{\varepsilon_{pm4}}, \quad (29)$$

В зависимости от выбранной переменной  $y$  формула линейной регрессии будет менять свой вид:

Если  $y = \sigma_{pp}$

$$\sigma_{pp} = \beta_0 + \beta_1 G + \beta_2 \varepsilon_{pm} + \beta_3 E, \quad (30)$$

Если  $y = \varepsilon_{pm}$

$$\varepsilon_{pm} = \beta_0 + \beta_1 G + \beta_2 \sigma_{pp} + \beta_3 E, \quad (31)$$

Если  $y = E$

$$E = \beta_0 + \beta_1 G + \beta_2 \sigma_{pp} + \beta_3 \varepsilon_{pm}, \quad (32)$$

Далее необходимо провести расчеты для определения коэффициентов регрессии на основе тех векторов, где значения заполнены (вектора 1, 2, 3 и 5), затем используются эти коэффициенты для прогноза  $G_4$ ,

Используем только строки с заполненными значениями  $G$ , создаем матрицу для независимых переменных  $x$ , добавляя еще один столбец единиц для учета свободного члена и вектора для зависимой переменной  $y$

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & \sigma_{pp1} & \varepsilon_{pm1} & E_1 \\ 1 & \sigma_{pp2} & \varepsilon_{pm2} & E_2 \\ 1 & \sigma_{pp3} & \varepsilon_{pm3} & E_3 \\ 1 & \sigma_{pp5} & \varepsilon_{pm5} & E_5 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} G_1 \\ G_2 \\ G_3 \\ G_5 \end{bmatrix}$$

Коэффициенты регрессии  $\beta$  можно найти с помощью формулы:

$$\beta = (X^T X)^{-1} X^T y \quad (33)$$

Для этого необходимо сначала рассчитать  $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})$ :

$$\mathbf{X}^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ \sigma_{pp1} & \sigma_{pp2} & \sigma_{pp3} & \sigma_{pp5} \\ \varepsilon_{pm1} & \varepsilon_{pm2} & \varepsilon_{pm3} & \varepsilon_{pm5} \\ E_1 & E_2 & E_3 & E_5 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 4 & \sigma_{pp1} + \sigma_{pp2} + \sigma_{pp3} + \sigma_{pp5} & \varepsilon_{pm1} + \varepsilon_{pm2} + \varepsilon_{pm3} + \varepsilon_{pm5} & E_1 + E_2 + E_3 + E_5 \\ \sigma_{pp1} + \sigma_{pp2} + \sigma_{pp3} + \sigma_{pp5} & \sum_{i=1}^4 \sigma_{pp_i}^2 & \sum_{i=1}^4 \sigma_{pp_i} d_i & \sum_{i=1}^4 \sigma_{pp_i} E_i \\ \varepsilon_{pm1} + \varepsilon_{pm2} + \varepsilon_{pm3} + \varepsilon_{pm5} & \sum_{i=1}^4 \sigma_{pp_i} \varepsilon_{pm_i} & \sum_{i=1}^4 \varepsilon_{pm_i}^2 & \sum_{i=1}^4 \varepsilon_{pm_i} E_i \\ E_1 + E_2 + E_3 + E_5 & \sum_{i=1}^4 \sigma_{pp_i} E_i & \sum_{i=1}^4 \varepsilon_{pm_i} E_i & \sum_{i=1}^4 E_i^2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X}^T \mathbf{y} = \begin{bmatrix} G_1 + G_2 + G_3 + G_5 \\ \sum_{i=1}^5 \sigma_{pp_i} G_i \\ \sum_{i=1}^5 \varepsilon_{pm_i} G_i \\ \sum_{i=1}^5 E_i G_i \end{bmatrix}$$

После вычисления получается вектор, который будет содержать значения для каждого из коэффициентов линейной регрессии. Полученные коэффициенты подставляем в формулу линейной регрессии и вычисляем прогнозируемое значение.

### Случайный лес

Случайный лес представляет собой ансамблевый метод, основанный на построении множества решающих деревьев. Каждое дерево обучается на случайной подвыборке данных с использованием случайного набора признаков. Итоговый прогноз формируется путем усреднения предсказаний всех деревьев (для регрессии) или голосования (для классификации).

Для регрессионной задачи предсказание случайного леса с  $T$  деревьями вычисляется как:

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T f_t(\mathbf{x}) \quad (34)$$

где:  $\mathbf{x}=(x_1, x_2, \dots, x_n)$ — вектор входных признаков (например, концентрация наполнителя, тип полимера);

$f_t$  —  $t$ -ое дерево в ансамбле;

$\hat{y}$  — предсказанное значение целевой переменной (например, прочность при растяжении).

### Градиентный бустинг

Градиентный бустинг — это ансамблевый метод, последовательно комбинирующий множество слабых моделей (обычно неглубоких деревьев), где каждая следующая корректирует ошибки предыдущих. Алгоритм начинается с базового предсказания, затем итеративно добавляет деревья, фокусирующиеся на остаточных ошибках, вычисляя градиент функции потерь для определения направления коррекции. Ключевые параметры: скорость обучения, глубина деревьев и количество итераций. Метод обеспечивает высокую точность прогнозирования и устойчивость к переобучению за счет адаптивной минимизации ошибки, что особенно эффективно для моделирования сложных нелинейных зависимостей между составом и свойствами полимерных композиционных материалов.

Алгоритм работы:

1. Инициализация:  $\hat{y}_0(\mathbf{x}) = \bar{y}$ .

2. Для  $t=1$  до  $T$ :

Вычисление остатков:  $r_t = y_i - \hat{y}_{t-1}(\mathbf{x}_i)$ .

Обучение дерева  $f_t$  на  $\mathbf{x}_i, r_i$ .

Обновление:

$\hat{y}_t(\mathbf{x}) = \hat{y}_{t-1}(\mathbf{x}) + \eta f_t(\mathbf{x})$ , где  $\eta$  — темп обучения.

Прогноз:

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \sum_{t=1}^T \eta f_t(\mathbf{x}) \quad (35)$$

### *Метод опорных векторов*

Метод опорных векторов - это алгоритм машинного обучения, который находит гиперплоскость, минимизирующую ошибку предсказания, при этом допуская отклонения не более чем на заданную величину  $\epsilon$ .

Для полимерных композиционных материалов метод опорных векторов особенно полезен:

- При моделировании сложных нелинейных зависимостей "состав-свойство";

- Для работы с шумными экспериментальными данными;
- Когда требуется точный прогноз ключевых характеристик (прочность, электропроводность) на основе ограниченного набора образцов;

#### *Дерево принятия решений*

Дерево решений — это алгоритм машинного обучения, который строит иерархию правил для классификации или регрессии, последовательно разделяя данные на подгруппы по наиболее информативным признакам. Это позволяет наглядно интерпретировать логику прогноза.

В анализе полимерных композиций метод эффективно выявляет ключевые зависимости между составом материала (например, концентрацией наполнителя или условиями обработки) и его свойствами. Он особенно полезен для определения пороговых эффектов, таких как критическая концентрация наполнителя, при которой резко меняется электропроводность или прочность. Однако дерево чувствительно к шуму в данных, поэтому на практике часто применяют более устойчивые ансамблевые методы, такие как случайный лес или градиентный бустинг.

### **2.4 Результаты применения модели определения свойств полимерных композиционных материалов**

Результаты практического применения разработанной математической модели для определения свойств полимерных композиционных материалов демонстрируют ее высокую эффективность в обработке экспериментальных данных. На рисунке 16 представлен фрагмент исходного набора данных, где красным цветом выделены незаполненные значения свойств полимерных композиционных материалов. Анализ исходного массива данных выявил значительное количество пропущенных данных, что существенно ограничивало возможности их статистической обработки и дальнейшего анализа.

Материал, №	Электропроводность, См/м	Электрическое сопротивление, Ом	Концентрация на пороге	Концентрация на пороге	Плотность, гр/м <sup>3</sup>	Предел прочности при растяжении,	Предел прочности при разрыве, Мпа	Удлинение при разрыве, %	Модуль Юнга, Мпа
1			0.00	0.01	0.31	68.00	81.00	6 230.77	1.30
2	0.00000500	200 000.00	0.00	0.20	0.31	71.74			3.70
3	0.000080000	12 500.00	0.00	0.20	0.31	73.94	100.74	2.87	3 510.00
4	0.00004000	25 000.00	0.00	0.20	0.31			2.79	
5	0.00001000	100 000.00	0.00	0.20	0.32	72.46	99.63	2.70	3 690.00
6	0.00001000	100 000.00	0.00		0.32	52.25		412.74	
7	0.00000500	200 000.00	0.00		0.34			533.33	
8	0.01	200.00	0.00	0.50	0.34	4.00	40.12	17.00	236.00
9	0.40	2.50	0.00	0.50	0.34	45 331.00	46.50	10.00	465.00
10			0.00	0.50	0.34	45 417.00	8.69	11.00	79.00
11	0.00000030000	3 333 333.33	0.00	0.10	0.35	45 478.00	22.88	26.00	88.00
12	0.00005000	20 000.00	0.00	0.10	0.35	45 297.00	36.26	37.00	98.00
13	0.000100000	10 000.00	0.00	0.10	0.35	45 418.00	52.90	46.00	115.00
14	0.01	111.11	0.00	0.10	0.35	45 479.00	52.46	43.00	122.00
15			0.00	3.00	0.31	41.00	0.82	2.00	41.00
16			0.00	3.00	0.32	33.00	0.33	1.00	33.00
17	0.00000001000	100 000 000.00	0.00	3.00	0.34				
18	0.00001000	100 000.00	0.00	3.00	0.35	36.78		148.19	
19	0.000100000	10 000.00	0.00	3.00	0.36	33.00	0.33	1.00	33.00
20	0.00001000	100 000.00	0.00	0.50	0.30	32.00		96.19	32.00
21	0.000900001	1 111.11	0.00	0.50	0.30	24.00	0.24	1.00	24.00
22	0.01	100.00	0.00	0.50	0.30		85.09	3 748.46	
23	0.10	10.00	0.00	0.50	0.30	33.00	0.33	1.00	33.00
24			0.00	4.00	0.30	37.00	0.74	2.00	37.00
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
499			0.00	4.00	0.30	33.00	0.66	2.00	33.00
500			0.00	4.00	0.31		33.03	88.67	
501	0.000000000000100000	1 000 000 000 000.00	0.00	4.00	0.31		47.66	80.82	
502			0.00	4.00	0.31	32.00	0.32	1.00	32.00
503	0.00000050	2 000 000.00	0.00	0.05	0.30	91.00	260.40	9.30	2 800.00
504	0.00006000	16 666.67	0.00	0.05	0.30	94.50	202.35	7.10	2 850.00
505	0.000400000	2 500.00	0.00	0.05	0.30	97.00	234.11	8.20	2 855.00
506	0.000300000	3 333.33	0.00	0.05	0.30	98.00	232.80	8.00	2 910.00
507	0.000000000010	10 000 000 000.00	0.00	0.50	0.30	43.00	2.30		
508	0.00000010000	10 000 000.00	0.00	0.50	0.31	51.00	61.00	203 333.33	
509	0.00001000	100 000.00	0.00	0.50	0.31	53.00	107.36		690.00
510	0.000100000	10 000.00	0.00	0.50	0.31	55.00	112.91		700.00

Рисунок 16-Набор данных до применения математической модели

Разработанная математическая модель, основанная на комбинации методов машинного обучения и статистического анализа, позволила существенно улучшить полноту набора данных. В результате применения алгоритмов восстановления пропущенных значений было достигнуто сокращение количества незаполненных ячеек на 76% - с исходных 1496 до 351 (рис. 17). Такой значительный прогресс в заполнении пробелов в данных объясняется использованием комплексного подхода, сочетающего методы регрессионного анализа и кластеризации.

Материал, №	Электропроводность, См/м	Электрическое сопротивление, Ом м	Концентрация на пороге протекания, об	Концентрация на пороге протекания, масс	Плотность, гр/м <sup>3</sup>	Предел прочности при растяжении, Мпа	Предел прочности при разрыве, Мпа	Удлинение при разрыве, %	Модуль Юнга, Мпа
1	0.0000000000100000	1 000 000 000 000.00	0.00	0.01	0.31	68.00	81.00	6 230.77	1.30
2	0.00000500	200 000.00	0.00	0.20	0.31	71.74	63.65	2.98	3.70
3	0.000080000	12 500.00	0.00	0.20	0.31	73.94	100.74	2.87	3 510.00
4	0.00004000	25 000.00	0.00	0.20	0.31	73.10	100.10	2.79	3 416.00
5	0.00001000	100 000.00	0.00	0.20	0.32	72.46	99.63	2.70	3 690.00
6	0.00001000	100 000.00	0.00	1.23	0.32	52.25	53.45	412.74	12.95
7	0.00000500	200 000.00	0.00	2.00	0.34	39.90	55.36	533.33	10.38
8	0.01	200.00	0.00	0.50	0.34	4.00	40.12	17.00	236.00
9	0.40	2.50	0.00	2.50	0.34	45 331.00	46.50	10.00	465.00
10	0.0000000009000000	11 111 111 111.11	0.00	0.50	0.34	45 417.00	8.69	11.00	79.00
11	0.0000030000	3 333 333.33	0.00	0.10	0.35	45 478.00	22.88	26.00	88.00
12	0.00005000	20 000.00	0.00	0.10	0.35	45 297.00	36.26	37.00	98.00
13	0.00010000	10 000.00	0.00	0.10	0.35	45 418.00	52.90	46.00	115.00
14	0.01	111.11	0.00	0.10	0.35	45 479.00	52.46	43.00	122.00
15	0.0000000000100000	1 000 000 000 000.00	0.00	3.00	0.31	41.00	0.82	2.00	41.00
16	0.0000000001000000	100 000 000 000.00	0.00	3.00	0.32	33.00	0.33	1.00	33.00
17	0.0000001000	100 000 000.00	0.00	3.00	0.34	27.66	48.30	107.60	68.41
18	0.00001000	100 000.00	0.00	3.00	0.35	36.78	37.98	148.19	25.63
19	0.00010000	10 000.00	0.00	3.00	0.36	33.00	0.33	1.00	33.00
20	0.00001000	100 000.00	0.00	0.50	0.30	32.00	30.78	96.19	32.00
21	0.000900001	1 111.11	0.00	0.50	0.30	24.00	0.24	1.00	24.00
22	0.01	100.00	0.00	0.50	0.30	72.09	85.09	3 748.46	2.27
23	0.10	10.00	0.00	0.50	0.30	33.00	0.33	1.00	33.00
24	0.0000000000040000	2 500 000 000 000.00	0.00	4.00	0.30	37.00	0.74	2.00	37.00
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
499	0.0000000000010000	10 000 000 000 000.00	0.00	4.00	0.30	33.00	0.66	2.00	33.00
500	0.00000000000500000	200 000 000 000.00	0.00	4.00	0.31	30.33	33.03	88.67	37.25
501	0.0000000000100000	1 000 000 000 000.00	0.00	4.00	0.31	37.66	47.66	80.82	58.97
502	0.00000000008000000	12 500 000 000.00	0.00	4.00	0.31	32.00	0.32	1.00	32.00
503	0.00000050	2 000 000.00	0.00	0.05	0.30	91.00	260.40	9.30	2 800.00
504	0.00006000	16 666.67	0.00	0.05	0.30	94.50	202.35	7.10	2 850.00
505	0.000400000	2 500.00	0.00	0.05	0.30	97.00	234.11	8.20	2 855.00
506	0.000300000	3 333.33	0.00	0.05	0.30	98.00	232.80	8.00	2 910.00
507	0.00000000010	10 000 000 000.00	0.00	0.50	0.30	43.00	2.30	161.68	1.42
508	0.0000010000	10 000 000.00	0.00	0.50	0.31	51.00	61.00	203 333.33	0.03
509	0.00001000	100 000.00	0.00	0.50	0.31	53.00	107.36	15.56	690.00
510	0.00010000	10 000.00	0.00	0.50	0.31	55.00	112.91	16.13	700.00

*Рисунок 17-Результаты применения математической модели определения свойств полимерных композиционных материалов*

Верификация модели подтвердила высокую точность прогнозирования значения коэффициента детерминации ( $R^2 > 0,95$ ) и корреляции ( $r > 0,97$ ) свидетельствуют о сильной линейной зависимости между прогнозируемыми и реальными данными.

При применении математической модели определения свойств полимерных композиционных материалов наблюдается сокращение число экспериментов на 35%, а так же временных затрат на 80%.

### **Выводы по 2 разделу**

Второй раздел посвящен разработке математической модели для определения характеристик полимерных композиционных материалов.

1. Проведенное исследование математических методов определения характеристик полимерных композиционных материалов позволило разработать комплексную модель прогнозирования их свойств. Анализ существующих баз данных выявил их ограничения, связанные с неполнотой данных и отсутствием экспериментального подтверждения для многих виртуальных материалов. Это обусловило необходимость создания собственного расширенного набора данных, включающего более 500 различных полимерных композиционных материалов с их механическими и электрическими характеристиками.

2. Применение методов кластерного анализа (к-средних и иерархической кластеризации) с высоким значением силуэтного коэффициента (0,936) позволило выявить шесть четко дифференцированных групп материалов со схожими свойствами. Это разделение подтвердило существование устойчивых закономерностей между составом полимерных композиционных материалов и их эксплуатационными характеристиками. Сравнительный анализ различных методов прогнозирования (линейная регрессия, случайный лес, метод ближайших соседей и др.) продемонстрировал преимущества линейной регрессии, показавшей наилучшие результаты по всем ключевым метрикам ( $MAE=6.42$ ,  $MSE=210.7$ ,  $R^2=0.998$ ).

3. Разработанная математическая модель определения механических и электрических свойств полимерных композиционных материалов продемонстрировала высокую эффективность при работе с данными материалов, позволила определять значения свойств полимерных композиционных материалов и сократить число экспериментов на 35%, обеспечивая экономию 80% времени.

## Раздел 3. Разработка модели автоматизации определения состава полимерных композиционных материалов

### 3.1 Исследование моделей и методов определения состава полимеров

Определение состава полимеров и полимерных композиционных материалов является важной задачей в области материаловедения и химической инженерии. Состав полимеров влияет на их физико-химические свойства, такие как прочность, гибкость, термостойкость и другие характеристики, что, в свою очередь, определяет их применение в различных отраслях [137]. В последние годы разработка моделей и методов для определения состава полимеров стала предметом активных исследований, что связано с необходимостью создания более эффективных и устойчивых материалов.

#### 3.1.1 Традиционные методы определения состава полимеров

Наиболее важной частью анализа состава полимерных композиционных материалов являются экспериментальные методы, они позволяют получить точные данные о составе, структуре и свойствах полимеров (рис. 18).

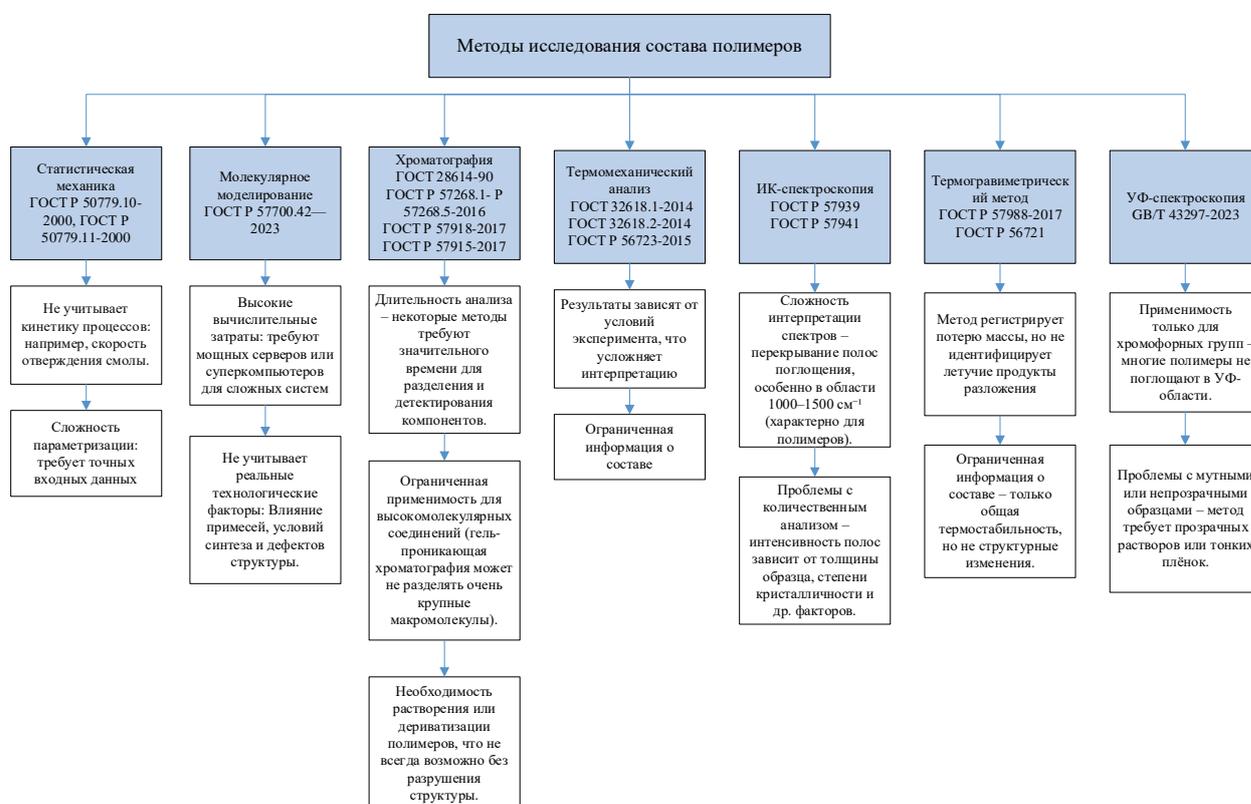


Рисунок 18 – Методы определения состава полимеров

Теоретические методы исследования полимерных материалов включают молекулярное моделирование и компьютерные симуляции, позволяющие предсказать структурные и термодинамические свойства путем анализа движения атомов и молекул. Квантово-химические расчеты применяются для изучения электронных свойств на атомном уровне, что важно для понимания химических связей и реакционной способности. Методы молекулярного моделирования, такие как Monte Carlo и конформационный анализ, помогают прогнозировать структуру и свойства полимерных систем.

Термодинамические расчеты включают построение фазовых диаграмм для анализа стабильности и фазового поведения, а также расчет ключевых параметров (энтальпия, энтропия, свободная энергия). Статистико-механические подходы, включая теорию флуктуаций и модели полимерных цепей (свободно-сочлененная цепь, модель Зиммермана-Сокола), связывают микроскопические параметры с макроскопическими свойствами.

Экспериментальные методы характеризуются разнообразием аналитических подходов. Химические анализы представлены хроматографическими методами разделения компонентов [138] и спектроскопическими исследованиями (ИК, ЯМР, УФ), позволяющими определять состав и структуру полимеров [139]. Физические методы включают термический анализ (ДСК, ТГА) для изучения термических свойств [140], механические испытания для оценки прочностных характеристик, а также современные микроскопические техники (электронная, атомно-силовая микроскопия) [141], обеспечивающие наноразмерное исследование морфологии.

Многие из этих методов требуют значительных затрат времени и ресурсов, а также могут быть сложными в реализации. Кроме того, традиционные методы могут не всегда обеспечивать полное представление о сложных полимерных системах. Подготовка образцов может быть трудоемкой и требовать специального оборудования, что увеличивает время и затраты на проведение тестов. В связи с этим возрастает необходимость создания модели

автоматизации определения состава полимерного композиционного материала, которая позволит существенно оптимизировать процесс разработки новых полимерных композиционных материалов (рис. 19).

Работа модели автоматизации определения состава полимерных композиционных материалов основана на поиске схожести между заданными пользователем параметрами и данными из кластеризованного набора данных. Для этого используются три метрики расстояния: евклидово, манхэттенское и косинусное.

Модель объединяет кластеризацию данных, поиск схожих материалов в кластере с помощью метрик расстояния, для выявления наилучшей метрики расстояния рассчитывается коэффициент Пирсона, а также сортировку найденных расстояний.

$$\mathbf{A}(\mathbf{a}) = \left\{ \begin{array}{l} C(\mathbf{a}) = \arg \min_s \sum_{i=1}^k \sum_{a \in S_i} \|\mathbf{a}_i - \mu_i\|^2 \rightarrow \{S_1, S_2, \dots, S_k\}, \\ f_i(\mathbf{B}) = \arg \min_{d \in d_E, d_M, d_C} [1 - \rho(\mathbf{a}, \mathbf{b}_d^*)], \\ \mathbf{B}(\mathbf{a}) = \arg \text{sort}_{b \in S_{C(a)}} d^*(\mathbf{a}, \mathbf{b}) \end{array} \right. \quad (36)$$

где:

**a** - целевой вектор для которого рассчитываются наиболее близкие вектора,

**b** - вектор, до которого определяется расстояние

$d_E, d_M, d_C$  - метрики расстояния.

На вход модели подаются: необходимые свойства для итогового материала или известные свойства связующего и наполнителя.

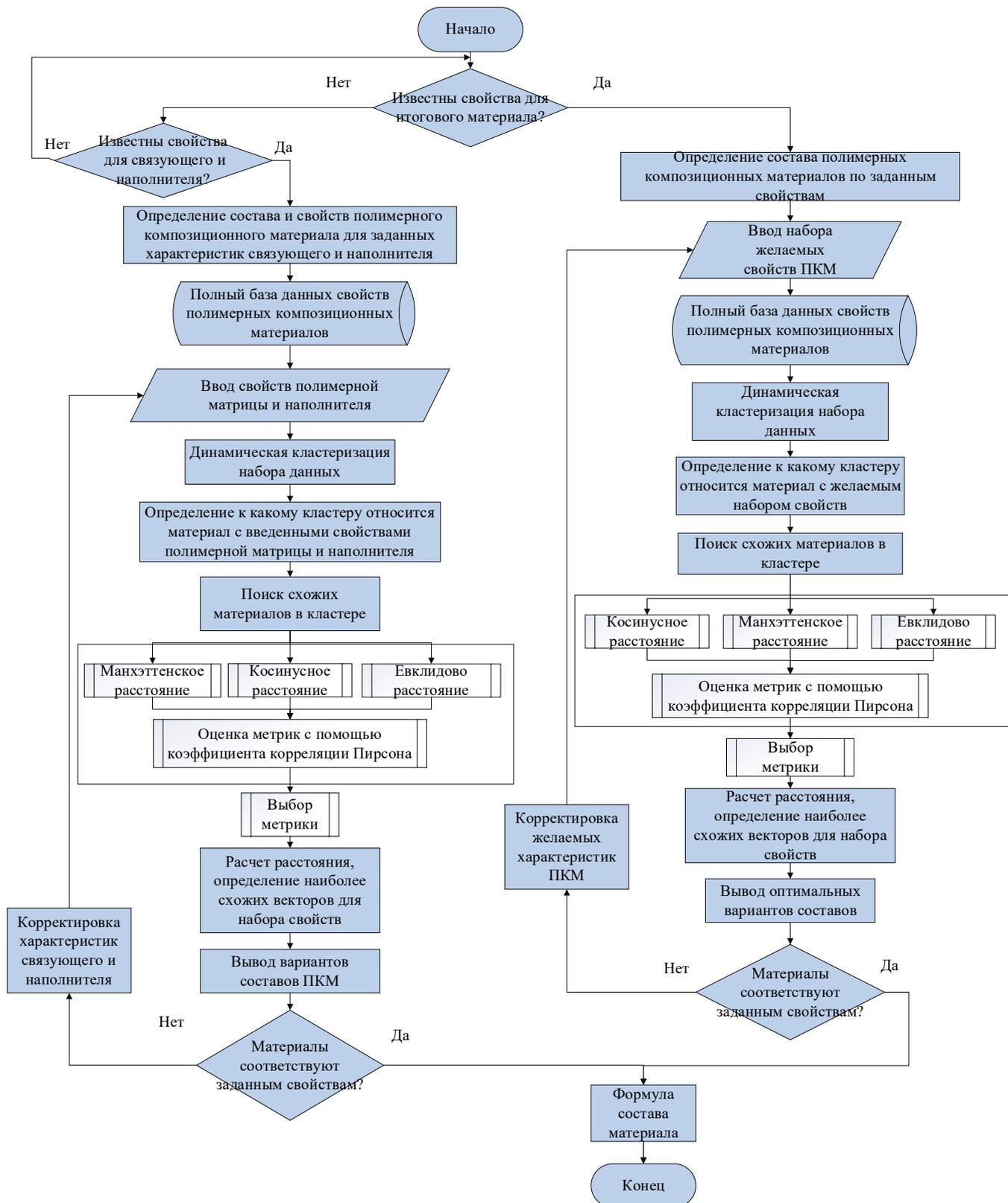


Рисунок 19 – Модель автоматизации определения состава полимерного композиционного материала

### 3.2 Разработка математического обеспечения информационной модели

Ключевым этапом в разработке математической информационной модели для определения состава полимерных композиционных материалов является формирование набора данных, который включает необходимые характеристики этих материалов. Сбор и структурирование данных о свойствах полимерных композиционных материалах подробно описано в разделе 2.

Важно отметить, что проведение механических испытаний требует значительных трудозатрат из-за большого количества образцов, а также вызывает экологические проблемы, связанные с их утилизацией. Разработка математической модели для определения состава полимеров может значительно упростить процесс проектирования, позволяя пользователям вводить значения свойств и получать список полимеров, наиболее соответствующих заданным параметрам. Кроме того, использование математической модели для определения состава полимерных композиционных материалов позволяет значительно сократить время и ресурсы, затрачиваемые на экспериментальные исследования. Это особенно актуально в условиях ограниченных бюджетов и необходимости быстрого реагирования на изменения в требованиях рынка.

#### 3.2.1 Кластеризация набора данных

Для разработки математической модели необходимо провести кластеризацию всего набора данных. Кластеризация позволяет группировать полимеры с похожими свойствами, что упрощает поиск и выбор наиболее подходящих материалов, подробное описание процесса кластеризации описано в разделе 2.

По формуле 22 вычислим сумму квадратов расстояний каждой точки данных до их центроида *СКР*, построим график зависимости значения целевой функции *СКР* от количества кластеров (рис. 20). Определим количество кластеров с помощью метода «локтя»  $k=8$  и воспользуемся методом  $k$ -средних для группировки данных на кластеры (рис. 21) [142].

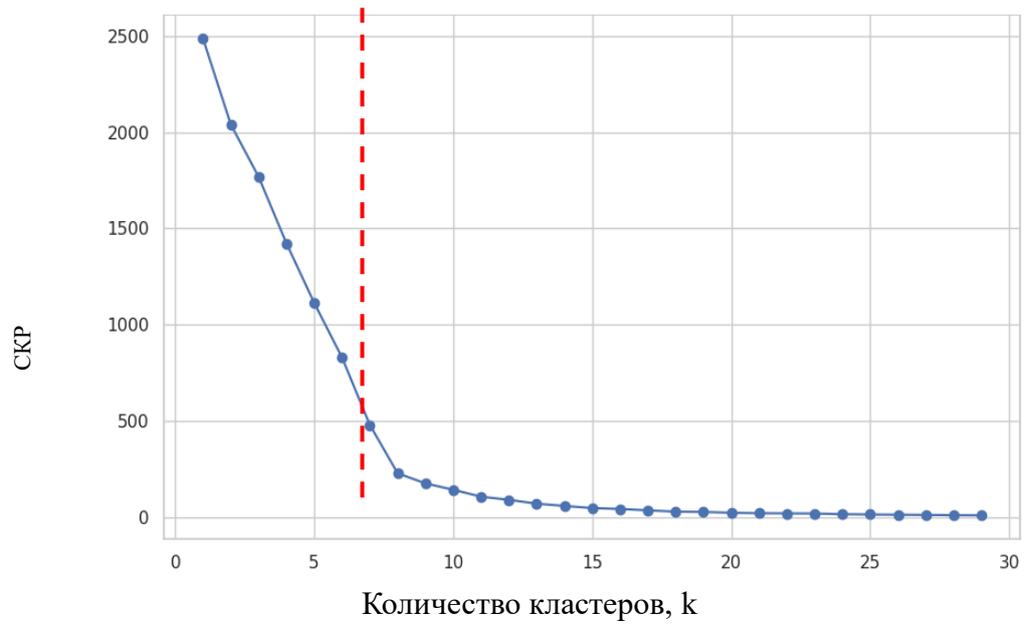


Рисунок 20 – Метод «локтя» для всего набора данных

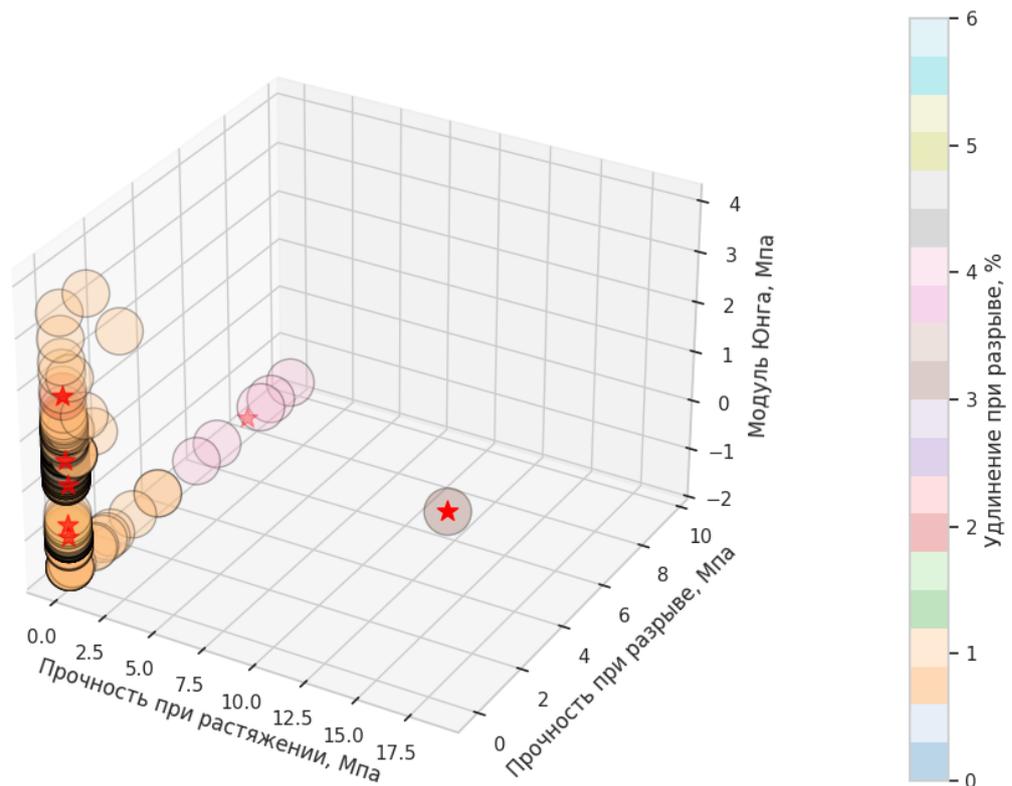


Рисунок 21 – Распределение набора данных на k=8 кластеров

В таблице 9 приведены результаты кластеризации:

Таблица 9 – Средние значения свойств для каждого кластера

№ кластера	Электропроводность См/м	Электрическое сопротивление, Ом/м	Плотность, гр/м <sup>3</sup>	Модуль Юнга, МПа	Предел прочности при разрыве МПа	Удлинение, %	Предел прочности при растяжении, МПа
1	4.633099e+02	5.068960e+12	1.21871	1094.857	386.31	258.21	114.85
2	2.571019e-02	7.009897e+08	0.7825	388.938	2948.2	1013.90	45428.65
3	1.101112e+01	5.603668e+13	0.265607	730.918	85.35	944.20	49.76
4	0.000000e+00	1.000000e+12	1.77	24054.24	384084	1596.741	0.1
5	1.000000e-02	1.681200e+02	0.44	566000	6.09	0.00107	4.89
6	1.000000e-07	1.000000e+07	0.31	0.03	61	203333.33	51
7	1.506024e+05	6.640000e-06	1.77	8.5	0.0782	0.92	65.92
8	0.00	4.257143e+15	1	0.62	0.444	25.184	0.358

Кластерный анализ выявил восемь характерных групп материалов с уникальными сочетаниями свойств. В кластере 1 представлены высокопроводящие материалы (463,31 См/м) с выдающимися механическими характеристиками: модуль Юнга 1094,857 ГПа, предел прочности 386,31 МПа и исключительной пластичностью (258,21% удлинения). Такие полимерные композиционные материалы идеальны для электротехнических применений, где требуются одновременно высокая проводимость, прочность и способность к деформации.

Материалы кластера 2 демонстрируют противоположные свойства - низкую электропроводность (0,02571 См/м) при экстремальной механической прочности (2948,2 МПа) и пластичности (1013,9% удлинения). Это делает их перспективными для конструкционных применений в авиакосмической и автомобильной промышленности.

Особый интерес представляет кластер 4, объединяющий абсолютные диэлектрики с рекордными значениями прочности (384084 МПа) и пластичности (1596,741% удлинения). Такие материалы могут найти применение в высоковольтной изоляции и специальных защитных покрытиях.

Кластеры 3 и 6 характеризуются сверхлегкими материалами (плотность 0,26-0,31 г/см<sup>3</sup>) с высокой деформационной способностью (до 2033,33% удлинения), но ограниченной прочностью. Их потенциальное применение - упаковочные материалы и гибкие конструкции.

На противоположном конце спектра находятся хрупкие материалы кластера 5 (удлинение всего 0,001%) с экстремальной жесткостью (566000 ГПа), но низкой прочностью, что ограничивает их применение специализированными конструкциями.

Материалы кластера 7 - сверхпроводники (150602,4 См/м) с минимальной механической прочностью, и кластер 8 - абсолютные изоляторы с уникальным сочетанием свойств.

Для оценки качества кластеризации рассчитаем коэффициент силуэта по формуле 24:

$$S_{(x_i)} = 0,684529$$

и построим график визуализации значений коэффициента силуэта для кластеров (рис. 22)

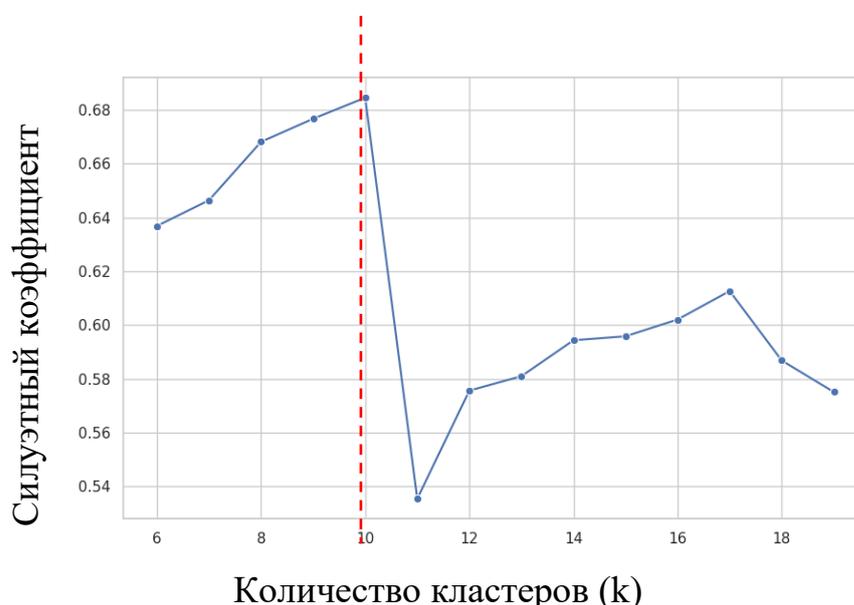


Рисунок 22 Визуализация коэффициента силуэта

Силуэтный коэффициент = 0,684 говорит о том, что объекты в кластерах хорошо сгруппированы и отделены от других кластеров.

### 3.2.2 Выбор метода поиска расстояния для поиска похожих материалов в наборе данных

Для модели используется набор данных, представляющий собой матрицу, где каждая строка соответствует одному материалу, а каждый столбец — одной из его характеристик. Матрица данных имеет размер  $N \times M$ , где  $N$  — количество материалов, входящих в кластер, а  $M$  — количество характеристик. Например, для первого кластера матрица данных будет иметь размер  $128 \times 8$ .

$$D = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{18} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{28} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{128,1} & x_{128,2} & \cdots & x_{128,8} \end{bmatrix}$$

где:  $x_{ij}$  — значение  $j$ -й характеристики  $i$ -го материала.

Для обеспечения корректного сопоставления характеристик с разными масштабами используется нормализация данных. Это позволяет привести все характеристики к единой шкале, что важно для применения метрик расстояния, таких как евклидово расстояние.

$$x'_{ij} = \frac{x_{ij} - \mu_j}{\sigma_j}, \quad (37)$$

где:  $x_{ij}$  — исходное значение  $j$ -й характеристики  $i$ -го материала;

$\mu_j$  — среднее значение  $j$ -й характеристики;

$\sigma_j$  — стандартное отклонение  $j$ -й характеристики.

Принцип работы модели определения состава материала основан на поиске схожести между заданными параметрами и параметрами в наборе данных.

Для поиска схожести могут быть использованы следующие методы: евклидово расстояние, манхэттенское расстояние (L1-норма), косинусная метрика.

Определим целевой вектор **a**, от которого будем искать наиболее близкие вектора:

$$\mathbf{a} = [a_1 \ a_2 \ a_3 \ a_4 \ a_5 \ a_6 \ a_7 \ a_8]$$

*Расчет Евклидова расстояния для поиска похожих векторов в наборе данных*

Пусть вектор  $\mathbf{a}$  относится к кластеру №1, поэтому расчет евклидова расстояния будет проводится только для векторов, относящихся к 1 кластеру, который состоит из 128 векторов, с 8 характеристиками.

Определим вектор  $\mathbf{b}$ , до которого будем определять Евклидово расстояние:

$$\mathbf{b} = [b_1 \ b_2 \ b_3 \ b_4 \ b_5 \ b_6 \ b_7 \ b_8]$$

Евклидово расстояние между векторами  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$  определяется по формуле:

$$d_e(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (a_i - b_i)^2}, \quad (38)$$

Для определения минимального значения евклидова расстояния необходимо провести расчеты для каждого из 128 векторов  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \dots, \mathbf{b}_{128}$ , после чего выбрать вектор с минимальным значением расстояния.

*Расчет Манхэттенского расстояния для поиска похожих векторов в наборе данных*

Рассчитаем манхэттенское расстояние для этих же векторов  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \dots, \mathbf{b}_{128}$  по формуле:

$$d_e(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \sum_{i=1}^n |a_i - b_i|, \quad (39)$$

Для определения минимального значения евклидова расстояния необходимо так же провести расчеты для каждого из 128 векторов.

*Расчет Косинусного расстояния для поиска похожих векторов в наборе данных*

Косинусное расстояние измеряет, насколько близки направления двух векторов, и определяется как дополнение к косинусу угла между ними. Косинусное расстояние для вектора  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{a}_l$  можно описать следующим образом:

$$d_c(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = 1 - \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}}{\|\mathbf{a}\| \cdot \|\mathbf{b}\|}, \quad (40)$$

где:  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$  - скалярное произведение векторов,

$\|\mathbf{a}\|, \|\mathbf{b}\|$  - нормы (длины) векторов  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$  соответственно.

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{i=1}^n (a_i \cdot b_i), \quad (41)$$

Норма вектора  $a$  и  $b$ :

$$\|\mathbf{a}\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n a_i^2}, \quad (42)$$

$$\|\mathbf{b}\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n b_i^2}, \quad (43)$$

Для определения более точного метода рассчитаем коэффициент корреляции Пирсона между целевым вектором и каждым из найденных векторов для каждой метрики. Затем сравним результаты, чтобы определить, какой метод лучше всего подходит для нахождения ближайших векторов.

Для векторов  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$  коэффициент корреляции рассчитывается по формуле:

$$r = \frac{n(\sum a_i b_i) - (\sum a_i)(\sum b_i)}{\sqrt{[n \sum a_i^2 - (\sum a_i)^2][n \sum b_i^2 - (\sum b_i)^2]}}, \quad (44)$$

где:  $n$  - количество элементов в векторах,

$\sum a_i b_i$  — сумма произведений соответствующих элементов векторов  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$ ,

$\sum a_i$  и  $\sum b_i$  — суммы элементов векторов  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$ ,

$\sum a_i^2$  и  $\sum b_i^2$  — суммы квадратов элементов векторов  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$ .

Определим для материала, обладающего следующими характеристиками

Проводимость = 29,62 СМ/м;

Удельное электрическое сопротивление: 854815242,3;

Диэлектрическая постоянная = 13,99;

Плотность гр/см<sup>3</sup> = 1,2011;

Модуль Юнга = 1142,6 МПа;

Предел прочности при разрыве = 357,77 МПа;

Предел прочности при растяжении 80,16274 Мпа;

Удлинение - 180,6833 %.

Запишем целевой вектор **a**:

$$a = [29,62 \quad 854815242,3 \quad 13,99 \quad 1,2011 \quad 1142,6 \quad 357,77 \quad 80,16274 \quad 180,6833]$$

Данный вектор относится к кластеру №1, который можно записать в виде матрицы A:

$$A = \begin{bmatrix} 2,000000e-08 & 5,000000e+07 & \dots & 1,50 \\ 4,000000e-08 & 2,500000e+07 & \dots & 1,70 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 5,000000e+02 & 2,000000e-03 & \dots & 900 \end{bmatrix},$$

По формуле 34 определим евклидово расстояние:

$$d_{E1}(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \sqrt{(29,62 - 0,00000002)^2 + (854815242,3 - 50000000)^2 + (13,99 - 7)^2 + (1,2011 - 1,18)^2 + (1142,6 - 0,2)^2 + (357,77 - 1,4)^2 + (80,16274 - 0,1)^2 + (180,6833 - 3,49)^2} \approx 2544000000$$

По формуле 35 рассчитаем манхэттенское расстояние:

$$d_{M1}(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = |29,62 - 0,00000002| + |854815242,3 - 50000000| + |13,99 - 7| + |1,2011 - 1,18| + |1142,6 - 0,2| + |357,77 - 1,4| + |80,16274 - 0,1| + |180,6833 - 3,49| \approx 804817034,95$$

По формулам 36-39 рассчитаем косинусное расстояние

$$a \cdot e = 29,62 \cdot 0,00000002 + 854815242,3 \cdot 50000000 + 13,99 \cdot 7 + 1,2011 \cdot 1,18 + 1142,6 \cdot 0,2 + 357,77 \cdot 1,4 + 80,16274 \cdot 0,1 + 180,6833 \cdot 3,49 = 42740762115000000$$

Норма вектора **a** и **b**:

$$\|a\| = \sqrt{29,62^2 + 854815242,3^2 + 13,99^2 + 1,2011^2 + 1142,6^2 + 357,77^2 + 80,16274^2 + 180,6833^2} = 8,55 \cdot 10^8$$

$$\|e\| = 5 \cdot 10^7$$

Косинусное расстояние для вектора **a** и **a<sub>l</sub>** равно:

$$d_c(a, e) = 1 - \frac{42740762115000000}{8,55 \cdot 10^8 \cdot 5 \cdot 10^7} = 0,000001$$

По формуле 40 рассчитаем коэффициент корреляции Пирсона для всех вектора каждого метода:

$$r = \frac{n(\sum a_i b_i) - (\sum a_i)(\sum b_i)}{\sqrt{[n \sum a_i^2 - (\sum a_i)^2][n \sum b_i^2 - (\sum b_i)^2]}}$$

$$\sum a_i = 29,62 + 854815242,3 + 13,99 + 1,2011 + 1142,6 + 357,77 + 180,6833 + 80,16274 = 854817048,32$$

$$\sum b_i = 50000013,37$$

$$\sum a_i^2 = 29,62^2 + 854815242,3^2 + 13,99^2 + 1,2011^2 + 1142,6^2 + 357,77^2 + 180,6833^2 + 80,16274^2 = 730709098469881000$$

$$\sum b_i^2 = 25000000000000064,5$$

$$\sum a_i b_i = (29,62 \cdot 0,00000002) + (854815242,3 \cdot 50000000) + (13,99 \cdot 7) + (1,2011 \cdot 1,18) + (1142,6 \cdot 0,2) + (357,77 \cdot 1,4) + (180,6833 \cdot 0,1) + (80,162 \cdot 3,49) = 42740762115001100$$

$$r = \frac{8(42740762115001100) - (854817048,32) \cdot (50000013,37)}{\sqrt{[8(730709098469881000) - (854817048,32)^2] \cdot [8(25000000000000064,5) - (50000013,37)^2]}} = 0.999$$

В таблице 10 представлены результаты расчета пяти расстояний для трех методов и коэффициенты корреляции:

Таблица 10

Метод	Евклидово расстояние					Манхэттенское расстояние					Косинусное расстояние				
Вектор	b <sub>1</sub>	b <sub>2</sub>	b <sub>3</sub>	b <sub>4</sub>	b <sub>5</sub>	c <sub>1</sub>	c <sub>2</sub>	c <sub>3</sub>	c <sub>4</sub>	c <sub>5</sub>	e <sub>1</sub>	e <sub>2</sub>	e <sub>3</sub>	e <sub>4</sub>	e <sub>5</sub>
Расстояние	8548152 42,3	854715242,3	854715 242,3	854815 242,3	8381485 75,63	8.55E +08	8.54E+ 08	8.55E +08	8381498 70,56	8547184 42,63	0,0000 09	0,999 999	0,000 527	0,999 955	0,000 685
Проводимость СМ/м	6,00	0,00001	0,00001	1,70E+ 01	0,00000 006	0,000 01	0,0000 009	6,00E +00	0,00000 006	0,00001	0,0000 1	0,00E +00	0,000 01	6,00E +00	0,000 01
Удельное электрическое сопротивление Ом/м	0,17	100000	100000	0,06	1666666 6,67	10000 0	111111 1,11	0,17	1666666 6,67	100000	100000	0	1000 00	0,17	10000 0
Диэлектрическая постоянная	0	0	0	0	20	0	0	0	20	0	0	0	0	0	0
Плотность гр/см <sup>3</sup>	1,26	0,31	0,9	1,19	1,2	0,31	0,32	1,26	1,2	0,9	0,32	1,01	0,31	1,26	0,9
Модуль Юнга, Мпа	3850	3185	103,01	0	2,3	3185	2,2	3850	2,3	103,01	12,95	1500	3185	3850	103,0 1

Предел прочности при разрыве, МПа	80,85	621,3935	1,23612	0	0	621,3935	77	80,85	0	1,23612	53,45	34	621,3935	80,85	1,23612
Удлинение,%	2,1	19,51	1,2	0	0	19,51	3500	2,1	0	1,2	412,741313	2,266667	19,51	2,1	1,2
Прочность при растяжении, МПа	66	116	3701	0	0	116	67	66	0	3701	52,25	31,9	116	66	3701
Коэффициент корреляции Пирсона	-0,149432078	,0,9995193	0,9993	-0,150549	0,99999	0,999519	0,999995	-0,149432	0,999999	0,99933	0,99999	-0,15037	0,999519	-0,149432	0,999328

Для определения наиболее точного метода, посчитаем количество коэффициентов корреляции Пирсона, близких к 1 для каждого метода:

Евклидово расстояние: 3 коэффициента (0.9995193, 0.999328, 0.999999)

Манхэттенское расстояние: 4 коэффициента (0.999519, 0.99999, 0.999999, 0.99932)

Косинусное расстояние: 3 коэффициента (0.99999, 0.999519, 0.99932)

Наиболее точным методом, для данных значений, является Манхэттенское расстояние, так как у него наибольшее количество коэффициентов, близких к 1, что указывает на сильную линейную зависимость между целевым вектором и найденными векторами.

Разработанная математическая модель реализует интеллектуальный подход к выбору оптимального метода сравнения материалов, автоматически определяя наиболее подходящую метрику для каждого конкретного случая поиска. Для различных типов полимерных композиционных материалов модель может применять: Евклидову метрику (L2) для нормально распределенных параметров, Косинусное расстояние при работе с угловыми характеристиками, Манхэттенское расстояние (L1) при наличии выбросов и аномальных значений.

Адаптивный выбор метрики осуществляется на основе предварительного анализа данных, анализа корреляционных связей между параметрами.

### **3.3 Результаты применения модели автоматизации определения состава полимерных композиционных материалов**

Разработанная модель показала высокую эффективность в оптимизации процесса разработки полимерных композиционных материалов. На примере поиска материала со следующими целевыми свойствами: проводимость 100 См/м, модуль Юнга 1500 МПа, предел прочности при разрыве 150 МПа, удлинение 10% и прочность при растяжении 70 МПа, модель успешно идентифицировала четыре наиболее подходящих варианта полимерных

КОМПОЗИЦИОННЫХ материалов на основе поликарбоната с многостенными углеродными нанотрубками (MWCNT) (табл. 11.).

*Таблица 11-результаты применения модели автоматизации определения состава полимерных композиционных материалов*

Наименование материала	Плотность, гр/см <sup>3</sup>	Электропроводность, См/м	Удельное электрическое сопротивление Ом/м	Концентрация на пороге протекания, массовое содержание наполнителя, %	Прочность при растяжении, МПа	Предел прочности при разрыве, Мпа	Удлинение, %	Модуль Юнга, Мпа
PC_MWCNT mass,% 99,6/0,4	1.2	87	0.01	0.2	55	159.5	11	1450
PC_MWCNT mass,% 99,4/0,6	1.2	98	0.01	0.2	58	95.39	6	1590
PC_MWCNT mass,% 99,4/0,6	1.2	95	0.01	0.2	60	180.4	11	1640
PC_MWCNT mass,% 99,6/0,4	1.2	80	0.01	0.2	62	232.5	15	1550

Анализ полученных результатов показывает близкое соответствие предложенных материалов заданным требованиям. Все выбранные полимерные композиционные материалы демонстрируют проводимость в диапазоне 80-98 См/м при целевом значении 100 См/м, модуль Юнга 1450-1640 МПа против требуемых 1500 МПа, а также удовлетворительные значения прочностных характеристик и деформационных свойств. Наиболее сбалансированным вариантом оказался полимерный композиционный материал PC\_MWCNT 99,6/0,4, показавший минимальные отклонения от заданных параметров: проводимость 87 См/м (-13%), модуль Юнга 1450 МПа (-3,3%), предел прочности 159,5 МПа (+6,3%) при удлинении 11% (+10%).

Преимуществом разработанной модели стало существенное сокращение временных затрат на подбор оптимального состава. Если традиционный экспериментальный подход требует около 2 месяцев для синтеза и

тестирования образцов, то модель обеспечивает получение сопоставимых результатов всего за 2 недели, ускоряя процесс в 4-6 раз. Такой эффект достигнут благодаря комплексному использованию адаптивных алгоритмов машинного обучения, оптимальных метрик сравнения.

Важным достижением модели стало сокращение объема лабораторных исследований до 60% бюджета на научно-исследовательские и опытно-конструкторские работы. Такое снижение затрат обусловлено минимизацией количества дорогостоящих лабораторных испытаний, включая хроматографию, спектроскопию и механические тесты. Модель позволяет прогнозировать свойства материалов без необходимости их физического изготовления и разрушающего тестирования, что не только сокращает расходы, но и уменьшает количество отходов.

### **Выводы по 3 разделу**

Третий раздел посвящен разработке и применению модели автоматизации определения состава полимерных композиционных материалов. Основные достижения включают:

1. Рассмотрены основные экспериментальные и теоретические методы определения состава полимеров, отмечены значительные затраты времени и ресурсов, а также сложность реализации некоторых методов. Подготовка образцов является трудоемкой и требует специального оборудования, что увеличивает время и затраты на проведение тестов.

2. Проведена кластеризация данных с использованием метода k-средних. Рассчитан коэффициент силуэта, равный 0,684, указывающий на хорошее качество кластеризации и эффективное разделение данных на группы.

3. Рассмотрены методы поиска схожести между заданными параметрами и параметрами в наборе данных, такие как евклидово, манхэттенское и косинусное расстояния. Для каждого метода рассчитан коэффициент корреляции Пирсона для оценки схожести целевого вектора с найденными векторами. Манхэттенское расстояние показало наилучшие

результаты, так как у него наибольшее количество коэффициентов, близких к 1, что указывает на сильную линейную зависимость между целевым вектором и найденными векторами.

4. Разработана модель автоматизации определения состава полимерных композиционных материалов, основанная на поиске схожести между заданными параметрами и параметрами в наборе данных с помощью применения методов кластеризации и метрик расстояния. Модель позволила сократить сроки подбора оптимального состава полимерного композиционного материала с 2 месяцев до 2 недель. Достигнуто ускорение процесса определения состава на 84-88%, а также сокращение объема лабораторных исследований на 60-62%.

## **Раздел 4. Разработка методики диагностики состава полимерных композиционных материалов**

Современные полимерные композиционные материалы занимают ключевое место в авиационной и космической промышленности, поскольку их состав непосредственно определяет важнейшие эксплуатационные характеристики: механическую прочность, жесткость, электропроводность и тд. Особое значение эти параметры приобретают при создании критически важных конструктивных элементов, таких как силовые элементы планера, где даже незначительные отклонения в составе материала могут привести к снижению надежности и безопасности.

Однако определение механической прочности и жесткости, а именно испытания на растяжение, в отличие от остальных методов диагностики, требуют изготовления и разрушения образцов, что увеличивает затраты и замедляет производственные процессы.

В связи этим разработка методики, способной определять состав полимерных композиционных материалов приобретает особую значимость. Подобная методика позволит существенно сократить время и стоимость контроля качества, повысить надежность и безопасность эксплуатации полимерных композиционных конструкций.

Методика включает в себя разработанные модели в 2 и 3 разделах (рис.23)



Рисунок 23- Методика диагностики состава полимерных композиционных материалов

## **4.1 Недостатки существующих методов диагностики состава полимерных композиционных материалов**

Методы испытаний на растяжение, установленные в ГОСТ 11262-2017 [26], являются стандартом для оценки механических свойств пластиковых материалов. Однако, несмотря на свою распространенность, они имеют ряд недостатков, которые ограничивают их применение в современных условиях.

### *4.1.1 Количество образцов и его влияние на затраты*

Согласно ГОСТ 11262-2017 [29], для получения достоверных результатов необходимо проводить испытания на растяжение как минимум на пяти образцах. Это требование связано с необходимостью учета вариаций в свойствах материала, которые могут возникать из-за неоднородности его структуры. Однако такое количество образцов приводит к значительным затратам как в финансовом, так и в временном плане.

Использование пяти образцов для одного испытания требует не только дополнительных ресурсов на их изготовление, но и увеличивает время, затрачиваемое на подготовку и проведение испытаний. В условиях, когда скорость вывода продукта на рынок имеет критическое значение, такие затраты становятся неприемлемыми для многих компаний.

Определение средних затрат на создание одного образца для проведения испытаний на растяжение может варьироваться в зависимости от типа материала, технологии его производства, а также от специфики испытательной лаборатории. Однако, в общем, можно выделить несколько ключевых факторов, влияющих на стоимость [143]:

Стоимость исходных материалов, из которых изготавливаются образцы. Например, стоимость полимеров может варьироваться от 100 до 10000 рублей за килограмм в зависимости от типа и качества.

Производственными затраты на обработку и формование образцов, включая использование специализированного оборудования. Эти затраты могут составлять от 4000 до 45000 рублей за партию образцов.

Затраты на проведение испытаний, включая оплату труда специалистов и использование оборудования для испытаний могут составлять от 8500 до 45000 рублей за одно испытание, в зависимости от сложности и необходимого оборудования.

Если образцы не могут быть повторно использованы, необходимо учитывать затраты на утилизацию.

В целом, общая стоимость проведения испытаний для одного образца может варьироваться от 2000 до 8500 рублей, в зависимости от вышеуказанных факторов.

На рисунке 24 представлена схема создания полимерных композиционных материалов, которая включает основные этапы процесса.

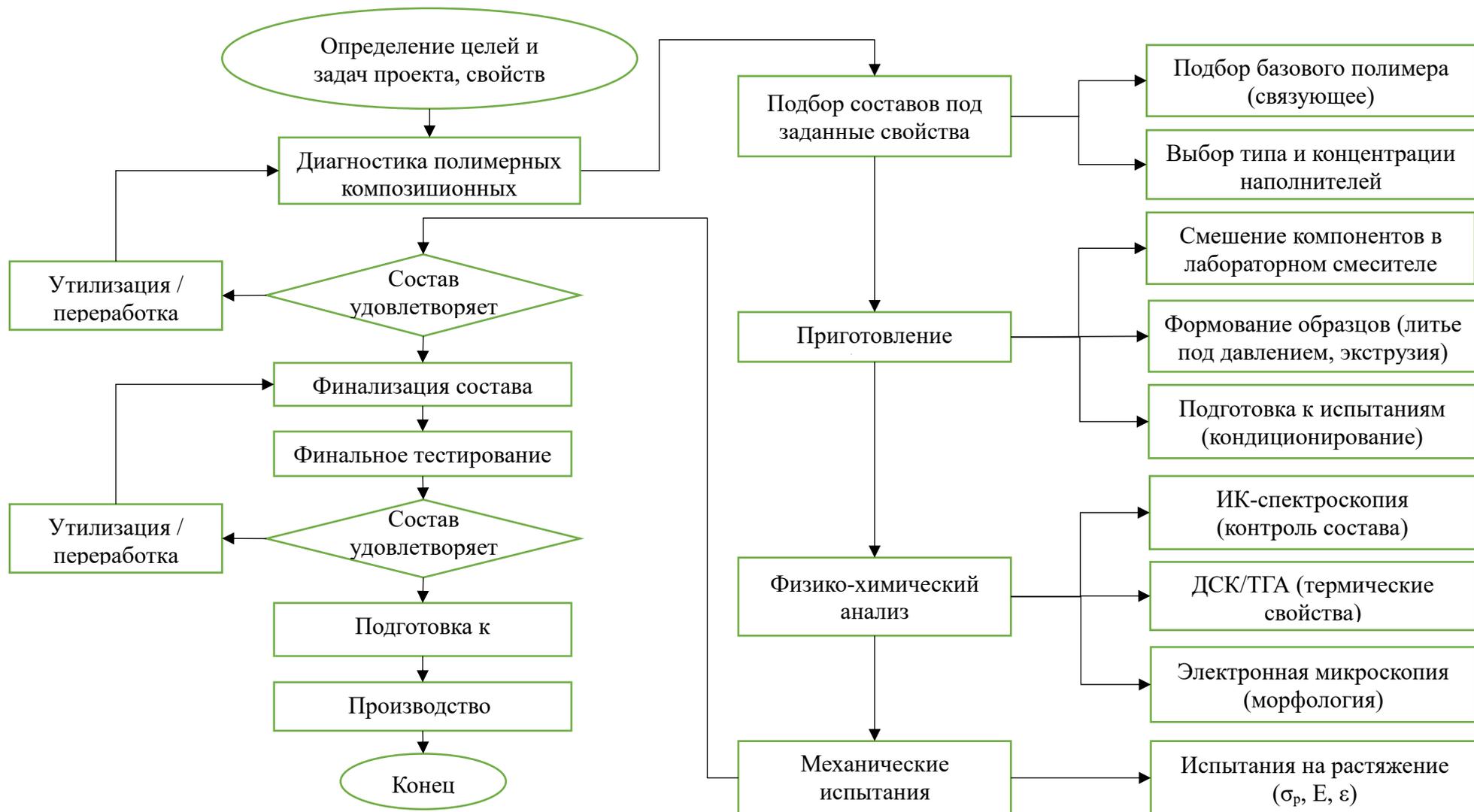


Рисунок 24 –Схема создания полимерных композиционных материалов

Если состав не соответствует заданным требованиям - утилизация образца.

Важно: Этот этап может проходить многократно (сотни раз), пока не будет достигнут нужный состав. Каждая итерация может включать:

Изменение состава материала, изменение геометрии частиц наполнителя (размер, форма, распределение) или изменение способа создания полимера.

Составим матрицу полнофакторного эксперимента для расчета примерного количества образцов при создании полимерного композиционного материала. Например, для создания материала, обладающего диэлектрическими свойствами и высокими механическими свойствами, в качестве матриц рассматриваются эпоксидные, полиэфирные, полиуретановые, фенолформальдегидные смолы, а также полипропилен и поливинилхлорид. Наполнители включают стеклянные и углеродные волокна, кремнезем и тальк.

Содержание наполнителя варьируется в диапазоне 0,5-3% (0,5; 1; 2; 3% масс.), что позволяет сохранить диэлектрические свойства при улучшении механических характеристик. Ключевыми параметрами, влияющими на конечные свойства материала, являются размер и форма частиц наполнителя, а также технология изготовления образцов. Такой подход обеспечивает систематическое исследование влияния состава на свойства материала при минимальном. Для проведения полнофакторного эксперимента с использованием указанных матриц и наполнителей, а также с учетом различных уровней содержания наполнителей и влияния других факторов (размер, форма частиц наполнителя и способ изготовления образцов), можно составить план эксперимента для 6 матриц и одного наполнителя (рис.25):

Определение факторов и уровней:

Матрица (6 уровней -эпоксидная смола; полиэфирная смола; полиуретановая смола; полипропилен (PP); поливинилхлорид (PVC); фенолформальдегидная смола):

Содержание наполнителя (4 уровня -0,5; 1;2;3%);

Размер частиц наполнителя (3 уровня – маленькие, средние, большие);  
Форма частиц наполнителя (2 уровня -плоские, круглые);  
Способ изготовления образцов (3 уровня – экструзия, литье, 3D-печать);

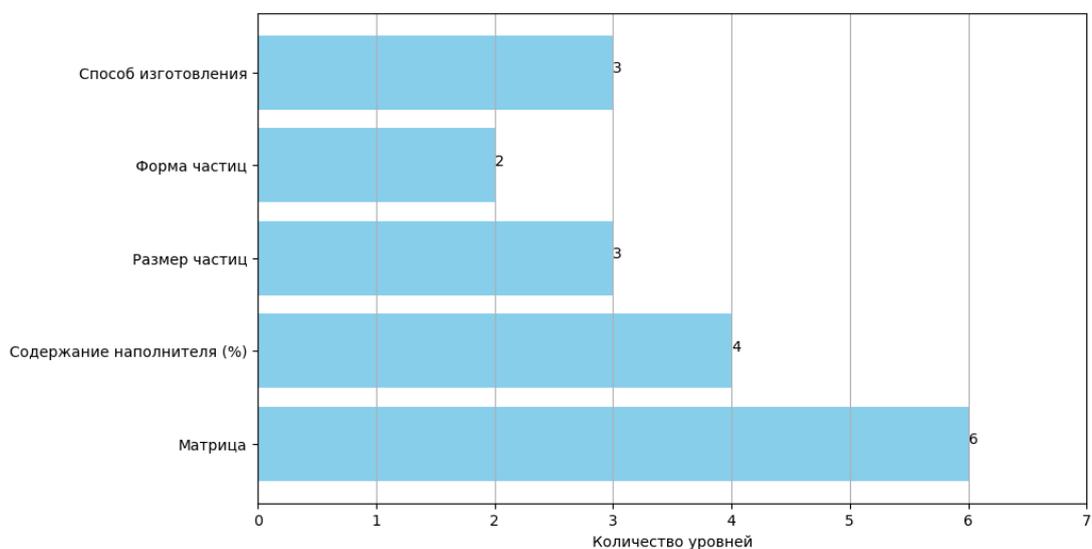


Рисунок 25-Количество уровней для каждого фактора

Расчет общего количества комбинаций

Формула для расчета общего количества комбинаций в полнофакторном эксперименте выглядит следующим образом:

$$\text{Общее количество комбинаций} = N1 \times N2 \times N3 \times N4 \times N5, \quad (45)$$

где:

N1 — количество уровней первого фактора (Матрица),

N2 — количество уровней второго фактора (Содержание наполнителя),

N3 — количество уровней третьего фактора (Размер частиц наполнителя),

N4 — количество уровней четвертого фактора (Форма частиц наполнителя),

N5 — количество уровней пятого фактора (Способ изготовления образцов).

$$\text{Общее количество комбинаций} = 6 \times 4 \times 3 \times 2 \times 3 = 432$$

В таблице 12 представлены результаты полнофакторного эксперимента для 6 матриц и одного наполнителя.

## Общее количество комбинаций полнофакторного эксперимента

№ эксперимента	Матрица	Содержание наполнителя (%)	Размер частиц	Форма частиц	Способ изготовления
1	Эпоксидная смола	0.5	Маленькие	Плоские	Экструзия
2	Эпоксидная смола	0.5	Маленькие	Плоские	Литье
3	Эпоксидная смола	0.5	Маленькие	Плоские	3D-печать
4	Эпоксидная смола	0.5	Маленькие	Круглые	Экструзия
5	Эпоксидная смола	0.5	Маленькие	Круглые	Литье
6	Эпоксидная смола	0.5	Маленькие	Круглые	3D-печать
...	...	...	...	...	...
428	Фенолформальдегидная смола	3	Большие	Плоские	Литье
429	Фенолформальдегидная смола	3	Большие	Плоские	3D-печать
430	Фенолформальдегидная смола	3	Большие	Круглые	Экструзия
431	Фенолформальдегидная смола	3	Большие	Круглые	Литье
432	Фенолформальдегидная смола	3	Большие	Круглые	3D-печать

По ГОСТ ГОСТ 11262-2017 «Пластмассы. Метод испытания на растяжение» [26] количество образцов для испытаний на растяжение для одного материала составляет 5 штук. Соответственно для проведения испытаний на растяжение всех комбинаций из 6 матриц и одного наполнителя требуется провести 2160 испытаний 432 материалов.

При условии, что у нас есть выбор из четырех наполнителей, число испытаний становится равным 8640 штук.

Зная среднюю стоимость создания одного образца полимерного композиционного материала, можно рассчитать стоимость проведения 8640 экспериментов – около 17–73 млн руб.

После проведения 8640 испытаний выбираются материалы, обладающие необходимыми электрическими и механическими свойствами, после чего проводится финальное тестирование, для проверки материала на соответствие всем техническим, функциональным и качественным требованиям, которые были определены на начальных этапах разработки.

#### *4.1.2 Экологические аспекты*

Испытания на растяжение, как и многие другие методы разрушающего контроля материалов, могут вызывать ряд экологических проблем, часто связанные с количеством отходов, после проведения испытаний.

Для испытаний на растяжение требуется изготовление более пяти образцов на один состав материала, что приводит к образованию излишних отходов. Если образцы не могут быть повторно использованы, это создает дополнительную нагрузку на окружающую среду. Пластиковые и полимерные материалы, используемые для образцов, часто имеют длительный срок разложения, что затрудняет их утилизацию и может привести к загрязнению окружающей среды.

При утилизации полимерных композиционных материалов могут происходить различные выбросы, включая углекислый газ, угарный газ, летучие органические соединения и другие загрязняющие вещества. Количество выбросов зависит от метода утилизации, например, термическая утилизация может приводить к более высоким выбросам по сравнению с механической переработкой. При сжигании одного килограмма полимерного материала может выделяться от 1 до 3 кг  $\text{CO}_2$ , в зависимости от его состава [144].

В среднем один образец весит от 20 до 50 гр. Сжигание 8640 образцов с средним весом около 35 гр, в атмосферу выбрасывается 604,8 кг углекислого газа.  $\text{CO}_2$  является одним из основных парниковых газов, способствующих глобальному потеплению. Он задерживает тепло в атмосфере, что приводит к повышению температуры на планете. Так же увеличение  $\text{CO}_2$  может способствовать образованию кислотных дождей, что негативно сказывается на экосистемах, почвах и водоемах.

Производство пластиковых материалов требует значительных объемов природных ресурсов, таких как нефть и газ, например, для производства одной тонны полипропилена необходимо около 1,5 тонны нефти [145]. Это может способствовать истощению ресурсов и негативно сказываться на экосистемах,

более того процесс производства образцов и их тестирования требует энергии, что может способствовать выбросам парниковых газов, если используется ископаемое топливо.

В процессе производства и обработки образцов могут использоваться различные химические вещества, которые могут быть токсичными или опасными для здоровья человека и окружающей среды. Неправильная утилизация или утечка химических веществ может привести к загрязнению почвы и водоемов.

В условиях глобальной экологической проблемы, связанной с загрязнением окружающей среды [146], необходимо искать более устойчивые и экологически чистые методы испытаний.

#### **4.1 Разработка методики диагностики состава полимерных композиционных материалов**

Методика диагностики состава полимерных композиционных материалов направлена на автоматизацию процесса выбора состава полимерных композиционных материалов без необходимости проведения первичных испытаний. Это достигается с помощью модели определения состава по заданным эксплуатационным характеристикам.

Методика позволяет значительно сократить количество образцов, необходимых для испытаний, за счет использования математических методов и моделей, что способствует уменьшению трудоемкости, финансовых затрат, повышению надежности материалов и обеспечению экологической безопасности окружающей среды.

С помощью разработанных моделей в 2 и 3 разделе можно получить рекомендации по составу материалов без необходимости проведения первичных испытаний.

Методика диагностики состава полимерных композиционных материалов включает в себя следующие этапы [147]:

- 1.) Определение целей и задач проекта.

На первом этапе необходимо сформулировать, какими характеристиками должен обладать полимерный композиционный материал, для чего и где он будет применяться, например, это может быть создание нового материала с улучшенными механическими свойствами, легкий и обладающий электропроводностью.

## 2.) Определение свойств для конечного полимерного композиционного материала.

Определение ключевых эксплуатационных характеристик, которым должен обладать конечный материал. Это могут быть:

- Предел прочности при растяжении;
- предел прочности при разрыве;
- удлинение при разрыве;
- модуль Юнга;
- плотность материала;
- электрические свойства: электропроводность, удельное поверхностное сопротивление, диэлектрическая постоянная.

## 3.) Применение автоматизированной модели определения состава полимерных композиционных материалов

### 1. Запуск автоматизированной модели:

Открыть программное обеспечение, разработанное для автоматизации выбора состава полимерного композиционного материала (рис.26)



## Диагностика полимерных композиционных материалов <sup>↔</sup>

Определение состава полимерного композиционного материала по свойствам    Прогнозирование свойств    Оп

*Рисунок 26 – Интерфейс автоматизированной модели определения состава полимерных композиционных материалов*

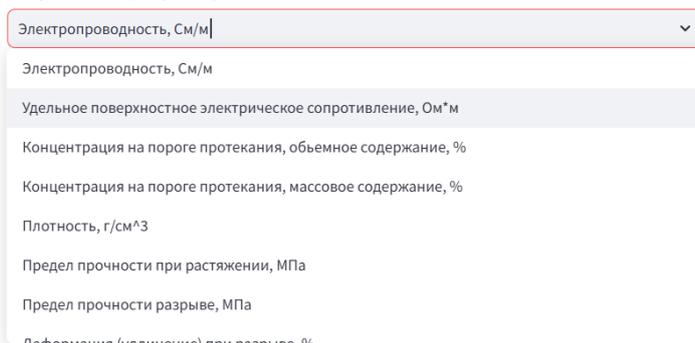
Выбрать необходимую вкладку: «*Определение состава полимерного композиционного материала по свойствам*», «*Прогнозирование свойств полимерного композиционного материала по свойствам*», «*Определение свойств материала по связующему и наполнителю*».

### *Прогнозирование свойств полимерного композиционного материала*

1. Необходимо выбрать свойство, значение которого планируется спрогнозировать (рис 27).

#### Выберите свойство для прогнозирования:

Выберите свойство для прогнозирования:

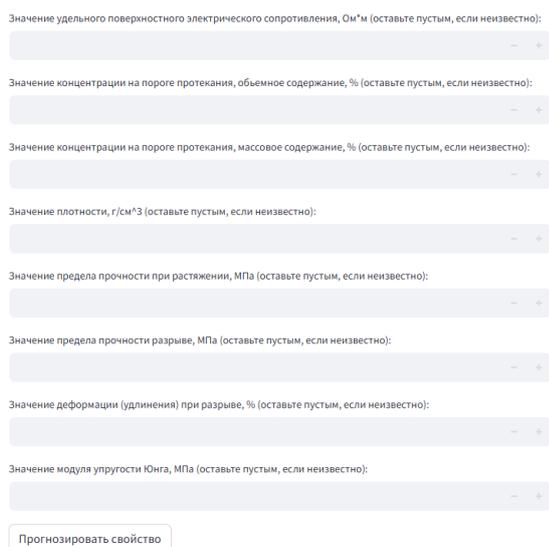


The image shows a web interface with a dropdown menu. The menu is open, showing a list of properties. The selected property is "Электропроводность, См/м". The list includes: "Электропроводность, См/м", "Удельное поверхностное электрическое сопротивление, Ом\*м", "Концентрация на пороге протекания, объемное содержание, %", "Концентрация на пороге протекания, массовое содержание, %", "Плотность, г/см³", "Предел прочности при растяжении, МПа", "Предел прочности разрыве, МПа", and "Деформация (удлинение) при разрыве, %".

*Рисунок 27 – Окно для выбора искомого свойства полимерного композиционного материала*

2. Необходимо ввести известные значения свойств (минимум 3 свойства) и нажать кнопку «прогнозировать свойства» (рис.28)

#### Введите известные параметры материала:



The image shows a web form with eight input fields, each with a label and a "Прогнозировать свойство" button at the bottom. The labels are: "Значение удельного поверхностного электрического сопротивления, Ом\*м (оставьте пустым, если неизвестно):", "Значение концентрации на пороге протекания, объемное содержание, % (оставьте пустым, если неизвестно):", "Значение концентрации на пороге протекания, массовое содержание, % (оставьте пустым, если неизвестно):", "Значение плотности, г/см³ (оставьте пустым, если неизвестно):", "Значение предела прочности при растяжении, МПа (оставьте пустым, если неизвестно):", "Значение предела прочности разрыве, МПа (оставьте пустым, если неизвестно):", "Значение деформации (удлинения) при разрыве, % (оставьте пустым, если неизвестно):", and "Значение модуля упругости Юнга, МПа (оставьте пустым, если неизвестно):".

*Рисунок 28 – Окно ввода известных значений свойств полимерного композиционного материала*

3. На экран выводятся значения прогноза (рис.29).

Прогнозируемое значение электропроводности, См/м: 0.15

*Рисунок 29 – Результат прогнозирования  
Определение состава полимерного композиционного материала по  
свойствам*

1. Ввод свойств для итогового материала. Далее необходимо нажать кнопку «вывод возможных комбинаций составов» (рис 30.)

**Введите свойства для итогового материала:**

Значение электропроводности, См/м (оставьте пустым, если неизвестно):

Значение удельного поверхностного электрического сопротивления, Ом/м (оставьте пустым, если неизвестно):

Значение концентрации на пороге протекания, объемное содержание, % (оставьте пустым, если неизвестно):

Значение концентрации на пороге протекания, массовое содержание, % (оставьте пустым, если неизвестно):

Значение плотности, г/см<sup>3</sup> (оставьте пустым, если неизвестно):

Значение предела прочности при растяжении, МПа (оставьте пустым, если неизвестно):

Значение предела прочности разрыве, МПа (оставьте пустым, если неизвестно):

Значение деформации (удлинение) при разрыве, % (оставьте пустым, если неизвестно):

Значение модуля упругости Юнга, МПа (оставьте пустым, если неизвестно):

Вывод возможных комбинаций составов

*Рисунок 30 – Окно ввода необходимых значений свойств полимерного  
композиционного материала*

2. Программа выводит таблицу из 5 формул полимерных  
композиционных материалов и их свойства

	Полимерный композиционный	Плотность, г/с	Электропроводность	Удельное поверхно	Концен	Концент	Предел прочност	Пре
199	99/1 mass.% PMMA_MWCNT	1.19	0.00000000001	100,000,000,000	0	0.5	53.1	
200	99.5/0.5 mass.% PMMA_MWCNT	1.19	0.00000000001	90,000,000,000	0	0.5	48.3	
148	60/40 mass.% PES_CF	1.41	28.41	0.04	0	0	60.19	
150	80/20 mass.% PES_CF	1.41	0.07	14.3	0	0	57.92	
147	70/30 mass.% PES_CF	1.41	0.03	32	0	0	57.46	

15	85/15 mass.% PES_CF	DOI: 10.1016/0010-4861(94) 90119-4	Rin	MM NP	polyethersulfone	88	1,000,000,000,000	0.25	0.4	1.17	carbon fiber	10	33,333.3333	1,000	1.75	200
----	---------------------	------------------------------------	-----	-------	------------------	----	-------------------	------	-----	------	--------------	----	-------------	-------	------	-----

*Рисунок 31 – Результаты поиска материалов*

3. С помощью кнопки «Выберите материал для просмотра детальной информации» можно просмотреть информацию о свойствах связующего и наполнителя для выбранного полимерного композиционного материала.

Выберите материал для просмотра детальной информации:

99/1 mass.% PMMA\_MWCNT | ▼

---

99/1 mass.% PMMA\_MWCNT

99,5/0,5 mass.% PMMA\_MWCNT

---

60/40 mass.% PES\_CF

80/20 mass.% PES\_CF

70/30 mass.% PES\_CF

*Рисунок 32 – Окно выбора материала для просмотра детальной информации*

После получения составов полимерных композиционных материалов, необходимо создать минимум 5 образцов на один материал и провести испытания на растяжение по ГОСТ 11262-2017 [2] .

Если материалы не удовлетворяют заданным свойствам, то необходимо сделать корректировку заданных свойств полимерных композиционных материалов

Если материалы удовлетворяют заданным свойствам, то проводят финализацию состава и проведение финальных испытаний.

### ***Определение свойств материала по связующему и наполнителю***

1. Необходимо ввести известные свойства связующего (рис.3)

#### **Свойства связующего**

Удельное сопротивление матрицы (Ом·м)	1000000000000,00	-	+
Коэффициент Пуассона	0,36	-	+
Коэффициент теплопроводности связующего (Вт/(м·К))	0,19	-	+
Плотность матрицы (г/см <sup>3</sup> )	1,20	-	+

*Рисунок 33 - Окно ввода свойств связующего полимерного композиционного материала*

- Ввести известные наполнителя и нажать кнопку «Найти материалы» (рис. 34)

### Свойства наполнителя

Электропроводность наполнителя (См/м)

1000000,00

- +

Коэффициент теплопроводности наполнителя (Вт/(м·К))

3000,00

- +

Плотность наполнителя (г/см<sup>3</sup>)

1,50

- +

Найти материалы

*Рисунок 34 – Окно ввода свойств наполнителя полимерного композиционного материала*

- На экран выводится таблица с материалами, обладающими заданными свойствами связующего и наполнителя (рис.35)

Название	Электропров	Плотност	Прочность	Напряжен	Удлинение (	Модуль упр
PC_MWCNT 99.2/0.8 mass.%	0.000006	1.21	58	174.825	12.95	1,350
PC_MWCNT 99/1 mass.%	0.0005	1.21	61	71	4.9616	1,431
PC_MWCNT 99/1 mass.%	0.0000000001	1.21	99	10.166	0.46	2,210
PC_MWCNT 99/1 mass.%	0.001	1.21	103	116	5.1832	2,238
PC_MWCNT 97/3 mass.%	1	1.22	108	121	5.0417	2,400

*Рисунок 35 – Результат поиска*

Новая схема создания полимерных композиционных материалов, с применением методики диагностики состава полимерных композиционных материалов представлена на рисунке 36.

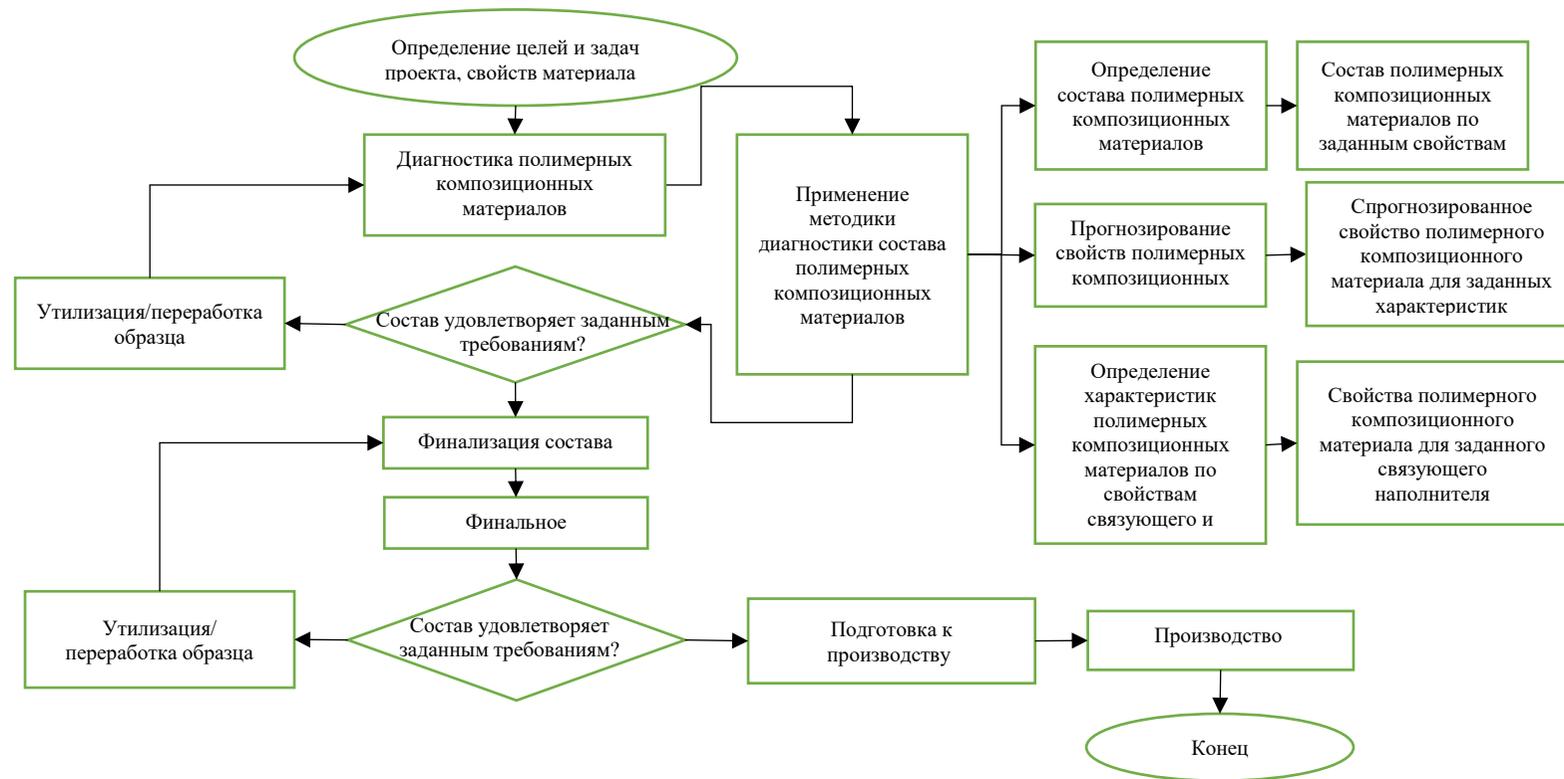


Рисунок 36 – Схема создания полимерных композиционных материалов с применением автоматизированной системы определения состава

Для расчета нового количества образцов полимерного композиционного материала составим матрицу полнофакторного эксперимента. Автоматизированная модель подобрала пять составов, соответствующих заданным свойствам: эпоксидная смола с MXene в соотношениях 99,6/0,4 и 99/1, эпоксидная смола с многослойными углеродными нанотрубками (97/3), а также полиметилметакрилат с MWCNT в пропорциях 99/1 и 99,6/0,4.

В эксперименте учитываются четыре фактора с разным числом уровней: материал и соотношение компонентов (5 вариантов), размер частиц наполнителя (3 уровня – маленькие, средние, большие), форма частиц (2 уровня -плоские, круглые) и способ изготовления (3 уровня – экструзия, литье, 3D-печать). Общее количество возможных комбинаций:

$$5 \times 3 \times 2 \times 3 = 90$$

*Таблица 13*

*Общее количество комбинаций полнофакторного эксперимента с использованием автоматизированной модели определения состава полимерного композиционного материала*

<b>№ эксперимента</b>	<b>Материал и соотношение</b>	<b>Размер частиц наполнителя</b>	<b>Форма частиц наполнителя</b>	<b>Способ изготовления образцов</b>
1	Эпоксидная смола, MXene (99,6/0,4)	Маленькие	Плоские	Экструзия
2	Эпоксидная смола, MXene (99,6/0,4)	Маленькие	Плоские	Литье
3	Эпоксидная смола, MXene (99,6/0,4)	Маленькие	Плоские	3D-печать
4	Эпоксидная смола, MXene (99,6/0,4)	Маленькие	Круглые	Экструзия
5	Эпоксидная смола, MXene (99,6/0,4)	Маленькие	Круглые	Литье
6	Эпоксидная смола, MXene (99,6/0,4)	Маленькие	Круглые	3D-печать
7	Эпоксидная смола, MXene (99,6/0,4)	Средние	Плоские	Экструзия
8	Эпоксидная смола, MXene (99,6/0,4)	Средние	Плоские	Литье
9	Эпоксидная смола, MXene (99,6/0,4)	Средние	Плоские	3D-печать
10	Эпоксидная смола, MXene (99,6/0,4)	Средние	Круглые	Экструзия
11	Эпоксидная смола, MXene (99,6/0,4)	Средние	Круглые	Литье
12	Эпоксидная смола, MXene (99,6/0,4)	Средние	Круглые	3D-печать
13	Эпоксидная смола, MXene (99,6/0,4)	Большие	Плоские	Экструзия
14	Эпоксидная смола, MXene (99,6/0,4)	Большие	Плоские	Литье
15	Эпоксидная смола, MXene (99,6/0,4)	Большие	Плоские	3D-печать
16	Эпоксидная смола, MXene (99,6/0,4)	Большие	Круглые	Экструзия
17	Эпоксидная смола, MXene (99,6/0,4)	Большие	Круглые	Литье
18	Эпоксидная смола, MXene (99,6/0,4)	Большие	Круглые	3D-печать
19	Эпоксидная смола, MXene (99/1)	Маленькие	Плоские	Экструзия
...	...	...	...	...
60	Полиметилметакрилат, MWCNT (99/1)	Маленькие	Круглые	3D-печать
61	Полиметилметакрилат, MWCNT (99/1)	Средние	Плоские	Экструзия

Продолжение таблицы 13

62	Полиметилметакрилат, MWCNT (99/1)	Средние	Плоские	Литье
63	Полиметилметакрилат, MWCNT (99/1)	Средние	Плоские	3D-печать
64	Полиметилметакрилат, MWCNT (99/1)	Средние	Круглые	Экструзия
65	Полиметилметакрилат, MWCNT (99/1)	Средние	Круглые	Литье
66	Полиметилметакрилат, MWCNT (99/1)	Средние	Круглые	3D-печать
67	Полиметилметакрилат, MWCNT (99/1)	Большие	Плоские	Экструзия
68	Полиметилметакрилат, MWCNT (99/1)	Большие	Плоские	Литье
69	Полиметилметакрилат, MWCNT (99/1)	Большие	Плоские	3D-печать
70	Полиметилметакрилат, MWCNT (99/1)	Большие	Круглые	Экструзия
71	Полиметилметакрилат, MWCNT (99/1)	Большие	Круглые	Литье
72	Полиметилметакрилат, MWCNT (99/1)	Большие	Круглые	3D-печать
73	Полиметилметакрилат, MWCNT (99,6/0,4)	Маленькие	Плоские	Экструзия
74	Полиметилметакрилат, MWCNT (99,6/0,4)	Маленькие	Плоские	Литье
75	Полиметилметакрилат, MWCNT (99,6/0,4)	Маленькие	Плоские	3D-печать
76	Полиметилметакрилат, MWCNT (99,6/0,4)	Маленькие	Круглые	Экструзия
77	Полиметилметакрилат, MWCNT (99,6/0,4)	Маленькие	Круглые	Литье
78	Полиметилметакрилат, MWCNT (99,6/0,4)	Маленькие	Круглые	3D-печать
79	Полиметилметакрилат, MWCNT (99,6/0,4)	Средние	Плоские	Экструзия
80	Полиметилметакрилат, MWCNT (99,6/0,4)	Средние	Плоские	Литье
81	Полиметилметакрилат, MWCNT (99,6/0,4)	Средние	Плоские	3D-печать
82	Полиметилметакрилат, MWCNT (99,6/0,4)	Средние	Круглые	Экструзия
83	Полиметилметакрилат, MWCNT (99,6/0,4)	Средние	Круглые	Литье
84	Полиметилметакрилат, MWCNT (99,6/0,4)	Средние	Круглые	3D-печать
85	Полиметилметакрилат, MWCNT (99,6/0,4)	Большие	Плоские	Экструзия
86	Полиметилметакрилат, MWCNT (99,6/0,4)	Большие	Плоские	Литье
87	Полиметилметакрилат, MWCNT (99,6/0,4)	Большие	Плоские	3D-печать
88	Полиметилметакрилат, MWCNT (99,6/0,4)	Большие	Круглые	Экструзия
89	Полиметилметакрилат, MWCNT (99,6/0,4)	Большие	Круглые	Литье
90	Полиметилметакрилат, MWCNT (99,6/0,4)	Большие	Круглые	3D-печать

По ГОСТ ГОСТ 11262-2017 «Пластмассы. Метод испытания на растяжение» [26] количество образцов для испытаний на растяжение для одного материала составляет 5 штук.

Общее количество экспериментов составит 450 штук.

С применением автоматизированной модели определения состава полимерного композиционного материала число экспериментом сократится с 8640 до 450 штук.

Средняя стоимость проведения экспериментов уменьшится до 9000000-4000000.

Выброс углекислого газа сократится с 604,8 кг до 32 кг.

Сокращено время на разработку рецептур состава материала на 90-95%.

Затраты на проведения испытаний на растяжение снизились на 80-90%.

## Выводы по 4 разделу

1. Проведенные исследования выявили ограничения традиционных методов испытаний полимерных композиционных материалов по ГОСТ 11262-2017. Особое внимание обращает на себя необходимость проведения большого количества испытаний, что влечет за собой значительные финансовые затраты (17-73 млн руб.) и экологическую нагрузку (605 кг CO<sub>2</sub> выбросов).

2. В ходе работы была разработана методика, включающая автоматизированную систему предварительного отбора составов и специальный алгоритм, позволяющий сократить количество необходимых испытаний в 19 раз (с 8640 до 450).

3. Реализация предложенного подхода демонстрирует значительный экономический и экологический эффект: стоимость испытаний снижается до 0,9-4 млн руб., углеродный след уменьшается на 95% (до 32 кг CO<sub>2</sub>), достигается существенная оптимизация использования сырьевых и энергетических ресурсов.

4. Практическая значимость исследования подтверждается разработкой специализированного программного интерфейса для автоматизированного подбора составов, формированием базы данных оптимальных композиций и созданием методики интеграции в существующие технологические процессы. Внедрение методики диагностики состава полимерных композиционных материалов позволило сократить время на разработку рецептур состава материала на 90-95%. Затраты на проведения испытаний на растяжение снизились на 80-90%.

## Раздел 5. Экспериментальная апробация разработанных моделей и методики

### 5.1 Апробация математической модели определения свойств

Для апробации математической модели определения механических свойств полимерных композиционных материалов необходимо обозначить набор данных для обучения модели (табл. 14) и набор данных, для которых будут определяться свойства материалов (табл. 15), которые будет содержать данные о различных механических.

*Таблица 14 - Набор данных для обучения модели определения свойств*

№	Связующее	Наполнитель	Нап, Мас,%	Св, Масс,%	Максимальная нагрузка при испытании на растяжение, Н	Предел прочности при растяжении, мпа	Удлинение, %	Модуль упругости, Мпа	Плотность материала гр м3
1	СКТН А	AlN	67	33	49,7	0,90	0,24	3,83	2,48
2	СКТН А	AlN	74	26	54,9	0,91	0,24	3,72	2,32
3	СКТН А	AlN	50	50	18	0,48	0,23	2,09	1,88
4	СКТН А	AlN	50	50	13,2	0,49	0,25	1,93	1,88
5	СКТН А	AlN	40	60	10,9	0,42	0,21	1,94	1,63
6	СКТН А	кристобалит	50	50	23	0,25	0,26	0,95	1,48
7	СКТН А	кристобалит	60	40	11	0,24	0,19	1,31	1,53
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
146	СКТН А	прокаль	30	40	4,4	0,21	0,14	1,54	1,39
147	СКТН А	прокаль	70	30	43,6	1,01	0,26	3,90	1,44
148	СКТН А	прокаль	70	30	49,7	1,24	0,31	4,02	1,44
149	СКТН А	кварц Б	30	70	5,2	0,29	0,29	1,00	1,45
150	СКТН А	кварц Б	30	70	10,6	0,33	0,30	1,11	1,45
151	СКТН А	кварц Б	60	40	45,9	1,02	0,29	3,46	1,76
152	СКТН А	кварц Б	70	30	32,4	1,19	0,22	5,32	1,82
153	СКТН А	кварц Б	70	30	45,3	1,04	0,22	4,63	1,82
154	СКТН А	кварц Б	20	80	8,7	0,22	0,29	0,74	1,36
155	СКТН А	кварц Б	20	80	8,5	0,17	0,29	0,60	1,36

Таблица 15 – Набор данных для определения механических свойств

№	Наполнитель	Нап , мас, %	Св , масс, %	Плотность материала гр м3	Максимальная нагрузка при испытании на растяжение, Н
1	BN	30	70	2,21	40,5
2	AlN	50	50	1,88	14
3	AlN	40	60	1,63	19,9
4	AlN	40	60	1,63	27,1
5	AlN	60	40	2,17	18,3
6	AlN	60	40	2,17	29,2
7	AlN	30	70	1,36	9,3
8	AlN	74	26	2,32	77,5
9	BN	30	70	2,21	26,5
10	BN	40	60	2,40	34,3
11	BN	60	40	2,95	94,9
12	BN	50	50	2,68	96,7
13	BN	20	80	2,03	15,5
14	BN	20	80	2,03	11,2
15	BN	20	80	2,03	14,9
16	BN	20	80	2,03	16,1
17	Al(OH)3	40	60	1,76	25,8
18	Al(OH)3	40	60	1,76	26,6
19	Al(OH)3	30	70	1,60	23,1
20	Al(OH)3	70	30	2,17	37,6
21	Al(OH)3	70	30	2,17	37,4
22	Al(OH)3	70	30	2,17	51,5
23	Al(OH)3	70	30	2,17	46,8
24	Al(OH)3	20	80	1,88	12,5
25	Al(OH)3	50	50	1,88	27,3
26	Al(OH)3	50	50	1,88	24,4
27	Al(OH)3	50	50	1,88	25,2
28	воластонит	70	30	1,75	29,7
29	воластонит	70	30	1,75	17,1
30	кристобалит	20	80	1,39	19
31	кристобалит	70	30	1,58	57
32	прокаль	40	60	1,37	15,6
33	прокаль	50	50	1,42	15,4
34	кварц Б	70	30	1,82	74,5
35	кварц Б	70	30	1,82	64,1
36	кварц Б	40	60	1,59	17,2
37	кварц Б	40	60	1,59	28,8
38	кварц Б	40	60	1,59	28,7
39	кварц Б	40	60	1,59	27,4
40	кварц Б	60	40	1,76	41,7
41	кварц Б	70	30	1,82	46,2
42	кварц Б	70	30	1,82	37,7
43	кварц Б	70	30	1,82	48,2
44	кварц Б	70	30	1,82	81,6
45	кварц Б	70	30	1,82	59
46	кварц Б	50	50	1,68	28
47	кварц Б	60	40	1,76	18,3
48	кварц Б	60	40	1,76	17,6

### 5.1.1 Кластеризация набора данных

Для применения модели определения свойств полимерных композиционных материалов необходимо провести кластеризацию для группировки материалов по схожим характеристикам.

Рассчитаем сумму квадратов расстояний каждой точки данных до их центроида (WCSS) по формуле 22. Построим график зависимости WCSS от количества кластеров и используя «метод локтя» определим число кластеров  $k$  (рис.37).

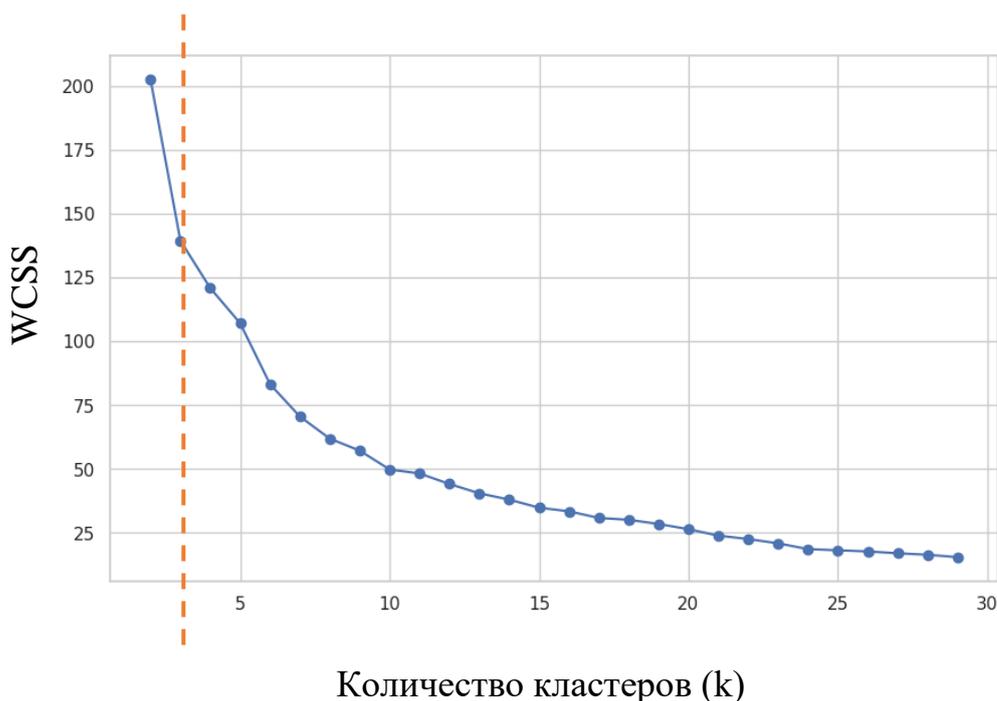


Рисунок 37 – Кластеризация набора данных

По графику определяем количество кластеров  $k = 3$  и визуализируем набор данных, обозначив центры кластеров (рис. 38).

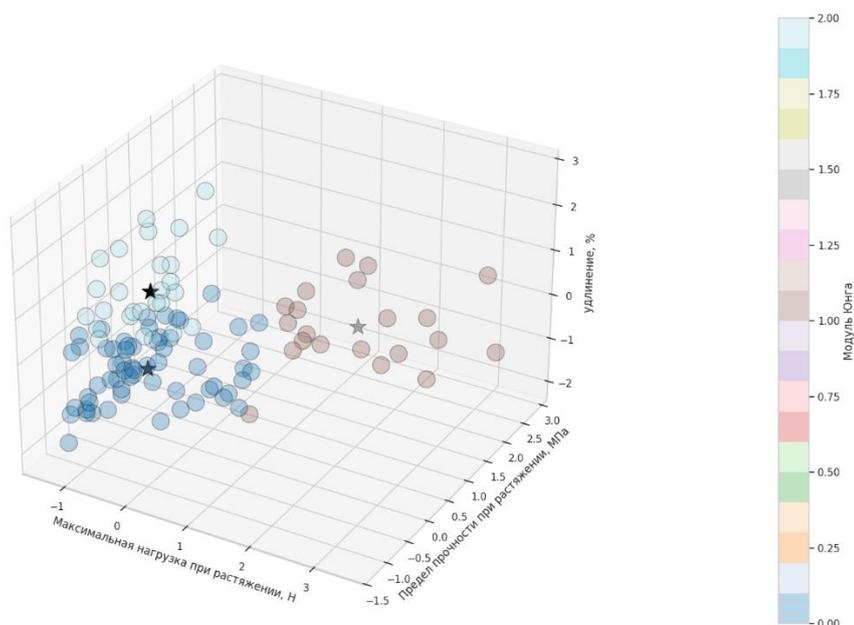


Рисунок 38 – Центры кластеров набора данных для обучения модели

Анализ кластеров:

Кластер 1. Максимальная нагрузка при испытании на растяжение = 23,075 Н. Низкая нагрузка на растяжение, что указывает на менее прочные материалы. Предел прочности при растяжении = 0,367 МПа. Низкая прочность на растяжение, что подтверждает низкую устойчивость к нагрузкам. Удлинение = 0,289%. Среднее удлинение, что указывает на некоторую эластичность. Модуль упругости = 1,319 МПа. Низкий модуль упругости, что говорит о низкой жесткости материала. Плотность материала = 1,813 г/см<sup>3</sup>. Средняя плотность, что указывает на умеренную массу при данном объеме.

Материалы в кластере 1 подойдут для применения, где требуется мягкость и некоторая эластичность, но не высокая прочность. Например, они могут использоваться в изделиях, требующих гибкости и мягкости, таких как подложки, уплотнители или мягкие покрытия.

Кластер 2. Максимальная нагрузка при испытании на растяжение = 50,283 Н. Средняя нагрузка на растяжение, что указывает на умеренную прочность материалов. Предел прочности при растяжении = 1,028 Мпа. Средняя прочность на растяжение, что подтверждает умеренную

устойчивость к нагрузкам. Удлинение = 0,246 %. Среднее удлинение, что указывает на некоторую эластичность.

Модуль упругости = 4,273 Мпа. Средний модуль упругости, что говорит о средней жесткости материала. Плотность материала = 1,888 г/см<sup>3</sup>. Средняя плотность, что указывает на умеренную массу при данном объеме. Материалы в кластере 2 подойдут для применения, где требуется умеренная прочность и жесткость. Они могут использоваться в конструктивных элементах, требующих баланса между прочностью и эластичностью, таких как рамы, корпуса или детали, подвергающиеся средним нагрузкам.

Кластер 3. Максимальная нагрузка при испытании на растяжение: 84,640 Н. Высокая нагрузка на растяжение, что указывает на высокую прочность материалов. Предел прочности при растяжении = 1,178 Мпа. Высокая прочность на растяжение, что подтверждает высокую устойчивость к нагрузкам. Удлинение = 0,242 %. Среднее удлинение, что указывает на некоторую эластичность. Модуль упругости = 5,218 Мпа. Высокий модуль упругости, что говорит о высокой жесткости материала. Плотность материала = 2,716 г/см<sup>3</sup>. Высокая плотность, что указывает на большую массу при данном объеме. Материалы в кластере 3 подойдут для применения, где требуется высокая прочность, жесткость и умеренная эластичность. Они могут использоваться в конструктивных элементах, требующих высокой прочности и жесткости, таких как рамы, корпуса или детали, подвергающиеся высоким нагрузкам, например, в автомобильной или авиационной промышленности.

По формуле 24 определим коэффициент силуэта  $S_{(x_i)}$ .

Коэффициент силуэта  $S_{(x_i)} = 0,42$ , качество кластеризации можно считать умеренным, объекты в кластерах имеют некоторую степень схожести, но есть и значительное количество объектов, которые могут находиться на границе между кластерами.

### 5.1.2 Применение линейной регрессии для определения свойств полимерных композиционных материалов

Определим для материалов из таблицы 13 значения предела прочности при растяжении, удлинения и модуль упругости.

Представим строку первую строку с максимальным напряжением при разрыве = 40,5 Н и плотностью = 2,2 гр/м<sup>3</sup> в виде вектора, прочерками обозначим недостающие значения предела прочности при растяжении, удлинения и модуля упругости соответственно:

$$[40,5 \quad - \quad - \quad - \quad 2,2]$$

С помощью кластеризации определим пять схожих векторов и запишем в виде матрицы:

$$\begin{bmatrix} 36 & 0,27 & 0,34 & 0,78 & 2,21 \\ 24,1 & 0,17 & 0,4 & 0,43 & 1,76 \\ 23,5 & 0,38 & 0,47 & 0,82 & 1,95 \\ 29,2 & 0,29 & 0,28 & 0,92 & 2,17 \\ 40,5 & - & - & - & 2,2 \end{bmatrix}$$

Поочередно найдем значения предела прочности при растяжении, удлинения и модуля упругости с помощью линейной регрессии.

Для применения линейной регрессии необходимо определить зависимую ( $y$ ) и независимые  $x_1$ ,  $x_2$  переменные,

$y$ - Предел прочности при растяжении, МПа

$x_1$ - максимальное напряжение при разрыве, Н

$x_2$ - плотность, гр/м<sup>3</sup>

составим матрицу:

$$\begin{bmatrix} 36 & 0,27 & 2,21 \\ 24,1 & 0,17 & 1,76 \\ 23,5 & 0,38 & 1,95 \\ 29,2 & 0,29 & 2,17 \\ 40,5 & - & 2,2 \end{bmatrix}$$

Подставим известные значения в формулу 26. Модель линейной регрессии может быть представлена как:

$$y = \beta_0 + \beta_1 \cdot 40,5 + \beta_2 \cdot 2,2$$

Определение коэффициентов регрессии проводится на основе тех векторов, где все значения свойств известны.

Используем только строки с известными значениями, создаем матрицу для независимых переменных  $x$ , добавляя еще один столбец единиц для учета свободного члена и вектора для зависимой переменной  $y$ ,

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 36 & 2,21 \\ 1 & 24,1 & 1,76 \\ 1 & 23,5 & 1,95 \\ 1 & 29,2 & 2,17 \end{bmatrix}$$

$$y = \begin{bmatrix} 0,27 \\ 0,17 \\ 0,38 \\ 0,29 \end{bmatrix}$$

Коэффициенты регрессии рассчитываются по формуле 31, для их определения необходимо вычислить  $X^T X^{-1} \cdot X^T Y$

$$X^T X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 36 & 24,1 & 23,5 & 29,2 \\ 2,21 & 1,76 & 1,95 & 2,17 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 36 & 2,21 \\ 1 & 24,1 & 1,76 \\ 1 & 23,5 & 1,95 \\ 1 & 29,2 & 2,17 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 112,8 & 8,09 \\ 112,8 & 3281,7 & 231,165 \\ 8,09 & 231,165 & 16,49 \end{bmatrix},$$

$$X^T X^{-1} = \begin{bmatrix} 14,4372 & 0,2021 & -10,2912 \\ 0,2021 & 0,0468 & -0,7883 \\ -10,2912 & -0,7883 & 16,829 \end{bmatrix}$$

$$X^T Y = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 36 & 24,1 & 23,5 & 29,2 \\ 2,21 & 1,76 & 1,95 & 2,17 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0,27 \\ 0,17 \\ 0,38 \\ 0,29 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1,11 \\ 31,215 \\ 2,2662 \end{bmatrix},$$

$$X^T X^{-1} \cdot X^T Y = \begin{bmatrix} 14,4372 & 0,2021 & -10,2912 \\ 0,2021 & 0,0468 & -0,7883 \\ -10,2912 & -0,7883 & 16,829 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1,11 \\ 31,215 \\ 2,2662 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,4228 \\ 0,00839 \\ -0,1977 \end{bmatrix}$$

Подставим значения коэффициентов в уравнение линейной регрессии

$$y = 0,4228 + 0,00839 \cdot 40,5 + (-0,1977) \cdot 2,2 = 0,328$$

Прогнозируемое значение предела прочности при растяжении = 0,328 Мпа

Таким же образом определим остальные показатели:

Удлинение = 0,39 %:

Модуль упругости = 0,83 Мпа

Результаты определения свойств полимерных композиционных материалов приведены в таблице 16.

*Таблица 16- Результаты определения свойств полимерных композиционных материалов с помощью математической модели*

№	Предел прочности при растяжении, мпа	Удлинение, %	Модуль упругости, Мпа
1	0,8	0,19	3,347352
2	0,22	0,227802	0,819729
3	0,26	0,3247	0,821275
4	0,31	0,340405	0,967983
5	0,243	0,286	0,876
6	0,2892	0,2798	0,92763
7	0,2056	0,2646	0,7727
8	0,32565	0,392193	0,82721
9	0,21	0,29	1
10	0,81	0,28	3
11	1,21	0,29	3,43
12	1,34	0,23	5,55
13	0,36	0,26	1,37
14	0,91	0,21	0,63
15	0,21	0,34	0,75
16	0,15	0,37	0,6
17	0,49	0,35	1,1
18	0,26	0,37	1
19	0,32	0,26	1,1
20	0,38	0,31	1,55
21	0,52	0,23	2,35
22	0,41	0,31	1,7
23	0,51	0,28	2
24	0,175	0,19	0,95
25	0,29	0,4	1,3
26	0,54	0,31	2,2
27	0,39	0,31	1,8
28	0,33	0,4	1
29	0,41	0,31	1,3
30	0,71	0,23	2,6
31	1,61	0,21	7,15
32	0,29	0,40	0,79
33	0,61	0,27	2,1
34	0,93	0,25	3,8

Продолжение таблицы 16

35	1,13	0,21	4,5
36	0,61	0,45	1,31
37	0,47	0,4	1
38	0,72	0,51	1,5
39	0,61	0,41	1,18
40	0,81	0,31	3
41	1,52	0,25	6,1
42	1,21	0,23	4,85
43	0,72	0,27	3,7
44	1,11	0,26	3,71
45	1,17	0,32	3,4
46	0,75	0,29	2,41
47	0,31	0,28	1,1
48	0,39	0,22	1,31

*5.1.3 Проведение испытаний на растяжение*

Для подтверждения достоверности результатов свойств полимерных композиционных материалов, полученных с помощью математической модели, проведем испытания этих материалов на растяжение.

ГОСТ 11262-2017 (ISO 527-2:2012) «Пластмассы. Метод испытания на растяжение» [29] устанавливает требования к проведению испытаний полимерных композиционных материалов. Определение показателей прочности и упругости проводилось с помощью испытательной машины МЕГЕОН-03000 (рис.39)



*Рисунок 39 – Испытательный стенд МЕГЕОН-03000*

Для испытания использовалось пять образцов на каждый состав материала. Длина образца составляла 170 мм, ширина 20 мм, толщина 2 мм. Поперечное сечение  $A=80 \text{ мм}^2$ .

Результаты измерений образцов с мелкодисперсными наполнителями при испытаниях на растяжение с помощью испытательного стенда МEGEON-03000 представлены в таблице 17 [148-149].

Таблица 17 – Результаты проведения испытаний на растяжение

№	Наполнитель	Нап , мас, %	Св , масс, %	Плотность материала гр м3	Максимальная нагрузка при испытании на растяжение, Н	Предел прочности при рпастяжении, МПа	Удлинение, %	Модуль упругости, Мпа
1	AlN	74	26	2,32	77,5	1,19	0,168	7,08
2	AlN	50	50	1,88	14	0,22	0,243	0,91
3	AlN	40	60	1,63	19,9	0,45	0,312	1,45
4	AlN	40	60	1,63	27,1	0,39	0,372	1,04
5	AlN	60	40	2,17	18,3	0,51	0,205	2,48
6	AlN	60	40	2,17	29,2	0,32	0,188	1,68
7	AlN	30	70	1,36	9,3	0,25	0,210	1,20
8	BN	30	70	2,21	40,5	0,30	0,352	0,85
9	BN	30	70	2,21	26,5	0,28	0,318	0,88
10	BN	40	60	2,4	34,3	0,78	0,260	3,01
11	BN	60	40	2,95	94,9	1,20	0,353	3,40
12	BN	50	50	2,68	96,7	1,24	0,228	5,43
13	BN	20	80	2,03	15,5	0,38	0,280	1,34
14	BN	20	80	2,03	11,2	0,12	0,220	0,54
15	BN	20	80	2,03	14,9	0,22	0,314	0,70
16	BN	20	80	2,03	16,1	0,19	0,387	0,49
17	Al(OH)3	40	60	1,76	25,8	0,42	0,404	1,04
18	Al(OH)3	40	60	1,76	26,6	0,26	0,357	0,73
19	Al(OH)3	30	70	1,6	23,1	0,27	0,259	1,03
20	Al(OH)3	70	30	2,17	37,6	0,40	0,268	1,48

Продолжение таблицы 17

21	Al(OH)3	70	30	2,17	37,4	0,49	0,215	2,28
22	Al(OH)3	70	30	2,17	51,5	0,40	0,272	1,47
23	Al(OH)3	70	30	2,17	46,8	0,52	0,261	1,99
24	Al(OH)3	20	80	1,88	12,5	0,17	0,207	0,84
25	Al(OH)3	50	50	1,88	27,3	0,32	0,311	1,02
26	Al(OH)3	50	50	1,88	24,4	0,58	0,289	2,01
27	Al(OH)3	50	50	1,88	25,2	0,49	0,283	1,74
28	воластонит	70	30	1,75	29,7	0,30	0,374	0,81
29	воластонит	70	30	1,75	17,1	0,33	0,264	1,25
30	кристобалит	20	80	1,39	19	0,58	0,241	2,39
31	кристобалит	70	30	1,58	57	1,40	0,197	7,09
32	прокаль	40	60	1,37	15,6	0,36	0,421	0,87
33	прокаль	50	50	1,42	15,4	0,56	0,265	2,13
34	кварц Б	70	30	1,82	74,5	0,89	0,238	3,73
35	кварц Б	70	30	1,82	64,1	1,00	0,227	4,41
36	кварц Б	40	60	1,59	17,2	0,53	0,419	1,26
37	кварц Б	40	60	1,59	28,8	0,42	0,379	1,11
38	кварц Б	40	60	1,59	28,7	0,68	0,473	1,44
39	кварц Б	40	60	1,59	27,4	0,52	0,436	1,20
40	кварц Б	60	40	1,76	41,7	0,76	0,278	2,73
41	кварц Б	70	30	1,82	46,2	1,43	0,240	5,95
42	кварц Б	70	30	1,82	37,7	1,08	0,224	4,80
43	кварц Б	70	30	1,82	48,2	0,86	0,234	3,68
44	кварц Б	70	30	1,82	81,6	1,07	0,294	3,66
45	кварц Б	70	30	1,82	59	1,18	0,318	3,72
46	кварц Б	50	50	1,68	28	0,73	0,306	2,39
47	кварц Б	60	40	1,76	18,3	0,26	0,266	0,99
48	кварц Б	60	40	1,76	17,6	0,36	0,278	1,29

В таблице 18 приведено сравнение результатов испытаний и значений, определенных с помощью математической модели.

*Таблица 18- Сравнение результатов испытаний полимерных композиционных материалов со значениями, определенными с помощью математической модели*

№	Предел прочности при растяжении, мПа	Удлинение, %	Модуль упругости, МПа	Спрогнозированные значения Предел прочности при растяжении, мПа	Спрогнозированные значения Удлинение, %	Спрогнозированные значения модуля упругости, МПа
1	1,1899	0,17	7,08	0,8	0,19	3,34
2	0,2222	0,24	0,91	0,22	0,22	0,81
3	0,4523	0,31	1,45	0,26	0,32	0,82
4	0,3871	0,37	1,04	0,31	0,3	0,96
5	0,5083	0,20	2,48	0,24	0,28	0,87
6	0,3160	0,19	1,68	0,28	0,27	0,92
7	0,2531	0,21	1,20	0,20	0,26	0,77
8	0,3000	0,35	0,85	0,32	0,39	0,82
9	0,2804	0,32	0,88	0,21	0,29	1
10	0,7840	0,26	3,01	0,81	0,28	3
11	1,1982	0,35	3,40	1,21	0,29	3,43
12	1,2397	0,23	5,43	1,34	0,23	5,55
13	0,3758	0,28	1,34	0,36	0,26	1,37
14	0,1179	0,22	0,54	0,91	0,21	0,63
15	0,2183	0,31	0,70	0,21	0,34	0,75
16	0,1883	0,39	0,49	0,15	0,37	0,6
17	0,4212	0,40	1,04	0,49	0,35	1,1
18	0,2608	0,36	0,73	0,26	0,37	1
19	0,2674	0,26	1,03	0,32	0,26	1,1
20	0,3958	0,27	1,48	0,38	0,31	1,55
21	0,4921	0,22	2,28	0,52	0,23	2,35
22	0,3998	0,27	1,47	0,41	0,31	1,7
23	0,5200	0,26	1,99	0,51	0,28	2
24	0,1736	0,21	0,84	0,175	0,19	0,95
25	0,3174	0,31	1,02	0,29	0,4	1,3
26	0,5810	0,29	2,01	0,54	0,31	2,2
27	0,4917	0,28	1,74	0,39	0,31	1,8
28	0,3046	0,37	0,81	0,33	0,4	1
29	0,3288	0,26	1,25	0,41	0,31	1,3
30	0,5758	0,24	2,39	0,71	0,23	2,6
31	1,3971	0,20	7,09	1,61	0,21	7,15
32	0,3649	0,42	0,87	0,29	0,40	0,79

Продолжение таблицы 18

33	0,5641	0,27	2,13	0,61	0,27	2,1
34	0,8885	0,24	3,73	0,93	0,25	3,8
35	1,0031	0,23	4,41	1,13	0,21	4,5
36	0,5284	0,42	1,26	0,61	0,45	1,31
37	0,4220	0,38	1,11	0,47	0,4	1
38	0,6814	0,47	1,44	0,72	0,51	1,5
39	0,5219	0,44	1,20	0,61	0,41	1,18
40	0,7582	0,28	2,73	0,81	0,31	3
41	1,4259	0,24	5,95	1,52	0,25	6,1
42	1,0771	0,22	4,80	1,21	0,23	4,85
43	0,8629	0,23	3,68	0,72	0,27	3,7
44	1,0737	0,29	3,66	1,11	0,26	3,71
45	1,1812	0,32	3,72	1,17	0,32	3,4
46	0,7320	0,31	2,39	0,75	0,29	2,41
47	0,2624	0,27	0,99	0,31	0,28	1,1
48	0,3592	0,28	1,29	0,39	0,22	1,31

Проведенный сравнительный анализ экспериментальных и спрогнозированных значений механических характеристик полимерных композиционных материалов (предела прочности при растяжении, удлинения и модуля упругости) демонстрирует высокую точность разработанной прогностической модели. Наблюдается хорошая корреляция между фактическими и предсказанными значениями для большинства образцов, что подтверждается коэффициентом детерминации  $R^2 > 0,95$  для всех трех параметров (таблица 19).

Таблица 19- Точность определения механических свойств, полученных с помощью математической модели

Параметр	Предел прочности при растяжении (МПа)	Удлинение (%)	Модуль упругости (МПа)
MAE	0,082	0,023	0,147
MSE	0,012	0,0009	0,043
RMSE	0,110	0,030	0,207
MAPE (%)	12,3	8,7	5,2
$R^2$	0,963	0,951	0,982

Полученные результаты подтверждают эффективность применения математического моделирования для прогнозирования механических свойств

полимерных композиционных материалов и открывают перспективы для дальнейшей оптимизации исследовательских процессов в материаловедении.

## **5.2 Апробация автоматизированной модели определения состава полимерных композиционных материалов**

Для проведения апробации автоматизированной модели определения состава полимерных композиционных материалов необходимо обозначить свойства, которыми должен обладать итоговый полимерный композиционный материал: материал должен быть легким, плотность 1-1,5 г/см<sup>3</sup>, материал должен быть диэлектриком, пределом прочности при разрыве более 200 МПа обладать удлинением при разрыве более 10 %, модуль Юнга более 1,5 Гпа.

С помощью автоматизированной модели определим 5 материалов, с подходящими нам свойствами (таблица 20)

*Таблица 20 – Результаты определения состава полимерного композиционного материала, с помощью автоматизированной модели определения состава полимерных композиционных материалов*

Полимерный композиционный материал	Плотность, г/см <sup>3</sup>	Удельное поверхностное сопротивление, Ом м	Предел прочности при растяжении, МПа	Предел прочности при разрыве	Деформация (удлинение), %	Модуль упругости Юнга, МПа
PC_MWCNT mass.% 99/1	1,2	1 250 000 000	58	314	20	1570
PC_MWCNT mass.% 95/5	1,2	100 000 000	61	231	15	1540
PC_MWCNT mass.% 98/2	1,2	33 333 333,33	62	331,8	21	1580
PC_MWCNT 99/1 mass.%	1,21	2000	61	71	4,96	1431
PC_MWCNT mass.% 99.8/0.2	1,2	0,33	60	189,8	13	1460

Из представленных моделью вариантов нам подходят первые три материала: PC\_MWCNT mass.% 99/1, PC\_MWCNT mass.% 95/5, PC\_MWCNT mass.% 98/2.

Для подтверждения достоверности результатов проведем испытания на растяжение и испытания на определение удельного объемного сопротивления

материалов PC\_MWCNT mass.% 99/1, PC\_MWCNT mass.% 95/5, PC\_MWCNT mass.% 98/2.

В исследовании использовался поликарбонат Бисфенол А поликарбонат (BPA-PC) с добавлением многостенных углеродных нанотрубок MWCNT-5.

### 5.2.1 Испытания на растяжение

Испытания на растяжение проводились в соответствии с ГОСТ 11262-2017 [29]. Было изготовлено по 5 образцов на один материал изготовленных прессованием. Образцы кондиционировались в течение суток при температуре 24°C и относительной влажности 53%. Исследование проводилось на измерительном стенде МЕГЕОН-03000 (рис. 33). Длина образца составляла 170 мм, ширина 20 мм, толщина 2 мм. Поперечное сечение  $A=80\text{мм}^2$ .

Таблица 21-Результаты исследования механических свойств материалов

Образец №	Наименование материала	Максимальная нагрузка при испытании на растяжение, Н	Предел прочности при разрыве, МПа	Удлинение образца, мм	Удлинение, %	Модуль упругости, МПа
1	PC_MWCNT mass.% 99/1	25350	316,8	33	19,4	1632,3
2	PC_MWCNT mass.% 99/1	24953	311,9	34,5	20,3	1536,9
3	PC_MWCNT mass.% 99/1	25300	316,2	35	20,6	1536
4	PC_MWCNT mass.% 99/1	24980	312,2	33,5	19,7	1584,5
5	PC_MWCNT mass.% 99/1	25350	316,8	33	19,4	1632,4
6	PC_MWCNT mass.% 95/5	18450	230,6	26,1	15,4	1502,2
7	PC_MWCNT mass.% 95/5	18700	233,7	25,8	15,2	1540,2
8	PC_MWCNT mass.% 95/5	17983	224,7	25	14,7	1528,6
9	PC_MWCNT mass.% 95/5	18153	226,9	23,9	14,1	1614,0
10	PC_MWCNT mass.% 95/5	18683	233,5	27	15,9	1470,4
11	PC_MWCNT mass.% 98/2	26550	331,8	35,6	20,9	1584,8
12	PC_MWCNT mass.% 98/2	26610	332,6	34,7	20,4	1629,5
13	PC_MWCNT mass.% 98/2	26300	328,7	33,9	19,9	1648,6
14	PC_MWCNT mass.% 98/2	25960	324,5	38	22,3	1451,7
15	PC_MWCNT mass.% 98/2	26100	326,25	34	20	1631,2

- Значения для материала PC\_MWCNT mass.% 99/1 предела прочности при разрыве = 314,8 Мпа, удлинение = 19,8 %, модуль упругости = 1584,5 МПа.
- Значения для материала PC\_MWCNT mass.% 95/5 предела прочности при разрыве = 229,9 Мпа, Удлинение = 15,1% Модуль упругости = 1531 МПа.
- Значения для материала PC\_MWCNT mass.% 98/2 предела прочности при разрыве = 328,8 Мпа, Удлинение = 20,7% Модуль упругости = 1589,2 МПа.

### 5.2.2 Испытания для определения электрических сопротивлений

Испытания проводились в соответствии ГОСТ Р 50499-93 (МЭК 93-80) [29]. Электрическое сопротивление измерялось помощью прибора Тераомметр Е6-13А.

Тераомметр Е6-13А (рисунок 40) предназначен для измерения сопротивления по постоянному току в диапазоне от 10 до  $10^{14}$  Ом, а также может быть применен для определения силы постоянного тока в диапазоне от  $10^{-4}$  до  $10^{-12}$  А с ненормированной погрешностью.



Рисунок 40 – Тераомметр Е6-13А

Для проведения исследований и определения электрических сопротивлений необходимо разработать и изготовить специальную конструкцию, состоящую из двух электродов (кольцевого и измерительного), обеспечивающую достаточное прижимное усилие к поверхности испытуемого

образца (около 100 г/см<sup>2</sup>), чтобы избежать образование проводящих дорожек, которые могут отрицательно повлиять на результаты измерений, а также третий электрод в виде сплошного диска, на который будет помещен исследуемый материал. В качестве основы при разработке электродов использовался рассмотренный электрод FE 50 (рис. 41).



*Рисунок 41– Электрод FE 50 для измерения объемного и поверхностного сопротивления*

Толщина образцов составляла 5 мм. Диаметр электрода 50 мм. Эффективная площадь измерительного электрода (А) 2375 мм<sup>2</sup>.

Результаты измерений удельного объемного сопротивления приведены в таблице 22.

*Таблица 22-Результаты измерений удельного объемного сопротивления*

Образец №	Наименование материала	Сопротивление, Ом	Удельное объемное сопротивление, Ом/м
1	PC_MWCNT mass.% 99/1	2631571	1249996225
2	PC_MWCNT mass.% 99/1	2635571	1251896225
3	PC_MWCNT mass.% 99/1	2631571	1249996225
4	PC_MWCNT mass.% 99/1	2631671	1250043725
5	PC_MWCNT mass.% 99/1	2632300	1250342500
6	PC_MWCNT mass.% 95/5	210535	100004125
7	PC_MWCNT mass.% 95/5	211700	100557500
8	PC_MWCNT mass.% 95/5	220300	104642500
9	PC_MWCNT mass.% 95/5	210500	99987500
10	PC_MWCNT mass.% 95/5	210000	99750000
11	PC_MWCNT mass.% 98/2	70180	33335500
12	PC_MWCNT mass.% 98/2	70300	33392500
13	PC_MWCNT mass.% 98/2	69850	33178750
14	PC_MWCNT mass.% 98/2	71003	33726425
15	PC_MWCNT mass.% 98/2	70500	33487500

Измеренные значения удельного объемного сопротивления:

- для материала PC\_MWCNT mass.% 99/1 = 1250454980 Ом/м;
- для материала PC\_MWCNT mass.% 95/5 = 100988325 Ом/м;
- для материала PC\_MWCNT mass.% 98/2 = 33424135 Ом/м;

Сравнительный анализ прогнозируемых и экспериментально полученных характеристик полимерных композиционных материалов на основе поликарбоната с многостенными углеродными нанотрубками (PC/MWCNT) демонстрирует высокую степень корреляции между теоретическими расчетами и практическими измерениями.

Для материала PC\_MWCNT массовой долей 99/1 наблюдается практически полное совпадение прогнозируемого удельного поверхностного сопротивления ( $1,25 \cdot 10^9$  Ом·м) с экспериментальным значением объемного сопротивления ( $1,25045 \cdot 10^9$  Ом/м), относительная погрешность составляет лишь 0,036%. Анализ механических свойств также выявил минимальные отклонения: предел прочности при разрыве составил 314 МПа (прогноз) против 314,8 МПа (эксперимент), что соответствует относительной погрешности 0,25%. Деформация при разрыве прогнозировалась на уровне 20%, тогда как фактическое значение достигло 19,8% (погрешность 1,01%). Модуль упругости Юнга оказался несколько выше расчетного (1584,5 МПа против 1570 МПа), однако расхождение не превысило 0,92%, что свидетельствует о высокой точности модели.

В случае материала PC\_MWCNT массовой долей 95/5 прогнозируемое значение удельного сопротивления ( $1,00 \cdot 10^8$  Ом·м) практически совпало с измеренным ( $1,00988 \cdot 10^8$  Ом/м), демонстрируя погрешность менее 1% (0,98%). Механические характеристики также показали высокую степень согласованности: предел прочности при разрыве составил 231 МПа (прогноз) и 229,9 МПа (эксперимент), с относительной погрешностью 0,48%. Удлинение при разрыве составило 15% (прогноз) против 15,1% (эксперимент), погрешность 0,66%. Модуль упругости оказался на 0,59% ниже расчетного

(1531 МПа против 1540 МПа), что находится в пределах допустимой статистической погрешности.

Для композиционного материала PC\_MWCNT массовой долей 98/2 также зафиксирована высокая точность прогноза. Удельное сопротивление отличалось от экспериментального значения всего на 0,27% ( $33,33 \cdot 10^6$  Ом·м против  $33,42 \cdot 10^6$  Ом/м). Предел прочности при разрыве составил 331,8 МПа (прогноз) и 328,8 МПа (эксперимент), с погрешностью 0,91%. Деформация при разрыве прогнозировалась на уровне 21%, тогда как фактическое значение составило 20,7%, что соответствует относительной погрешности 1,45%. Модуль упругости Юнга оказался близок к расчетному (1589,2 МПа против 1580 МПа), с отклонением всего 0,58%.

Таким образом, проведенный сравнительный анализ подтверждает высокую точность прогнозирования физико-механических свойств исследуемых композиционных материалов. Наибольшая согласованность наблюдается для электрофизических характеристик (отклонения не превышают 1%), что особенно важно для применения данных материалов в электротехнических и электронных устройствах. Механические свойства также предсказаны с высокой точностью, при этом максимальная погрешность не превышает 1,5%, что свидетельствует о высокой надежности использованной модели. Полученные результаты позволяют сделать вывод о возможности эффективного применения математического моделирования для прогнозирования свойств полимерных нанокомпозитов без необходимости проведения трудоемких экспериментальных исследований.

### **Выводы по 5 разделу**

Проведенное сравнение расчетных и фактических характеристик полимерных композиционных материалов на основе поликарбоната с углеродными нанотрубками демонстрирует высокую степень соответствия между модельными и экспериментальными значениями. Наибольшая точность прогноза наблюдается для электрофизических характеристик - отклонения по удельному объемному сопротивлению не превышают 0,5% для

всех исследованных составов. В частности, для материала с содержанием 1% MWCNT модельное значение  $1,25 \cdot 10^9$  Ом·м практически идентично экспериментальному показателю  $1,25045 \cdot 10^9$  Ом·м.

Механические характеристики также показывают хорошую сходимость с прогнозируемыми параметрами. Для полимерного композиционного материала с 2% нанотрубок расхождение по пределу прочности при разрыве составляет менее 1% (331,8 МПа в модели против 328,8 МПа в эксперименте), а по модулю упругости - около 0,6% (1580 МПа против 1589,2 МПа). Аналогичная картина наблюдается и для других составов: отклонения по деформационным характеристикам не превышают 2%, что находится в пределах допустимой погрешности для материалов такого класса.

Особого внимания заслуживает поведение полимерного композиционного материала с 5% MWCNT, где модельные значения несколько завышают прочностные характеристики (231 МПа против 229,9 МПа) и занижают деформационные свойства (15% против 15,1%). Эти незначительные расхождения могут быть связаны с особенностями распределения нанотрубок в полимерной матрице при повышенных концентрациях. Тем не менее, даже в этом случае погрешность прогноза не превышает 1%, что подтверждает высокую надежность разработанной модели.

## Заключение

В диссертационной работе изложено новое научно обоснованное техническое решение совершенствование диагностики состава полимерных композиционных материалов с заданными механическими свойствами при сохранении электрических характеристик. Разработанные модели и методики позволяют существенно сократить трудоемкость и финансовые затраты на проведение испытаний, повысить надежность изделий и обеспечить экологическую безопасность окружающей среды.

1. Разработанная математическая модель определения механических и электрических свойств полимерных композиционных материалов продемонстрировала высокую эффективность при работе с данными полимерных композиционных материалов, позволила определять значения свойств полимерных композиционных материалов и сократить число экспериментов на 35%, обеспечивая экономию 80% времени.

2. Внедрение информационной модели определения состава полимерного композиционного материала позволило сократить сроки подбора оптимального состава полимерного композиционного материала с 2 месяцев до 2 недель. Достигнуто ускорение процесса определения состава на 84-88%. Модель позволяет сократить объем лабораторных исследований на 60-62%.

3. Внедрение методики повышения диагностики состава полимерных композиционных материалов позволило сократить время на разработку рецептур состава материала на 90-95%. Затраты на проведения испытаний на растяжение снизились на 80-90%.

Полученные результаты соответствуют пунктам 1, 4 и 7 паспорта специальности 2.2.8 «Методы и приборы контроля и диагностики материалов, изделий, веществ и природной среды» и вносят существенный вклад в развитие цифрового материаловедения. Разработанные подходы открывают новые возможности для ускоренного проектирования полимерных композиционных материалов с заданными свойствами, что имеет важное

значение для различных отраслей промышленности, включая аэрокосмическую, электротехническую и автомобильную индустрию.

## Список литературы

1. Указ Президента Российской Федерации от 07.05.2024 г. № 309 «О национальных целях развития Российской Федерации на период до 2030 года и на перспективу до 2036 года» // Официальные сетевые ресурсы Президента России URL: <http://www.kremlin.ru/acts/bank/50542/page/1> (дата обращения: 03.02.2025).
2. 8 национальных проектов по обеспечению технологического лидерства // Аналитический центр при Правительстве Российской Федерации URL: <https://ac.gov.ru/news/page/sformirovany-8-nacionalnyh-proektov-po-obespeceniu-tehnologiceskogo-liderstva-27954> (дата обращения: 03.02.2025).
3. Большие вызовы и приоритеты научно-технологического развития РФ // Научно-техническое развитие Российской федерации. URL: <https://xn--m1agf.xn--p1ai/challenges-priorities/> (дата обращения: 03.02.2025).
4. Кауфман А. М., Когтев Н. А. ВЫСОКОПРОЧНЫЕ ПОЛИМЕРНЫЕ КОМПОЗИТЫ //ББК 2/8 И 88. – 2023. – С. 133.
5. Шереметьев С. В. и др. Использование полиэфирэфиркетона в медицине и других отраслях промышленности. Обзор //Вестник Казанского технологического университета. – 2012. – Т. 15. – №. 20. – С. 164-167.
6. Бикша Д. Использование композитных материалов в оборонной промышленности и аэрокосмической индустрии //Вестник электроники. – 2014. – №. 1. – С. 47.
7. Национальный проект “Технологическое лидерство” // Национальные проекты России URL: <https://xn--80aarpmpemcchfmo7a3c9ehj.xn--p1ai/new-projects/ekologicheskoe-blagopoluchie/> (дата обращения: 03.02.2025).
8. Указ Президента Российской Федерации от 09.05.2017 г. № 203. О Стратегии развития информационного общества в Российской Федерации на 2017 – 2030 годы. // Официальные сетевые ресурсы Президента России URL: <http://www.kremlin.ru/acts/bank/41919> (дата обращения: 10.02.2025).

9. Данилова С. Н. и др. Износостойкие полимерные композиционные материалы с улучшенным межфазовым взаимодействием в системе «Полимер-волокно» //Вестник Северо-Восточного федерального университета им. МК Аммосова. – 2016. – №. 5 (55). – С. 80-92.

10. Каюмов Р. А. и др. О задаче деградации композитных балок при продольном изгибе и методе решения при больших перемещениях //Ученые записки Казанского университета. Серия Физико-математические науки. – 2024. – Т. 166. – №. 3. – С. 364-376.

11. Новоженин Н. А., Курнаев Д. А. Сравнение аддитивных и композитных материалов: перспективы прикладного использования //Вестник науки. – 2025. – Т. 3. – №. 1 (82). – С. 1100-1107.

12. Бохоева Л. А., Пнев А. Г., Чермошенцева А. С. Испытание на прочность кольцевых образцов из слоистых композиционных материалов с межслойными дефектами //Вестник Бурятского государственного университета. Математика, информатика. – 2011. – №. 9. – С. 230-236.

13. Бохоева Л. А., Новосельцев П. В., Курохтин В. Ю. Влияние предварительного напряжения волокон на прочность полимерного композиционного материала //Вестник Восточно-Сибирского государственного университета технологий и управления. – 2023. – №. 4 (91). – С. 74-86.

14. Новосельцев П. В. и др. Экспериментальное исследование влияния предварительного напряжения наполнителя на механические свойства полимерного композиционного материала //Вестник Восточно-Сибирского государственного университета технологий и управления. – 2023. – №. 4 (91). – С. 65-73.

15. Васильков М. Ю. и др. Получение полимерных композиционных материалов, обладающих электретными свойствами, и изучение их электрических свойств //Вестник Саратовского государственного технического университета. – 2014. – Т. 2. – №. 1. – С. 72-76.

16. Тунеков Т. А. и др. Разработка растяжимых электродных матриц для электромиографии и инвазивных нейроинтерфейсов //LIFT Школа молодого нейротехнолога: тезисы участников конференции (26–27 апреля 2024 г.). – Общество с ограниченной ответственностью «Квант Медиа», 2024. – Т. 1. – С. 167-169.
17. Мурашов В. В. и др. Диагностика структуры, состава и свойств полимерных композиционных материалов //Авиационные материалы и технологии. – 2008. – №. 1 (6). – С. 17-24.
18. Чертищев В. Ю. и др. Оценка глубины залегания дефектов в многослойных сотовых конструкциях из пкм при импедансном контроле серийными дефектоскопами //Труды ВИАМ. – 2022. – №. 12 (118). – С. 107-120.
19. Tao L., Chen G., Li Y. Machine learning discovery of high-temperature polymers //Patterns. – 2021. – Т. 2. – №. 4.
20. Breuer K., Stommel M. RVE modelling of short fiber reinforced thermoplastics with discrete fiber orientation and fiber length distribution //SN applied Sciences. – 2020. – Т. 2. – С. 1-13.
21. ГОСТ 32794-2014 Межгосударственный стандарт. Композиты полимерные. Термины и определения. (Утвержден и введен в действие Приказом Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии от 15 октября 2014 г. № 1333-ст)// М.: Стандартинформ, 2015.
22. Дориомедов М. С. Российский и мировой рынок полимерных композитов (обзор) //Труды Виам. – 2020. – №. 6-7 (89). – С. 29-37.
23. Краткий обзор мирового и отечественного рынка полимерных композитных материалов // Журнал «НОЗС» URL: <https://dfnc.ru/marketing/kratkij-obzor-mirovogo-i-otchestvennogo-rynka-polimernyh-kompozitnyh-materialov/> (дата обращения: 15.02.2025).
24. Полиэфирные смолы и композитные материалы // "Дугалак Азия" URL: <https://dugalak.kz/poleznaya-informatsiya/view/rynok-kompozitnyh-materialov-stremitelno-rastet> (дата обращения: 15.02.2025).

25. Россия. Производство первичных базовых полимеров в 2024 году // PLASTINFO URL: [https://plastinfo.ru/information/news/54978\\_17.03.2025/](https://plastinfo.ru/information/news/54978_17.03.2025/) (дата обращения: 20.03.2025).

26. Кербер М. Л. и др. Полимерные композиционные материалы: структура, свойства, технология //СПб.: Профессия. – 2008. – Т. 560..

27. Бондалетова Л. И., Бондалето В. Г. Полимерные композиционные материалы (часть 1): учебное пособие //Томск: Изд-во Томского политехнического университета. – 2013. – Т. 118. – С. 7.

28. ГОСТ Р 56810-2015 Композиты полимерные. Метод испытания на изгиб плоских образцов. (Утвержден и введен в действие Приказом Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии от 27 ноября 2015 г. № 2067-ст.)// М.: Стандартиформ, 2016.

29. ГОСТ 11262-2017 (ISO 527-2:2012) Пластмассы. Метод испытания на растяжение. (Утвержден и введен в действие Приказом Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии от 2 февраля 2018 г. № 45-ст.) // М.: Стандартиформ, 2018.

30. ГОСТ 34370 – 2017 (ISO 527-1:2012) ПЛАСТМАССЫ. Определение механических свойств при растяжении. Часть 1. Общие принципы. (Утвержден и введен в действие Приказом Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии от 26 января 2018 г. № 24-ст) // М.: Стандартиформ, 2018.

31. ГОСТ 4651—2014 (ISO 604:2002) Пластмассы. Метод испытания на сжатие. (Утвержден и введен в действие Приказом Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии от 29 мая 2014 г. N 467-ст )// М.: Стандартиформ, 2015.

32. ГОСТ Р 50499-93 (МЭК 93-80) Материалы электроизоляционные твердые. Методы определения удельного объемного и поверхностного сопротивления. (Утвержден и введен в действие Постановлением Госстандарта России от 16.02.93 N 45) М.: ГОССТАНДАРТ РОССИИ, 1994.

33. ГОСТ 22372-77 «Материалы диэлектрические. Методы определения диэлектрической проницаемости и тангенса угла диэлектрических потерь в диапазоне частот от 100 до  $5 \cdot 10^6$  Гц.( Утвержден и введен в действие Постановлением Государственного комитета стандартов Совета Министров СССР от 18 февраля 1977 г. N 424) //М., ГОСУДАРСТВЕННЫЙ КОМИТЕТ СССР ПО СТАНДАРТАМ, 1978

34. Ishii M. et al. NIMS polymer database PoLyInfo (I): an overarching view of half a million data points //Science and Technology of Advanced Materials: Methods. – 2024. – Т. 4. – №. 1. – С. 2354649.

35. Hu B., Lin A., Brinson L. C. ChemProps: A RESTful API enabled database for composite polymer name standardization //Journal of cheminformatics. – 2021. – Т. 13. – №. 1. – С. 22.

36. Сарджент П. Качество данных в информационных системах по материалам // Автоматизированное проектирование. – 1992. – Т. 24. – №. 9. – С. 477-490.

37. Turan F. et al. The effect of carbon nanotubes loading and processing parameters on the electrical, mechanical, and viscoelastic properties of epoxy-based composites //Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering. – 2022. – Т. 44. – №. 3. – С. 93.

38. Fogel M. et al. Thermal, rheological and electrical analysis of MWCNTs/epoxy matrices //Composites Science and Technology. – 2015. – Т. 110. – С. 118-125.

39. Hamouda H. I., Abdel-Ghafar H. M., Mahmoud M. H. H. Multi-walled carbon nanotubes decorated with silver nanoparticles for antimicrobial applications //Journal of Environmental Chemical Engineering. – 2021. – Т. 9. – №. 2. – С. 105034.

40. Баранов А. Б., Симонов-Емельянов И. Д., Андреева Т. И. Параметры разных типов структур и физико-механические характеристики полимерных композитов на основе полисульфона со стекловолокном //Пластические массы. – 2020. – №. 3-4. – С. 4-7.

41. Duhovic M., Mitschang P., Bhattacharyya D. Modelling approach for the prediction of stitch influence during woven fabric draping //Composites Part A: Applied Science and Manufacturing. – 2011. – T. 42. – №. 8. – C. 968-978.
42. Gong T. et al. Low percolation threshold and balanced electrical and mechanical performances in polypropylene/carbon black composites with a continuous segregated structure //Composites Part B: Engineering. – 2016. – T. 99. – C. 348-357.
43. Li Y. et al. A bio-surfactant for defect control: Multifunctional gelatin coated MWCNTs for conductive epoxy nanocomposites //Composites Science and Technology. – 2018. – T. 159. – C. 216-224.
44. Ruiz, Christhy V., María E. Becerra, and Oscar Giraldo. "Structural, thermal, and release properties of hybrid materials based on layered zinc hydroxide and caffeic acid." *Nanomaterials* 10.1 (2020): 163.
45. Tanvir, Aisha, et al. "Electrically conductive, transparent polymeric nanocomposites modified by 2D Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> (MXene)." *Polymers* 11.8 (2019): 1272.
46. Pedrazzoli, Diego, Andrea Dorigato, and Alessandro Pegoretti. "Monitoring the mechanical behavior under ramp and creep conditions of electrically conductive polymer composites." *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* 43.8 (2012): 1285-1292.
47. Leung, Siu N. "Thermally conductive polymer composites and nanocomposites: Processing-structure-property relationships." *Composites Part B: Engineering* 150 (2018): 78-92.
48. Bai, J. B., and Aïssa Allaoui. "Effect of the length and the aggregate size of MWNTs on the improvement efficiency of the mechanical and electrical properties of nanocomposites—experimental investigation." *Composites Part A: applied science and manufacturing* 34.8 (2003): 689-694.
49. Feng, Chuang, and Liying Jiang. "Micromechanics modeling of bi-axial stretching effects on the electrical conductivity of CNT-polymer composites." *International Journal of Applied Mechanics* 7.01 (2015): 1550005.

50. Курбанова Р. В. и др. Гибридные нанокompозиты на основе полипропилена и клиноптиллолита //Пластические массы. – 2019. – №. 3-4. – С. 32-34.

51. Никифоров А. А. и др. Влияние технологических добавок на свойства стеклонанополненных композиций на основе биобазированного полиамида 1010 //Пластические массы. – 2016. – №. 5-6. – С. 43-48.

52. Курбанова Н. И. и др. Влияние металлсодержащих нанонаполнителей на свойства смесевых и динамически вулканизованных термопластичных эластомеров на основе изотактического полипропилена и тройного этиленпропилендиенового эластомера //Пластические массы. – 2016. – №. 5-6. – С. 48-51.

53. Singh A. K. et al. Study on metal decorated oxidized multiwalled carbon nanotube (MWCNT)-epoxy adhesive for thermal conductivity applications //Journal of Materials Science: Materials in Electronics. – 2017. – Т. 28. – С. 8908-8920.

54. Ghaleb Z. A., Mariatti M., Ariff Z. M. Properties of graphene nanopowder and multi-walled carbon nanotube-filled epoxy thin-film nanocomposites for electronic applications: The effect of sonication time and filler loading //Composites Part A: Applied Science and Manufacturing. – 2014. – Т. 58. – С. 77-83.

55. Song S. H. et al. Enhanced thermal conductivity of epoxy-graphene composites by using non-oxidized graphene flakes with non-covalent functionalization //Advanced materials. – 2013. – Т. 25. – №. 5. – С. 732-737.

56. Gantayat S. et al. Designing of epoxy matrix by chemically modified multiwalled carbon nanotubes //Advances in Polymer Technology. – 2018. – Т. 37. – №. 1. – С. 176-184.

57. Xu J. et al. Preparation, morphology, and properties of conducting polyaniline-grafted multiwalled carbon nanotubes/epoxy composites //Journal of Applied Polymer Science. – 2012. – Т. 125. – №. S1. – С. E334-E341.

58. Li L., Chung D. D. L. Electrical and mechanical properties of electrically conductive polyethersulfone composites //Composites. – 1994. – T. 25. – №. 3. – C. 215-224.
59. Debelak B., Lafdi K. Use of exfoliated graphite filler to enhance polymer physical properties //Carbon. – 2007. – T. 45. – №. 9. – C. 1727-1734.
60. Ma P. C., Tang B. Z., Kim J. K. Effect of CNT decoration with silver nanoparticles on electrical conductivity of CNT-polymer composites //Carbon. – 2008. – T. 46. – №. 11. – C. 1497-1505.
61. Zhou T. et al. Improved thermal conductivity of epoxy composites using a hybrid multi-walled carbon nanotube/micro-SiC filler //Carbon. – 2010. – T. 48. – №. 4. – C. 1171-1176.
62. Yang J. et al. Cellulose/graphene aerogel supported phase change composites with high thermal conductivity and good shape stability for thermal energy storage //Carbon. – 2016. – T. 98. – C. 50-57.
63. Hawkins S. A. et al. Tensile properties and electrical conductivity of epoxy composite thin films containing zinc oxide quantum dots and multi-walled carbon nanotubes //Carbon. – 2017. – T. 115. – C. 18-27.
64. Lee G. W. et al. Enhanced thermal conductivity of polymer composites filled with hybrid filler //Composites Part A: Applied science and manufacturing. – 2006. – T. 37. – №. 5. – C. 727-734.
65. Li Y. et al. Mechanical, electrical and thermal properties of in-situ exfoliated graphene/epoxy nanocomposites //Composites Part A: Applied Science and Manufacturing. – 2017. – T. 95. – C. 229-236.
66. Zakaria M. R. et al. Comparative study of graphene nanoparticle and multiwall carbon nanotube filled epoxy nanocomposites based on mechanical, thermal and dielectric properties //Composites Part B: Engineering. – 2017. – T. 119. – C. 57-66.
67. Wang L. et al. Fabrication on the annealed Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> MXene/Epoxy nanocomposites for electromagnetic interference shielding application //Composites Part B: Engineering. – 2019. – T. 171. – C. 111-118.

68. Fogel M. et al. Thermal, rheological and electrical analysis of MWCNTs/epoxy matrices //Composites Science and Technology. – 2015. – T. 110. – C. 118-125.
69. Li Y. et al. A bio-surfactant for defect control: Multifunctional gelatin coated MWCNTs for conductive epoxy nanocomposites //Composites Science and Technology. – 2018. – T. 159. – C. 216-224.
70. Guo Y. et al. Factors affecting thermal conductivities of the polymers and polymer composites: A review //Composites Science and Technology. – 2020. – T. 193. – C. 108134.
71. M Matos M. A. S. et al. Predictions of the electro-mechanical response of conductive CNT-polymer composites //Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2018. – T. 114. – C. 84-96.
72. Ayatollahi M. R. et al. Effect of multi-walled carbon nanotube aspect ratio on mechanical and electrical properties of epoxy-based nanocomposites //Polymer Testing. – 2011. – T. 30. – №. 5. – C. 548-556.
73. Allaoui A. et al. Mechanical and electrical properties of a MWNT/epoxy composite //Composites science and technology. – 2002. – T. 62. – №. 15. – C. 1993-1998.
74. Tseng C. H., Wang C. C., Chen C. Y. Functionalizing carbon nanotubes by plasma modification for the preparation of covalent-integrated epoxy composites //Chemistry of Materials. – 2007. – T. 19. – №. 2. – C. 308-315.
75. Kang R. et al. Enhanced thermal conductivity of epoxy composites filled with 2D transition metal carbides (MXenes) with ultralow loading //Scientific reports. – 2019. – T. 9. – №. 1. – C. 9135.
76. Tsekmes I. A. et al. Thermal conductivity of polymeric composites: A review //2013 IEEE International Conference on Solid Dielectrics (ICSD). – IEEE, 2013. – C. 678-681.
77. Feng A. et al. Preparation and characterization of epoxy resin filled with Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> MXene nanosheets with excellent electric conductivity //Nanomaterials. – 2020. – T. 10. – №. 1. – C. 162.

78. Bhaskaran K., Bheema R. K., Etika K. C. The influence of Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>@GNP hybrids on enhancing the EMI shielding effectiveness of epoxy composites in the X-band //Synthetic Metals. – 2020. – T. 265. – C. 116374.

79. Li Y. et al. A review of the electrical and mechanical properties of carbon nanofiller-reinforced polymer composites //Journal of Materials Science. – 2019. – T. 54. – C. 1036-1076.

80. Gong T. et al. Low percolation threshold and balanced electrical and mechanical performances in polypropylene/carbon black composites with a continuous segregated structure //Composites Part B: Engineering. – 2016. – T. 99. – C. 348-357.

81. Mierczynska A. et al. Electrical and mechanical properties of carbon nanotube/ultrahigh-molecular-weight polyethylene composites prepared by a filler prelocalization method //Journal of applied polymer science. – 2007. – T. 105. – №. 1. – C. 158-168.

82. Verma P., Saini P., Choudhary V. Designing of carbon nanotube/polymer composites using melt recirculation approach: Effect of aspect ratio on mechanical, electrical and EMI shielding response //Materials & Design. – 2015. – T. 88. – C. 269-277.

83. Xiang D. et al. Structure, mechanical, and electrical properties of high-density polyethylene/multi-walled carbon nanotube composites processed by compression molding and blown film extrusion //Journal of Applied Polymer Science. – 2015. – T. 132. – №. 42.

84. Ayewah D. O. O. et al. A surfactant dispersed SWCNT-polystyrene composite characterized for electrical and mechanical properties //Composites Part A: Applied Science and Manufacturing. – 2010. – T. 41. – №. 7. – C. 842-849.

85. Xin F., Li L. Decoration of carbon nanotubes with silver nanoparticles for advanced CNT/polymer nanocomposites //Composites Part A: Applied Science and Manufacturing. – 2011. – T. 42. – №. 8. – C. 961-967.

86. Chen J. et al. Balance the electrical properties and mechanical properties of carbon black filled immiscible polymer blends with a double

percolation structure //Composites Science and Technology. – 2017. – T. 140. – C. 99-105.

87. Chen J. et al. Balance the electrical properties and mechanical properties of carbon black filled immiscible polymer blends with a double percolation structure //Composites Science and Technology. – 2017. – T. 140. – C. 99-105.

88. Stan F. et al. Effect of reprocessing on the rheological, electrical, and mechanical properties of polypropylene/carbon nanotube composites //Journal of Micro-and Nano-Manufacturing. – 2017. – T. 5. – №. 2. – C. 021005.

89. Wang C. et al. Improving the mechanical, electrical, and thermal properties of polyimide by incorporating functionalized graphene oxide //High Performance Polymers. – 2016. – T. 28. – №. 7. – C. 800-808.

90. Naguib M. et al. Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> (MXene)–polyacrylamide nanocomposite films //RSC advances. – 2016. – T. 6. – №. 76. – C. 72069-72073.

91. Liu H. et al. Manipulating the filler network structure and properties of polylactide/carbon black nanocomposites with the aid of stereocomplex crystallites //The Journal of Physical Chemistry C. – 2018. – T. 122. – №. 8. – C. 4232-4240.

92. Luo J. Q. et al. Flexible, stretchable and electrically conductive MXene/natural rubber nanocomposite films for efficient electromagnetic interference shielding //Composites Science and Technology. – 2019. – T. 182. – C. 107754.

93. Yao Y. et al. Interfacial engineering of silicon carbide nanowire/cellulose microcrystal paper toward high thermal conductivity //ACS applied materials & interfaces. – 2016. – T. 8. – №. 45. – C. 31248-31255.

94. Song Y. S., Youn J. R. Influence of dispersion states of carbon nanotubes on physical properties of epoxy nanocomposites //Carbon. – 2005. – T. 43. – №. 7. – C. 1378-1385.

95. Sun R. et al. Highly conductive transition metal carbide/carbonitride (MXene)@ polystyrene nanocomposites fabricated by electrostatic assembly for

highly efficient electromagnetic interference shielding //Advanced Functional Materials. – 2017. – T. 27. – №. 45. – C. 1702807.

96. Uetani K. et al. Elastomeric thermal interface materials with high through-plane thermal conductivity from carbon fiber fillers vertically aligned by electrostatic flocking //Advanced Materials (Deerfield Beach, Fla.). – 2014. – T. 26. – №. 33. – C. 5857-5862.

97. Koysuren O., Karaman M., Ozyurt D. Effect of noncovalent chemical modification on the electrical conductivity and tensile properties of poly (methyl methacrylate)/carbon nanotube composites //Journal of applied polymer science. – 2013. – T. 127. – №. 6. – C. 4557-4563.

98. Alam M. K. et al. Structural, mechanical, thermal, and electrical properties of carbon black reinforced polyester resin composites //Journal of Applied Polymer Science. – 2014. – T. 131. – №. 13.

99. Zhou S., Hrymak A., Kamal M. Electrical and morphological properties of microinjection molded polypropylene/carbon nanocomposites //Journal of Applied Polymer Science. – 2017. – T. 134. – №. 43. – C. 45462.

100. Das N. C., Chaki T. K., Khastgir D. Effect of axial stretching on electrical resistivity of short carbon fibre and carbon black filled conductive rubber composites //Polymer International. – 2002. – T. 51. – №. 2. – C. 156-163.

101. Kwon J., Kim H. Comparison of the properties of waterborne polyurethane/multiwalled carbon nanotube and acid-treated multiwalled carbon nanotube composites prepared by in situ polymerization //Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry. – 2005. – T. 43. – №. 17. – C. 3973-3985.

102. Guo J. et al. Aspect ratio effects of multi-walled carbon nanotubes on electrical, mechanical, and thermal properties of polycarbonate/MWCNT composites //Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics. – 2014. – T. 52. – №. 1. – C. 73-83.

103. Jin X. et al. Flame-retardant poly (vinyl alcohol)/MXene multilayered films with outstanding electromagnetic interference shielding and thermal

conductive performances //Chemical Engineering Journal. – 2020. – T. 380. – C. 122-475.

104. Guedes R. M. Lifetime predictions of polymer matrix composites under constant or monotonic load //Composites Part A: Applied Science and Manufacturing. – 2006. – T. 37. – №. 5. – C. 703-715.

105. Barnes H. M., Murphy R. J. Effect of vapor boron treatment on some properties of wood strand and fiber composites //Composites Part A: Applied Science and Manufacturing. – 2006. – T. 37. – №. 9. – C. 1402-1405.

106. Markov A., Fiedler B., Schulte K. Electrical conductivity of carbon black/fibres filled glass-fibre-reinforced thermoplastic composites //Composites Part A: Applied science and manufacturing. – 2006. – T. 37. – №. 9. – C. 1390-1395.

107. Duhovic M., Mitschang P., Bhattacharyya D. Modelling approach for the prediction of stitch influence during woven fabric draping //Composites Part A: Applied Science and Manufacturing. – 2011. – T. 42. – №. 8. – C. 968-978.

108. Schutzius T. M. et al. High strain sustaining, nitrile rubber based, large-area, superhydrophobic, nanostructured composite coatings //Composites Part A: Applied Science and Manufacturing. – 2011. – T. 42. – №. 8. – C. 979-985.

109. Schmalz T. et al. Catalytic formation of carbon phases in metal modified, porous polymer derived SiCN ceramics //Carbon. – 2011. – T. 49. – №. 9. – C. 3065-3072.

110. Guo H. et al. High thermal conductive poly (vinylidene fluoride)-based composites with well-dispersed carbon nanotubes/graphene three-dimensional network structure via reduced interfacial thermal resistance //Composites Science and Technology. – 2019. – T. 181. – C. 107-713.

111. Frérot L., Aghababaei R., Molinari J. F. A mechanistic understanding of the wear coefficient: From single to multiple asperities contact //Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2018. – T. 114. – C. 172-184.

112. Xu H. et al. A multi-scale and multi-field coupling nonlinear constitutive theory for the layered magnetoelectric composites //Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2018. – T. 114. – C. 143-157.

113. Alkan S., Ojha A., Sehitoglu H. The complexity of non-Schmid behavior in the CuZnAl shape memory alloy //Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2018. – T. 114. – C. 238-257.
114. Vernerey F. J. Transient response of nonlinear polymer networks: A kinetic theory //Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2018. – T. 115. – C. 230-247.
115. Liu S. et al. Preparation, mechanical and thermal characteristics of d-Ti3C2/PVA film //Materials Today Communications. – 2020. – T. 22. – C. 100799.
116. Koerner H. et al. Deformation–morphology correlations in electrically conductive carbon nanotube—thermoplastic polyurethane nanocomposites //Polymer. – 2005. – T. 46. – №. 12. – C. 4405-4420.
117. Choi E. Y., Kim J. Y., Kim C. K. Fabrication and properties of polycarbonate composites with polycarbonate grafted multi-walled carbon nanotubes by reactive extrusion //Polymer. – 2015. – T. 60. – C. 18-25.
118. Shao J. et al. A novel high permittivity percolative composite with modified MXene //Polymer. – 2019. – T. 174. – C. 86-95.
119. Qi H. RETRACTED: Multifunctional Cellulose/rGO/Fe3O4 Composite Aerogels for Electromagnetic Interference Shielding. – 2024.
120. Maiti S. et al. A strategy to achieve high electromagnetic interference shielding and ultra low percolation in multiwall carbon nanotube–polycarbonate composites through selective localization of carbon nanotubes //Rsc Advances. – 2014. – T. 4. – №. 16. – C. 7979-7990.
121. Babal A. S. et al. Mechanical and electrical properties of high performance MWCNT/polycarbonate composites prepared by an industrial viable twin screw extruder with back flow channel //RSC advances. – 2014. – T. 4. – №. 110. – C. 64649-64658.
122. Cao Y. et al. Enhanced thermal properties of poly (vinylidene fluoride) composites with ultrathin nanosheets of MXene //RSC advances. – 2017. – T. 7. – №. 33. – C. 20494-20501.

123. Kim Y. J. et al. Hybridization of oxidized MWNT and silver powder in polyurethane matrix for electromagnetic interference shielding application //IEEE transactions on electromagnetic compatibility. – 2005. – Т. 47. – №. 4. – С. 872-879.
124. Kalakonda P., Banne S. Thermomechanical properties of PMMA and modified SWCNT composites //Nanotechnology, science and applications. – 2017. – С. 45-52.
125. Alam J. et al. Electroactive shape memory property of a Cu-decorated CNT dispersed PLA/ESO nanocomposite //Materials. – 2015. – Т. 8. – №. 9. – С. 6391-6400.
126. Tatarkin D. E. et al. Surface-enhanced Raman spectroscopy on hybrid graphene/gold substrates near the percolation threshold //Nanomaterials. – 2020. – Т. 10. – №. 1. – С. 164.
127. Ляшенко Е. Ю. и др. Композиционные материалы на основе полиэфирэфиркетона //Пластические массы. – 2023. – Т. 1. – №. 1-2. – С. 11-13.
128. Курбанова Н. И., Рагимова С. К., Гулиева Т. М. Получение и исследование свойств композитов на основе полиэтилена высокого давления с никельсодержащими нанонаполнителями //Пластические массы. – 2023. – Т. 1. – №. 7-8. – С. 6-8.
129. Гущина Е.А. Применение стохастического градиентного алгоритма при формировании базы данных композитных материалов /Е.А. Гущина, Л.А. Решетов // Вестник Казанского государственного технического университета им. А.Н. Туполева. 2024. Т. 80. № 1. С. 87-91.
130. Гущина Е.А. Эффективный способ пополнения базы данных / Е.А. Гущина, Л.А. Решетов // Вестник Казанского государственного технического университета им. А.Н. Туполева. 2024. Т. 80. № 1. С. 92-96.
131. Гущина Е.А. Проектирование базы данных полимерных композитных материалов/Е.А. Гущина// Вестник Казанского

государственного технического университета им. А.Н. Туполева. 2024. Т. 80. № 2. С. 46-49.

132. Saputra D. M., Saputra D., Oswari L. D. Effect of distance metrics in determining k-value in k-means clustering using elbow and silhouette method //Sriwijaya international conference on information technology and its applications (SICONIAN 2019). – Atlantis Press, 2020. – С. 341-346.

133. Batool F., Hennig C. Clustering with the average silhouette width //Computational Statistics & Data Analysis. – 2021. – Т. 158. – С. 107-190.

134. Черезов Д. С., Тюкачев Н. А. Обзор основных методов классификации и кластеризации данных //Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Системный анализ и информационные технологии. – 2009. – №. 2. – С. 25-29.

135. Таблица степеней свободы [Электронный ресурс] <http://old.exponenta.ru/educat/referat/xikonkurs/student5/tabst-st.pdf> дата обращения 17.04.2025

136. Прикладной линейный регрессивный анализ / И. Вучков, Л. Бояджиева, Е. Солаков. - М. : Финансы и статистика, 1987. - С. 21

137. Мостовой А. и др. Влияние дисперсного наполнителя на механические и физико-химические свойства полимерных композиционных материалов //Полимеры и полимерные композиты. – 2021. – Т. 29. – №. 6. – С. 583-590

138. Chang T. Polymer characterization by interaction chromatography //Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics. – 2005. – Т. 43. – №. 13. – С. 1591-1607.

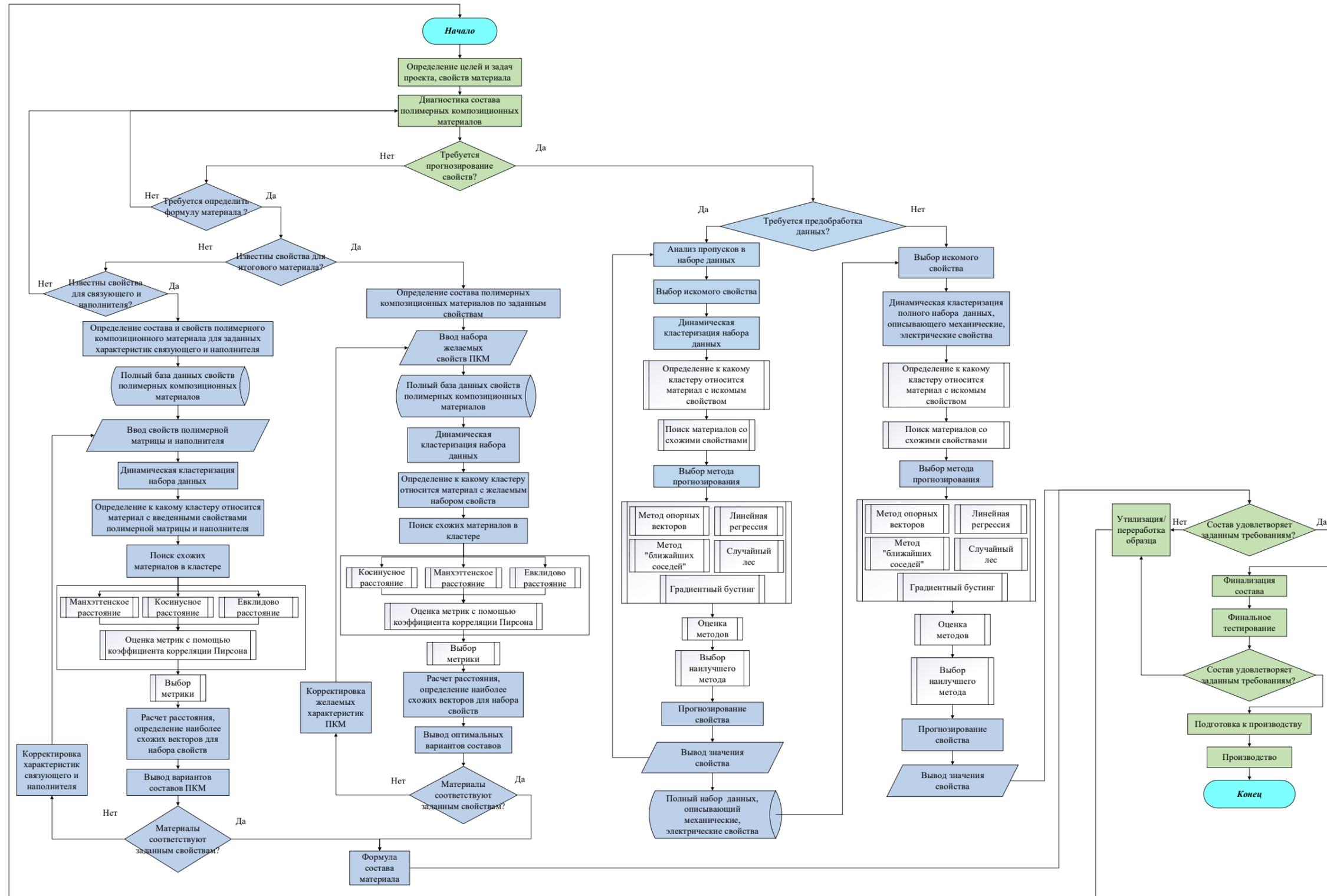
139. Koenig J. L. Spectroscopic characterization of polymers //Analytical Chemistry. – 1987. – Т. 59. – №. 19. – С. 1141A-1155A.

140. Hatakeyama T., Quinn F. X. Thermal analysis: fundamentals and applications to polymer science. – [sl], 1999.

141. Swallowe G. M. (ed.). Mechanical properties and testing of polymers: an A–Z reference. – Springer Science & Business Media, 2013. – Т. 3.

142. Гущина Е.А. Исследование возможности применения кластерного анализа для прогнозирования свойств полимерных композитных материалов /Е.А. Гущина // Контроль. Диагностика 2025. №4. С. 60 - 66.
143. TORRES GAITÁN R. La teoría del comercio internacional de Adam Smith //Problemas del Desarrollo. – 1976. – С. 135-152.
144. Комаровская А. С. Воздействие предприятия по переработке отходов пластика на атмосферный воздух. – 2022.
145. Goal 12: Ensure sustainable consumption and production patterns // Sustainable development URL: <https://www.un.org/sustainabledevelopment/sustainable-consumption-production/> (дата обращения: 20.05.2025).
146. Семенова Г. Н. Глобальные экологические проблемы и способы их решения //Научные труды Вольного экономического общества России. – 2022. – Т. 238. – №. 6. – С. 226-248.
147. Гущина Е.А. Методика диагностики состава полимерных композиционных материалов / А.Р. Бестугин, Е.А. Гущина, Е.А. Фролова // Радиотехника. т. 89, № 5, 2025 г., с. 166–172.
148. Гущина Е.А. Метод определения прочности на разрыв композиционных материалов. /Е.А. Гущина // Вестник Казанского государственного технического университета им. А.Н. Туполева. 2023. Т. 79. № 2. С. 37-40.
149. Гущина Е.А. Моделирование показателей прочности композитных материалов. /Е.А. Гущина// Вестник Казанского государственного технического университета им. А.Н. Туполева. 2023. Т. 79. № 2. С. 41-43.

Приложение А. Методика диагностики состава полимерных композиционных материалов



Приложение Б. Свидетельство о государственной регистрации базы  
данных

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



**СВИДЕТЕЛЬСТВО**

о государственной регистрации базы данных

№ 2024622324

**База данных композитных материалов с  
электропроводящими наполнителями**

Правообладатель: *Федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования  
"Санкт-Петербургский государственный университет  
аэрокосмического приборостроения" (RU)*

Авторы: *Гущина Екатерина Алексеевна (RU), Решетов  
Леонид Аркадьевич (RU), Рубин Иван Максимович (RU),  
Якушев Алексей Дмитриевич (RU)*

Заявка № 2024621987

Дата поступления 17 мая 2024 г.

Дата государственной регистрации  
в Реестре баз данных 28 мая 2024 г.

*Руководитель Федеральной службы  
по интеллектуальной собственности*



ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ  
Сертификат 429b6a0fe3653164ba96f83b73b4aa7  
Владелец **Зубов Юрий Сергеевич**  
Действителен с 19.05.2023 по 02.08.2024

*Ю.С. Зубов*

Приложение В. Свидетельство о государственной регистрации программы  
для ЭВМ

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2024667153

**Программа для прогнозирования способа получения  
состава и свойств новых композиционных материалов**

Правообладатель: *Федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования  
"Санкт-Петербургский государственный университет  
аэрокосмического приборостроения" (RU)*

Авторы: *Гуцина Екатерина Алексеевна (RU), Рубин Иван  
Максимович (RU), Якушев Алексей Дмитриевич (RU)*

Заявка № 2024666546

Дата поступления 22 июля 2024 г.

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ 22 июля 2024 г.

*Руководитель Федеральной службы  
по интеллектуальной собственности*



ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ  
Сертификат: 429b6ba0fe3853164ba196f83b73b4aa7  
Владелец: **Зубов Юрий Сергеевич**  
Действителен с 10.05.2023 по 02.08.2024

*Ю.С. Зубов*

Приложение Г. Свидетельство о государственной регистрации программы  
для ЭВМ

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2024667153

**Программа для прогнозирования способа получения  
состава и свойств новых композиционных материалов**

Правообладатель: **Федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования  
"Санкт-Петербургский государственный университет  
аэрокосмического приборостроения" (RU)**

Авторы: **Гуцина Екатерина Алексеевна (RU), Рубин Иван  
Максимович (RU), Якушев Алексей Дмитриевич (RU)**

Заявка № **2024666546**

Дата поступления **22 июля 2024 г.**

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ **22 июля 2024 г.**

*Руководитель Федеральной службы  
по интеллектуальной собственности*

ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ  
Сертификат 429b6a0fe3853164ba96183b73b4aa7  
Владелец **Зубов Юрий Сергеевич**  
Действителен с 10.05.2023 по 02.08.2024

*Ю.С. Зубов*



Приложение Д. Акт внедрения результатов диссертационной работы в АО  
«НИИ «Масштаб»

УТВЕРЖДАЮ  
Заместитель генерального директора  
АО «НИИ «Масштаб» по научной работе  
кандидат технических наук  
  
А. И. Фортинский  
«23» мая 2025 года



АКТ

внедрения в АО «НИИ «Масштаб» научных результатов диссертационной работы  
Гушиной Екатерины Алексеевны:

— Модель автоматизации определения состава полимерного композиционного материала с заданными механическими свойствами при сохранении электрических характеристик, способствующая снижению трудоёмкости испытаний на растяжение, повышению уровня экологической безопасности окружающей среды.

Комиссия в составе: председателя комиссии, советника генерального директора, доктора технических наук, кандидата военных наук, доцента Билятдинова К.З. и членов комиссии: начальника научно-системного центра Гагарина С.П. и начальника научно-технического отдела Хрусталева Е.В. в период с 10.03.2025 по 10.04.2025 провела проверку реализации научных результатов диссертационной работы Гушиной Е.А. определения состава полимерного композиционного материала с требуемыми характеристиками на 84-88%, на 60% сократить объем лабораторных исследований.

Научные результаты диссертационной работы введены на рабочие места производственной системы и применены для повышения организационно-технологической эффективности технологических линий организации.

Председатель комиссии:  
Советник генерального директора АО «НИИ «Масштаб»  
Доктор технических наук, кандидат военных наук, доцент  К.З. Билятдинов  
Члены комиссии:  
Начальник научно-системного центра  С.П. Гагарин  
Начальник научно-технического отдела  Е.В. Хрусталева  
«23» мая 2025 года

ВЕРНО (Одобрено решением НТС. Протокол НТС № 14 от 23.05.2025):  
Секретарь НТС АО «НИИ «Масштаб»  
Начальник научно-технического отдела  Е.В. Хрусталёва  
«23» мая 2025 года

Приложение Е. Акт внедрения результатов диссертационной работы в  
ООО «ИндуТех»



Инжиниринговая торгово-производственная компания с 2005 г

УТВЕРЖДАЮ

Генеральный директор  
ООО «ИндуТех» Верещагин Е.В.  
«07» июля 2025 года

АКТ

внедрения в лабораторные исследования научных результатов диссертационной работы  
Гушиной Екатерины Алексеевны

— Модель автоматизации определения состава полимерного композиционного материала с заданными механическими свойствами при сохранении электрических характеристик, способствующая снижению трудоёмкости испытаний на растяжение, повышению уровня экологической безопасности окружающей среды.

— Методика диагностики состава полимерных композиционных материалов с заданными механическими свойствами при сохранении электрических характеристик, способствующая уменьшению трудоёмкости, финансовых затрат проведения испытаний на растяжение, повышению надёжности материалов и обеспечению экологической безопасности окружающей среды.

Комиссия в составе: председателя комиссии, директора по развитию Фурса П.Н. и члена комиссии начальника лаборатории Евсеев В.И. в период с 10.06.2025 по 10.07.2025 провела проверку реализации научных результатов диссертационной работы Гушиной Е. А. и установила: внедрение указанных научных результатов позволило сократить сроки подбора оптимального состава полимерного композиционного материала с 2 месяцев до 2 недель. Реализация методики диагностики состава полимерных композиционных материалов для достижения заданных механических и электрических характеристик позволила сократить время разработки состава материала на 90%, а так же позволила уменьшить затраты на проведение испытаний на растяжение на 80%.

Научные результаты диссертационной работы введены на рабочие места производственной системы и применены для повышения организационно-технологической эффективности технологических линий организации.

Председатель комиссии:

Директор по развитию  
Фурса П.Н.

Член комиссии:  
Начальник лаборатории  
Евсеев В.И.



«07» июля 2025 года

**Приложение Ж. Акт внедрения результатов диссертационной работы в  
ООО «Центр инженерии, мехатроники и робототехники»**

УТВЕРЖДАЮ

Генеральный директор  
ООО Центр инженерии,  
мехатроники и робототехники  
Кривошеев С.В.



АКТ

О внедрении (практическом использовании) результатов  
диссертационной работы Гущиной Екатерины Алексеевны на тему  
«МОДЕЛИ И МЕТОДИКА ДИАГНОСТИКИ СОСТАВА ПОЛИМЕРНЫХ  
КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ»

Настоящий акт подтверждает внедрение результатов диссертационной работы Гущиной Е.А. в рамках реализации опытно-конструкторских работ, нацеленных на создание комплексных технических устройств с полимерными композиционными материалами.

Внедрение указанных научных результатов позволило сократить сроки подбора оптимального состава полимерного композиционного материала с 2 месяцев до 2 недель. Реализация методики диагностики состава полимерных композиционных материалов для достижения заданных механических и электрических характеристик позволила сократить время разработки состава материала на 90%, а также позволила уменьшить затраты на проведение испытаний на растяжение на 80%.

Научные результаты диссертационной работы введены на рабочие места производственной системы и применены для повышения организационно-технологической эффективности технологических линий организации.

Руководитель проектов,  
кандидат технических наук, доцент

Резников С.С.

«04» июля 2025 года

**Приложение 3. Акт внедрения результатов диссертационной работы в  
ООО «Пантес»**

УТВЕРЖДАЮ

Генеральный директор  
ООО «ПАНТЕС»  
Кандидат технических наук  
Коршунов И.Е.  
«30» июля 2025 года



**АКТ**

внедрения в ООО «ПАНТЕС» научных результатов диссертационной работы  
Гуцкиной Екатерины Алексеевны «Модели и методика диагностики состава  
полимерных композиционных материалов»:

— Математическая модель определения механических и электрических свойств полимерных композиционных материалов, способствующая улучшению эксплуатационных характеристик изделий и повышению экологической безопасности окружающей среды.

— Модель автоматизации определения состава полимерного композиционного материала с заданными механическими свойствами при сохранении электрических характеристик, способствующая снижению трудоёмкости испытаний на растяжение, повышению уровня экологической безопасности окружающей среды.

— Методика диагностики состава полимерных композиционных материалов с заданными механическими свойствами при сохранении электрических характеристик, способствующая уменьшению трудоёмкости, финансовых затрат проведения испытаний на растяжение, повышению надёжности материалов и обеспечению экологической безопасности окружающей среды.

Комиссия в составе: председателя комиссии, директора по науке и инновациям, кандидата технических наук Брусенцова К.А. и члена комиссии начальника производственного отдела Смолина Д.В. провела проверку реализации научных результатов диссертационной работы Гуцкиной Е.А. и установила:

— Внедрение математической модели позволяет определять значения свойств полимерных композиционных материалов и сократить число экспериментов на 35% обеспечивая экономию 80% времени;

— внедрение модели автоматизации позволяет ускорить подбор оптимального состава полимерного композиционного материала с требуемыми характеристиками на 85%, что снижает расходы материалов на 62%.

— применение методики диагностики состава полимерных композиционных материалов сократило сроки разработки их рецептур на 95%. Затраты на испытания на растяжение уменьшились на 90%.

Председатель комиссии:

Директор по науке и инновациям ООО «ПАНТЕС»

Кандидат технических наук



Брусенцов К.А.

Член комиссии:

Начальник производственного отдела



Смолин Д.В.

30.07.2025 года

**Приложение И. Акт внедрения результатов диссертационной работы в  
ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет  
аэрокосмического приборостроения»**



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
«САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ АЭРОКОСМИЧЕСКОГО ПРИБОРОСТРОЕНИЯ»  
(ГУАП)

ул. Большая Морская, д. 67, лит. А, Санкт-Петербург, 190000, Тел. (812) 710-7057,  
E-mail: info@guap.ru, http://www.guap.ru. ОГРН 1027810232680, ИНН 7807083893

№ \_\_\_\_\_  
На № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_

**УТВЕРЖДАЮ**  
Ректор,  
доктор экономических наук,  
профессор  
 Ю.А. Антохина

«15» 04 2025г

Акт о внедрении результатов диссертационной работы  
Гушиной Екатерины Алексеевны  
«Модели и методика диагностики состава полимерных композиционных  
материалов»,  
представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук  
по специальности 2.2.8 – Методы и приборы контроля и диагностики  
материалов, изделий, веществ и природной среды (технические науки)

*Комиссия в составе:*

Председателя комиссии – заместителя директора Института фундаментальной подготовки и технологических инноваций по учебно-методической деятельности, доцента кафедры метрологического обеспечения инновационных технологий и промышленной безопасности, кандидата технических наук, доцента Ефремова Н.Ю.

*Членов комиссии:*

Литвинова Б.Я. - профессора кафедры метрологического обеспечения инновационных технологий и промышленной безопасности, доктора технических наук, профессора  
Чуновкиной А.Г. - профессора кафедры метрологического обеспечения инновационных технологий и промышленной безопасности, доктора технических наук, старшего научного сотрудника

Составила настоящий акт о том, что результаты диссертационной работы Гушиной Екатерины Алексеевны «Модели и методика диагностики состава полимерных композиционных материалов», а именно:

1. Математическая модель определения механических и электрических

свойств полимерных композиционных материалов, способствующая улучшению эксплуатационных характеристик изделий и повышению экологической безопасности окружающей среды.

2. Модель автоматизации определения состава полимерного композиционного материала с заданными механическими свойствами при сохранении электрических характеристик, способствующая снижению трудоёмкости испытаний на растяжение, повышению уровня экологической безопасности окружающей среды.

3. Методика диагностики состава полимерных композиционных материалов с заданными механическими свойствами при сохранении электрических характеристик, способствующая уменьшению трудоёмкости, финансовых затрат проведения испытаний на растяжение, повышению надёжности материалов и обеспечению экологической безопасности окружающей среды.

использованы в учебном процессе при подготовке специалистов и бакалавров по направлению 27.03.01 «Стандартизация и метрология» и 27.05.02 «Метрологическое обеспечение вооружения и военной техники» на кафедре метрологического обеспечения инновационных технологий и промышленной безопасности ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения» по дисциплинам «Физико-химические измерения», «Методы и средства измерений», «Основы искусственного интеллекта в профессиональной деятельности».

Заместитель директора  
Института фундаментальной подготовки  
и технологических инноваций  
по учебно-методической деятельности,  
доцент кафедры метрологического обеспечения  
инновационных технологий  
и промышленной безопасности,  
к.т.н., доцент

Ефремов Н.Ю.

профессор кафедры  
метрологического обеспечения  
инновационных технологий  
и промышленной безопасности,  
д.т.н., с.н.с.

Чуновкина А.Г.

профессор кафедры  
метрологического обеспечения  
инновационных технологий  
и промышленной безопасности,  
д.т.н., доцент

Литвинов Б.Я.