

Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский
центр «Информатика и управление» Российской академии наук»



На правах рукописи

Мочалова Юлия Дмитриевна

**МЕТОДЫ АНАЛИЗА ДАННЫХ И МНОГОМАСШТАБНЫЕ ПОДХОДЫ
ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЧНОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ**

Специальность 1.2.2
«Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ»

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Научный руководитель -
доктор физико-математических наук, доцент
Абгарян Каринэ Карленовна

Москва 2026

Оглавление

Введение	5
Глава 1. Современные методы моделирования и анализа усталостных характеристик слоистых КМ.....	16
1.1 Микромеханические модели.....	16
1.2 Мезомасштабные модели	16
1.3 Макромоделирование и конечно-элементный анализ	17
1.4 Модели усталости	17
1.5 Оптимизация структуры композита.....	18
1.6 Машинное обучение в моделировании свойств КМ	19
1.7 Основные выводы	22
Глава 2. Структура полимерных композитных материалов (ПКМ)	23
2.1 Однослойный КМ.....	23
2.2 Элемент репрезентативного объема КМ	25
2.3 Структура и особенности многослойного КМ.....	27
2.3.1 Основные характеристики	27
2.3.2 Анизотропия и механическая целостность	27
2.3.3 Методы анализа.....	28
2.3.4 Особенности эксплуатации.....	28
2.3.5 Значение для настоящего исследования.....	28
2.4 Критерии разрушения.....	29
2.4.1 Классификация критериев	29
2.4.2 Применение критериев в многослойных композитах.....	36
2.4.3 Значение для настоящего исследования.....	37
2.5 Основные выводы	37
Глава 3. Методика полуавтоматического формирования проблемно-ориентированных коллекций данных	38
3.1. Концепция многомасштабного моделирования	39

3.1.1 Базовые модели-композиции	40
3.1.2 Многомасштабная композиция	41
3.2 Расчет упругих свойств базового материала.....	46
3.3 Модуль автоматического запуска модели численного моделирования упругих свойств однослойного КМ. Численное моделирование.....	50
3.4 Метод моделирования упругих характеристик однослойного КМ	51
3.5 Модуль автоматического запуска модели численного моделирования упругих свойств многослойного КМ с разным углом укладки.....	55
3.6 Метод моделирования упругих характеристик многослойных ПКМ с разным углом укладки	58
3.7 Хранение данных	64
3.8 Программная реализация разработанного комплекса.....	66
3.9 Основные выводы	67
Глава 4. Разработка модели предсказания разрушения композитного материала.....	68
4.1 Постановка задачи	68
4.2 Формирование признакового описания.....	69
4.3 Архитектура модели предсказания разрушения.....	71
4.4 Итеративная двунаправленная рекуррентная сеть для предсказания разрушения многослойных композитов	73
4.5 Результаты обучения и валидация модели	76
4.6 Основные выводы	81
Глава 5. Разработка алгоритма для решения обратной задачи получения материала для заданных условий	82
5.1 Формулировка задачи оптимизации	82
5.2 Генетический алгоритм	84
5.3 Ограничения	86
5.4 Результаты оптимизации.....	87
5.5 Сквозной пример.....	89

5.6 Основные выводы	94
Заключение	95
Список литературы.....	97
Приложение А. Базовые модели-композиции	102
Приложение Б. Свидетельство о государственной регистрации	106
Приложение В. Акт о внедрении результатов.....	107

Введение

Актуальность темы исследования. Полимерные композиционные материалы (ПКМ) широко применяются в авиационной, аэрокосмической, транспортной и энергетической отраслях благодаря их малому весу, высокой прочности и жесткости, а также коррозионной стойкости и возможности варьирования свойств за счет изменения структуры материала. Особое значение в инженерной практике имеют многослойные композитные конструкции, свойства которых в значительной степени определяются последовательностью укладки слоев, ориентацией волокон и сочетанием используемых материалов.

Одной из ключевых проблем при проектировании конструкций из многослойных ПКМ является достоверная оценка их прочностных и усталостных характеристик. В отличие от изотропных материалов, поведение композитов, характеризуется выраженной анизотропией, нелинейностью свойств и чувствительностью к структурным параметрам, что существенно усложняет моделирование процессов деформации и разрушения. Классические аналитические методы и численные подходы, основанные на классической теории слоистых структур (*CLT*) и конечно-элементном анализе, обеспечивают высокую точность, однако требуют значительных вычислительных ресурсов, особенно при анализе большого числа вариантов структуры и параметров укладки.

Дополнительную сложность представляет задача оптимизации структуры многослойных композитных материалов, включающая подбор углов укладки, толщин слоев и сочетаний материалов при наличии множества инженерных ограничений по прочности, жесткости, массе и геометрии. Решение таких задач традиционными методами приводит к необходимости многократного выполнения трудоемких численных расчетов, что существенно ограничивает их практическую применимость на этапах предварительного проектирования и многовариантного анализа.

В связи с этим актуальной является задача разработки новых подходов, направленных на снижение вычислительных затрат при сохранении требуемой точности оценки прочностных характеристик многослойных ПКМ. Одним из

перспективных направлений является использование методов машинного обучения, способных аппроксимировать сложные нелинейные зависимости между параметрами структуры композитного материала и его механическими характеристиками на основе данных численного моделирования и экспериментальных данных. Применение таких методов позволяет рассматривать модели машинного обучения в качестве суррогатных моделей, заменяющих дорогостоящие численные расчеты на этапе оптимизации.

Особый интерес представляет использование моделей машинного обучения, способных учитывать последовательную природу структуры многослойных композитных материалов. Последовательность укладки слоев и ориентация волокон оказывают существенное влияние на распределение напряжений и процессы разрушения, однако традиционные регрессионные модели, как правило, не учитывают порядок укладки слоев. В этом контексте перспективным является применение рекуррентных нейронных сетей, позволяющих определить зависимости, связанные с последовательным характером данных.

Актуальность настоящей работы также обусловлена необходимостью интеграции методов машинного обучения с классическими инженерными инструментами, такими как классическая теория слоистых структур и критерии разрушения, а также с эволюционными алгоритмами оптимизации. Генетические алгоритмы зарекомендовали себя как эффективный инструмент решения многокритериальных и высокоразмерных задач оптимизации структуры композитных материалов, однако их практическое применение ограничено высокой вычислительной стоимостью оценки целевых функций. Использование суррогатных моделей на основе машинного обучения позволяет существенно повысить эффективность таких алгоритмов.

Таким образом, разработка гибридных методик, объединяющих многомасштабное численное моделирование, методы машинного обучения и эволюционные алгоритмы оптимизации, является актуальной научной и практической задачей. Решение данной задачи направлено на создание вычислительно эффективных инструментов анализа и оптимизации прочностных

характеристик многослойных полимерных композитных материалов и соответствует современным тенденциям развития искусственного интеллекта и машинного обучения в инженерных приложениях.

Классификация используемых методов. В настоящей работе используются методы, относящиеся к следующим классам математических моделей и алгоритмов: континуальные (дифференциальные) модели - классическая теория слоистых структур и метод конечных элементов, описывающие напряженно-деформированное состояние на основе уравнений теории упругости; дискретные атомистические модели - молекулярная динамика, моделирующая свойства матрицы и волокна на нано-уровне; эмпирические статистические методы машинного обучения - рекуррентные нейронные сети (LSTM, BIRN), аппроксимирующие зависимость прочности от структуры укладки; эволюционные методы оптимизации - генетический алгоритм для решения обратной задачи; методы анализа данных - стандартизация признаков, кодирование циклических углов и кросс-валидация. Развернутая классификация приведена в главе 3.

Целью диссертационной работы является разработка комплекса проблемно-ориентированных программ, численных методов и математических моделей для исследования прочностных характеристик многослойных полимерных композитных материалов, основанного на интеграции многомасштабного вычислительного эксперимента и методов машинного обучения. Для достижения данной цели были решены следующие задачи:

1. Провести системный анализ существующих математических моделей и численных методов расчета прочностных и усталостных характеристик многослойных полимерных композитных материалов на микро-, мезо- и макромасштабных уровнях, включая классическую теорию слоистых структур и метод конечных элементов, с целью обоснования выбора базовых вычислительных схем для последующего многомасштабного моделирования.
2. Разработать и обосновать многомасштабную математическую модель прочностного поведения многослойного полимерного композита,

обеспечивающую согласованную передачу характеристик между нано-, мезо- и макроуровнями и пригодную для постановки серии вычислительных экспериментов.

3. Разработать эффективные вычислительные методы и алгоритмы интерпретации результатов многомасштабного численного моделирования на основе суррогатных моделей машинного обучения, аппроксимирующих нелинейные зависимости между параметрами укладки слоев, условиями нагружения и критериями разрушения.
4. Разработать алгоритм полуавтоматической генерации проблемно-ориентированного набора данных на основе постановки и проведения серий численных экспериментов с применением классической теории слоистых структур и конечно-элементного анализа, обеспечивающий статистически репрезентативную выборку для обучения и валидации суррогатных моделей.
5. Разработать численный метод и алгоритм решения обратной задачи определения параметров укладки многослойного композита для заданных требований по жесткости, прочности и толщине на основе интеграции генетического алгоритма, суррогатной модели машинного обучения и классической теории слоистых структур.

В совокупности решение указанных задач направлено на создание универсального и вычислительно эффективного инструмента анализа и оптимизации многослойных полимерных композитных материалов, применимого для инженерных задач проектирования и оценки прочности композитных конструкций.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. **Многомасштабная математическая модель** прочностного поведения многослойных полимерных композитных материалов, основанная на последовательном согласовании результатов нано-, мезо- и макромасштабного численного моделирования и обеспечивающая постановку **вычислительного эксперимента** для формирования репрезентативных обучающих выборок.

2. **Методика полуавтоматической генерации проблемно-ориентированного набора данных**, основанная на серии вычислительных экспериментов с использованием классической теории слоистых структур и конечно-элементного анализа, в отличие от известных аналогов, опирающихся на ручной подбор и разрозненные экспериментальные данные, методика реализует единый полуавтоматический контур генерации данных, обеспечивающий их воспроизводимость и согласованность с многомасштабной моделью.
3. **Проблемно-ориентированный набор данных**, сформированный путем интеграции справочных, экспериментальных и расчетных данных и пригодный для обучения и валидации моделей машинного обучения в задачах анализа прочностных характеристик композитов; по составу и способу формирования не имеющий известных отечественных и зарубежных аналогов.
4. **Архитектура** рекуррентной нейронной сети (BIRN) с итеративным согласованием межслойных взаимодействий, обеспечивающая высокую точность аппроксимации зависимости прочностных характеристик от последовательности и углов укладки слоев ($R^2 = 0,984$ на валидационной выборке против 0,975 у классической LSTM).
5. **Комплекс проблемно-ориентированных программ**, реализующий разработанные численные методы и алгоритмы (многомасштабное моделирование, суррогатное моделирование на основе BIRN, генетический алгоритм оптимизации укладки) и обеспечивающий проведение вычислительных экспериментов по анализу и оптимизации многослойных композитных конструкций со снижением вычислительных затрат по сравнению с прямыми методами конечно-элементного анализа.

Научная новизна диссертационной работы заключается в разработке и обосновании гибридного подхода к анализу и оптимизации прочностных характеристик многослойных полимерных композитных материалов, основанного

на интеграции многомасштабного численного моделирования, методов машинного обучения и эволюционных алгоритмов оптимизации:

1. Предложена и обоснована многомасштабная математическая модель прочностного поведения многослойных полимерных композиционных материалов, обеспечивающая согласованную передачу характеристик между нано-, мезо- и макроуровнями и пригодная для постановки серии вычислительных экспериментов.

2. Предложена оригинальная архитектура рекуррентной нейронной сети (BIRN) с итеративным согласованием межслойных взаимодействий, представляющая собой новый алгоритм аппроксимации решения задачи прочностного анализа многослойного композита.

3. Разработан и реализован в виде комплекса проблемно-ориентированных программ гибридный численный метод анализа и оптимизации структуры композитных материалов, основанный на интеграции суррогатной модели машинного обучения, классической теории слоистых структур и генетического алгоритма, обеспечивающий существенное снижение вычислительных затрат.

Теоретическая значимость заключается в развитии методов математического моделирования и численного анализа прочностных характеристик многослойных полимерных композитных материалов на основе интеграции многомасштабных численных моделей, методов машинного обучения и эволюционных алгоритмов оптимизации, что соответствует направлениям комплексных исследований научных и технических проблем с применением технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента.

В работе получены следующие теоретически значимые результаты:

1. Обоснована целесообразность последовательного представления структуры многослойного композита при решении задач прогнозирования прочности, что позволило теоретически связать порядок укладки слоев с результирующими механическими характеристиками материала в рамках моделей машинного обучения.

2. Развита подходы к построению суррогатных моделей в задачах анализа и оптимизации многослойных композитных материалов, основанные на использовании рекуррентных нейронных сетей для аппроксимации результатов численного моделирования.
3. Показана теоретическая возможность интеграции классической теории слоистых структур и моделей машинного обучения в едином вычислительном контуре анализа прочностных характеристик многослойных композитных материалов.
4. Сформированы методические основы использования эволюционных алгоритмов оптимизации в сочетании с суррогатными моделями машинного обучения для решения многокритериальных задач оптимизации структуры композитных материалов.

Практическая значимость заключается в создании комплекса проблемно-ориентированных программ, позволяющего проводить вычислительные эксперименты по анализу и оптимизации структуры многослойных композитов в инженерных задачах проектирования с существенным снижением вычислительных затрат. Разработанный программный комплекс для поиска допустимых решений для проектирования многослойных композитных полимерных материалов, в том числе модель машинного обучения, а также созданный набор данных были внедрены в исследовательскую деятельность в ООО «ИНТЕРЮНИС-ИТ», что позволило значительно сократить время, затрачиваемое на проектирование и повысить эффективность решения задач по созданию многослойных полимерных композитных структур с заданными прочностными характеристиками.

Соответствие диссертации паспорту научной специальности. В соответствии с формулой специальности 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» (технические науки) в работе предложена многомасштабная математическая модель прочностного поведения многослойных полимерных композитных материалов и выполнены разработка, исследование и реализация численных методов и алгоритмов анализа и оптимизации их структуры, основанных на интеграции вычислительного эксперимента, машинного обучения

и эволюционных методов оптимизации. Работа соответствует следующим пунктам паспорта специальности: п. 2. «Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий», п. 3. «Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента», п. 8. «Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента», п. 9. «Постановка и проведение численных экспериментов, статистический анализ их результатов, в том числе с применением современных компьютерных технологий (технические науки)».

Публикации. Результаты работы были представлены в 11 публикациях, в том числе 5 работ опубликованы в изданиях из списка ВАК. Зарегистрирована 1 программа для ЭВМ (рисунок Б.1, приложение Б).

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на следующих научных конференциях: IV Международная конференция «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (2025); 21-я Всероссийская конференция с международным участием «Математические методы распознавания образов» (2023); III Международная конференция «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (2021); 19-я Международная конференция «Авиация и космонавтика» (2020); II Международная конференция «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (2020).

Разработанные соискателем математические модели и методы определения параметров укладки слоев многослойных полимерных композиционных материалов внедрены в практику проектирования и используются в исследовательской деятельности организации ООО «ИНТЕРЮНИС-ИТ», что подтверждается соответствующим актом о внедрении, утвержденным генеральным директором (рисунок В.1, приложение В).

Результаты, изложенные в настоящей диссертационной работе, были получены в рамках проекта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-15-2024-544 «Математические модели и численные методы как основа для разработки робототехнических комплексов, новых материалов и интеллектуальных технологий конструирования».

Личный вклад. Все основные результаты, представленные в диссертационной работе, получены автором самостоятельно.

В рамках выполнения диссертационного исследования автором самостоятельно разработаны и реализованы методы численного моделирования прочностных характеристик многослойных полимерных композитных материалов на мезо- и макромасштабных уровнях, включая программную реализацию аналитических расчетов упругих характеристик и критериев разрушения, а также постановку и проведение конечно-элементных расчетов.

Автором разработана методика формирования проблемно-ориентированного набора данных, выполнена подготовка и структурирование данных, а также реализованы и обучены модели машинного обучения для прогнозирования прочностных характеристик многослойных композитных материалов. Также автором самостоятельно реализован генетический алгоритм оптимизации параметров укладки многослойного композитного материала и выполнена его интеграция с моделью машинного обучения и классической теорией слоистых структур.

Расчеты на микроуровне, основанные на квантово-механическом моделировании свойств компонентов композитного материала, выполнялись с использованием программного модуля, разработанного другим участником общего научного проекта. Указанный модуль использовался автором в качестве исходного инструмента для получения входных параметров с нано уровня, при этом его разработка и реализация не входили в задачи настоящей диссертационной работы.

Интерпретация полученных результатов, анализ их достоверности, формулировка выводов и подготовка текста диссертационной работы выполнены автором самостоятельно.

Структура и объем работы. Настоящая диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы и приложений. Работа содержит 107 страниц, 12 таблиц, 21 рисунок. Список литературы включает 45 наименования.

В **первой главе** приведен обзор существующих подходов к моделированию усталостных и прочностных характеристик слоистых полимерных композиционных материалов, рассмотрены основные методы численного моделирования на различных масштабных уровнях. Проанализированы современные подходы к применению методов машинного обучения в задачах моделирования свойств композиционных материалов. На основе анализа литературы сформулирована научная мотивация и обозначены нерешенные проблемы, определившие направление настоящего исследования.

Во **второй главе** рассмотрена структура полимерных однонаправленных композиционных материалов. Описаны особенности однослойных и многослойных композитов, приведено понятие репрезентативного объема композиционного материала. Рассмотрены основные критерии разрушения, применяемые для оценки прочностных характеристик слоистых композиционных материалов.

В **третьей главе** представлена многомасштабная модель прочностного поведения многослойных полимерных композиционных материалов, обеспечивающая согласованную передачу характеристик между нано-, мезо- и макроуровнями и пригодная для постановки серии вычислительных экспериментов. Описана методика полуавтоматического формирования проблемно-ориентированных наборов данных для задач моделирования свойств и разрушения многослойных композиционных материалов. Описаны этапы расчета упругих свойств базового материала, однослойных и многослойных композитов с различными углами укладки на основе классической теории слоистых структур. Рассмотрен вопрос хранения и организации полученных данных.

В **четвертой главе** разработана и исследована модель прогнозирования разрушения многослойного композиционного материала на основе методов

машинного обучения. Приведена постановка задачи, описана архитектура модели, используемые входные признаки и методы валидации. Проведен анализ качества прогнозирования и устойчивости модели.

В **пятой главе** представлен алгоритм решения обратной задачи синтеза многослойного композиционного материала для заданных условий по жесткости, прочности, толщине и составу материалов. Описана формализация задачи оптимизации, метод кодирования структуры композита и интеграция алгоритма оптимизации с моделями численного моделирования и машинного обучения. Представлены результаты оптимизации и их анализ.

В **заключении** сформулированы основные результаты диссертационной работы, приведены выводы по каждому из этапов исследования, а также обозначены направления дальнейших исследований.

Глава 1. Современные методы моделирования и анализа усталостных характеристик слоистых КМ

Подходы к моделированию прочности и усталостной долговечности полимерных композитов можно разделить на несколько классов.

1.1 Микромеханические модели

Микромеханические подходы описывают композит как систему волокон, матрицы и межфазного слоя и позволяют рассчитывать локальные напряжения и механизмы зарождения повреждений. Типично используются модели включений (Eshelby), модели Морри - Танаки, самосогласованные методы и конечно-элементное моделирование Representative Volume Element (RVE).

Так, в работах Liu и Talreja показали [1], что микромеханические механизмы накопления усталостных повреждений могут быть смоделированы на основе RVE с явным учетом волокон и матрицы, что позволяет численно воспроизводить развитие трещин матрицы при циклических нагружениях. Аналогично, работа McCartney представляет аналитические модели для оценки напряжений и повреждений на уровне волокно-матрица, включая радиальное растрескивание матрицы [2].

Микромеханические модели дают глубокое физическое понимание механизмов разрушения, однако обладают высокой вычислительной сложностью, что ограничивает их применение в задачах многокритериальной оптимизации структуры композита.

1.2 Мезомасштабные модели

На мезоуровне композит рассматривается как ортотропный однослойный материал, что позволяет анализировать межслойные напряжения и критерии разрушения. Основу такого подхода составляют классические теории слоистых структур (Classical Laminate Theory, CLT), позволяющие вычислять эффективные модульные характеристики многослойных структур при различных углах укладки.

В ряде работ показано, что сочетание CLT и критериев разрушения - Tsai - Hill, Tsai - Wu, Hashin, Puck, Hoffman - позволяет достаточно точно оценивать статическую прочность композитов [3,4,5]. Так, Hashin разработал физически интерпретируемую модель разрушения волокон и матрицы, которая легла в основу многочисленных инженерных методик [5].

Мезоуровневые модели хорошо подходят для первичного проектирования многослойных конструкций, но их точность снижается при расчете сложных неравномерных напряженных состояний и при прогнозировании накопления усталостных повреждений.

1.3 Макромоделирование и конечно-элементный анализ

Макромодели основаны на конечно-элементном анализе конструкций (Ansys, Abaqus, COMSOL), что обеспечивает учет сложных граничных условий, анизотропии материалов и нелинейных эффектов. Такие методы позволяют моделировать распространение трещин, расслоение и взаимодействие повреждений.

Например, в работе [6] использовали подход прогрессивного анализа повреждений (PDA) в Abaqus для воспроизведения распространения деламинации под циклическим нагружением. В работе [7] исследованы механизмы расслоения на основе модели когезионной зоны.

Макромодели дают высокую точность, но требуют больших вычислительных ресурсов, что усложняет их применение в задачах массовой генерации данных или структурной оптимизации.

1.4 Модели усталости

Для описания усталостного разрушения применяются S-N кривые, модели деградации жесткости и модели повреждений. Одним из значимых подходов является модель Talreja, где усталость описывается эволюцией внутренних переменных повреждения [8]. Подходы на основе continuum damage mechanics» (CDM) активно применяются и сегодня.

Тем не менее, точные усталостные модели требуют больших массивов экспериментальных данных, что делает их труднореализуемыми для широкого класса материалов.

1.5 Оптимизация структуры композита

Генетические алгоритмы (GA) и Байесовская оптимизация широко применяются для поиска оптимального распределения углов укладки и толщин слоев.

В работе [9] *генетические алгоритмы* используются для оптимизации многослойных композиционных панелей с учетом нагружения [9], ограничения оцениваются с помощью аналитических решений.

Jacob L. Pelletier, Senthil S. Vel исследовали оптимизацию МКМ на основе гибридных метаэвристик, с учетом ограничений по прочности и жесткости, также базируясь на аналитических решениях [10].

В Enhanced Optimization of Composite Laminates: Multi-Objective Genetic Algorithms with Improved Ply-Stacking Sequences представлен multi-objective подход на основе GA для оптимизации последовательности слоев композитов с учетом нескольких функциональных критериев (масса, жесткость и устойчивость). Авторы показали, что интеграция инженерных ограничений в формулировку оптимизационной задачи улучшает качество найденных решений по сравнению с классическими эвристическими стратегиями [11].

Анализ литературных источников показал, что сочетание суррогатных моделей и эволюционных алгоритмов является одним из наиболее перспективных направлений, позволяющих ускорять расчеты на основе конечно-элементных моделей без существенной потери точности, так как основные решатели, используемые в подобных подходах, базируются на аналитических решениях, что является ограничением подобных методов, так как аналитические решения упрощают модель поведения материала и геометрию, что может приводить к снижению точности оценки прочности и жесткости по сравнению с численными методами, например, FEM.

1.6 Машинное обучение в моделировании свойств КМ

В последние годы методы машинного обучения (ML) получили широкое распространение в задачах прогнозирования механических свойств и структурной оптимизации композиционных материалов (КМ). Их применение диктуется необходимостью решать сложные нелинейные задачи, характерные для КМ, при высоких вычислительных затратах традиционных методов, а также потребностью в быстром анализе большого количества вариаций конструкции и параметров. Методы машинного обучения способны аппроксимировать зависимости между входными параметрами материалов и сложными выходными характеристиками, такими как прочностные показатели, критические нагрузки, устойчивость и др.

Современные исследования показывают, что ML подходы могут быть эффективно интегрированы как в **направленные прогнозные задачи механических свойств**, так и в **гибридные оптимизационные процессы**, где суррогатные модели существенно ускоряют вычисление отклика конструкции. В обзоре, посвященном применению машинного обучения для прогнозирования механического поведения композитов, описан широкий спектр методов - от классических алгоритмов регрессии до глубоких нейронных сетей и ансамблевых моделей - и их успешное применение к задачам оценки прочности, модуля упругости и сопротивления разрушению на основе экспериментальных и численных данных. Анализ показал, что модели машинного обучения способны захватывать сложные зависимости между структурными параметрами и механическими характеристиками, обеспечивая при этом существенное сокращение времени вычислений по сравнению с прямыми МКЭ-симуляциями [12].

Одним из направлений исследований является **сочетание МКЭ и машинного обучения** для предсказания механических свойств МКМ. В работе *Mechanical properties prediction of composite laminate with FEA and machine learning coupled method* предложена методология объединения классического моделирования методом конечных элементов (FEA), нейронных сетей и случайных лесов для прогнозирования фактора отказа по теории Рукс при случайном

состоянии напряжений и критических собственных чисел устойчивости. В этой работе показано, что такие подходы могут аппроксимировать результаты FEA с приемлемой точностью, что позволяет снизить вычислительные затраты при анализе широкого класса структурных решений [13].

Другой вектор исследований связан с **обнаружением и оценкой дефектов и повреждений** в композитных материалах с помощью ML. Например, обзор *Review of machine learning applications for defect detection in composite materials* систематизирует успешные применения методов машинного обучения, включая классификацию дефектов, диагностику состояний и прогнозирование локального отклонения механических характеристик на основе как экспериментальных, так и численных данных. В частности, методы глубокого обучения обеспечивают высокую точность обнаружения дефектов и мониторинга развития повреждений в композитных структурах [14].

Особое внимание уделяется **оптимизации конструкции композитов** с применением ML и эвристических алгоритмов, таких как генетические алгоритмы (GA). GA относятся к методам глобальной оптимизации, адекватно работающим в случае высоко размерных и не-гладких пространств параметров, что делает их привлекательными для задач выбора оптимальной последовательности укладки слоев, толщины, сочетаний материалов и др. Высокая вычислительная нагрузка GA обусловлена необходимостью многократных оценок в цикле оптимизации, что влечет за собой интенсивное использование FEA.

Более высокая степень интеграции ML и GA продемонстрирована в работе *Optimizing composite shell with neural network surrogate models and genetic algorithms: Balancing efficiency and fidelity*, где предложена гибридная методология, сочетающая глубинную нейросетевую суррогатную модель для прогноза собственных частот конструкции и вибрационных показателей с GA для многокритериальной оптимизации оболочек из композитов. В этой работе применяется многоуровневый подход (multi-fidelity), где низко- и высокоточные модели FEA используются вместе с нейросетевой суррогатной моделью для оценки отклика при оптимизации, что снижает общий объем дорогостоящих численных

симуляций и ускоряет поиск оптимальных конфигураций композитной оболочки [15].

Особая категория подходов объединяет суррогатное моделирование и ансамблевые ML-модели с целью повышения устойчивости и точности оптимизации. В *Multi-Objective Optimization of Thin-Walled Composite Axisymmetric Structures Using Neural Surrogate Models and Genetic Algorithms* рассмотрена интеграция ансамблевых нейросетей (network ensembles), суррогатные моделей и ГА для решения многокритериальных задач оптимизации механических характеристик композитных оболочек (собственная частота, ширина полос частот). Авторы отметили, что использование ансамблей моделей повышает точность предсказаний и делает оптимизационный процесс более устойчивым к ошибке аппроксимации при малом числе FEA-оценок [16].

Помимо прямой оптимизации механических характеристик и конфигураций, машинное обучение также применяется в связанных задачах прогнозирования усталостных повреждений материала и его долговечности. Например, задачи прогнозирования усталости композитов часто решаются с использованием статистических индексов и ML-моделей, как описано в работе *Properties prediction of composites based on machine learning models: A focus on statistical index approaches*. Здесь рассматриваются различные ML-модели, их настройки и сравнительная оценка эффективности при прогнозировании механических характеристик, включая упругие модули и пределы прочности композитов [17].

Таким образом, применение машинного обучения в моделировании свойств КМ охватывает широкий спектр задач - от предсказания механических свойств и обнаружения дефектов до оптимизации структуры и многокритериальных оптимизационных задач. Интегрированные подходы, сочетающие суррогатные ML модели и эвристические оптимизаторы, демонстрируют значительный потенциал в уменьшении вычислительной сложности и расширении области применимости численных методов к сложным инженерным задачам, что делает их важным компонентом современных методик проектирования композитных материалов.

1.7 Основные выводы

Несмотря на значительное число известных подходов, остаются нерешенные задачи:

- высокая вычислительная стоимость моделирования разрушения при большом числе варьируемых параметров (углы, свойства, нагрузки);
- зависимость точности суррогатных моделей от качества данных;
- существенные затруднения в применении классических методов критериев разрушения на сложные многослойные конфигурации;
- недостаток комплексных моделей, способных соединить CLT, критерии разрушения, конечно-элементные данные и методы машинного обучения в единый вычислительный процесс.

Таким образом, разработка гибридной методики, включающей генерацию данных на основе пакетов численного моделирования, теорию слоистых структур, машинное обучение для суррогатных моделей разрушения и генетическую оптимизацию углов укладки, является актуальной задачей современной механики композитов.

Глава 2. Структура полимерных композитных материалов (ПКМ)

2.1 Однослойный КМ

Однослойный композиционный материал является базовым структурным элементом многослойных полимерных композиционных материалов. Он представляет собой гетерогенную среду, состоящую, как правило, из армирующих волокон, ориентированных в одном направлении, и полимерной матрицы, обеспечивающей совместную работу волокон, передачу нагрузок и защиту от внешних воздействий (рисунок 2.1).

Армирующая фаза определяет основные прочностные и жесткостные характеристики однослойного композита в направлении ориентации волокон. В качестве армирующих элементов наиболее широко применяются углеродные, стеклянные и арамидные волокна, обладающие высокой удельной прочностью и модулем упругости. Полимерная матрица, как правило, выполняется на основе термореактивных или термопластичных полимеров и обеспечивает целостность структуры, устойчивость к сдвиговым и поперечным нагрузкам, а также сопротивление расслоению.

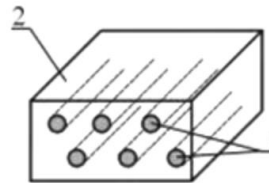


Рисунок 2.1. Однонаправленный композитный материал. 1 - продольное армирующее волокно, 2 - матрица.

С механической точки зрения однослойный композиционный материал является **ортотропным телом**, для которого упругие свойства существенно различаются в направлении волокон, в поперечном направлении и в плоскости слоя (рисунок 2.2). В инженерной практике поведение однослойного композита обычно описывается в рамках линейной теории упругости с использованием набора независимых упругих констант: продольного и поперечного модулей упругости, модуля сдвига и коэффициентов Пуассона.

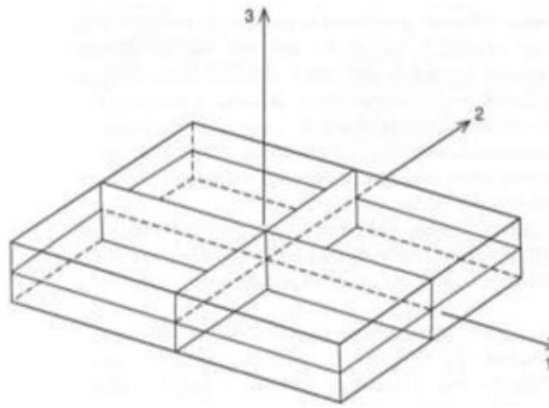


Рисунок 2.2. Оси 1, 2, 3 - главные ортотропные оси монослоя

Эффективные упругие характеристики однослойного композиционного материала зависят от свойств компонентов, их объемных долей, геометрии армирования и качества межфазного взаимодействия. Для их определения применяются различные подходы, включая микромеханические модели, полуэмпирические соотношения и численные методы. Наиболее распространенными являются модели правил смесей, методы на основе теории эффективных сред, а также численные методы с использованием представительного объема материала.

В рамках многомасштабного моделирования однослойный композиционный материал рассматривается как связующее звено между микроструктурным уровнем, на котором описываются свойства волокна и матрицы, и макроуровнем, на котором анализируется поведение многослойной конструкции (рисунок 2.3). Полученные на этом уровне упругие и прочностные характеристики используются в дальнейшем при расчете многослойных композитов на основе классической теории слоистых структур.

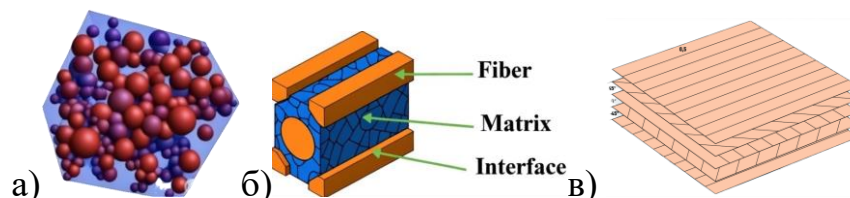


Рисунок 2.3. нано-, мезо-, макроуровень моделирования соответственно.

Следует отметить, что при анализе прочности однонаправленного однослойного композиционного материала необходимо учитывать его

ортотропную природу и различие механизмов разрушения в зависимости от направления приложения силы. Для описания разрушения однослойных композитов применяются различные феноменологические критерии, основанные на напряжениях или деформациях, которые подробно рассматриваются в последующих разделах работы.

Таким образом, корректное описание механических свойств и поведения однослойного композиционного материала является ключевым этапом при моделировании многослойных полимерных композитов и формирует основу для дальнейшего анализа их прочности, усталостной долговечности и оптимизации структуры.

2.2 Элемент репрезентативного объема КМ

Элемент репрезентативного объема (Representative Volume Element, RVE) является ключевым понятием многомасштабного моделирования полимерных композиционных материалов (рисунок 2.4). RVE представляет собой минимальный объем материала, статистически репрезентирующий его микроструктуру, и позволяющий корректно описывать макроскопические свойства на основании локальных характеристик компонентов. Для многослойных композитов RVE обычно включает армирующие волокна и матрицу с учетом их распределения, ориентации волокон и взаимодействия между фазами.

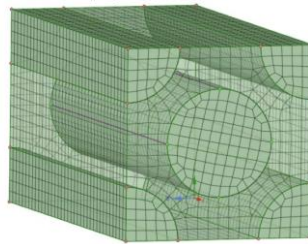


Рисунок 2.4. Элемент репрезентативного объема

Использование RVE позволяет формализовать переход от микроуровня (свойства волокон и матрицы) к мезоуровню (свойства однослойного материала) и далее к макроуровню (многослойные конструкции). При этом предполагается, что свойства RVE адекватно усредняют локальные анизотропные характеристики

материала, обеспечивая возможность применения эффективных упругих констант и критериев разрушения на уровне слоя или конструкции в целом.

Для определения механических свойств RVE применяются различные методы:

1. Микромеханические модели - аналитические или полуэмпирические подходы, учитывающие объемные доли компонентов, геометрию армирования и свойства матрицы и волокон. Классическими являются правила смесей для продольного и поперечного модуля упругости [18].
2. Численные методы на основе конечно-элементного анализа - позволяют учитывать сложное расположение волокон и влияние межфазных взаимодействий. Такие модели позволяют прогнозировать локальные поля напряжений и деформаций, а также определять зоны концентрации напряжений, критичные для разрушения [19].
3. Гибридные подходы - комбинация аналитических моделей и FEA, где RVE используется для генерации данных, которые затем применяются в многослойных расчетах или при построении суррогатных моделей с использованием машинного обучения.

Корректная постановка RVE критична для дальнейшего анализа прочности и усталостной долговечности материала. Неправильное определение или недостаточный объем элемента может привести к значительным погрешностям при прогнозировании макроскопических свойств. В связи с этим выбор RVE требует оценки статистической репрезентативности, соответствия геометрии армирования и масштабного соотношения между размером элемента и характерными размерами микроструктуры.

Таким образом, элемент репрезентативного объема служит фундаментом многомасштабного подхода к моделированию полимерных композитов, обеспечивая согласованность между микро-, мезо- и макроуровнями моделирования. Полученные на уровне RVE эффективные упругие свойства и поля напряжений используются для построения моделей однослойных и многослойных композитов, расчета их прочности, а также для формирования проблемно-

ориентированных наборов данных, применяемых в задачах машинного обучения и оптимизации структуры композита.

2.3 Структура и особенности многослойного КМ

Многослойный композиционный материал представляет собой совокупность однослойных композитов, соединенных в определенной последовательности и под определенными углами ориентации волокон. Такой подход позволяет формировать конструкции с заданными механическими свойствами, включая прочность, жесткость, сопротивление деформациям и устойчивость к усталости, которые невозможно достичь в рамках однослойных композитов.

2.3.1 Основные характеристики

Структура многослойного композита определяется следующими параметрами:

- **Толщина каждого слоя** - влияет на распределение напряжений и жесткость конструкции;
- **Материал и свойства каждого слоя** - продольный и поперечный модули упругости, модуль сдвига, коэффициенты Пуассона, прочностные характеристики;
- **Углы ориентации волокон** - критически важный фактор для управления анизотропией и перераспределения нагрузок;
- **Последовательность укладки слоев** - влияет на механическую целостность и устойчивость к расслоению;
- **Число слоев** - задает общую толщину конструкции и распределение механических характеристик по толщине.

2.3.2 Анизотропия и механическая целостность

Многослойные композиты обладают выраженной анизотропией: продольная жесткость, сопротивление сдвигу и прочность различаются как по направлению волокон, так и в плоскости слоев. Правильное сочетание материалов, толщин и

углов укладки позволяет создавать конструкции с желаемым балансом прочности и жесткости, а также контролировать распределение напряжений и предотвращать их локальные концентрации.

2.3.3 Методы анализа

Для анализа многослойных композитов применяются:

1. **Классическая теория слоистых структур (CLT)** - позволяет вычислять упругие характеристики многослойной конструкции на основе свойств отдельных слоев и их ориентации [20]. CLT применяется для прогнозирования макроскопической жесткости, деформаций и распределения напряжений.
2. **Конечно-элементное моделирование (FEM)** - используется для анализа локальных полей напряжений, выявления критических зон и моделирования сложных нагрузочных условий, включая неравномерное нагружение, контактные взаимодействия и многослойные эффекты.
3. **Многомасштабные подходы** - интеграция данных с микро- и мезоуровней через RVE позволяет более точно прогнозировать поведение конструкции при сложных нагрузках и дефектах материалов.

2.3.4 Особенности эксплуатации

Особое внимание в многослойных композиционных материалах уделяется устойчивости к расслоению и усталостным повреждениям, поскольку локальные дефекты в одном слое могут распространяться по всей конструкции. При проектировании учитываются как **межслоевые взаимодействия**, так и влияние последовательности укладки слоев на распределение нагрузок.

2.3.5 Значение для настоящего исследования

Правильное описание структуры многослойного композита является ключевым для дальнейшего построения моделей машинного обучения и оптимизации структуры. Полученные характеристики слоев и их сочетаний служат

входными данными для предсказательной модели разрушения и генетического алгоритма для решения обратной задачи синтеза композиционного материала с заданными свойствами.

2.4 Критерии разрушения

Критерии разрушения многослойных полимерных композиционных материалов являются фундаментальным инструментом для оценки прочностных характеристик и прогнозирования поведения конструкции при различных нагрузках. Они позволяют количественно определить момент наступления повреждения в слое или в целом многослойной структуре, учитывая анизотропную природу материала и различие механизмов разрушения в продольном и поперечном направлениях.

2.4.1 Классификация критериев

Существует 2 подхода к оценке прочности слоистого КМ: 1) по выбранному критерию прочности оценивается прочность каждого монослоя после чего делается вывод о прочности всего многослойного КМ; 2) оценивается прочность всего многослойного КМ, рассматриваемого как анизотропный материал.

Большинство САЕ-систем реализует модуль расчета разрушения слоистого КМ. Для МКМ, состоящих из однонаправленных слоев, могут применяться следующие критерии прочности [21]:

- максимальных деформаций;
- максимальных напряжений;
- Цзя-Бу;
- Цзя-Хилла;
- Хофмана;
- Хашина;
- Пака;
- Кунце;
- LaRC.

В работе [22] отмечается, что в РФ чаще используются критерии, базирующиеся на напряжениях, что может быть связано со стандартами паспортизации КМ в РФ: для монослоя КМ указываются разрушающие напряжения при растяжении, сжатии.

Напряженное состояние материала характеризуется главными напряжениями $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ в каждой расчетной точке. Если одно из трех главных напряжений равно 0, а 2 других отличны от 0 и действуют в одной плоскости, то материал находится в плоском напряженном состоянии. Большая часть элементов из КМ (оболочки, пластины, балки) в конструкциях описываются напряженным состоянием, близким к плоскому [23].

Коэффициент запаса прочности RF (Reserve Factor) определяется как отношение разрушающей нагрузки F_f к приложенной нагрузке $F_{applied}$: $RF = \frac{F_f}{F_{applied}}$.

Аналізу применимости и сравнению критериев прочности для различных КМ посвящена работа [22]. В таблице 2.1 приведены функции критериев прочности КМ и особенности их применения, при расчете запаса прочности и разрушения многослойных КМ, состоящих из однонаправленных монослоев КМ для плоского напряженного состояния КМ.

В таблице 2.1 использованы следующие обозначения: X, Y, Z - пределы прочности КМ вдоль осей, определенные для одноосного растяжения X_t, Y_t, Z_t и сжатия X_c, Y_c, Z_c . Пределы прочности Z в плоском напряженном состоянии тела в плоскости XY принимаются равными 0. S, R, Q - пределы прочности материала, определенные для сдвиговых напряжений. $\tau_{12}, \tau_{13}, \tau_{23}$ - касательные напряжения КМ. Указанные величины являются заданными свойствами монослоя КМ (определяются экспериментальным путем).

Таблица 2.1. Критерии прочности, особенности их применения для волокнистых КМ.

Название и функция критерия прочности для однонаправленного монослоя КМ	Особенности применения критерия	В каких пакетах численного моделирования поддерживается
Критерий Максимальных напряжений $f = \left(\left \frac{\sigma_1}{X} \right , \left \frac{\sigma_2}{Y} \right , \left \frac{\tau_{12}}{S} \right \right),$ где $\{X = X_t, \text{при } \sigma_1 \geq 0; X = X_c, \text{при } \sigma_1 < 0; Y = Y_t, \text{при } \sigma_2 \geq 0; Y = Y_c, \text{при } \sigma_2 < 0.$	-отсутствует учет взаимосвязей между различными составляющими напряжения; -для контролируемого разрушения матрицы наиболее достоверные результаты достигаются, если напряжение, приложенное к КМ, перпендикулярно ориентации волокон; -прогнозирует ограниченный спектр разрушений, т.к. напряжение в каждом направлении сечения материала сравнивается с	SolidWorks Fidesys Nastran/ Femap Ansys Abacus Helius/Autodesk Comsol HyperWorks

	параметром прочности в этом же направлении; -дает консервативную оценку запаса прочности;	
Критерий Цая-Хилла (Хилла-Мизеса) $f = \left(\frac{\sigma_1}{X}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_2}{Y}\right)^2 + \left(\frac{\tau_{12}}{S}\right)^2 - \frac{\sigma_1\sigma_2}{X^2},$ $H = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{X^2} + \frac{1}{Y^2} \right),$ где $\{X = X_t, \text{ при } \sigma_1 \geq 0; X = X_c, \text{ при } \sigma_1 < 0; Y = Y_t, \text{ при } \sigma_2 \geq 0; Y = Y_c, \text{ при } \sigma_2 < 0.$	-применяется при равенстве сил растяжения и сжатия КМ; -не позволяет прогнозировать формы и причины разрушения монослоя; -для контролируемого разрушения матрицы применяется, если напряжение, перпендикулярное волокнам $\sigma_2 < 0$;	SolidWorks Fidesys Nastran/ Femap Ansys Abacus Helius/Autodesk Comsol HyperWorks
Критерий Цая - Ву $f = \frac{\sigma_1^2}{X_t X_c} + \frac{\sigma_2^2}{Y_t Y_c} + \frac{\tau_{23}^2}{Q^2} + \frac{\tau_{13}^2}{R^2} + \frac{\tau_{12}^2}{S^2} + \left(\frac{1}{X_t} - \frac{1}{X_c} \right) \sigma_1 + \left(\frac{1}{Y_t} - \frac{1}{Y_c} \right) \sigma_2 + 2F_{12}\sigma_1\sigma_2$	-наиболее достоверные результаты при неравенстве сил сжатия и растяжения КМ; -для контролируемого разрушения матрицы применяется, если	SolidWorks Fidesys Nastran/ Femap Ansys Abacus Helius/Autodesk Comsol

	напряжение, перпендикулярное волокнам $\sigma_2 < 0$; -коэффициент взаимодействия F_{12} определяется с помощью экспериментальных испытаний на двухосную нагрузку; при отсутствии экспериментальных данных принимают $F_{12} = -\frac{1}{2}$;	HyperWorks
Критерий Хашина $f = \max(f_f^+, f_f^-, f_m^+, f_m^-),$ $f_f^+ = \left(\frac{\sigma_1}{X_t}\right)^2 + \left(\frac{\tau_{12}}{S}\right)^2, \sigma_1 \geq 0;$ $f_f^- = \frac{\sigma_1}{X_c}, \sigma_1 < 0;$ $f_m^+ = \left(\frac{\sigma_2}{Y_t}\right)^2 + \left(\frac{\tau_{12}}{S}\right)^2, \sigma_2 \geq 0;$ $f_m^- = \left(\frac{\sigma_2}{2S}\right)^2 + \left(\frac{\tau_{12}}{S}\right)^2 + \left[\left(\frac{Y_c}{2S}\right)^2 - 1\right] \frac{\sigma_2}{Y_c}, \sigma_2 < 0;$	-задает критерии прочности: волокон при растяжении и сжатии вдоль волокон функциями f_f^+ и f_f^-; -матрицы при растяжении и сжатии в трансверсальном направлении функциями f_m^+ и f_m^-; -КМ считается разрушенным при достижении 1 одной из четырех функций критерия, т.е. в результате наиболее вероятного механизма разрушения КМ.	Ansys Helius/Autodesk HyperWorks

Модифицированный критерий Пака $f = \max(f_f, f_m)$ $f_f = \left(\left \frac{\sigma_1}{X} \right , \left \frac{\sigma_2}{Y} \right , \left \frac{\tau_{12}}{S} \right \right),$ где $\{X = X_t, \text{ при } \sigma_1 \geq 0; X = X_c, \text{ при } \sigma_1 < 0; Y = Y_t, \text{ при } \sigma_2 \geq 0; Y = Y_c, \text{ при } \sigma_2 < 0.$ $f_m = \frac{\sigma_2^2}{Y_t Y_c} + \left(\frac{\tau_{12}}{S} \right)^2 + \left(\frac{1}{Y_t} + \frac{1}{Y_c} \right) \sigma_2$	-задает функции критериев прочности при сжатии и растяжении волокон и матрицы КМ; -позволяет прогнозировать разрушение КМ в результате расслоения при введении дополнительного коэффициента расслоения для межслойного интерфейса; -интерфибральный критерий прочности Пака (IFF) предусматривает введение шести констант пороговых напряжений и позволяет предсказывать направления расположения микротрещин в КМ, но необходимость введения дополнительных внутренних параметров модели, зависящих от свойств КМ, делают его применение затруднительным.	Fidesys Nastran/ Femap Ansys Abacus Helius/Autodesk Comsol HyperWorks
---	---	--

При необходимости задания приоритета в оценке механизма разрушения некоторые критерии прочности могут быть дополнены весовыми коэффициентами, определяющими наиболее вероятный механизм разрушения КМ. Так, если к КМ предъявляются более жесткие требования по разрушению волокон, чем по

отсутствию расслоения, то необходимо повысить весовой коэффициент критерия прочности при разрушении волокон. В [21] в качестве примера приводится критерий максимальных напряжений, дополненный весовыми коэффициентами $W_1, W_2, W_3, W_{12}, W_{13}, W_{23}$:

$$f = \max \left(\left| W_1 \frac{\sigma_1}{X} \right|, \left| W_2 \frac{\sigma_2}{Y} \right|, \left| W_3 \frac{\sigma_3}{Z} \right|, \left| W_{12} \frac{\tau_{12}}{S} \right|, \left| W_{13} \frac{\tau_{13}}{R} \right|, \left| W_{23} \frac{\tau_{23}}{Q} \right| \right).$$

В современных САЕ-системах квадратичные критерии прочности получили наиболее широкое распространение, несмотря на основной недостаток тензорно-полиномиальных критериев, а именно невозможность установить механизм разрушения монослоя, в результате чего возникает неопределенность при принятии решения об исключении монослоя из расчета прочности пакета в случае разрыва волокон или принятии гипотезы, что свойства матрицы монослоя перестают влиять на прочностные свойства пакета в случае разрушения поверхности раздела.

В данной работе для оценки прочности и начала разрушения слоев композитного материала использовался критерий Хоффмана. Данный критерий относится к феноменологическим квадратичным критериям прочности и позволяет учитывать различие между прочностью материала при растяжении и сжатии, а также совместное влияние нормальных и касательных напряжений [23]. Для плоского напряженного состояния однонаправленного монослоя критерий Хоффмана записывается в виде

$$F_1 \cdot \sigma_1 + F_2 \cdot \sigma_2 + F_{11} \cdot \sigma_1^2 + F_{22} \cdot \sigma_2^2 + F_{12} \cdot \sigma_1 \cdot \sigma_2 + F_{66} \cdot \tau_{12}^2 \leq 1,$$

где σ_1, σ_2 - нормальные напряжения вдоль и поперек волокон, τ_{12}^2 - касательное напряжение, а коэффициенты выражаются через пределы прочности при растяжении и сжатии X_t, X_c (вдоль волокон), Y_t, Y_c (поперек) и предел прочности при сдвиге S :

$$F_1 = \frac{1}{X_t} - \frac{1}{X_c}, F_2 = \frac{1}{Y_t} - \frac{1}{Y_c},$$

$$F_{11} = \frac{1}{X_t \cdot X_c}, F_{22} = \frac{1}{Y_t \cdot Y_c}, F_{66} = \frac{1}{S^2}, F_{12} = -0.5 \cdot (F_{11} + F_{22}),$$

где F_{12} принимается по указанной формуле, если коэффициент взаимодействия не определен экспериментально.

В настоящей работе значение левой части критерия, вычисляемое в каждой расчетной точке, называется индексом разрушения; интегральным индексом разрушения многослойного композита принимается максимальное значение по всем слоям и точкам. Эта скалярная величина используется как целевой признак для модели машинного обучения (глава 4) и как целевая функция в обратной задаче (глава 5). В отличие от более простых критериев, таких как критерий максимальных напряжений, критерий Хоффмана учитывает взаимодействие компонент напряженного состояния, что особенно важно для многослойных композитов, работающих в условиях сложного напряженного состояния. При этом критерий Хоффмана не требует моделирования механизмов повреждения и параметров эволюции разрушения, что делает его вычислительно устойчивым и удобным для применения в численных расчетах и параметрических исследованиях. Выбор данного критерия обеспечивает компромисс между физической обоснованностью, численной стабильностью и применимостью в задачах оптимизации и машинного обучения, где требуется однозначный скалярный показатель уровня разрушения слоя.

2.4.2 Применение критериев в многослойных композитах

Для многослойных конструкций разрушение одного слоя может привести к перераспределению нагрузок между соседними слоями и изменению общего состояния напряжений. В связи с этим при анализе применяются:

- Последовательное применение критериев к каждому слою с учетом ориентации волокон и механических свойств;
- Обобщение критических состояний на уровне МКМ для прогнозирования глобального разрушения;
- Интеграция с методами многомасштабного моделирования, где свойства слоев получаются на основе RVE и CLT.

2.4.3 Значение для настоящего исследования

Выбор и корректное применение критериев разрушения критично для формирования точного проблемно-ориентированного набора данных, который служит входом для моделей машинного обучения. Они обеспечивают возможность количественного предсказания прочностных характеристик и создания алгоритмов оптимизации структуры многослойного композита, включая обратное проектирование состава и ориентации слоев.

2.5 Основные выводы

В данной главе обоснован методический подход к анализу и оптимизации прочностных характеристик многослойных полимерных композитных материалов на основе сочетания многомасштабного численного моделирования и методов машинного обучения. Проведен систематический анализ существующих методов моделирования прочности и усталости слоистых композитов, включая микромеханические, мезомасштабные и макромасштабные модели, а также методы конечно-элементного анализа и теорию классических слоистых структур. Выявлены их достоинства и ограничения применительно к оценке прочностных характеристик многослойных полимерных композитов при различной укладке слоев и механических воздействиях.

Глава 3. Методика полуавтоматического формирования проблемно-ориентированных коллекций данных

Для построения эффективных моделей предсказания разрушения многослойных полимерных композитов необходима качественная база данных, отражающая зависимость прочностных и упругих характеристик от структуры материала, последовательности укладки слоев и свойств отдельных компонентов. В условиях сложной анизотропной структуры ПКМ экспериментальное получение таких данных является дорогостоящим и трудоемким, особенно при учете множества комбинаций материалов, толщин и углов укладки. Поэтому в работе предложена методика генерации таких данных средствами многомасштабного численного моделирования.

Формируемый набор данных описывает зависимость «структура укладки → прочность»: для каждого образца (многослойного композита с 2-10 слоями) задаются углы ориентации волокон каждого слоя (из диапазона 0-90° с шагом 5°), используемые материалы и физико-механические параметры, а в качестве выходных величин сохраняются упругие характеристики (модули упругости и сдвига) и интегральный индекс разрушения по критерию Хоффмана.

Полуавтоматическое формирование проблемно-ориентированных коллекций данных позволяет решить эту задачу за счет интеграции молекулярно-динамического и численного моделирования на нано-, мезо- и макроуровнях с программной генерацией наборов данных, пригодных для последующего обучения моделей машинного обучения и оптимизации структуры композита. Такой подход обеспечивает:

1. Статистическую репрезентативность данных - охватываются все значимые комбинации параметров слоев и материалов.
2. Снижение трудозатрат и времени на генерацию данных - за счет автоматизации расчетов упругих свойств, применения CLT и оценки критериев разрушения.
3. Возможность масштабирования - легко добавлять новые материалы или новые схемы укладки слоев без существенного изменения алгоритма.

4. Подготовку данных для обучения ML моделей и интеграцию с методами оптимизации - формируемые наборы данных используются для обучения суррогатных (RNN) моделей и решения обратной задачи выбора структуры композита.

В данной главе описывается методика формирования таких коллекций, включая: расчет упругих свойств базового материала и однослойного композита, построение многослойного композита с различными углами укладки (CLT), а также организацию и хранение полученных данных.

3.1. Концепция многомасштабного моделирования

Под **многомасштабной моделью** понимается подход, при котором изучаемая физическая проблема рассматривается одновременно на нескольких иерархически связанных уровнях, характеризующихся несопоставимыми пространственными, временными или иными параметрами (различающимися на несколько порядков) [24]. Ключевой особенностью такого моделирования является обязательный учет явлений, протекающих как на «грубой» (макро-), так и на «тонкой» (микро-) шкале, поскольку корректное описание системы невозможно без их явного взаимодействия и взаимного влияния в рамках единой вычислительной схемы. В настоящей работе исследуемая задача рассматривается в рамках концепции многомасштабного моделирования полимерных композитных материалов, предполагающей последовательное описание их свойств на взаимосвязанных пространственно-временных масштабах. Многомасштабная модель используется для решения прямой и обратной задач. Прямая задача состоит в том, чтобы по известной структуре многослойного композита (число слоев, углы укладки, материалы) вычислить его интегральный индекс разрушения и упругие характеристики. Такой подход служит методологической основой для согласованного перехода от свойств исходных компонентов к прогнозированию прочностных характеристик многослойного композитного материала и последующему решению задач анализа и оптимизации его структуры. Обратная задача состоит в том, чтобы по заданным инженерным требованиям (жесткость,

прочность, толщина) подобрать такую укладку, которая этим требованиям удовлетворяет и обеспечивает минимальный индекс разрушения; ее постановка и алгоритм решения приведены в главе 5.

3.1.1 Базовые модели-композиции

Базовая модель-композиция - информационная структура, объединяющая данные и методы их обработки в единой информационно-вычислительной среде [24]. Представим базовую модель-композицию (базовую композицию, БК) как объединение основных множеств разного структурного типа:

$$VX_{ij}, MA_{ij}, \{MA_{ij}^k\}_{k=1}^p$$

Здесь i -номер масштабного уровня, $i = \underline{0, L}$, где L -число рассматриваемых уровней, j - номер базовой модели-композиции на текущем масштабном уровне, $j = \underline{0, N}$, N - число моделей на i -ом уровне, k - номер элементарного процесса БК.

Опишем основные множества:

$VX_{ij} = \{V_{ij}, X_{ij}\}$ - множество данных, где:

V_{ij} -множество входных данных (внешние характеристики модели);

X_{ij} - множество выходных данных (фазовых переменных и данных-свойств модели);

MA_{ij} - множество методов обработки данных (модели и алгоритмы);

$\{MA_{ij}^k\}_{k=1}^p$ - множество реализаций моделей и алгоритмов в зависимости от элементарного процесса p ;

Под базовой моделью-композицией MC_j^i будем понимать однопараметрическое семейство основных множеств, задействованных в общем вычислительном процессе, разного структурного типа, включая данные и методы их обработки.

$$MC_j^i = \langle \{VX_{ij}, E_{ij}, MA_{ij}, \{MA_{ij}^k\}_{k=1}^p\} \rangle$$

Здесь

$$VX_{ij} = \{V_{ij}, X_{ij}\}, MA_{ij} = \{M_{ij}, A_{ij}\},$$

$$\{MA_{ij}^k\}_{k=1}^p = \{MA_{ij}^1, MA_{ij}^2, \dots, MA_{ij}^p\}.$$

Параметром семейства основных множеств является количество элементарных процессов в базовой модели-композиции p . Индексы i и j позволяют идентифицировать MC_j^i на пространственном уровне i по ее номеру j . Структуры моделей-композиций продемонстрированы в таблицах А.1 - А.6 в приложении А.

3.1.2 Многомасштабная композиция

Под многомасштабной композицией (МК) будем понимать однопараметрическое семейство, полученное из экземпляров БК с разных масштабных уровней за счет объединения в общем вычислительном процессе их основных множеств разного структурного типа, включая данные и методы их обработки [24].

Используемые в многомасштабной модели методы могут быть классифицированы по типам математических моделей и алгоритмов:

- дискретные атомистические модели: молекулярная динамика в пакете LAMMPS, используемая для расчета эффективных упругих свойств матрицы и волокна на наноуровне (раздел 3.2);
- мезоскопические аналитические модели: правило смесей и обратные правила смесей для эффективных свойств однонаправленного монослоя (раздел 3.4);
- континуальные (дифференциальные) модели: классическая теория слоистых структур (CLT), метод конечных элементов (FEM, пакеты ANSYS и COMSOL), уравнения линейной теории упругости для ортотропного монослоя и многослойного композита (разделы 2 и 3);

Каждая из указанных категорий входит в структуру многомасштабной композиции (таблица 3.1), что обеспечивает интеграцию всех классов методов в единый вычислительный процесс для решения задачи исследования прочностных характеристик композиционных материалов. Классификация соответствующих БК приведена в таблице 3.1.

Таблица 3.1. Классификация базовых моделей-композиций

№ уровня	Обозначение и название базовой модели-композиции
0	MC_0^1 «SMILES ФОРМУЛА (МАТРИЦА)» MC_0^2 «SMILES ФОРМУЛА (ВОЛОКНО)»
1	MC_1^1 «МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА (МАТРИЦА)» MC_1^2 «МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА (ВОЛОКНО)»
2	MC_2^1 «ГОМОГЕНИЗАЦИЯ RVE (АВТОРСКИЙ)» MC_2^2 «ГОМОГЕНИЗАЦИЯ RVE (ANSYS)» MC_2^3 «ГОМОГЕНИЗАЦИЯ RVE (АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ)»
3	MC_3^1 «ГОМОГЕНИЗАЦИЯ МКМ (ANSYS)» MC_3^2 «НАПРЯЖЕНИЕ И РАЗРУШЕНИЕ МКМ (COMSOL)»

Структура МК полностью определяет вычислительную цепочку экземпляров базовых моделей-композиций (последовательность вычислений) для расчета искомых характеристик:

$$\begin{aligned}
 &MC_{01}^{matrix} : \{V_{01}^{matrix}\} \\
 &MC_{02}^{fiber} : \{V_{02}^{fiber}\} \\
 &MC_{11}^{matrix} : \{V_{11}^{matrix}, X_{11}^{matrix}, MA_{11}^{matrix}\} \\
 &MC_{12}^{fiber} : \{V_{12}^{fiber}, X_{12}^{fiber}, MA_{12}^{fiber}\} \\
 &MC_{23}^{matrix/fiber} : \{V_{23}^{matrix/fiber}, X_{23}^{matrix/fiber}, MA_{23}^{matrix/fiber}\} \\
 &MC_{31}^{matrix/fiber} : \{V_{31}^{matrix/fiber}, X_{31}^{matrix/fiber}, MA_{31}^{matrix/fiber}\} \\
 &MC_{32}^{matrix/fiber} : \{V_{32}^{matrix/fiber}, X_{32}^{matrix/fiber}, MA_{32}^{matrix/fiber}\}
 \end{aligned}$$

В приведенной последовательности указаны как применяемые методы, так и принимающие участие в расчетах данные. Тогда, построенная многомасштабная композиция может быть представлена в следующем виде:

$$MK_{1,2,3}^{(11;/12;)23;31,32} = MK_{1,2,3}^{(matrix/fiber);23;31,32}$$

На рисунке 3.1 представлена структура многомасштабной композиции для расчета прочностных характеристик трехслойного полимерного композитного материала.

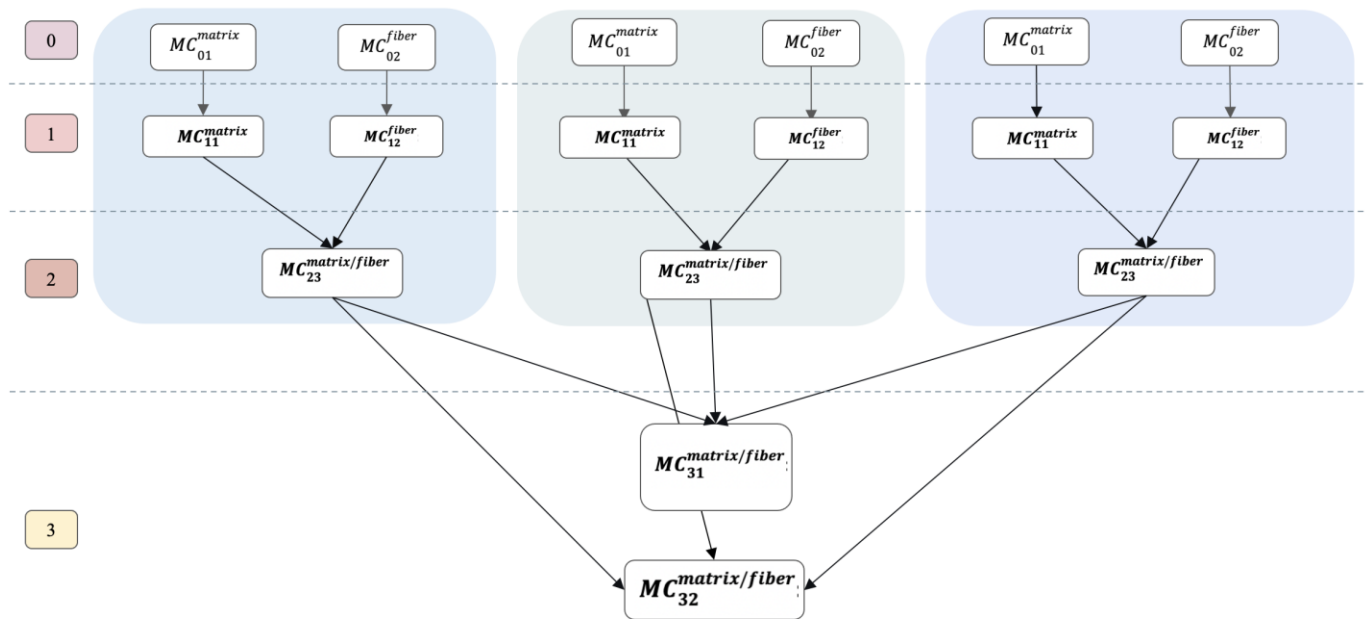


Рисунок 3.1. Схематическое представление многомасштабной композиции для трехслойного КМ

В качестве базиса используются классические модели композиции и гомогенизации, обеспечивающие переход от нано уровня к макроуровню. На нано масштабе рассматриваются полимерная матрица и армирующее волокно как однородные фазы с заданными упругими и прочностными характеристиками. Эти параметры служат входными данными для построения эффективных свойств однослойного композита на мезо масштабе с учетом объемных долей компонентов. Далее, на макроуровне, поведение многослойного композитного материала описывается в рамках классической теории слоистых структур и/или с использованием пакетов численного моделирования, что позволяет агрегировать свойства отдельных слоев с различными углами укладки и толщинами в

интегральные характеристики жесткости и напряженно-деформированного состояния конструкции.

Построенная в работе схема многомасштабной композиции обеспечивает согласованное распространение информации о свойствах материала от нижележащих масштабов к вышележащим и формирует единое расчетное пространство для анализа прочности и разрушения. Наличие формализованных связей между уровнями позволяет использовать результаты численного моделирования для систематической генерации проблемно-ориентированных наборов данных и последующего применения методов машинного обучения и оптимизации.

Использование концепции многомасштабного моделирования в данной работе позволяет связать параметры структуры и состава многослойного композитного материала с его прочностными характеристиками на уровне конструкции. Такой подход обеспечивает физическую интерпретируемость получаемых результатов, снижает зависимость моделей от эмпирических допущений и создает методологическую основу для решения обратных задач проектирования и оптимизации композитных материалов.

Математическое описание многомасштабной модели.

Рассматривается многослойный композит Ω , состоящий из L однонаправленных ортотропных монослоев толщиной t_k ($k = 1, \dots, L$) с углами укладки θ_k . Каждому масштабному уровню ставится в соответствие отображение:

$$\begin{aligned} F_{nano} (MC_1) : X_n &\rightarrow H_m, \\ F_{meso} (MC_2) : [H_{m1}, H_{m2}] &\rightarrow H_p, \\ F_{macro} (MC_3) : H_p \times \Theta &\rightarrow H_I, \end{aligned}$$

где X_n - параметры наноуровня (Smiles формула), H_m - эффективные упругие свойства материала, H_p - эффективные ортотропные свойства монослоя, Θ - множество последовательностей углов укладки, H_I - интегральный индекс разрушения, F_{nano} - наноуровень (определение свойств матрицы и волокна по молекулярной структуре), F_{meso} - мезоуровень (гомогенизация представительного

объема RVE до эффективных свойств монослоя), F_{macro} - макроуровень, на котором краевая задача теории упругости, описываемая системой дифференциальных уравнений равновесия, решается методом конечных элементов (МКЭ) в рамках классической теории слоистых структур, что позволяет вычислить напряженно-деформированное состояние и интегральный индекс разрушения H_I . Тогда многомасштабная модель задается композицией отображений:

$$F_{macro} \circ F_{meso} \circ F_{nano} \quad (3.1)$$

Прямая задача сводится к вычислению значения составного оператора F для заданных входных параметров. Математические модели отдельных уровней и соответствующие уравнения приведены в разделах, описывающих сами уровни: наноуровень - раздел 3.2, формулы (3.2)-(3.4); мезоуровень (гомогенизация RVE) - раздел 3.4, формулы (3.5)-(3.10); макроуровень (система дифференциальных уравнений равновесия, решаемая методом конечных элементов в рамках классической теории слоистых структур) - разделы 3.5-3.6, формулы (3.12)-(3.17); критерий разрушения Хоффмана и интегральный индекс разрушения - раздел 3.5, формула (3.11).

Связь с задачами моделирования.

Построенная модель F решает прямую задачу: по структуре укладки (число слоев L , углы θ_k , свойства материалов) вычисляются упругие характеристики пакета и интегральный индекс разрушения H_I . Эта же модель используется при решении обратной задачи выбора укладки под заданные требования по жесткости, прочности и толщине (глава 5). Поскольку многократное решение краевой задачи (3.11)-(3.17) при многовариантном анализе требует больших вычислительных затрат, применяется суррогатная модель машинного обучения BIRN, обученная на наборе пар «структура укладки $\rightarrow$ интегральный индекс разрушения», полученных решением задач (3.11)-(3.17) для представительного множества конфигураций; BIRN аппроксимирует решение задач (3.11)-(3.17) в составе алгоритма обратного проектирования.

3.2 Расчет упругих свойств базового материала

Модуль для расчета упругих свойств матрицы/волокна включает в себя этап подготовки атомистической модели аморфного материала для последующего молекулярно-динамического (МД) моделирования его свойств. Его основная задача - автоматическое преобразование химической структуры мономера в реалистичную трехмерную (3D) периодическую модель конденсированного состояния с равновесной плотностью.

Алгоритм работы модуля включает четыре основных этапа:

1. Генерация цепи: построение одиночной макромолекулы на основе SMILES-нотации мономера.
2. Создание начальной периодической системы: размещение цепи в элементарной ячейке и ее репликация для формирования начальной 3D-модели.
3. Молекулярно-динамическое уплотнение: использование МД-моделирования (NPT-ансамбль) для достижения равновесной плотности материала.
4. Равновесная релаксация: стабилизация системы при целевых термодинамических условиях.

Генерация цепи из SMILES-описания мономера. На вход модуля подается SMILES-строка (Simplified Molecular Input Line Entry System) [25], однозначно описывающая структуру мономера с указанием точек связи (например, для полипиррола: *C1=CC=CN1*, где * обозначает точки роста цепи). Модуль использует химико-информационные библиотеки (например, RDKit [26] или аналогичные внутренние средства) для разбора этой строки и создания объектной модели молекулы.

На основе этой модели алгоритм осуществляет следующий процесс:

- **Определение точек связи:** автоматическое распознавание атомов, помеченных как точки роста цепи.

- **Создание повторяющегося звена:** формирование структурной единицы, которая будет многократно повторяться. При необходимости производится модификация концевых групп (например, присоединение атомов водорода).
- Последовательное ковалентное связывание заданного числа звеньев (N) в линейную цепь. Для гибких цепей начальная конформация (торсионные углы) может задаваться случайным образом или в соответствии с библиотекой предустановленных конформаций, чтобы избежать искусственно вытянутой структуры.
- **Формирование выходных данных:** результат этого этапа - всеатомная модель одиночной цепи. Данные сохраняются в структурированном формате (JSON, PDB, или молекулярный файл формата .mol/.data для LAMMPS), содержащем информацию о координатах всех атомов, типах химических связей, валентных и торсионных углах, а также общую топологию цепи.

Построение трехмерной периодической системы. Полученная одиночная цепь представляет собой изолированную молекулу в вакууме, что не соответствует конденсированному состоянию реального материала. Для перехода к объемной модели выполняются следующие действия:

1. **Назначение силового поля:** цепи присваиваются параметры классического силового поля, совместимого с последующим моделированием в LAMMPS. Как правило, используются специализированные полимерные силовые поля, такие как PCFF (Polymer Consistent Force Field) или CVFF (Consistent Valence Force Field) [27, 28], выбор которых определяется пользователем в зависимости от химического состава системы. Эти поля обеспечивают корректное описание валентных и невалентных взаимодействий в органических и полимерных системах.
2. **Помещение в элементарную ячейку:** цепь помещается в центр расчетной кубической (или орторомбической) элементарной ячейки. Начальные размеры ячейки выбираются с существенным запасом по объему относительно ожидаемой равновесной плотности, чтобы избежать

искусственного перекрытия молекул при инициализации и дать цепям пространство для упаковки в процессе уплотнения.

3. **Периодическая репликация:** для моделирования макроскопического объема, свободного от граничных эффектов, применяется метод периодических граничных условий (Periodic Boundary Conditions, PBC). Исходная элементарная ячейка многократно копируется (реплицируется) в трех пространственных направлениях (X, Y, Z). В результате формируется система из множества идентичных цепей, расположенных в пространстве.

Процедура молекулярно-динамического уплотнения и релаксации. Начальная периодическая система имеет существенно заниженную плотность и неравновесную структуру. Для получения модели с реалистичной равновесной плотностью и равновесным распределением конформаций цепей проводится многостадийное МД-моделирование в пакете LAMMPS [29]. Процедура состоит из двух ключевых фаз:

1. Фаза компрессии (уплотнения):

- Моделирование проводится в изобарно-изотермическом NPT-ансамбле, где контролируются количество частиц (N), давление (P) и температура (T).
- Температура системы повышается до значения выше температуры стеклования моделируемого материала (например, 500-600 К для многих аморфных полимеров). Это придает цепям высокую подвижность, позволяя им преодолевать кинетические барьеры и перестраиваться.
- К системе прикладывается повышенное внешнее давление (порядка 100-500 атм). Под действием этого давления и высокой температуры происходит интенсивное сближение цепей, выравнивание вакансий и общее уплотнение системы.

- Фаза длится до тех пор, пока плотность системы не перестает монотонно возрастать и не выходит на плато, а размеры элементарной ячейки стабилизируются.

2. Фаза релаксации (равновесия):

- После достижения максимального уплотнения параметры моделирования постепенно (поэтапно или линейно) снижаются до целевых значений - комнатной температуры (298 K) и атмосферного давления (1 атм).
- На этом этапе происходит «отжиг» системы: снимаются внутренние напряжения, возникшие при быстрой компрессии, и устанавливается равновесное распределение конформаций полимерных цепей, соответствующее условиям моделирования.
- Система выдерживается в этих условиях в течение продолжительного времени (несколько наносекунд в модельном времени) для сбора статистики и гарантии достижения равновесия.

Выходные данные и их использование. Результатом работы модуля является полностью подготовленный файл конфигурации (например, restart-файл LAMMPS или файл траектории), содержащий:

- Атомистическую модель материала с равновесной для заданных условий плотностью.
- Стабилизированные размеры элементарной ячейки.
- Равновесные конформации цепей в аморфном состоянии.
- Всю информацию о силах, связях и типах атомов, необходимую для продолжения моделирования.

Эта модель является корректной стартовой точкой для последующего изучения широкого спектра свойств: диффузии малых молекул, механических характеристик (модуль Юнга, прочность), термического поведения (теплопроводность, теплоемкость) и других, путем проведения специализированных МД-расчетов на основе созданной конфигурации.

Состояние системы из N атомов с координатами r_i и импульсами p_i описывается гамильтоновой системой:

$$\frac{dr_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial r_i}, H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + U(r_1, \dots, r_N) \quad (3.2)$$

где m_i - массы атомов, U - потенциал межатомных взаимодействий (валентные и невалентные вклады). Уравнения (3.2) интегрируются в изобарно-изотермическом ансамбле (NPT) для достижения равновесной плотности. Тензор напряжений микроскопической системы (вириал):

$$\sigma_{ij} = -\left(\frac{1}{V}\right) \cdot \left[\sum_k m_k \cdot v_{ki} \cdot v_{kj} \right] + \left(\frac{1}{2}\right) \cdot \left[\sum_{kl} r_{kl,i} \cdot F_{kl,j} \right] \quad (3.3)$$

а эффективные упругие характеристики матрицы вычисляются как отклик равновесной конфигурации на малые деформации (испытание на растяжение и сдвиг):

$$E_m = \frac{\partial \sigma_x}{\partial \varepsilon_x}, G_m = \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial \gamma_{xy}}, \nu_m = -\frac{\varepsilon_y}{\varepsilon_x}, \rho_m = \left\langle \frac{M}{V} \right\rangle_{NPT} \quad (3.4)$$

Верификация наноуровня с экспериментом.

Эффективные упругие характеристики матрицы, полученные молекулярно-динамическим моделированием (модуль Юнга, коэффициент Пуассона, плотность), сопоставляются со справочными данными для соответствующего полимера и сертификационными значениями производителей; отклонение, как правило, не превышает первых единиц процентов. Пример такой верификации для матрицы РА6 приведен в разделе 5.5.

3.3 Модуль автоматического запуска модели численного моделирования упругих свойств однослойного КМ. Численное моделирование

Для генерации обучающей выборки было реализовано автоматизированное моделирование свойств материалов в программной системе ANSYS (ANSYS Workbench и программный продукт Ansys Material Designer.) Используемая среда позволяет запускать автоматизированные расчеты из командной строки для заранее описанного в Material Designer материала, но не позволяет делать это для материала, свойства которого задаются как изменяемые параметры. Поэтому для

автоматизированного запуска команд в рамках интеграции продукта был реализован дополнительный скрипт на языке Python, который дополняет имеющийся в ANSYS функционал и позволяет запускать расчеты для разных материалов автоматически.

Для запуска многовариантных расчетов с использованием скрипта были подготовлены дополнительные исполняемые файлы. Так как геометрию объекта исследования и настройки расчета возможно задать только в пользовательском интерфейсе пакета Material Designer, на рабочей станции с программной средой были подготовлены файлы, содержащие геометрические и топологические данные сетки по заданной форме материала по нескольким направлениям осей: X, XY, XZ, ZY, Z, Y. Помимо геометрии в файлах указан тип требуемых расчетов. Эти подготовленные файлы используются в скрипте в качестве шаблонов. При запуске скрипта необходимо передать следующие входные параметры: доля волокна в композитном материале и пути к файлам с физическими характеристиками материалов (по 21 константе эластичности). Далее скрипт, с использованием SSH-клиента, подключается к удаленной рабочей станции с установленным ANSYS. Используя подготовленные шаблоны, скрипт генерирует файлы ds.dat с заданными параметрами. Запуск расчетов по направлению осей с использованием подготовленных файлов осуществляется командами, передаваемыми SSH-клиентом. В среднем, время расчета гомогенизированных свойств для одного композитного материала занимает 1.5 минуты. После завершения расчетов скрипт получает результирующие файлы с удаленной рабочей станции и извлекает результаты. Полученные результаты преобразуются в матрицу эластичности и записываются в файл в требуемом формате, после чего используются для дальнейшего анализа.

3.4 Метод моделирования упругих характеристик однослойного КМ

Эффективные упругие характеристики однонаправленного композитного монослоя определялись с использованием правила смесей, которое широко применяется для оценки макроскопических свойств композитных материалов на

основе свойств компонентов. В рамках данного подхода предполагалось, что монослой состоит из волокон и матрицы с известными механическими характеристиками и объемной долей волокон.

Продольный модуль упругости монослоя вычислялся по линейному правилу смесей как взвешенная сумма модулей волокна и матрицы:

$$E_1 = V_f E_f + V_m E_m,$$

где V_f и V_m - объемные доли волокна и матрицы соответственно, E_f и E_m - модули упругости волокна и матрицы.

Поперечный модуль упругости определялся по обратному правилу смесей:

$$\frac{1}{E_2} = \frac{V_f}{E_f} + \frac{V_m}{E_m},$$

$$E_2 = \frac{E_m E_f}{V_m E_f + V_f E_m},$$

Модуль сдвига монослоя рассчитывался аналогичным образом:

$$\frac{1}{G_{12}} = \frac{V_f}{G_f} + \frac{V_m}{G_m}.$$

Коэффициенты Пуассона определялись по линейному правилу смесей:

$$\nu_{12} = V_f \nu_f + V_m \nu_m.$$

Плотность монослоя вычислялась как взвешенная сумма плотностей компонентов:

$$\rho = V_f \rho_f + V_m \rho_m. \quad (3.5)$$

В общем виде (численная гомогенизация RVE, ANSYS) эффективный тензор жесткости C^* определяется через осредненные по объему напряжение и деформацию:

$$\bar{\sigma} = \left(\frac{1}{|\Omega_{RVE}|} \right) \cdot \int_{\Omega_{RVE}} \sigma(x) dx, \bar{\varepsilon} = \left(\frac{1}{|\Omega_{RVE}|} \right) \cdot \int_{\Omega_{RVE}} \varepsilon(x) dx, \bar{\sigma} = C^* : \bar{\varepsilon} \quad (3.6)$$

Для проведения теоретического расчета предела прочности КМ в работе используются определяющие уравнения, взятые из [30], которые были получены в предположении, что силы, действующие в направлении армирования для однонаправленного композита равновесны. Используя площадь сечения

однонаправленного слоя (A) и A_B , A_M - площади, занятые соответственно волокнами и матрицей рассчитаем предел прочности на растяжение $\bar{\sigma}_1^+$ как

$$\bar{\sigma}_1^+ \cdot A = \bar{\sigma}_B^+ \cdot A_B + \sigma_M \cdot A_M$$

где $\bar{\sigma}_B^+$ - разрушающее напряжение волокна на растяжение;

σ_M - напряжения в матрице при критической деформации.

Если разделить обе части на площадь сечения однонаправленного слоя A , получим:

$$\bar{\sigma}_1^+ = \bar{\sigma}_B^+ \cdot \psi + \sigma_M \cdot (1 - \psi) \quad (3.7)$$

где ψ - объемная доля волокон (коэффициент армирования);

При этом, будем считать, что, при приложении сил в направлении армирования, слой деформируется однородно, то есть относительное удлинение композита ε_1 равно относительному удлинению матрицы ε_M и волокна ε_B :

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_B = \varepsilon_M$$

Согласно закону Гука [31], принимаем $\sigma_M = E_M \cdot \bar{\varepsilon}_B^+$

Сделав замену в уравнении (3.7), получим

$$\bar{\sigma}_1^+ = \bar{\sigma}_B^+ \cdot \psi + E_M \cdot \bar{\varepsilon}_B^+ \cdot (1 - \psi)$$

Выразим относительное удлинение волокна при растяжении $\bar{\varepsilon}_B^+$ через закон Гука

$$\bar{\varepsilon}_B^+ = \frac{\bar{\sigma}_B^+}{E_B}$$

Где E_B - модуль упругости армирующего материала.

Окончательно получим

$$\bar{\sigma}_1^+ = \bar{\sigma}_B^+ \cdot \left(\psi + \frac{E_M}{E_B} \cdot (1 - \psi) \right)$$

где E_M - модули упругости.

Получение уравнения прочности слоя при сжатии соответствует получению уравнения при растяжении и имеет похожий вид. Если прочность композита на сжатие определяется волокнами, получим

$$\bar{\sigma}_1^- = \bar{\sigma}_{1B}^- \cdot \left(\psi + \frac{E_M}{E_B} \cdot (1 - \psi) \right), \bar{\varepsilon}_{1B}^- < \bar{\varepsilon}_{1M}^- \quad (3.8)$$

В противном случае:

$$\bar{\sigma}_1^- = \bar{\sigma}_{1M}^- \cdot \left((1 - \psi) + \frac{E_M}{E_B} \cdot \psi \right), \bar{\varepsilon}_{1B}^- > \bar{\varepsilon}_{1M}^- \quad (3.9)$$

Где $\bar{\varepsilon}_{1B}^-$, $\bar{\varepsilon}_{1M}^-$ - предельные удлинения разрушения при сжатии волокон и матрицы;

$\bar{\sigma}_{1B}^-$, $\bar{\sigma}_{1M}^-$ - прочности волокон и матрицы при сжатии;

$\bar{\sigma}_1^-$ - прочность однонаправленного слоя при сжатии вдоль волокон.

Так как уравнения (3.8) и (3.9) являются общими для композитов различных типов, полученные результаты являются приближенными. В связи с этим, данные, полученные с помощью этих уравнений, не принимаются как конечный результат. Их необходимо проанализировать и выявить наличие зависимостей от фактических значений, а также типа этих зависимостей (линейные/нелинейные и тд.). Уравнение для нахождения максимального коэффициента концентрации напряжений K_{22} для матрицы выглядит следующим образом [32]:

$$K_{22} = \frac{\sigma_{m2(max)}}{\sigma_2} = \frac{1 - \psi \cdot (1 - E_M/E_B)}{1 - \left(4 \cdot \frac{\psi}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot (1 - E_M/E_B)}. \quad (3.10)$$

Если принять

$$\sigma_{m2(max)} = \bar{\sigma}_M^+,$$

$$\bar{\sigma}_2^+ = \frac{\bar{\sigma}_M^+}{K_{22}},$$

то из уравнения (3.10) получим прочность однонаправленного слоя при поперечном растяжении.

Таким же образом можем определять прочность слоя при поперечном сжатии $\bar{\sigma}_2^-$:

$$\bar{\sigma}_2^- = \frac{\bar{\sigma}_M^-}{K_{22}}$$

где K_{22} находится из (3.10), а $\bar{\sigma}_M^-$ предел прочности матрицы на сжатие.

Заменив индексы 2, E и $\bar{\sigma}_M^-$ из уравнения (3.10) на 12, G и τ соответственно, получим выражение для расчета коэффициента концентрации напряжений для

внутрислойной сдвиговой прочности.

$$K_{22} = \frac{\sigma_{m12(max)}}{\tau_{12}} = \frac{1 - \psi \cdot (1 - G_{m12}/G_{b12})}{1 - \left(4 \cdot \frac{\psi}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot (1 - G_{m12}/G_{b12})}.$$

Если использовать предел прочности на сдвиг матрицы $\bar{\tau}_m$ по уравнению $\bar{\tau}_{12} = \bar{\tau}_m/K_{12}$, то можно определить прочность слоя при внутрислойном сдвиге.

Верификация мезоуровня с экспериментом.

Полученные по правилу смесей эффективные ортотропные свойства монослоя сопоставляются со справочными и экспериментальными данными для полимеров соответствующей объемной доли волокна: продольный модуль упругости и поперечные характеристики согласуются с ожидаемым диапазоном свойств. Верификация на примере материала PA6/CF20% приведена в разделе 5.5.

3.5 Модуль автоматического запуска модели численного моделирования упругих свойств многослойного КМ с разным углом укладки

Описание модели. Для расчета напряженно-деформированного состояния и индекса разрушения по критерию Хоффмана была построена численная модель многослойного композитного материала в среде COMSOL Multiphysics. Композит моделировался с использованием подхода Layered Material, позволяющего задать индивидуальные механические свойства и ориентацию каждого слоя в составе многослойной структуры. В качестве физического интерфейса использовалась механика оболочек (Shell physics), что обеспечивает эффективное моделирование тонкостенных многослойных конструкций с учетом анизотропии и слоистой структуры материала. Геометрия образца представляла собой плоскую прямоугольную пластину размером 10×10 см. Количество слоев в модели варьировалось в диапазоне от 2 до 10, при этом суммарная толщина пластины определялась толщинами отдельных слоев. Граничные условия задавались следующим образом: одна сторона пластины была полностью заделана (жесткая заделка), на противоположную сторону прикладывалась растягивающая нагрузка в виде суммарной силы 25 Н, равномерно распределенной по кромке. Таким образом

моделировалось одноосное растяжение многослойного композита. Дискретизация расчетной области выполнялась с использованием physics-controlled mesh. Сетка состояла из треугольных конечных элементов, характерных для оболочечных моделей, с общим количеством порядка 1000 узлов и 1500 элементов. Для обеспечения корректности численного решения была проведена проверка сеточной сходимости, в рамках которой анализировалось влияние размера элементов на распределение напряжений и значения индекса разрушения. Выбранная сетка обеспечивала баланс между точностью расчета и вычислительной эффективностью и использовалась во всех последующих численных экспериментах.

На основе рассчитанных компонент напряжений в каждой расчетной точке вычисляется индекс разрушения по критерию Хоффмана:

$$f_H(x) = F_1 \cdot \sigma_1 + F_2 \cdot \sigma_2 + F_{11} \cdot \sigma_1^2 + F_{22} \cdot \sigma_2^2 + F_{12} \cdot \sigma_1 \cdot \sigma_2 + F_{66} \cdot \tau_{12}^2, I_H = \max_{k,x} f_H(x) \quad (3.11)$$

$$F_1 = \frac{1}{X_t} - \frac{1}{X_c}, F_2 = \frac{1}{Y_t} - \frac{1}{Y_c}, F_{11} = \frac{1}{X_t \cdot X_c}, F_{22} = \frac{1}{Y_t \cdot Y_c}, F_{66} = \frac{1}{S^2}, F_{12} = -0.5 \cdot (F_{11} + F_{22})$$

, где X_t, X_c, Y_t, Y_c - пределы прочности вдоль и поперек волокон при растяжении и сжатии, S - предел прочности при сдвиге.

Физический смысл нагружения и оценка разрушения.

Моделируемое нагружение соответствует одноосному растяжению образца: одна кромка пластины жестко закреплена (заделка), на противоположную кромку равномерно приложена растягивающая сила 25 Н, распределенная по кромке. Разрушение оценивается локально: в каждой расчетной точке каждого слоя на основе рассчитанных компонент напряжений ($\sigma_1, \sigma_2, \tau_{12}$) вычисляется значение критерия Хоффмана; слой считается вышедшим из строя, когда значение критерия достигло единицы. Интегральным (скалярным) показателем разрушения всего пакета принимается максимальное значение критерия по всем слоям и расчетным точкам. Именно эта величина используется как целевой признак в моделях машинного обучения (глава 4) и как целевая функция в обратной задаче (глава 5).

Согласно работе О. Хоффмана [33], при одноосном растяжении, сжатии вдоль главных осей ортотропии и при чистом сдвиге квадратичный критерий вырождается в замкнутые соотношения, в которых условие разрушения наступает при напряжении, равном соответствующему пределу прочности (X_t , X_c , Y_t , S). В построенных моделях индекс разрушения достигал единицы при значениях внешней нагрузки, совпадающих с аналитическими с точностью погрешности конечно-элементного решения, что подтверждает корректность вычисления напряжённого состояния и формул критерия в COMSOL. Правомерность применения квадратичных критериев Хоффмана для однонаправленных и многослойных композитов дополнительно подтверждена международным вычислительным экспериментом WWFE [34, 35], в котором для базовых однонаправленных схем нагружения предсказания таких критериев согласовались с экспериментальными данными в пределах порядка 10%.

Автоматический запуск параметрических расчетов в COMSOL. Для формирования набора данных использовался автоматизированный параметрический запуск расчетов в среде COMSOL Multiphysics в пакетном режиме. Запуск модели осуществлялся через командную строку с использованием интерфейса `batch`, что позволило выполнять серию расчетов без графического интерфейса и интегрировать численное моделирование в вычислительный пайплайн. Автоматизация обеспечивалась передачей параметров модели через аргументы командной строки с последующим вызовом пользовательского метода модели (`start_task`). Для каждого запуска в модель передавался набор параметров, определяющих конфигурацию многослойного композита, включая количество слоев, упругие константы и другие механические свойства слоев, а также углы укладки. Это позволило систематически варьировать параметры конструкции и получать соответствующие поля напряжений и значения индекса разрушения по критерию Хоффмана. Использование пакетного режима обеспечило воспроизводимость расчетов, масштабируемость вычислений и возможность генерации большого числа конфигураций без ручного вмешательства. Такой подход был использован для построения параметрического пространства и

формирования обучающей выборки для последующего анализа и обучения моделей машинного обучения.

3.6 Метод моделирования упругих характеристик многослойных ПКМ с разным углом укладки

В методе предполагается, что известны определяющие свойства монослоя: модуль упругости слоя вдоль волокон E_1 , модуль упругости слоя поперек волокон E_2 , модуль сдвига слоя поперек волокон G_{12} и коэффициент Пуассона ν_{12} .

Уравнения классической теории слоистых структур (CLT).

В соответствии с законом Гука коэффициенты матрицы жесткости

$$G^0 = (g_{11}^0 \ g_{12}^0 \ g_{16}^0 \ g_{21}^0 \ g_{22}^0 \ g_{26}^0 \ g_{61}^0 \ g_{62}^0 \ g_{66}^0)$$

для монослоя однонаправленного композиционного материала при плоском напряженном состоянии имеют вид [36] :

$$g_{11}^0 = \frac{E_1}{1 - \nu_{12}\nu_{21}}; \ g_{12}^0 = g_{21}^0 = \frac{E_1\nu_{21}}{1 - \nu_{12}\nu_{21}}; \ g_{22}^0 = \frac{E_2}{1 - \nu_{12}\nu_{21}}$$

$$g_{66}^0 = G_{12}, \ g_{66}^0 = g_{62}^0 = g_{16}^0 = g_{26}^0 = 0, \ \nu_{21} = \frac{\nu_{12}E_2}{E_1}$$

При плоском напряженном состоянии коэффициенты матрицы жесткости могут быть записаны через независимые коэффициенты V_k , являющиеся инвариантами характеристик жесткости:

$$V_1 = \frac{3g_{11}^0 + 2g_{12}^0 + 3g_{22}^0 + 4g_{66}^0}{8}$$

$$V_2 = \frac{g_{11}^0 - g_{22}^0}{2} \tag{3.12}$$

$$V_3 = \frac{g_{11}^0 - 2g_{12}^0 + g_{22}^0 - 4g_{66}^0}{8}$$

$$V_4 = \frac{g_{11}^0 - 2g_{12}^0 + g_{22}^0 + 4g_{66}^0}{8}$$

При повороте волокнистого материала на угол θ в плоскости укладки слоя коэффициенты симметричной матрицы жесткости

$$G' = (g'_{11} \ g'_{12} \ g'_{16} \ g'_{12} \ g'_{22} \ g'_{26} \ g'_{16} \ g'_{26} \ g'_{66})$$

можно вычислить по формулам:

$$\begin{aligned}
 g'_{11} &= V_1 + V_2 \cos 2\theta + V_3 \cos \cos 4\theta; \\
 g'_{16} &= \frac{1}{2} V_2 \sin 2\theta + V_3 \sin 4\theta; \\
 g'_{12} &= V_1 - 2V_4 - V_3 \cos \cos 4\theta; \\
 g'_{22} &= V_1 - V_2 \cos \cos 2\theta + V_3 \cos \cos 4\theta; \\
 g'_{26} &= \frac{1}{2} V_2 \sin 2\theta - V_3 \sin \sin 4\theta; \quad g'_{66} = V_4 - V_3 \cos 4\theta
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

Используя приведенные выше коэффициенты матриц жесткостей монослоев, можно определить упругие характеристики для композиционного материала, состоящего из нескольких разноориентированных слоев однонаправленного материала.

При растяжении однонаправленного слоистого композиционного материала под углом θ к направлению армирования эффективный модуль упругости E''_x можно рассчитать по формуле:

$$E''_x = \frac{\Delta G'}{g'_{22}g'_{66} - (g'_{26})^2} \tag{3.14}$$

При укладке однонаправленных слоев композита по технологии перекрестного армирования, когда многослойный композит состоит из $2n$ слоев, n из которых уложены под углом θ и n слоев под углом $-\theta$ относительно оси симметрии укладки, модуль упругости такого композита в направлении x равен

$$E_x^\# = g'_{11} - \frac{g'^2_{12}}{g'_{22}} \tag{3.15}$$

В Ansys, когда каждый монослой рассматривается как ортотропный материал в плоском напряженном состоянии, закон Гука в осях слоя и матрица жесткости рассчитывается по формулам:

$$\{\sigma_k\} = [Q_k]\{\varepsilon_k\}, Q_{11} = \frac{E_1}{1 - \nu_{12} \cdot \nu_{21}}, Q_{22} = \frac{E_2}{1 - \nu_{12} \cdot \nu_{21}}, Q_{12} = \frac{\nu_{12} \cdot E_2}{1 - \nu_{12} \cdot \nu_{21}}, Q_{66} = G_{12}, \nu_{21} = \frac{\nu_{12} \cdot E_2}{E_1} \quad (3.16)$$

Такому описанию соответствует краевая задача теории упругости: в области Ω выполняются дифференциальные уравнения равновесия $\text{div } \sigma + f = 0$ (f - вектор объемных сил); на границе задаются условия $u = 0$ на Γ_D (жесткая заделка) и $\sigma \cdot n = \bar{t}$ на Γ_N (растягивающая нагрузка по кромке). Для численного решения этой системы дифференциальных уравнений методом конечных элементов используется равносильная слабая (вариационная) форма, приводящая к уравнению (3.17).

При повороте слоя на угол θ матрица жесткости преобразуется как $Q_k(\theta) = T(\theta)^T \cdot Q_k \cdot T(\theta)$. Для МКМ в рамках гипотез Кирхгофа-Лява (прямая нормаль остается прямой, перпендикулярной к срединной поверхности, поперечные деформации и нормальные напряжения на площадках, параллельных срединной поверхности, пренебрежимо малы) соотношение «усилия N , моменты M - деформации» записывается через матрицы A, B, D , а равновесие конструкции - в слабой форме:

$$A_{ij} = \sum_1^k Q_{ij}^k \cdot t_k, B_{ij} = \sum_1^k Q_{ij}^k \cdot t_k \cdot z_k, D_{ij} = \sum_1^k Q_{ij}^k \cdot \left(t_k \cdot \left| z_k^2 \right| + \left| \frac{t_k^3}{12} \right| \right), \int_{\Omega} \sigma(u) : \delta \varepsilon d\Omega = \int_{\Gamma_N} \bar{t} \cdot \delta u d\Gamma \quad (3.17),$$

где t_k - толщина k -го слоя, z_k - координата его середины, при граничных условиях: $u = 0$ на Γ_D (заделка); $\sigma \cdot n = \bar{t}$ на Γ_N (одноосное растяжение). Гипотезы Кирхгофа-Лява сводят трехмерную задачу теории упругости к двумерной относительно срединной поверхности и лежат в основе оболочечной модели Ansys.

Для **верификации** результатов расчета эффективной упругости многослойного композиционного материала было проведено сравнение экспериментальных данных [37-39] с результатами численного моделирования. Также результаты расчета сравнивались с результатами численного моделирования упругих характеристик в программном комплексе Ansys PrePost (ACP), позволяющем в явном виде задавать свойства монослоев, структуру укладки

многослойных *композитных* материалов, рассчитывать и визуализировать упруго-жесткостные свойства проектируемых материалов.

В проведенных численных экспериментах рассчитывались упругие свойства перекрестно армированного материала из 48 слоев. Все слои были выполнены из материала IM7/8551-7a, состоящего из углеродного волокна IM7 и связующего - эпоксидной смолы 8551-7a. Упругие свойства материала IM7/8551-7a доступны в открытых источниках: $E_1 = 144,9$ ГПа; $E_2 = 8,8$ ГПа; $G_{12} = 4,8$ ГПа; $\nu_{12} = 0,36$.

На рисунке 3.2 представлен экспериментальный и расчетные графики зависимости эффективного модуля упругости от угла армирования θ , изменяющегося от 0° до 90° , для перекрестно армированного материала. Видно, что экспериментальные данные хорошо согласуются с данными численных экспериментов, полученных как в рамках расчета модуля упругости с использованием соотношений (3.12) и (3.13), так и полученных при использовании модуля ACP.

Рисунок 3.3 иллюстрирует хорошее качественное и количественное согласие экспериментальных и расчетных данных: относительное отклонение расчетных данных от экспериментальных не превышает 5%. Величины модуля упругости, полученные по соотношениям (3.12), (3.13) и (3.15) и в приложении ACP, практически совпадают: относительная величина отклонения не превышает 1%.

На рисунке 3.4 показаны результаты расчета модулей упругости перекрестно армированного композиционного материала AS4/3502, состоящего из однонаправленных углеродных волокон и связующего из смолы. Для расчета использованы данные о свойствах из открытых источников: $E_1 = 127,65$ ГПа; $E_2 = 11,32$ ГПа; $G_{12} = 6$ ГПа; $\nu_{12} = 0,3$. Видно, что результаты численных экспериментов, полученные в модуле ACP и при использовании соотношений (3.12), (3.13) и (3.15), хорошо согласуются.

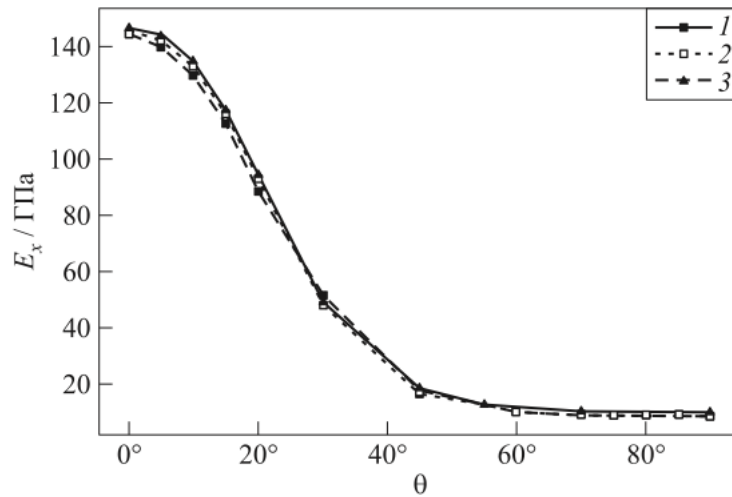


Рисунок 3.2. Зависимость модуля упругости $E_x^\#$ от угла армирования θ для многослойного композиционного материала IM7 / 8551-7a: 1 - эксперимент; 2 - расчет с использованием соотношений (3.12) и (3.13); 3 - численные эксперименты в АСР

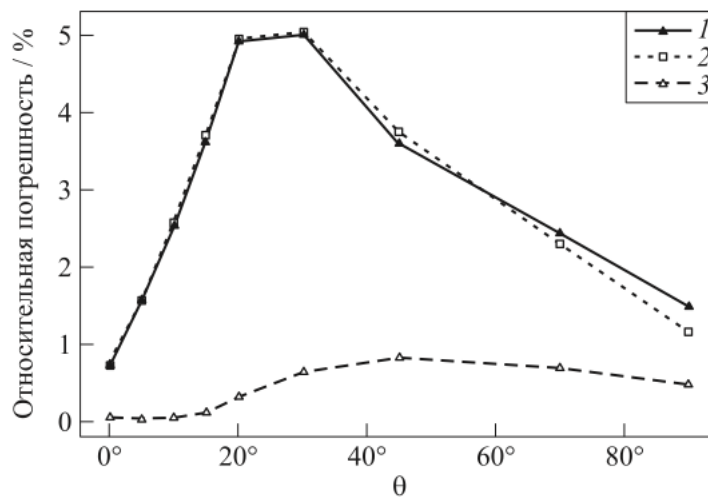


Рисунок 3.3. Погрешность измерения модуля упругости $E_x^\#$: 1 - вычисленного по соотношениям (3.12), (3.13) и (3.15) относительно экспериментального значения; 2 - вычисленного в АСР относительно экспериментального значения; 3 - вычисленного по соотношениям (3.12), (3.13) и (3.15) относительно вычисленного в АСР

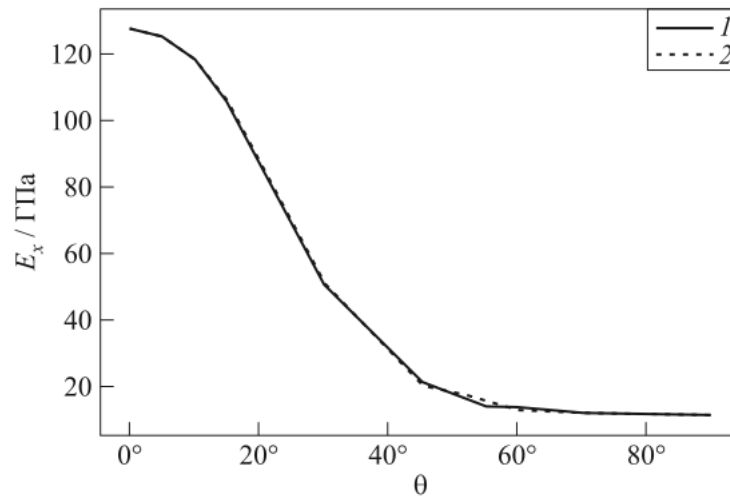


Рисунок 3.4. Модули упругости $E_x^\#$ перекрестно армированного композиционного материала AS4 / 3502: 1 - вычисленного по соотношениям (3.12), (3.13) и (3.15); 2 - вычисленного в ACP

На эффективные упруго-жесткостные свойства многослойного материала существенное влияние оказывает ориентация армирующих слоев относительно друг друга. На рисунке 3.5 представлены результаты расчета модуля упругости для двух образцов композиционного материала, слои которого состоят из материала марки IM7 / 8551-7a. Кривая 1 иллюстрирует результаты расчета E_x'' при укладке слоев без изменения угла армирования и растяжении материала под углом θ к направлению армирования. Кривая 2 - модуль упругости $E_x^\#$ для многослойного материала со структурой армирования $[\pm\theta]$. Видно, что выбор ориентации при укладке слоев может значительно влиять на модуль упругости многослойного композиционного материала. Для рассмотренного случая модули упругости E_x'' и $E_x^\#$ могут отличаться на 50%.

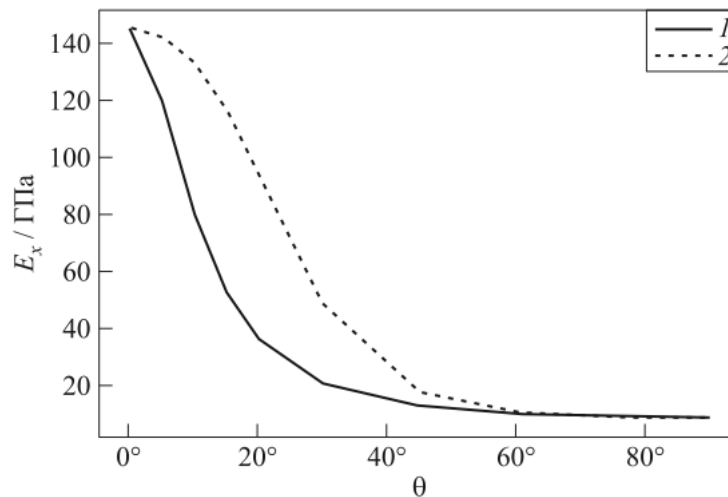


Рисунок 3.5. Зависимость модулей упругости от угла армирования θ : 1 - модуль упругости материала из одинаково ориентированных слоев под углом θ к оси растяжения; 2 - модуль упругости перекрестно армированного КМ

3.7 Хранение данных

Для обеспечения удобного доступа, структурирования и последующей обработки сформированных проблемно-ориентированных наборов данных используется реляционная база данных PostgreSQL. Выбор PostgreSQL обусловлен ее высокой производительностью при работе с объемными данными, поддержкой транзакций и надежными средствами обеспечения целостности данных, что особенно важно при работе с многомасштабными моделями композитов.

Структура данных, полученных на разных уровнях, представлена в таблице 3.2.

Таблица 3.2. Структура данных по уровням

№ уровня	Базовая модель-композиция	Характеристики, сохраняемые в БД
0	MC_0^1 / MC_0^2	- Smiles формула полимера - Smiles формула волокна
1	MC_1^1 / MC_1^2 (наноуровень)	- упругие константы материала $\{C_{ij}\}$, $i = \underline{0,6}; j = \underline{0,6}$ - модуль Юнга E_1, E_2 - модуль сдвига G_{12} - коэффициент Пуассона ν_{12} - плотность ρ
2	$MC_2^1 / MC_2^2 / MC_2^3$ (мезоуровень)	- упругие константы слоя $\{C_{ij}^{layer}\}$, $i = \underline{0,6}; j = \underline{0,6}$

		- модуль Юнга E_1^{layer}, E_2^{layer} - модуль сдвига G_{12}^{layer} - коэффициент Пуассона ν_{12}^{layer}
3	MC_3^1/MC_3^2 (макроуровень)	- углы укладки слоев $\{\theta_i\}, i = \underline{0, n}$ где n - количество слоев - модуль Юнга $E_1^{multi_layer}, E_2^{multi_layer}$ - модуль сдвига $G_{12}^{multi_layer}$ - максимальное значение индекса критерия разрушения Хоффмана F_{index}

Структура базы данных состоит из трех взаимосвязанных таблиц (рисунок 3.5):

1. Таблица «**Базовый материал**» - содержит характеристики отдельных компонентов композита (волокно и матрица), включая модули упругости, коэффициенты Пуассона, пределы прочности на растяжение и сжатие, плотность и прочие механические свойства (50 базовых материалов).
2. Таблица «**Однослойный КМ**» - описывает однослойные композиты, формируемые на основе материалов из таблицы «Базовый материал». Содержит толщину слоя, ориентацию волокон, упругие характеристики, рассчитанные на основе микромеханических моделей и CLT (600 записей с результатами расчета).
3. Таблица «**Многослойный КМ**» - проблемно-ориентированный набор данных содержит записи, каждая из которых соответствует одному многослойному композиту: входные данные - число слоев, углы укладки, материалы и физико-механические параметры; выходные данные - упругие характеристики МКМ и интегральный индекс разрушения по критерию Хоффмана (3000 записей с результатами расчета). Набор формируется перечислением сочетаний параметров, покрывающих диапазон 2-10 слоев и углы 0-90°, и используется для обучения и валидации моделей машинного обучения (глава 4) и для решения обратной задачи (глава 5).

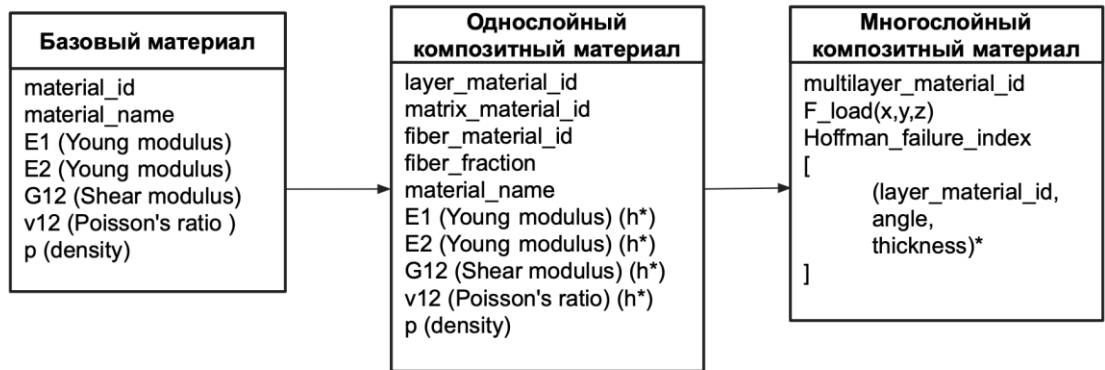


Рисунок 3.5. Схема таблиц базы данных

Взаимосвязь таблиц реализована через внешние ключи, что позволяет обеспечить целостность данных и проводить удобные выборки для анализа и обучения моделей машинного обучения. Такая структура облегчает интеграцию с программным комплексом генерации данных и позволяет автоматически формировать выборки для предсказательной модели разрушения, а также для алгоритма обратного проектирования структуры композита.

Использование реляционной базы данных PostgreSQL обеспечивает масштабируемость, надежное хранение и возможность интеграции с современными инструментами анализа данных и визуализации, что является необходимым условием для формирования проблемно-ориентированного набора данных в рамках настоящего исследования.

3.8 Программная реализация разработанного комплекса

Разработанные численные методы, алгоритмы доработанные компоненты реализованы в виде единого комплекса проблемно-ориентированных программ, включающего модули:

1) модуль генерации атомистической модели полимера из SMILES-формулы и молекулярно-динамического расчета упругих свойств матрицы в пакете LAMMPS (наноуровень, раздел 3.2);

2) модуль автоматизированного запуска гомогенизации RVE в ANSYS Material Designer, дополняющий штатный функционал и позволяющий

рассчитывать эффективные свойства однослойного КМ для произвольных параметров материала (мезоуровень, раздел 3.3);

3) модуль параметрического запуска расчетов напряженно-деформированного состояния и индекса разрушения в COMSOL Multiphysics в пакетном режиме (макроуровень, раздел 3.5);

4) модуль решения прямой задачи на основе CLT (раздел 3.6);

5) модуль хранения и выборки данных на базе СУБД PostgreSQL (раздел 3.7);

Управляющая оболочка обеспечивает сквозную передачу данных между модулями в соответствии со структурой многомасштабной композиции (раздел 3.1). Отдельные программные модули зарегистрированы в Роспатенте (свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2025619197).

3.9 Основные выводы

В данной главе представлена методика полуавтоматического формирования проблемно-ориентированного набора данных для задач анализа и оптимизации многослойных композитов. Она основана на последовательном многомасштабном численном моделировании упругих свойств слоев и многослойных пакетов с различными углами ориентации волокон. Методика позволяет существенно сократить трудоемкость подготовки обучающих выборок, обеспечить воспроизводимость результатов и создать структурированные данные, пригодные для обучения и валидации моделей машинного обучения.

Глава 4. Разработка модели предсказания разрушения композитного материала

4.1 Постановка задачи

В данной работе рассматривается задача моделирования и прогнозирования прочностного поведения многослойных композиционных материалов на основе их структурного описания. Композитный материал представляется в виде упорядоченного набора однонаправленных слоев, каждый из которых характеризуется ориентацией армирующих волокон, а также набором физико-механических параметров матрицы и волокна, одинаковых для всех слоев МКМ.

Целью является построение аппроксимирующей модели, позволяющей по заданной конфигурации слоев предсказывать интегральный индекс разрушения, характеризующий предельное состояние композита при растяжении. Указанный индекс может быть получен в результате численного расчета (например, методом конечных элементов с использованием критериев разрушения) либо экспериментального исследования и рассматривается как скалярная величина, отражающая макроскопическое прочностное поведение материала.

Каждый объект выборки представляет собой многослойный композит, состоящий из переменного числа слоев. Для каждого слоя задан угол ориентации армирующих волокон, а для всего набора слоев - набор усредненных физико-механических параметров материала.

Каждому объекту сопоставляется последовательность

$$X = (x_1, x_2, \dots, x_L)$$

где L - число слоев в композите, $x_i \in R^d$ - вектор признаков i -го слоя, а $y \in R$ - интегральный индекс разрушения, полученный в результате численного моделирования или эксперимента.

Задача сводится к аппроксимации отображения

$$\mathcal{F} : \{x_i\}_{i=1}^L \rightarrow y,$$

Ключевой особенностью задачи является переменная длина входной последовательности (различное число слоев) и существенная нелинейность зависимости выходного показателя от порядка и свойств слоев. Задача обладает рядом принципиальных особенностей. Во-первых, зависимость прочностных характеристик от структуры композита является существенно нелинейной и обусловлена сложным взаимодействием слоев. Во-вторых, порядок укладки слоев оказывает прямое влияние на перераспределение напряжений и механизмы разрушения, что требует учета последовательности слоев как упорядоченного объекта. В-третьих, переменная длина входных данных исключает применение стандартных моделей, ориентированных на фиксированную размерность входного вектора.

С учетом указанных факторов задача формулируется как задача регрессии на последовательностях, в которой необходимо агрегировать информацию о локальных свойствах отдельных слоев в интегральное представление всего композита и на его основе предсказать макроскопический показатель разрушения. Для решения данной задачи целесообразно использование моделей, способных последовательно обрабатывать элементы структуры и аккумулировать контекстную информацию, в частности рекуррентных нейронных сетей с механизмом долгосрочной памяти.

4.2 Формирование признакового описания

Для построения модели предсказания разрушения многослойного композита требуется представление каждого образца в виде последовательности признаков, учитывающих как индивидуальные свойства слоев, так и усредненные характеристики всего материала.

Каждый слой i композита характеризуется углом ориентации армирующих волокон θ . Чтобы корректно учесть циклическую природу угла, он кодируется через синус и косинус:

$$f_{angle}(\theta_i) = [\cos(\theta_i), \sin(\theta_i)] \in \mathbb{R}^2.$$

Такое представление позволяет модели воспринимать близость углов 0° и 360° и избегает разрывов в пространстве признаков.

Кроме того, каждый композит имеет набор гомогенизированных физико-механических характеристик $x_i = [th, p, E_1, E_2, \nu_1, G]$, одинаковых для всех слоев одного МКМ. Для обеспечения сопоставимости признаков разных типов эти параметры стандартизируются с помощью стандартизатора (StandardScaler), что приводит их к нулевому среднему и единичной дисперсии:

$$x_i^{scaled} = \frac{x_i - \mu}{\sigma}$$

Финальный вектор признаков для слоя формируется конкатенацией кодировки угла и масштабированных параметров композита:

$$x_j^{layer} = [f_{angle}(\theta_i), x_i^{scaled}] \in R^d, d = 8$$

Для композита с L формируется последовательность:

$$X = [x_1^{layer}, x_2^{layer}, \dots, x_L^{layer}] \in \mathbb{R}^{L \times d}.$$

Такой подход позволяет сохранить информацию о порядке слоев и их индивидуальных свойствах, а также учесть глобальные характеристики всего материала. Для работы с последовательностями различной длины при обучении модели применяется заполнение до длины максимального образца в батче, что обеспечивает корректное формирование тензоров для рекуррентной нейронной сети и предотвращает искажение данных. Для корректной обработки таких последовательностей в рекуррентной сети используется упаковка последовательностей (packed sequences), что исключает влияние добавленных нулевых элементов на вычисление скрытых состояний.

Таким образом, признаковое описание обеспечивает как структурное, так и физико-механическое представление каждого композита, подготавливая данные к обучению последовательной модели.

4.3 Архитектура модели предсказания разрушения

Для прогнозирования интегрального индекса разрушения многослойного композита используется модель на основе **рекуррентной нейронной сети (RNN)** с архитектурой **LSTM (Long Short-Term Memory)**. Выбор LSTM обусловлен способностью этих сетей обрабатывать последовательности переменной длины и учитывать порядок элементов, что критично для многослойных композитов, где порядок слоев существенно влияет на механические характеристики.

Формализация модели. Пусть входной объект представляет собой последовательность векторов признаков:

$$X = [x_1, x_2, \dots, x_L] \in R^{L \times d}$$

где L - число слоев композита, $x_i \in R^d$ - вектор признаков слоя (угол + физико-механические параметры). Цель модели - аппроксимировать функцию F , связывающую последовательность слоев с интегральным индексом разрушения $y \in R$:

$$y = F(X).$$

Каждый вектор слоя x_t подается на вход LSTM с H скрытыми нейронами и N слоями рекуррентной обработки. LSTM вычисляет скрытое состояние $h_t \in R^H$ для каждого слоя с учетом предыдущих состояний:

$$h_t = LSTM_{cell}(x_t, h_{t-1}, c_{t-1}),$$

где c_t - вектор ячейки памяти, сохраняющий долгосрочные зависимости.

Архитектура ячейки представлена на рисунке 4.1.

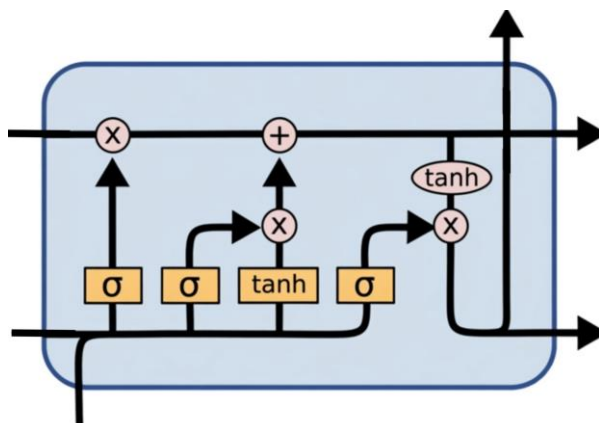


Рисунок 4.1. Архитектура ячейки LSTM

LSTM вычисляет скрытое состояние h_t и состояние памяти c_t по формулам:

$$\begin{aligned} i_t &= \sigma(W_i x_t + U_i h_{t-1} + b_i), \\ f_t &= \sigma(W_f x_t + U_f h_{t-1} + b_f), \\ o_t &= \sigma(W_o x_t + U_o h_{t-1} + b_o), \\ \tilde{c}_t &= \tanh(W_c x_t + U_c h_{t-1} + b_c), \\ c_t &= f_t \odot c_{t-1} + i_t \odot \tilde{c}_t, \\ h_t &= o_t \odot \tanh(c_t). \end{aligned}$$

В работе используется архитектура из двух LSTM-слоев с размерностью скрытого состояния 64. Это позволяет сформировать иерархическое представление, в котором первый слой агрегирует информацию о локальных свойствах слоев, а второй - о наборе слоев в целом.

Последнее скрытое состояние h_L служит агрегированным представлением всего композита и подается на полносвязный слой для предсказания интегрального индекса разрушения:

$$\hat{y} = FC(h_L) \in R$$

Полносвязный блок. В данной архитектуре используется один линейный слой:

$$FC(h_L) = W h_L + b,$$

где $W \in R^{1 \times H}$, $b \in R$ - обучаемые параметры. Такой подход минимизирует риск переобучения, обеспечивая интерпретируемое соответствие между скрытым состоянием LSTM и выходным показателем.

Модель обучается с использованием функции потерь MSE (Mean Squared Error):

$$L = \frac{1}{B} \sum_{i=1}^B (\hat{y}_i - y_i)^2,$$

где B - размер батча. Для оптимизации используется алгоритм Adam с адаптивным шагом обучения, обеспечивающий стабильную сходимость при нелинейной зависимости индекса разрушения от характеристик слоев и порядка их следования. Архитектура нейросети представлена на рисунке 4.2.

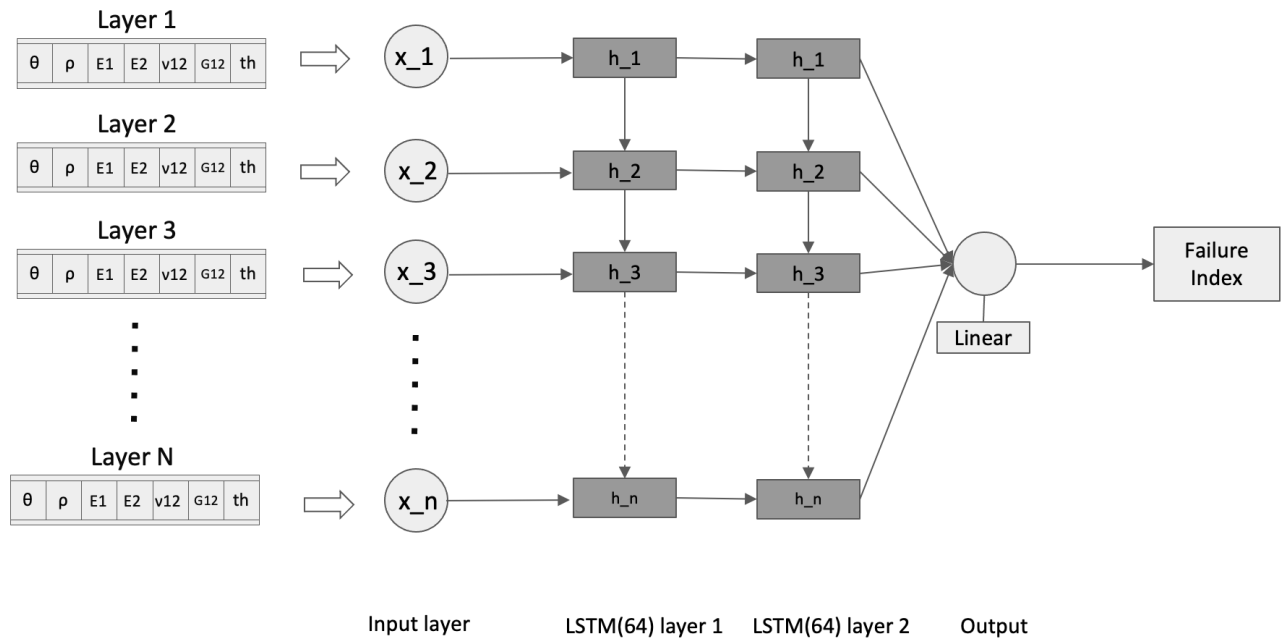


Рисунок 4.2. Архитектура нейросети

Особенности архитектуры

1. Сохранение порядка слоев: LSTM учитывает последовательность и зависимость слоев друг от друга.
2. Гибкость по длине: переменное число слоев не требует усечения или дополнения вручную - автоматически обрабатывается через заполнение и упаковку.
3. Интеграция глобальных признаков: усредненные физико-механические параметры композита повторяются для каждого слоя, обеспечивая одновременное влияние локальных (угол слоя) и глобальных характеристик.
4. Простая финальная регрессия: один линейный слой после LSTM обеспечивает предсказание интегрального индекса разрушения с минимальной сложностью.

4.4 Итеративная двунаправленная рекуррентная сеть для предсказания разрушения многослойных композитов

Архитектура LSTM позволяет учитывать порядок слоев и зависимость их состояний, а также гибко обрабатывать переменное число слоев через паддинг и пакетирование, интегрируя при этом глобальные физико-механические параметры

материала вместе с локальными характеристиками каждого слоя. Финальный линейный слой обеспечивает простую и интерпретируемую регрессию интегрального индекса разрушения. Однако такая постановка ограничена однократным агрегированием информации по слоям и не моделирует многократное взаимное влияние слоев, что критично для правильного воспроизведения перераспределения напряжений в композите. Для преодоления этих ограничений предлагается итеративная двунаправленная архитектура (BIRN), которая многократно обновляет состояния слоев, реализуя итеративное согласование межслойных взаимодействий и более точно отражая физическое поведение материала.

В предложенной улучшенной архитектуре каждый слой композита представлен скрытым состоянием, обновляемым с учетом состояний соседних слоев как в прямом, так и в обратном направлениях. В отличие от стандартных двунаправленных RNN моделей, процесс обновления повторяется на протяжении нескольких итераций, что приводит к многократному обмену информацией между слоями.

Такой механизм может быть интерпретирован как согласование межслойных состояний. С физической точки зрения данный процесс аналогичен релаксации напряжений в композите, при которой локальные взаимодействия приводят к установлению согласованного глобального состояния.

Такая модель выходит за рамки однопроходных двунаправленных RNN, явно моделирует многократное взаимное влияние слоев, формирует устойчивое представление структуры через итеративную стабилизацию скрытых состояний. Итоговое интегральное представление набора слоев агрегируется с помощью механизма внимания и используется для предсказания интегрального индекса разрушения композита при растяжении.

В отличие от LSTM, предлагается итеративно обновлять скрытые состояния, с учетом локального взаимодействия между соседними слоями.

Для каждой итерации $k = 1, \dots, K$ и слоя t :

$$h_t^{(k)} = GRU\left(\left[x_t; h_{t-1}^{(k-1)}; h_{t+1}^{(k-1)}\right], h_t^{(k-1)}\right)$$

где GRU - стандартная gated recurrent unit [40],

Таким образом, состояние каждого слоя обновляется на основе его собственных свойств x_t , латентных состояний соседних слоев $h_{t-1}^{(k-1)}; h_{t+1}^{(k-1)}$, собственного предыдущего состояния $h_t^{(k-1)}$.

Итерационная схема задает нелинейную операторную систему вида

$$h^{(k)} = F(h^{(k-1)}, X),$$

где

$$h^{(k)} = (h_1^{(k)}, \dots, h_T^{(k)}).$$

При фиксированном числе итераций K модель аппроксимирует процесс локального перераспределения и согласования состояний слоев, аналогичный релаксации в физически связанной системе.

После завершения итераций получаем финальные состояния $h_t = h_t^{(K)}$.

Для получения глобального представления композита используется механизм внимания [41]:

$$\alpha_t = \frac{\exp(w^T h_t)}{\sum_{j=1}^T \exp(w^T h_j)}, t = 1, \dots, T,$$

где $w \in R^H$ – обучаемый вектор.

Глобальное представление:

$$h_{global} = \sum_{t=1}^T \alpha_t h_t.$$

Механизм внимания позволяет учитывать неодинаковый вклад в итоговую прочность композита. Предсказание целевой величины осуществляется линейным отображением:

$$\hat{y} = W h_{global} + b$$

, где $W \in R^{1 \times H}, b \in R$.

Архитектура нейросети отображена на рисунке 4.3.

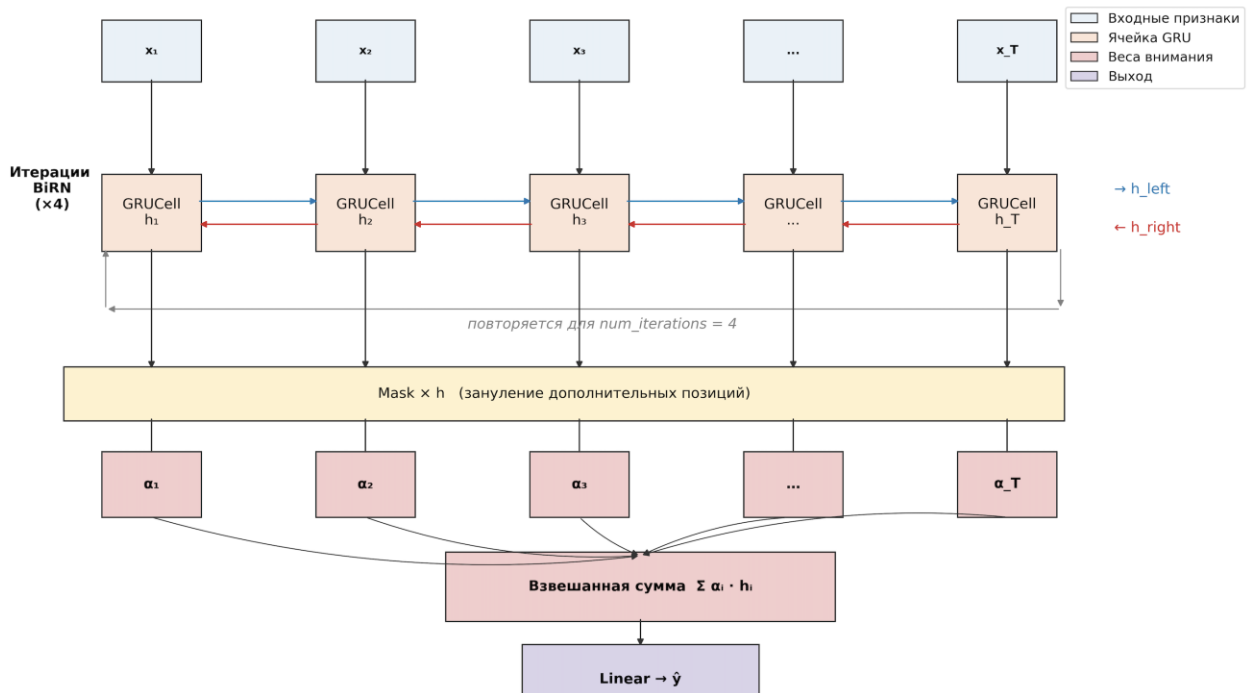


Рисунок 4.3. Итеративная двунаправленная рекуррентная ИНС

4.5 Результаты обучения и валидация модели

Для сравнения рассматриваются классическая LSTM и предложенная итеративная двунаправленная архитектура BIRN.

Модели обучались с использованием функции потерь MSE (Mean Squared Error) [42]:

$$L = \frac{1}{B} \sum_{i=1}^B (\hat{y}_i - y_i)^2,$$

где «B» - размер батча. Для оптимизации используется алгоритм Adam с адаптивным шагом обучения, обеспечивающий стабильную сходимость при нелинейной зависимости индекса разрушения от характеристик слоев и порядка их следования.

Модели были обучены и проверены с использованием 5-кратной кросс-валидации для оценки обобщающей способности на разных разбиениях данных в соотношении 80/20. Обучение выполнялось на 100 эпохах.

Метрики оценки качества модели. Для количественной оценки точности прогноза используются стандартные метрики регрессии. Среднеквадратичная ошибка MSE (Mean Squared Error) вычисляется по формуле

$$\text{MSE} = \frac{1}{n} \cdot \sum (y_i - \hat{y}_i)^2,$$

где n - число образцов, y_i - истинное (полученное численным моделированием) значение интегрального индекса разрушения, $\hat{y}_i$ - предсказанное моделью значение. MSE измеряется в квадрате единиц целевой величины: для индекса разрушения, принимающего значения порядка от 0 до нескольких единиц, значение MSE порядка 0.005 означает, что среднеквадратичное отклонение прогноза от истины составляет примерно 0.07, то есть менее 1% шкалы показателя.

Коэффициент детерминации R^2 (R-квадрат) вычисляется по формуле

$$R^2 = 1 - \sum \frac{(y_i - \hat{y}_i)^2}{(y_i - \bar{y})^2},$$

где $\bar{y}$ - среднее истинных значений. R^2 показывает, какую долю разброса (дисперсии) целевой величины объясняет модель: $R^2 = 1$ означает полное совпадение предсказаний с истинными значениями, $R^2 = 0$ - предсказание не лучше использования среднего значения. Значение $R^2 = 0.984$ означает, что модель объясняет 98.4% вариации индекса разрушения на неизвестных данных.

Площадь под кривой функции потерь (AULC) вычисляется методом трапеций и используется как интегральный показатель скорости и стабильности обучения: чем меньше AULC, тем быстрее и устойчивее снижается ошибка.

Результаты обучения представлены в таблице 4.1. Графический анализ потерь и метрик по эпохам (рисунок 4.3) показывает, что модель быстро достигает стационарного состояния, а колебания валидационной ошибки не превышают допустимые пределы, что указывает на стабильность предсказаний. На сотой эпохе BIRN демонстрирует лучшие показатели по сравнению с LSTM (таблица 4.1): $\text{train_MSE} = 0.0034$, $\text{val_MSE} = 0.0057$, $R^2 = 0.984$, тогда как у LSTM соответствующие значения составляют $\text{train_MSE} = 0.0046$, $\text{val_MSE} = 0.0089$, $R^2 = 0.975$. При этом BIRN достигает уровня $R^2 = 0.96$ уже на 20-й эпохе, что указывает на более быструю сходимость и устойчивость обучения. На рисунках 4.4 и 4.5

отображена динамика функции на обучении и валидации. Анализ динамики функции потерь по эпохам показывает устойчивое снижение ошибок как на обучающей, так и на валидационной выборках. В начальные эпохи наблюдалось значительное снижение ошибки (ошибка на обучении с 0.2858 до 0.0509 к 10-й эпохе, ошибка на валидации с 0.1493 до 0.04), что свидетельствует о быстром захвате модели структуры зависимости выходного показателя от признаков. В последующих эпохах потери стабилизировались в диапазоне 0.0035 - 0.005 для ошибки на обучении и 0.00557 - 0.01 для ошибки на валидации, демонстрируя отсутствие явного переобучения

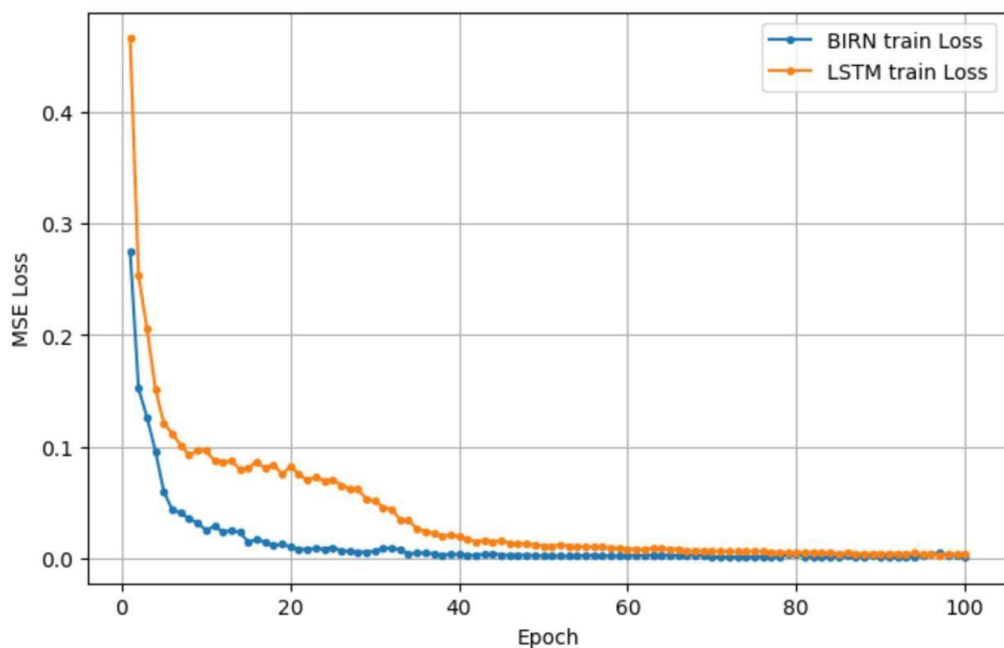


Рисунок 4.4. Динамика функции потерь на обучающей выборке по эпохам

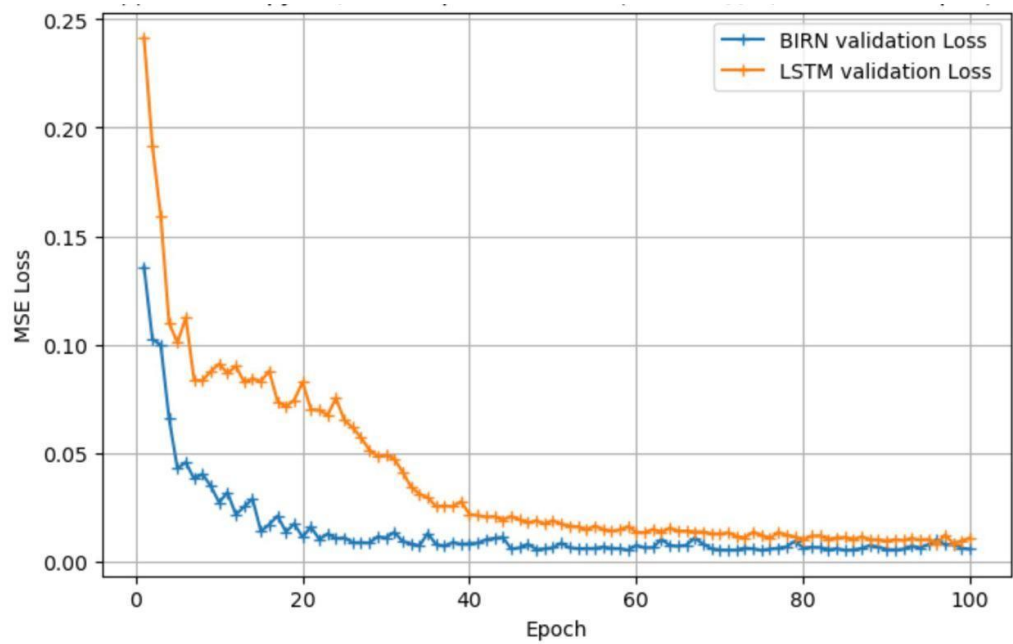


Рисунок 4.5. Динамика функции потерь на валидационной выборке по эпохам

Дополнительно для количественной оценки эффективности обучения была использована интегральная площадь под кривой функции потерь (AULC), вычисленная методом трапеций. Для BIRN она составила 1.18, в то время как для LSTM - 3.50, что дополнительно подтверждает более быстрое и стабильное снижение ошибки при обучении.

Таблица 4.1. Метрики обучения и валидации для LSTM и BIRN на 100-й эпохе

Модель	train MSE	val MSE	R ² (val)	AULC
LSTM	0.0046	0.0089	0.975	3.50
BIRN	0.0034	0.0057	0.984	1.18

Таким образом, итеративная двунаправленная архитектура BIRN не только обеспечивает более высокую точность предсказаний, но и демонстрирует ускоренное и стабильное обучение по сравнению с классической LSTM, что особенно важно для задач прогнозирования прочностного поведения многослойных композитов.

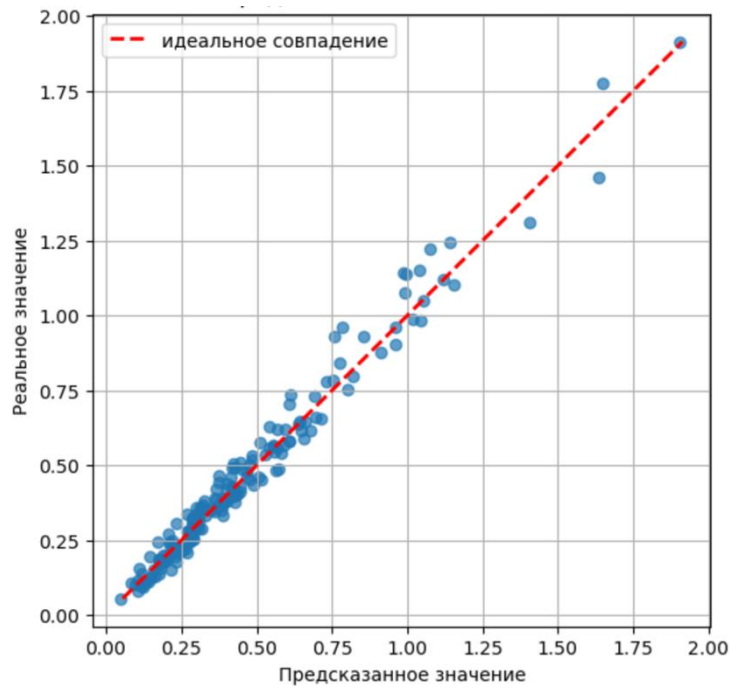


Рисунок 4.6. Предсказанное и истинное значение на отложенной выборке (в обучающей выборке были данные по 1 материалу)

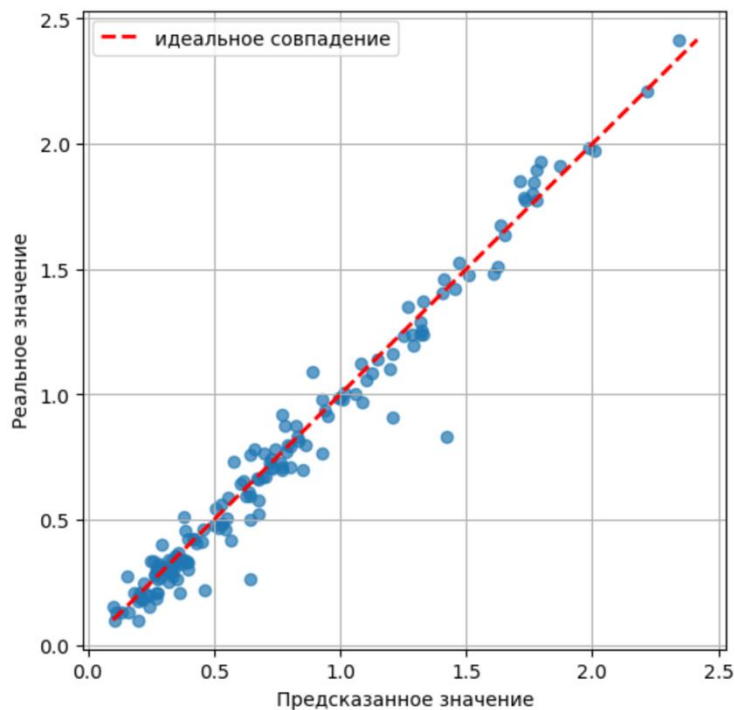


Рисунок 4.7. Предсказанное и истинное значение на отложенной выборке (в обучающей выборке были данные по 10 материалам)

Высокое значение R^2 свидетельствует о том, что модель объясняет более 98% дисперсии интегрального индекса разрушения на невидимых данных, что подтверждает ее способность корректно аппроксимировать сложные нелинейные

зависимости между порядком и свойствами слоев композита и выходной величиной.

Таким образом, предложенная BIRN-архитектура с использованием итеративной стабилизации и кодировки углов, стандартизированных физико-механических параметров и обработки последовательностей переменной длины обеспечивает высокую точность предсказания интегрального индекса разрушения многослойного композита и может быть использована для анализа и оптимизации композиционных материалов.

4.6 Основные выводы

В данной главе была предложена и реализована модель предсказания интегрального индекса разрушения композитного материала на основе рекуррентной нейронной сети BIRN, учитывающей последовательную природу укладки слоев и взаимное влияние их свойств. Архитектура модели обеспечивает обработку композитов с переменным числом слоев, а формирование признакового описания позволяет корректно объединять углы ориентации слоев и усредненные физико-механические параметры материала. Проведена проверка модели на валидационной выборке и показана высокая точность предсказания индекса разрушения, согласующаяся с результатами численного моделирования методом конечных элементов.

Глава 5. Разработка алгоритма для решения обратной задачи получения материала для заданных условий

5.1 Формулировка задачи оптимизации

В данном разделе рассматривается **обратная задача проектирования многослойного композиционного материала**. Заданы инженерные требования к композиту: требуемая жесткость вдоль главной оси $E_x \geq E^*$, предельная толщина пакета $h \leq h^*$ и условие прочности (интегральный индекс разрушения ниже предельно допустимого значения). Требуется найти параметры укладки - число слоев L ($2 \leq L \leq 10$), углы ориентации волокон каждого слоя θ_i и материалы слоев m_i - такие, что выполняются все ограничения, а интегральный индекс разрушения минимален при прочих равных условиях.

Математически задача записывается как условная стохастическая оптимизация:

minimize $y(L, \{\theta_i\}, \{m_i\})$ по переменным L, θ_i, m_i

при ограничениях: $E_x \geq E^*, h \leq h^*, y \leq y_{max}$,

где y - интегральный индекс разрушения, предсказываемый суррогатной моделью машинного обучения, E_x - модуль упругости пакета вдоль главной оси, вычисляемый по CLT, m_i - материал i -го слоя. В качестве иллюстрации в разделе 5.5 решается конкретный вариант: толщина не более 1 мм, жесткость не ниже 30 ГПа, прочность - минимальный индекс разрушения при соблюдении первых двух ограничений.

Объект оптимизации представляет собой многослойный композит с **варьируемым числом слоев L** , которое рассматривается в диапазоне от 2 до 10. Для каждого слоя необходимо выбрать:

1. **Угол ориентации армирующих волокон θ_i** из диапазона $0 \leq \theta_i \leq 90$, позволяющий охватить все возможные ориентировки слоев.
2. **Материал слоя m_i** , выбранный случайным образом из заранее определенного множества допустимых материалов M . Параметры материала

включают толщину слоя, модуль упругости, коэффициент Пуассона, плотность и другие физико-механические характеристики.

Таким образом, каждая особь генетического алгоритма кодирует **структурно-материальный состав композита**:

$$x = [(\theta_1, m_1), (\theta_2, m_2), \dots, (\theta_L, m_L)], L \in [2, 10]$$

Цель оптимизации - минимизация **критерия разрушения** $y = F(x)$, предсказываемого ранее разработанной моделью нейронной сети, учитывающей порядок слоев, их углы и физико-механические свойства материала:

$$y = F(x)$$

Важным аспектом является наличие **ограничений на жесткость композита**, в текущей реализации проверяется модуль упругости вдоль главной оси E_1 :

$$E_1^{min} < E_1(x)$$

Таким образом, задача принимает вид **условной стохастической оптимизации**, где решения генерируются и эволюционируют с учетом двух критериев:

Целевая функция: минимизация прогнозируемого индекса разрушения y .

Ограничение: сохранение модуля упругости E_1 в допустимых пределах.

Особенности подхода

- **Вариативность структуры:** число слоев композита варьируется, что отражает реальные проектные ограничения и позволяет исследовать оптимальные конфигурации разной толщины и сложности.
- **Комбинированная оптимизация геометрии и материалов:** каждый слой кодируется углом укладки и набором физических параметров материала, выбранного из множества возможных.
- **Использование стохастических методов:** генерация начальной популяции, скрещивание и мутация выполняются с вероятностным выбором углов и материалов, что позволяет эффективно исследовать сложное и высокоразмерное пространство возможных композитов.

- **Поддержка переменной длины последовательности:** для моделей LSTM предусмотрены механизмы паддинга и пакетирования последовательностей различной длины, что обеспечивает корректную обработку композитов с разным числом слоев.

Таким образом, задача сводится к **многомерной стохастической оптимизации**, где оптимальными параметрами являются как структурные характеристики (углы, число слоев), так и физико-механические свойства материала каждого слоя, обеспечивающие минимальный прогнозируемый индекс разрушения.

5.2 Генетический алгоритм

Обоснование доработки классического генетического алгоритма.

Классический генетический алгоритм предполагает фиксированную структуру хромосомы и однородное пространство поиска, поэтому напрямую к поставленной задаче он неприменим. В ходе работы алгоритм был адаптирован по следующим причинам:

1) переменная длина хромосомы - число слоев L варьируется в диапазоне $[2, 10]$, поэтому хромосома должна менять длину; это реализовано включением числа слоев в хромосому и операторами добавления/удаления слоя при мутации;

2) смешанное дискретно-непрерывное кодирование - углы ориентации принимают дискретные значения из $[0, 90^\circ]$ с шагом 5° , материалы выбираются из конечного множества M (дискретный ген), тогда как физико-механические параметры непрерывны; потребовалось ввести соответствие «дискретный выбор $\rightarrow$ вектор признаков» для подачи в суррогатную модель;

3) учет ограничений методом штрафных функций - недопустимые по жесткости или прочности особи не отбрасываются полностью, а получают штраф к функции приспособленности, что сохраняет разнообразие популяции;

Таким образом, разработанный алгоритм является гибридной модификацией классического ГА, учитывающей специфику проектирования многослойных

композитов; все его компоненты программно реализованы и также включены в разработанный комплекс проблемно-ориентированных программ (раздел 3.8).

Кодирование хромосомы

В рамках генетического алгоритма (ГА) каждая особь популяции представляет собой **хромосому**, кодирующую конкретную конфигурацию многослойного композита. Хромосома объединяет **структурные и материальные параметры слоев**, а также **число слоев** композита:

$$C = [(\theta_1, m_1), (\theta_2, m_2), \dots, (\theta_L, m_L)], L \in [2, 10],$$

где:

- $\theta_i \in [0, 90]$ - угол ориентации волокон i -го слоя, кодируемый как вещественное число;
- $m_i \in M$ - дискретный вектор параметров материала i -го слоя, выбранного из заранее определенного множества допустимых материалов;
- L - переменное количество слоев, также включаемое в хромосому и определяющее длину последовательности.

Такое кодирование позволяет одновременно оптимизировать **геометрию слоев, материальные свойства и структурную сложность композита**, учитывая влияние каждого слоя на интегральный индекс разрушения $y = F(C)$.

Механизм селекции. Для выбора родителей используется **отбор на основе ранжирования по приспособленности**. Каждая особь оценивается по прогнозируемому индексу разрушения y , при этом учитываются ограничения на модуль упругости E_1 . Отбор осуществляется следующим образом:

1. Вычисляется функция приспособленности $f_{fit}(C) = y(C)$ с учетом штрафа за нарушение ограничений;
2. Особей сортируют по возрастанию значения функции приспособленности (чем меньше y , тем лучше);
3. Для скрещивания выбираются **топ-процентные особи** (например, верхние 20%), что обеспечивает передачу наиболее удачных комбинаций в следующее поколение.

Механизм скрещивания. Скрещивание реализуется как **одноточечное объединение генетических сегментов родителей:**

$$C_{child} = [(\theta_1^p, m_1^p), \dots, (\theta_c^p, m_c^p), (\theta_{c+1}^q, m_{c+1}^q), \dots, (\theta_L^p, m_L^p)],$$

где p и q - индексы родителей, а $c \in [1, L - 1]$ - случайно выбранная точка разреза. Такой подход позволяет **смешивать комбинации углов и материалов** разных родителей, сохраняя при этом целостность слоев.

Механизм мутации. Мутация применяется с малой вероятностью μ к каждому гену (слою) хромосомы и реализуется как:

1. **Случайная замена угла** $\theta_i \rightarrow \theta_i'$, выбранного равномерно из диапазона $[0, 90]$ (диапазон с шагом 5);
2. **Случайная замена материала слоя** $m_i \rightarrow m_i'$, выбранного из множества M ;
3. **Возможное добавление или удаление слоя** при условии, что число слоев остается в пределах $[2, 10]$.

Мутация обеспечивает **разнообразие популяции**, предотвращая преждевременную сходимость алгоритма и увеличивая вероятность нахождения глобального минимума функции разрушения.

Таким образом, комбинация продуманного **кодирования хромосомы** и гибких механизмов **селекции, скрещивания и мутации** позволяет генетическому алгоритму эффективно исследовать высокоразмерное и дискретно-непрерывное пространство возможных композитов. Такой подход обеспечивает поиск оптимальной конфигурации слоев и материалов с учетом механических ограничений, минимизации индекса разрушения и вариативности числа слоев.

5.3 Ограничения

Высокая вычислительная сложность. При увеличении числа слоев $L \in [2, 10]$ и размера множества материалов $|M|$ пространство решений растет экспоненциально. Генетический алгоритм требует оценки функции приспособленности для каждой особи в каждом поколении, что может быть дорого, особенно если модель $F(x)$ сложная.

Стохастический характер и нестабильность результатов. Результаты зависят от случайной инициализации популяции и вероятностей мутации/скрещивания.

Для одного и того же задания разные запуски могут давать разные конфигурации композита.

Ограниченность по точности решения. ГА обеспечивает приближенный поиск глобального минимума, но не гарантирует нахождение истинного оптимального решения.

Неэффективность при жестких ограничениях. В текущей реализации проверяется только E_1 и индекс разрушения; если в будущем добавить больше ограничений, доля недопустимых особей может резко возрасти. Это приведет к пропуску многих решений, замедляя эволюцию и снижая эффективность поиска.

5.4 Результаты оптимизации

При одинаковом числе оценок генетического алгоритма к симулятору (300) предложенный гибридный алгоритм демонстрирует кардинальное превосходство по временным затратам на одну конфигурацию. Прямой метод (COMSOL + ГА) требует в среднем ~ 2.5 часа на одну полную конечно-элементную симуляцию для нахождения допустимого решения. В то же время, гибридный подход, использующий предсказания обученной BIRN-сети и уточнение через CLT, тратит в среднем **6.6 мин.** Это соответствует ускорению вычислений более чем в 25 раз.

Качественная интерпретация: Данный результат подтверждает основную гипотезу работы. BIRN-сеть, обученная на данных, полученных в пакете численного моделирования, успешно выполняет роль сверхбыстрого суррогатного метамоделирования, предсказывая целевую функцию для особей в популяции ГА.

Таблица 5.1. Сравнение алгоритмов по времени работы

Сценарий	Число оценок ГА	Время
Comsol + GA (pop=200, gen=100)	300	~ 2 ч 29 мин
BIRN + CLT+ GA (pop=200, gen=100)	300	6 мин

Качественная интерпретация: Важным практическим выводом является возможность успешного применения метода с существенно меньшими вычислительными затратами. Алгоритм способен находить качественные решения, не требуя полного перебора, характерного для прямой оптимизации. Сокращение времени расчета прямого решателя делает методику применимой для задач, где вычислительные ресурсы строго лимитированы.

Проведенные вычислительные эксперименты убедительно доказывают эффективность разработанного гибридного метода оптимизации на основе BIRN и генетического алгоритма. В сравнении с прямым методом (интеграция ГА и COMSOL) предложенный подход обеспечивает ускорение более чем на три порядка при сопоставимом бюджете на оптимизацию. Полученные результаты позволяют рекомендовать данный подход для решения задач структурной и параметрической оптимизации в тех областях, где прямое моделирование связано с высокими вычислительными затратами.

Разработанный комбинированный подход реализован в рамках программного комплекса, описанного в разделе 3.8, что обеспечивает интеграцию модуля численного моделирования, суррогатной модели машинного обучения и генетического алгоритма в единый вычислительный контур.

5.5 Сквозной пример

Рассмотрим однонаправленный полимерный композитный материал PA6/CF20% с полимерной матрицей нейлон PA6 и углеродным волокном T700 с 20% долей волокна.

Наноуровень. Определение свойств матрицы. На наноуровне механические свойства полимерной матрицы на основе полиамида PA6 были рассчитаны с использованием метода молекулярной динамики. Моделирование проводилось в пакете LAMMPS для молекулярной структуры PA6, заданной в виде SMILES-формулы



В результате молекулярно-динамического моделирования были определены эффективные упругие характеристики и плотность матрицы, которые далее использовались в качестве входных параметров для последующей гомогенизации:

$$E_1 = 2.515 \text{ ГПа}, E_2 = 2.515 \text{ ГПа}, G_{12} = 1.129 \text{ ГПа}, \nu_{12} = 0.286, \rho = 1109.9 \text{ кг/м}^3.$$

Результаты молекулярно-динамического моделирования показали, что полученные эффективные механические характеристики полиамида PA6 (матрицы) - в частности модули упругости порядка **~2.5-2.6 ГПа** и плотность **~1.11 г/см³** - находятся в разумном согласии с типичными справочными значениями для неполимеризованного PA6 (Nylon 6). Согласно данным производителя и агрегатора материалов, для PA6 в обычных условиях измеряется модуль упругости в диапазоне примерно **2.6-3.3 ГПа**, а плотность составляет около **1.13-1.15 г/см³** в стандартных испытаниях на растяжение и изгиб при температуре окружающей среды [43].

Свойства углеродного волокна были заданы на основе справочных данных для волокна Toray T700, приведенных в открытых источниках [44]. Волокно моделировалось как ортотропный материал с высокой продольной жесткостью:

$$E_1 = 230 \text{ ГПа}, E_2 = 18 \text{ ГПа}, G_{12} = 8.7 \text{ ГПа}, \nu_{12} = 0.2, \nu_{23} = 0.49, \rho = 1800 \text{ кг/м}^3.$$

Гомогенизация монослоя (RVE). На мезоуровне выполнялась гомогенизация представительного объема (RVE) однонаправленного композитного монослоя с объемной долей волокна 20%. Эффективные свойства

монослоя определялись на основе правила смесей, используя свойства матрицы и волокна, полученные на предыдущем этапе. В результате гомогенизации были получены следующие эффективные ортотропные характеристики монослоя:

$$E_1 = 48.01 \text{ ГПа}, E_2 = 3.04 \text{ ГПа}, G_{12} = 1.37 \text{ ГПа}, \nu_{12} = 0.27, \nu_{23} = 0.33, \rho = 1247 \text{ кг/м}^3.$$

Полученные эффективные свойства RVE однонаправленного композита на основе PA6 с углеродным волокном (20%) находятся в согласии с опубликованными справочными и экспериментальными данными для PA6-CFRP с содержанием углеродного волокна порядка 20 %. В частности, рассчитанная плотность композита хорошо соответствует значениям, приведенным производителем для материалов на основе PA6 с 20 % углеродного волокна, а уровень продольного модуля упругости и поперечных характеристик согласуется с ожидаемым диапазоном свойств для однонаправленных углеродонаполненных термопластов [45].

Пределы прочности монослоя при растяжении, сжатии и сдвиге и толщина монослоя $t_h = 0.2$ мм были заданы на основе справочных данных для углепластиковых материалов [45] и использовались при расчете индекса разрушения по критерию Хоффмана:

Таблица 5.2. Прочностные свойства PA6/CF20%

Свойство	Ед. изм.	PA6/CF20%
Матрица	-	PA6
Доля волокна	wt%	20
Плотность	kg/m ³	1,220
Предел прочности на растяжение	MPa	195
Упругость на растяжение	%	3.9
Прочности на сжатие	MPa	295

Свойство	Ед. изм.	РА6/CF20%
Упругость на сжатие	GPa	13.5

Макроуровень. На макроуровне полученные свойства монослоя использовались для численного моделирования многослойных композитных конструкций в пакете численного моделирования COMSOL Multiphysics. Были сгенерированы дополнительные расчеты для укладок с 3, 5 и 7 слоями, при варьировании ориентаций слоев и параметров материала. Всего было выполнено порядка 100 численных расчетов, на основе которых были получены поля напряжений и значения индекса разрушения по критерию Хоффмана. Эти данные использовались для дообучения модели машинного обучения, что позволило повысить ее устойчивость и точность при прогнозировании прочностных характеристик выбранного материала.

Решение обратной задачи. Пусть, нам необходимо подобрать параметры укладки МКМ со следующими условиями:

1. Толщина: не более 1 мм.
2. Жесткость: $E_2 > 30$ ГПа
3. Прочность: $F_{index(Hoffman)} < 0.95$

Решение полным перебором (для сравнения) потребует оценки 2613640 вариантов решений.

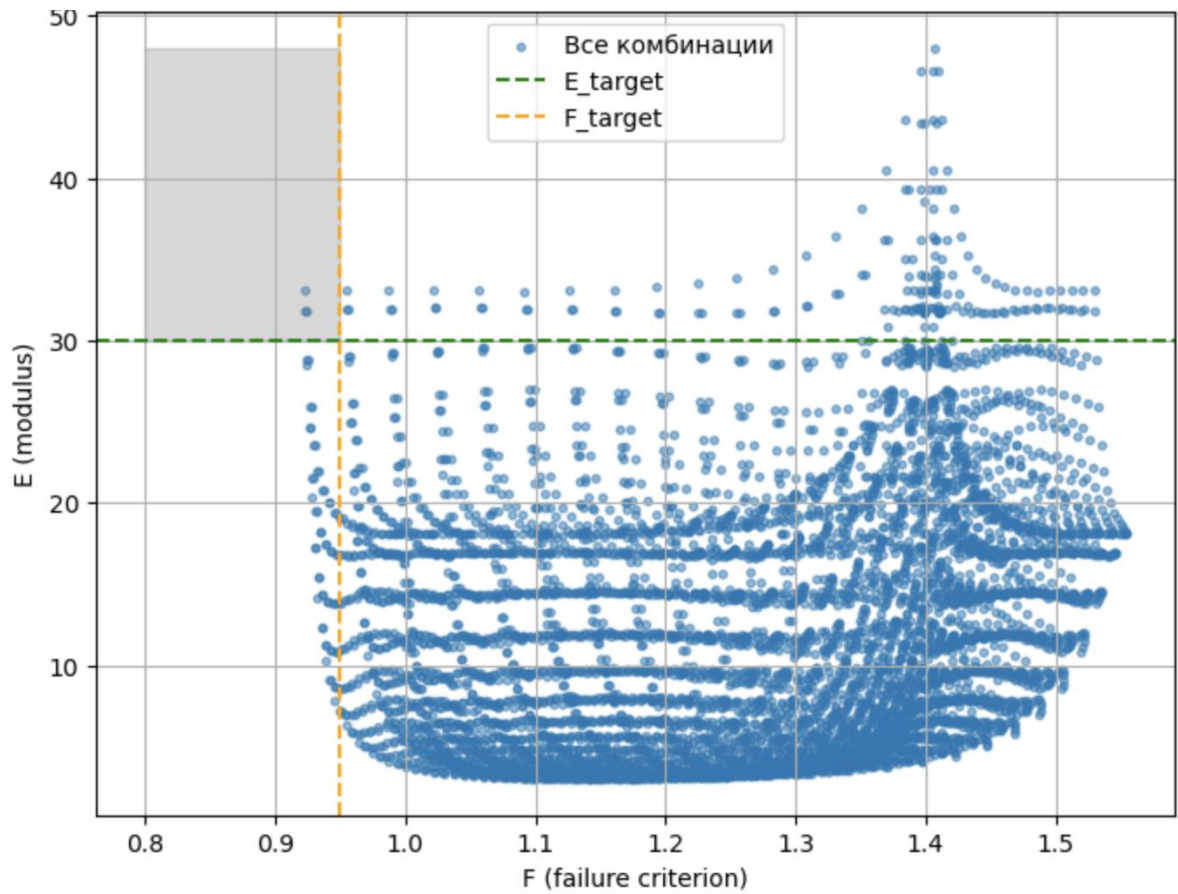


Рисунок 5.1. Полный перебор вариантов

На рисунке 5.1 в верхней левой части выделено множество решений, удовлетворяющих заданным условиям.

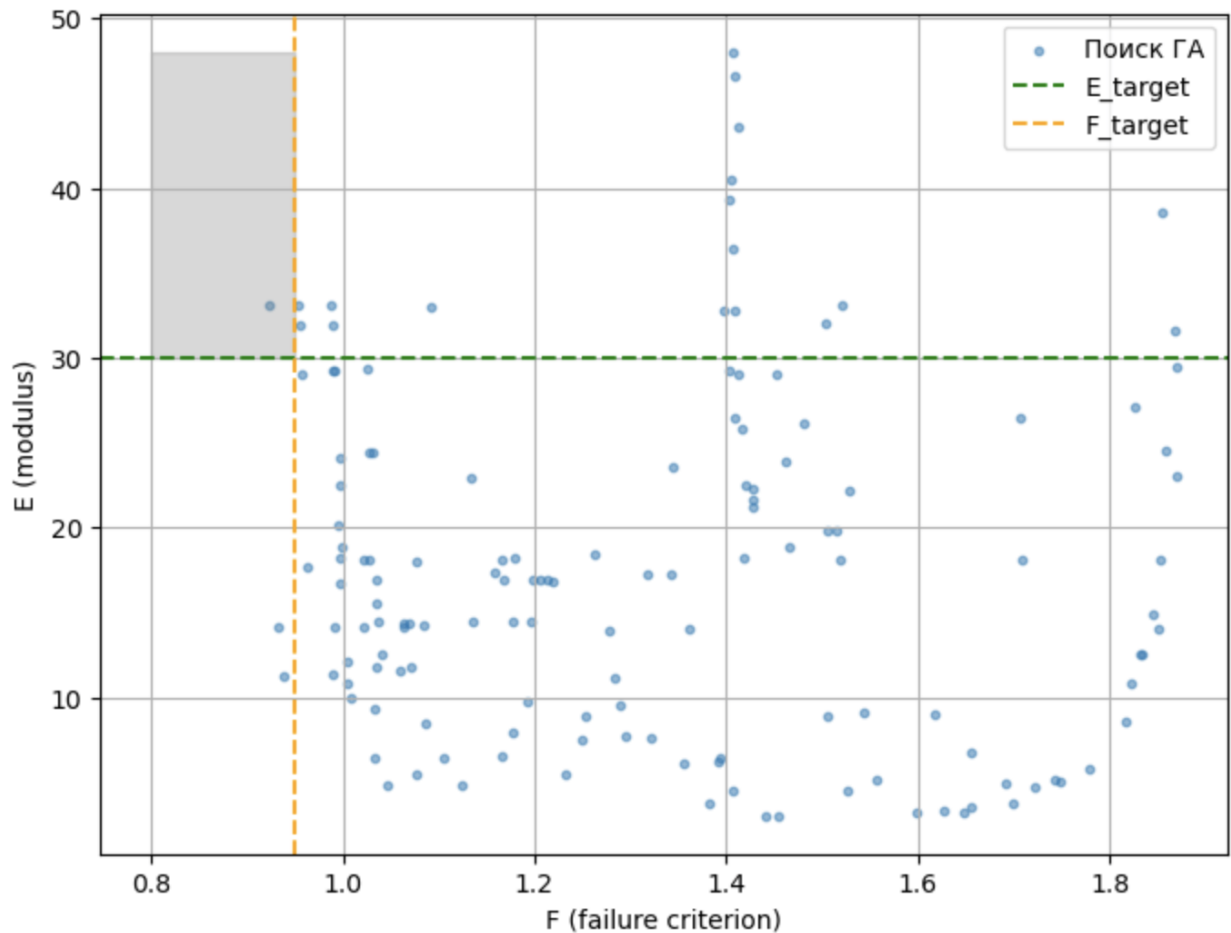


Рисунок 5.2. Пространство поиска решений генетического алгоритма

Пространство поиска решений генетического алгоритма отображено на рисунке 5.2. Лучший индивидум был найден в 4 поколении. Всего потребовалось 141 вычисление (оценка претендентов). В текущем примере алгоритм завершил работу при нахождении первого, удовлетворяющего условиям, решения: материал РА6/CF20% с тремя слоями и углами укладки $[90, 90, 0]$ обеспечит максимальное значение индекса критерия разрушения $F_{index(Hoffman)} = 0.92$, при соблюдении условий жесткости $E_2 = 33$ ГПа с толщиной материала 0.06. При необходимости, алгоритм может продолжить работу для поиска нескольких решений, удовлетворяющих заданным условиям.

На нано- и мезо- уровнях решения сопоставлялись с экспериментальными прочностными характеристиками и справочными материалами. На макроуровне найденное решение (материал РА6/CF20%, укладка $[90,90,0]$) сопоставлялось с результатами конечно-элементного расчета: оценки индекса разрушения и жесткости согласуются с расчетными и справочными значениями, что

подтверждает корректность применимости суррогатной модели и всей многомасштабной цепочки.

5.6 Основные выводы

Разработан алгоритм решения обратной задачи проектирования композитного материала с использованием генетического алгоритма, интегрированного с BIRN-моделью и классической теорией слоистых структур (CLT). Алгоритм обеспечивает нахождение оптимальных конфигураций слоев и материалов, минимизирующие прогнозируемый индекс разрушения при соблюдении ограничений на модуль упругости. Проведен анализ эффективности и устойчивости алгоритма, показано, что предложенный подход обеспечивает существенное сокращение вычислительных затрат по сравнению с прямым FEM-моделированием и позволяет исследовать широкий спектр конструктивных решений.

Результаты оптимизации показали, что алгоритм обеспечивает нахождение рациональные схемы чередования слоев и подбор материалов, обеспечивая как минимальный интегральный индекс разрушения, так и требуемые жесткостные характеристики. В совокупности, разработанный методический подход и алгоритмы создают универсальный инструмент для проектирования и оптимизации многослойных полимерных композитов, применимый в инженерных задачах для повышения прочностной надежности и оптимизации структуры композитных конструкций.

Заключение

Основные результаты диссертационной работы.

1. Проведен системный анализ методов моделирования многослойных полимерных композитов, включая микромеханические, мезомасштабные и макромасштабные модели, а также методы конечно-элементного анализа и теорию классических слоистых структур. Выявлены их возможности и ограничения для оценки прочности и разрушения многослойных композитов при различных схемах укладки слоев.

2. Разработана многомасштабная модель прочностного поведения МПКМ, обеспечивающая согласованную передачу характеристик между нано-, мезо- и макроуровнями и пригодная для постановки серии вычислительных экспериментов. Корректность модели подтверждена сопоставлением с экспериментальными и справочными данными.

3. Разработаны эффективные вычислительные методы и алгоритмы на основе суррогатных моделей машинного обучения, аппроксимирующих нелинейные зависимости между параметрами укладки слоёв, условиями нагружения и критериями разрушения. Построена и обучена предсказательная модель BIRN на базе RNN, учитывающая последовательность слоев и их взаимное влияние на прочностные характеристики композита. Модель обеспечивает обработку композитов с переменным числом слоев и объединяет углы укладки с физико-механическими характеристиками материала, что позволяет с высокой точностью прогнозировать интегральный индекс разрушения.

4. Разработана методика формирования проблемно-ориентированного набора данных на основе многомасштабного численного моделирования, включающего расчет упругих свойств однослойных и многослойных композитов с различными углами укладки. Методика позволяет создавать структурированные данные для обучения и валидации моделей машинного обучения, обеспечивая воспроизводимость и снижение трудоемкости подготовки выборок.

5. Разработан численный метод и алгоритм решения обратной задачи определения параметров укладки многослойного композита для заданных

требований по жёсткости, прочности и толщине на основе интеграции генетического алгоритма, суррогатной модели машинного обучения и классической теории слоистых структур, превосходящий по вычислительной эффективности прямые конечно-элементные расчеты.

6. Показана эффективность и вычислительная экономичность предложенного подхода: алгоритм обеспечивает значительное ускорение по сравнению с прямыми FEM-расчетами при сохранении высокой точности предсказания индекса разрушения. Применение CLT позволяет оценить надежность найденных решений и построить доверительные интервалы прогнозируемых значений.

Список литературы

1. **Liu D., Talreja R.** Modeling of fatigue damage evolution in composite laminates // *Composites Science and Technology*. 2002. Vol. 62, no. 12. P. 1433-1441.
2. **McCartney L. N.** Predicting shape and size of damage zones in composite materials // *Composites Part A*. 2000. Vol. 31. P. 525-536.
3. **Tsai S. W., Wu E. M.** A general theory of strength for anisotropic materials // *Journal of Composite Materials*. 1971. Vol. 5. P. 58-80.
4. **Puck A., Schürmann H.** Failure analysis of FRP laminates by means of physically based phenomenological models // *Composites Science and Technology*. 1996.
5. **Hashin Z.** Failure criteria for unidirectional fiber composites // *Journal of Applied Mechanics*. 1980. Vol. 47. P. 329-334.
6. **Dong Zhou, HongJun Liu, ShengLi Lv** // Progressive Damage Model for Composite Laminates in Hygrothermal Environments // *ACS Omega*. 2026. 5;11(2).
7. **O. Tanay Topac, Burak Gozluklu, Ercan Gurses** // Experimental and computational study of the damage process in CFRP composite beams under low-velocity impact // *Composites Part A*. 2017.
8. **Talreja R.** Damage mechanics of composite materials // *Composite Structures*. 2006.
9. **Angela Vincenti, Paolo Vannucci, M. Reza Ahmadian**, Optimisation of composite laminates using genetic algorithms // *Mechanics of Advanced Materials and Structures*. 2013.
10. **Jacob L. Pelletier, Senthil S. Vel** // Multi-objective optimization of fiber reinforced composite laminates for strength, stiffness and minimal mass// *Computers & Structures*. 2006.
11. **Ramesh Kumpati, Wojciech Skarka, Michał Skarka** // Enhanced Optimization of Composite Laminates: Multi-Objective Genetic Algorithms with Improved Ply-Stacking Sequences // *Materials*. 2024. Vol. 17, no. 4. Art. 887. DOI: 10.3390/ma17040887.

12. **Harshit Sharma, Gaurav Arora, Manoj Kumar Singh, Vinod Ayyappan** // Review of machine learning approaches for predicting mechanical behavior of composite materials // *Discover Applied Sciences*. 2025. Vol. 7. Art. 1238. DOI: 10.1007/s42452-025-07616-8.
13. **Chen Zhang, Yushu Li, Biao Jiang** // Mechanical properties prediction of composite laminate with FEA and machine learning coupled method // *Composite Structures*. 2022. Vol. 299. Art. 116086. DOI: 10.1016/j.compstruct.2022.116086.
14. **Vahid Daghigh, Hamid Daghigh, Thomas E. Lacy Jr** // Review of machine learning applications for defect detection in composite materials // *Machine Learning with Applications*. 2024. Vol. 18. Art. 100600. DOI: 10.1016/j.mlwa.2024.100600.
15. **Bartosz Miller, Leonard Ziemiański** // Optimizing composite shell with neural network surrogate models and genetic algorithms: Balancing efficiency and fidelity // *Advances in Engineering Software*. 2024. Vol. 197. Art. 103740. DOI: 10.1016/j.advengsoft.2024.103740.
16. **Bartosz Miller, Leonard Ziemiański** // Multi-Objective Optimization of Thin-Walled Composite Axisymmetric Structures Using Neural Surrogate Models and Genetic Algorithms // *Materials*. 2025. Vol. 16, no. 20. Art. 6794.
17. **Barshan Dev, Md Ashikur Rahman, Md. Jahidul Islam** // Properties prediction of composites based on machine learning models: A focus on statistical index approaches // *Materials Today Communications*. 2024. Vol. 38. Art. 107659. DOI: 10.1016/j.mtcomm.2023.107659.
18. **Gibson R. F.** Principles of Composite Material Mechanics. 3rd ed. Boca Raton: CRC Press, 2016.
19. **Daniel I. M., Ishai O.** Engineering Mechanics of Composite Materials. 2nd ed. Oxford: Oxford University Press, 2006.
20. **Jones R. M.** Mechanics of Composite Materials. 2nd ed. Philadelphia: Taylor & Francis, 1999.

21. **Муйземнек А. Ю., Курташова Е. Д.** Механика деформирования и разрушения полимерных слоистых композиционных материалов: учебное пособие. Пенза: Изд-во ПГУ, 2017.
22. **Орешко Е. И., Ерасов В. С., Гриневич А. В., Шершак П. В.** Обзор критериев прочности материалов // *Труды ВИАМ*. 2019. № 9.
23. **Полилов А. Н., Татусь Н. А.** Биомеханика прочности волокнистых композитов. М.: Физматлит, 2017.
24. **Абгарян К. К.** Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения: монография // Вычислительный центр Федерального исследовательского центра "Информатика и управление" РАН. - Москва: МАКС Пресс, 2017. - 284 с. - ISBN 978-5-317-05707-7.
25. **Weininger D.** SMILES, a chemical language and information system. 1. Introduction to methodology and encoding rules // *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*. 1988. Vol. 28, no. 1. P. 31-36.
26. **RDKit: Open-source cheminformatics** [Электронный ресурс]. URL: <https://www.rdkit.org>.
27. **Sun H. et al.** An ab initio CFF93 all-atom force field for polycarbonates // *Journal of the American Chemical Society*. 1994. Vol. 116, no. 7. P. 2978-2987.
28. **Dauber-Osguthorpe P. et al.** Structure and energetics of ligand binding to proteins // *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics*. 1988. Vol. 4, no. 1. P. 31-47.
29. **Thompson A. P. et al.** LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales // *Computer Physics Communications*. 2022. Vol. 271. Art. 108171.
30. **Первушин Ю. С., Жернаков В. С.** Проектирование и прогнозирование механических свойств однонаправленного слоя из композиционного материала: учебное пособие. Уфа: УГАТУ, 2002. 127 с.
31. **Закон Гука** [Электронный ресурс] // Физическая энциклопедия. URL: http://www.femto.com.ua/articles/part_1/0889.html.

32. **Pilkey W. D., Pilkey D. F., Bi Z.** Peterson's Stress Concentration Factors. 4th ed. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, 2020. 640 p.
33. **Hoffman O.** The Brittle Strength of Orthotropic Materials // *Journal of Composite Materials*. 1967. Vol. 1, No 2. P. 200–206.
34. **Hinton M.J., Soden P.D.** Predicting failure in composite laminates: the background to the exercise // *Composites Science and Technology*. 1998. Vol. 58, No 7. P. 1001–1010.
35. **Soden P.D., Hinton M.J., Kaddour A.S.** Lamina properties, lay-up configurations and loading conditions for a range of fibre-reinforced composite laminates // *Composites Science and Technology*. 1998. Vol. 58, No 7. P. 1011–1022.
36. **Алфутов Н. А., Зиновьев П. А., Попов Г. Б.** Расчет многослойных пластин и оболочек из композиционных материалов. М.: Машиностроение, 1984. 264 с.
37. **Peel L. D., Hyer W. M., Shuart M. J.** // Compression failure of angle-ply laminates. // Blacksburg, VA, USA: College of Engineering, Virginia Polytechnic Institute and State University, 1991. Interim Report 87. 162 p.
38. **Finckenor J. L.** // Determination of significant composite processing factors by designed experiment. // Huntsville, AL, USA: NASA Marshall Space Flight Center, 2003. MSFS Center Director's Discretionary Fund Final Report, Project No. 95-23. 68 p.
<https://ntrs.nasa.gov/api/citations/20030068919/downloads/20030068919.pdf>.
39. **Barbero E. J.** // Introduction to composite materials design. // Boca Raton, London, New York: CRC Press, 2011. 508 p.
40. **Cho K. et al.** Learning Phrase Representations using RNN Encoder-Decoder for Statistical Machine Translation // *Proceedings of the 2014 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing (EMNLP)*. 2014. P. 1724–1734.
41. **Vaswani A. et al.** Attention Is All You Need // *Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)*. 2017. Vol. 30. P. 5998–6008.

42. **Kokhlikyan N., Miglani V., Martin M.** A Survey of Loss Functions in Deep Learning // *Mathematics*. 2025. Vol. 13.
43. **MatMake.** Nylon 6 (Polyamide 6) material properties. MatMake Materials Database. URL: <https://matmake.com/materials-data/nylon-6-properties.html>
44. **Matsuzaki, R., Ueda, M., Namiki, M., Jeong, T. K., Asahara, H., Hasegawa, N., & Todoroki, A.** (2016). Three-dimensional printing of continuous-fiber composites by in-nozzle impregnation. *Scientific Reports*, 6, 23058. PMC11767158. URL: <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC11767158/>.
45. **TopLaseIKO.** *CFRP-04 Carbon Fiber Reinforced Polymer composite material data*. URL: https://www.toplaseiko.com/en/product/cfrp_04.html

Приложение А. Базовые модели-композиции

Таблица 1. Базовая модель-композиция «МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА»
(MC_1^1 / MC_1^2)

№	Название и обозначение множеств структурных элементов, подмножеств		Состав	
1	Множество данных VX_{11}	V_{11} - множество входных данных	Smiles формула материала	
		$X_{11} = \{C, p\}$ - множество выходных данных	Упругие свойства материала C	- упругие константы материала $\{C_{ij}\}$, $i = \underline{0,6}; j = \underline{0,6}$ - модуль Юнга E_1, E_2 - модуль сдвига G_{12} - коэффициент Пуассона ν_{12}
			Физические свойства p	- плотность p
2	Множество обработки методов данных (модели и алгоритмы) $MA_{11} = \{M_{11}, A_{11}\}$ $= \{f_{11}, a_{11}\}$	M_{11} - множество моделей	f_{11} – динамические	Модели молекулярной динамики
		A_{11} - множество алгоритмов	a_{11} - подмножество алгоритмов исп. только на 1-м уровне масштаба (локальные)	-
3	Множество реализаций методов обработки данных		Заполняется для экземпляров БК	

Таблица 2. Базовая модель-композиция «ГОМОГЕНИЗАЦИЯ RVE» (MC_2^1)

№	Название и обозначение множеств структурных элементов, подмножеств		Состав
1	Множество данных VX_{21}	$V_{21} = \{C_{matrix}, C_{fiber}, p\}$ - множество входных данных	(C_{matrix}, C_{fiber}) - упругие свойства матрицы и волокна, наследуются из соответствующих моделей-композиций MC_1^1 / MC_1^2 ; ρ - доля волокна;

		$X_{21} = \{C, p\}$ - множество выходных данных	Упругие свойства материала С	- упругие константы материала $\{C_{ij}^{homogenized}\}, i = \underline{0,6}; j = \underline{0,6}$ - модуль Юнга E_1, E_2 - модуль сдвига G_{12} - коэффициент Пуассона ν_{12}
			Физические свойства р	- плотность р
2	Множество обработки методов данных (модели и алгоритмы) $MA_{21} = \{M_{21}\}$	M_{21} - множество моделей	f_{21} – динамические	Модели молекулярной динамики
3	Множество реализаций методов обработки данных			Заполняется для экземпляров БК

Таблица 3. Базовая модель-композиция «ГОМОГЕНИЗАЦИЯ RVE» (MC_2^2)

№	Название и обозначение множеств структурных элементов, подмножеств			Состав
1	Множество данных VX_{22}	$V_{22} = \{C_{matrix}, C_{fiber}, p\}$ - множество входных данных		(C_{matrix}, C_{fiber}) - упругие свойства матрицы и волокна, наследуются из соответствующих моделей-композиций MC_1^1 / MC_1^2 ; ρ - доля волокна;
		$X_{22} = \{C, p\}$ - множество выходных данных	Упругие свойства материала С	- упругие константы материала $\{C_{ij}^{homogenized}\}, i = \underline{0,6}; j = \underline{0,6}$ - модуль Юнга E_1, E_2 - модуль сдвига G_{12} - коэффициент Пуассона ν_{12}
			Физические свойства р	- плотность р
2	Множество обработки методов данных (модели и алгоритмы) $MA_{22} = \{M_{22}\}$	M_{22} - множество моделей	s_{22} – статические	Численное моделирование ANSYS
3	Множество реализаций методов обработки данных			Заполняется для экземпляров БК

Таблица 4. Базовая модель-композиция «ГОМОГЕНИЗАЦИЯ RVE» (MC_2^3)

№	Название и обозначение множеств структурных элементов, подмножеств		Состав
1	Множество данных VX_{23}	$V_{23} = \{C_{matrix}, C_{fiber}, p\}$ - множество входных данных	(C_{matrix}, C_{fiber}) - упругие свойства матрицы и волокна, наследуются из соответствующих моделей-композиций MC_1^1 / MC_1^2 ; ρ - доля волокна;
		$X_{23} = \{C, p\}$ - множество выходных данных	Упругие свойства материала C - упругие константы материала $\{C_{ij}^{homogenized}\}, i = \underline{0,6}; j = \underline{0,6}$ - модуль Юнга E_1, E_2 - модуль сдвига G_{12} - коэффициент Пуассона ν_{12}
			Физические свойства p - плотность ρ
2	Множество обработки методов данных (модели и алгоритмы) $MA_{23} = \{A_{23}\}$	A_{23} - множество алгоритмов	a_{23} - подмножество алгоритмов исп. только на 2-м уровне масштаба (локальные)
3	Множество реализаций методов обработки данных		Заполняется для экземпляров БК

Таблица 5. Базовая модель-композиция «ГОМОГЕНИЗАЦИЯ МКМ (ANSYS)» (MC_3^1)

№	Название и обозначение множеств структурных элементов, подмножеств		Состав
1	Множество данных VX_{31}	V_{31} - множество входных данных	- упругие свойства монослоя для каждого слоя, наследуются из соответствующих моделей-композиций $MC_2^1 / MC_2^2 / MC_2^3$; - углы укладки слоев $\{\theta_i\}, i = \underline{0, n}$ где n - количество слоев
		$X_{31} = \{E_1, E_2, G_{12}\}$ - множество выходных данных	Упругие свойства материала - модуль Юнга E_1, E_2 - модуль сдвига G_{12}

2	Множество обработки методов данных (модели и алгоритмы) $MA_{31} = \{M_{31}\}$	M_{31} -множество моделей	s_{31} — статические	Численное моделирование ANSYS
3	Множество реализаций методов обработки данных			Заполняется для экземпляров БК

Таблица 6. Базовая модель-композиция «НАПРЯЖЕНИЕ И РАЗРУШЕНИЕ МКМ (COMSOL)» (MC_3^2)

№	Название и обозначение множеств структурных элементов, подмножеств		Состав	
1	Множество данных VX_{32}	V_{32} - множество входных данных	- упругие свойства монослоя для каждого слоя, наследуются из соответствующих моделей-композиций $MC_2^1 / MC_2^2 / MC_2^3$; - вектор силы (F_x, F_y, F_z) - углы укладки слоев $\{\theta_i\}, i = \underline{0, n}$ где n - количество слоев	
		$X_{32} = \{\sigma\}$ - множество выходных данных	Прочностные свойства материала σ	- значение индекса критерия разрушения Хоффмана
2	Множество обработки методов данных (модели и алгоритмы) $MA_{32} = \{M_{32}\}$	M_{32} -множество моделей	s_{32} — статические	Численное моделирование COMSOL (МКЭ)
3	Множество реализаций методов обработки данных			Заполняется для экземпляров БК

Приложение Б. Свидетельство о государственной регистрации

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2025619197

**Программный модуль для расчета упругих
характеристик однонаправленных полимерных
композитных материалов**

Правообладатель: **Федеральное государственное учреждение
«Федеральный исследовательский центр «Информатика
и управление» Российской академии наук» (RU)**

Авторы: **Абгарян Каринэ Карленовна (RU), Мочалова Юлия
Дмитриевна (RU)**

Заявка № **2025616220**
Дата поступления **21 марта 2025 г.**
Дата государственной регистрации
в Реестре программ для ЭВМ **14 апреля 2025 г.**

Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

Ю.С. Зубов



ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ
Сертификат: 0692e7c1a6300b15412401670bca2026
Владелец: Зубов Юрий Сергеевич
Действителен с 10.07.2024 по 03.10.2025

Рисунок Б.1 — Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ

Приложение В. Акт о внедрении результатов

УТВЕРЖДАЮ

Генеральный директор

ООО «ИНТЕРЮНИС-ИТ»

С.В. Елизаров

8.03.2026 г.



АКТ

о внедрении результатов диссертационной работы Ю. Д. Мочаловой
«Методы анализа данных и многомасштабные подходы для исследования прочностных
характеристик композиционных материалов»

Настоящий акт составлен научно-технической комиссией в составе сотрудников: Елизаров С.В., Генеральный директор, Барат В.А., нач. НИО, Ушанов С.В., ст. н. с. НИО о том, что результаты диссертационной работы Мочаловой Юлии Дмитриевны на тему «Методы анализа данных и многомасштабные подходы для исследования прочностных характеристик композиционных материалов» использованы в исследовательской деятельности организации.

Разработанные соискателем модели и методы определения параметров укладки слоев в многослойных полимерных композиционных материалах внедрены в практику проектирования, что позволяет повысить эффективность решения задач по созданию многослойных композитных структур с заданными прочностными характеристиками.

Ст. н. с. НИО

A handwritten signature in blue ink, likely belonging to S.V. Ushanov.

С.В. Ушанов

Рисунок В.1 — Акт о внедрении результатов