

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»

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Москва - 2026

Работа выполнена в Федеральном государственном учреждении «Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук».

Научный руководитель:	**Абгарян Каринэ Карленовна,** доктор физико-математических наук, доцент.
Официальные оппоненты:	**Алексеев Владимир Витальевич**, доктор технических наук, профессор, профессор кафедры «Информационные системы и защита информации» ФГБОУ ВО «Тамбовский государственный университет имени Г.Р. Державина». **Алексеев Алексей Кириллович,** доктор физико-математических наук, доцент, главный научный сотрудник отдела аэрогазодинамики, ПАО «Ракетно-космическая корпорация «Энергия» имени С.П. Королёва».
Ведущая организация:	**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н. Э. Баумана** (национальный исследовательский университет)»

Защита состоится «23» декабря 2026 г. в 12:30 на заседании диссертационного совета 24.1.224.01 при Федеральном исследовательском центре «Информатика и управление» Российской академии наук по адресу: 117312, г. Москва, пр.-т 60-летия Октября, д. 9.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» Российской академии наук и на сайте https://www.frccsc.ru/diss-council/00207304/diss/list/48-mochalova_yd.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения, просьба направлять по адресу: 119333, г. Москва, ул. Вавилова, д.44, кор. 2, ученому секретарю диссертационного совета 24.1.224.01.

Автореферат разослан «____» _____ 2026 года.
Телефон для справок: +7 (499) 135-51-64.

Ученый секретарь
диссертационного совета 24.1.224.01,
доктор технических наук, доцент И. В. Смирнов

Общая характеристика работы

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

Проектирование многослойных ПКМ сопряжено с трудностями достоверной оценки прочностных характеристик, обусловленными анизотропией и нелинейным характером поведения композитов. Традиционные аналитические и численные методы, основанные на классической теории слоистых структур и конечно-элементном анализе, обеспечивают высокую точность, однако требуют значительных вычислительных затрат, особенно при многовариантном анализе и оптимизации структуры.

Задачи оптимизации многослойных композитных материалов, включающие подбор параметров укладки при наличии множества инженерных ограничений, приводят к необходимости многократного выполнения трудоемких численных расчетов, что существенно ограничивает их практическое применение на ранних этапах проектирования.

В этой связи актуальной является разработка вычислительно эффективных подходов к оценке прочностных характеристик многослойных ПКМ. Перспективным направлением является использование методов машинного обучения в качестве суррогатных моделей, аппроксимирующих нелинейные зависимости между параметрами структуры материала и его механическими характеристиками. Особый интерес представляют модели, учитывающие последовательный характер укладки слоев, а также их интеграция с классическими инженерными методами и эволюционными алгоритмами оптимизации.

Таким образом, разработка гибридных методик, объединяющих численное моделирование, методы машинного обучения и алгоритмы оптимизации, является актуальной научно-практической задачей, направленной на повышение эффективности анализа и проектирования многослойных полимерных композиционных материалов.

Классификация используемых методов. В работе используются методы следующих классов математических моделей и алгоритмов: континуальные (дифференциальные) модели - классическая теория слоистых структур и метод конечных элементов; мезоскопические аналитические модели - правила смесей для эффективных свойств монослоя; дискретные атомистические модели - молекулярная динамика (LAMMPS); эмпирические

статистические методы машинного обучения - рекуррентные нейронные сети (LSTM, BIRN); эволюционные методы оптимизации - генетический алгоритм; методы анализа данных (стандартизация признаков, кодирование циклических углов, кросс-валидация).

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.

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:

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. Развиты 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. 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.

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).

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. Постановка задач и обсуждение результатов проводились совместно с научным руководителем.

Автором разработаны и реализованы методы моделирования прочностных характеристик многослойных полимерных композиционных материалов на мезо- и макромасштабных уровнях, включая программную реализацию аналитических расчетов упругих характеристик и критериев разрушения, а также постановку и проведение конечно-элементных расчетов [2, 3, 5, 9-11].

Автором разработана методика формирования проблемно-ориентированного набора данных, выполнены подготовка и структурирование данных, а также реализованы и обучены модели машинного обучения для прогнозирования прочностных характеристик многослойных композитных материалов [1, 4, 8]. Также самостоятельно реализован генетический алгоритм оптимизации параметров укладки и выполнена его интеграция с моделью машинного обучения и классической теорией слоистых структур [1, 7]. Программная реализация модуля расчета упругих характеристик однонаправленных полимерных композитных

материалов оформлена в виде свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ [6].

Расчеты на микроуровне, основанные на квантово-механическом моделировании свойств компонентов композитного материала, выполнялись с использованием программного модуля, разработанного другим участником научного проекта и использованного автором в качестве исходного инструмента; его разработка не входила в задачи настоящей работы.

Интерпретация результатов, анализ их достоверности, формулировка выводов и подготовка текста диссертации выполнены автором самостоятельно.

Содержание работы

Во введении обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, формулируется цель, ставятся задачи работы, формулируются научная новизна и теоретическая значимость представляемой работы.

В **первой главе** представлен обзор методов моделирования прочностных и усталостных характеристик слоистых полимерных композиционных материалов на различных масштабных уровнях, а также проанализированы подходы к применению методов машинного обучения. На основе анализа литературы сформулирована научная мотивация и определены нерешенные проблемы, определившие направление исследования.

В **разделах 1.1-1.3** приведен обзор существующих подходов к моделированию прочностных и усталостных характеристик слоистых полимерных композиционных материалов на различных масштабных уровнях. Рассмотрены микромеханические модели, описывающие композит как систему волокон, матрицы и межфазного слоя, мезомасштабные модели на основе классической теории слоистых структур и критериев разрушения, а также макромасштабные методы, основанные на конечно-элементном анализе. Показано, что микромеханические и макромодели обеспечивают высокую физическую и расчетную точность, однако характеризуются значительными вычислительными затратами, тогда как мезоуровневые модели обладают высокой вычислительной эффективностью, но ограниченной точностью при анализе сложных напряженных состояний и усталостного разрушения.

В **разделе 1.4** рассмотрены основные подходы к моделированию усталостного разрушения композиционных материалов, включая эмпирические модели на основе S-N кривых, модели деградации жесткости и модели континуальной механики повреждений. Отмечено, что данные подходы требуют значительных массивов экспериментальных данных и обладают ограниченной применимостью при варьировании структуры многослойных композитов.

В **разделе 1.5** проанализированы методы оптимизации структуры слоистых композитных материалов, основанные на применении

эволюционных алгоритмов, в частности генетических алгоритмов. Показано, что такие методы эффективны для решения высокоразмерных и многокритериальных задач выбора параметров укладки слоев, однако их практическое применение существенно ограничено высокой вычислительной стоимостью оценки целевых функций, как правило, основанных на аналитических или конечно-элементных расчетах.

В **разделе 1.6** рассмотрены современные подходы к применению методов машинного обучения для прогнозирования механических свойств, обнаружения дефектов и оптимизации структуры композиционных материалов. Показано, что использование моделей машинного обучения в качестве суррогатных позволяет аппроксимировать результаты численного моделирования с приемлемой точностью и существенно сократить вычислительные затраты. Особое внимание уделено гибридным подходам, сочетающим суррогатные модели на основе машинного обучения и эволюционные алгоритмы оптимизации, а также многоуровневым и ансамблевым стратегиям повышения точности и устойчивости оптимизационного процесса.

В **разделе 1.7** сформулированы основные выводы по результатам анализа литературных источников. Отмечены нерешенные проблемы, связанные с высокой вычислительной стоимостью численного моделирования при большом числе варьируемых параметров, зависимостью точности суррогатных моделей от качества данных, ограничениями классических критериев разрушения при анализе сложных многослойных конфигураций, а также недостатком комплексных подходов, объединяющих теорию слоистых структур, критерии разрушения, конечно-элементные данные и методы машинного обучения в единую вычислительную схему.

Сформулированные выводы обосновывают актуальность разработки гибридной методики анализа и оптимизации прочностных характеристик многослойных композиционных материалов, основанной на интеграции численного моделирования, методов машинного обучения и эволюционных алгоритмов оптимизации.

Классификация используемых в работе методов.

Используемые в работе методы распределяются по следующим классам математических моделей и алгоритмов: континуальные (дифференциальные) модели (CLT, метод конечных элементов в ANSYS и COMSOL); аналитические мезоскопические модели (правила смесей); дискретные атомистические модели (молекулярная динамика в LAMMPS); эмпирические статистические модели машинного обучения (LSTM, BIRN); эволюционные методы оптимизации (генетический алгоритм). Каждый класс входит в структуру многомасштабной композиции (раздел 3.1), что обеспечивает их интеграцию в единый вычислительный процесс.

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 **разделе 2.1** рассмотрен однослойный композиционный материал как базовый структурный элемент многослойных полимерных композитов (рисунок 2.1).

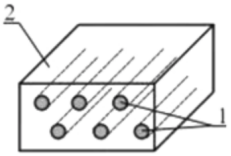
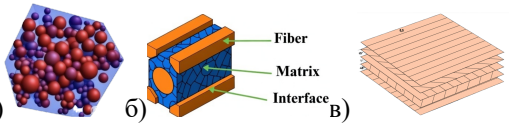


Рисунок 2.1. Однонаправленный композитный материал. 1 - продольное армирующее волокно, 2 - матрица.

Описана его гетерогенная структура, включающая армирующие волокна и полимерную матрицу, а также ортотропный характер механических свойств. Показано, что эффективные упругие и прочностные характеристики однослойного композита определяются свойствами компонентов, их объемными долями, геометрией армирования и качеством межфазного взаимодействия. Отмечена роль однослойного материала как связующего звена между микроуровнем и макроуровнем в рамках многомасштабного моделирования (рисунок 2.3).



а) б) в)

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

В **разделе 2.2** введено понятие элемента репрезентативного объема (RVE) как основы многомасштабного подхода к моделированию полимерных композиционных материалов (рисунок 2.4). Рассмотрены методы определения эффективных свойств RVE, включая микромеханические модели, конечно-элементный анализ и гибридные подходы. Показано, что корректный выбор и постановка RVE критичны для достоверного перехода от микроуровня к мезо- и макроуровням, а также для формирования данных, используемых при расчете прочности и построении суррогатных моделей.

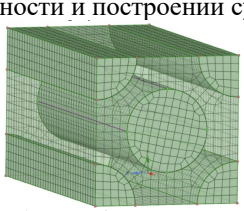


Рисунок 2.4. Элемент репрезентативного объема

В **разделе 2.3** рассмотрены структура и особенности многослойных композиционных материалов. Проанализировано влияние толщины слоев, углов ориентации волокон, последовательности укладки и числа слоев на анизотропию, жесткость и прочность конструкции. Рассмотрены основные методы анализа многослойных композитов, включая классическую теорию слоистых структур, конечно-элементное моделирование и многомасштабные подходы. Отмечена важность учета межслоевых взаимодействий, расслоения и усталостных повреждений при проектировании и эксплуатации многослойных конструкций.

В **разделе 2.4** рассмотрены критерии разрушения многослойных полимерных композиционных материалов и их классификация. Проанализированы основные феноменологические критерии прочности, применяемые для однонаправленных слоев и многослойных конструкций, а также особенности их использования в условиях плоского напряженного состояния. Обоснован выбор критерия Хоффмана для оценки начала разрушения слоев композитного материала, как обеспечивающего компромисс между физической обоснованностью, численной устойчивостью и вычислительной эффективностью, что особенно важно для параметрических расчетов, оптимизации и задач машинного обучения.

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} - касательное напряжение, а коэффициенты выражаются через пределы прочности при растяжении и сжатии X_t, X_c, Y_t, Y_c и предел прочности при сдвиге S: $F_1 = \frac{1}{X_t} - \frac{1}{X_c}$, $F_2 = \frac{1}{Y_t} - \frac{1}{Y_c}$, $F_{11} = \frac{1}{X_t \cdot X_c}$, $F_{22} = \frac{1}{Y_t \cdot Y_c}$, $F_{66} = \frac{1}{S^2}$, $F_{12} = -0.5 \cdot (F_{11} + F_{22})$.

Физический смысл: левая часть накапливает вклад нормальных и касательных напряжений в риск разрушения слоя; если ее значение меньше единицы - слой выдерживает нагрузку, если достигает или превышает единицу - начинается разрушение. В отличие от критерия Цая-Хилла учитывается различие прочностей при растяжении и сжатии. Максимальное значение критерия по всем слоям и расчетным точкам принимается за интегральный индекс разрушения композита и используется как целевой признак модели машинного обучения и целевая функция обратной задачи.

В **разделе 2.5** сформулированы основные выводы главы. Показано, что корректное описание структуры однослойных и многослойных композитов, выбор адекватного RVE и критериев разрушения являются необходимой основой для построения вычислительно эффективных моделей анализа прочности и оптимизации структуры многослойных полимерных композиционных материалов.

В **третьей главе** представлена методика полуавтоматического формирования проблемно-ориентированных наборов данных для задач моделирования свойств и разрушения многослойных композиционных

материалов методами машинного обучения и программный комплекс, реализующий данную методику. Описаны этапы расчета упругих свойств базового материала, однослойных и многослойных композитов с различными углами укладки на основе классической теории слоистых структур. Рассмотрены подходы к моделированию разрушения многослойных композитов и вопросы хранения и организации полученных данных.
Описана прямая и обратная задачи.

В **разделе 3.1** описана прямая и обратная задачи - по известной структуре укладки вычисляется интегральный индекс разрушения и упругие характеристики композита - и используется при решении обратной задачи, состоящей в подборе укладки под заданные требования (жесткость, прочность, толщина). Также рассматривается концепция многомасштабного моделирования полимерных композитных материалов (ПКМ), обеспечивающая согласованный переход от свойств исходных компонентов к прогнозированию прочностных характеристик многослойного композита. Введены понятия базовой модели-композиции (БК) и многомасштабной композиции (МК), описывающие структуру данных и алгоритмы обработки на разных масштабных уровнях - от нано- до макроуровня (рисунок 3.1). Классификация БК включает молекулярно-динамические модели матрицы и волокна, гомогенизацию RVE и МКМ с расчетом напряжений и разрушения, что обеспечивает формализацию вычислительной цепочки и единое расчетное пространство для анализа прочности. Формальное математическое описание многомасштабной модели представлено как:

$$F_{macro} \circ F_{meso} \circ F_{nano}$$

Многомасштабная модель задается композицией отображений, отвечающих трем масштабным уровням: F_{nano} - наноуровень (молекулярно-динамическое моделирование свойств матрицы и волокна в пакете LAMMPS; раздел 3.2 диссертации); F_{meso} - мезоуровень (гомогенизация представительного объема RVE по правилам смесей и численная гомогенизация в ANSYS; разделы 3.3-3.4 диссертации); F_{macro} - макроуровень (расчет напряженно-деформированного состояния и интегрального индекса разрушения по классической теории слоистых структур и методу конечных элементов в COMSOL; разделы 3.5-3.6 диссертации). Модель решает прямую задачу (по структуре укладки вычисляет индекс разрушения и упругие характеристики) и используется при решении обратной задачи (глава 5 диссертации); при многовариантном анализе вместо повторного решения макроуровневой задачи используется суррогатная модель BIRN (глава 4 диссертации). Уравнения отдельных уровней приведены в главе 3 диссертации. Готовых экспериментальных данных по прочности для всего многообразия укладок нет, поэтому в работе предложена методика их генерации средствами многомасштабного моделирования. Формируемый набор данных описывает зависимость «структура укладки → прочность»: входные данные - число слоев (2-10), углы укладки (диапазон 0-90° с шагом 5°), материалы и их физико-

механические параметры, рассчитанные на разных уровнях; выходные данные - упругие характеристики МКМ и интегральный индекс разрушения по критерию Хоффмана.

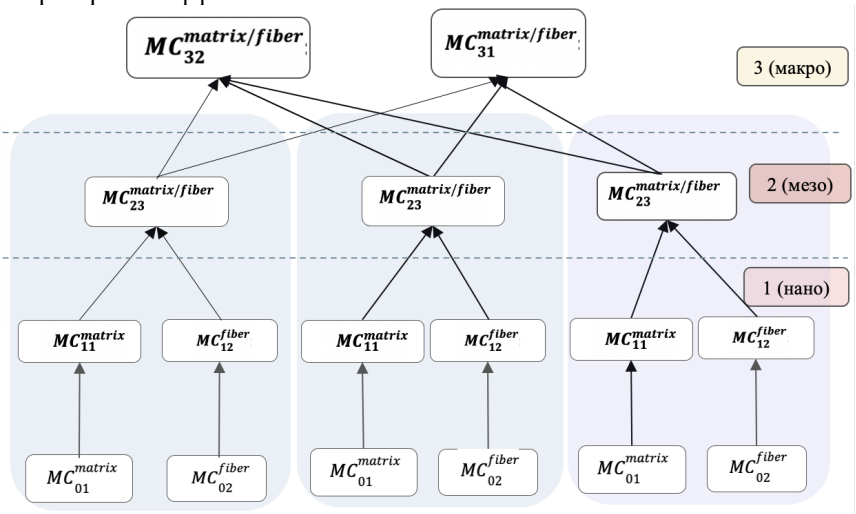


Рисунок 3.1. Схематическое представление многомасштабной композиции для трехслойного КМ

В **разделе 3.2** описан модуль расчета упругих свойств базового материала, включающий генерацию атомистической модели цепи из SMILES-нотации мономера, построение периодической трехмерной системы, молекулярно-динамическое уплотнение и релаксацию для достижения равновесной плотности. Полученные модели позволяют проводить расчеты механических, термических и диффузионных свойств материала на наноуровне. Эффективные упругие характеристики, полученные молекулярно-динамическим моделированием, сопоставляются со справочными и сертификационными данными; отклонение не превышает первых единиц процентов (пример для матрицы PA6 - в разделе 5.5).

Раздел 3.3 посвящен автоматизированному численному моделированию упругих свойств однослойного композита с использованием ANSYS. Реализован скрипт на Python для пакетного запуска расчетов с различными долями волокна и наборами физических констант, что позволяет систематически формировать обучающую выборку для машинного обучения.

В разделе 3.4 описан метод расчета эффективных упругих характеристик однонаправленного монослоя на основе правил смесей для модулей упругости, модуля сдвига, коэффициентов Пуассона и плотности, а также приближенный расчет предела прочности слоя при растяжении, сжатии и сдвиге с учетом коэффициента концентрации напряжений в матрице.

Разделы 3.5 и 3.6 рассматривают моделирование многослойного композита с различными углами укладки. Реализован автоматический запуск параметрических расчетов в COMSOL Multiphysics для различных конфигураций слоев и их ориентации. Эффективные упругие характеристики многослойного КМ определяются через матрицы жесткости монослоев с учетом углов армирования, перекрестного армирования и закона Гука. Проведена верификация расчетных данных с экспериментальными результатами для материалов IM7/8551-7a и AS4/3502, показавшая хорошее согласие с относительным отклонением не более 5% (рисунок 3.2).

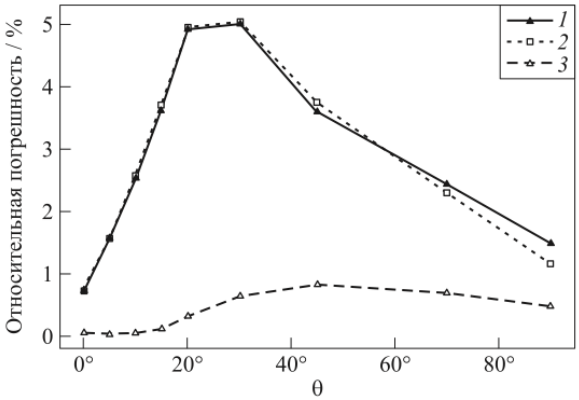


Рисунок 3.2. Погрешность измерения модуля упругости $E_x^{\#}$: 1 - вычисленного по соотношениям (5), (6) и (8) относительно экспериментального значения; 2 - вычисленного в АСР относительно экспериментального значения; 3 - вычисленного по соотношениям (5), (6) и (8) относительно вычисленного в АСР

Для хранения рассчитанных характеристик и характеристик из литературных источников была разработана база данных (**раздел 3.7).** Описание структуры базы данных по уровню получения данных представлена в таблице 3.7

Таблица 3.7. Структура базы 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 p
2	$MC_2^1/MC_2^2/MC_2^2$ **(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}

Таким образом, разработанная методика полуавтоматического формирования коллекций данных позволяет эффективно генерировать статистически репрезентативные наборы для многослойных ПКМ, обеспечивая интеграцию многомасштабного моделирования, численных расчетов и подготовки обучающих данных для машинного обучения и оптимизации структуры композита.

Методы реализованы в виде комплекса проблемно-ориентированных программ: модуль МД-расчета свойств матрицы (LAMMPS), модуль автоматизированной гомогенизации RVE (ANSYS), модуль параметрических расчетов НДС и разрушения (COMSOL), модуль CLT-расчетов, СУБД PostgreSQL. Отдельные программные модули зарегистрированы в Роспатенте (свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2025619197).

В **четвертой главе** разработана и исследована модель прогнозирования разрушения многослойного композиционного материала на основе методов машинного обучения, а также предложена новая нейросетевая архитектура. Приведена постановка задачи, используемые входные признаки и методы валидации. Проведен анализ качества прогнозирования и устойчивости модели.

В **разделе 4.1** рассматривается задача прогнозирования прочностного поведения многослойных композиционных материалов на основе структурного описания. Каждый композит представлен упорядоченным набором однонаправленных слоев с заданным углом ориентации волокон и усредненными физико-механическими параметрами матрицы и волокна. Целью является построение аппроксимирующей модели, способной по конфигурации слоев предсказывать интегральный индекс разрушения, отражающий макроскопическое поведение композита при растяжении. Ключевыми особенностями задачи являются нелинейность

зависимости прочности от структуры, влияние порядка слоев и переменная длина входной последовательности, что исключает применение стандартных моделей фиксированной размерности. Задача формулируется как регрессия на последовательностях с агрегированием локальной информации слоев в интегральное представление.

Раздел 4.2 посвящен формированию признакового описания. Каждый слой кодируется углом ориентации через синус и косинус для учета циклической природы признака $f_{angle}(\theta_i) = [\cos(\theta_i), \sin(\theta_i)] \in \mathbb{R}^2$, а также имеет стандартизированные физико-механические параметры композита $x_i = [th, p, E_1, E_2, \nu_1, G]$.

Финальный вектор признаков слоя формируется конкатенацией кодировки угла и масштабированных параметров, что позволяет сохранить порядок слоев и их индивидуальные свойства.

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

Для композита с L формируется последовательность:

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

Для работы с последовательностями переменной длины применяется паддинг и упаковка (packed sequences), обеспечивающие корректное формирование тензоров для обучения рекуррентной модели.

В **разделе 4.3** описана архитектура модели на основе LSTM. Последовательность векторов признаков подается на два LSTM-слоя, скрытое состояние последнего слоя агрегируется полносвязным слоем для предсказания интегрального индекса разрушения (рисунок 4.2). Такой подход позволяет сохранять порядок слоев, учитывать локальные и глобальные признаки, а также минимизировать риск переобучения. Модель обучается с функцией потерь MSE и оптимизатором Adam.

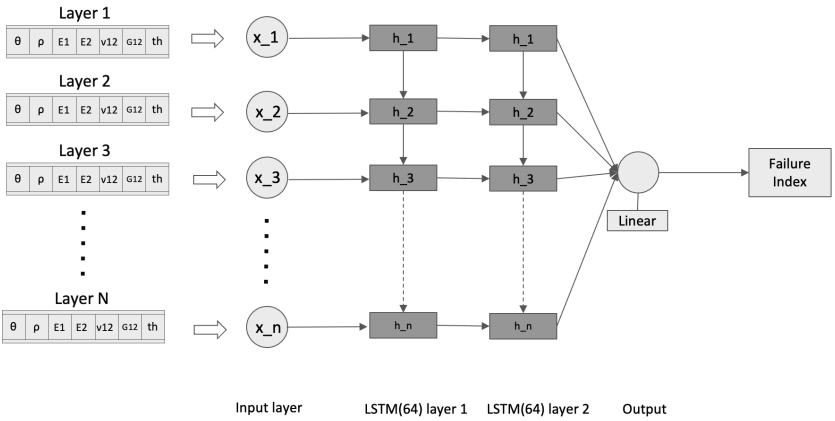


Рисунок 4.2. Архитектура нейросети

Раздел 4.4 посвящен предложенной итеративной двунаправленной рекуррентной нейронной сети (BIRN), которая многократно обновляет скрытые состояния слоев с учетом соседних слоев и собственных предыдущих состояний. Итерационная схема имитирует локальное перераспределение и согласование напряжений, а итоговое глобальное представление формируется через механизм внимания, позволяющий учитывать неодинаковый вклад слоев в прочность. Для каждой итерации $k = 1, \ldots,$ К 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 [36],

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 $h^{(k)} = F\left(h^{(k-1)}, X\right)$, где $h^{(k)} = \left(h_1^{(k)}, \ldots, h_T^{(k)}\right)$.

При фиксированном числе итераций К 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 [37]:

$\alpha_t = \frac{exp\,(w^T h_t)}{\sum_{j=1}^{T} exp\,(w^T h_t)}, t = 1, \ldots, T$, 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 $W \in R^{1\times H}, b \in R$.

Финальное предсказание интегрального индекса осуществляется линейным слоем. Архитектура нейросети представлена на рисунке 4.3.

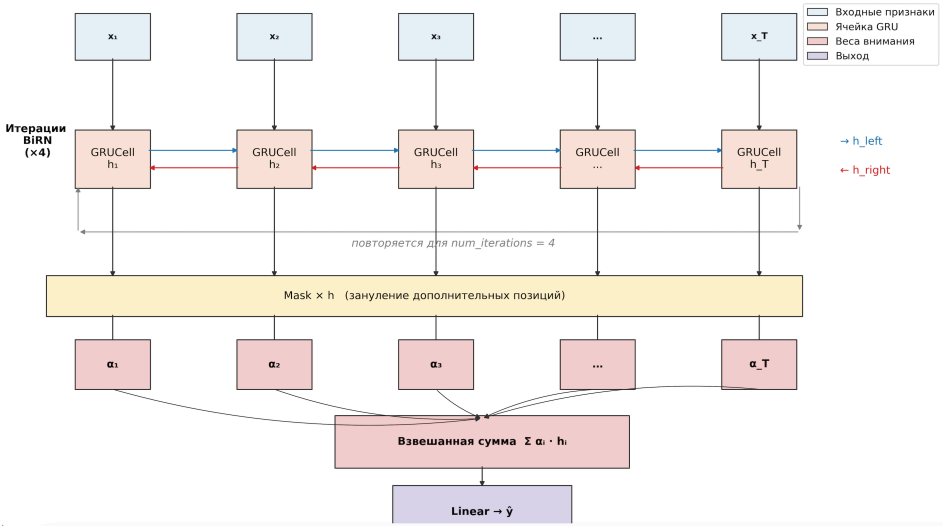


Рисунок 4.3. Итеративная двунаправленная рекуррентная ИНС (BIRN)

В ходе экспериментальной оценки предложенной архитектуры были заданы следующие гиперпараметры модели. Размер скрытого состояния (hidden_dim) установлен равным 256, количество итераций (num_iterations) - 4. Оптимизация весов выполнялась с использованием алгоритма Adam с начальной скоростью обучения (learning rate) 1×10^{-3}. В качестве функции потерь использовалась среднеквадратичная ошибка (MSELoss). Обучение проводилось в течение 100 эпох.

Подбор гиперпараметров выполнен методом Grid Search (перебором по сетке) на валидационной выборке. Перебирались следующие значения: hidden_dim ∈ {64, 128, 256, 512}, num_iterations ∈ {2, 3, 4, 5}, learning rate ∈ $\{1\times10^{-2}, 1\times10^{-3}, 1\times10^{-4}\}$. Выбранная комбинация обеспечила наилучшее значение целевой метрики (R2 / MSE) при допустимых вычислительных затратах.

В **разделе 4.5** представлены результаты обучения и валидации. Сравнение классической LSTM и BIRN показало, что BIRN обеспечивает более высокую точность и стабильность предсказаний (таблица 4.1). Модель демонстрирует быстрое усваивание структуры зависимости выходного показателя от признаков и устойчивое обучение без переобучения (рисунок 4.4).

Используемые метрики оценки качества модели:

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

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

MSE - среднеквадратичная ошибка, средний квадрат отклонения предсказания от истинного значения индекса разрушения; значение MSE ≈ 0.005 соответствует среднеквадратичному отклонению ≈ 0.07 (менее 1% шкалы показателя).

R^2 - коэффициент детерминации, доля дисперсии целевой величины, объясненная моделью ($\bar{y}$ - среднее истинных значений). Значение $R^2 = 0.984$ означает, что модель объясняет 98.4% вариации индекса разрушения на невидимых 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.

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

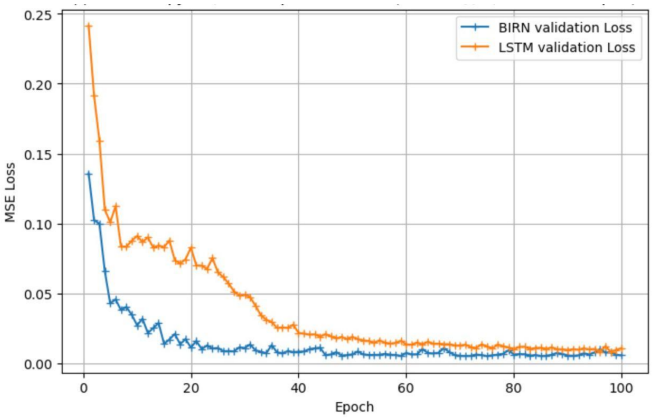


Рисунок 4.4. Динамика функции потерь на валидационной выборке по эпохам

В **разделе 4.6** сформулированы основные выводы: разработана модель BIRN для предсказания интегрального индекса разрушения многослойного композита, учитывающая последовательную природу укладки слоев и их взаимное влияние. Архитектура позволяет работать с переменным числом слоев, а признаки корректно объединяют углы ориентации и физико-механические параметры. Модель показала высокую точность предсказаний и согласие с результатами численного моделирования

методом конечных элементов, что делает ее пригодной для анализа прочностных свойств композиционных материалов.

В **пятой главе** представлена методика совместного применения решения методов машинного обучения и методов оптимизации для решения обратной задачи проектирования 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 **разделе 5.1** рассматривается обратная задача проектирования многослойного композита: требуется определить число слоев, углы их укладки и материалы, минимизирующие прогнозируемый интегральный индекс разрушения y = F(x), с учетом ограничения на модуль упругости E_1. Каждая конфигурация кодируется хромосомой:

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

и оценивается моделью нейронной сети. Задача формулируется как стохастическая условная оптимизация с вероятностной генерацией, скрещиванием и мутацией, поддержкой переменной длины последовательностей для корректной обработки в модели машинного обучения.

В **разделе 5.2** рассматривается генетический алгоритм (ГА) для проектирования многослойных композитов. Каждая особь популяции кодируется хромосомой, включающей углы ориентации слоев, материал и число слоев:

$C = [(\theta_1, m_1), (\theta_2, m_2), \dots, (\theta_L, m_L)],\ L \in [2, 10]$. Механизмы селекции, скрещивания и мутации обеспечивают эффективное исследование дискретно-непрерывного пространства решений с учетом влияния каждого слоя на интегральный индекс разрушения $y = F(C)$.

Обоснование доработки генетического алгоритма. Классический генетический алгоритм неприменим к поставленной задаче напрямую и был доработан: введены переменная длина хромосомы (число слоев 2-10, операторы добавления/удаления слоя), дискретно-непрерывное кодирование (углы с шагом 5°, дискретный выбор материала), учет ограничений методом штрафных функций, оценка приспособленности через суррогатную модель BIRN вместо прямого FEM-расчета (ускорение более чем в 1500 раз) и условие останова при нахождении первого допустимого решения.

Раздел 5.3 описывает ограничения метода: высокая вычислительная сложность при увеличении числа слоев и материалов, стохастический характер результатов, приближенный поиск глобального минимума и снижение эффективности при строгих ограничениях.

В **разделе 5.4** представлены результаты оптимизации. Для расчетного примера прямой метод COMSOL + ГА требует ~166 минут на одну конфигурацию, тогда как гибридный подход с использованием BIRN-

сети и CLT сокращает время до 0.11 минут, обеспечивая ускорение более чем в 1500 раз. Сокращение бюджета вычислений в 4 раза сохраняет качество решений, что подтверждает практическую эффективность метода.

Раздел 5.5 демонстрирует сквозной пример для композита PA6/CF20%. На наноуровне свойства матрицы PA6 определялись методом молекулярной динамики, на мезоуровне выполнялась гомогенизация RVE, а на макроуровне проводилось численное моделирование многослойной конструкции в COMSOL. Для решения обратной задачи с ограничениями по толщине, жесткости и индексу разрушения прямой перебор потребовал бы больше 2.6 млн вариантов (рисунок 5.1), тогда как ГА с BIRN нашел оптимальное решение с тремя слоями и углами [90,90,0] всего за 141 оценку (рисунок 5.2).

На макроуровне найденное решение (материал PA6/CF20%, укладка [90,90,0]) сопоставлялось с экспериментальными прочностными характеристиками однонаправленного PA6/CF20% и результатами конечно-элементного расчета: оценки индекса разрушения и жесткости согласуются с расчетными и справочными значениями, что подтверждает корректность всей масштабной цепочки (нано → мезо → макро).

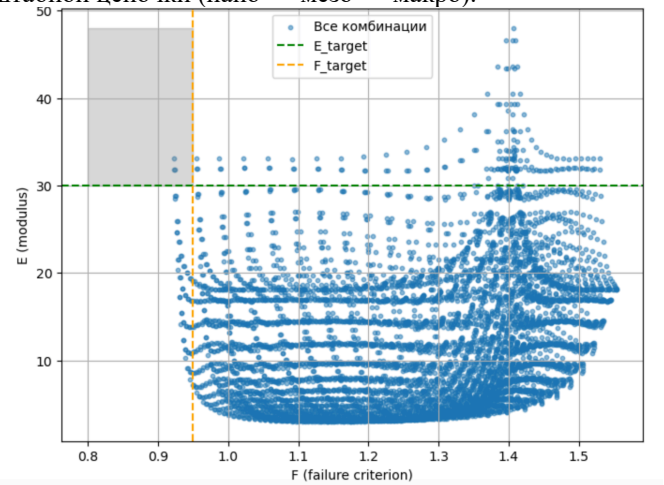


Рисунок 5.1. Полный перебор вариантов

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

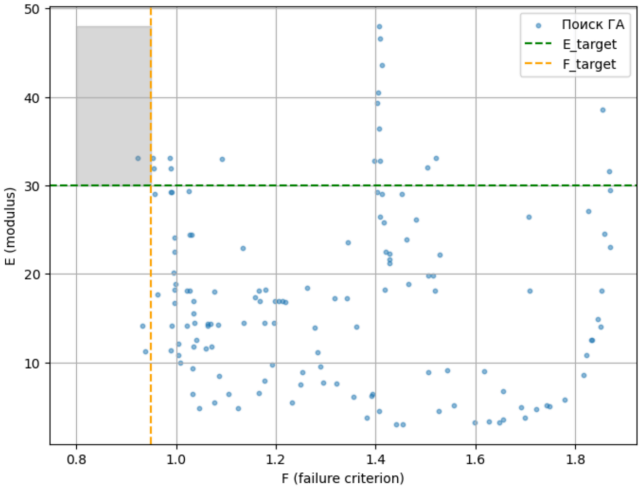


Рисунок 5.2 Пространство поиска решений генетического алгоритма

В **разделе 5.6** сформулированы основные выводы: разработан алгоритм интеграции ГА с BIRN и теорией слоистых структур (CLT), позволяющий находить оптимальные конфигурации слоев и материалов с минимизацией интегрального индекса разрушения и соблюдением механических ограничений. Алгоритм демонстрирует значительное сокращение вычислительных затрат и универсальность для проектирования многослойных полимерных композитов, обеспечивая повышение прочностной надежности и оптимизацию структуры конструкций.

В **заключении** приведены основные результаты 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.

Публикации автора по теме диссертации

В изданиях из списка ВАК РФ и приравненных к ним

1. Мочалова Ю.Д., Абгарян К.К. Итеративная двунаправленная рекуррентная сеть для предсказания разрушения многослойных композитов // International Journal of Open Information Technologies. 2026. Т. 14. № 2. С. 87-91. (ВАК, К1)

2. Абгарян К.К., Загордан Н.Л., Мочалова Ю.Д. Метод компьютерного моделирования упругих характеристик многослойных композиционных материалов // Системы и средства информатики. 2023. Т. 33. № 4. С. 92-101. (ВАК, К1).

3. Загордан Н.Л., Мочалова Ю.Д., Абгарян К.К. Компьютерное моделирование эффективного модуля упругости слоистых композиционных материалов из углеродного волокна // Системы высокой доступности, 2025. Т. 21. (ВАК, К2).

4. Загордан Н.Л., Мочалова Ю.Д., Абгарян К.К. Современные подходы к моделированию упруго-прочностных характеристик полимерных композиционных материалов // Моделирование и анализ данных. 2025. Т. 15. (ВАК, К3).

5. Мочалова Ю.Д., Абгарян К.К. Автоматизация расчета предела прочности композитных материалов с металлической матрицей с

использованием программных средств // International Journal of Open Information Technologies. 2023. Т. 11. № 5. С. 100-105. (ВАК, К1).

Зарегистрированные программы для ЭВМ

6. Абгарян К.К., Мочалова Ю.Д. Программный модуль для расчета упругих характеристик однонаправленных полимерных композитных материалов // Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2025619197. 2025. Заявка № 2025616220 от 21.03.2025.

В сборниках трудов конференций

7. Мочалова Ю.Д. Ускоренный подбор последовательностей укладки многослойных полимерных композиционных материалов с помощью теорий-ориентированных моделей машинного обучения // Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы IV Международной конференции. 2025.

8. Абгарян К.К., Загордан Н.Л., Мочалова Ю.Д. Применение методов машинного обучения для анализа упругих характеристик многослойных композиционных материалов // Математические методы распознавания образов. Тезисы докладов 21-й Всероссийской конференции с международным участием. 2023. С. 224-226.

9. Мочалова Ю.Д., Абгарян К.К. Моделирование усталостных характеристик композитного материала с помощью программного продукта COMSOL Multiphysics // Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы III Международной конференции. 2021. С. 144-146.

10. Мочалова Ю.Д., Абгарян К.К. Моделирование прочностных свойств композитных материалов // 19-я Международная конференция «Авиация и космонавтика». Тезисы 19-ой Международной конференции. 2020. С. 478.

11. Мочалова Ю.Д., Абгарян К.К. Моделирование процессов деградации механических свойств, прочности и разрушения композитных материалов // Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы II международной конференции. 2020. С. 95-97.