

# ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА до кваліфікаційної роботи МАГІСТРА


Освітньо-кваліфікаційний рівень

Спеціальність 132 – Матеріалознавство  
Шифр і назва спеціальності  
Освітньо-професійна програма Відновлення та технічний сервіс автомобілів  
Назва освітньої програми

на тему *Параметрична оптимізація фізико-механічних властивостей композиційних матеріалів*

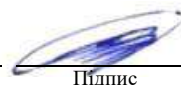
Шифр: КРТАМ 25. 24341.000. ПЗ

Виконав: студент 2 курсу, група МТВАм-24-1  
Курс, група виконавця  Підпис Андрій ШЧУК  
Ім'я, прізвище

Керівник: д.т.н., професор кафедри ТАМ  
Науковий ступінь, посада  Підпис Ілона ДРАЧ  
Ім'я, прізвище

До захисту допускаю:

зав. кафедри ТАМ, д.т.н., професор



Підпис

Олександр ДИХА

Ім'я, прізвище

5 грудня 2025 р.

# ХМЕЛЬНИЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Факультет *інженерії, транспорту та архітектури*

Кафедра *трибології, автомобілів та матеріалознавства*

Рівень вищої освіти *другий магістерський*

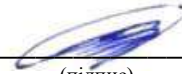
Галузь знань *13 – Механічна інженерія*

Спеціальність *132 – Матеріалознавство*

Освітньо-професійна програма *Відновлення та технічний сервіс автомобілів*

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри ТАМ



(підпис)

д.т.н., професор Олександр ДИХА

Науковий ступінь, ім'я, прізвище

7 жовтня 2025 року

## ЗАВДАННЯ НА ДИПЛОМНУ РОБОТУ

Іщуку Андрію Юрійовичу

(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи: «Параметрична оптимізація фізико-механічних властивостей композиційних матеріалів»

Керівник роботи Драч Ілона Володимирівна д.т.н., професор

(прізвище, ім'я, по батькові науковий ступінь, вчене звання)

Затверджено наказом університету від 25 серпня 2025 р. № 65 (Д28)

2. Строк подання студентом роботи на кафедру: 2 грудня 2025 р.

3. Вихідні дані: дані для розрахунків, межі зміни параметрів, які використовуються для побудови математичних моделей та визначення оптимальних фізико-механічних характеристик композиційного матеріалу, дані натурних експериментів, наведені у джерелах [35–37], які використовуються для перевірки адекватності моделей шляхом порівняння результатів.

4. Зміст пояснювальної записки (перелік задач): *провести аналіз сучасних підходів до моделювання та оптимізації композиційних матеріалів; узагальнити алгоритм їх проектування з урахуванням заданого комплексу властивостей; визначити ключові параметри, що впливають на фізико-механічні характеристики композитів; побудувати математичну модель взаємозв'язку між структурними параметрами та показником деформованості; розробити методіку параметричної оптимізації з використанням чисельних методів і обчислювального експерименту на прикладі епоксиполіуретанового композиту.*

5. Перелік графічного матеріалу: *графічна частина роботи представлена у вигляді презентації на слайдах.*

6. Консультанти розділів роботи:

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		Завдання видав	Завдання прийняв

7. Дата видачі завдання 1 червня 2025 р.

### КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№	Назва етапів (розділів) дипломної роботи	Термін виконання	Примітка
1	<i>Вибір напрямку дослідження та узгодження тематики дипломної роботи з керівником</i>	30.08.2025	<i>виконано</i>
2	<i>Ознайомлення з предметною областю, формулювання мети та задач дослідження, визначення об'єкта та предмета дослідження</i>	10.09.2025	<i>виконано</i>
3	<i>Робота над розділом 1 – Характеристика предметної області та постановка задачі дослідження</i>	20.09.2025	<i>виконано</i>
4	<i>Робота над розділом 2 – Математичне моделювання та методика параметричної оптимізації</i>	30.09.2025	<i>виконано</i>
5	<i>Робота над розділом 3 – Побудова узагальненого алгоритму синтезу композитного матеріалу із заданим комплексом властивостей</i>	30.10.2025	<i>виконано</i>
6	<i>Робота над розділом 4 – Результати досліджень та їх аналіз</i>	15.11.2025	<i>виконано</i>
7	<i>Оформлення пояснювальної записки згідно вимог</i>	25.11.2025	<i>виконано</i>
8	<i>Нормоконтроль пояснювальної записки</i>	2.12.2025	<i>виконано</i>
9	<i>Підписання розділів. Затвердження дати захисту</i>	5.12.2025	<i>виконано</i>

Студент



Підпис

*Андрій ІЩУК*

Ім'я, прізвище

Керівник



Підпис

*Ілона ДРАЧ*

Ім'я, прізвище

## РЕФЕРАТ

Тема дипломної роботи:

*Параметрична оптимізація фізико-механічних властивостей композиційних матеріалів*

Виконавець дипломної роботи:

*студент групи МТВАм-24-1  
Іщук Андрій Юрійович*

Керівник дипломної роботи бакалавра:

*д.т.н., професор кафедри ТАМ  
Драч Ілона Володимирівна*

Дипломна робота бакалавра містить:





Пояснювальна записка				Кількість додатків
Сторінок	Рисунків	Таблиць	Джерел інформації	
84	18	1	37	3

Робота присвячена аналізу задачі проектування композиційного матеріалу з наперед заданими механічними характеристиками. Увагу приділено динамічному модулю пружності як цільовому параметру оптимізації. На прикладі епоксиполіуретанового композиту описано методику підбору концентрацій компонентів із використанням емпіричних даних і аналітичного підходу.

Ключові слова: композиційні матеріали, складні системи, композитні матеріали, методологія проектування, системний підхід, математичне моделювання, оптимізація складу.

## ЗМІСТ

Вступ.....	8
1 Характеристика предметної області та постановка задачі дослідження.....	11
1.1 Загальні відомості про композиційні матеріали .....	11
1.2 Фізико-механічні властивості композиційних матеріалів .....	16
1.3 Підходи до математичного моделювання композиційних матеріалів .....	20
1.4 Методи параметричної оптимізації композиційних матеріалів .....	26
1.5 Мета і задачі дослідження .....	27
2 Математичне моделювання та методика параметричної оптимізації .....	29
2.1 Теоретичні основи математичного моделювання композиційних матеріалів.....	29
2.2 Математичне моделювання в практичних дослідженнях композиційних матеріалів .....	30
2.3 Задача оптимізації. Основні поняття .....	31
2.4 Методи одновимірної оптимізації .....	34
2.4.1 Метод рівномірного пошуку .....	35
2.4.2 Метод дихотомії .....	35
2.4.3 Метод поділу за правилом золотого перерізу .....	36
2.4.4 Метод Фібоначчі .....	38
2.5 Формулювання задачі параметричної оптимізації .....	40
2.6 Вибір параметрів і критеріїв оптимізації .....	41

					КРТАМ 25. 24341.000 ПЗ				
Змн	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат	Параметрична оптимізація фізико-механічних властивостей композиційних матеріалів	Літ.	Арк.	Акрюшіє	
Розроб.	Іщук							5	
Перевір.	Драч								
Реценз.									
Н. Контр.	Бабак								
Затверд.	Диха							ХНУ група МТВАм 24-1	

2.7	Методика проведення параметричної оптимізації .....	41
2.8	Побудова регресійної моделі для оптимізації .....	42
	Висновки до розділу.....	43
3	Побудова узагальненого алгоритму синтезу композитного матеріалу із заданим комплексом властивостей.....	44
3.1	Оптимізація фізико-механічних характеристик композитів .....	45
3.1.1	Кінетична модель набору міцності .....	45
3.1.2	Кінетика зміни модуля пружності .....	46
3.1.3	Кінетика контракції й усадки .....	47
3.1.4	Кінетика наростання внутрішніх напружень .....	48
3.1.5	Процеси тепловиділення .....	49
3.1.6	Хімічна стійкість композицій .....	49
3.1.7	Водопоглинення й водостійкість .....	50
3.1.8	Моделювання процесів седиментації й флокуляції .....	51
3.2	Узагальнений алгоритм проектування композитів з заданим комплексом властивостей .....	52
	Висновки до розділу.....	57
4	Результати досліджень та їх аналіз .....	59
4.1	Одновимірна оптимізація в композиційних системах .....	59
4.1.1	Формулювання задачі .....	59
4.1.2	Розв'язання задачі методом Фібоначчі .....	60
4.2	Перевірка методики параметричної оптимізації полімерного композиційного матеріалу .....	64
4.2.1	Вихідні дані та умови моделювання .....	64
4.2.2	Обчислення ефективних характеристик .....	65
4.2.3	Побудова регресійної моделі .....	65
4.2.4	Оптимізація параметрів .....	67
4.2.5	Порівняння розрахункових і експериментальних даних .....	68

4.3	Задача проєктування композиційного матеріалу з заданими механічними властивостями .....	68
4.3.1	Постановка задачі .....	68
4.3.2	Формалізація задачі .....	72
4.3.3	Аналіз розв'язку оптимізаційної задачі .....	74
	Висновки до розділу.....	76
	Висновки.....	78
	Перелік посилань .....	81
	Додатки.....	85

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		7

## ВСТУП

### Актуальність теми

У сучасному машинобудуванні, авіаційній, автомобільній, будівельній та енергетичній галузях спостерігається тенденція до інтенсивного використання композиційних матеріалів, що поєднують у собі високу питому міцність, корозійну стійкість, зносостійкість та низьку густину. Завдяки можливості цілеспрямованого керування структурою й складом, такі матеріали забезпечують отримання оптимального поєднання фізико-механічних характеристик відповідно до умов експлуатації.

Разом з тим, визначення раціональних параметрів структури композиційного матеріалу є складним багатопараметричним завданням, що потребує використання сучасних методів математичного моделювання, оптимізації та комп'ютерного аналізу. Традиційні експериментальні підходи є надто трудомісткими й економічно затратними, тому виникає необхідність у розробленні ефективних методів параметричної оптимізації.

Застосування методів оптимізації дозволяє визначати найкраще поєднання факторів, що впливають на властивості композиційного матеріалу, таких як об'ємна частка наповнювача, орієнтація волокон, товщина шарів, параметри матриці тощо. Це забезпечує створення матеріалів із наперед заданими експлуатаційними характеристиками та підвищує ефективність виробничих процесів. Саме тому тема дослідження є актуальною та має значну наукову й практичну цінність.

### Мета і завдання дослідження

Метою роботи є розроблення методів параметричної оптимізації фізико-механічних властивостей композиційних матеріалів на основі математичного моделювання їхньої структури та поведінки під дією зовнішніх навантажень.

Для досягнення поставленої мети необхідно вирішити такі завдання:

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		8

1) Провести аналіз сучасних підходів до моделювання та оптимізації композиційних матеріалів. На основі аналізу результатів сучасних досліджень в галузі створення нових матеріалів узагальнити алгоритм проектування композитів з заданим комплексом властивостей.

2) Визначити основні параметри, що впливають на фізико-механічні властивості композиційних систем.

3) Побудувати математичну модель взаємозв'язку між структурними параметрами та показником деформованості матеріалу.

4) Розробити методику параметричної оптимізації із використанням чисельних методів та обчислювального експерименту.

5) На прикладі епоксиполіуретанового композиту застосувати методику підбору концентрацій компонентів із використанням емпіричних даних і аналітичного підходу.

Об'єкт і предмет дослідження

Об'єктом дослідження є композиційні матеріали з полімерною матрицею, армовані частинковими наповнювачами.

Предметом дослідження є процес параметричної оптимізації фізико-механічних властивостей композиційних матеріалів із використанням математичного моделювання та методів обчислювальної оптимізації.

Методи дослідження

У роботі використовуються методи математичного та комп'ютерного моделювання, теорії оптимізації, регресійного аналізу, чисельних методів розв'язання рівнянь.

Наукова новизна та практичне значення

Наукова новизна полягає у розробленні підходу до параметричної оптимізації композиційних матеріалів, який дозволяє встановити кількісні залежності між структурними параметрами та фізико-механічними характеристиками.

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		9

Практичне значення результатів полягає у можливості використання розробленої методики для прогнозування властивостей нових композиційних матеріалів і підвищення ефективності процесів їх проектування.

За результатами дослідження опубліковано статті [1, 2] (Додаток А).

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		10

# 1 ХАРАКТЕРИСТИКА ПРЕДМЕТНОЇ ОБЛАСТІ ТА ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ ДОСЛІДЖЕННЯ

## 1.1 Загальні відомості про композиційні матеріали

Композиційні матеріали (КМ) є штучно створеними системами, що складаються з двох або більше компонентів, які суттєво відрізняються за фізико-хімічними властивостями та розділені чіткою міжфазною межею. Основною метою створення таких матеріалів є досягнення поєднання властивостей, які неможливо реалізувати в традиційних однорідних матеріалах.

Типова структура композиційного матеріалу включає матрицю (зв'язуючу фазу) та наповнювач (армуючу фазу). Матриця виконує роль сполучного середовища, яке передає навантаження на наповнювач і визначає загальну форму виробу. Наповнювач, у свою чергу, забезпечує підвищення міцності, жорсткості, термостійкості та інших експлуатаційних характеристик.

Залежно від типу матриці композиційні матеріали поділяють на полімерні, металеві, керамічні та вуглецеві.

### 1. Полімерні композиційні матеріали (ПКМ).

Структура та типи матриць: полімерні композити є гетерофазними системами, що складаються з полімерної матриці (зв'язувального) та армувальних елементів [3].

Матриці поділяються на два основні типи.

#### 1) Термореактивні матриці:

- епоксидні: твердіння у широкому температурному інтервалі без виділення летких речовин, об'ємна усадка 1-5%, експлуатація до 150°C;
- фенолформальдегідні: твердіння при 160-200°C і тиску 30-40 МПа, стабільні при 200-250°C, але крихкі з великою усадкою;
- кремнійорганічні: працездатність від -200°C до +350°C, стійкі до органічних розчинників, але відносно низькі механічні властивості;

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		11

- поліамідні: затвердіння при 300-350°C, висока теплостійкість та міцність [4].

2) Термопластичні матриці: нейлон-6, поліфеніленсульфід, полісульфон, поліефір термопластичний [4]

Фізико-механічні характеристики [4]:

- щільність: 1,2-1,43 × 10<sup>-3</sup> кг/м<sup>3</sup>;
- модуль пружності: 2,4-11 ГПа (залежно від типу);
- границя міцності при розтягуванні: 30-100 МПа;
- границя міцності при стисканні: 80-280 МПа;
- теплостійкість: 50-320°C (найвища у поліамідних);
- відносне подовження: 0,3-9%;
- об'ємна усадка: 1-25%.

Переваги: низька щільність, висока адгезія, технологічність, корозійна стійкість, гарні діелектричні властивості. Мала в'язкість забезпечує простоту зв'язку з волокнами [4].

Недоліки: обмежена теплостійкість порівняно з іншими типами, велика усадка у фенольних матриць, крихкість, необхідність тиску при формуванні [4].

Застосування: авіація, автомобілебудування, машинобудування, спортивний інвентар, електроніка, криогенна техніка [5].

## 2. Металеві композиційні матеріали (МКМ).

Структура та склад: металеві матриці формуються зі сплавів на основі Al, Mg, Ti, іноді нікелеві сплави. Армуювальні елементи: вуглецеві волокна, карбід кремнію, оксид алюмінію, бор, тонкі металеві дроти [5].

Матриця забезпечує ключові властивості:

- розподіл навантаження на всю поверхню арматури;
- захист наповнювачів від вологи, корозії;
- ефективну теплопередачу;
- високу міцність та жорсткість при екстремальних навантаженнях

[5].

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		12

Переваги [4]:

- вища жорсткість і міцність порівняно з полімерними композитами;
- висока температура експлуатації;
- стійкість до агресивних середовищ та зносу;
- ефективне відведення тепла;
- здатність витримувати високі навантаження.

Недоліки [4]:

- висока щільність (важчі за полімерні);
- складні технологічні процеси виробництва;
- висока вартість;
- можливі корозійні процеси на межі поділу фаз.

Типовим представником є ALMMC (алюмінієвий матрицевий металокерамік) з керамічними частинками  $Al_2O_3$ , SiC [5].

Застосування: авіаційна та автомобільна промисловість, військова техніка, суднобудування, електроніка, будівництво [5].

### 3. Керамічні композиційні матеріали (ККМ).

Структура та класифікація: матрицею служать оксиди, нітриди, карбіди, інтерметаліди [6]. Поділяються на:

- дисперсні та грануло-шарові (ізотропні);
- армовані волокнами (анізотропні).

Особливості виробництва [6]:

- температури спікання компонентів повинні бути близькими (критерій Таммана: 0,7-0,8Тпл для силікатів, 0,8-0,9Тпл для оксидів, 0,4-0,5Тпл для металів);

- для покращення змочування волокна піддають травленню, оксидуванню, віскеризації;

- вводять добавки (наприклад, Ti,  $TiO_2$  для  $Al_2O_3$ ) для зниження температури спікання.

Фізико-механічні властивості [5]:

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		13

- теплостійкість: робочі температури  $>1200^{\circ}\text{C}$
- механізм руйнування армованих ККМ: три стадії - руйнування матриці  $\rightarrow$  руйнування волокон  $\rightarrow$  виділення волокон;

- висока міцність та жорсткість при розтягуванні і стиску;
- термостійкість та корозійна стійкість у агресивних середовищах.

Типовий представник – кермети:

- гетерогенні композиції керамічної фази з металом;
- інфракермети: керамічна фаза покращує властивості металу;
- ультракермети: металева фаза покращує властивості кераміки;
- приклад: WC-Co (карбід вольфраму-кобальт) [6].

Переваги: найвища теплостійкість, хімічна стабільність, стійкість до агресивних середовищ, висока міцність при високих температурах [5].

Недоліки: крихкість, складність отримання монолітних матеріалів, необхідність спеціальних технологічних операцій [6].

Застосування: авіація (космічні апарати), ядерна і кріогенна техніка, електроніка, медичні прилади, харчова промисловість, термозахисні системи (C/SiC) [5].

#### 4. Вуглецеві композиційні матеріали (вуглець-вуглець).

Структура та технологія одержання: композити на основі вуглецевої матриці отримують карбонізацією систем з вуглецевих волокон і фенольних смол при  $1000-1500^{\circ}\text{C}$  в інертному середовищі або вакуумі. Процес супроводжується осіданням та збільшенням пористості, що вимагає подальшого ущільнення [4].

Фізико-механічні властивості:

- щільність: низька (залежить від ступеня ущільнення);
- теплостійкість: експлуатація при екстремально високих температурах;
- високі механічні характеристики з можливістю проектування [7];

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		14

- добрі протиутомні властивості, стійкість до циклічних навантажень [8].

Переваги:

- надвисока теплостійкість та стійкість до теплового удару;
- стійкість до опромінення;
- хімічна інертність;
- висока міцність при низькій щільності;
- висока здатність до проектування характеристик [9].

Недоліки:

- надзвичайно складний та тривалий технологічний процес;
- висока вартість;
- висока пористість матриці без додаткової обробки;
- обмежені методи формування [4].

Застосування: космічна техніка (термозахист), авіація, ядерна промисловість, високотемпературні конструкції, де потрібна комбінація легкості та стійкості до екстремальних температур [5].

Отже найбільш поширеними є полімерні композиційні матеріали (ПКМ) завдяки низькій густині, простоті формування та високому співвідношенню міцності до маси. Металеві композиційні матеріали (МКМ) відзначаються підвищеною теплопровідністю та здатністю працювати при високих температурах.

У наукових дослідженнях [10–13] зазначається, що ефективність композиційного матеріалу визначається не лише вибором компонентів, але й їхнім кількісним співвідношенням, орієнтацією, розподілом і геометричними параметрами, які формують структуру системи. Саме тому процес розроблення таких матеріалів потребує системного підходу, заснованого на методах математичного моделювання.

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		15



до ударних пошкоджень (delamination, fiber breakage). Визначається за допомогою випробувань Ізода чи Шарпі. Вуглепластики мають відносно низьку ударну в'язкість порівняно зі склопластиками.

5. Щільність. Маса одиниці об'єму ( $\text{кг}/\text{м}^3$ ). Це ключовий параметр для легких конструкцій:

- полімерні композити:  $1,2-2,0 \times 10^3 \text{ кг}/\text{м}^3$ ;
- металеві композити:  $2,7-4,5 \times 10^3 \text{ кг}/\text{м}^3$ ;
- керамічні композити:  $2,5-4,0 \times 10^3 \text{ кг}/\text{м}^3$ ;
- вуглецеві композити (вуглець – вуглець):  $1,5-2,0 \times 10^3 \text{ кг}/\text{м}^3$ .

Низька щільність – головна перевага композитів порівняно з металами (сталь  $\sim 7,85 \times 10^3 \text{ кг}/\text{м}^3$ ) [4]

6. Зносостійкість – опір поступовому руйнуванню поверхні при терті. Критично важлива для:

- машинобудування (підшипники, циліндри);
- аерокосмічних деталей (крила, обтічники);
- побутового (спортивного) інвентаря.

Визначається втратою маси чи об'єму при стандартних умовах тертя. Кермети (WC-Co) мають надвисоку зносостійкість.

7. Теплостійкість – збереження фізико-механічних властивостей при високих температурах. Головний критерій класифікації матриць:

- полімерні:  $50-350^\circ\text{C}$  (залишкова міцність падає  $>100^\circ\text{C}$ );
- металеві:  $300-600^\circ\text{C}$  (алюміній), до  $800^\circ\text{C}$  (титан);
- керамічні:  $>1200^\circ\text{C}$  ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ , SiC);
- вуглецеві (вуглець-вуглець):  $>2000^\circ\text{C}$  в інертному середовищі.

Визначається за температурою розм'якшення (полімери) чи температурою плавлення (метали).

8. Демпфуючі властивості (демпінг). Здатність поглинати вібраційну енергію та перетворювати її в тепло. Композити в разі перевершують метали за цим показником:

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		17

- сталеві конструкції: демпінг 0,1-0,2%;
- полімерні композити: 1-5%.

Це знижує акустичний шум, вібрації, підвищує довговічність.

9. Втомна міцність – опір руйнуванню при багаторазових циклічних навантаженнях. Композити мають вищу втомну міцність ніж метали (наприклад, алюміній). Визначається кількістю циклів до руйнування при заданій амплітуді напружень. Вуглепластики зберігають 70-80% міцності після мільйонів циклів.

10. Міжшарова міцність (Interlaminar Shear Strength). Це унікальна властивість багатошарових композитів – опір зсуву між шарами. Це найслабкіша ланка ламінатів, оскільки матриця передає навантаження між шарами. Визначається за допомогою трьохточкового згину коротких зразків. Критично важлива при ударних навантаженнях.

11. Коефіцієнт лінійного термічного розширення (КЛТР) – відносна деформація при зміні температури на 1°C. Для композитів цей показник анізотропний:

- вздовж волокон: близький до нуля (вуглепластики) чи невеликий (склопластики);
- поперек волокон: близький до КЛТР матриці.

Критично важливий для композитів з металами (металокераміки) – неспівпадання КЛТР викликає теплові напруження.

12. Теплопровідність – здатність проводити тепловий потік. Важлива для:

- відведення тепла (електроніка, двигуни);
- теплоізоляції (кріогенна техніка).

Властивість анізотропна: вздовж волокон (особливо вуглецевих) – висока, поперек – низька. Вуглепластики мають вищу теплопровідність вздовж волокон, ніж алюміній.

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		18

13. Стійкість до агресивних середовищ. Збереження властивостей при контакті з хімічними реагентами, водою, розчинниками. Критично важлива для:

- полімерних композитів: поглинання води знижує міцність на 20-30%;
- металевих композитів: корозія на межі поділу фаз;
- керамічні композити: практично інертні.

Визначається зміною маси та міцності після витримки в агресивному середовищі.

14. Радіаційна стійкість – опір руйнуванню під дією іонізуючого випромінювання. Унікальна вимога для:

- космічної техніки (космічне випромінювання);
- ядерної промисловості;
- медичного обладнання.

Вуглецеві та керамічні композити мають найвищу радіаційну стійкість. Полімери деградують при високих дозах.

15. Вологопоглинання (гідроскопічність) – здатність поглинати воду з навколишнього середовища. Критичний недолік полімерних композитів:

- підвищує масу;
- знижує міцність та модуль пружності;
- змінює розміри (набухання);
- погіршує електричні властивості.

Визначається збільшенням маси після витримки при 70°C та 95% вологості.

16. Довговічність та довгоміцність – збереження властивостей протягом тривалого часу при постійних або змінних навантаженнях. Включає:

- довгоміцність – зниження міцності під постійним навантаженням (повзучість);
- старіння – зміна властивостей від часу, температури, вологи.

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		19

Для композитів критично важлива прогнозована довговічність 20-30 років (авіація, будівництво).

Взаємозв'язок властивостей у композитах.

Головний принцип: властивості композиту не є сумою властивостей компонентів. Вони визначаються:

- об'ємною часткою та орієнтацією армуючих елементів;
- якістю межі поділу фаз (адгезією);
- технологією виробництва.

До прикладу, вуглепластик може мати міцність 1500 МПа при розтягуванні, але лише 80 МПа при міжшаровому зсуві – це визначає геометрію та розрахункові схеми конструкцій.

Кожна властивість має бути оптимізована під конкретне застосування – немає "ідеального" композиту для всіх випадків [3, 4].

Наукові праці [14–17] свідчать, що властивості композиційних матеріалів залежать від таких чинників:

- типу та властивостей матриці;
- форми, розмірів і орієнтації армуючої фази;
- об'ємного вмісту наповнювача;
- умов виготовлення (температури, тиску, швидкості затвердіння тощо).

Завдяки широким можливостям варіювання цими параметрами стає можливим цілеспрямоване керування структурою композиційного матеріалу, що дає змогу отримувати необхідні фізико-механічні характеристики. Саме це створює основу для реалізації задачі параметричної оптимізації.

### 1.3 Підходи до математичного моделювання композиційних матеріалів

Математичне моделювання композиційних матеріалів є критично важливим через гетерогенну структуру та анізотропні властивості цих

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		20

матеріалів. Прямий розрахунок напружено-деформованого стану (НДС) волокнистого композиту як системи волокон, армованих матрицею, є неможливим через величезну кількість включень [18, 19]. Тому актуальними є задачі гомогенізації композитного матеріалу – заміни гетерогенного матеріалу еквівалентним однорідним з ефективними характеристиками. «Отримані при цьому ефективні фізико-механічні характеристики використовують при проектуванні та розрахунку конструкцій, виготовлених з композитів» [18, 19].

Класифікація математичних підходів.

1. Мікромеханічні моделі (Micro-mechanical models): враховують взаємодію окремих компонентів (волокон, матриці) на мікрорівні.
2. Макромеханічні моделі (Macro-mechanical models): розглядають композит як однорідний анізотропний матеріал з ефективними властивостями.
3. Мультискейлове моделювання (Multiscale modeling): поєднує мікро- та макрорівні, використовуючи методи асимптотичної гомогенізації [19].

Основні математичні підходи до моделювання.

1). Правила сумішей (Rule of Mixtures, Voigt-Reuss bounds).

Проста лінійна модель для односпрямованих волокнистих композитів:

Модуль пружності вздовж волокон (Voigt model):

$$E_1 = E_f V_f + E_m (1 - V_f).$$

Модуль пружності поперек волокон (Reuss model):

$$\frac{1}{E_2} = \frac{V_f}{E_f} + \frac{1 - V_f}{E_m}.$$

де  $E_f$ ,  $E_m$  – модулі волокна та матриці,  $V_f$  – об'ємна частка волокна.

Обмеження: дають верхню та нижню оцінки, не враховують геометрію та взаємодію компонентів. Придатні лише для початкових розрахунків.

					<i>KPTAM 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		21

2). Метод гомогенізації (Homogenization Method). Зводить задачу для гетерогенного матеріалу до задачі для однорідного з ефективними властивостями, використовуючи асимптотичні розклади та узгодження переміщень [18-20].

Алгоритм (за Гребенюком та співавт., 2020):

1. Визначення представницької комірки (RVE, Representative Volume Element) – циліндрична модель з волокном та матрицею

2. Розв'язання задач:

- деформування матриці та волокна при сумісному розтягу/стиску;
- деформування однорідного трансверсально-ізотропного композиту;

3. Узгодження переміщень: рівність осьових та радіальних переміщень на межі комірки;

4. Отримання ефективних сталих: модуль пружності  $E_1$ , коефіцієнт Пуассона  $\nu_{12}$  [18, 20].

Ключове рівняння для різномодульних композитів: для матеріалів, де механічні характеристики при розтягу ( $E^+$ ,  $\nu^+$ ) та стиску ( $E^-$ ,  $\nu^-$ ) відрізняються, використовується різномодульна теорія пружності [18, 20]:

$$\sigma_i = \frac{E^+}{1-\nu^+} \cdot \varepsilon_i \text{ (при розтягу),}$$

$$\sigma_i = \frac{E^-}{1-\nu^-} \cdot \varepsilon_i \text{ (при стиску).}$$

Результати дослідження Гребенюка: для конкретного композиту (матриця:  $E_m^+ = 60.4$  ГПа,  $E_m^- = 48.32$  ГПа; волокно:  $E_f^+ = 5.55$  ГПа,  $E_f^- = 4.44$  ГПа) ефективний поздовжній модуль при розтягу на 25% більший, ніж при стиску, а коефіцієнт Пуассона – на 40% більший [18, 20].

					<b>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</b>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		22



## 5). Математичне моделювання плит та оболонок.

Для композитних плит середньої товщини розроблені спеціальні теорії згину, що враховують [20]:

- зсувові деформації;
- анізотропію матеріалу;
- нелінійну поведінку;
- температурні ефекти.

Ключові рівняння: системи диференціальних рівнянь 4-го порядку для зміщень з урахуванням коефіцієнтів жорсткості плити.

### 4. Спеціалізовані підходи.

#### 4.1. Моделювання різномодульних композитів.

Для матеріалів, що мають різні характеристики при розтягу та стиску (бетон, деякі композити), використовується різномодульна теорія пружності [18, 20]:

- пряма форма закону Гука: зв'язок напружень з деформаціями;
- зворотня форма: зв'язок деформацій з напруженнями;
- критерій знаку: визначення типу деформування (розтяг/стиск) за знаком головних напружень.

#### 4.2. Моделювання динамічних та теплових процесів.

Для хвильових рівнянь та теплопровідності в шаруватих композитах застосовують асимптотичну гомогенізацію [19]:

$$\rho^\varepsilon \frac{\partial^2 u^\varepsilon}{\partial t^2} = \nabla \cdot (A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon).$$

де  $\rho^\varepsilon$  – густина,  $A^\varepsilon$  – тензор жорсткості з періодичною мікроструктурою.

#### 4.3. Моделювання руйнування та пошкодження:

- критерії руйнування: Tsai-Hill, Tsai-Wu, Hashin-Rotem;
- механіка руйнування (Fracture Mechanics): визначення  $K_{Ic}$ ,  $G_{Ic}$ ;

					<b>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</b>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		24

- моделі прогресуючого руйнування (CDM): врахування зниження жорсткості при накопиченні пошкоджень.

За даними літературного аналізу визначено такі нерозв'язані задачі:

- визначення повного набору ефективних сталей для різномодульних трансверсально-ізотропних композитів (модуль зсуву  $G_{12}$ , коефіцієнти Пуассона  $\nu_{21}$ ,  $\nu_{23}$ ) [18];

- врахування нелінійності, пластичності та в'язкопружності в моделях гомогенізації;

- моделювання межі поділу фаз з неспіввершинами та її вплив на ефективні властивості.

Отже, математичне моделювання композитів – це багаторівневий процес, що включає:

- мікромоделі для визначення ефективних властивостей;
- макромоделі для аналізу конструкцій;
- мультискейлові підходи для точного врахування мікроструктури;
- спеціалізовані теорії для різномодульних, динамічних та термомеханічних задач.

Вибір підходу залежить від рівня деталізації, необхідної точності та обчислювальних ресурсів. Сучасні дослідження фокусуються на асимптотичній гомогенізації [19] та різномодульних матеріалах [18, 20] для забезпечення надійного проектування критичних конструкцій.

Математичне моделювання є ключовим інструментом дослідження композиційних систем. Воно дозволяє встановити залежності між структурними параметрами матеріалу та його фізико-механічними властивостями.

Серед найпоширеніших підходів виділяють:

- аналітичні моделі (моделі Войта, Рейсса, Хашина–Штрикмана), що описують ефективні модулі пружності на основі усереднення властивостей компонентів;

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		25

- емпіричні моделі, побудовані на основі експериментальних даних із використанням регресійного або кореляційного аналізу;
- чисельні методи, зокрема метод скінченних елементів (МСЕ), що дозволяють моделювати поведінку матеріалу під дією різних типів навантаження.

Розвиток комп'ютерних технологій сприяв активному впровадженню обчислювального експерименту, який забезпечує можливість багаторазового варіювання параметрів без проведення реальних фізичних випробувань. Це значно скорочує часові та матеріальні витрати на дослідження композиційних систем.

#### 1.4 Методи параметричної оптимізації композиційних матеріалів

Параметрична оптимізація передбачає визначення таких значень змінних параметрів, за яких досягаються найкращі показники фізико-механічних властивостей композиційного матеріалу.

У сучасній науковій літературі [21–24] виділяють кілька основних методів параметричної оптимізації:

- методи математичного програмування (градієнтні, стохастичні, еволюційні алгоритми);
- методи планування експерименту (центральні-композиційні плани, ротатабельні схеми, факторний аналіз);
- методи багатокритеріальної оптимізації, що дозволяють одночасно враховувати кілька цільових функцій (наприклад, мінімізацію маси при максимальній міцності).

Ефективність оптимізаційного процесу значною мірою залежить від адекватності математичної моделі та від правильного вибору критерію оптимальності, який повинен відображати фізичну сутність завдання.

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		26

## 1.5 Мета і задачі дослідження

В сучасній техніці використовується понад 20 тисяч конструкційних і будівельних матеріалів, і їх асортимент з кожним роком зростає за рахунок створення надміцних, жаростійких, хімічно стійких матеріалів та їх сплавів. Але якщо раніше нові матеріали створювалися в результаті простого відбору природних речовин із необхідними властивостями, то сьогодні на основі знання залежності фізичних і хімічних властивостей речовини від її будови (структури) цілеспрямовано створюють матеріали із заздалегідь заданими механічними, тепловими, електромагнітними, оптичними та іншими властивостями [25].

Технічний прогрес породжує необхідність розробки нових композитів із заздалегідь заданими властивостями, розробки нових технологій їх виробництва та методів розрахунку. Сучасна наука про такі матеріали є надзвичайно розгалуженою та далекою від свого завершення [25, 26].

Експериментальне визначення властивостей композитних матеріалів потребує великого обсягу вартісних досліджень. Виникає доцільність автономних досліджень сепаратних підсистем в ієрархічній структурі та побудови їх теоретичних моделей під час конструювання композитів [27].

Такий підхід вимагає узагальнення наукових основ математичного моделювання та багатокритеріального синтезу композитних матеріалів, а також розробки математичного апарату аналізу та синтезу КМ, програмних комплексів для їх реалізації.

Аналіз літературних джерел показав, що параметрична оптимізація є потужним інструментом керування фізико-механічними властивостями композиційних матеріалів. Сучасні методи моделювання дозволяють встановити кількісні залежності між структурними параметрами та експлуатаційними характеристиками, а також визначити оптимальні поєднання факторів для досягнення заданих властивостей.

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		27

Разом з тим, залишається актуальним питання розроблення універсальних математичних моделей, придатних для широкого класу композиційних матеріалів, а також підвищення точності та швидкодії оптимізаційних алгоритмів. Ці аспекти зумовлюють необхідність подальших досліджень у даному напрямі.

Метою цієї роботи є розроблення методів параметричної оптимізації фізико-механічних властивостей композиційних матеріалів на основі математичного моделювання їхньої структури та поведінки під дією зовнішніх навантажень.

Для досягнення поставленої мети необхідно вирішити такі завдання:

1) Провести аналіз сучасних підходів до моделювання та оптимізації композиційних матеріалів. На основі аналізу результатів сучасних досліджень в галузі створення нових матеріалів узагальнити алгоритм проектування композитів з заданим комплексом властивостей.

2) Визначити основні параметри, що впливають на фізико-механічні властивості композиційних систем.

3) Побудувати математичну модель взаємозв'язку між структурними параметрами та показником деформованості матеріалу.

4) Розробити методику параметричної оптимізації із використанням чисельних методів та обчислювального експерименту.

5) На прикладі епоксиполіуретанового композиту застосувати методику підбору концентрацій компонентів із використанням емпіричних даних і аналітичного підходу.

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		28

## 2 МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА МЕТОДИКА ПАРАМЕТРИЧНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ

### 2.1 Теоретичні основи математичного моделювання композиційних матеріалів

Математичне моделювання композиційних матеріалів ґрунтується на встановленні кількісних залежностей між структурними параметрами системи та її фізико-механічними властивостями. Основна мета такого моделювання полягає у прогнозуванні ефективних характеристик матеріалу, виходячи з відомих властивостей компонентів і умов їхнього взаємодіяння.

Нехай композиційний матеріал складається з матриці з модулем пружності  $E_m$  та об'ємною часткою  $V_m$ , і наповнювача з модулем пружності  $E_f$  та часткою  $V_f$ . Для опису ефективного модуля пружності композиції  $E_c$  використовують моделі Войта та Рейсса:

- модель Войта (паралельне навантаження):

$$E_c = E_f V_f + E_m V_m.$$

- модель Рейсса (послідовне навантаження):

$$\frac{1}{E_c} = \frac{V_f}{E_f} + \frac{V_m}{E_m}.$$

Для більш точного врахування взаємодії фаз застосовуються узагальнені моделі Хашина–Штрикмана або моделі на основі методу ефективного середовища. Такі підходи дають змогу описувати не лише пружні властивості, але й міцність, коефіцієнт теплопровідності, густину, модуль зсуву тощо.

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		29

## 2.2 Математичне моделювання в практичних дослідженнях композиційних матеріалів

У практичних дослідженнях композиційних матеріалів (КМ) робляться спроби побудувати модель, ізоморфну реальній задачі лише щодо обмеженого кількості специфічних властивостей, тобто має обмежений ізоморфізм.

Створення математичних моделей КМ проводять для таких задач: керування об'єктом; прогноз виходу об'єкта; виявлення механізму явищ, які відбуваються в об'єкті.

Задачі керування об'єктом: одержання строго заданих структур КМ: наноструктур, нескінченних кластерів, фракталів, сітчастих або лінійних полімерів, об'ємних або каркасних ґраток, певного виду зв'язків або поєднань хімічних елементів тощо.

Задачі виходу об'єкта: одержання заданих кількісних та якісних експлуатаційних характеристик КМ певного призначення: радіаційно-захисних, кислотостійких, жарозривких, біостійких тощо.

Задачі виявлення механізму явищ: виявлення механізму структуроутворення КМ: полімеризація, поліконденсація, топохімічний, кризь розчинний, змішаний тощо.

Аналіз сучасного стану теорії та практики побудови математичних моделей (ММ) та їх використання при керуванні, прогнозі та вивченні різних явищ природи і техніки дозволяє вибрати для моделювання композиційних матеріалів як одні з основних – методи побудови нелінійних моделей та розширення області використання нелінійних залежностей, що дозволяють розширити можливості щодо створення та детальних досліджень різних КМ.

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		30

### 2.3 Задача оптимізації. Основні поняття

Терміном "оптимізація" в літературі визначають процес або послідовність дій, що дозволяють отримати уточнений розв'язок. Метою оптимізації є пошук найкращого, або "оптимального", розв'язку. Як правило, доводиться задовольнитися покращенням відомих розв'язків. Найчастіше мова не йде про знаходження оптимального розв'язку або навіть доведення знайденого до оптимального. Тому під оптимізацією розуміють процес наближення до оптимального розв'язку, який, можливо, і не буде одержаний.

Цільова функція – це вираз, значення якого інженер прагне зробити максимальним або мінімальним. Вона дозволяє кількісно порівняти два альтернативні розв'язки.

З математичної точки зору цільова функція описує деяку  $n-1$  – вимірну поверхню. Її значення визначається проектними параметрами:

$$F = F(x_1, x_2, \dots, x_n). \quad (2.1)$$

Проектні параметри  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$  – невідомі величини, значення яких обчислюються в процесі оптимізації. Проектними параметрами можуть бути будь-які основні або похідні величини, що кількісно описують систему (вага, час, температура, довжина тощо). Число проектних параметрів характеризує рівень складності задачі.

В загальному випадку функція (2.1) може мати декілька екстремумів (максимумів або мінімумів) (рис. 2.1, а). Якщо функція (2.1) в заданому проектному діапазоні має один максимум (мінімум), то її називають унімодальною (рис. 2.1, б).

Прикладами цільової функції, що часто зустрічаються в інженерній практиці, є ціна, вага, міцність, габаритні розміри тощо. Якщо існує тільки один проектний параметр, то цільову функцію можна зобразити кривою на площині (рис. 2.1, а, б).

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		31

Якщо проектних параметрів два, то цільова функція має вигляд деякої поверхні в тривимірному просторі (рис. 2.2). При трьох і більше проектних параметрах поверхня не піддається зображенню звичайними засобами.

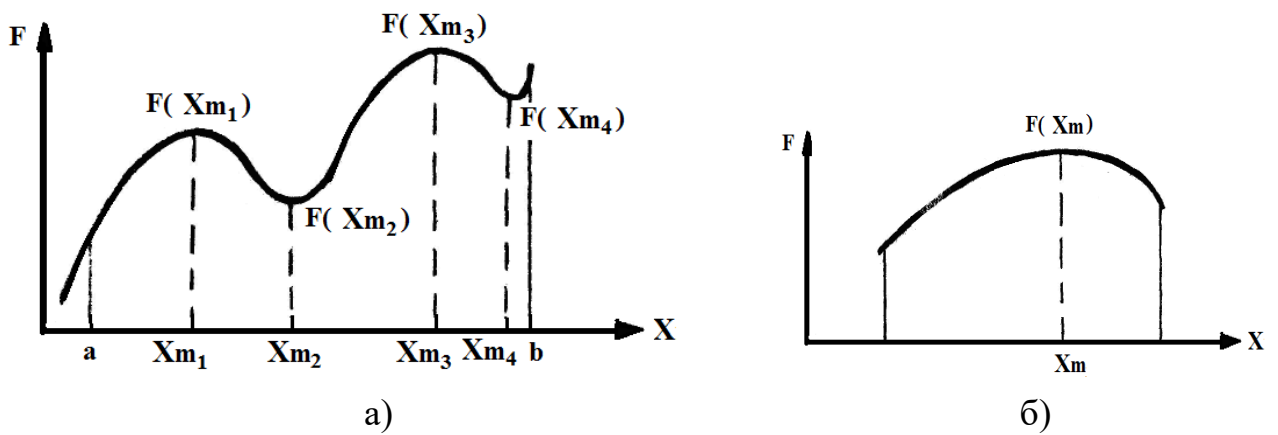


Рисунок 2.1 – Цільова функція з одним проектним параметром, зображена кривою на площині

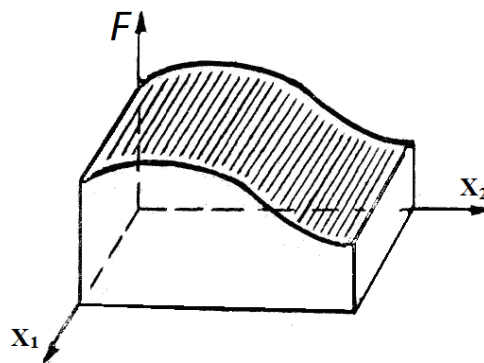


Рисунок 1.2 – Цільова функція з 2-ма проектними параметрами у вигляді деякої поверхні в тривимірному просторі

Деякі задачі оптимізації потребують введення додаткових цільових функцій. Інколи одна з них може бути несумісною з іншою. Прикладом служить проектування композита, де водночас: треба забезпечити високу міцність, мінімальну вагу та мінімальну ціну. В таких випадках інженер повинен вибрати систему пріоритетів і встановити в відповідність кожній цільовій функції деякий безрозмірний множник.

Обмеження можуть бути у вигляді рівностей та нерівностей.

Обмеження-рівності – це залежність між проектними параметрами, що повинні враховуватися в процесі розв’язання. Вони відображають закони природи, економіки, можливі матеріали тощо. Число обмежень може бути будь-яким:

$$\begin{aligned} B_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0, \\ B_2(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0, \\ &\dots \\ B_k(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0. \end{aligned} \tag{2.2}$$

Якщо яке-небудь співвідношення (2.2) можна розв’язати відносно одного з проектних параметрів, то це дозволяє виключити цей параметр з процесу оптимізації і таким чином спростити задачу.

Обмеження-нерівності визначають область існування оптимуму:

$$\begin{aligned} a_1 &\leq \Omega_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq b_1, \\ a_2 &\leq \Omega_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq b_2, \\ &\dots \\ a_k &\leq \Omega_k(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq b_k. \end{aligned}$$

Обмеження інколи роблять неможливими досягнення оптимального значення функції там, де її поверхня має нульовий градієнт. Нерідко розв’язок відповідає значенню на межі області проектування.

У задачах оптимізації або управління зустрічаються випадки, коли є повна інформація про всі умови і коли в початковій інформації про задачу є елемент невизначеності або деякі параметри носять випадковий характер з відомими імовірнісними характеристиками. В першому випадку задачі оптимізації називаються детермінованими, а в другому – стохастичними.

Наприклад, екстремальна задача, яка моделює роботу автоматичного пристрою з урахуванням випадкових перешкод, є стохастичною задачею керування.

Задачі оптимізації можна також поділити за принципом досягнення екстремуму або в ізольованих точках або на лініях, поверхнях. Клас задач, в яких екстремум досягається в ізольованій точці, досліджується методами оптимізації, які називаються методами математичного програмування. Клас задач, в яких екстремум досягається на лініях, поверхнях, вивчається методами оптимізації, що є методами варіаційного числення. Таким чином, задачі оптимізації поділяються на задачі математичного програмування, варіаційного числення та задачі оптимального керування.

#### 2.4 Методи одновимірної оптимізації

Задачу одновимірної оптимізації можна сформулювати так: знайти значення проектного параметра  $x$  ( $a \leq x \leq b$ ), при якому функція  $F(x)$  має оптимум.

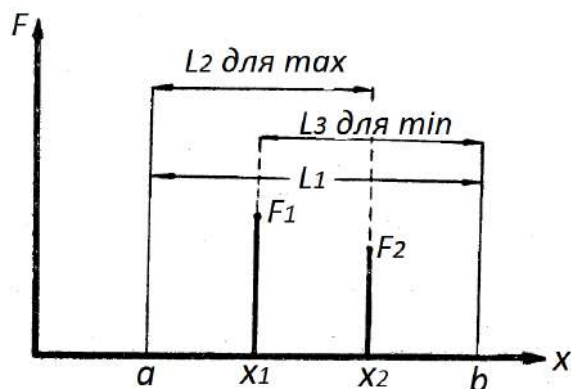


Рисунок 2.3 – Інтервал невизначеності на початку процесу оптимізації

Інтервал значень  $x$ , в якому знаходиться оптимум, називається інтервалом невизначеності. На початку процесу оптимізації цей інтервал має довжину  $b-a$  (рис. 2.3). Обчисливши значення цільової функції  $F_1$  та  $F_2$  при

значеннях  $x_1$  та  $x_2$  на вказаному інтервалі, звужимо інтервал невизначеності (рис. 2.3). Звужуючи інтервал, ми таким чином локалізуємо оптимальне значення функції  $F(x_m)$ .

Розглянемо декілька методів звуження інтервалу для визначення максимуму уномодальної функції однієї змінної.

#### 2.4.1 Метод рівномірного пошуку

Цей метод базується на тому, що змінній  $x=a$  на кожній ітерації привласнюється нове значення  $x=x+\Delta x$  (з кроком  $\Delta x=const$ ) та обчислюється значення  $F(x)$ . Якщо  $F(x_{n+1}) > F(x_n)$ , змінній  $x$  надається новий приріст, а інтервал зменшується до розмірів  $b-(x+\Delta x)$ . Як тільки  $F(x_{n+1})$  стане менше за  $F(x_n)$ , пошук зупиняється. При малому заданому кроці  $\Delta x$  цей метод неефективний за витратами машинного часу.

#### 2.4.2 Метод дихотомії

Метод дихотомії (метод половинного поділу інтервалу  $[a, b]$ ) реалізується за таким алгоритмом.

1) Перевіряємо умову  $|b - a| \leq 2\varepsilon$ , де  $\varepsilon$  – задана похибка обчислень. Якщо ця умова виконується, переходимо до п.5, якщо не виконується – до п.2.

2) Ділимо інтервал пошуку  $[a, b]$  навпіл точкою  $x_c=(a+b)/2$  і знаходимо дві абсциси симетрично точки поділу:  $x_1=(a+x_c)/2$  та  $x_2=(x_c+b)/2$ .

3) Для аргументів  $x_1$  та  $x_2$  обчислюємо значення функції  $F(x_1)$  та  $F(x_2)$ .

4) Перевіряємо умову  $F(x_1) > F(x_2)$ . Якщо умова виконується, то  $b=x_2$ , інакше  $a=x_1$ .

Переходимо до п.1.

5) Обчислюємо значення  $x_m=(a+b)/2$  та  $F(x_m)$ .

Кінець обчислень.

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		35

### 2.4.3 Метод поділу за правилом золотого перерізу

Метод золотого перерізу базується на поділі інтервалу  $[a, b]$  за правилом золотого перерізу. Цей метод дозволяє звужувати інтервал невизначеності  $[a, b]$ , кожен раз обчислюючи лише одне значення  $F(x)$ , а не два, як в методі дихотомії.

Інтервал невизначеності ділиться на дві нерівні частини так, щоб відношення довжини більшого відрізка до довжини усього інтервалу дорівнювало відношенню довжини меншого відрізка до довжини більшого. На рис. 2.4 показано інтервал  $[a, b]$  довжиною  $L$ , який складається з відрізків  $L_1$  та  $L_2$  таких, що:  $L_1/L = L_2/L_1$ .

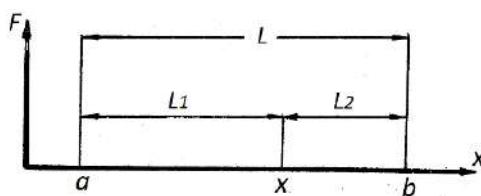


Рисунок 2.4 – Інтервал невизначеності, який ділиться на дві нерівні частини

Коефіцієнт поділу відрізка визначається за формулою:

$$k = \frac{\sqrt{5}-1}{2} = 0,618.$$

Алгоритм оптимізації методом золотого перерізу.

- 1) Знаходимо абсцису  $x_1 = a + (b - a)(1 - k)$  та обчислюємо  $F(x_1)$
- 2) Знаходимо абсцису  $x_2 = a + (b - a)k$  та обчислюємо  $F(x_2)$ .
- 3) Перевіряємо виконання умови  $|x_1 - x_2| \leq \varepsilon$ , де  $\varepsilon$  – задана похибка обчислень. Якщо ця умова виконується, обчислюємо  $x_m = (x_1 + x_2)/2$  та  $F(x_m)$ , після чого зупиняємо процес пошуку. Якщо вказана умова не виконується,

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		36

переходимо до п.4.

4) Перевіримо умову  $F(x_1) \leq F(x_2)$ . Якщо вона виконується, прирівнюємо  $a=x_1$ ,  $x_1=x_2$  та  $F(x_1)=F(x_2)$ , після чого переходимо до п.2 та п.3.

5) Якщо  $F(x_1) \geq F(x_2)$ , то  $b=x_2$ ,  $x_2=x_1$ ,  $F(x_2)=F(x_1)$ , після чого переходимо до п.1 та п.3.

II. інтервал невизначеності  $[a, b]$  має довжину  $L_2$ . Знаходимо абсцису  $x_2$  за формулою  $x_2 = a + (b - a)k$  та обчислюємо  $F(x_2)$ . За рис. 2.5  $F(x_1) > F(x_2)$ , то  $b=x_2$ ,  $x_2=x_1$ ,  $F(x_2)=F(x_1)$ .

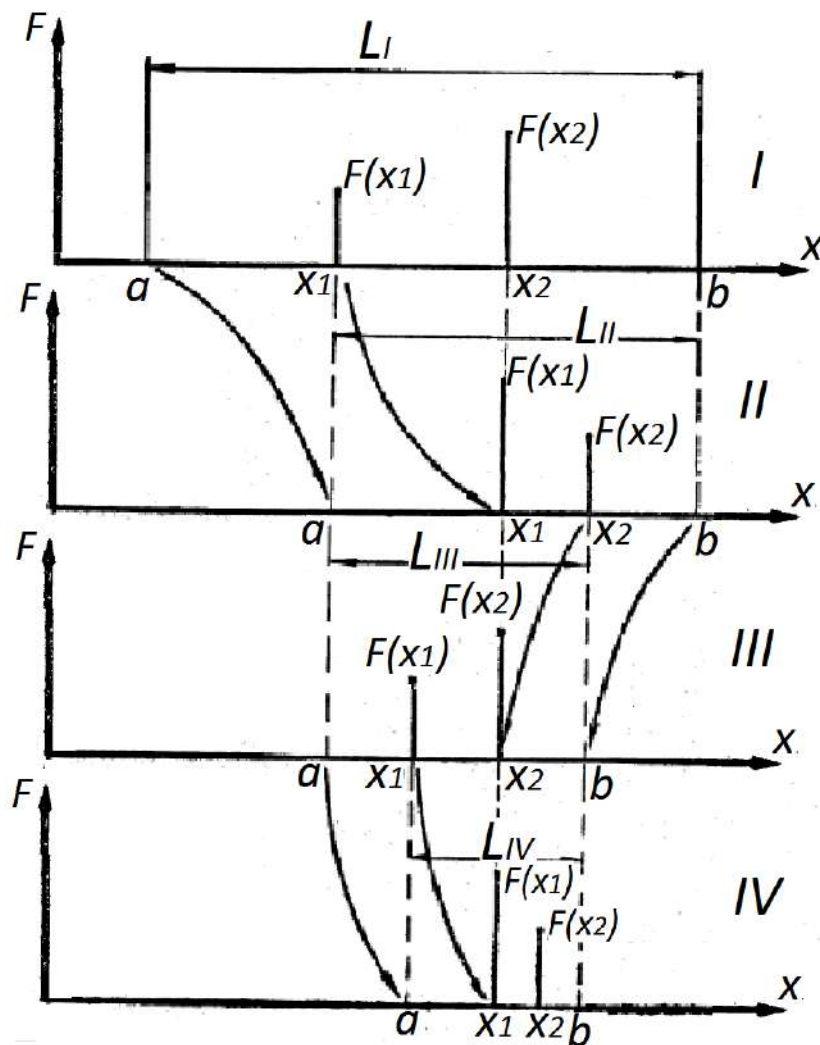


Рисунок 2.5 – Геометрична інтерпретація оптимізації методом золотого перерізу

III. Інтервал невизначеності  $[a, b]$  має довжину  $L_3$ . Абсциса  $x_1$  знаходиться за формулою  $x_1 = a + (b - a)(1 - k)$ . Для третього кроку ітерації (рис. 1.4)  $F(x_1) \leq F(x_2)$ , тому  $a = x_1$ ,  $x_1 = x_2$ ,  $F(x_1) = F(x_2)$ .

IV. Абсциса  $x_2$  знаходиться за формулою  $x_2 = a + (b - a)k$ . Інтервал невизначеності  $[a, b]$  має довжину  $L_4$ .  $F(x_1) > F(x_2)$ , то  $b = x_2$ ,  $x_2 = x_1$ ,  $F(x_2) = F(x_1)$ .

Повторюють кроки доти, поки не буде виконано умову  $|x_1 - x_2| \leq \varepsilon$ , де  $\varepsilon$  – задана похибка обчислень.

Хоч метод золотого перерізу і є ефективним, зрозуміло, що він не є оптимальним при заданій кількості обчислень цільової функції. Цей недолік можна усунути використовуючи метод Фібоначчі.

#### 2.4.4 Метод Фібоначчі

У цьому методі використовується числова послідовність 1, 1, 2, 3, 5, 8, ... (ряд Фібоначчі), в якій кожен наступний член дорівнює сумі двох попередніх; таким чином, послідовність  $U_1, U_2, U_3, \dots$  задається початковими значеннями  $U_1 = U_2 = 1$  та рекурентним співвідношенням  $U_{n+1} = U_{n-1} + U_n$ . (Перші 14 чисел цієї послідовності були вперше в 1228 році наведені в рукописах Леонардо Пізанського (Фібоначчі)).

Запишемо перші 10 чисел ряду Фібоначчі:

n	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$U_n$	1	1	2	3	5	8	13	21	34	55	89

В методі Фібоначчі, на відміну від вище розглянутих методів, оптимум одержують за скінчене (задане проектувальником) число обчислень цільової функції. Цей факт в деяких випадках є вирішальним.

Рекурентні формули методу Фібоначчі співпадають з формулами методу золотого перерізу. Відрізняються тільки правилами визначення коефіцієнта

поділу  $k$ . Формули для визначення абсцис  $x_1$  та  $x_2$  на інтервалі  $[a, b]$  мають вигляд:

$$x_1^k = a_k + \frac{U_{n-1-k}}{U_{n+1-k}} (b_k - a_k); \quad (2.3)$$

$$x_2^k = a_k + \frac{U_{n-k}}{U_{n+1-k}} (b_k - a_k), \quad (2.4)$$

де  $k$  – номер ітерації.

Процес визначення оптимуму цільової функції в методі Фібоначчі поділяють на три етапи.

1. Визначення числа обчислень цільової функції  $N$  (задається проектувальником) та знаходження абсцис  $x_1$  та  $x_2$  за формулами (2.3), (2.4), де  $n=N$ ,  $k=0$ . Обчисливши значення цільової функції  $F(x_1)$  та  $F(x_2)$ , порівнюємо їх між собою. Якщо  $F(x_1) \leq F(x_2)$ , то значення змінних змінюються так:  $a_k=x_1$ ,  $x_1=x_2$ ,  $F(x_1) = F(x_2)$ , а якщо  $F(x_1) \geq F(x_2)$ , то  $b_k=x_2$ ,  $x_2=x_1$ ,  $F(x_2) = F(x_1)$ .

2. Другий етап пошуку включає в себе  $(N-3)$  ітераційних кроків  $k=1, 2, \dots, N-3$ . На кожному кроці обчислюється тільки одна абсциса  $x_1^{k+1}$  або  $x_2^{k+1}$  за формулами (2.3) або (2.4). Прирівнявши значення цільової функції в точках  $x_1^{k+1}$  та  $x_2^{k+1}$ , визначають новий інтервал  $[a_k, b_k]$  та знаходять відсутню абсцису так, як було описано вище. Після проведення  $N-3$  обчислень цільової функції, переходимо до третього етапу.

3. Визначають, з якої сторони від точки  $x_1^{N-3}$  ( $x_2^{N-3}$ ) в інтервалі  $[a_{N-2}, b_{N-2}]$  лежить оптимум  $x_m$ . Для цього останнє обчислення цільової функції проводиться поблизу від точки попереднього обчислення  $x_i^{N-3} - (-1)^i \varepsilon$ , де  $i=1$  або  $2$ , а  $\varepsilon$  визначається за формулою:

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		39

$$\varepsilon = \frac{b_{N-2} - a_{N-2}}{5} \quad (2.5)$$

Це дозволяє визначити інтервал  $[a_{N-1}, b_{N-1}]$ . Цим закінчується третій етап.

У розділі 4 цієї роботи розглянуто на прикладі реалізацію метода Фібоначчі до задачі керування об'єктом.

## 2.5 Формулювання задачі параметричної оптимізації

Задача параметричної оптимізації полягає у визначенні оптимальних значень змінних параметрів  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , які характеризують структуру або технологічні умови виготовлення композиційного матеріалу, з метою максимізації або мінімізації цільової функції  $F(x)$ , що описує певну фізико-механічну властивість.

У загальному вигляді задача записується так:

Знайти

$$X^* = (x_1, x_2, \dots, x_n), \text{ для яких } F(X) \rightarrow \text{extremum}$$

при обмеженнях:

$$g_i(X) \leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

$$x_j^{\min} \leq x_j \leq x_j^{\max}, \quad j = 1, 2, \dots, n$$

де  $g_i(X)$  – функції обмежень, які можуть описувати технологічні, структурні або експлуатаційні вимоги до матеріалу.

Прикладом цільової функції може бути максимізація питомої міцності  $\sigma/\rho$ , мінімізація маси виробу при заданій жорсткості, або оптимізація співвідношення «міцність – вартість».

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		40

## 2.6 Вибір параметрів і критеріїв оптимізації

Параметрами оптимізації можуть виступати:

- об'ємна частка наповнювача  $V_f$ ;
- орієнтація армуючих волокон  $\theta$ ;
- товщина окремих шарів у багатошаровій структурі;
- параметри технологічного процесу (температура, тиск, час затвердіння);
- властивості зв'язуючої фази (модуль пружності, адгезія).

Як критерій оптимізації обирається цільова функція, що відображає бажану властивість або сукупність властивостей матеріалу. Для багатокритеріальних задач застосовують узагальнену функцію:

$$F(X) = \sum_{i=1}^k w_i \cdot f_i(X)$$

де  $f_i(X)$  – окремі критерії (наприклад, міцність, маса, жорсткість), а  $w_i$  – вагові коефіцієнти, що визначають їхню відносну важливість.

## 2.7 Методика проведення параметричної оптимізації

Методика параметричної оптимізації композиційних матеріалів включає такі етапи:

1. Формулювання мети дослідження – визначення оптимальних характеристик матеріалу (наприклад, максимальна міцність при мінімальній густині).
2. Вибір системи параметрів – встановлення факторів, що впливають на фізико-механічні властивості.

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		41

3. Побудова математичної моделі – опис залежностей між параметрами й цільовими показниками.

4. Проведення обчислювального експерименту – варіювання параметрів у межах допустимих значень та обчислення результатів.

5. Аналіз результатів та пошук оптимуму – використання методів оптимізації (градієнтних, генетичних, стохастичних алгоритмів).

6. Перевірка адекватності моделі – порівняння розрахункових результатів з експериментальними даними.

Для реалізації чисельної оптимізації можуть застосовуватися такі методи:

- метод найшвидшого спуску;
- метод Ньютона;
- генетичний алгоритм;
- метод рою частинок;
- симплекс-метод.

## 2.8 Побудова регресійної моделі для оптимізації

У випадках, коли кількість параметрів невелика, ефективним є використання регресійного аналізу. Залежність між вихідним параметром  $Y$  (наприклад, міцність матеріалу) та вхідними факторами  $x_1, x_2, \dots, x_n$  може бути описана рівнянням виду:

$$Y = b_0 + \sum_{i=1}^n b_i x_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^n b_{ii} x_i^2$$

Отримані коефіцієнти  $b_i$  визначаються за допомогою методу найменших квадратів на основі експериментальних або обчислювальних даних. Після

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		42

побудови моделі проводиться аналіз значущості факторів і визначення оптимальних параметрів за допомогою часткових похідних або чисельних методів.

#### Висновки до розділу

У цьому розділі розглянуто теоретичні основи математичного моделювання та параметричної оптимізації композиційних матеріалів. Визначено основні етапи побудови моделей, критерії оптимізації та методи пошуку оптимальних параметрів.

Застосування розробленої методики дає змогу прогнозувати фізико-механічні властивості матеріалів із заданими характеристиками та мінімізувати кількість натурних експериментів.

Отримані підходи можуть бути використані для розроблення алгоритмів автоматизованого проєктування композиційних систем нового покоління.

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		43

### 3 ПОБУДОВА УЗАГАЛЬНЕНОГО АЛГОРИТМУ СИНТЕЗУ КОМПОЗИТНОГО МАТЕРІАЛУ ІЗ ЗАДАНИМ КОМПЛЕКСОМ ВЛАСТИВОСТЕЙ

Композит як багатоцільова, складна система оцінюється декількома показниками якості. Виникає задача багатокритеріальної оптимізації при керуванні структурою та властивостями матеріалу за рахунок зміни відповідних сигнатурних і технологічних параметрів, а також пов'язані з нею проблеми скаляризації та розробки функціоналів якості. З цього погляду стає очевидним підхід до синтезу матеріалів як задачі керування. Введення ієрархії критеріїв та виділення комплексів розв'язуваних часткових задач є основою розробки ієрархічної структури матеріалу (системи) з оцінками її елементів. Для розробки методів оптимізації структури та властивостей композитних матеріалів розв'язується задача ідентифікації кінетичних процесів у гомогенних та гетерогенних системах. Серед методів ідентифікації найбільш адекватними є методи ідентифікації динамічних процесів за даними нормального функціонування, оскільки для розробки матеріалів, зазвичай, наявні експериментальні залежності зміни контрольованих властивостей від часу. Зазвичай кінетичні процеси для досліджуваних матеріалів розглядаються як результат розв'язання звичайних диференціальних рівнянь  $n$ -го порядку (переважно зі сталими коефіцієнтами) за заданих початкових умов (порівняння результатів експериментальних досліджень із теоретичними дозволяє подолати проблеми некоректності розв'язання обернених задач). Отже, у припущенні, що контрольований параметр з часом асимптотично наближається до необхідного значення задача синтезу матеріалів зводиться до: вибору порядку та виду диференціального рівняння (моделі); параметричної ідентифікації у межах обраної моделі; вивчення впливу параметрів моделі на вигляд кінетичних процесів; однокритеріальної оптимізації матеріалу на основі розв'язання формалізованого завдання; встановлення зв'язку параметрів моделі та

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		44

контрольованих властивостей композитних матеріалів; багатокритеріальної оптимізації складу, структури та технології виробництва матеріалу. Що складає основні етапи розробленого алгоритму синтезу композитних матеріалів.

### 3.1 Оптимізація фізико-механічних характеристик композитів

Загальне завдання ідентифікації кінетичних процесів формування фізико-механічних характеристик композитів вирішується, виходячи із простоти й адекватності опису реальних кінетичних процесів (із прийнятною для практичних цілей точністю й простотою фізичної інтерпретації результатів).

Порівняння результатів експериментальних досліджень із теоретичними (додаткова інформація про шуканий розв'язок) показало можливість моделювання основних кінетичних процесів (набір міцності, зміна модуля пружності, контракція й усадка, наростання внутрішніх напружень, тепловиділення, хімічна стійкість, водопоглинення й водостійкість) у класі звичайних диференціальних рівнянь  $n$ -го порядку. А саме, четвертого порядку зі сталими коефіцієнтами й з дійсним корінням характеристичного полінома.

Опираючись на результати багаторічних досліджень по синтезу матеріалів [28-32], наведемо основні моделі для оцінки формування окремих властивостей матеріалу (критеріїв якості).

#### 3.1.1 Кінетична модель набору міцності

Міцність композитів залежить від ступеня наповнення, дисперсності й фізико-хімічної активності поверхні наповнювача, адгезійної зв'язки в зоні контакту сполучника й наповнювача, концентрації полімеризувальної речовини, пористості композиції, температури вихідних компонентів, від технології виготовлення й деяких інших факторів. Регулювання міцності епоксидних композитів можливо за рахунок використання комбінованих наповнювачів,

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		45

регулювання режимів отвердіння, обробки аппретами, механічного очищення поверхні наповнювача, уведення модифікуючих, легуючих, пластифікуючих добавок, а також поверхово активних речовин.

Кінетика набору міцності композитів часто апроксимується функцією:

$$R(t) = R_m(1 - e^{-\lambda t}), \quad (3.1)$$

де  $R(t)$  – міцність композита в момент часу  $t$ ;  $R_m$  – максимальна міцність;  $t$  – час отвердіння;  $\lambda$  – показник, що характеризує швидкість отвердіння (сталий для заданого матеріалу).

Легко показати, що (3.1) є частковим випадком процесу:

$$x(t) = x_m \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} e^{-\lambda_1 t} - \frac{\lambda_1}{\lambda_1 - \lambda_2} e^{-\lambda_2 t} + 1 \right) \quad (3.2)$$

розв'язку завдання Коші:

$$\ddot{z} + 2n\dot{z} + \omega_0^2 z = 0, \quad z = x - x_m, \quad x(0) = 0, \quad \dot{x}(0) = 0. \quad (3.3)$$

Таким чином, в обох розглянутих випадках кінетичний процес набору міцності описується динамічною моделлю виду (3.3).

### 3.1.2 Кінетика зміни модуля пружності

Іншим з основних показників властивостей дисперсно-наповнених композитів є модуль пружності. Для його ефективного підвищення особливо часто застосовуються дисперсні наповнювачі, що добре змочуються матричним сполучником. Кінетична модель зміни модуля пружності подається у вигляді:

					<i>KPTAM 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		46

$$E(t) = E_n \left( 1 - e^{-qt^n} \right), \quad (3.4)$$

де  $n = 1 - 1/d$ ;  $d$  – структурна розмірність композиційної системи.

Враховуючи експонентний характер кінетичного процесу, тут цілком можлива його апроксимація лінійною комбінацією функцій виду:

$$\sum_{i=1}^n c_i e^{-\lambda_i t}.$$

### 3.1.3 Кінетика контракції й усадки

Кінетика контракції й усадки є відбиттям процесів структуроутворення. Структура композита (щільність, регулярність, упакування, наявність або відсутність дефектів, пористість) залежить не стільки від величини енергії, наданій системі, скільки від швидкості витрати цієї енергії.

Кінетика контракції й усадки розглянутих матеріалів добре апроксимується у вигляді:

$$K(t) = K_m \left( 1 - e^{-\alpha t^{1/n}} \right), \quad (3.5)$$

де  $K(t)$  – контракція в момент часу  $t$ ;  $K_m$  – максимальна контракція для заданого композита;  $\alpha$  – коефіцієнт пропорційності, що характеризує швидкість отвердіння, для поліефірних смол  $n = 1$ .

І тут поряд з (3.5) можливий опис кінетичного процесу лінійною комбінацією експонентних функцій виду:

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		47

$$\sum_{i=1}^n c_i e^{-\lambda_i t}$$

### 3.1.4 Кінетика наростання внутрішніх напружень

Внутрішні напруження пов'язані з незавершеними усадочними процесами, що нерівномірно протікають. Знання механізму виникнення внутрішніх напружень дає можливість направлено змінювати їхню величину, наприклад, шляхом зменшення густоти просторової зшивки полімеру; збільшення гнучкості макромолекул зі збільшенням за рахунок цього швидкості релаксаційних процесів; зміни характеру надмолекулярних структур за рахунок впливу на швидкість процесів структуроутворення тощо. Вигляд кінетичних процесів наростання внутрішніх напружень наводиться на рис. 3.1.

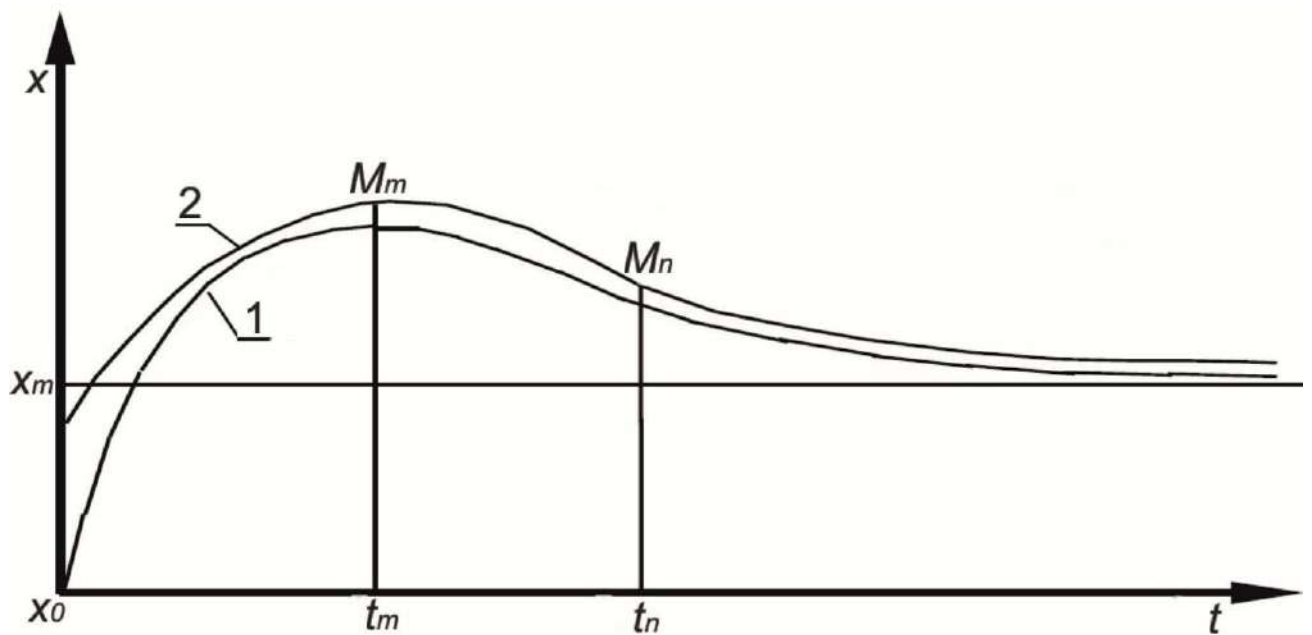


Рисунок 3.1 – Кінетичні процеси наростання внутрішніх напружень

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		48

Процеси виду, наведені на рис. 2.4, крива 1, є розв'язком задачі Коші:

$$\ddot{z} + 2n\dot{z} + \omega_0^2 z = 0, z = x - x_m, x(0) = 0, \dot{x}(0) = \dot{x}_0. \quad (3.6)$$

Процеси, наведені на рис. 3.1, крива 2, є розв'язком задачі Коші:

$$\ddot{z} + 2n\dot{z} + \omega_0^2 z = 0, z = x - x_m, x(0) = x_0, \dot{x}(0) = \dot{x}_0. \quad (3.7)$$

### 3.1.5 Процеси тепловиділення

Процес утворення структури епоксидного полімеру відбувається за рахунок приєднання до полімерного ланцюга кожної нової ланки олігомери. Утворення кожного нового зв'язку в процесі полімеризації супроводжується виділенням певної порції тепла. Зниження тепловиділення при полімеризації є важливою умовою одержання бездефектної структури епоксидного композита. Експериментально визначалася кінетика тепловиділення, яка має вигляд, аналогічний наведеному на рис. 3.1, крива 2. Зазначені процеси є розв'язком задачі Коші (3.7).

### 3.1.6 Хімічна стійкість композицій

Збільшення хімічної стійкості композита (стійкість матеріалів і конструкцій у заданому інтервалі часу експлуатації до впливу агресивних середовищ без руйнування й істотної зміни геометричних розмірів і форми) досягається правильним вибором в'язучих і наповнювачів (вони повинні мати близькі значення коефіцієнта температурного розширення й пружних властивостей, а також гарну адгезію), створенням щільної структури матеріалу, а також введенням у матеріал активних добавок. У розглянутому випадку:

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		49

$$x(t) \approx x_m e^{-\lambda t}.$$

Природне згладжування лінійною комбінацією експонентних функцій дасть більш точні результати. Зокрема, при  $n = 2$  розглянутий кінетичний процес є розв'язком задачі Коші:

$$\ddot{z} + 2n\dot{z} + \omega_0^2 z = 0, \quad z = x - x_m, \quad x(0) = x_m, \quad \dot{x}(0) = 0. \quad (3.8)$$

Тут  $x_m$  визначається безпосередньо за експериментально отриманим процесом ( $x_m = x(0)$ ), параметр  $\lambda$  визначиться методом найменших квадратів.

Як впливає з зазначеного вище, використовувана експонентна модель для аналізу хімічної стійкості також є лише частковим випадком моделі (3.7).

### 3.1.7 Водопоглинення й водостійкість

Вода впливає на композиційні будівельні матеріали; прискорює процеси деструкції, змінює властивості композитів. Тому опір дії води є одним з найбільш важливих характеристик композиційного матеріалу. Дифузія води в композит багато в чому визначається проникністю граничного шару полімер-наповнювач, яка у свою чергу й визначає водопоглинення й водостійкість композита. Наприклад, водопоглинення й водостійкість епоксидних композитів відповідно носять експоненціально зростаючий і убуваючий характер. Природно, відповідно до попереднього більш точно ці процеси можуть описуватися лінійною комбінацією експонентних функцій. Зокрема, при  $n = 2$  вони є розв'язком задачі Коші (3.8).

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		50

### 3.1.8 Моделювання процесів седиментації й флокуляції

Моделювання процесів седиментації й флокуляції здійснюється на основі моделювання системи часток (докладно розглядалося в [32, 33]).

Як показує практика, існують системи, кінетичні процеси в яких не можуть бути описані розглянутими вище моделями першого й другого порядку. До таких систем, зокрема, належать деякі полідисперсні системи. Так, наприклад, кінетика набору міцності композиційного матеріалу має іноді не одну, а дві точки перегину. При цьому на основі експериментально отриманих кінетичних закономірностей формування основних фізико-механічних характеристик композиційних матеріалів для їхнього опису пропонується узагальнена динамічна модель [28]: кінетичний процес  $x(t)$  є розв'язком задачі

Коші:

$$z^{(4)} + a_1 z^{(3)} + a_2 z^{(2)} + a_3 z^{(1)} + a_4 z = 0,$$

$$z = x - x_m; \quad x(0) = x_0, \dot{x}(0) = \dot{x}_0, \ddot{x}(0) = \ddot{x}_0, \ddot{\ddot{x}}(0) = \ddot{\ddot{x}}_0;$$

$x_0, \dot{x}_0, \ddot{x}_0, \ddot{\ddot{x}}_0$  визначаються необхідним видом кінетичного процесу й заданим експлуатаційним значенням  $x_m$  досліджуваної характеристики матеріалу.

Таким чином, параметрична ідентифікація й наступна оптимізація кінетичних процесів зводиться до визначення параметрів моделі або пов'язаних з ними коренів характеристичного полінома.

### 3.2 Узагальнений алгоритм проектування композитів з заданим комплексом властивостей

На основі аналізу результатів сучасних досліджень в галузі створення нових матеріалів маємо за мету узагальнити алгоритм проектування композитів з заданим комплексом властивостей.

Проектування композитів не може бути вирішене без урахування багатьох критеріїв щодо навколишнього середовища, експлуатаційних характеристик матеріалів, показників структури та властивостей, дотримання рецептури та технології, тобто КМ необхідно розглядати системно, як складну технічну систему, що переживає комплекс впливів і має цілий ряд керованих параметрів.

Проектування композитів як складних систем проводиться з дотриманням основних принципів системного підходу [31]:

- ієрархічність – кожна система або елемент сприймається як окрема система;
- структурність – можливість опису системи через опис зв'язків між її елементами;
- взаємозалежність – прояв властивостей системи лише за взаємодії із зовнішнім середовищем;
- множинність опису – опис системи через множину взаємодіючих математичних моделей;
- проектування частини з урахуванням цілого.

Центральним етапом є побудова математичних моделей окремих підсистем та опис їхньої взаємодії.

До певного рівня декомпозицію матеріалу можна здійснити на основі когнітивного моделювання (побудови орграфа), а синтез цілісної системи наближено звести до вирішення задач синтезу підсистем [29]. Так, когнітивні моделі дозволили виявити клас математичних моделей під час оптимізації

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		52

структури та властивостей радіаційно-захисних композитів [29, 30]. Окремі фрагменти, що входять до складу матеріалу (об'єкта), розглядалися як підсистеми; вказувалися способи виміру властивостей кожної з підсистем. Природно передбачалося, що в ідеалі існує справжня математична модель, яка дозволяє замінити об'єкт ідентифікації у всіх необхідних випадках (при реально багаторівневій ієрархічній структурі матеріалу (багатозв'язній системі) її отримання – нездійсненна мрія [32]).

Виникає задача опису матеріалу на основі формалізації його властивостей (які, втім, визначають його структуру). Традиційно оцінка матеріалу здійснюється за сукупністю низки фізико-механічних характеристик [28].

Кожна з властивостей при оптимізації розглядається як один із часткових критеріїв (загалом – суперечливих).

Нетривіальна задача вибору математичної моделі для опису властивості пов'язана з структурною ідентифікацією (вибором класу моделей); розв'язанням загальної задачі ідентифікації у вибраному класі моделей з наступним розв'язанням часткової задачі ідентифікації – параметричної.

Однією з головних вимог до моделей вважається простота інтерпретацій фізичного сенсу коефіцієнтів, які входять у модель. Врахуємо, що регресійні моделі при синтезі матеріалів сутнісно не застосовуються; а моделі, отримані математичними методами планування експерименту, в основному також носять ілюстративний характер і рідко використовуються для розв'язання задач прогнозування та цілеспрямованої зміни значень чинників.

Найбільший практичний інтерес мають математичні моделі, представлені системою рівнянь із заданим кортежем параметрів (параметри класичного типу – літерні константи; некласичного типу – множини допустимих значень параметра класичного типу, метапараметри [32]).

При описі кожної фізико-механічної характеристики матеріалу задається пробний клас математичних моделей, до якого, на думку учасників

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		53

когнітивного моделювання, гіпотетично могла б належати істинна її модель. Визнається доцільним опис кожної з експлуатаційних характеристик матеріалу у вигляді асимптотичного значення розв'язку деякого диференціального рівняння (кінетичний процес формування фізико-механічної характеристики [30]). Такий опис не є єдиним (за потреби можлива заміна пробного класу).

Врахуємо, що задача ідентифікації належить до класу некоректних задач. Якщо при наближеному розв'язку оберненої задачі використати будь-який класичний алгоритм формально без урахування некоректності задачі, то є можливим одержання результату, який не має ні наукової, ні прикладної цінності. Ігнорувати некоректність постановки задачі не можна. Для її подолання можна використовувати додаткову інформацію про розв'язок або скористатися методами регуляризації некоректно поставлених задач. Найчастіше як додаткову інформацію про шуканий розв'язок використовують порівняння результатів експериментальних досліджень із теоретичними.

У [34] показана можливість моделювання основних кінетичних процесів (набір міцності, зміна модуля пружності, контракція та усадка, наростання внутрішніх напруг, тепловиділення, хімічна стійкість, водопоглинення та водостійкість) у класі звичайних диференціальних рівнянь  $n$ -го порядку, а саме, четвертого порядку зі сталими коефіцієнтами та з дійсним корінням характеристичного полінома. Пошук адекватної моделі складався з трьох етапів: структурної, параметричної та непараметричної ідентифікації.

На етапі структурної ідентифікації здійснюється: вибір пробного класу та пробних значень для всіх метапараметрів із заданого кортежу параметрів пробного класу; вибір пробної множини моделей об'єкта в результаті заміни всіх метапараметрів із заданого кортежу параметрів пробними значеннями; інтерпретація обраних пробних значень метапараметрів як прийнятних для цієї стадії наближень до адекватних значень; інтерпретація обраної пробної множини моделей об'єкта як прийнятного наближення до адекватної множини моделей об'єкта.

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		54

На етапі параметричної ідентифікації здійснюється інтерпретація обраних пробних значень параметрів класичного типу як прийнятних наближень до адекватних значень (при непараметричній ідентифікації є хоча б один функціональний параметр, допустимими значеннями якого є функції).

У випадку великих складних систем, сформованих за модульним принципом (якими є і композитні матеріали [29]), легко здійснити декомпозицію системи на сепаратні підсистеми, які мають певний ступінь автономності (інтегративні властивості наближено можна визначити на основі автономних досліджень сепаратних підсистем [29]). Тут кожен елемент ієрархічної структури якості системи визначає автономну (без урахування всіх міжсистемних зв'язків) якість сепаратної системи. Результати автономних досліджень модулів можна використовувати для визначення інтегративних властивостей (визначаються зв'язками між модулями, рівнями і на кожному з рівнів; переважно, лише на якісному рівні).

Можливість використання результатів автономних досліджень сепаратних підсистем при конструюванні системи загалом пов'язана з необхідністю усунення міжсистемних зв'язків. Це можна зробити введенням еталонних моделей, які налаштовуються одночасно з децентралізацією модулів по входах [34].

Умови для перенесення результатів автономних досліджень на систему загалом визначаються повнотою розуміння процесів формування структури та властивостей системи. Зокрема як зазначено у [34], при визначенні деяких властивостей матеріалу в залежності від гранулометричного складу можна використовувати інгредієнти з інших матеріалів, але з тим самим гранулометричним складом, що і в матеріалі, який синтезується. Проте необхідно забезпечити аналогічні, наскільки можливо, точні, міжсистемні зв'язки (наприклад, змочуваність). При перенесенні результатів автономних досліджень змочуваності формування структури і властивостей матеріалу необхідно знати параметри змочуваності вхідних компонентів у обмежених

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		55

умовах. Принципово це можна забезпечити використанням налаштовуваної еталонної моделі, яка передбачає регулювання тиску між компонентами. Налаштування можна забезпечити за допомогою експериментальних даних на зразках.

Отже, задача синтезу матеріалів послідовно зводиться до:

- розв'язання загальної задачі ідентифікації (вибору порядку та виду диференціального рівняння);
- параметричної ідентифікації в рамках вибраної структури рівняння (визначення параметрів моделі);
- вивчення впливу параметрів моделі на вигляд кінетичних процесів у межах обраної моделі;
- оптимізації параметрів моделі;
- встановлення зв'язку параметрів моделі та контрольованих параметрів;
- оптимізації рецептури (вмісту та структури складників, тощо) та технології виробництва матеріалу відповідно до отриманих оптимальних параметрів моделі.

Запропонована методика синтезу матеріалу ґрунтується на використанні характерних ознак експериментально отриманих даних про кінетичні процеси в композитних матеріалах.

На основі проведеного аналізу алгоритм синтезу композитного матеріалу має вигляд, який наводиться на рисунку 3.2.

Його основою є задача визначення структури та властивостей композитного матеріалу як складної системи модульної структури.

Можливість створення композиту з необхідними властивостями початково визначається виділенням керуючих параметрів. На основі когнітивної карти визначаються ієрархічні структури критеріїв якості, а згідно виділених критеріїв якості – відповідні структурні схеми системи (для кожного виділеного масштабного рівня).

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		56

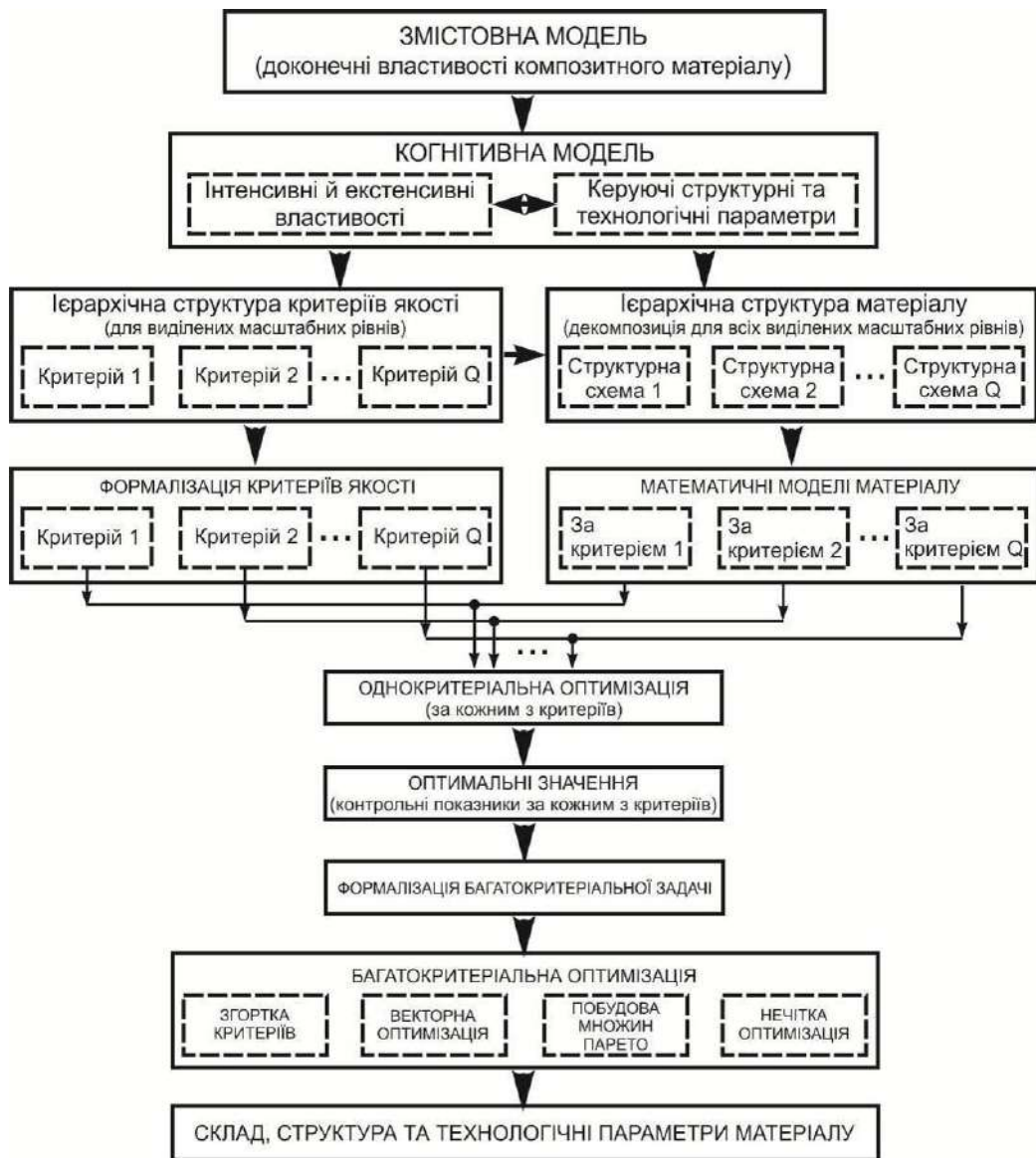


Рисунок 3.2 – Алгоритм синтезу композитного матеріалу із заданим комплексом властивостей

Далі здійснюється формалізація критеріїв якості системи та розробляються математичні моделі відповідно до кожного з критеріїв. Нарешті, на основі розв’язання задач однокритеріальної оптимізації з використанням знайдених оптимальних значень здійснюється формалізація багатокритеріальної задачі та її розв’язання (визначаються оптимальні організація та властивості системи).

## Висновки до розділу

Розглянутий у роботі підхід до створення композитних матеріалів полягає у поданні їх як систем, що дозволяє при їх синтезі використовувати методи системного аналізу та результати моделювання кінетичних процесів формування фізико-механічних характеристик матеріалів для керування їх якістю.

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		58

## 4 РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕНЬ ТА ЇХ АНАЛІЗ

### 4.1 Одновимірна оптимізація в композиційних системах

#### 4.1.1 Формулювання задачі

Розглянемо задачу параметричної оптимізації, у якій необхідно визначити раціональне значення проектного параметра композиційного матеріалу –  $x$  – відсоткової частки армувальних волокон у структурі композиційного матеріалу, що забезпечує максимальне значення цільової функції  $F(x)$  – відносного модуля пружності.

Цільова функція має вигляд:

$$F(x) = \sin(x/60).$$

Проектний параметр  $x$  може набувати значення  $10 \leq x \leq 150$ , отже ( $a=10$ ,  $b=150$ ).

Необхідно визначити інтервал локалізації проектного параметра  $x_m$ , при якому функція  $F(x)$  має найбільше значення. Можливе число обчислень цільової функції  $N=5$ .

Таким чином, задача формулюється як задача одновимірної оптимізації з обмеженим числом експериментів, що імітує процес підбору оптимального параметра композиційного матеріалу за мінімальної кількості випробувань.

Графічна інтерпретація задачі подана на рис. 4.1.

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		59

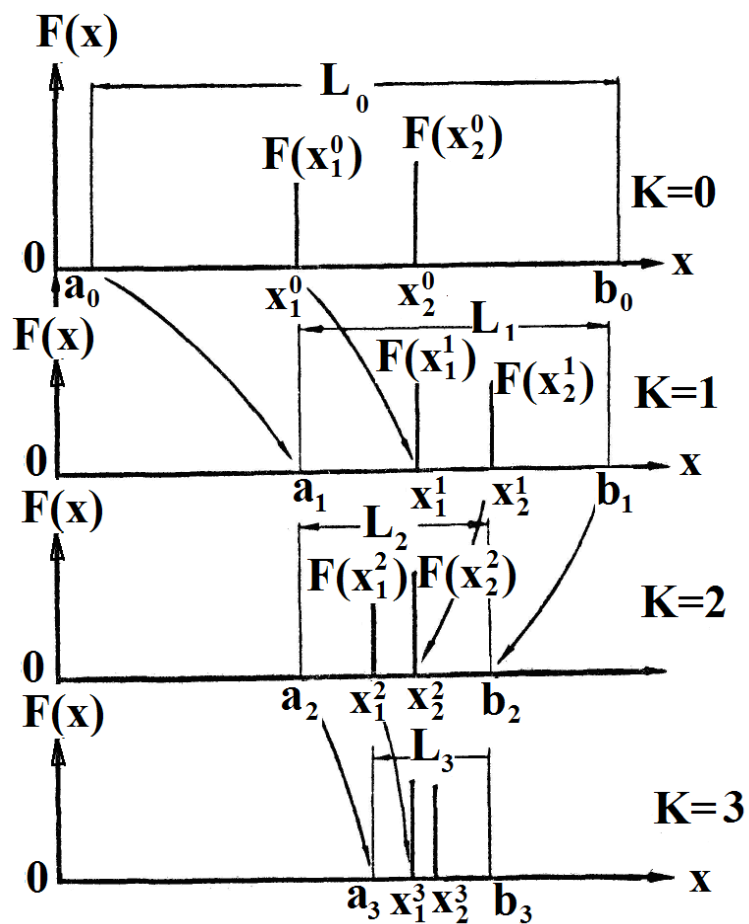


Рисунок 4.1 – Геометрична інтерпретація оптимізації методом Фібоначчі

#### 4.1.2 Розв'язання задачі методом Фібоначчі

Перший етап розрахунків починаємо з визначення абсцис  $x_1^0$  та  $x_2^0$  ( $k=0$ ) за формулами (2.3), (2.4):

$$x_1^0 = 10 + (150 - 10) \frac{5}{13} = 63.846,$$

$$x_2^0 = 10 + (150 - 10) \frac{8}{13} = 96.154.$$

Значення цільової функції в цих точках дорівнює  $F(x_2^1)=0,874$ ;  $F(x_2^0)=0,999$ . Оскільки  $F(x_1^0) < F(x_2^0)$ , то  $a_1 = x_1^0$ ,  $x_1^1 = x_2^0$ ,  $F(x_1^1) = F(x_2^0)$ .

Другий етап виконується за  $k=l, 2, \dots, N-3$  ітераційних кроків. Оскільки  $N-3=5-3=2$ , то  $k=1, 2$ . При  $k=1$  інтервал невизначеності  $[a_1, b_1]$  параметра  $x$  звужився ( $63.846 \leq x \leq 150$ ). Для подальшої роботи знайдемо відсутню абсцису  $x_2^1$  за формулою (2.4):

$$x_2^1 = 63.8 + (150 - 63.8) \frac{5}{8} = 117.692.$$

Значення цільової функції в точках  $x_1^1$  та  $x_2^1$  відповідно  $F(x_1^1)=0,999$  та  $F(x_2^1)=0,925$ , що задовольняв умову  $F(x_1^1) > F(x_2^1)$ . Згідно з алгоритмом  $b_2 = x_2^1$ ,  $x_2^2 = x_1^1$ ,  $F(x_2^2) = F(x_1^1)$ . Наступний крок ітераційного процесу на другому етапі виконуємо при  $k=2$ . В інтервалі невизначеності знаходимо відсутню абсцису  $x_1^2$  за формулою (2.3):

$$x_1^2 = 63.8 + (117.6 - 63.8) \frac{2}{5} = 85.385.$$

Значення цільової функції  $F(x_1^2)=0,989$  та  $F(x_2^2)=0,999$ . Виконується умова  $F(x_1^2) < F(x_2^2)$ , тому  $a_3 = x_1^2$ ,  $x_1^3 = x_2^2$ ,  $F(x_1^3) = F(x_2^2)$ .

Третій етап починаємо з визначення  $\varepsilon$  за формулою (2.5):

$$\varepsilon = \frac{b_3 - a_3}{5} = \frac{117.692 - 85.385}{5} = 6.462.$$

Відсутню абсцису на інтервалі  $[a_3, b_3]$  знаходимо як  $x_1^3 - (-1)^1 \varepsilon = 96,154 + 6,462 = 102,615$ . Порівнявши значення цільової функції в

					<b>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</b>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		61

точках  $x_1^3$  та  $x_1^3 + \varepsilon$ , визначаємо, що оптимальне значення проектного параметра знаходиться в інтервалі  $[a_3, x_1^3]$  ( $x_m \in [85,385, 96,154]$ ).

На рис. 4.2–4.3 наведено процес оптимізації функції методом Фібоначчі у MathCad.

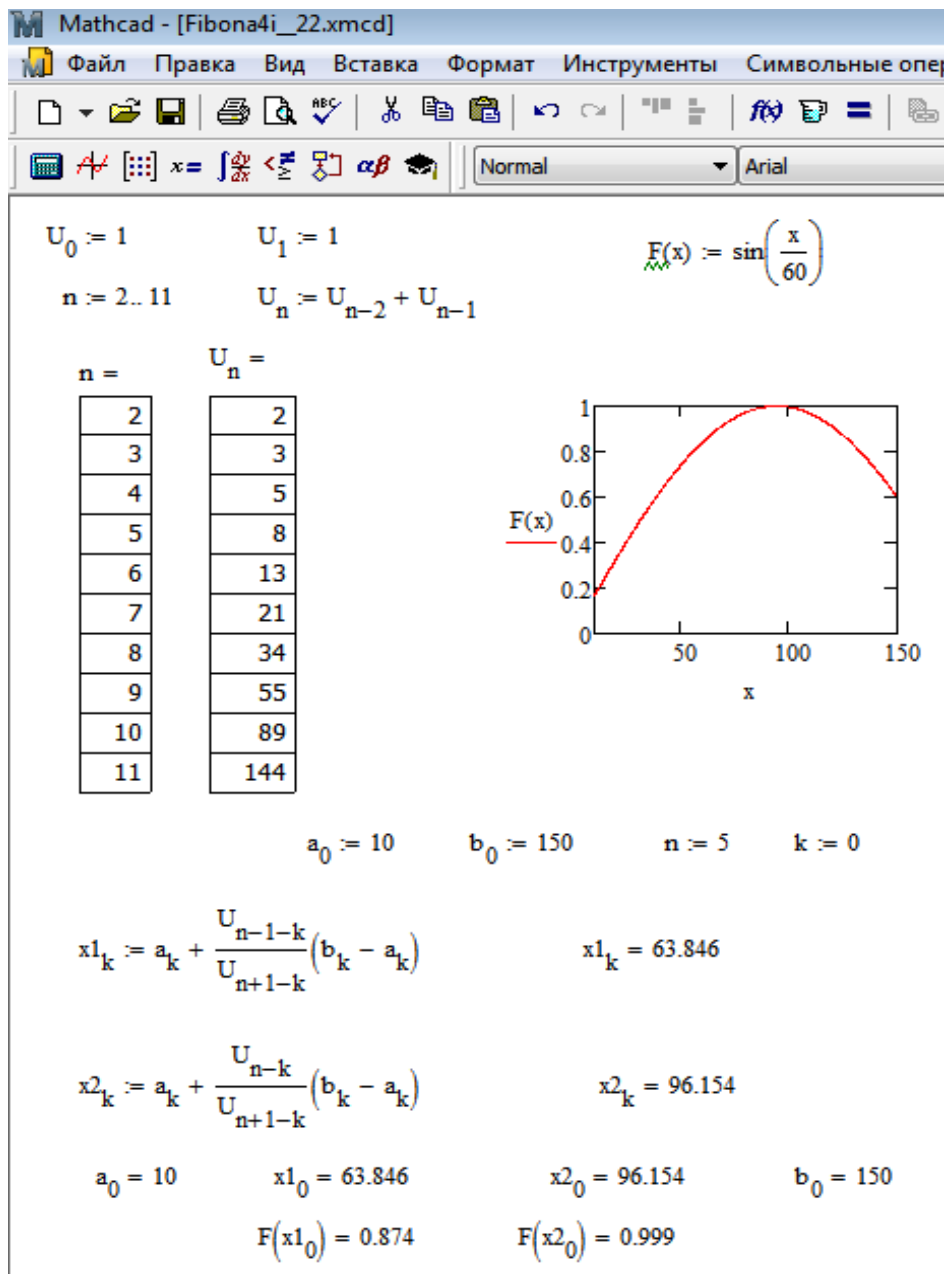


Рисунок 4.2 – Копія екрану 1: оптимізація функції методом Фібоначчі у MathCad

-----  $F(x_1) \leq F(x_2)$  отже:  $a_k = x_1, x_1 = x_2$  -----

$$a_1 := x_{1_0} = 63.846 \quad x_{1_1} := x_{2_0} = 96.154 \quad b_1 := b_0 = 150$$

$$k := 1 \quad + \quad U_{n-k} = 5 \quad U_{n+1-k} = 8$$

$$x_{2_k} := a_k + \frac{U_{n-k}}{U_{n+1-k}} (b_k - a_k) \quad x_{2_k} = 117.692$$

$$F(x_{1_1}) = 0.999 \quad F(x_{2_1}) = 0.925$$

-----  $F(x_1) \geq F(x_2)$  отже:  $b_k = x_2, x_2 = x_1$  -----

$$a_2 := a_1 = 63.846 \quad b_2 := x_{2_1} = 117.692 \quad x_{2_2} := x_{1_1} = 96.154$$

$$k := 2 \quad U_{n-1-k} = 3 \quad U_{n+1-k} = 8$$

$$x_{1_k} := a_k + \frac{U_{n-1-k}}{U_{n+1-k}} (b_k - a_k) \quad x_{1_k} = 85.385$$

$$F(x_{1_2}) = 0.989 \quad F(x_{2_2}) = 0.999$$

-----  $F(x_1) \leq F(x_2)$  отже:  $a_k = x_1, x_1 = x_2$  -----

$$a_3 := x_{1_2} = 85.385 \quad x_{1_3} := x_{2_2} = 96.154 \quad b_3 := b_2 = 117.692$$

$$\varepsilon := \frac{(b_3 - a_3)}{5} = 6.462$$

$$x_{2_3} := x_{1_3} - (-1) \cdot \varepsilon = 102.615$$

$$a_3 = 85.385 \quad x_{1_3} = 96.154 \quad x_{2_3} = 102.615 \quad b_3 = 117.692$$

$$F(a_3) = 0.989 \quad F(x_{1_3}) = 0.999 \quad F(x_{2_3}) = 0.99 \quad F(b_3) = 0.925$$

Рисунок 4.3 – Копія екрану 2: оптимізація функції методом Фібоначчі у MathCad

Таким чином, визначений інтервал локалізації  $x_m \in [85,385, 96,154]$  може бути використаний як робочий діапазон структурного параметра – вмісту

армувальної фази, що забезпечує оптимальне поєднання міцності та жорсткості композиційного матеріалу.

## 4.2 Перевірка методики параметричної оптимізації полімерного композиційного матеріалу

### 4.2.1 Вихідні дані та умови моделювання

Для перевірки запропонованої методики параметричної оптимізації (п.п. 2.7) було проведено обчислювальний експеримент, спрямований на дослідження впливу об'ємної частки наповнювача та орієнтації армуючих волокон на фізико-механічні властивості полімерного композиційного матеріалу.

У моделюванні розглядалася система типу епоксидна матриця – скляне волокно, для якої відомі такі вихідні характеристики:

- модуль пружності матриці  $E_m=3.5$  ГПа;
- модуль пружності волокна  $E_f=72$  ГПа;
- густина матриці  $\rho_m=1200$  кг/м<sup>3</sup>;
- густина волокна  $\rho_f=2550$  кг/м<sup>3</sup>.

Об'ємна частка волокон  $V_f$  змінювалась у межах від 0,1 до 0,7, а орієнтація волокон  $\theta$  – від 0° (поздовжнє армування) до 90° (поперечне армування).

Для розрахунків ефективного модуля пружності використовувалась модель Войта–Рейсса з коригувальним коефіцієнтом орієнтації  $k_\theta$ :

$$E_c = k_\theta \cdot (V_f \cdot E_f + V_m \cdot E_m),$$

де  $k_\theta = \cos^4\theta + 0,5 \cdot \sin^4\theta$ .

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		64

#### 4.2.2 Обчислення ефективних характеристик

За наведеними залежностями було визначено зміну ефективного модуля пружності  $E_c$  та питомої міцності  $\sigma_c/\rho_c$  композиційного матеріалу при різних параметрах структури.

Таблиця 4.1 – Результати обчислювального експерименту

№	$V_f$	$\theta, ^\circ$	$E_c, \text{ГПа}$	$\rho_c, \text{кг/м}^3$	$\sigma_c/\rho_c, \text{кН}\cdot\text{м/кг}$
1	0.1	0	10.5	1335	0.157
2	0.3	0	23.7	1625	0.259
3	0.5	0	38.3	1875	0.315
4	0.7	0	52.1	2100	0.333
5	0.5	30	32.5	1875	0.292
6	0.5	60	22.8	1875	0.249
7	0.5	90	14.4	1875	0.198

Результати показують, що зі збільшенням об'ємної частки волокон  $V_f$  модуль пружності та питома міцність композиційного матеріалу суттєво зростають, тоді як вплив кута орієнтації волокон є нелінійним: максимальні значення спостерігаються при поздовжньому армуванні ( $\theta=0^\circ$ ) і зменшуються при переході до поперечного розташування.

#### 4.2.3 Побудова регресійної моделі

На основі результатів обчислювального експерименту було побудовано квадратичну регресійну модель залежності ефективного модуля пружності від параметрів структури:

$$E_c = b_0 + b_1 V_f + b_2 \theta + b_{11} V_f^2 + b_{22} \theta^2 + b_{12} V_f \theta.$$

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		65

На основі результатів чисельного експерименту, проведеного відповідно до плану двофакторного дослідження, методом найменших квадратів отримані коефіцієнти (рис. 4.1):

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D

# Коефіцієнти рівняння регресії
b0 = 3.2
b1 = 70.5
b2 = -0.18
b11 = -40.3
b22 = -0.0016
b12 = -0.12

# Діапазони факторів
x1 = np.linspace(0, 1, 50) # об'ємна частка волокон (умовно)
x2 = np.linspace(0, 90, 50) # кут орієнтації, градуси
X1, X2 = np.meshgrid(x1, x2)
```

Рисунок 4.1 – Скрін екрану – коефіцієнти регресійної моделі

Коефіцієнт детермінації  $R^2=0.987$  свідчить про високу адекватність моделі експериментальним даним. Побудована поверхня відгуку (рис. 4.2) демонструє зростання модуля пружності з підвищенням об'ємної частки волокон і зменшенням кута орієнтації.

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		66

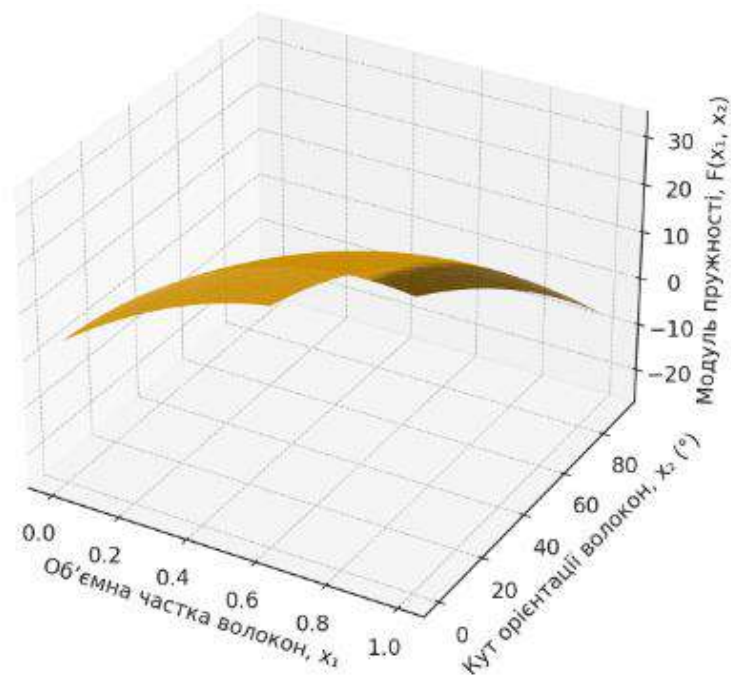


Рисунок 4.2 – Поверхня відгуку модуля пружності кмпозитного матеріалу

#### 4.2.4 Оптимізація параметрів

Для визначення оптимальних параметрів використано метод градієнтного пошуку, спрямований на максимізацію питомої міцності  $\sigma_c/\rho_c$ .

За результатами обчислень встановлено, що оптимальні значення є:

$$V_f^* = 0.56, \theta^* = 12^\circ,$$

що забезпечує:

$$E_c^* = 41.8 \text{ ГПа}, \sigma_c/\rho_c = 0.326 \text{ кН} \cdot \text{м/кг}.$$

Таким чином, при об'ємній частці армуючих волокон близько 55–60% і їхній орієнтації під малим кутом до напрямку навантаження досягається оптимальне співвідношення міцності та густини матеріалу.



компонентів з метою захисту від вологи, пилу та температурних впливів. Завдяки високій міцності, еластичності й хімічній стійкості, цей матеріал забезпечує довговічність і надійність автомобільних систем в умовах інтенсивної експлуатації.

Композит отримують із таких вихідних складників: епоксидна смола (ЕД-20), отверджувач ПЕПА, модифікуюча добавка – полізоціанат, наповнювач – подрібнений кварцовий пісок [32].

Процес приготування композиту здійснюється в такій послідовності: спочатку змішують епоксидну смолу з отверджувачем протягом 5 хвилин. Потім додають модифікуючу добавку та наповнювач і знову перемішують упродовж 5 хвилин. Завершальне формування епоксиполіуретану відбувається протягом наступних 24 годин у процесі полімеризації. В окремих випадках процес виготовлення доповнюється операцією термообробки [33].

Як цільову механічну характеристику розглядатимемо динамічний модуль пружності епоксиполіуретану –  $E_c$ . Для його визначення використано результати експериментальних вимірювань [32], а також відомі з літератури залежності, які описують вплив концентрації компонентів на модуль пружності [27, 32, 33].

Аналіз експериментальних даних показує, що значення  $E_c$  при різних концентраціях отверджувача можуть бути апроксимовані поліномом 3-го порядку за концентрацією отверджувача, що описується формулою:

$$E_c = -0,653 \cdot M_m^3 + 18,032 \cdot M_m^2 - 78,428 \cdot M_m + 3500,500;$$

де  $M_m$  – кількість отверджувача в масових частках на 100 масових часток смоли (кількість отверджувача змінювалася в межах від 8 до 25 масових часток).

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		69

Це рівняння відображає нелінійну залежність модуля пружності від кількості отверджувача, що є цілком очікуваним у полімерних системах. Мала кількість отверджувача призводить до недостатньої зшивки. Надмірна кількість – до перенасичення й дефектів.

Для визначення впливу кількості поліізоціанату на динамічний модуль пружності скористаємося формулою, що зазвичай використовується для попередньої оцінки модуля пружності новорозроблюваних композитів [30]:

$$E_c = E_m \cdot (1 + 11 \cdot M_{\text{mod}}^{1.7}),$$

де  $E_m$  – модуль пружності матриці;  $M_{\text{mod}}$  – кількість модифікатора в масових частках на 100 масових часток смоли (кількість модифікатора змінювалася в межах від 0 до 20 масових часток).

Це рівняння описує вплив поліізоціанату, який модифікує структуру полімеру (збільшуючи зшивку або змінюючи структуру). Нелінійна форма  $M_{\text{mod}}^{1.7}$  свідчить, що вплив не прямо пропорційний – з ростом концентрації ефект спочатку посилюється, а потім може насичуватися.

Дисперсний наповнювач – кварцовий пісок – додають до композиту для його здешевлення та підвищення модуля пружності  $E_c$ . Існують рівняння, які прогнозують властивості композитів із армуючим наповнювачем. Для кварцового піску найбільш застосовне рівняння Гутто–Смолвуда [32]:

$$E_c = E_m \cdot (1 + 2,5 \cdot \phi + 14,1 \cdot \phi^2),$$

де  $\phi$  – об’ємний вміст наповнювача. Для дисперснонаповнених композитів кількість добавки зазвичай варіюється в межах від 0 до 0,7 об’єму композиту. Припустимо, що в якості наповнювача використовується кварцовий пісок з такими параметрами: густина  $\rho = 1855$ (кг/м<sup>3</sup>), питома поверхня  $s = 250$

					<b>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</b>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		70

(м<sup>2</sup>/кг), коефіцієнт компактності  $\eta = 0,86$  [32]. Наповнювачі з таким показником компактності відносять до високополідисперсних, і для них оптимальне значення об'ємного вмісту визначається нерівностями [32, 34]:

$$\frac{0,637}{(2,3 \cdot 10^{-7} \cdot \rho \cdot s + 1)^3} < \phi < \frac{0,870}{(2,3 \cdot 10^{-7} \cdot \rho \cdot s + 1)^3}.$$

У результаті розрахунків отримано інтервал варіювання об'ємного вмісту наповнювача від 0,41 до 0,57.

Об'єднавши всі наведені вище формули, отримуємо узагальнене рівняння, яке описує залежність динамічного модуля пружності епоксиполіуретанового композиту від кількості вихідних компонентів:

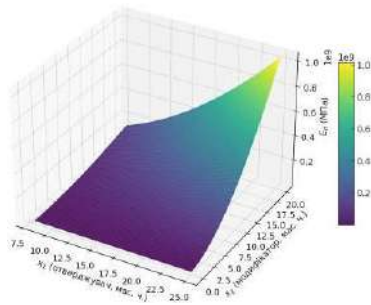
$$E_c = (-0,653 \cdot M_m^3 + 18,032 \cdot M_m^2 - 78,428 \cdot M_m + 3500,500) \times (1 + 11 \cdot M_{\text{mod}}^{1,7}) \cdot (1 + 2,5 \cdot \phi + 14,1 \cdot \phi^2). \quad (4.1)$$

Це дозволяє повністю охарактеризувати проєктований композит через встановлення функціонального зв'язку між величиною  $E_c$  і концентраціями його складових.

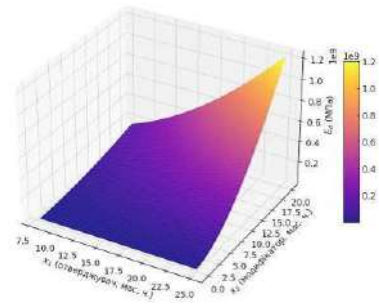
На рис. 4.3 подано поверхні залежності динамічного модуля пружності  $E_c$  епоксиполіуретанового композиту від масових часток отверджувача і модифікатора (4.1) при фіксованих значеннях об'ємної частки кварцового піску  $\phi=0,49$  (рис. 4.3.1 а)) та  $\phi=0,55$  (рис. 4.3.1 б)).

З графічного аналізу рисунка 4.3 видно, що збільшення кількості модифікатора та отверджувача суттєво впливає на зростання модуля пружності, особливо при їх поєднаному впливі. Як видно з рис. 4.3.б), при збільшенні вмісту наповнювача модуль пружності значно зростає в залежності від концентрацій отверджувача та модифікатора – ефект підсилення є помітним.

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		71



а)



б)

Рисунок 4.3 – Поверхня залежності динамічного модуля пружності  $E_c$  від концентрацій отверджувача та модифікатора (при фіксованому вмісту кварцового піску  $\phi=0,49$  – а;  $\phi=0,55$  – б)

Постановка та розв’язання задачі оптимізації. Припустімо, що необхідно отримати епоксиполіуретан із динамічним модулем пружності 6000 МПа. У такому випадку цільова функція, яка слугує критерієм для вибору оптимального складу матеріалу, має вигляд:

$$F(M_m; M_{\text{mod}}; \phi) = |6000 - E_c|.$$

#### 4.3.2 Формалізація задачі

Позначимо кількість отверджувача  $M_m$  через  $x_1$ , кількість модифікатора  $M_{\text{mod}}$  – через  $x_2$ , а кількість наповнювача  $\phi$  – через  $x_3$ .

Результати попередніх досліджень, а також дані, відомі з наукової літератури, дозволяють задати наступну систему нерівностей, яка визначає область проектування (рис. 4.4):

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		72

$$\begin{aligned}
8 &\leq x_1 \leq 25; \\
0 &\leq x_2 \leq 20; \\
0,41 &\leq x_3 \leq 0,57.
\end{aligned}
\tag{4.2}$$

Область допустимих значень параметрів композиту – це паралелепіпед у тривимірному просторі, всередині якого можна варіювати склад композиту для подальшого аналізу його властивостей.

Після введених позначень цільова функція набуває вигляду:

$$\begin{aligned}
F(x_1, x_2, x_3) = & \left| 6000 - (-0,653 \cdot x_1^3 + 18,032 \cdot x_1^2 - 78,428 \cdot x_1 + 3500,500) \right. \\
& \times \left. (1 + 11 \cdot x_2^{1,7}) \cdot (1 + 2,5 \cdot x_3 + 14,1 \cdot x_3^2) \right.
\end{aligned}
\tag{4.3}$$

Задача полягає у знаходженні таких значень параметрів  $x_1$ ,  $x_2$ ,  $x_3$ , які задовольняють системі обмежень (4.2) і водночас мінімізують значення цільової функції  $F(x_1, x_2, x_3)$ .

Ця задача є задачею умовної багатовимірної оптимізації. Для її розв'язання є застосовним будь-який метод багатовимірного пошуку, в якому задачі одновимірної оптимізації розв'язуються відповідними методами одновимірного пошуку. Оптимізація може бути проведена з використанням програмного забезпечення (зокрема MATLAB, MathCAD, Excel, інших спеціалізованих програм).

На рисунку 4.5 подано розв'язок задачі (4.2)–(4.3), одержаний в системі комп'ютерної алгебри MathCAD. У Додатку Б подано Python-скрипт для побудови 3D-графіка поверхні динамічного модуля пружності  $E_d$  у залежності від кількості отверджувача  $x_1$  і модифікатора  $x_2$ , при фіксованому значенні піску  $x_3$  і повний Python-скрипт для оптимізації динамічного модуля пружності  $E_d$  епоксиполіуретанового композиту в межах заданих обмежень:

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		73



Рисунок 4.6 дозволяє наочно оцінити, як змінюється жорсткість композиту залежно від концентрації компонентів, і допомагає знайти оптимальні поєднання для досягнення бажаних механічних властивостей.

Наведемо короткий аналіз ізоліній динамічного модуля пружності  $E_d$  епоксиполіуретанового композиту в залежності від концентрацій трьох компонентів:

1. Вплив кількості отверджувача ( $x_1$ ).

При збільшенні  $x_1$  від 8 до 25 мас. ч.  $E_d$  зростає нелінійно.

На всіх графіках видно чітке зростання жорсткості композиту при збільшенні кількості отверджувача. Це узгоджується з тим, що отверджувач посилює зшивання полімерної матриці, підвищуючи її міцність і пружність.

2. Вплив кількості модифікатора ( $x_2$ ).

Модифікатор також підвищує  $E_d$ , але ефект стає відчутним переважно на тлі достатньої кількості отверджувача.

За низьких значень  $x_1$  збільшення  $x_2$  дає слабкий ефект, що вказує на синергетичну дію модифікатора лише в поєднанні з отверджувачем.

3. Вплив вмісту піску ( $\phi$ ).

Зі зростанням  $\phi$  від 0.41 до 0.57 помітне загальне підвищення  $E_d$  на всіх ділянках графіків.

Це відповідає реальному фізичному ефекту: наповнювач (пісок) підвищує жорсткість системи, діючи як жорсткий каркас.

Найвищі значення  $E_d$  досягаються при максимальному  $\phi=0.57$  в поєднанні з високими значеннями  $x_1$  і  $x_2$ .

4. Загальний висновок.

Оптимальні властивості досягаються при середньо-високих концентраціях усіх трьох компонентів.

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		75

Ізолінії мають опуклий характер, що свідчить про наявність точки оптимуму – це важливо для цілеспрямованого проектування матеріалів.

Залежність є нелінійною, тому прості лінійні моделі тут неефективні – це обґрунтовує застосування узагальненого рівняння та методів нелінійної оптимізації.

Рекомендація: для практичного проектування можна використати отримане рівняння як об'єктивну функцію в задачі оптимізації, наприклад методом градієнтного спуску або генетичних алгоритмів — залежно від задачі.

### Висновки до розділу

1. Методом Фібоначі проведено однофакторну параметричну оптимізацію для визначення раціонального значення проектного параметра композиційного матеріалу –  $x$  – відсоткової частки армувальних волокон у структурі композиційного матеріалу, що забезпечує максимальне значення цільової функції  $F(x)$  – відносного модуля пружності. Визначений інтервал локалізації проектного параметра [85,385, 96,154] може бути використаний як робочий діапазон структурного параметра – вмісту армувальної фази, що забезпечує оптимальне поєднання міцності та жорсткості композиційного матеріалу.

2. Проведено обчислювальний експеримент із використанням математичної моделі Войта–Рейсса для системи «епоксидна матриця – скляне волокно».

Встановлено, що основними факторами, які впливають на модуль пружності та питому міцність матеріалу, є об'ємна частка наповнювача й орієнтація армуючих волокон.

Побудовано регресійну модель, яка адекватно описує залежності фізико-механічних характеристик від параметрів структури ( $R^2=0.987$ ).

Оптимальні значення параметрів становлять  $V_f=0.56$  і  $\theta=12^\circ$ , що забезпечує максимальну питому міцність композиційного матеріалу.

									Арк.
									76
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат	КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ				

Результати розрахунків узгоджуються з експериментальними даними, що підтверджує ефективність запропонованої методики параметричної оптимізації.

3. Побудоване рівняння, яке є узагальненою емпірично-теоретичною моделлю, що описує залежність динамічного модуля пружності  $E_c$  епоксиполіуретанового композиту від трьох основних компонентів:  $M_m$  – кількості отверджувача (ПЕПА),  $M_{mod}$  – кількості модифікатора (поліізоціанату),  $\phi$  – об'ємної частки кварцового піску.

Модель комбінує емпіричні і теоретичні підходи: частина з  $M_m$  отримана з експериментальних даних (апроксимація); частини з  $M_{mod}$  і  $\phi$  – це апроксимовані або теоретично виведені множники.

Модель відображає фізичні механізми зміцнення композиту: хімічне зшивання (отверджувач і модифікатор), наповнення твердими частками (кварцовий пісок), взаємодію компонентів між собою.

Модель є узагальненням для інженерного застосування: рівняння зручно використовувати для прогнозу властивостей композиту при проєктуванні – варіюючи концентрації складових, можна передбачити, як зміниться модуль пружності.

Результати оптимізації: оптимальна кількість отверджувача: 8,05 мас. ч.; оптимальна кількість модифікатора: 0,003 мас. ч. (мінімально допустима межа); оптимальна об'ємна частка піску: 0,411 (мінімально допустима межа). За таких параметрів композиту одержимо запланований динамічний модуль пружності  $E_c \approx 6000$  МПа.

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		77

## ВИСНОВКИ

Аналіз літературних джерел за темою роботи показав, що композиційні матеріали відіграють ключову роль у сучасному машинобудуванні, авіації, будівництві та інших галузях завдяки поєднанню високої міцності, малої густини та стійкості до зовнішніх впливів [25]. Однак досягнення оптимального балансу між фізичними та механічними властивостями вимагає ретельного підходу до вибору структури та складу матеріалу [26]. Однопараметрична оптимізація є одним із ефективних методів, що дозволяє змінювати лише один параметр (наприклад, вміст армувального компонента або температуру пресування) з метою максимізації або мінімізації певної характеристики матеріалу. Такий підхід дає змогу глибше зрозуміти вплив окремих факторів на властивості композицій та забезпечити більш керований процес проектування нових матеріалів [27].

У дослідженнях композиційних матеріалів (КМ) використовують математичні моделі з обмеженим ізоморфізмом, які відображають лише ключові властивості об'єкта. Основні задачі моделювання: керування структурою КМ, прогноз їхніх експлуатаційних характеристик і виявлення механізмів структуроутворення. Ефективними є підходи, засновані на нелінійних моделях, що розширюють можливості аналізу та розробки КМ [34].

У ході виконання роботи було проведено комплексне дослідження процесу параметричної оптимізації фізико-механічних властивостей композиційних матеріалів на основі математичного моделювання. Отримані результати дозволяють сформулювати такі основні висновки:

1) Проаналізовано сучасний стан досліджень у галузі композиційних матеріалів.

Визначено, що розвиток методів математичного моделювання та оптимізації є ключовим напрямом підвищення ефективності створення нових композиційних систем із наперед заданими властивостями.

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		78

2) Узагальнено фізико-механічні характеристики композиційних матеріалів та виявлено основні фактори, що впливають на їх формування: тип матриці, властивості наповнювача, об'ємна частка армуючої фази, орієнтація волокон і параметри технологічного процесу.

3) Розроблено математичні моделі визначення ефективного модуля пружності композиційного матеріалу на основі моделі Войта–Рейсса з урахуванням орієнтації армуючих волокон, одно факторної оптимізації, нелінійної оптимізації. Моделі дозволяють описати зміну властивостей композиції при варіюванні структурних параметрів.

4) Запропоновано методику параметричної оптимізації, що включає послідовність етапів: формулювання мети, вибір параметрів, побудову математичної моделі, проведення обчислювального експерименту, пошук оптимальних значень та перевірку адекватності результатів.

5) Проведено обчислювальні експерименти за кожною моделлю.

За результатами обчислювального експерименту для задачі однофакторної оптимізації визначений інтервал локалізації проектного параметра – [85,385, 96,154], який може бути використаний як робочий діапазон структурного параметра – вмісту армувальної фази, що забезпечує оптимальне поєднання міцності та жорсткості композиційного матеріалу.

За результатами обчислювального експерименту для системи «епоксидна матриця – скляне волокно» побудовано регресійну модель і визначено оптимальні параметри структури композиції: об'ємна частка волокон  $V_f=0.56$ , орієнтація волокон  $\theta=12^\circ$ .

Отримано кількісні результати оптимізації: ефективний модуль пружності  $E_c=41.8$  ГПа, питома міцність 0.326 кН·м/кг. Відхилення від експериментальних даних не перевищує 7%, що підтверджує достовірність запропонованого підходу.

Обчислювальний експеримент за нелінійною моделлю дає можливість визначити: оптимальну кількість отверджувача – 8,05 мас. ч.; оптимальну

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		79

кількість модифікатора – 0,003 мас. ч. (мінімально допустима межа); оптимальну об'ємну частку піску – 0,411 (мінімально допустима межа). За таких параметрів композиту одержано запланований динамічний модуль пружності композиційного матеріалу  $E_c \approx 6000$  МПа.

б) Практичне значення роботи полягає у можливості застосування розробленої методики для прогнозування властивостей нових композиційних матеріалів, скорочення обсягів натурних експериментів і підвищення ефективності процесів інженерного проєктування.

Таким чином, виконане дослідження підтверджує ефективність методів параметричної оптимізації в задачах керування фізико-механічними властивостями композиційних матеріалів та відкриває перспективи для подальшого розвитку адаптивних і комп'ютеризованих систем проєктування композицій нового покоління.

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		80



[8 Ukrainian Composites – "Чому вуглепластик – майбутнє". URI:](https://ukrainian.t-composite.com/%D0%B1%D0%BB%D0%BE%D0%B3/Why-carbon-fiber-composite-materials-are-the-future-light-cavalry-of-the-military-industry-a-weapon-)

<https://ukrainian.t-composite.com/%D0%B1%D0%BB%D0%BE%D0%B3/Why-carbon-fiber-composite-materials-are-the-future-light-cavalry-of-the-military-industry-a-weapon->

9 Композитні матеріали з вуглецевого волокна. URI: <https://ua.hgcomposites.com/info/carbon-fiber-advanced-aircraft-structures-83345372.html>

10 Алієв Р. А., Климчук О. О. Композиційні матеріали та їх застосування в машинобудуванні. – К.: Наук. думка, 2020. – 256 с.

11 Маліновський В. М., Беляєв Ю. І. Фізико-механічні властивості полімерних композитів. – Харків: ХНУРЕ, 2019. – 212 с.

12 Hashin Z., Shtrikman S. A variational approach to the theory of the elastic behavior of multiphase materials. Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 1963. – Vol. 11, No. 2. – P. 127–140.

13 Voigt W. Über die Beziehung zwischen den beiden Elasticitätsconstanten isotroper Körper. – Annalen der Physik, 1899. – Bd. 274. – S. 573–587.

14 Reuss A. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle. ZAMM, 1939. – Bd. 9. – S. 49–58.

15 Гнатюк І. М., Поліщук О. П. Математичне моделювання в задачах матеріалознавства. – Львів: Видавництво ЛНУ, 2021. – 188 с.

16 Gibson R. F. Principles of Composite Material Mechanics. – CRC Press, 2016. – 703 p.

17 Підвисоцький І. В., Мельник А. П. Оптимізація конструкцій із композиційних матеріалів. – Дніпро: ДНУ, 2022. – 174 с.

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		82

18 Гребенюк С.М., Смолянкова Т.М., Клименко М.І., Кудін О.В. (2020). Гомогенізація різномодульних композитів при їх поздовжньому деформуванні. *Mechanics of Composite Materials*. DOI: 10.15587/1729-4061.2020.199968

19 Сандраков Г. (2025). Гомогенізація та моделювання процесів у композитах. Доповідь на міжнародній конференції з механіки композитних матеріалів. URI: <https://journal.comp-sc.if.ua/test/index.php/ITCM/article/view/699>

20 Шваб'юк Р.О. (2022). Математичні моделі деформування композитних плит і балок середньої товщини. Львів: Львівська політехніка. 250 с.

21 Deb K. *Multi-objective optimization using evolutionary algorithms*. – Wiley, 2001. – 497 p.

22 Федоренко В. М. Математичні методи оптимізації та моделювання технічних систем. – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2020. – 228 с.

23 Патон Б. Є., Дрозд В. А. Новітні технології створення композиційних матеріалів. – К.: Ін-т електрозварювання ім. Є. О. Патона НАН України, 2018. – 296 с.

24 Tsai S. W., Hahn H. T. *Introduction to Composite Materials*. – Technomic Publishing, 1980. – 423 p.

25 Sultan, M. T. H., Arulvel, S., & Jayakrishna, K. (Eds.). (2022). *Composite and Composite Coatings: Mechanical and Tribology Aspects*. CRC Press.

26 De Jong, A., Jansen, M., Van Dijk, J., & Meyer, J. (2021). Analysis of Innovative Practices in Advanced Materials and Structural Engineering. *Fusion of Multidisciplinary Research, An International Journal*, 2(1), 178-188.

27 Pilia, G. (2021). Machine learning in materials science: From explainable predictions to autonomous design. *Computational Materials Science*, 193, 110360.

28 Gay, D. (2022). *Composite materials: design and applications*. CRC press.

29 Jones, R. M. (2018). *Mechanics of composite materials*. CRC press.

					<i>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</i>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		83

30 Vieira, A. F. C., Filho, M. R. T., Eguea, J. P., Ribeiro, M. L. (2024). Optimization of Structures and Composite Materials: A Brief Review. Eng, 5(4), 3192-3211.

31 Behrens B.-A., Bouguecha A., Lüken I., Mielke J., Bistron M. 5.11 - Tribology in Hot Forging, Editor(s): Saleem Hashmi, Gilmar Ferreira Batalha, Chester J. Van Tyne, Bekir Yilbas, Comprehensive Materials Processing, Elsevier, 2014. P. 211-234.

32 Guo, K., Yang, Z., Yu, C. H., & Buehler, M. J. (2021). Artificial intelligence and machine learning in design of mechanical materials. Materials Horizons, 8(4), 1153-1172.

33 Zeng, Q., Zhou, H., Huang, J., & Guo, Z. (2021). Review on the recent development of durable superhydrophobic materials for practical applications. Nanoscale, 13(27), 11734-11764.

34 Szymanski, N. J., Rendy, B., Fei, Y., Kumar, R. E., He, T., Milsted, D., ... & Ceder, G. (2023). An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of novel materials. Nature, 624(7990), 86-91.

35 Чорний Ю. О., Білик П. П. Експериментальні дослідження полімерних композитів із волокнистим армуванням. Вісник КНУТД, 2023. – №4. – С. 75–82.

36 Peters S. T. Handbook of Composites. – Springer, 2019. – 1120 p.

37 Ashby M. F. Materials Selection in Mechanical Design. – Elsevier, 2017. – 660 p.

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		84

# ДОДАТКИ

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		85

## Додаток А



23.09.2025 р.	Програма
16:00-18:00	<b>СЕКЦІЯ 6</b> Проблеми матеріалознавства
ГОЛОВА	Доктор технічних наук, професор Гречанюк М.І.
16:00-16:15	Гречанюк В.Г., Шаповалов В.О. Особливості формування конденсатів Si-Ni, отриманих методом електронно-променевого випаровування-конденсації
16:15-16:30	Маценко О. В., Гречанюк І. М. Структура тугоплавких матеріалів на основі титану, отриманих методом електронно-променевого випаровування-конденсації
16:30-16:45	Іщук А. Ю., Драч І. В., Диха М. О. Параметрична оптимізація фізико-механічних властивостей композиційних матеріалів
16:45-18:00	Круглий стіл по проблемам матеріалознавства

Іщук А. Ю., Драч І. В., Диха М. О. Параметрична оптимізація фізико-механічних властивостей композиційних матеріалів // Сучасні досягнення в науці та освіті : зб. пр. XX Міжнар. наук. конф., 18–25 верес. 2025 р., м. Нетанія (Ізраїль). Хмельницький : ХНУ, 2025. С. 124-131.

URI: <https://elar.khmnmu.edu.ua/handle/123456789/19577>



					<b>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</b>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		86



## Додаток Б

**Python-скрипт** для побудови 3D-графіка поверхні динамічного модуля пружності  $E_d$  у залежності від кількості отверджувача  $x_1$  і модифікатора  $x_2$ , при фіксованому значенні піску  $x_3$

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
4
5 # Цільова функція Ed
6 def calculate_Ed(x1, x2, x3):
7     term1 = -0.6527 * x1**3 + 18.032 * x1**2 - 78.428 * x1 + 3633.7
8     term2 = 1 + 11 * x2**1.7
9     term3 = 1 + 2.5 * x3 + 14.1 * x3**2
10    return term1 * term2 * term3
11
12 # Діапазони значень
13 x1_vals = np.linspace(8, 25, 100) # отверджувач
14 x2_vals = np.linspace(0, 20, 100) # модифікатор
15 x3_fixed = 0.57 # пісок
16
17 # Створення сітки
18 X1, X2 = np.meshgrid(x1_vals, x2_vals)
19 Z = calculate_Ed(X1, X2, x3_fixed)
20
21 # Побудова 3D-графіка
22 fig = plt.figure(figsize=(10, 7))
23 ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
24 surf = ax.plot_surface(X1, X2, Z, cmap='viridis', edgecolor='none')
25
26 # Підписи
27 ax.set_title(f"Динамічний модуль пружності  $E_d(x_1, x_2)$  при  $x_3 = {x3\_fixed}$ ")
28 ax.set_xlabel("Отверджувач  $x_1$  (мас. ч.)")
29 ax.set_ylabel("Модифікатор  $x_2$  (мас. ч.)")
30 ax.set_zlabel("Модуль пружності  $E_d$  (МПа)")
31
32 fig.colorbar(surf, ax=ax, shrink=0.5, aspect=10)
33 plt.tight_layout()
34 plt.show()
35
```

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		88

Повний Python-скрипт для **оптимізації** динамічного модуля пружності  $E_d$  епоксиполіуретанового композиту в межах заданих обмежень:

```
1 import numpy as np
2 from scipy.optimize import minimize
3
4 # Цільова функція (мінус Ed, бо будемо мінімізувати)
5 def objective(x):
6     x1, x2, x3 = x
7     term1 = -0.6527 * x1**3 + 18.032 * x1**2 - 78.428 * x1 + 3633.7
8     term2 = 1 + 11 * x2**1.7
9     term3 = 1 + 2.5 * x3 + 14.1 * x3**2
10    Ed = term1 * term2 * term3
11    return -Ed # Мінімізація негативного значення – це максимізація Ed
12
13 # Межі змінних: [мін, макс]
14 bounds = [
15     (8, 25), # x1 – отверджувач (мас. частин)
16     (0, 20), # x2 – модифікатор (мас. частин)
17     (0.41, 0.57) # x3 – кварцовий пісок (об'ємна частка)
18 ]
19
20 # Початкове припущення (усереднені значення)
21 x0 = [15, 10, 0.5]
22
23 # Запуск оптимізації
24 result = minimize(objective, x0, bounds=bounds)
25
26 # Вивід результатів
27 if result.success:
28     x_opt = result.x
29     Ed_max = -result.fun # повертаємо позитивне значення
30     print(" Оптимальні значення:")
31     print(f" Отверджувач (x1): {x_opt[0]:.2f} мас. ч.")
32     print(f" Модифікатор (x2): {x_opt[1]:.2f} мас. ч.")
33     print(f" Кварцовий пісок (x3): {x_opt[2]:.2f} об'єм. частка")
34     print(f"\n Максимальний динамічний модуль пружності E_d: {Ed_max:.2f} МПа")
35 else:
36     print(" Оптимізація не вдалася.")
37
```

					КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		89

Додаток В  
Презентаційний матеріал

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА МАГІСТРА



**ПАРАМЕТРИЧНА ОПТИМІЗАЦІЯ  
ФІЗИКО-МЕХАНІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ  
КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ**

Виконав : студент групи МТВАм-24-1  
Іщук А. Ю.

Керівник : д.т.н., професор Драч І.В.

**Кафедра трибології, автомобілів і матеріалознавства**



**МЕТА** кваліфікаційної роботи :

розроблення методів параметричної оптимізації фізико-механічних властивостей композиційних матеріалів на основі математичного моделювання їхньої структури та поведінки під дією зовнішніх навантажень.

**ОБ'ЄКТ** дослідження – композиційні матеріали з полімерною матрицею, армовані частинковими наповнювачами.

**ПРЕДМЕТ** дослідження – процес параметричної оптимізації фізико-механічних властивостей композиційних матеріалів із використанням математичного моделювання та методів обчислювальної оптимізації.

2

					<b>КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ</b>	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат		90

## ЗАВДАННЯ кваліфікаційної роботи :

- провести аналіз сучасних підходів до моделювання та оптимізації композиційних матеріалів. На основі аналізу результатів сучасних досліджень в галузі створення нових матеріалів узагальнити алгоритм проектування композитів з заданим комплексом властивостей;
- визначити основні параметри, що впливають на фізико-механічні властивості композиційних систем ;
- побудувати математичну модель взаємозв'язку між структурними параметрами та показником деформованості матеріалу;
- розробити методику параметричної оптимізації із використанням чисельних методів та обчислювального експерименту;
- на прикладі епоксиполіуретанового композиту застосувати методику підбору концентрацій компонентів із використанням емпіричних даних і аналітичного підходу.

3

## РЕЗУЛЬТАТИ АНАЛІЗУ ПРЕДМЕТНОЇ ОБЛАСТІ

### ПОРІВНЯЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІ

Параметр	Полімерні	Металеві	Керамічні	Вуглецеві
Щільність	Низька (1,2-1,43)	Висока	Середня-висока	Низька
Теплостійкість	50-320°C	Висока	>1200°C	Висока (до 400°C в повітрі, >2000°C без доступу кисню)
Технологічність	Висока	Середня	Низька	Низька
Вартість	Низько-середня	Висока	Висока	Дуже висока
Корозійна стійкість	Висока	Середня	Дуже висока	Висока
Міцність/жорсткість	Середня	Дуже висока	Висока	Дуже висока
Застосування	Масове	Спеціалізоване	Екстремальні умови	Екстремальні умови

## ПІДХОДИ ДО МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ КОМПОЗИТІВ

- Мікромеханічні – аналіз на рівні фаз (волокно/матриця), правила сумішей, самоузгодження
- Мезомеханічні – представлювальний елементарний об'єм (RVE), FEM з реальною мікроструктурою, гомогенізація
- Макромеханічні – анізотропна теорія пружності, моделі пошкодження та в'язкопластичності
- Мультишкальні – зведення шкали (scale bridging), зворотна гомогенізація, інтеграція мікро → макро

5

Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат

КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ

Арк.

91

## МЕТОДИ ПАРАМЕТРИЧНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ КОМПЗИТИВ

- **Градiєнтнi методи** – найшвидше сходження, чутливі до локальних екстремумів (SQP, MMA)
- **Еволюційні алгоритми** – глобальний пошук, без похідних (генетичні, частинки рою)
- **Метасурогатні моделі** – заміна FEM на RSM/Kriging/нейромережі, скорочення обчислень у 100–1000 разів
- **Топологічна оптимізація** – розподіл матеріалу в просторі, SIMP, BESO для анізотропії
- **Мета-евристичні** – поєднання алгоритмів, адаптивні стратегії пошуку
- **Робастна оптимізація** – врахування розкиду параметрів, надійність-6σ
- **Багатокритеріальна** – Pareto-фронт, компроміси маса/міцність/вартість

6

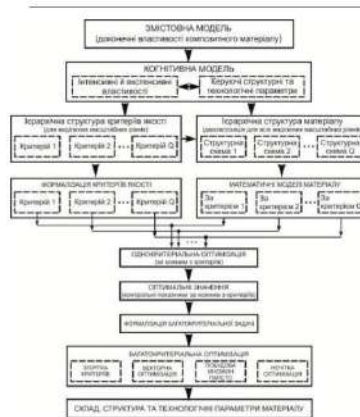
## МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА МЕТОДИКА ПАРАМЕТРИЧНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ

### МЕТОДИКА ПРОВЕДЕННЯ ПАРАМЕТРИЧНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ

1. **Формулювання мети** дослідження – визначення оптимальних характеристик матеріалу (наприклад, максимальна міцність при мінімальній густині).
2. **Вибір системи параметрів** – встановлення факторів, що впливають на фізико-механічні властивості.
3. **Побудова математичної моделі** – опис залежностей між параметрами й цільовими показниками.
4. **Проведення обчислювального експерименту** – варіювання параметрів у межах допустимих значень та обчислення результатів.
5. **Аналіз результатів та пошук оптимуму** – використання методів оптимізації (градієнтних, генетичних, стохастичних алгоритмів).
6. **Перевірка адекватності моделі** – порівняння розрахункових результатів з експериментальними даними.

7

## ПОБУДОВА УЗАГАЛЬНЕНОГО АЛГОРИТМУ СИНТЕЗУ КОМПЗИТНОГО МАТЕРІАЛУ ІЗ ЗАДАНИМ КОМПЛЕКСОМ ВЛАСТИВОСТЕЙ



Розглянутий у роботі підхід до створення композитних матеріалів полягає у поданні їх як систем, що дозволяє при їх синтезі використовувати методи системного аналізу та результати моделювання кінетичних процесів формування фізико-механічних характеристик матеріалів для керування їх якістю.

8

Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат

КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ

Арк.

92

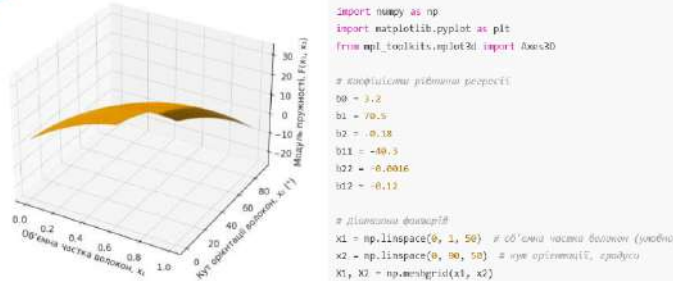


## РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕНЬ ТА ЇХ АНАЛІЗ

### ПОБУДОВА РЕГРЕСІЙНОЇ МОДЕЛІ

На основі результатів обчислювального експерименту було побудовано квадратичну регресійну модель залежності ефективного модуля пружності від параметрів структури:

$$E_c = b_0 + b_1 V_f + b_2 \theta + b_{11} V_f^2 + b_{22} \theta^2 + b_{12} V_f \theta.$$



12

## РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕНЬ ТА ЇХ АНАЛІЗ

### ОПТИМІЗАЦІЯ ПАРАМЕТРІВ

За результатами обчислень встановлено, що оптимальні значення є:

$$V_f^* = 0.56, \theta^* = 12^\circ,$$

що забезпечує:

$$E_c^* = 41.8 \text{ ГПа}, \sigma_c/\rho_c = 0.326 \text{ кН}\cdot\text{м/кг}.$$

Таким чином, при об'ємній частці армуючих волокон близько 55–60% і їхній орієнтації під малим кутом до напрямку навантаження досягається оптимальне співвідношення міцності та густини матеріалу.

13

## РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕНЬ ТА ЇХ АНАЛІЗ

### ЗАДАЧА ПРОЄКТУВАННЯ КОМПОЗИЦІЙНОГО МАТЕРІАЛУ З ЗАДАНИМИ МЕХАНІЧНИМИ ВЛАСТИВОСТЯМИ

Узагальнене рівняння, яке описує залежність динамічного модуля пружності епоксиполіуретанового композиту від кількості вихідних компонентів:

$$E_c = (-0.653 \cdot M_m^3 + 18.032 \cdot M_m^2 - 78.428 \cdot M_m + 3500.500) \times (1 + 11 \cdot M_{\text{mod}}^{1.7}) \cdot (1 + 2.5 \cdot \phi + 14.1 \cdot \phi^2)$$

$E_m$  – модуль пружності матриці;

$M_{\text{mod}}$  – кількість модифікатора в масових частках на 100

масових часток смоли –  $x_1$  ;

$M_m$  – кількість отверджувача в масових частках на 100 масових

часток смоли –  $x_2$  ;

$\phi$  – об'ємний вміст наповнювача –  $x_3$  .

14

Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат

КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ

Арк.

94

## РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕНЬ ТА ЇХ АНАЛІЗ

### ЗАДАЧА ПРОЄКТУВАННЯ КОМПОЗИЦІЙНОГО МАТЕРІАЛУ З ЗАДАНИМИ МЕХАНІЧНИМИ ВЛАСТИВОСТЯМИ

#### Формалізація задачі

$$F(x_1, x_2, x_3) = \left| 6000 - \left( -0,653 \cdot x_1^3 + 18,032 \cdot x_1^2 - 78,428 \cdot x_1 + 3500,500 \right) \times \right. \\ \left. \times \left( 1 + 11 \cdot x_2^{1,7} \right) \cdot \left( 1 + 2,5 \cdot x_3 + 14,1 \cdot x_3^2 \right) \right|$$

$$8 \leq x_1 \leq 25;$$

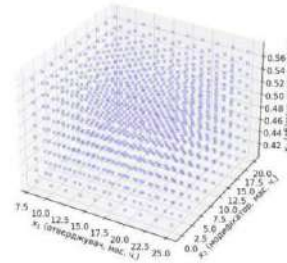
$$0 \leq x_2 \leq 20;$$

$$0,41 \leq x_3 \leq 0,57.$$

Point := Minimize (F, x, y, z)

Point =  $\begin{bmatrix} 8,05 \\ 0,003 \\ 0,411 \end{bmatrix}$

F(8,05, 0,003, 0,411) = 0,015

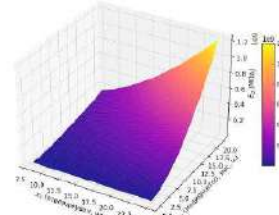
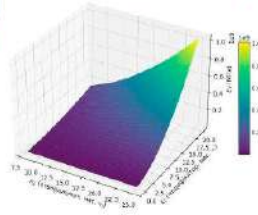


15

## РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕНЬ ТА ЇХ АНАЛІЗ

### ЗАДАЧА ПРОЄКТУВАННЯ КОМПОЗИЦІЙНОГО МАТЕРІАЛУ З ЗАДАНИМИ МЕХАНІЧНИМИ ВЛАСТИВОСТЯМИ

#### Аналіз розв'язку оптимізаційної задачі



Поверхня залежності динамічного модуля пружності  $E_d$  від концентрацій отверджувача та модифікатора (при фіксованому вмісту кварцового піску  $\phi = 0,49 - a$ ;  $\phi = 0,55 - b$ )

16

## Висновки

1. Проаналізовано сучасний стан досліджень у галузі композиційних матеріалів. Визначено, що розвиток методів математичного моделювання та оптимізації є ключовим напрямом підвищення ефективності створення нових композиційних систем із наперед заданими властивостями.
2. Узагальнено фізико-механічні характеристики композиційних матеріалів та виявлено основні фактори, що впливають на їх формування: тип матриці, властивості наповнювача, об'ємна частка армуючої фази, орієнтація волокон і параметри технологічного процесу.
3. Розроблено математичні моделі визначення ефективного модуля пружності композиційного матеріалу на основі моделі Войта-Рейсса з урахуванням орієнтації армуючих волокон, одно факторної оптимізації, нелінійної оптимізації. Моделі дозволяють описати зміну властивостей композиції при варіюванні структурних параметрів.
4. Запропоновано методіку параметричної оптимізації.
5. Проведено обчислювальні експерименти за кожною моделю.

17

Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дат

КРТАМ 25 24341. 000 ПЗ

Арк.

95