

УДК 667.6:004.8

Прогнозирование свойств эрозионностойких лакокрасочных покрытий с использованием машинного обучения

Кирпаль Юлия Германовна^{1,2(*)}

kirpaLiul@yandex.ru

SPIN-код: 8593-2788

Силаева Анна Александровна²

aasilaevaаа@gmail.com

SPIN-код: 8104-5527

¹ МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия² РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

Аннотация. Разработка новых лакокрасочных материалов (ЛКМ) традиционно опирается на ресурсоемкий эмпирический подход. В работе предложена методология применения машинного обучения для ускоренного проектирования рецептур эрозионностойких покрытий. На основе анализа литературы выявлены ключевые параметры (входные переменные), определяющие стойкость к эрозии. Для прогнозирования предложено использовать стандартные механические показатели как целевые переменные. Разработаны рецептуры для формирования базы данных, на которой планируется обучать интерпретируемые ML-модели для прямого и обратного инжиниринга ЛКМ.

Ключевые слова: машинное обучение, эрозионностойкие покрытия, лакокрасочные материалы, прогнозирование свойств, полимерные композиты, функциональные наполнители

Predicting the properties of erosion - resistant paint coatings using machine learning

Kirpal Yulia Germanovna^{1,2(*)}

kirpaLiul@yandex.ru

SPIN-code: 8593-2788

Silaeva Anna Alexandrovna

aasilaevaаа@gmail.com

SPIN-code: 8104-5527

¹ BMSTU, Moscow, Russia² D.I. Mendeleev Russian University of Chemical Technology, Moscow, Russia

Abstract. The development of new paint materials is traditionally based on a resource-intensive empirical approach. The paper proposes a methodology for the application of machine learning for accelerated design of formulations of erosion-resistant coatings. Based on the literature analysis, the key parameters determining erosion resistance have been identified. It is proposed to use standard mechanical indicators as targets for prediction. Some formulations have been developed for the creation of a database on which it is planned to train interpreted ML models for direct and reverse engineering of paint coatings.

Keywords: machine learning, erosion-resistant coatings, paint materials, property prediction, polymer composites, functional fillers

Введение. Эрозионностойкие лакокрасочные покрытия (ЛКП) применяются во многих областях промышленности (авиации, кораблестроении). При разработке новых лакокрасочных материалов (ЛКМ) на основе современных функциональных наполнителей специалисты традиционно опираются на эмпирические методы и многолетний опыт, при этом цикл разработки нового востребованного материала занимает большое количество времени и является весьма ресурсоемким. Цифровизация материаловедения открывает новые возможности для ускорения создания таких материалов [1]. Одним из перспективных инструментов является машинное обучение (ML), уже распространяющееся в области синтеза новых полимеров, создания полимерных композитных материалов (ПКМ) [2, 3]. Учитывая близость ЛКМ к ПКМ, логичным является постановка задач оптимизации разработки рецептур ЛКМ с учетом требуемых характеристик покрытия и решения обратной задачи с помощью ML.

Методы и материалы; результаты. Поставленная задача включает в себя поиск подходящих баз данных, алгоритмов машинного обучения, выявление входных и выходных переменных модели. Ввиду отсутствия открытых баз данных по рецептурам ЛКП, исследование основано на экспериментальных выборках. Для выявления целевых переменных модели (targets) на базе собранных из научной литературы данных [4, 5] была составлена ограниченная выборка, содержащая записи о физико-механических свойствах ЛКП, а также о стойкости покрытий к газокapельной эрозии. Корреляционный анализ выявил заметную связь между эрозионной стойкостью и динамическим модулем сдвига, пределом прочности, что согласуется с известными моделями [6], а также подтвердил гипотезу о важности адгезионной прочности покрытия. Также установлена связь эрозионной стойкости с твердостью и ударной вязкостью [7]. Таким образом, в качестве целевых переменных, вместо сложно измеримой эрозионной стойкости [8], можно использовать перечисленные выше стандартные механические показатели. Учтена необходимость прогнозирования интервалов значений, а не точечных оценок.

Установлено, что в качестве входных переменных (features) следует включать те детерминированные факторы, которые вносят наибольший вклад в физико-механические свойства покрытий. Это молекулярная масса между поперечными связями сшивки [8], химические свойства, гибкость цепей полимера [9], поверхностные свойства наполнителей, соотношение компонентов в покрытии, реологические свойства ЛКМ [10], параметры нанесения материала [11].

Учитывая опыт предсказания свойств ПКМ и ЛКМ [12, 13], было также выяснено, что для небольших выборок целесообразно использовать интерпретируемые алгоритмы, например, метод опорных векторов (SVM), множественную линейную регрессию (MLR), деревья решений (regression trees).

Для формирования однородной базы данных разработаны и испытываются рецептуры модельных эрозионностойких ЛКМ с функциональными наполнителями (нитевидный ZnO, волластонит, тальк).

Закключение. На основе создаваемой базы данных модельных рецептур, планируется обучение ML-моделей. Их анализ (например, Causal Inference, SHAP) при этом может указать на новые связи, не замеченные ранее исследователями, и, соответственно, повысить точность предсказаний интересующих свойств покрытий. Обученную и усовершенствованную модель в дальнейшем необходимо будет апробировать в лабораторной практике, выполнив дополнительные тестовые рецептуры. Успех работы откроет возможности для обратного инжиниринга рецептур ЛКМ, и расширения подхода на другие типы защитных покрытий.

Список источников

- [1] Jhamb S. et al. A review of computer-aided design of paints and coatings. *Current Opinion in Chemical Engineering*, 2020, vol. 27, pp. 107–120. <https://doi.org/10.1016/j.coche.2019.12.005>
- [2] Xie C. et al. Machine Learning Approaches in Polymer Science: Progress and Fundamental for a New Paradigm. *SmartMat.*, 2025, vol. 6, no. 1. <https://doi.org/10.1002/smm2.1320>
- [3] Jaganathan M. et al. Machine Learning Techniques for the Design and Optimization of Polymer Composites: A Review. *E3S Web of Conferences*, 2023, vol. 428, art. no. 2013. <https://doi.org/10.1051/e3sconf/202342802013>
- [4] Кузнецова В.А., Кузнецов Г.В., Кондрашов Э.К., Владимирский В.Н., Иванникова Н.Н. *Состав для защитного покрытия*. Патент № RU 2290421 C1, 2006.
- [5] Кузнецова В.А. и др. Стойкость лакокрасочных покрытий при воздействии газоабразивной и газокapельной эрозии. *Труды ВИАМ*, 2024, № 4 (134), с. 133–144. <https://doi.org/10.18577/2307-6046-2024-0-4-133-144>
- [6] Кондрашов Э.К., Найденов Н.Д. Эрозионностойкие лакокрасочные покрытия авиационного назначения. Часть 1. Эрозионностойкие лакокрасочные покрытия на основе эпоксидных и полиуретановых пленкообразователей (обзор). *Труды ВИАМ*, 2020, № 2 (86), с. 81–90. <https://doi.org/10.18577/2307-6046-2020-0-2-81-90>
- [7] Zhao Y. et al. Development of erosion equations for removal of organic coating on carbon fiber reinforced polymer surface by plastic abrasive. *Journal of Coatings Technology Research*, 2022, vol. 20, pp. 671–685. <https://doi.org/10.1007/s11998-022-00700-3>
- [8] Zhang Z. et al. Artificial neural network predictions on erosive wear of polymers. *Wear*, 2003, vol. 255, no. 1–6, pp. 708–713. [https://doi.org/10.1016/S0043-1648\(03\)00149-2](https://doi.org/10.1016/S0043-1648(03)00149-2)
- [9] Hill A. et al. Role of free volume in molecular mobility and performance of glassy polymers for corrosion-protective coatings. *Corrosion Engineering Science and Technology*, 2020, vol. 55, no. 2, pp. 145–158. <https://doi.org/10.1080/1478422X.2019.1701237>
- [10] Липатов Ю.С. *Физическая химия наполненных полимеров*. Москва, Химия, 1977, 304 с.
- [11] Галиновский А.Л., Михайлов А.А., Мартысюк Д.А. и др. Анализ износостойкости трехкомпонентных лакокрасочных покрытий с использованием технологии ультразвуковой диагностики. *Технология металлов*, 2024, № 10, с. 18–25. <https://doi.org/10.31044/1684-2499-2024-0-10-18-25>
- [12] Kharb S.S. et al. Machine Learning-Based Erosion Behavior of Silicon Carbide Reinforced Polymer Composites. *Silicon*, 2020, vol. 13, no. 4, pp. 1113–1119. <https://doi.org/10.1007/s12633-020-00497-z>
- [13] Arya R.K. et al. Modeling of Surfactant-Enhanced Drying of Poly(styrene)-p-xylene Polymeric Coatings Using Machine Learning Technique. *Coatings*, 2021, vol. 11, no. 12, art. no. 1529. <https://doi.org/10.3390/coatings11121529>