

УДК 004.942

Разработка системы автоматизированного принятия решений по оптимальному выбору композиционных материалов под заданные условия

Михеев Данил Александрович

mikheev.d@bmstu.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

Аннотация. Рассмотрены подходы к созданию цифровой платформы поддержки инженерных решений для оптимального выбора полимерных композиционных материалов (ПКМ) под заданные условия эксплуатации. Представлена структура базы данных, включающая сведения о составе и свойствах связующих, армирующих наполнителей и ПКМ. Описаны методы решения прямой и обратной задач прогнозирования свойств с применением алгоритмов машинного обучения (регрессия LASSO). Проведена экспериментальная верификация, показавшая точность прогноза 91 % для прямой и 89,5 % для обратной задачи. Сделан вывод о целесообразности применения системы в аэрокосмической, оборонной и машиностроительной промышленности для сокращения сроков и стоимости разработки изделий.

Ключевые слова: полимерные композиционные материалы, база данных, машинное обучение, прогнозирование свойств, оптимизация, автоматизированные системы

Development of an Automated Decision - Making System for the Optimal Selection of Composite Materials under Given Conditions

Mikheev Danil Alexandrovich

mikheev.d@bmstu.ru

BMSTU, Moscow, Russia

Abstract. The paper considers the development of a digital decision-support platform aimed at the optimal selection of polymer composite materials (PCM) for specified operating conditions. The structure of the database is presented, including information on the composition and properties of binders, reinforcing fillers, and composite materials. Methods for solving the direct and inverse problems of property prediction using machine learning algorithms (LASSO regression) are described. Verification results show that the system provides an average prediction accuracy of 91 % for the direct problem and 89.5 % for the inverse problem. The study concludes that the proposed system can be applied to reduce the time and cost of product development in aerospace, defense, and mechanical engineering industries.

Keywords: energy supply, environmental pollution, nanotechnology, ecological balance, specific properties of nanomaterials

Введение. Современное материаловедение характеризуется высокой сложностью задач по выбору и проектированию полимерных композиционных материалов (ПКМ) для различных отраслей промышленности. Актуальной про-

блемой является необходимость снижения времени и стоимости разработки новых изделий, а также минимизация рисков, связанных с использованием недостаточно изученных материалов. Целью настоящей работы является разработка системы автоматизированного принятия решений, обеспечивающей выбор ПКМ с прогнозируемыми свойствами на основе комплексного анализа базы данных и применения алгоритмов машинного обучения [1, 2].

Методы и материалы; результаты. Разрабатываемая система автоматизированного принятия решений включает три функциональных блока: базу данных полимерных композиционных материалов (ПКМ), модуль решения прямой задачи и модуль решения обратной задачи. База данных структурирована по трем направлениям: «ПКМ», «Связующие» и «Армирующие наполнители». Для каждого блока предусмотрены сведения о составе, основных механических и физико-химических характеристиках, справочные данные, технические паспорта и паспорта безопасности, а также сведения о технологиях переработки и производителях компонентов [3].

Блок «ПКМ» содержит данные о составе и ключевых свойствах композитов, включая прочность при растяжении, сжатии и изгибе, модуль упругости, относительные деформации, плотность, коэффициенты термического расширения, межслоевую прочность и другие характеристики. Блок «Связующие» обеспечивает хранение информации о смолах, отвердителях, ускорителях, модификаторах и растворителях, а также параметрах технологического применения (температурные профили, давление, время гелеобразования) [4, 5]. Блок «Армирующие наполнители» содержит сведения о дисперсных наполнителях, тканях, нитях основы и утка, видах плетения, свойствах замасливателей и производителях [6].

Решение прямой задачи заключается в прогнозировании свойств ПКМ на основе свойств компонентов и условий формования. Входные данные формируются посредством выбора компонентов из базы данных. Результатом работы модуля является набор прогнозируемых характеристик композита без необходимости изготовления образцов. Решение обратной задачи направлено на определение состава и технологии изготовления ПКМ по заданному пользователем целевому вектору свойств. В этом случае система возвращает гипотезу состава и технологических параметров, обеспечивающих требуемые характеристики [7].

Для реализации алгоритмов прогноза применены методы машинного обучения. Данные формировались на основе литературных источников и натурных испытаний образцов ПКМ. Предварительная обработка включала преобразование категориальных признаков, очистку и формирование числовой матрицы [8]. Для прогнозирования использована LASSO-регрессия (Least Absolute Shrinkage and Selection Operator), реализованная в библиотеке scikit-learn. Выбор данного метода обусловлен его способностью не только предсказывать значения целевых переменных, но и выполнять отбор наиболее информативных признаков. Обучение проводилось на выборке с разделением в соотношении 80/20.

Для верификации работы системы изготовлены экспериментальные образцы методом горячего прессования, вакуумной инфузии и инъекции связующего. Сопоставление расчетных и экспериментальных данных показало, что при решении прямой задачи средняя относительная ошибка составила 8,6 %, а точность прогноза достигла 91,4 %. При решении обратной задачи ошибка составила 10,5 %, а точность — 89,5 %. Зафиксированные локальные флуктуации отдельных параметров объясняются вариациями партий компонентов и технологических процессов.

Таким образом, разработанный программный комплекс обеспечивает достоверное прогнозирование свойств ПКМ, существенно сокращает необходимость в натурных испытаниях и снижает риск ошибок при выборе материалов и технологий. С увеличением объема данных в базе точность модели будет возрастать, что делает систему перспективным инструментом для практического применения в аэрокосмической, оборонной и машиностроительной промышленности.

Обсуждение. Полученные результаты подтверждают корректность выбора методологического подхода, основанного на интеграции базы данных и методов машинного обучения. Высокая точность прогноза (91,4 % для прямой задачи и 89,5 % для обратной задачи) свидетельствует о том, что модель способна адекватно воспроизводить взаимосвязи между свойствами компонентов и характеристиками композиционных материалов.

При этом зафиксированные локальные флуктуации отдельных параметров отражают естественные вариации, связанные с неоднородностью партий компонентов, технологическими моментами и ограниченностью текущего объема выборки. Эти отклонения не носят системного характера, однако подчеркивают необходимость расширения базы данных и включения большего числа экспериментальных серий для повышения устойчивости модели [9].

Существенным преимуществом разработанной системы является возможность ранжирования альтернативных рецептов по достижимости целевых свойств, что позволяет использовать ее как инструмент поддержки принятия решений в инжиниринговых компаниях и производственных организациях. В отличие от традиционного подхода, основанного на множественных натурных испытаниях, система обеспечивает значительное сокращение временных и финансовых затрат при сохранении высокой достоверности прогноза [10].

Таким образом, применение цифровой платформы открывает перспективу перехода к новому уровню цифрового материаловедения, при котором проектирование ПКМ может осуществляться в виртуальной среде с последующей минимальной экспериментальной проверкой. Дальнейшее развитие работы связано с увеличением объема базы данных, расширением номенклатуры свойств и совершенствованием алгоритмической части для учета сложных нелинейных зависимостей [11].

Заключение. Разработанная система автоматизированного принятия решений по выбору полимерных композиционных материалов продемонстрировала высокую эффективность при решении задач прогнозирования. Полу-

ченные результаты показывают, что интеграция базы данных свойств компонентов и методов машинного обучения позволяет достигать точности прогноза свыше 89 %, что подтверждается сопоставлением расчетных и экспериментальных данных.

Система обеспечивает сокращение объема натурных испытаний и времени на подбор рецептур, снижает вероятность ошибок при внедрении новых материалов и технологий, а также открывает возможность применения виртуальных инструментов для оптимизации проектирования изделий. Перспективность платформы обусловлена ее универсальностью: она может быть использована в аэрокосмической, оборонной, судостроительной, автомобильной и машиностроительной промышленности [9, 10].

Дальнейшее развитие системы связано с расширением базы данных, включением дополнительных параметров компонентов и технологических факторов, а также с применением более сложных алгоритмов машинного обучения для повышения точности и надежности прогнозов. Это позволит формировать научно обоснованные рекомендации для выбора материалов и технологий, создавая основу для перехода к полноформатному цифровому материаловедению [11].

Работа выполнена в рамках программы государственной поддержки центров Национальной технологической инициативы на базе образовательных организаций высшего образования и научных организаций (Центр НТИ «Цифровое материаловедение: новые материалы и вещества» при МГТУ им. Н.Э. Баумана).

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

- [1] Галиновский А.Л., Филимонов А.С., Рогалев Р.С. и др. Исследование баз данных материалов для технологии селективного лазерного плавления. *Электрометаллургия*, 2022, № 3, с. 18–27. <https://doi.org/10.31044/1684-5781-2022-0-3-18-27>
- [2] Терешков А.Г., Турин Ф.Г., Бородулин А.С., Нелюб В.А. Методика оптимизации технологии изготовления препрега на основе термопластичного полимера. *Химическая промышленность сегодня*, 2022, № 5, с. 34–41. https://doi.org/10.53884/27132854_2022_5_34
- [3] Storozhuk I.P., Bulkatov D.P., Khina A.G. et al. Development of Polyethersulfones for Modification of Epoxy Resins. *Polym. Sci. Ser. B*, 2024, vol. 66, pp. 514–523. <https://doi.org/10.1134/S1560090424601481>
- [4] Dzhangurazov E.B., Petrov, T.V., Shapagin A.V., Tretyakov I.V., Korokhin R.A., Kireynov A.V., Alexeeva O.V., Solodilov V.I., Yurkov G.Y., Berlin A.A. Fracture Toughness of Winding Carbon Plastics Based on Epoxy Matrices and Reinforced by Polysulfone Film. *Polymers*, 2025, vol. 17, art. no. 220. <https://doi.org/10.3390/polym17020220>
- [5] Zlobin I., Toroptsev N., Averochkin G. et al. Pre-trained Mol2Vec Embeddings as a Tool for Predicting Polymer Properties. *Chin J Polym Sci.*, 2024, vol. 42, pp. 2059–2068. <https://doi.org/10.1007/s10118-024-3237-y>
- [6] Malashin I., Martysyuk D. Powder particle classification with scanning electron microscopy images using machine learning techniques. *Expert Systems with Applications*, 2025, vol. 286, art. no. 128001.
- [7] Klokoval K.S., Ardabevskaia S.N., Katarzhnova E.Y. et al. Methods for rapid and efficient synthesis of dendrimers, a new impetus for the development of dendrimer materials science. *Russ Chem Bull.*, 2024, vol. 73, pp. 2151–2176. <https://doi.org/10.1007/s11172-024-4337-0>

-
- [8] Galinovskii A.L., Martysyuk D.A., Katkova E.D. et al. Developing a Method of Estimating the Efficiency of Cutting with Abrasive Cutoff Wheels. *Polym. Sci. Ser. D*, 2024, vol. 17, pp. 934–940. <https://doi.org/10.1134/S1995421224701594>
- [9] Storozhuk I.P., Khina A.G., Bulkatov D.P. et al. Synthesis and Study of Melt Processing of Polyarylate-Polysulfone Cardo Block Copolymers. *Polym. Sci. Ser. B*, 2025, vol. 66, pp. 693–702. <https://doi.org/10.1134/S1560090425600275>
- [10] Galkin K.I., Zakharova D.V., Aysin R.R., Danshina A.A., Pak A.M., Sandulenko I.V., Novikov R.A., Egorova K.S. Overcoming the Reversibility in the Diels-Alder Reaction of Bio-Based Electron-Poor Furans with Maleimides Through Liquid-to-Solid Phase Transition. *Int. J. Mol. Sci.*, 2025, vol. 26, art. no. 6550. <https://doi.org/10.3390/ijms26146550>
- [11] Storozhuk I.P., Bulkatov D.P., Khina A.G. et al. Development of Polyethersulfones for Modification of Epoxy Resins. *Polym. Sci. Ser. B*, 2024, vol. 66, pp. 514–523. <https://doi.org/10.1134/S1560090424601481>