

DOI: 10.15593/2499-9873/2022.1.03

УДК 5:004+66.01(075)

**И.В. Гермашев¹, Е.Ф. Феоктистов¹,
Е.В. Дербишер², В.Е. Дербишер²**

¹Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия

²Волгоградский государственный технический университет,
Волгоград, Россия

ОПТИМИЗАЦИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ ПОЛИМЕРНОЙ КОМПОЗИЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НЕЧЕТКОЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Рассмотрены некоторые аспекты анализа полимерных композиционных материалов как сложных систем. При этом система представлена как совокупность одной полимерной матрицы и нескольких активных добавок. В рамках данной работы состав композиции полагается неизменяемым, а управление свойствами композиции осуществляется изменением концентрации ингредиентов. В работе была разработана математическая модель, позволяющая вычислить оптимальное содержание компонентов, направленное на улучшение определенных свойств полимерной композиции. Получение такой модели отчасти затруднено сложными взаимодействиями между компонентами, однако для этого было получено решение в рамках одного определенного состава. Тем не менее перенести эти результаты на другие составы в данном случае не удалось, и получить общую математическую модель для произвольного состава не получилось. Поэтому для решения этой проблемы в данной работе была использована модель черного ящика. Представлены основные методы исследования полимерных композиций, рассмотрена их систематизация по принципу управления свойствами на разных этапах синтеза материала. В работе был использован вариант управления свойствами полимерной композиции с помощью активных добавок. Обоснована актуальность задачи, связанной с разработкой методов оценки свойств и управления последними путем ранжирования концентраций ингредиентов полимерной матрицы. В результате этого получена математическая модель оптимизации состава полимерной композиции. В ней учитывается не только положительное, но и отрицательное влияние ингредиентов на весь состав полимерной матрицы. Также проведены вычислительные эксперименты для поиска оптимальной концентрации активных добавок в составе полимерной композиции в условиях парного взаимодействия добавок. Модель представлена и решена в виде задачи квадратичного программирования на конкретном примере. Были использованы различные граничные значения содержания ингредиентов. Полученные результаты в явной форме демонстрируют зависимость свойств химической системы от концентрации конкретных ингредиентов. По результатам двух вычислительных экспериментов при разных граничных условиях проведен расчет оптимальной концентрации для максимального проявления двух свойств. В работе также представлен вектор дальнейших действий, перспективы доработки модели и возможные области применения указанной модели.

Ключевые слова: оптимизация, композиционные материалы, нечеткие числа, математическая модель, квадратичное программирование, полимерная матрица, активные добавки, оптимизация Парето, химическая структура.

I.V. Germashev¹, E.F. Feoktistov¹,
E.V. Derbisher², V.E. Derbisher²

¹Volgograd State University, Volgograd, Russian Federation

²Volgograd State Technical University, Volgograd, Russian Federation

OPTIMIZATION OF A MULTICOMPONENT POLYMER COMPOSITION USING A FUZZY MATHEMATICAL MODEL

Some aspects of the analysis of polymer composite materials as complex systems are considered. In this case, the system is presented as a combination of one polymer matrix and several active additives. Within the framework of this work, the composition is assumed to be unchanged, and the properties of the composition are controlled by changing the concentration of the ingredients. In work, a mathematical model was developed that calculates the optimal content of components to improve specific properties of the polymer composition. Obtaining such a model is partly hampered by complex interactions between components, but a solution was obtained within the framework of one specific composition. Nevertheless, it was impossible to transfer these results to other compositions in this case, and it was impossible to obtain a general mathematical model for an arbitrary composition. Therefore, to solve this problem, a black-box model was used in this work. The main methods for studying polymer compositions are presented; their systematization is considered according to the principle of controlling properties at different stages of material synthesis. In this work, a variant of controlling the properties of the polymer composition using active additives was used. The urgency of the problem related to the development of methods for assessing the properties and control of the latter by ranking the concentrations of the ingredients of the polymer matrix has been substantiated. As a result, a mathematical model for optimizing the composition of the polymer composition was obtained. It takes into account the positive and the negative influence of the ingredients on the entire composition of the polymer matrix. Also, computational experiments were carried out to find the optimal concentration of active additives in the composition of the polymer composition under conditions of pair interaction of additives. The model is presented and solved using a quadratic programming problem using a specific example. Different cut-off values were used for the content of the ingredients. The results obtained clearly demonstrate the dependence of the properties of a chemical system on the concentration of specific ingredients. Based on the results of two computational experiments under different boundary conditions, the optimal concentration was calculated for the full manifestation of two properties. The paper also presents a vector of further actions, prospects for improving the model, and possible areas of application of this model.

Keywords: optimization, composite materials, fuzzy numbers, mathematical model, quadratic programming, polymer matrix, active additives, Pareto optimization, polymer compositions, chemical structure.

Введение

Композиционные материалы широко распространены в современном мире и представляют собой комплексные системы. Синтез подобных систем связан с новыми требованиями и запросами производств в различных сферах человеческой деятельности. Контроль и определение свойств композиций является многокритериальной задачей, которая решается различными методами, включая эмпирические, математические и квантово-химические [1]. Актуальность

полимеров в современности объясняется целым набором достаточно уникальных физических и химических свойств, которые обуславливаются цепным строением молекул. Упругость, определённая степень деформации и стойкость при больших температурах – лишь небольшой перечень возможных свойств таких материалов.

Изделия из полимерных композиций находят ключевое применение в промышленности, строительстве, машиностроении, радиоэлектронике и многих других сферах человеческой деятельности. Надежность и долговечность обуславливают их широкое использование, однако каждый индивидуальный случай требует учета множества факторов. Из-за сложной и комплексной природы химической системы полимерной матрицы эти факторы учесть в полной мере достаточно непросто. Более того, часто полимеры наполняют активными и пассивными добавками с целью получения определенных свойств, упрощения технологического процесса, приобретения функциональности. В связи с этим создание новых синтезируемых материалов не сопровождается значительной предварительной работой с высокой точностью. Создание и оценка, как правило, сопровождаются различными эмпирическими этапами, несмотря на наличие теоретического анализа. В связи с этим использование математических методов и средств для моделирования представляется крайне перспективным в этой области, причем независимо от этапа проектирования композиционного продукта.

Одни из распространенных композиционных материалов синтезированы более 50 лет назад. Актуальные задачи сосредоточены больше вокруг оптимизации свойств известных полимеров, хотя синтез ведется и в новых направлениях. Как следствие, важной задачей является определение и идентификация свойств данных химических систем в контексте определенных практических задач. Чаше и проще проводить анализ полимеров экспериментальным путем, что, как правило, сопровождается использованием дорогостоящей техники и достаточно масштабного и затратного технологического процесса. Таким образом объясняется актуальность использования неэмпирических методов на основе математических, информационных и химических подходов, а именно их прогностическая функция [2–4].

Как правило, синтез полимерных композиций насчитывает три этапа, на каждом из которых существует особая методика и подходы

по управлению свойствами. Первый этап определяется еще до начала эмпирического синтеза и называется подход «структура – свойство». Обычно на этой стадии свойства полимерной композиции прогнозируют по структуре мономера [5]. Технологические разработки, такие как нейронные сети, достаточно часто используются для поиска зависимостей между свойствами химических систем и их структурами [6].

Современным витком в развитии материаловедения полимерных структур являются наноккомпозиты, которые представляют собой комплексные материалы на основе пластичного полимера и его наполнителя – органомодифицированной наноглины [7]. Наноккомпозиты обладают свойствами, превосходящими по различным показателям свойства обычных полимерных композиций, поэтому идентификация этих свойств сейчас особенно актуальна [8–10]. Например, широкое распространение получила модель теплопроводности полимеров, разрабатываемая в разных приближениях, позволяющая оценить различные свойства с помощью системы линейных и дифференциальных уравнений. Эффект достигается армированием наноккомпозитов углеродными нанотрубками [11].

Вторым этапом является возможность управления свойствами при полимеризации материалов [12–14]. Стадия сопровождается различными подходами, которые, тем не менее, встречаются гораздо реже в научной литературе относительно первого и третьего этапов. Как правило, работы в этой сфере рассматривают свободную полимеризацию, так как фундаментальные основы были выведены уже достаточно давно. В качестве примера возможно привести математическое моделирование для описания кинетики и ее влияния на другие свойства химической системы в целом [15].

Наиболее популярным и разработанным в научной литературе выделяется третий этап, на котором происходит управление свойствами полимерных композиций с помощью активных добавок или пассивных наполнителей [16–20]. Однако при этом крайне редко используются предварительные математические расчёты или построения информационных систем. Чаще применяются методы квантовой химии, которые используются для вычисления результатов полимеризации, при контроле определенных ее характеристик. С другой стороны, взаимодействие и влияние активных добавок описывается математически в редких специфических случаях.

Существуют также комплексные методы при идентификации и оценке свойств полимерных композиций. Комплексный метод подразумевает использование подходов каждого из трех выделенных выше этапов. Например, предварительные теоретические расчеты с помощью математических средств моделирования, сопровождение процесса полимеризации контролем и анализом для дальнейших расчетов и оценка результатов и влияния активных и пассивных добавок. Дальнейшее исследование предполагает формирование задач для оптимизации полученного композиционного материала. Такие комплексные подходы практически не встречаются в научной литературе, поэтому актуальность их достаточно высока из-за возможного улучшения качества материала, удешевления производства и распространения применения в новые сферы человеческой деятельности.

Более того, действительно редко встречаются методы математического моделирования, предусмотренные для работы с несколькими полимерными композициями одновременно. Как правило, модели описывают одну полимерную матрицу, в которой рассматриваются мономеры и ингредиенты, а также процессы, возникающие между ними. Квантово-химические методы, которые могут помочь в анализе более сложных систем, представляют собой пока неизученное, но перспективное направление, причем не только для методов моделирования, но и для эмпирических экспериментов. Актуальность объясняется возможностью синтезирования новых свойств, а также новых материалов, которые возможно изучить более детально на предмет свойств химической системы.

Идентификация ингредиентов для проектирования полимерной композиции с необходимыми характеристиками и определение структуры и состава химической системы являются нерешенными задачами в науке. Нередко комплексные композиционные системы описываются с помощью средств нечеткой математики. У метода имеются преимущества, так как данные обычно представлены в диапазонных значениях либо отсутствуют. Задача усложняется нередко полярными мнениями экспертов по одному вопросу или рецептуре, что приводит к необходимости описывать переменные лингвистически. Как результат, отсутствует универсальная модель решения [21; 22].

Внутри химической системы компоненты также тяготеют к взаимодействию, которое из-за комплексности полимерной композиции достаточно сложно описывать. В работе предлагается принять более приближенную модель, где описывается только парное взаимодействие элементов системы. Это является допущением, так как даже в случае парного взаимодействия необходимо учитывать такие переменные, как время, скорость реакции, квантово-химические показатели. Тем не менее подобные модели построены и используются для решения определенного узкого круга задач [21].

Системный анализ и математические модели могут образовывать с методами квантовой химии достаточно сильные инструменты, имеющие прогностическую функцию в отношении свойств полимера, например, предсказание условий полимеризации и структуры после взаимодействия с добавками. В идеальном случае подобные вычисления необходимо проверять эмпирически, чтобы быстро определять релевантность вычислений. Адекватность модели по причинам, указанным выше, не всегда имеется возможность проверять экспериментально.

Перспективным направлением выделяется использование нанокompозитов и гибридных наноматериалов. Множество ученых сосредоточились именно на этих разработках, так как практическое применение полимерных композиций может быть значительно увеличено ввиду заметного увеличения показателей определенных свойств. Однако синтез такого рода продуктов требует еще более детального моделирования и теоретических методов, способных описывать подобные процессы. В связи с этим модель, представленная в работе, может быть разработана на основе описанного подхода.

Широкий спектр свойств огромного числа всевозможных полимеров открывает безграничные возможности для анализа. В связи с этим актуализация обобщенности в рассмотренных подходах является приоритетной задачей, имеющей в долгосрочной перспективе серьезный прикладной смысл.

В статье поставлена и решена задача оптимизации набора ингредиентов и добавок для получения необходимых свойств полимерной композиции в условиях парного взаимодействия. Кроме этого, проанализированы два свойства и подобрана оптимальная концентрация каждой добавки после двух вычислительных экспериментов для каждого свойства.

Постановка задачи

Математическое моделирование, как было описано выше, играет важную роль в неэмпирических и полуэмпирических методах идентификации, определения и управления свойствами полимеров. Конечным свойствам каждого композиционного материала предшествовали процессы взаимодействия его компонентов во время полимеризации, воздействия активными добавками. Эти процессы образуют достаточно обширный комплекс факторов, среди которых важной переменной выделяется концентрация ингредиентов. Другие факторы можно выявить обычно только экспериментально, однако за адекватный период времени столько исследований не провести, в том числе с учетом других экономических возможностей. Таким образом, необходимо предварительное моделирование.

Поставим формальную задачу. Пусть задан полимер P . При этом P представляет собой полимерную матрицу, не включающую еще добавки и ингредиенты. Пусть P обладает базовым набором свойств Q_1, \dots, Q_m , где m – количество свойств полимера P . Значения проявления этих свойств зададим через x_1, \dots, x_m соответственно.

В качестве s_1, \dots, s_n обозначим ингредиенты, которые вместе с полимерной матрицей P образуют полимерную композицию S . Ингредиенты s_1, \dots, s_n имеют концентрацию c_1, \dots, c_n .

Общая проблема исследования заключается в необходимости найти такие значения c_1, \dots, c_n , которые обеспечивают оптимальный набор свойств Q_1, \dots, Q_m .

В рамках работы решаем более узкую задачу: оптимизируя состав, определяем концентрацию c_1, \dots, c_n добавок и s_1, \dots, s_n ингредиентов для наибольшего проявления двух конкретных свойств Q_j и Q_{j+1} где j – фиксированное значение. По результатам вычислительных экспериментов для каждого отдельного свойства определяется оптимальный состав полимерной композиции для лучшего проявления двух свойств одновременно.

Математическая модель

Введем следующие обозначения. Коэффициент $a_{i_1 i_2 j}$ парного влияния добавок:

$$a_{i_1 i_2 j} = x_{i_1 i_2 j} / x_j,$$

где $x_{i_1 i_2 j}$ – проявление свойства композиции после введения добавок s_{i_1} и s_{i_2} в полимер.

Приведенный коэффициент $a_{i_1 i_2 j}$ принимает положительные значения при улучшении свойства и отрицательные при ухудшении:

$$q_{i_1 i_2 j} = a_{i_1 i_2 j} - 1.$$

Общее проявление свойства Q_j всей композиции после введения всех ингредиентов обозначим x'_j . Для x'_j также введем приведенный коэффициент q_j , отражающий влияние всего комплекса добавок на свойство Q_j

$$q_j = x'_j / x_j - 1.$$

Оценка значения q_j приведена в работе [3], где предлагается использовать нечеткую величину

$$\hat{q}_j(x_j) = \exp\left(-\frac{(x_j - \bar{q}_j)}{\delta_j^2} \ln 2\right),$$

где $\bar{q}_j = \frac{\bar{q}_j + \underline{q}_j}{2}$, $\delta_j = \frac{\bar{q}_j - \underline{q}_j}{2}$, $\bar{q}_j = \sum_{i_1=1}^n \sum_{i_2=i_1+1}^n q_{i_1 i_2 j}$,

$$\underline{q}_j = \frac{1}{n} \sum_{i_1=1}^n \sum_{i_2=i_1+1}^n q_{i_1 i_2 j}.$$

Каждая добавка имеет собственную концентрацию в общей системе композиции. Причем в рецептурах часто концентрация веществ задается не точным значением, а диапазоном, поэтому имеет смысл ввести нечеткое \hat{c}_i , которое означает концентрацию ингредиента s_i . При этом добавим в модель возможность управления максимальным и минимальным содержанием ингредиентов нечеткими значениями: через \hat{p}_i^{\min} обозначим минимально возможное содержание s_i , через \hat{p}_i^{\max} обозначим максимально возможное содержание s_i , через \hat{p} обозначим наибольшее суммарное содержание всех добавок, т.е.

$$\sum_{i=1}^n \hat{c}_i \leq \hat{p}, \quad \hat{c}_i \leq \hat{p}_i^{\max}, \quad \hat{c}_i \geq \hat{p}_i^{\min}, \quad i = \overline{1, n}. \quad (1)$$

Эти ограничения позволяют регулировать следующие соотношения. Чрезмерное увеличение содержания добавок может привести к ничтожно малому содержанию полимерной матрицы, что в принципе изменит постановку задачи и поэтому неприемлемо. Второе ограничение позволяет остановить увеличение содержания добавки, например, если дальнейшее увеличение концентрации приводит к слишком слабому эффекту или по иным соображениям. При решении определенных потребительских задач может казаться принципиальным содержание какой-либо добавки в композиции. Это условие отслеживается третьим ограничением.

Варьируя концентрации \hat{c}_i , можно управлять проявлением \hat{q}_j свойства Q_j полимерной композиции, которое описывается следующим соотношением:

$$\hat{q}_j = -\frac{1}{2} \hat{c}^T D \hat{c} + l^T \hat{c}.$$

Таким образом получаем задачу нечеткого программирования.

$$r(\hat{c}) = -\frac{1}{2} \hat{c}^T D \hat{c} + l^T \hat{c} \rightarrow \max_{\hat{c}}.$$

при ограничениях (1), где элементы матрицы $D = (d_{i_1 i_2})$ показывают удельное (на единицу концентрации) взаимодействие пары добавок s_{i_1} и s_{i_2} , а элементы вектора $l = (l_i)$ – удельное воздействие добавки s_i на проявление свойства Q_j . Будем считать, что матрица D и вектор l заданы.

Вычислительный эксперимент

Эксперимент является абстрактным. Конкретный характер подобных вычислений планируется в дальнейших разработках с использованием открытой информации различных рецептов и последующим эмпирическим экспериментом для проверки адекватности и валидности используемой модели. Ранжирование граничных значений в работе взято для демонстрации зависимости проявления свойства от различных концентраций и парных

взаимодействий. В конкретных примерах планируется более детальный подход к выбору количества итераций поиска необходимых ограничений для нивелирования потенциальных негативных эффектов.

Пусть дана полимерная композиция C . В вычислительном эксперименте используются четыре активные добавки $s_1 \dots s_4$, которые имеют концентрацию $c_1 \dots c_4$.

Общее проявление свойства q_j рассчитывается, исходя из проявлений свойства после введенных добавок и его отношению к проявлению свойства чистой полимерной матрицы.

Для решения поставленной задачи квадратичного программирования проведена дефаззификация, чтобы перейти к задаче квадратичного программирования.

$$r(c) = -\frac{1}{2} c^T D c + l^T c \rightarrow \max_c,$$

где c – вектор дефаззифицированных значений концентраций соответствующих добавок.

Возьмем в качестве матрицы D следующую

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 0,5 & 0,75 & 0 \\ 0,5 & 0,5 & 1,3 & 0,6 \\ 0,75 & 1,3 & 1,5 & 0,85 \\ 0 & 0,6 & 0,85 & 1,05 \end{pmatrix},$$

а в качестве $l = (0,25; 1,25; 0,375; 0,5)$.

В начале примем общую долю ингредиентов небольшой, и представим, что она ограничена 30 %, то есть $\hat{p} = 0,3$. Каждый ингредиент имеет верхнюю и нижнюю границы $\hat{p}_i^{\max} = 0,2$ и $\hat{p}_i^{\min} = 0,001$.

Решая получившуюся задачу квадратичного программирования, получим следующие результаты оптимальной концентрации ингредиентов:

$$c^* = (0,19; 0,001; 0,001; 0,09)^T, r(c^*) = 0,107.$$

Таким образом, наилучший эффект будет достигнут в случае добавления 19 % первой и 9 % четвертой добавки соответственно.

При малых концентрациях некоторые активные добавки не в состоянии в полной мере проявить положительный эффект, поэтому для продолжения эксперимента следует увеличить возможные граничные значения.

Примем, что общая доля ингредиентов ограничена $\hat{p} = 0,7$. Каждый ингредиент имеет верхнюю и нижнюю границу $\hat{p}_i^{\max} = 0,5$ и $\hat{p}_i^{\min} = 0,001$. Решая задачу квадратичного программирования, получим

$$c^* = (0,21; 0,001; 0,175; 0,298)^T, r(c^*) = 0,3322.$$

Таким образом, наилучший эффект достигается в случае добавления 21 % первой, 17,5 % третьей и 29,8 % четвертой добавок соответственно. Уровень $r(c)$ полезного действия добавок вырос примерно в 3 раза.

Из вычислительного эксперимента следует, что для принятой матрицы D оптимальной является большая концентрация добавок, в частности третьей добавки, которая проявляет свойства только при увеличении доли содержания в общей композиции. Однако такое увеличение не всегда приносит положительный результат. Следует учитывать, что слишком высокая концентрация определенного ингредиента может повлечь негативные последствия воздействия на полимерную матрицу, например, разрушив химические связи, вызвав реакцию с другим элементом или прекратив положительное влияние на свойства композиции. Эти факторы в предлагаемой модели не учитываются, однако при необходимости могут быть добавлены. Эти модификации могут рассматриваться как одно из направлений развития модели.

Далее приведено решение задачи для альтернативного свойства. В вычислительном эксперименте рассмотрено альтернативное свойство q_{j+1} . Для этого свойства проводятся аналогичные операции для расчета оптимальной концентрации добавок для лучшего его проявления. После произведенных вычислений сравним полученные результаты в двух случаях и приведем к определенной концентрации для лучшего проявления двух свойств, насколько это будет возможно.

Общее проявление еще одного свойства q_{j+1} полимерной композиции рассчитывается, исходя из проявлений свойства после

введённых добавок и его отношения к проявлению свойства одной только полимерной матрицы, без добавок.

Для решения поставленной задачи также проведена дефаззификация, чтобы перейти к задаче квадратичного программирования.

$$r(c) = -\frac{1}{2}c^T Dc + l^T c \rightarrow \max_c,$$

где c – вектор дефаззифицированных значений концентраций четырех соответствующих добавок.

Возьмем в качестве матрицы D следующую

$$D = \begin{pmatrix} 0,8 & 0,4 & 0 & 1 \\ 0,2 & 0,6 & 0,5 & 0,4 \\ 0,35 & 1,2 & 0,75 & 0,15 \\ 0,65 & 0 & 1 & 0,25 \end{pmatrix}$$

а в качестве $l = (0,45; 1,1; 0,5; 0,2)$.

В начале примем общую долю ингредиентов небольшой и представим, что она ограничена 30 %, то есть $\hat{p} = 0,3$. Каждый ингредиент имеет верхнюю и нижнюю границы $\hat{p}_i^{\max} = 0,2$ и $\hat{p}_i^{\min} = 0,001$.

Решая получившуюся задачу квадратичного программирования, получим следующие результаты оптимальной концентрации ингредиентов:

$$c^* = (0,001; 0,166; 0,001; 0,085)^T, r(c^*) = 0,087.$$

Таким образом, наилучший эффект достигается в случае добавления 16,6 % второй и 8,5 % четвертой добавки соответственно.

Однако при малых концентрациях некоторые активные добавки не в состоянии в полной мере проявить положительный эффект, поэтому для продолжения эксперимента следует увеличить возможные граничные значения.

Примем, что общая доля всех ингредиентов ограничена $\hat{p} = 0,7$. Каждая активная добавка также имеет граничные значения $\hat{p}_i^{\max} = 0,5$ и $\hat{p}_i^{\min} = 0,001$.

Решая задачу квадратичного программирования, получим:

$$c^* = (0,05; 0,407; 0,001; 0,21)^T, r(c^*) = 0,211.$$

Таким образом, наилучший эффект достигается, в случае добавления 5 % первой, 40,7 % второй и 21 % четвертой добавок соответственно. Уровень $r(c)$ полезного действия добавок вырос примерно в 2,5 раза.

Из данного вычислительного эксперимента следует, что увеличение концентрации также увеличивает полезное действие активных добавок с учетом парного взаимодействия. Как следствие, можно заключить, что эти добавки лучше проявляются в большем количестве, как для первого свойства, так и для второго. Однако для проявления первого и второго свойства необходимы разные концентрации различных добавок, что предполагает дополнительный анализ результатов.

В ходе проведенных вычислительных экспериментов получены значительно отличающиеся решения. Для Q_j

$$c^* = (0,21; 0,001; 0,175; 0,298)^T, r(c^*) = 0,3322,$$

а для Q_{j+1}

$$c^* = (0,05; 0,407; 0,001; 0,21)^T, r(c^*) = 0,211.$$

В связи с этим возникает вполне резонный вопрос, как поступать, если необходимо оптимизировать оба свойства одновременно – и Q_j и Q_{j+1} . Таким образом, необходимо найти компромиссное решение для двухкритериальной задачи оптимизации, то есть такие концентрации ингредиентов, которые оптимальны с точки зрения некоторого компромисса приведенных двух решений.

Для этого использовался метод Парето в среде MatLab, в рамках которого получены следующие значения для каждой добавки соответственно: 0,079; 0,337; 0,001; 0,202. Значения $r(c^*)$ в этом случае равны 0,197 и 0,161 для первого и второго свойства соответственно. Как следствие, согласно начальным условиям оптимальное сочетание добавок для достижения максимального проявления двух свойств потребует концентрации 7,9 % первой добавки, 33,7 % второй добавки и 20,2 % четвертой. Конечно, подобные заявления должны проходить проверку эмпирическими методами, однако исследование может стать отправной точкой для дальнейшего развития

прогностических функций модели описания проявления свойств полимерной композиции.

Заключение

Предложенная модель является первым шагом к актуальной и перспективной системе оценки и прогнозирования свойств композиционных материалов, а также для их синтеза, дальнейшего применения и получения. Разработка требует дальнейшей как идейной работы, так и более конкретной в математическом аппарате вычислений. Тем не менее на настоящем этапе модель позволяет решать задачу оценки заданных свойств полимера, а также обратную задачу подбора оптимального состава.

Значительная доработка требуется в предложенной модели по двум направлениям. Матрица D и вектор l обычно являются неизвестными величинами. Возможности их получения заложены в экспериментах, в квантово-химических вычислениях носят комплексный и индивидуальный характер. Нередко на этом этапе возможно использование технологий работы с большими данными, машинного обучения или нейронных сетей по выборке известных рецептов.

Следующее направление, требующее доработки, – работа с полным комплексом свойств полимерной композиции, а не с одним или двумя. Полный список требований к производимым продуктам содержит, как правило, достаточно обширный перечень свойств полимерной композиции. Чтобы модель нашла прикладное применение, необходимо разработать многокритериальный выбор концентрации для удовлетворения поставленным условиям.

Эта информация в дальнейшем позволит формализовать исходные данные предметной области математическим моделированием, когда при получении заказа от потребителя автоматически формируется набор требований к композиционному материалу, а далее вычисляются оценки соответствия сформированным требованиям для конкретных кандидатов в компоненты полимерной композиции. Затем прорабатываются технические аспекты состава химической структуры, обеспечивающей высокое качество получаемого материала. Приведенная модель дана как возможная перспектива развития прикладного использования средств мате-

математического моделирования в технологических процессах производства с целью улучшения синтеза новых материалов, оптимизации их состава и, соответственно, свойств. Дальнейшая разработка позволит учитывать экономический, экологический и многие другие аспекты разработки полимерных композиционных материалов.

Список литературы

1. Бобрышев А.Н., Ерофеев В.Т., Козомазов В.Н. Полимерные композиционные материалы: учеб. пособие. – М.: Издательство АСВ, 2013. – 480 с.
2. Modelling of thermal transport through a nanocellular polymer foam: Toward the generation of a new superinsulating material / G. Wang, C. Wang, J. Zhao [et al.] // *Nanoscale*. – 2017. – Iss. 9. – P. 5996–6009.
3. Correlation between the mechanical and dielectric responses in polymer films by a fractional calculus approach / F. Y. Rentería-Baltierra, M. E. Reyes-Melo, J. G. Puente-Córdova, B. López-Walle // *Journal of Applied Polymer Science*. – 2021. – Vol. 138, iss. 7. Art. 49853. – DOI: 10.1002/app.49853
4. Григорьев И.В. Численное исследование процесса полимеризации бутадиена методами математического моделирования // Дифференциальные уравнения и смежные проблемы: мат. междунар. науч. конф., 25–29 июня 2018 г., г. Стерлитамак / Институт механики им. Р.Р. Мавлютова УФИЦ РАН; Стерлитамакский филиал ИСИ РБ. – 2018.
5. Morita A., Matsuba G., Fujimoto M. Evaluation of hydrophilic cellulose nanofiber dispersions in a hydrophobic isotactic polypropylene composite // *Journal of Applied Polymer Science*. – 2021. – Vol. 138, iss. 8. – Art. 49896. – DOI: 10.1002/app.49896
6. Patnaik L.M., Rajan K. Target detection through image processing and resilient propagation algorithms // *Neurocomputing*. – 2000. – Vol. 35, iss. 3–4. – P. 123–125.
7. Highly bulky spherosilicates as functional additives for polyethylene processing – Influence on mechanical and thermal properties / D. Brząkałski, R. E. Przekop, M. Dobrosielska, B. Sztorch, P. Marciniak, B. Marciniak // *Polymer Composites*. – 2020. – Vol. 41. – P. 3389–3402.
8. Abbasi H., Antunes M., Velasco J.I. Enhancing the electrical conductivity of polyetherimide-based foams by simultaneously increasing the porosity and graphene nano-platelets dispersion // *Polymer Composites*. – 2019. – Vol. 40. – P. E1416–E1425.
9. Optical and dielectric properties of PMMA (poly(methyl methacrylate))/carbon dots composites / I. Bouknaitir, A. Panniello, S. S. Teixeira, L. Kreit,

M. Corricelli, M. Striccoli, L. C. Costa, M. E. Achour // *Polymer Composites*. – 2019. – Vol. 40. – P. E1312–E1319.

10. Jun Jiang, Changtong Mei, Mingzhu Pan, Jinzhen Cao Improved mechanical properties and hydrophobicity on wood flour reinforced composites: Incorporation of silica/montmorillonite nanoparticles in polymers // *Polymer Composites*. – 2020. – № 41. – P. 1090–1099.

11. Zare Y., Rhee K. Y. Advancement of a model for electrical conductivity of polymer nanocomposites reinforced with carbon nanotubes by a known model for thermal conductivity // *Engineering with Computers*. – 2020. – 11 p. – DOI: 10.1007/s00366-020-01220-7

12. Frontal polymerization of unidirectional carbon-fiber-reinforced composites / E. Goli [et al.] // *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*. – 2020. – Vol. 130. – Art. 105689.

13. Benchmarking Stochastic and Deterministic Kinetic Modeling of Bulk and Solution Radical Polymerization Processes by Including Six Types of Factors Two / L. De Keer [et al.] // *Macromolecular Theory and Simulations*. – 2020. – Vol. 29. – №6. – Art. 2000065.

14. López-Domínguez P., Clemente-Montes D. A., Vivaldo-Lima E. Modeling of Reversible Deactivation Radical Polymerization of Vinyl Monomers Promoted by Redox Initiation Using NHPI and Xanthone // *Macromolecular Reaction Engineering*. – 2020. – Vol. 14. – № 6. – Art. 2000020.

15. Anionic polymerization of ϵ -caprolactam under the influence of water: 2. Kinetic model / R. Wendel, Ph. Rosenberg, M. Wilhelm, F. Henning // *Journal of Composites Science*. – 2020. – Vol. 4, № 1. – Art. 8. DOI: 10.3390/jcs4010008

16. Mechanical, tribological, and biological properties of carbon fiber/hydroxyapatite reinforced hybrid composites / Y. Akgul, H. Ahlatci, M.E. Turan, H. Simsir, M. E. Erden, Y. Sun, A. Kilic // *Polymer Composites* – 2020. – № 41. – P. 2426–2432.

17. Polymer Additives for Morphology Control in High-Performance Lead-Reduced Perovskite Solar Cells / M.C. Wu [et al.] // *Solar RRL*. – 2020. – Vol. 4, № 6. – Art. 2000093.

18. Thermal management of polymer electrolyte membrane fuel cells: A review of cooling methods, material properties, and durability / Q. Chen [et al.] // *Applied Energy*. – 2021. – Vol. 286. – Art. 116496.

19. Germashev I. V., Derbisher V. E., Orlova S. A. Evaluation of activity of the fireproofing compounds in elastomer compositions by means of fuzzy sets // *Kauchuk i Rezina*. – 2001. – № 6. – P. 15–17.

20. Germashev I.V., Derbisher V.E., Vasil'ev, P.M. Prediction of the activity of low-molecular organics in polymer compounds using probabilistic methods //

Theoretical Foundations of Chemical Engineering. – 1998. – Vol. 32, № 5. – P. 514–517.

21. Model of Paired and Solitary Influence of Ingredients of Polymer Composition / I. V. Germashev, E. V. Derbisher, V. E. Derbisher, T. P. Mashihina // Studies in Systems, Decision and Control. – 2021. – № 342. – P. 205–217.

22. Derbisher E.V., Derbisher V.E. Application of computational methods for the creation and selection of polymer compositions with specified properties // Математическая физика и компьютерное моделирование. – 2019. – Vol. 22, № 1. – P. 35–53.

References

1. Bobryshev A. N., Yerofeev V. T., Kozomazov V. N. Polymernie Compositiionnie Materialy: Ucheb. Posobie (Polymer composite materials: textbook). ASV, Moscow, 2013, 480 p. (in Russian)

2. Wang G., Wang C., Zhao J. et al. Modelling of thermal transport through a nanocellular polymer foam toward the generation of a new superinsulating material. *Nanoscale*, 2017, vol. 9, pp. 5996–6009.

3. Rentería-Baltierrez F. Y., Reyes-Melo M. E., Puente-Córdova J. G., López-Walle B. Correlation between the mechanical and dielectric responses in polymer films by a fractional calculus approach. *Journal of Applied Polymer Science*, 2021, vol. 138, iss. 7, art. 49853, DOI: 10.1002/app.49853

4. Grigoriev I. V. Chislennoe issledovanie processa polimerizatsii butadiena metodami matematicheskogo modelirovaniya (Numerical study of the butadiene polymerization process by methods of mathematical modeling). *Differencialnie Uravnenia I Smezhnie Problemi (Differential Equations and Related Problems)*, Bashkir State University, Sterlitamak, June 25-29, 2018 (in Russian)

5. Morita A., Matsuba G., Fujimoto M. Evaluation of hydrophilic cellulose nanofiber dispersions in a hydrophobic isotactic polypropylene composite. *Journal of Applied Polymer Science*, 2021, vol. 138, iss. 8, art. 49896, DOI: 10.1002/app.49896

6. Patnaik L.M., Rajan K. Target detection through image processing and resilient propagation algorithms. *Neurocomputing*, 2000, vol. 35, no. 1-4, pp. 123–125.

7. Brząkałski D., Przekop R. E., Dobrosielska M., Sztorch B., Marciniak P., Marciniak B. Highly bulky spherosilicates as functional additives for polyethylene processing—Influence on mechanical and thermal properties. *Polymer Composites*, 2020, vol. 41, pp. 3389–3402.

8. Abbasi H., Antunes M., Velasco J. I. Enhancing the electrical conductivity of polyetherimide-based foams by simultaneously increasing the porosity and graphene nanoplatelets dispersion. *Polymer Composites*, 2019, vol. 40, pp. E1416–E1425.

9. Bouknaitir I., Panniello A., Teixeira S. S., Kreit L., Corricelli M., Striccoli M., Costa L. C., Achour M. E. Optical and dielectric properties of PMMA (poly(methyl methacrylate))/carbon dots composites. *Polymer Composites*, 2019, vol. 40, pp. E1312-E1319.

10. Jiang J., Mei C., Pan M., Cao J. Improved mechanical properties and hydrophobicity on wood flour reinforced composites: Incorporation of silica/montmorillonite nanoparticles in polymers. *Polymer Composites*, 2020, vol. 41, pp. 1090-1099.

11. Zare Y., Rhee K. Y. Advancement of a model for electrical conductivity of polymer nanocomposites reinforced with carbon nanotubes by a known model for thermal conductivity. *Engineering with Computers*, 2020, 11 p. DOI: 10.1007/s00366-020-01220-7

12. Goli E et al. Frontal polymerization of unidirectional carbon-fiber-reinforced composites. *Composites Part A. Applied Science and Manufacturing*, 2020, vol. 130, art. 105689.

13. De Keer L. et al. Benchmarking Stochastic and Deterministic Kinetic Modeling of Bulk and Solution Radical Polymerization Processes by Including Six Types of Factors Two. *Macromolecular Theory and Simulations*, 2020, vol. 29, no. 6, art. 2000065.

14. López-Domínguez P., Clemente-Montes D. A., Vivaldo-Lima E. Modeling of Reversible Deactivation Radical Polymerization of Vinyl Monomers Promoted by Redox Initiation Using NHPI and Xanthone. *Macromolecular Reaction Engineering*, 2020, vol. 14, no. 6, art. 2000020.

15. Wendel R., Rosenberg Ph., Wilhelm M., Henning F. Anionic polymerization of ϵ -caprolactam under the influence of water: 2. Kinetic model. *Journal of Composites Science*, 2020, vol. 4, no. 1, art. 8, DOI: 10.3390/jcs4010008

16. Akgul Y., Ahlatci H., Turan M. E., Simsir H., Erden M. E., Sun Y., Kilic A. Mechanical, tribological, and biological properties of carbon fiber/hydroxyapatite reinforced hybrid composites. *Polymer Composites*, 2020, vol. 41, pp. 2426-2432.

17. Wu M. C. et al. Polymer Additives for Morphology Control in High-Performance Lead-Reduced Perovskite Solar Cells. *Solar RRL*, 2020, vol. 4, no. 6, art. 2000093.

18. Chen Q. et al. Thermal management of polymer electrolyte membrane fuel cells: A review of cooling methods, material properties, and durability. *Applied Energy*, 2021, vol. 286, art. 116496.

19. Germashev I.V., Derbisher V.E., Orlova S.A. Evaluation of activity of the fireproofing compounds in elastomer compositions by means of fuzzy sets. *Kauchuk i Rezina*, 2001, vol. 6, pp. 15-17. (in Russian)

20. Germashev I.V., Derbisher V.E., Vasil'ev P.M. Prediction of the activity of low-molecular organics in polymer compounds using probabilistic methods. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 1998, vol. 32, no. 5, pp. 514-517.

21. Germashev I.V., Derbisher E.V., Derbisher V.E., Mashihina T.P. Model of Paired and Solitary Influence of Ingredients of Polymer Composition. *Studies in Systems, Decision and Control*, 2021, vol. 342, pp. 205-217.

22. Derbisher E. V., Derbisher V. E. Application of computational methods for the creation and selection of polymer compositions with specified properties. *Mathematical Physics and Computer Modeling*, 2019, vol. 22, no. 1, pp. 35–53.

Статья получена: 29.12.2021

Статья одобрена: 28.02.2022

Принята к публикации: 18.03.2022

Финансирование. *Исследование не имело спонсорской поддержки.*

Конфликт интересов. *Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.*

Сведения об авторах

Гермашев Илья Васильевич (Волгоград, Россия) – доктор технических наук, профессор, профессор кафедры математического анализа и теории функций Волгоградского государственного университета, (400062, г. Волгоград, пр-т Университетский, 100, germashev@volsu.ru).

Феокистов Егор Федорович (Волгоград, Россия) – аспирант кафедры математического анализа и теории функций Волгоградского государственного университета (400062, г. Волгоград, пр-т Университетский, 100, faa-201_193934@volsu.ru).

Дербишер Вячеслав Евгеньевич (Волгоград, Россия) – доктор химических наук, профессор, профессор кафедры технологии высокомолекулярных и волокнистых материалов Волгоградского государственного технического университета, (400005, г. Волгоград, пр. им. Ленина, 28, derbisher_ve@vstu.ru).

Дербишер Евгения Вячеславовна (Волгоград, Россия) – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры аналитической, физической химии и физико-химии полимеров Волгоградского государственного технического университета (400005, г. Волгоград, пр. им. Ленина, 28, derbisher2@vstu.ru).

About the authors

Ilya V. Germashev (Volgograd, Russian Federation) – Dr. Habil. in Engineering, Professor, Professor of the Department of Mathematical Analysis and Theory of Functions, Volgograd State University (100, Universitetskiy ave., Volgograd, 400062, germashev@volsu.ru).

Egor F. Feoktistov (Volgograd, Russian Federation) – Ph. D. student of the Department of Mathematical Analysis and Theory of Functions, Volgograd State University (100, Universitetskiy ave., Volgograd, 400062, faa-201_193934@volsu.ru).

Vyacheslav E. Derbisher (Volgograd, Russian Federation) – Dr. Habil. in Chemistry, Professor, Professor of the Department of High Molecular and Fibrous Materials Technology, Volgograd State Technical University (28, Lenin ave., Volgograd, 400005, derbisher_ve@vstu.ru).

Evgeniya V. Derbisher (Volgograd, Russian Federation) – Ph. D. in Engineering, Associate Professor, Associate Professor of the Department of Analytical, Physical Chemistry and Physicochemistry of Polymers, Volgograd State Technical University (28, Lenin ave., Volgograd, 400005, derbisher2@vstu.ru).

**Библиографическое описание статьи
согласно ГОСТ Р 7.0.100–2018:**

Оптимизация многокомпонентной полимерной композиции с использованием нечеткой математической модели / И. В. Гермашев, Е. Ф. Феоктистов, Е. В. Дербишер, В. Е. Дербишер. – текст : непосредственный. – DOI: 10.15593/2499-9873/2022.1.03 // Прикладная математика и вопросы управления = Applied Mathematics and Control Sciences. – 2022. – № 1. – С. 52–71.

Цитирование статьи в изданиях РИНЦ:

Оптимизация многокомпонентной полимерной композиции с использованием нечеткой математической модели / И. В. Гермашев, Е. Ф. Феоктистов, Е. В. Дербишер, В. Е. Дербишер // Прикладная математика и вопросы управления. – 2022. – № 1. – С. 52–71. DOI: 10.15593/2499-9873/2022.1.03

Цитирование статьи в references и международных изданиях

Cite this article as:

Germashev I.V., Feoktistov E.F., Derbisher E.V., Derbisher V.E. Optimization of a multicomponent polymer composition using a fuzzy mathematical model. *Applied Mathematics and Control Sciences*, 2022, no. 1, pp. 52–71. DOI: 10.15593/2499-9873/2022.1.03 (in Russian)