

## МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПРОЦЕССА ОТВЕРЖДЕНИЯ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ НЕЙРОННОЙ СЕТИ

О. С. Дмитриев, А. А. Барсуков

*Кафедра «Физика», phys@tstu.ru; ФГБОУ ВО «ТГТУ», г. Тамбов, Россия*

**Ключевые слова:** кинетическая функция; математическая модель; мощность тепловыделений; нейронные сети; отверждение; полимерные композиты.

**Аннотация:** Рассмотрена возможность моделирования кинетических характеристик процесса отверждения полимерных композитов (на примере углепластика) на основе применения искусственных нейронных сетей. С использованием нейросетевого моделирования получена зависимость изменения кинетической функции полимерного композита от степени отверждения. Проведено сравнение работоспособности нейронной сети с экспериментальными данными классическими методами аппроксимации.

---

### Введение

На сегодняшний день полимерные композиты (ПК) нашли применение во всех отраслях промышленности и современной техники, приходя на замену многим привычным для нас материалам. Качество изделий из ПК и эффективность производства в целом во многом обуславливаются оптимальностью температурно-временного режима отверждения ПК. Для проектирования оптимального процесса отверждения ПК на основе математической модели необходимо определить параметры модели процесса отверждения и материала, включая кинетические, реологические, теплофизические и другие характеристики ПК [1 – 7].

Известно множество различных математических моделей и методов для описания кинетики и определения кинетических характеристик процесса отверждения ПК, которые в основном определяют особенности химического процесса и не могут с одинаковой точностью описывать кинетику различных по химизму процессов, поэтому поиск и выбор адекватной модели кинетики отверждения требует высокой квалификации химика-технолога и много времени [6 – 10]. Для того чтобы упростить моделирование, предлагается использовать нейронные сети (НС), которые в настоящее время широко применяются для прогнозирования и аппроксимации во многих областях технических и гуманитарных наук [11].

Нейронные сети представляют собой самообучающиеся системы, позволяющие эффективно строить нелинейные зависимости, более точно описывающие наборы экспериментальных данных. Главным преимуществом нейросетевого моделирования является обучение и обобщение накопленной информации на основе выборки экспериментальных данных. Любая информация, загруженная в нейронную сеть в качестве входных и выходных сигналов, может представлять собой экспериментальные или расчетные данные [11]. Метод нейросетевого моделирования позволяет упростить моделирование кинетики отверждения, исключив подбор и поиск адекватной модели отверждения.

Цель работы – проверка возможности и целесообразности применения нейронной сети для прогнозирования кинетической функции  $\varphi(\beta)$  отверждения полимерного композита.

### Математическая модель кинетики отверждения полимерных композитов

Процесс исследования характеристик полимерных композитов необходимо организовывать так, чтобы в экспериментальном образце распределение температуры соответствовало температурному полю полубесконечной пластины, которое создается путем одностороннего нагрева образца плоской формы с тепловой изоляцией противоположной нагревателю стороны образца и его боковых сторон (рис. 1). При исследовании и производстве невозможно полностью исключить течение смолы препрега по направлению перпендикулярно градиента температуры в экспериментальной установке. Поэтому вводится допущение о течении смолы по изотерме и учитываются изменения толщины  $L$  и содержания связующего  $\gamma$  в исследуемом препреге ПК. Таким образом, для исследования характеристик образца будем использовать математическую модель горячего прессования [10].

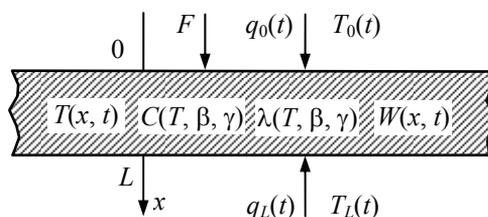


Рис. 1. Физическая модель процесса отверждения ПК

Для нахождения теплофизических и кинетических характеристик необходимо решить обратную задачу теплопроводности и кинетики для модели процесса, при решении которой, в качестве исходных данных, будем использовать температуру в образце  $T(x, t)$  и величины тепловых потоков  $q_0, q_L$  на поверхностях 0 и  $L$  исследуемого образца. В связи с этим при построении математической модели нагрева и отверждения ПК будут заданы граничные условия второго рода.

В указанных условиях математическая модель, описывающая процесс нагрева и отверждения полимерных композитов, аналогичная модели неограниченной пластины (см. рис. 1), представляет собой систему нелинейных дифференциальных уравнений:

– переноса тепла с граничными условиями второго рода с изменяющейся под давлением толщиной  $L$  образца при наличии внутренних источников тепла:

$$C(T, \beta, \gamma) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda(T, \beta, \gamma) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \gamma(t) Q_{\text{п}} \frac{\partial \beta}{\partial t},$$

$$T \equiv T(x, t), \quad 0 < x < L(t), \quad 0 < t \leq t_{\text{к}}, \quad (1)$$

$$T(x, 0) = g_0(x), \quad 0 \leq x \leq L(0);$$

$$-\lambda(T, \beta, \gamma) \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = q_0(t), \quad 0 < t \leq t_{\text{к}};$$

$$-\lambda(T, \beta, \gamma) \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=L(t)} = q_L(t), \quad 0 < t \leq t_{\text{к}}; \quad (2)$$

– кинетики отверждения

$$\frac{\partial \beta}{\partial t} = \varphi(\beta) \exp\left(-\frac{E(\beta)}{RT}\right), \quad \beta < 1, \quad (3)$$

$$\beta \equiv \beta(x, t), \quad 0 \leq x \leq L(t), \quad 0 < t \leq t_k,$$

$$\beta(x, 0) = \beta_0(x), \quad 0 \leq x \leq L(0);$$

– прессования материала и течения связующего

$$L(t) = L(0) - L_{\text{в.св}}(t), \quad (4)$$

$$L_{\text{в.св}}(t) = \sum_{i=1}^{n-1} \int_0^t \frac{dh_i(\tau)}{d\tau} d\tau, \quad (5)$$

$$\frac{dh_i(t)}{dt} = -16 \frac{h_i^3(t)}{B\mu_i(t)l^3b} \frac{F}{i}, \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \quad 0 < t \leq t_k; \quad (6)$$

$$h(0) = \frac{L(0)(\gamma_n - \gamma_k)}{(n-1)(1 - \gamma_k)}, \quad (7)$$

$$\mu_i(t) = \tilde{\mu}(\beta) \exp\left(\frac{E_\mu}{RT_i(t)}\right), \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \quad 0 < t \leq t_k, \quad (8)$$

$$\gamma(t) = \frac{L(t) - L(0)(1 - \gamma_n)}{L(t)}, \quad (9)$$

$$\gamma_n = \frac{\rho_{\text{пр}}(0) M_{\text{св}}(0)}{\rho_{\text{св}} M_{\text{пр}}(0)}, \quad (10)$$

$$\gamma_k = \frac{\rho_{\text{пр. min}} M_{\text{св. min}}}{\rho_{\text{св}} M_{\text{пр. min}}}, \quad (11)$$

где  $C$  – объемная теплоемкость, Дж/(м<sup>3</sup>·К);  $T$  – температура, К;  $\beta$  – степень отверждения;  $\gamma$  – содержание связующего в препреге;  $\lambda$  – теплопроводность, Вт/(м·К);  $t$  – время, с;  $x$  – пространственная координата, м;  $g$  – начальное распределение температуры, К;  $q$  – плотность теплового потока, Вт/м<sup>2</sup>;  $Q_{\text{п}}$  – полный тепловой эффект реакции отверждения, Дж/м<sup>3</sup>;  $t_k$  – время окончания процесса отверждения, с;  $E$  – энергия активации отверждения, Дж/моль;  $R$  – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К);  $\varphi$  – кинетическая функция, с<sup>-1</sup>;  $B$  – коэффициент формы зазоров между слоями волокон;  $E_\mu$  – энергия активации вязкого течения, Дж/моль;  $h$  – толщина связующего между слоями препрега, м;  $l$ ,  $b$ ,  $L$  – длина, ширина и толщина образца соответственно, м;  $\mu$  – динамическая вязкость связующего, Па·с;  $\rho$  – плотность, кг/м<sup>3</sup>. Индексы: к – конечный; н – начальный; пр – препрег; св – связующее; в.св – вытекшее связующее из слоев препрега.

Исходя из предположения, что тепло, выделяемое связующим во время отверждения, пропорционально нарастанию степени отверждения, поэтому для определения кинетических характеристик, то есть энергии активации  $E(\beta)$  и кинетической функции отверждения  $\varphi(\beta)$ , используем мощность тепловыделений

$$W(x, t) = Q_{\text{п}} \frac{\partial \beta}{\partial t}. \quad (12)$$

Исследование кинетики проведем на тонких образцах ПК, толщина которых не превышает 5 мм. Для образцов малой толщины температуры на поверхностях и внутри образца практически не отличаются, тогда можно предположить, что скорости протекания реакции отверждения по всему объему исследуемого образца одинаковы и будем считать, что процесс отверждения по толщине протекает при среднеинтегральной температуре  $T_{cp}(t) = \frac{1}{L} \int_0^L T(x,t) dx$ , то есть

$$W(x, t) \equiv W(t). \quad (13)$$

Интегральное представление мощности тепловыделений в зависимости от времени находится непосредственно из уравнения (1) и имеет вид

$$W(t) = \frac{1}{\gamma(t)L(t)} \left[ q_L(t) - q_0(t) + \frac{d}{dt} \int_0^{L(t)} \int_{T(x,0)}^{T(x,t)} C(s, \beta, \gamma) ds dx \right]. \quad (14)$$

Источником информации о кинетике процесса является мощность тепловыделений, которая связана с кинетическим уравнением следующим образом:

$$\beta(t) = \frac{Q(t)}{Q_n}, \quad 0 \leq \beta \leq 1, \quad (15)$$

где  $Q(t) = \int_0^t W(t) dt$  – тепловой эффект реакции отверждения, Дж/м<sup>3</sup>.

Учитывая допущения о среднеинтегральной температуре  $T_{cp}(t)$  по толщине образца, математическая модель кинетики примет вид:

$$\frac{d\beta}{dt} = \varphi(\beta) \exp\left(-\frac{E(\beta)}{RT_{cp}(t)}\right), \quad \beta < 1, \quad (16)$$

$$\beta \equiv \beta(t), \quad 0 < t \leq t_k, \quad \beta(0) = \beta_0.$$

Для дальнейшего моделирования и расчета процесса отверждения необходимо иметь значения параметров математической модели (1) – (11), которые можно определить экспериментально на основе физико-химических исследований процесса отверждения ПК или решив соответствующие обратные задачи. При решении обратной задачи кинетики для нахождения энергии активации  $E(\beta)$  и кинетической функции отверждения  $\varphi(\beta)$  будем использовать экспериментально измеренные и вычисленные значения степени отверждения  $\beta$ , соответствующей концентрации прореагировавших веществ. Подробное описание способов нахождения параметров математической модели (1) – (11) представлено в работах [10, 12]. Разработаны соответствующие методы и алгоритмы для определения теплофизических и кинетических характеристик, а также техническое оснащение [13].

Для расчета двух неизвестных характеристик  $E(\beta)$  и  $\varphi(\beta)$  из уравнения математической модели кинетики (16) необходимо составить систему из двух уравнений, описывающих различные условия процесса отверждения, то есть достаточно иметь данные о степени отверждения  $\beta(t)$ , полученные при отверждении одного и того же исследуемого материала по двум различным температурно-временным режимам  $T_1(t)$ ,  $T_2(t)$ .

Применив операцию логарифмирования к обеим частям уравнения (16) и используя временные зависимости  $\beta(t)$  и  $T_{cp}(t)$  двух различных по скорости нагрева экспериментов, составим систему двух линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных  $\ln\varphi(\beta)$  и  $E(\beta)$ , решая которую, находим кинетические характеристики процесса как функции степени отверждения:

$$E(\beta) = R \frac{\ln \frac{W_2(t(\beta))}{W_1(t(\beta))} T_{cp1}(t(\beta)) T_{cp2}(t(\beta))}{T_{cp2}(t(\beta)) - T_{cp1}(t(\beta))}; \quad (17)$$

$$\varphi(\beta) = \exp \left[ \frac{T_{cp2}(t(\beta)) \ln \frac{W_2(t(\beta))}{Q_n} - T_{cp1}(t(\beta)) \ln \frac{W_1(t(\beta))}{Q_n}}{T_{cp2}(t(\beta)) - T_{cp1}(t(\beta))} \right], \quad (18)$$

где  $W_1(t(\beta))$ ,  $W_2(t(\beta))$  – мощности тепловыделений в течение реакции отверждения в зависимости от времени и степени отверждения образцов для двух различных температурно-временных режимов отверждения;  $R$  – универсальная газовая постоянная;  $T_{cp1}(t(\beta))$ ,  $T_{cp2}(t(\beta))$  – среднеинтегральные температуры образцов при отверждении.

Как показал опыт исследования, полученные экспериментальные функции  $E(\beta)$  и  $\varphi(\beta)$  позволяют получать хорошие, устойчивые результаты только в средней части диапазона изменения степени отверждения, то есть в пределах  $0,2 < \beta < 0,8$ , где погрешность разностей среднеинтегральных температур невелика. При малых  $0 < \beta < 0,2$  и больших степенях отверждения  $0,8 < \beta < 1$  погрешности измерения температур  $T_{cp1}(t(\beta))$ ,  $T_{cp2}(t(\beta))$  становятся соизмеримыми с разностью данных температур, и функции  $E(\beta)$  и  $\varphi(\beta)$  определяются с достаточно большой погрешностью, имеют неустойчивость и не для всех материалов пригодны для расчетов.

Для дальнейшего использования при математическом моделировании полученных экспериментальных функций (17), (18) и адекватного моделирования кинетики процесса отверждения полимерного композита необходимо аппроксимировать кинетическую функцию  $\varphi(\beta)$  в пределах изменения степени отверждения  $\beta$  от 0 до 1 и энергию активации  $E(\beta)$ .

Кинетическую функцию  $\varphi(\beta)$  обычно аппроксимируют в виде одной из предложенных в работах [6, 7] и представленных в табл. 1 моделей 1 – 3. Кинетические параметры в них определяются с помощью нелинейной регрессии эмпирической автокаталитической модели, введенной Камалом в работе [6] (модель 2). Несмотря на то, что существуют более сложные механистические модели (модель 3), применимость данной кинетической модели для термореактивных связующих, которые следуют механизму свободно радикальной полимеризации, хорошо изучена и представлена в работе [7]. Автокаталитическая кинетическая модель связывает степень отверждения связующего  $\beta$  со скоростью полимеризации  $\frac{\partial \beta}{\partial t}$ . Предполагается, что константа скорости химической реакции  $K$  для этих выражений соответствует соотношению Аррениуса, как показано в уравнении (16). Порядки скорости химической реакции  $m$ ,  $n$  и константа скорости  $K$  определяются на основе экспериментально полученной функции  $\varphi(\beta)$  при отверждении образца, являются величинами, вычисленными для каждого отдельного вида ПК,

Модели аппроксимации кинетической функции

Модель 1	Модель 2	Модель 3
$\varphi(\beta) = K(1-\beta)^m$	$\varphi(\beta) = K\beta^n(1-\beta)^m$	$\varphi(\beta) = K(1-\beta)(1+k_0\beta)$
$K = 1,093 \cdot 10^6$	$K = 1,15 \cdot 10^6$	$K = 1,15 \cdot 10^6$
$m = 1,25$	$m = 1,26$	$k_0 = -0,66$
–	$n = 0,02$	–

и зависят от характера химической реакции процесса отверждения. Таким образом, имея в наличии три модели, возникает задача выбора наилучшей из них, которая будет соответствовать данному процессу отверждения ПК.

Энергия активации, например для углепластиков, как правило имеет слабую зависимость от степени отверждения и ее можно представить как константу  $E$ , и на основе средней части зависимости  $E(\beta)$ , где погрешность минимальная, находить среднее значение  $E$ , несмотря на то, что данное условие выполняется не для всех ПК.

### Построение нейронной сети для моделирования кинетики отверждения

Выбор и построение адекватной модели кинетической функции предлагается выполнять на основе нейронной сети. Для моделирования кинетической функции будем использовать массив экспериментальных данных в виде таблицы, содержащий расчетные зависимости изменения логарифма кинетической функции  $\varphi(\beta)$  от степени отверждения  $\beta$  по вышеприведенным формулам.

Для анализа данных применен метод нейросетевого моделирования путем построения трех различных типов нейронных сетей: по методам Левенберга–Марквардта, Байесовой регуляризации и масштабированному методу сопряженных градиентов. Моделирование проводилось в среде MATLAB с использованием плагина NEURON FITTING TOOLS, который позволяет задавать количество нейронов в скрытом слое, изменять процент обучающей, тестовой и проверочной выборок (рис. 2).

Нейронная сеть обучена с использованием алгоритмов «с учителем». Задано три вектора – входных значений (Inputs), целевой выходных значений (Outputs) и проверочный. В качестве входного вектора использовался экспериментальный массив данных по изменению степени отверждения полимерного композита в процессе отверждения; целевого параметра – значения кинетической функции, рассчитанные по моделям 1 – 3. Проверочным вектором выступали отобранные случайным образом 15 % от всех экспериментальных данных, которые не использовались при построении модели, а только для проверки адекватности работы НС.

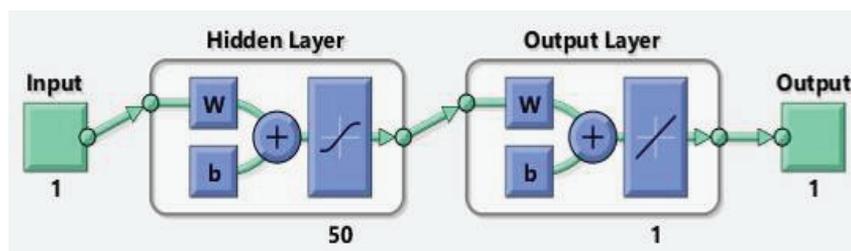


Рис. 2. Структурная схема нейронной сети

Для построения нейронной сети использовался каждый из доступных методов обучения. Число нейронов в скрытом слое задавали в количестве 50 шт., обучающая выборка составляла 70 %, тестовая и проверочная выборки – 15 %. Получены значения регрессии нейронной сети с использованием вышеприведенных алгоритмов, подтверждающие их работоспособность и производительность. В результате анализа графиков регрессии НС трех различных типов сделан вывод, что наибольшая производительность НС достигается при обучении сети по методу Байесовой регуляризации (рис. 3).

Для дальнейшего компьютерного моделирования будем использовать данный метод. В процессе моделирования осуществлен полный перебор значений степени отверждения  $\beta$  от 0 до 1 с шагом 0,01. По результатам моделирования получена зависимость логарифма кинетической функции  $\ln \varphi(\beta)$  от степени отверждения  $\beta$  (рис. 4) и вычислены значения кинетической функции  $\varphi(\beta)$ .

При сравнении с экспериментально полученными данными оказалось, что НС достаточно точно прогнозирует изменение значений кинетической функции от степени отверждения при  $\beta > 0,1$ . Расхождение результатов моделирования и эксперимента на данном участке связано с большими погрешностями при экспериментальном определении мощности тепловыделений на начальном этапе эксперимента. Для сравнения результатов работы нейронной сети и численных методов расчета по моделям 1 – 3 составлена табл. 2.

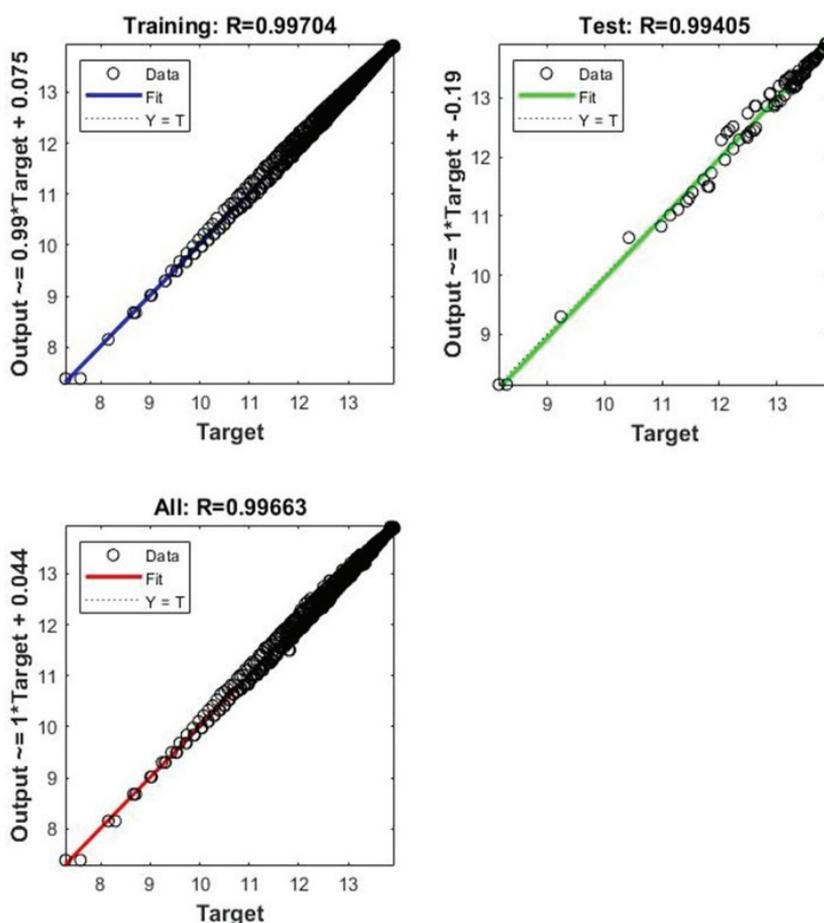
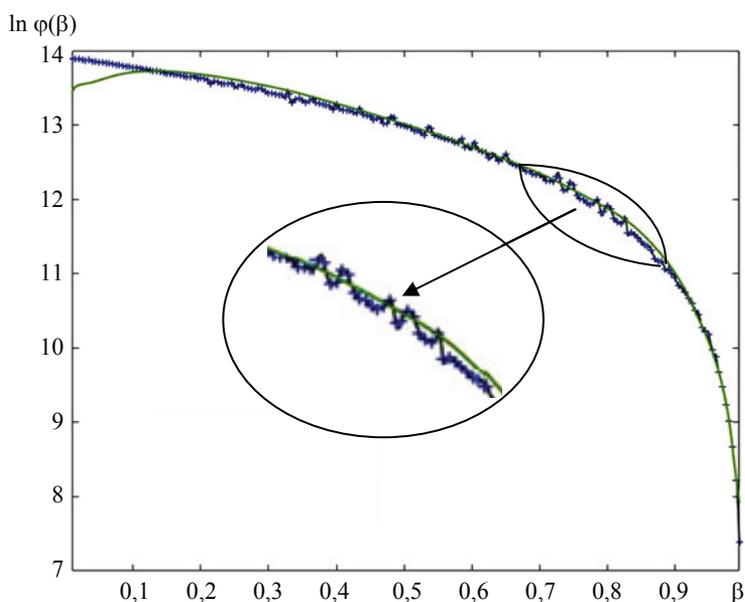


Рис. 3. Графики регрессии нейронной сети



**Рис. 4. Результаты моделирования кинетической функции:**  
 + – выходные значения; — — аппроксимирующая кривая НС;  
 — — экспериментальная кривая

Таблица 2

**Сравнение результатов моделирования кинетической функции  $\ln\phi(\beta)$**

Степень отверждения $\beta$	Модель 1	Модель 2	Модель 3	Нейронная сеть	Эксперимент
0,003	13,84	13,95	13,85	13,90	13,53
0,017	13,85	13,93	13,88	13,88	13,54
0,164	13,69	13,66	13,68	13,68	13,72
0,251	13,56	13,48	13,53	13,54	13,61
0,347	13,39	13,27	13,34	13,37	13,45
0,467	13,15	12,96	13,06	13,12	13,14
0,642	12,65	12,38	12,56	12,62	12,61
0,743	12,24	11,92	12,13	12,21	12,16
0,835	11,69	11,36	11,71	11,66	11,74
0,967	9,66	9,53	9,64	9,65	9,71

Для наглядного сравнения погрешности вычисления кинетической функции по каждой из моделей, найдем методическую среднеквадратичную погрешность, рассчитанную на основе прогнозируемых данных по каждому из методов и экспериментальным данным. Для вычисления среднеквадратичной погрешности рассчитано значение кинетики отверждения при изменении  $\beta$  от 0,1 до 0,9 с шагом 0,01. Данный диапазон изменения степени отверждения выбран для минимизации влияния погрешности экспериментальных измерений на точность сравнения представленных методов

Модель	1	2	3	Нейронная сеть
Погрешность	0,0049	0,0404	0,0045	0,0036

Наименьшее значение среднеквадратичной погрешности модели достигается при использовании нейронной сети. Таким образом, ее применение в процессе нахождения кинетических характеристик отверждения полимерных композитов оправдано, а также повышает точность аппроксимации кинетической функции.

### Выводы

В результате выполнения данной работы создана НС, позволяющая моделировать кинетическую функцию углепластика в процессе его отверждения в пределах изменения  $\beta$  от 0 до 1, что подтвердило возможность и целесообразность использования НС для моделирования процесса отверждения полимерных композитов. Однако для функционирования НС требуется определять эмпирические параметры моделей кинетики, поэтому актуальна дальнейшая разработка системы обработки экспериментальных данных на основе НС, которая позволит находить в автоматическом режиме все необходимые кинетические характеристики процесса отверждения только на основе экспериментальных данных, без выполнения промежуточных вычислений и выбора подходящих аппроксимирующих моделей.

### Список литературы

1. Optimal Curing for Thermoset Matrix Composites: Thermochemical Considerations / M. Li, Q. Zhu, P. H. Geubelle, Ch. L. Tucker // *Polymer Composites*. – 2001. – Vol. 22, No. 1. – P. 118 – 131. doi: 10.1002/pc.10524
2. Optimal Cure Cycle Parameters for Minimizing Residual Stresses in Fiber-Reinforced Polymer Composite Laminates / P. H. Shah, V. A. Halls, J. Q. Zheng, R. C. Batra // *Journal of Composite Materials*. – 2017. – Vol. 52, No. 6. – P. 773 – 792. doi: 10.1177/0021998317714317
3. Struzziero, G. Numerical Optimisation of Thermoset Composites Manufacturing Processes: A review / G. Struzziero, J. J. E. Teuwen, A. A. Skordos // *Composites Part A. Science and Manufacturing*. – 2019. – Vol. 124. – Art. 105499. doi:10.1016/j.compositesa.2019.105499
4. Optimization of Curing Cycles Products of the Polymer Composite Materials on Base of Glutinous Prepregs / O. S. Dmitriev, S. V. Mischenko, S. O. Dmitriev, V. N. Kirillov // *Polymer Science, Series D*. – 2009. – Vol. 2, No. 4. – P. 223 – 229. doi: 10.1134/S1995421209040078
5. The Structure and Properties of Fluoroplastic Modified with Titanium Nanoparticles / G. S. Baronin, V. M. Buznik, O. S. Dmitriev [et al.] // *AIP Conference Proceedings*. – 2017. – Vol. 1915, Issue 1. – P. 040002-1 – 040002-4. doi: 10.1063/1.5017350
6. Kamal, M. R. Kinetics and Thermal Characterization of Thermoset Cure / M. R. Kamal, S. Sourour // *Polymer Engineering and Science*. – 1973. – Vol. 13, No. 1. – P. 59 – 64.
7. Lee, J. H. Kinetic Parameters Estimation for Cure Reaction of Epoxy Based Vinyl Ester Resin / J. H. Lee, J. W. Lee // *Polymer Engineering and Science*. – 1994. – Vol. 34, No. 9. – P. 742 – 749.
8. Effect of Cure Kinetic Simulation Model on Optimized Thermal Cure Cycle for Thin-Sectioned Composite Parts / M. Vafayan, H. Abedini, M. H. R Ghreishy, M. H. Beheshty // *Polymer Composites*. – 2013. – Vol. 34, No. 7. – P. 1172 – 1179. doi: 10.1002/pc.22526
9. Kumar, K. V. Root Cause Analysis of Heating Rate Deviations in Autoclave Curing of CFRP Structures / K. V. Kumar, M. Safiullah, A. N. K. Ahmed // *International Journal of Innovative Research and Studies*. – 2013. – Vol. 2, No. 5. – P. 369 – 378.
10. Мищенко, С. В. Математическое моделирование процесса отверждения изделия из полимерных композиционных материалов методом горячего прессования / С. В. Мищенко, О. С. Дмитриев, С. В. Пономарев // *Вестн. Тамб. гос. техн. ун-та*. – 1998. – Т. 4, № 4. – С. 390 – 399.

11. Хайкин, С. Нейронные сети. Полный курс / С. Хайкин ; пер. с англ. Н. Н. Кукуль, А. Ю. Шелестова. – 2-е изд. – М. : Вильямс, 2006. – 1104 с.

12. Dmitriev, O. S. Numerical-Analytical Solution of the Nonlinear Coefficient Inverse Heat Conduction Problem / O. S. Dmitriev, A. A. Zhivenkova // *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. – 2018. – Vol. 91, No. 6. – P. 1353 – 1364. doi: 10.1007/s10891-018-1869-x

13. Computer-Measuring System for Research into Properties of Glutinous Prepregs and Calculation of Curing Cycles of the Polymer Composite Materials on Their Base / O. S. Dmitriev, V. N. Kirillov, S. V. Mischenko, A. O. Dmitriev // *Polymer Science, Series D*. – 2010. – Vol. 3, No. 1. – P. 20 – 25. doi: 10.1134/S199542121001003X

---

## Modeling the Kinetic Characteristics of the Curing Process of Polymer Composites Based on a Neural Network

O. S. Dmitriev, A. A. Barsukov

*Department of Physics, phys@tstu.ru; TSTU, Tambov, Russia*

**Keywords:** kinetic function; mathematical model; heat release power; neural networks; curing; polymer composites.

**Abstract:** The article considers the possibility of modeling the kinetic characteristics of the curing process of polymer composites (for example, carbon fiber reinforced plastic) based on the use of artificial neural networks. Using neural network modeling, the dependence of the change in the kinetic function of the polymer composite on the degree of cure has been obtained. The performance of the neural network is compared with experimental data using classical approximation methods.

### References

1. Li M., Zhu Q., Geubelle P.H., Tucker Ch.L. Optimal Curing for Thermoset Matrix Composites: Thermochemical Considerations, *Polymer Composites*, 2001, vol. 22, no. 1, pp. 118-131, doi: 10.1002/pc.10524

2. Shah P.H., Halls V.A., Zheng J.Q., Batra R.C. Optimal Cure Cycle Parameters for Minimizing Residual Stresses in Fiber-Reinforced Polymer Composite Laminates, *Journal of Composite Materials*, 2017, vol. 52, no. 6, pp. 773-792, doi: 10.1177/0021998317714317

3. Struzziero G., Teuwen J.J.E., Skordos A.A. Numerical Optimisation of Thermoset Composites Manufacturing Processes: A Review, *Composites Part A. Science and Manufacturing*, 2019, vol. 124, art. 105499, doi: 10.1016/j.compositesa.2019.105499

4. Dmitriev O.S., Mischenko S.V., Dmitriev S.O., Kirillov V.N. Optimization of Curing Cycles Products of the Polymer Composite Materials on Base of Glutinous Prepregs, *Polymer Science, Series D*, 2009, vol. 2, no. 4, pp. 223-229, doi: 10.1134/S1995421209040078

5. Baronin G.S., Buznik V.M., Dmitriev O.S., Zavrazhina C.V., Mishchenko S.V., Zavrazhin D.O., Khudyakov V.V. The Structure and Properties of Fluoroplastic Modified with Titanium Nanoparticles, *AIP Conference Proceedings*, 2017, vol. 1915, issue 1, pp. 040002-1 - 040002-4, doi: 10.1063/1.5017350

6. Kamal M.R., Sourour S. Kinetics and Thermal Characterization of Thermoset Cure, *Polymer Engineering and Science*, 1973, vol. 13, no. 1, pp. 59-64.

7. Lee J.H., Lee J.W. Kinetic Parameters Estimation for Cure Reaction of Epoxy Based Vinyl Ester Resin, *Polymer Engineering and Science*, 1994, vol. 34, no. 9, pp. 742-749.

8. Vafayan M., Abedini H., Ghoreishy M.H.R., Beheshty M.H. Effect of Cure Kinetic Simulation Model on Optimized Thermal Cure Cycle for Thin-Sectioned Composite Parts, *Polymer Composites*, 2013, vol. 34, no. 7, pp. 1172-1179, doi: 10.1002/pc.22526

9. Kumar K.V., Safiullah M., Ahmad A.N.K. Root Cause Analysis of Heating Rate Deviations in Autoclave Curing of CFRP Structures, *International Journal of Innovative Research and Studies*, 2013, vol. 2, no. 5, pp. 369-378.

10. Mishchenko S.V., Dmitriev O.S., Ponomarev S.V. [Mathematical modeling of curing process of polymer composite material products by hot pressing method], *Transactions of the Tambov State Technical University*, 1998, vol. 4, no. 4, pp. 390-399. (In Russ., abstract in Eng.)

11. Haykin S. *Neyronnyye seti. Polnyy kurs* [Neural networks. Full course], Moscow: Vil'yams, 2006, 1104 p. (In Russ.)

12. Dmitriev O.S., Zhivenkova A.A. Numerical-Analytical Solution of the Nonlinear Coefficient Inverse Heat Conduction Problem, *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2018, vol. 91, no. 6, pp. 1353-1364, doi: 10.1007/s10891-018-1869-x

13. Dmitriev O.S., Kirillov V.N., Mischenko S.V., Dmitriev A.O. Computer-Measuring System for Research into Properties of Glutinous Prepregs and Calculation of Curing Cycles of the Polymer Composite Materials on Their Base, *Polymer Science, Series D*, 2010, vol. 3, no. 1, pp. 20-25, doi: 10.1134/S199542121001003X

---

### **Modellierung kinetischer Eigenschaften des Aushärtungsprozesses von Polymerverbundwerkstoffen auf dem neuronalen Netzwerk**

**Zusammenfassung:** Es ist die Möglichkeit betrachtet, die kinetischen Eigenschaften des Härtingsprozesses von Polymerverbundwerkstoffen (am Beispiel des kohlefaserverstärkten Kunststoffs) auf der Grundlage der Anwendung der künstlichen neuronalen Netze zu modellieren. Unter Verwendung der neuronalen Netzwerkmodellierung ist die Abhängigkeit der Änderung der kinetischen Funktion des Polymerverbundstoffs vom Härtingsgrad erhalten. Die Leistung des neuronalen Netzwerks ist mit experimentellen Daten unter Verwendung klassischer Approximationsmethoden verglichen.

---

### **Modélisation des caractéristiques cinétiques du processus du durcissement des composites polymères à partir d'un réseau neuronal**

**Résumé:** Est envisagée la possibilité de modéliser les caractéristiques cinétiques du processus du durcissement des composites polymères (à l'exemple de la fibre de carbone) à la base de l'utilisation des réseaux neuronaux artificiels. Avec l'utilisation de la simulation du réseau neuronal est obtenue une dépendance du changement de la fonction cinétique du composite polymère du degré du durcissement. La performance du réseau neuronal a été comparée aux données expérimentales par des méthodes classiques d'approximation.

---

**Авторы:** *Дмитриев Олег Сергеевич* – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой «Физика»; *Барсуков Александр Андреевич* – аспирант кафедры «Физика», ФГБОУ ВО «ТГТУ», г. Тамбов, Россия.

**Рецензент:** *Грибков Алексей Николаевич* – доктор технических наук, доцент, заведующий кафедрой «Энергообеспечение предприятий и теплотехника», ФГБОУ ВО «ТГТУ», г. Тамбов, Россия.