УДК 004.81: 678.58
DOI: 10.17277/vestnik.2026.03.pp.424-435

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МОДЕЛЕЙ КИНЕТИКИ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ ВУЛКАНИЗАЦИИ РЕЗИНОВОЙ СМЕСИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФИЗИЧЕСКИ-ИНФОРМИРОВАННОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ

© А. А. Маслов[1] ✉, С. Г. Тихомиров[1], О. В. Карманова[2], И. А. Хаустов[1], Е. Е. Титова[1]

[1] *Кафедра информационных и управляющих систем, imasslove@mail.ru;*
[2] *кафедра технологии органических соединений, переработки полимеров и техносферной безопасности, ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет инженерных технологий», Воронеж, Российская Федерация*

Ключевые слова: изотермическая вулканизация; кинетическая модель; математическое моделирование; реометрия.

Аннотация: Представлен сравнительный анализ кинетических моделей изотермической вулканизации резиновой смеси на основе физически-информированных нейронных сетей. Рассмотрена модель Камала и расширенная кинетическая модель Корана, описываемая системой дифференциальных уравнений. Обе модели реализованы в рамках единой архитектуры физически-информированной нейронной сети и обучены на экспериментальных реометрических данных, представляющих зависимость крутящего момента от времени, при температурах 145, 155 и 165 °С. Проведен анализ нейронной сети, используя каждую из кинетических моделей. Показано, что расширенная модель Корана обеспечивает более высокую точность по показателям среднего абсолютного отклонения и среднеквадратичного отклонения по сравнению с моделью Камала. Полученные результаты подтверждают эффективность применения физически-информированной нейронной сети для определения параметров кинетических моделей вулканизации и могут быть использованы при расчете режимов вулканизации толстостенных резинотехнических изделий.

Обозначения

$C_A, C_B, C_{B*}, C_{\mathrm{vu_{St}}}, C_{\mathrm{vu_{Lab}}}, C_C, C_{R*}, C_R$ – концентрации ДАВ, предшественника сшивания; активной формы предшественника сшивания; стабильных вулканизационных узлов; лабильных вулканизационных узлов; внутримолекулярно связанной серы; макрорадикала каучука; каучука, моль/кг;

C_{vu} – суммарная концентрация элементов сетки;

$k_1, \ldots, k_9$ – константы скоростей реакций, $\mathrm{с}^{-1}$ (k_4, кг·$\mathrm{с}^{-1}$/моль);

$k_{\mathrm{м}}$ – коэффициент масштабирования;

L – функция потерь;

L_{data} – ошибка аппроксимации экспериментальных данных;

L_{IC} – ошибка по начальным условиям;

L_{ODE} – оценка невязок по отклонению скорости вулканизации;

L_{range} – штраф за выход допустимых значений;

m, n – эмпирические показатели порядка реакции;

T – температура, °С;

W_{data}, W_{ODE}, W_{IC}, W_{range} – весовые коэффициенты функции потерь;

α_1 – степень вулканизации, усл. ед.;

α, β, γ, δ – стехиометрические коэффициенты.

Введение

Вулканизация является одним из ключевых этапов формирования эксплуатационных свойств резинотехнических изделий, таких как автомобильные шины, определяя прочность, эластичность и долговечность готовых изделий. Современные требования к ресурсосбережению и энергоэффективности производства стимулируют развитие расчетных методов прогнозирования свойств и создание математических моделей, позволяющих заранее оценивать влияние рецептуры и режимов вулканизации на свойства готовых изделий. При этом наибольший интерес представляют модели, которые учитывают как термодинамику, так и кинетику химических превращений, происходящих в процессе формирования пространственной сетки вулканизатов [1]. Классические подходы к моделированию часто опираются на упрощенные кинетические схемы и используются в виде эмпирических зависимостей, определяемых по данным реометрии или дифференциальной сканирующей калориметрии [2]. В результате литературного обзора выявлена одна из наиболее распространенных моделей вулканизации – модель Камала, которая описывает изменение степени вулканизации во времени с использованием кинетического уравнения с небольшим числом параметров [2]. Согласно данным современных исследований [2 – 4] показана недостаточная эффективность применения традиционных подходов к математическому моделированию вулканизационных процессов, происходящих при переработке сложных по составу изделий, полученных на основе многокомпонентных резиновых смесей, где наблюдаются значительные градиенты температур.

Для решения этой проблемы и интенсификации процесса вулканизации наиболее перспективным и актуальным инструментом признаются физически-информированные нейронные сети (Physics-Informed Neural Networks – PINN) [3, 4], способность которых интегрировать физические законы и учитывать многостадийную природу реакции делает их ключевым элементом в разработке кинетических моделей повышенной точности, что подтверждается рядом недавних публикаций в области полимерной инженерии [3 – 5].

Актуальность исследования обусловлена необходимостью повышения точности расчета режимов вулканизации, особенно для крупногабаритных и армированных изделий [6 – 8]. В таких изделиях из-за низкой теплопроводности возможно неравномерное распределение температуры по объему, что может приводить к локальному перегреву материала или, наоборот, к недостаточной степени вулканизации в отдельных зонах. Это ухудшает механические свойства изделий и снижает их эксплуатационную надежность. Классические подходы к идентификации кинетических параметров, базирующиеся на аппроксимации реометрических данных методами локальной оптимизации, характеризуются проблемой многовариантности решения [3]. Существует вероятность получения множества различных наборов параметров, обеспечивающих равнозначную точность описания эксперимента, при этом результат поиска критически зависит от выбранных начальных условий.

Развитие методов машинного обучения открывает возможность интеграции априорных физических знаний о процессе вулканизации непосредственно в структуру моделей [4]. Физически-информированные нейронные сети позволяют в общем случае оценивать эмпирические параметры детерминированных математических моделей, описывающих физико-химические процессы на основе дифференциальных уравнений различной сложности. Применительно к процессам вулканизации речь идет об оценке кинетических параметров вулканизации и получении устойчивых решений при ограниченном объеме экспериментальных данных. Применение PINN к моделям изотермической вулканизации является перспективным направлением, особенно при сравнении альтернативных кинетических схем.

Цель работы – сравнительный анализ точности кинетических моделей изотермической вулканизации резиновой смеси на базе архитектуры физически-информированной нейронной сети для определения степени структурирования резиновых изделий. Для достижения цели проводятся оценка качества аппроксимации экспериментальных данных моделью Камала и расширенной моделью на основе общепризнанной схемы Корана, а также анализ влияния структуры кинетической модели на точность описания степени вулканизации.

Описание исследуемых моделей

Математическая модель Камала (1), показывающая изменение степени структурирования $\alpha_1(t)$ как результат конкурирующих процессов сшивания молекул, представлена дифференциальным уравнением первого порядка с параметрами, зависящими от температуры:

$$\frac{d\alpha_1}{dt} = kk_1(1-\alpha_1)^m + kk_2\alpha_1^n . \quad (1)$$

Температурная зависимость констант реализуется по закону Аррениуса, что позволяет использовать модель при разных режимах изотермической вулканизации [2].

При определении параметров модель Камала фактически описывает макрокинетику формирования сетки без выделения промежуточных стадий, таких как образование активированных связей, промежуточных радикалов и продуктов деструкции. Это упрощает процедуру подбора параметров, но ограничивает возможности экстраполяции модели на существенно отличающиеся режимы и рецептурные варианты [2].

Модернизированная схема Корана включает дополнительные реакции, приводящие к модификации молекул серы, образованию макрорадикала и его реакцию с действительным агентом вулканизации (**ДАВ**) [1]. Математическая модель представлена системой дифференциальных уравнений (2), описывающих кинетику процесса, дополненную начальными условиями для концентраций основных реагентов и промежуточных соединений. Модель показывает изменение концентраций исходных связей каучука, серосодержащих структур, активных центров, промежуточной вулканизационной сетки и продуктов реакции [6 – 8].

Система уравнений имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
&\frac{dC_A}{dt} = -k_1C_A - k_4C_AC_{B*};\\
&\frac{dC_B}{dt} = k_1C_A - k_2C_B + \beta k_4C_AC_{B*} + k_9C_{R*};\\
&\frac{dC_{B*}}{dt} = k_2C_B - \left(k_3 + k_5 + k_7\right)C_{B*} + k_6C_{\mathrm{vu_{Lab}}} - k_4C_AC_{B*};\\
&\frac{dC_{\mathrm{vu_{St}}}}{dt} = \alpha k_3C_{B*};\\
&\frac{dC_{\mathrm{vu_{Lab}}}}{dt} = \gamma k_5C_{B*} - k_6C_{\mathrm{vu_{Lab}}};\\
&\frac{dC_C}{dt} = \delta k_7C_{B*}; \quad (2)
\end{aligned}$$

$$\frac{dC_{R*}}{dt} = k_8 C_R - k_9 C_{R*};$$

$$\frac{dC_R}{dt} = -k_8 C_R;$$

$$C_A(0) = \xi\,[S_8]\cdot[A_C]\cdot[\mathrm{Akt}]^{\theta}\cdot[C_R(0)]^{\eta};$$

$$C_B(0) = 0;$$

$$C_{B*}(0) = 0;$$

$$C_{\mathrm{vu_{St}}}(0) = 0;$$

$$C_{\mathrm{vu_{Lab}}}(0) = 0;$$

$$C_C(0) = 0;$$

$$C_{R*}(0) = C_R(0)^{\eta}.$$

Начальная концентрация ДАВ определяется произведением

$$[\text{ДАВ}] = \xi\,[S_8]\cdot[A_C]\cdot[\mathrm{Akt}]^{\theta}\cdot[R]^{\eta}, \tag{3}$$

где ξ, θ, η – константы; $[\mathrm{Akt}]^{\theta}$, $[S_8]$, $[R]^{\eta}$, $[A_C]$ – начальные концентрации активатора (оксида цинка), серы, макрорадикала каучука и ускорителя соответственно.

Степень вулканизации определяется по формуле

$$\alpha_1 = k_{\text{м}} C_{\text{vu}}\,, \tag{4}$$

где C_{vu} – суммарная концентрация элементов сетки ($C_{\text{vuSt}} + C_{\text{vuLab}}$); $k_{\text{м}}$ – коэффициент масштабирования, обеспечивающий приведение значения C_{vu} к диапазону изменения степени вулканизации.

Описание физически-информированной нейронной сети

В рассматриваемой работе физически-информированная нейронная сеть (*англ*. Physics-Informed Neural Network (**PINN**)) строится как многослойный персептрон, включающий входной слой, два скрытых слоя по 64 нейрона и выходной слой (рис. 1). Нейронная сеть принимает на вход время и на выходе предсказывает степень вулканизации $\alpha_1(t)$.

В скрытых слоях нейронной сети в качестве функции активации используется гиперболический тангенс th. Выбор данной функции обусловлен ее гладкостью и непрерывной дифференцируемостью, что является принципиально важным при использовании физико-информированных нейронных сетей, основанных на вычислении производных выходной величины по входной переменной. Функция th обеспечивает устойчивую аппроксимацию нелинейных зависимостей и позволяет корректно вычислять производные с помощью автоматического дифференцирования, что применяется при расчете функции потерь в PINN. Кроме того, использование th способствует более стабильному процессу обучения по сравнению с кусочно-линейными функциями активации. В выходном слое используется сигмоидальная функция активации, обеспечивающая ограничение значений степени вулканизации в диапазоне от 0 до 1, что соответствует физическому смыслу рассматриваемой величины.

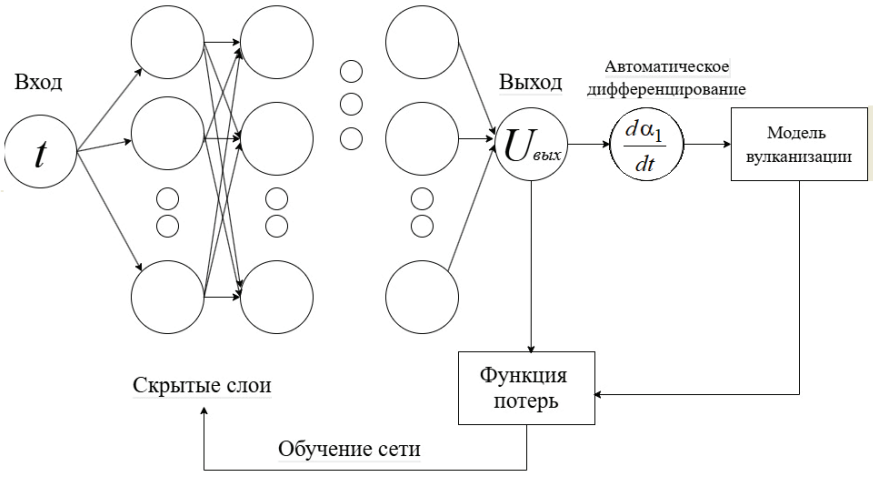

Рис. 1. Архитектура PINN для расчета степени завершенности вулканизации при изотермических условиях

Ключевой особенностью метода является формирование функции потерь [3 – 5, 9], включающей несколько слагаемых (5). В рассматриваемой постановке использовались:

– ошибка аппроксимации экспериментальных данных L_{data};

– оценка невязок по отклонению скорости вулканизации L_{ODE}, вычисляемая через автоматическое дифференцирование по времени;

– ошибка по начальным условиям L_{IC};

– дополнительный штраф L_{range}, ограничивающий значения степеней и концентраций физически допустимыми интервалами.

Итоговая функция потерь имеет вид

$$L = W_{\text{data}} \cdot L_{\text{data}} + W_{\text{ODE}} \cdot L_{\text{ODE}} + W_{\text{IC}} \cdot L_{\text{IC}} + W_{\text{range}} \cdot L_{\text{range}}, \quad (5)$$

здесь весовые коэффициенты подобраны раздельно для каждого температурного режима.

Настройки для обучения нейросетевых моделей подбирались с учетом различий в скорости протекания реакции при разных температурах. Для моделей использовались следующие параметры нейронной сети (табл. 1).

Число эпох обучения определяет количество итераций, в ходе которых нейронная сеть последовательно уточняет параметры модели. В процессе каждой эпохи выполняется полный проход по обучающим данным с вычислением функции потерь и обновлением параметров. Различие в числе эпох обучения обусловлено особенностями формы экспериментальных зависимостей. Несмотря на более высокую температуру 165 °C, соответствующая кривая характеризуется быстрым выходом на насыщение и сравнительно простой формой, что облегчает ее аппроксимацию.

Таблица 1

Параметры обучения нейронной сети

Параметр PINN	Число эпох	W_{data}	W_{ODE}	W_{IC}	W_{range}
145 °C	20000	1000	1,0	10	10
155 °C	40000	3000	0,5	10	10
165 °C	20000	1000	1,0	10	10

В то же время для температуры 155 °С зависимость степени вулканизации от времени имеет более протяженный переходный участок и выраженную S-образную форму, что усложняет задачу аппроксимации и требует увеличения числа эпох обучения для достижения требуемой точности.

Весовые коэффициенты определяют относительную значимость различных слагаемых функции потерь при обучении нейронной сети. Их подбор позволяет обеспечить высокую точность аппроксимации экспериментальных данных, сохранив физическую сущность модели аппроксимации.

Согласно анализу параметров обучения видно, что для температуры 155 °С использованы увеличенные значения весового коэффициента, соответствующего аппроксимации экспериментальных данных, и уменьшенное значение коэффициента при оценке невязок скоростей. Это связано с тем, что при данной температуре наблюдается более сложная форма кинетической кривой, включающая протяженный переходный участок, что затрудняет ее точное описание с использованием только физической модели. В связи с этим при обучении нейронной сети больший приоритет отдан согласованию с экспериментальными данными, что потребовало увеличения числа эпох обучения и обеспечило высокую точность совпадения расчетных и измеренных зависимостей. При этом слагаемое, связанное с оценкой невязок скоростей реакций, обеспечивает соблюдение физической сущности модели процесса, а дополнительные члены функции потерь позволяют использовать при аппроксимации корректные начальные условия и ограничивать значения переменных в физически допустимых пределах. Для температур 145 и 165 °С форма зависимостей относительно проста, что позволяет использовать меньшее число эпох.

Ключевой особенностью предложенного подхода является вариативность блока функции потерь – выход нейронной сети формируется на основе физической модели вулканизации, где в данном случае это либо модель Корана, условно назовем «модель № 1», либо модель Камала – «модель № 2», что позволяет адаптировать PINN под различные уровни детализации кинетики. В модели № 2 используется одно дифференциальное уравнение, что дает меньшую размерность по сравнению с моделью № 1. При этом обучение обеих конфигураций осуществлялось при использовании одинаковой интервальной сетки дискретизации по времени экспериментальных данных, что обеспечивает строгую сопоставимость результатов и минимизирует влияние погрешностей численного расчета.

Численные эксперименты реализованы на языке Python с использованием библиотек PyTorch, NumPy и Matplotlib для обучения и визуализации результатов [9]. Для каждой температуры выполнялся цикл обучения моделей № 1 и № 2, после чего вычислялись прогнозные значения $\alpha_1(t)$ и оценивались метрики качества.

Экспериментальные данные

В качестве натурного эксперимента использована резиновая смесь на основе каучуковых композиций, применяемых в протекторных слоях шин. В состав смеси входят натуральный и синтетический каучуки, технический углерод, пластификатор, сера и ускорители вулканизации. Испытания смеси проводили на реометре в изотермических условиях для определения ее вулканизационных свойств. В ходе эксперимента регистрировалась зависимость крутящего момента от времени при температурах 145, 155 и 165 °С.

Приведем состав резиновой смеси, масс. ч.:

Синтетический каучук …….	100
Технический углерод ……	30
Мягчитель ……..	15
Сера техническая ……	2
Стеариновая кислота ……...	2
Оксид цинка ……	2

Полученные реометрические кривые нормированы и преобразованы в степень вулканизации $\alpha_1(t)$. Нормализация выполнялась линейным масштабированием по минимальному и максимальному значениям крутящего момента, что обеспечило сопоставимость результатов при различных температурах.

На рисунке 2 представлены результаты аппроксимации экспериментальных данных с использованием физически-информированной нейронной сети для исследуемых моделей. Графики позволяют отдельно оценить качество описания процесса каждой из рассматриваемых моделей. Также показано их совместное сравнение с экспериментальными данными, что дает возможность наглядно сопоставить точность моделей на различных стадиях вулканизации.

Полученные графики демонстрируют высокую степень совпадения расчетных и экспериментальных данных на всем интервале времени. Модернизированная модель Корана корректно воспроизводит как начальный участок процесса, так и стадию интенсивного роста и выход на плато вулканизации. Благодаря учету в модели № 1 многостадийности и большему количеству параметров, она эффективнее адаптируется к различным этапам вулканизации.

В результате обучения нейронной сети получены параметры математической модели № 1 (табл. 2).

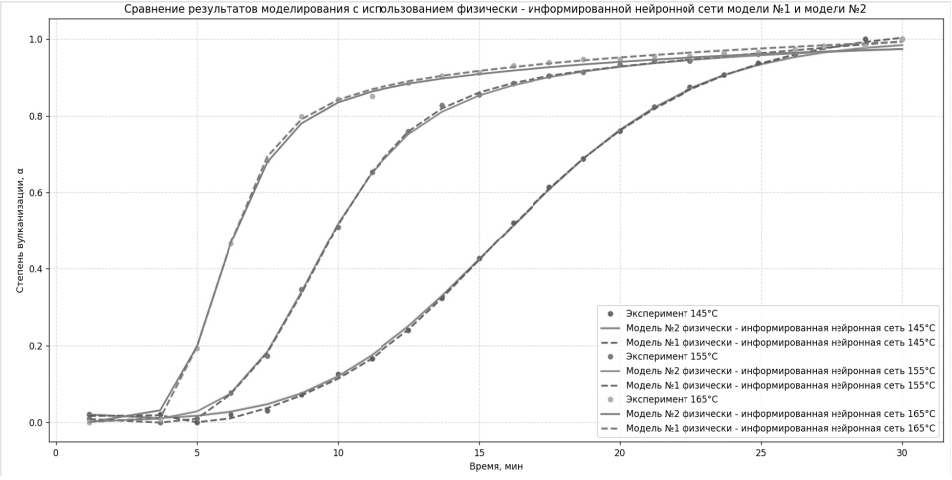

Рис. 2. Результаты расчетов степени вулканизации с использованием PINN

Таблица 2

Результаты идентификации параметров модели № 1

T, °C	k_1	k_2	k_3	k_4	k_5	k_6	k_7
145	0,0084	0,2419	0,5680	0,0979	1,3674	0,6046	0,5680
155	$1{,}12\cdot10^{-4}$	$8{,}05\cdot10^{-3}$	$3{,}76\cdot10^{-1}$	$1{,}56\cdot10^{-2}$	1,0475	$4{,}86\cdot10^{-1}$	$3{,}75\cdot10^{-1}$
165	0,0090	0,2798	0,6020	0,1380	1,4736	0,5186	0,6020
T, °C	k_8	k_9	α	β	γ	δ	$k_м$
145	0,0068	0,0492	0,0016	0,9176	1,8345	0,007	0,955
155	$7{,}27\cdot10^{-4}$	$6{,}73\cdot10^{-4}$	–0,0007	1,5256	1,7142	–0,003	0,931
165	0,0290	0,1694	0,0201	–0,3792	1,8498	0,002	0,942

Таблица 3

Результаты идентификации параметров модели №2

T, °C	kk_1	kk_2	m	n
145	0,1788	0,1726	3,0243	3,3152
155	0,1734	0,1665	2,2065	4,9603
165	0,2026	0,1701	1,9865	7,0386

Анализ полученных зависимостей показывает, что модели в сочетании с физически-информированной нейронной сетью корректно воспроизводят общий характер изменения степени вулканизации, соответствующий сигмоидальной форме кривых. Результаты идентификации параметров модели Камала приведены в табл. 3.

В целом следует отметить, что модель Камала обеспечивает корректное качественное описание кинетики вулканизации, однако ее ограниченная структура не позволяет в полной мере учитывать особенности начального индукционного периода и плато вулканизации, что проявляется в локальных отклонениях от экспериментальных данных.

Анализируя функцию потерь PINN, включающую кинетическую модель процесса, выявлены следующие характеристики: модель Камала имеет обобщенную кинетику, состоит из одного уравнения; нет связи с геометрией, только связь степени завершенности от времени; параметры модели – эмпирические показатели формы кривой, набор параметров хорошо описывает экспериментальную кинетику и позволяет прогнозировать поведение при других температурах или режимах, но это «параметры модели», а не «чистые химические константы»; модель не учитывает теплоперенос, изменения температурных градиентов по толщине изделий. Модернизированная модель Корана представлена термокинетической моделью расчета концентраций реагентов реакции вулканизации, состоит из 8 дифференциальных уравнений, начальные условия представлены начальными концентрациями компонентов смеси; степень вулканизации определяется как функция времени. В каждой из исследуемых моделей учитывается температура процесса в виде констант скоростей химических реакций, описываемых уравнением Аррениуса.

Таким образом, использование модернизированной модели позволяет повысить точность описания процесса вулканизации на всех стадиях, что особенно важно при анализе начального периода и перехода к насыщению. Это подтверждает эффективность применения физико-информированных нейронных сетей для определения параметров более сложных кинетических моделей.

Количественное сравнение моделей выполнялось по среднему абсолютному отклонению и среднеквадратичному отклонению между прогнозируемой и экспериментальной степенью вулканизации (табл. 4).

Во всех случаях использование физико-информированных нейронных сетей для модернизированной модели дает существенно меньшие значения среднего абсолютного отклонения по сравнению с моделью Камала, особенно при температуре 155 °C, где относительная погрешность уменьшается почти на порядок. При этом различия в среднеквадратичном отклонении менее выражены, что объясняется высокой степенью общего совпадения кривых, однако и здесь модернизированная модель демонстрирует преимущество.

Таблица 4

Метрики качества моделирования

T, °C	Среднее абсолютное отклонение, %		Среднеквадратичное отклонение, %	
	Модель Камала	Модернизированная модель Корана	Модель Камала	Модернизированная модель Корана
145	7,552	4,3	0,0098	0,0061
155	13,563	2,0	0,0101	0,0053
165	12,368	0,9	0,0109	0,0044

Полученные результаты показывают, что модернизированная модель Корана при корректном определении ее параметров с использованием физико-информированных нейронных сетей обеспечивает заметное повышение точности описания процесса вулканизации. Особенно важно, что модернизированная модель не только уменьшает среднюю погрешность, но и лучше воспроизводит форму кривых в области индукционного периода и выхода на плато, что критично при расчете времени выдержки изделий в пресс-формах.

Заключение

Выполнен сравнительный анализ двух кинетических моделей изотермической вулканизации резиновой смеси – модели Камала и модернизированной модели Корана, реализованных с использованием физико-информированных нейронных сетей. На основании реометрических данных при температурах 145, 155 и 165 °C показано, что модернизированная модель обеспечивает более низкие значения среднего абсолютного и среднеквадратичного отклонений, а также лучшее согласование с экспериментальными зависимостями степени вулканизации.

Использование физико-информированных нейронных сетей для определения параметров кинетических моделей вулканизации является перспективным направлением, поскольку позволяет учитывать сложный характер протекания процесса и не требует в процессе параметрической идентификации многократного расчета математических моделей, что при условии большой размерности и сложности последних подразумевает увеличение использования ресурсов вычислительной системы и времени расчетов. В дальнейшем планируется распространить предложенный подход на нестационарные температурные режимы и учесть перенос тепла и массы в толстостенных армированных конструкциях, что позволит создавать цифровые модели технологических процессов, учитывающие как кинетику вулканизации, так и тепломассообмен в изделии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ФГБОУ «Воронежский государственный университет инженерных технологий» № FZGW-2026-0006 «Научно-практические основы синтеза, модификации и переработки полимеров с применением природоподобных (интеллектуальных) технологий».

Список литературы

1. Coran, A. Y. Vulcanization. Part IV. The Effects of Compounding Variables on the Nature of Rubber Networks / A. Y. Coran // Rubber Chemistry and Technology. – 1964. – Vol. 37, No. 3. – P. 673–678.

2. Kamal, M. R. Thermoset characterization for moldability analysis / M. R. Kamal // Polymer Engineering & Science. – 1974. – Vol. 14, No. 3. – P. 231–239.

3. Raissi, M. Physics-Informed Neural Networks: A Deep Learning Framework for Solving Forward and Inverse Problems Involving Nonlinear Partial Differential Equations / M. Raissi, P. Perdikaris, G. E. Karniadakis // Journal of Computational Physics. – 2019. – Vol. 378. – P. 686–707. doi: 10.1016/j.jcp.2018.10.045

4. Physics-Informed Machine Learning / G. E. Karniadakis, Y. Kevrekidis, L. Lu, P. Perdikaris, S. Wang, L. Yang // Nature Reviews Physics. – 2021. – Vol. 3, No. 6. – P. 422–440. doi: 10.1038/s42254-021-00314-5

5. Jagtap, A. D. Extended Physics-Informed Neural Networks (XPINNs): A generalized Space-Time Domain Decomposition Based Deep Learning Framework for Nonlinear Partial Differential Equations / A. D. Jagtap, G. E. Karniadakis // Communications in Computational Physics. – 2020. – Vol. 28, No. 5. – P. 2002–2041. doi: 10.4208/cicp.OA-2020-0164

6. Программный комплекс для решения задач математического моделирования процесса изотермической вулканизации / С. Г. Тихомиров, О. В. Карманова, Ю. В. Пятаков, А. А. Маслов // Вестник Воронежского государственного университета инженерных технологий. – 2016. – № 3(69). – С. 93–99. doi: 10.20914/2310-1202-2016-3-93-99

7. Управление процессом вулканизации на основе моделирования и оценки ключевых параметров модели / С. Г. Тихомиров, А. А. Маслов, О. В. Карманова, И. А. Хаустов, В. К. Битюков // Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Системный анализ и информационные технологии. – 2024. – № 4. – С. 22–34. doi: 10.17308/sait/1995-5499/2024/4/22-34

8. Тихомиров, С. Г. Программное обеспечение для исследования процессов вулканизации полимерных композиций с помощью математического моделирования / С. Г. Тихомиров, А. А. Маслов, О. В. Карманова, [и др.] // Вестник Тамбовского государственного технического университета. – 2022. – Т. 28, № 4. – С. 544–558. doi: 10.17277/vestnik.2022.04.pp.544-558

9. Оптимизация гиперпараметров в моделях машинного обучения: сравнительное исследование / В. В. Денисенко, А. А. Маслов, Л. С. Чесников, К. С. Клименко // Автоматизация. Современные технологии. – 2023. – Т. 77, № 10. – С. 475–480. doi: 10.36652/0869-4931-2023-77-10-475-480

Comparative Analysis of Kinetic Models of Isothermal Vulcanization of Rubber Compounds Using a Physically Informed Neural Network

© A. A. Maslov[1] ✉, S. G. Tikhomirov[1], O. V. Karmanova[2], I. A. Khaustov[1], E. E. Titova[1]

[1] *Department of Information and Control Systems, imasslove@mail.ru;*
[2] *Department of Organic Compound Technology, Polymer Processing and Technosphere Safety, Voronezh State University of Engineering Technologies, Voronezh, Russian Federation*

Keywords: isothermal vulcanization; kinetic model; mathematical modeling; rheometry.

Abstract: A comparative analysis of kinetic models of isothermal vulcanization of a rubber mixture based on physically informed neural networks is presented. The Kamal model and the extended kinetic Koran model, described by a system of

differential equations, are considered. Both models are implemented within a single architecture of a physically informed neural network and are trained on experimental rheometric data representing the torque-time dependence at temperatures of 145, 155, and 165 °C. A neural network analysis was performed using each of the kinetic models. It was shown that the extended Koran model provides higher accuracy in terms of the average absolute deviation and the standard deviation compared to the Kamal model. The obtained results confirm the effectiveness of using a physically informed neural network to determine the parameters of the kinetic models of vulcanization and can be used in the calculation of vulcanization modes.

References

1. Coran A.Y. Vulcanization. Part IV. The Effects of Compounding Variables on the Nature of Rubber Networks, *Rubber Chemistry and Technology*, 1964, vol. 37, no. 3, pp. 673-678.

2. Kamal M.R. Thermoset characterization for moldability analysis, *Polymer Engineering & Science*, 1974, vol. 14, no. 3, pp. 231-239.

3. Raissi M., Perdikaris P., Karniadakis G.E. Physics-Informed Neural Networks: A Deep Learning Framework for Solving Forward and Inverse Problems Involving Nonlinear Partial Differential Equations, *Journal of Computational Physics*, 2019, vol. 378, pp. 686-707. doi: 10.1016/j.jcp.2018.10.045

4. Karniadakis G.E., Kevrekidis Y., Lu L., Perdikaris P., Wang S., Yang L. Physics-Informed Machine Learning, *Nature Reviews Physics*, 2021, vol. 3, no. 6, pp. 422-440. doi: 10.1038/s42254-021-00314-5

5. Jagtap A.D., Karniadakis G.E. Extended Physics-Informed Neural Networks (XPINNs): A generalized Space-Time Domain Decomposition Based Deep Learning Framework for Nonlinear Partial Differential Equations, *Communications in Computational Physics*, 2020, vol. 28, no. 5, pp. 2002-2041. doi: 10.4208/cicp.OA-2020-0164

6. Tikhomirov S.G., Karmanova O.V., Pyatakov Yu.V., Maslov A.A. [Software package for solving problems of mathematical modeling of the isothermal vulcanization process], *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta inzhenernykh tekhnologiy* [Proceedings of Voronezh State University of Engineering Technologies], 2016, no. 3(69), pp. 93-99. doi: 10.20914/2310-1202-2016-3-93-99 (In Russ., abstract in Eng.)

7. Tikhomirov S.G., Maslov A.A., Karmanova O.V. [et al.] [Control of the vulcanization process based on modeling and estimation of key model parameters], *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Sistemnyy analiz i informatsionnye tekhnologii* [Proceedings of Voronezh State University. Series: Systems Analysis and Information Technologies], 2024, no. 4, pp. 22-34. doi: 10.17308/sait/1995-5499/2024/4/22-34 (In Russ., abstract in Eng.)

8. Tikhomirov S.G., Maslov A.A., Karmanova O.V. [et al.] [Software for studying vulcanization processes of polymer compositions using mathematical modeling]. *Transactions of the Tambov State Technical University*, 2022, vol. 28, no. 4, pp. 544-558. doi: 10.17277/vestnik.2022.04.pp.544-558 (In Russ., abstract in Eng.)

9. Denisenko V.V., Maslov A.A., Chesnikov L.S., Klimenko K.S. [Hyperparameter optimization in machine learning models: a comparative study], *Avtomatizatsiya. Sovremennye tekhnologii* [Automation. Modern Technologies], 2023, vol. 77, no. 10, pp. 475-480. doi: 10.36652/0869-4931-2023-77-10-475-480 (In Russ., abstract in Eng.)

Vergleichende Analyse von Modellen zur isothermen Vulkanisationskinetik von Kautschukmischungen mithilfe des physikalisch fundierten neuronalen Netzes

Zusammenfassung: Es ist eine vergleichende Analyse kinetischer Modelle der isothermen Vulkanisation von Kautschukmischungen auf Basis physikalisch informierter neuronaler Netze vorgestellt. Das Kamal-Modell und das erweiterte Koran-Modell, beschrieben durch ein System von Differentialgleichungen, sind betrachtet. Beide Modelle sind in einer einzigen Architektur des physikalisch informierten neuronalen Netzes implementiert und sind anhand experimenteller rheometrischer Daten trainiert, die die Drehmoment-Zeit-Abhängigkeit bei Temperaturen von 145, 155 und 165 °C darstellen. Mit jedem der kinetischen Modelle ist die Analyse mittels neuronaler Netze durchgeführt. Es hat sich gezeigt, dass das erweiterte Koran-Modell im Vergleich zum Kamal-Modell eine höhere Genauigkeit hinsichtlich der mittleren absoluten Abweichung und der mittleren quadratischen Abweichung aufweist. Die erzielten Ergebnisse bestätigen die Effektivität der Verwendung des physikalisch informierten neuronalen Netzes zur Bestimmung der Parameter der kinetischen Vulkanisationsmuster und können zur Berechnung von Vulkanisationsbedingungen für dickwandige Kautschukprodukte eingesetzt werden.

Analyse comparative des models de kinétique de vulcanisation isothermique de la méthylétechloréte à l'aide d'une network de neurons physicellement informé

Résumé: Est présentée une analyse comparative des modèles de kinétique de vulcanisation isothermique de la méthylétechlôrée à l'aide de réseaux de neurones physicellement informés. Sont décrits le modèle de Kamal et le modèle cinétique coranique étendu par le système d'équations différentielles. Les deux modèles sont mis en œuvre dans le cadre d'une architecture de réseau neuronal informatisé et formés à l'aide de données rhéométriques expérimentales représentant la relation couple-temps à des températures de 145, 155 et 165 °C. Est réalisée l'analyse du réseau neuronal à l'aide de tous les modèles cinétiques. Est démontré que le modèle élargi de Koran offre une plus grande précision en termes de déviation absolue moyenne et de variance en comparaison avec le modèle Kamal. Les résultats obtenus confirment l'efficacité de l'utilisation d'un réseau neuronal physiquement informé pour déterminer les paramètres des modèles cinétiques de vulcanisation et peuvent être utilisés pour calculer les régimes de vulcanisation des produits en caoutchouc à paroi épaisse.

Авторы: ***Маслов Александр Александрович*** – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры информационных и управляющих систем; ***Тихомиров Сергей Германович*** – доктор технических наук, профессор, профессор кафедры информационных и управляющих систем; ***Карманова Ольга Викторовна*** – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой технологии органических соединений, переработки полимеров и техносферной безопасности; ***Хаустов Игорь Анатольевич*** – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой информационных и управляющих систем; ***Титова Екатерина Евгеньевна*** – студент, ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет инженерных технологий», Воронеж, Россия.