

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
«Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»  
Физико-механический институт  
Высшая школа теоретической механики и математической физики

## Защита ВКР

# ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕХАНИЧЕСКИ МОТИВИРОВАННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Научный руководитель: Мельников Борис Евгеньевич, профессор ВШМиПУ, д.т.н., профессор  
Консультант: Грищенко Алексей Иванович, ассистент ВШМиПУ  
Выполнил: Никишин Андрей Павлович, студент группы 5030103/00101

Санкт-Петербург, 2024

# План доклада

- Цели, задачи, актуальность
- Постановка задачи
  - Общие сведения о композитных материалах
  - Закон Гука и эффективные свойства
  - Свойства волокнистых композитных материалов
- Аналитические оценки
- Метод конечно-элементной гомогенизации
  - Влияние выбора граничных условий на эффективные свойства
- Применение нейросетевых технологий
  - Построение нейронной сети на основе модификации правила смесей
  - Архитектура механически мотивированной нейронной сети
  - Верификация результатов моделирования
- Заключение и развитие

## Задачи и цели работы

- Собрать информацию о свойствах однонаправленных волокнистых композитных материалах
- Проанализировать существующие аналитические подходы нахождения эффективных характеристик
- Освоить модуль APDL и Ansys Material Designer
- Сформировать обучающий набор данных
- Написать и обучить нейронную сеть
- Верифицировать полученные результаты с экспериментальными данными

## Актуальность работы

- Уникальные свойства композитных материалов → **широкая область применения**
- Метод конечно-элементной гомогенизации основной подход для определения эффективных характеристик композиционных материалов → **данный способ является ресурсоемким**
- Актуальной задачей является разработка подхода для моделирования композитных материалов с заданными эффективными характеристиками → **применение нейросетевых технологий**

## Постановка задачи. Общие сведения о композитных материалах

- Объект исследования: однонаправленный волокнистый композитный материал (ОВКМ)
- ОВКМ – трансверсально изотропный материал
- Матрица и включение – изотропные материалы
- Элементарный представительный объем (ЭПО) композитного материала – минимальный объем, содержащий информацию о материале.

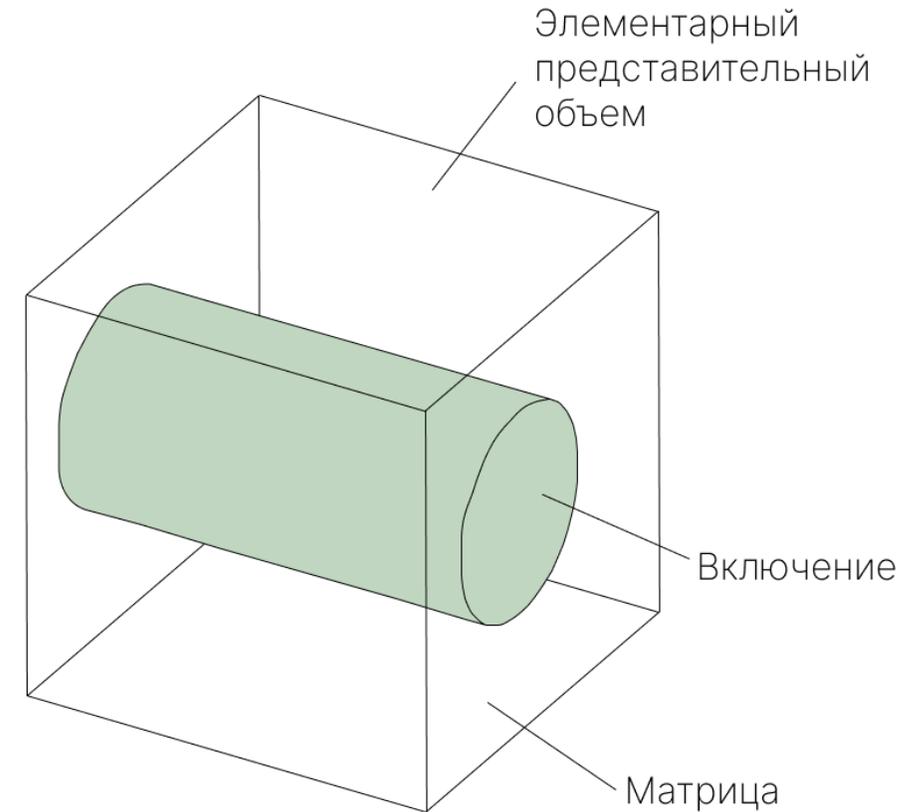


Рис. 1: ЭПО композитного материала

Постановка задачи. Закон Гука

$$[\bar{S}] = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_{11}} & -\frac{\nu_{12}}{E_{11}} & -\frac{\nu_{12}}{E_{11}} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{12}}{E_{11}} & \frac{1}{E_{22}} & -\frac{\nu_{23}}{E_{22}} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{12}}{E_{11}} & -\frac{\nu_{23}}{E_{22}} & \frac{1}{E_{22}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{23}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{12}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{12}} \end{bmatrix}$$

Закон Гука для *трансверсально-изотропного* упругого материала имеет вид:

$$\bar{\varepsilon} = \bar{S} \cdot \bar{\sigma}$$

$\bar{\varepsilon}$  – тензор деформации,

$\bar{\sigma}$  – тензор напряжений,

$\bar{S}$  – тензор упругих податливостей 4 ранга.

Задача сводится к нахождению 5 независимых констант (эффективных свойств):

$$E_{11}, E_{22}, G_{12}, G_{23}, \nu_{12}$$

## Постановка задачи. Свойства однонаправленных волокнистых композитов

Полимеры, используемые в качестве матрицы КМ [1]:

Material	Плотность	Модуль Юнга, ГПа	Коэффициент Пуассона
PBT	1,21-1,38	1,8-2,5	0,32-0,36
PA 6	1,10-1,12	2,8-2,9	0,30-0,35
PA 66	1,06-1,12	2,8-3,9	0,30-0,32
PA 12	1,01-1,03	0,5-1,9	0,30-0,35
PP	0,89-0,92	1,0-2,0	0,27-0,30
PEEK	1,29-1,34	3,1-8,3	0,27-0,30
PEKK	1,27-1,31	3,8-4,0	0,30-0,35
PET	1,30-1,38	2,5-4,0	0,30-0,35
PEI	1,26-1,79	2,7-6,4	0,30-0,36
PES	1,36-1,58	2,4-8,6	0,32-0,38
PMAA	1,17-1,26	2,8-3,4	0,32-0,35
PPS	1,35-1,43	3,4-4,3	0,32-0,36
PLA	1,18-1,26	0,5-3,5	0,26-0,30
HDPE	0,95-0,97	0,7-1,4	0,35-0,40
LDPE	0,92-0,93	0,1-0,4	0,38-0,42
PE	0,92-0,93	0,2-0,3	0,38-0,42
PC	1,18-1,22	2,4-2,5	0,30-0,35
PU	1,15-1,25	0,1-0,7	0,27-0,30

Таблица 1: Свойства матриц

Волокна, используемые в качестве включения КМ [1]:

Материал	Плотность	Модуль Юнга, ГПа	Коэффициент Пуассона
Glass fibers	2.46-2.54	70-90	0,2-0,3
Carbon fibers	1.94-2.15	230-725	0,2-0,3
Flax fibers	1.5	50	0,2-0,3
Jute fibers	1.3	26,5	0,2-0,3
Hemp fibers	1.45	64	0,25-0,35
Graphite	1.9	3,3	0,28-0,3
Aramid fibers	1.45	125	0,25-0,35

Таблица 2: Свойства включений

(!) Получилось 4000 пар матриц-включения при различной объемной доли волокна

## Аналитические подходы. Простейшие оценки.

1. Правило смесей [2,3]
2. Модель Халпина-Цая [4]
3. Модель Чамиса [5]

$$E_{11} = V_f E^f + V_m E^m, \nu_{12} = V_f \nu^f + V_m \nu^m$$

$$E_{22} = \frac{E^f E^m}{V_f E^m + V_m E^f}, G_{12} = \frac{G^f G^m}{V_f G^m + V_m G^f}$$

2. Voigt W. Über die Beziehung zwischen den beiden Elastizitätskonstanten Isotroper Körper. Wied. Ann, 1889, vol. 38, pp.573-587.

3. Reuss A. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle, 1929, no.9,

4. Halpin J.C., Kardos J.L. The Halpin-Tsai equations: A review. Polymer Engineering and Science, 1976, vol. 16, no.

5. Chamis Christos. «Mechanics of composite materials: past, present, and future». B: Composites Technology and Research 11.1 (1989), с. 3—14.

## Аналитические оценки. Модель Мори-Танака

Компоненты тензора Мори-Танака [6]:

$$\Lambda_{11} = \frac{E^m}{E^f} \left[ 1 + \frac{\nu^m(\nu^m - \nu^f)}{(1 + \nu^m)(1 - \nu^m)} \right], \Lambda_{22} = \frac{E^m(\nu^f + 4\nu^f\nu^m - 3) + (\nu^m + 1)(4\nu^m - 5)}{8E^f(1 + \nu^m)(\nu^m - 1)} = \Lambda_{33},$$

$$\Lambda_{12} = \frac{E^m(\nu^m(1 - \nu^f) - 2\nu^f) + E^f\nu^m}{2E^f(1 + \nu^m)(1 - \nu^m)}, \Lambda_{21} = \frac{E^m(\nu^m - \nu^f)}{2E^f(1 + \nu^m)(1 - \nu^m)},$$

$$\Lambda_{32} = \frac{E^m(3\nu^f + 4\nu^f\nu^m - 1) + (\nu^m + 1)(1 - 4\nu^m)}{8E^f(1 + \nu^m)(\nu^m - 1)} = \Lambda_{23},$$

$$\Lambda_{44} = \frac{G^m}{G^f} \frac{1}{4(1 - \nu^m)} + \frac{(3 - 4\nu^m)}{4(1 - \nu^m)}, \Lambda_{55} = \frac{G^m + G^f}{2G^f} = \Lambda_{66}$$

$$\Lambda_r = \Lambda_{11}(\Lambda_{22} + \Lambda_{32}) - 2\Lambda_{12}^2, \Lambda_{12} = \Lambda_{13}, \Lambda_{21} = \Lambda_{31},$$

## Аналитические оценки. Модель Мори-Танака

Эффективные свойства:

$$E_{11} = \frac{V_f^2 + V_m^2 \Lambda_r + V_f V_m (\Lambda_{11} + \Lambda_{22} + \Lambda_{32})}{V_f V_m [2\Lambda_{21} (S_{12}^m - S_{12}^f) + (\Lambda_{22} + \Lambda_{32}) S_{11}^f + \Lambda_{11} S_{11}^m] + \Lambda_r S_{11}^m V_m^2 + S_{11}^f V_f^2}$$

$$\nu_{12} = \frac{V_f^2 S_{12}^f - V_m^2 S_{12}^m + V_m V_f [2\Lambda_{12} (S_{11}^f - S_{11}^m) + (\Lambda_{22} + \Lambda_{32}) S_{12}^m - \Lambda_{11} S_{12}^f]}{V_f V_m [2\Lambda_{21} (S_{12}^m - S_{12}^f) + (\Lambda_{22} + \Lambda_{32}) S_{11}^f + \Lambda_{11} S_{11}^m] + \Lambda_r S_{11}^m V_m^2 + S_{11}^f V_f^2}$$

$$G_{12} = \frac{G^f G^m (V_f + V_m \Lambda_{66})}{V_f G^m + V_m \Lambda_{66} G^f}, G_{23} = \frac{G^f G^m (V_f + V_m \Lambda_{44})}{V_f G^m + V_m \Lambda_{44} G^f}$$

## Аналитические оценки. Модель Мори-Танака

Эффективные свойства:

$$E_{22} = \frac{V_f^2 + V_m^2 \Lambda_r + V_f V_m [\Lambda_{11} + \Lambda_{22} + \Lambda_{32}] [V_f + V_m (\Lambda_{22} - \Lambda_{32})]}{\Lambda_{22} (b_1 + b_2) V_m + \Lambda_{12} (b_3 + b_4) V_m + b_5 (\Lambda_{11} V_m + V_f) + \Lambda_{22}^2 S_{11}^m V_m^2 (\Lambda_{11} V_m + V_f)}$$

$$b_1 = V_f V_m [\Lambda_{12} (S_{12}^m - S_{12}^f) + \Lambda_{11} (S_{11}^m + S_{11}^f)], \quad b_2 = V_f^2 (S_{11}^m + S_{11}^f) - 2V_m^2 \Lambda_{12} \Lambda_{21} S_{11}^m,$$

$$b_3 = V_m \Lambda_{21} [2c_m \Lambda_{32} S_{11}^m - V_f (S_{11}^f - S_{12}^f + S_{11}^m + S_{12}^m)], \quad b_4 = V_f (S_{12}^m - S_{12}^f) (V_f - V_m \Lambda_{32}),$$

$$b_5 = V_f V_m \Lambda_{32} (S_{12}^m - S_{12}^f) - V_m^2 S_{11}^m \Lambda_{32}^2 + V_f^2 S_{11}^f,$$

## Анализ точности аналитического подхода

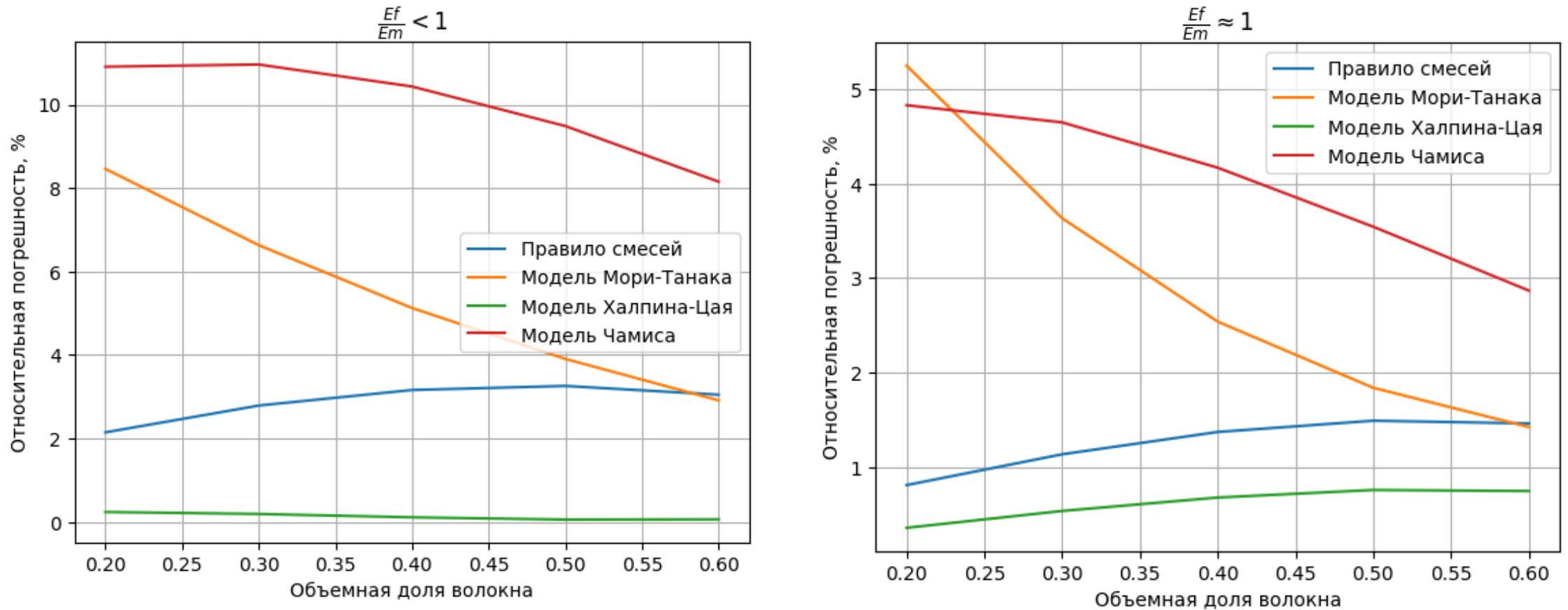


Рис. 2: График зависимости усредненной относительной ошибки модуля Юнга в поперечном направлении от доли включения

## Анализ точности аналитического подхода

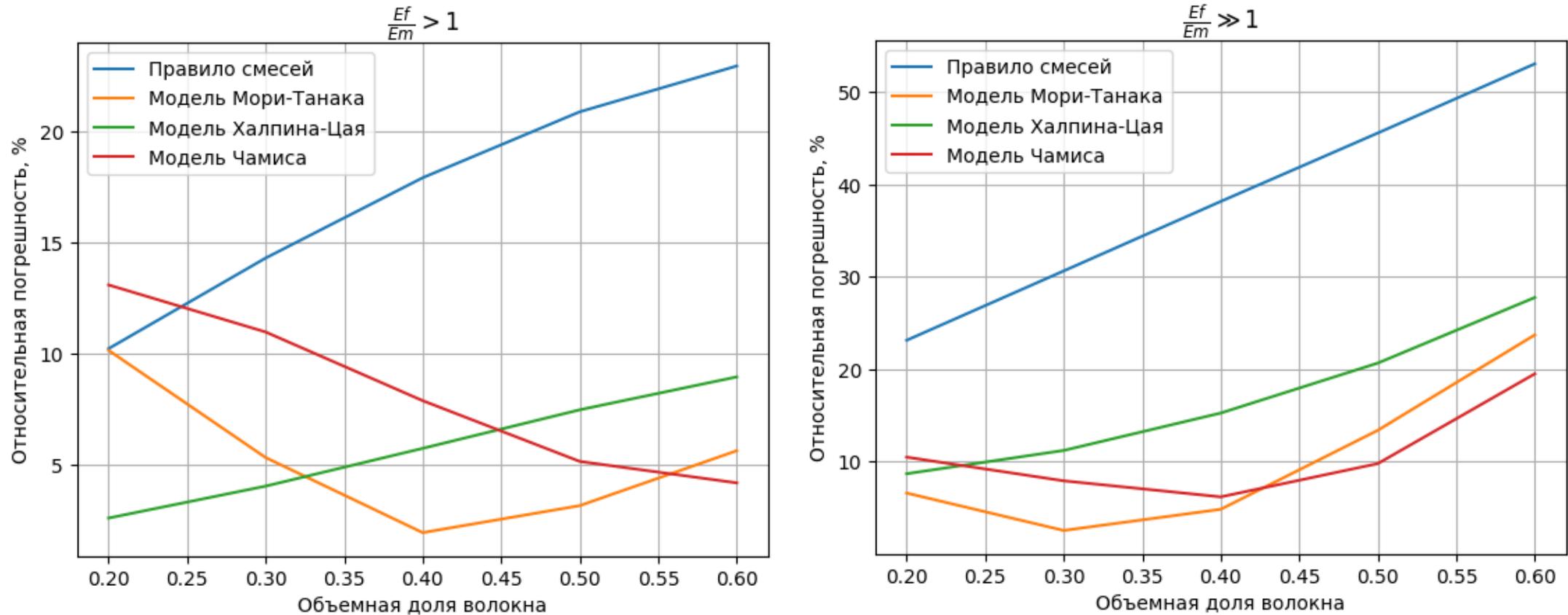


Рис. 3: График зависимости усредненной относительной ошибки модуля Юнга в поперечном направлении от доли включения

## Метод конечно-элементной гомогенизации. Влияния выбора ГУ

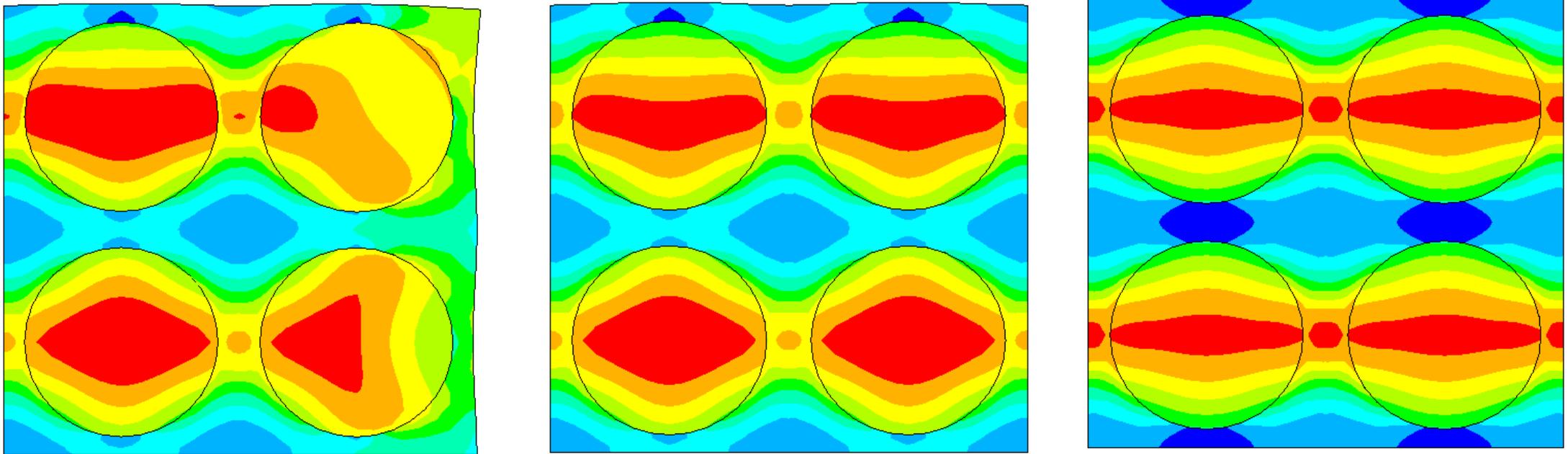


Рис. 4: Поля распределений напряжений по Мизесу для силовых / кинематических / периодических граничных условий [7]

## Метод конечно-элементной гомогенизации. Влияния выбора ГУ

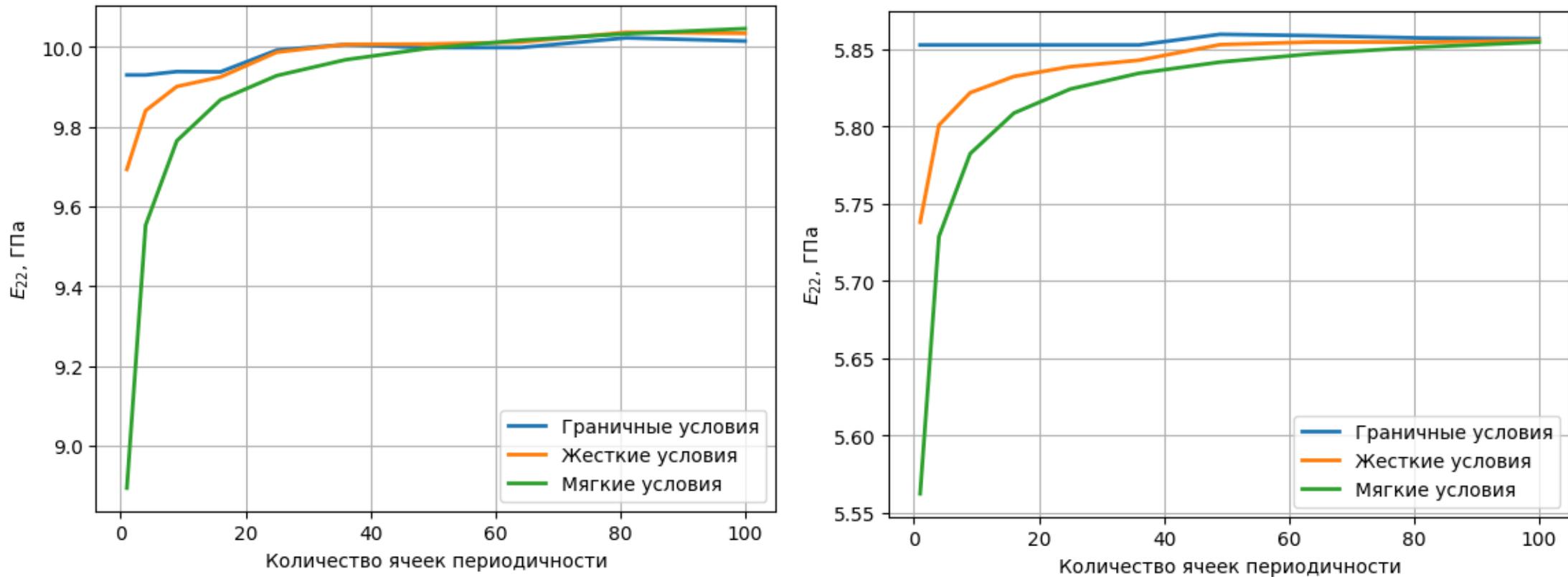


Рис. 5: График сходимости решения эффективного модуля Юнга в поперечном направлении с увеличением количества ячеек периодичности [7]

## Нейросетевой подход. Рассмотренные варианты архитектур

1. Нейронная сеть на основе модуля Юнга по оценке Фойгта и Рейса, прогнозирование одновременно всех эффективных свойств [8]
2. Нейронная сеть на основе компонент тензора Мори-Танака
3. Переход к прогнозированию отдельных свойств на основе модификации правила смесей
4. **Механически мотивированная нейронная сеть** на основе тензорного представления правила смесей

## Нейросетевой подход. Нейронная сеть на основе модификации правила смесей

- Входной слой:

Нормированные безразмерные величины, характеризующие свойства матрицы и включения на основе правила смесей.

- Выходной слой:

Нормированные безразмерные эффективные свойства материала

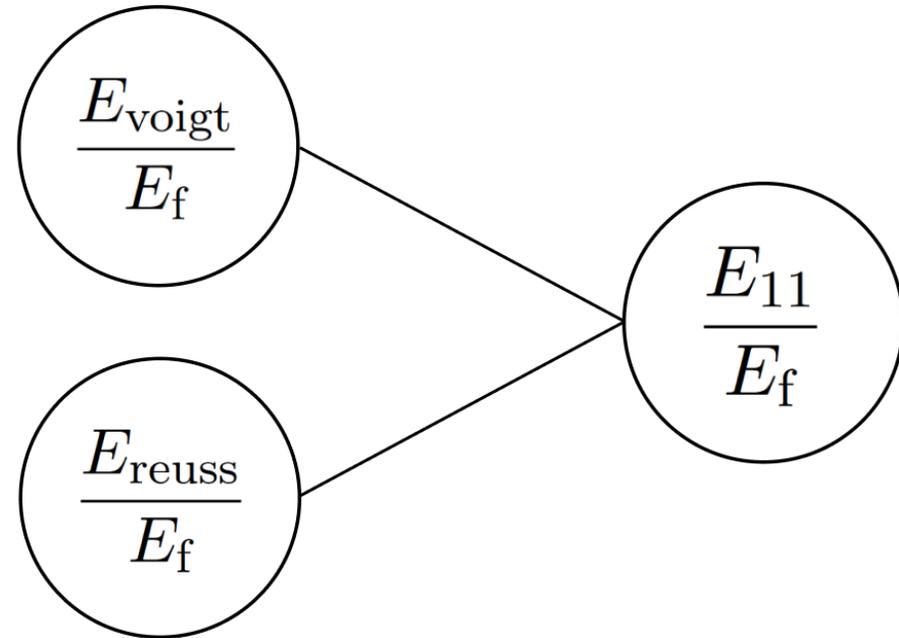


Рис. 7: Архитектура нейронной сети

## Нейросетевой подход. Нейронная сеть на основе модификации правила смесей

По итогу обучения нейронной сети, в качестве результата мы получаем:

- Зависимость  $\alpha_i(V_f), \beta_i(V_f)$
- Модификацию классического правила смесей, на основе весов  $\alpha_i, \beta_i$

$$E_{11} = \alpha_1 E_{voigt} + \beta_1 E_{reuss}$$

$$E_{22} = \alpha_2 E_{voigt} + \beta_2 E_{reuss}$$

$$G_{12} = \alpha_3 G_{voigt} + \beta_3 G_{reuss}$$

$$G_{23} = \alpha_4 G_{voigt} + \beta_4 G_{reuss}$$

$$\nu_{12} = \alpha_5 \nu_{voigt} + \beta_5 \nu_{reuss}$$

# Нейросетевой подход. Нейронная сеть на основе модификации правила смесей

Метод	$\alpha_1$	$\beta_1$	$\alpha_2$	$\beta_2$	$\alpha_3$	$\beta_3$	$\alpha_4$	$\beta_4$	$\alpha_5$	$\beta_5$
Правило смеси	1	0	0	1	0	1	-	-	0	1
Нейронная сеть	1	0	0.03	1.02	0.04	1.02	0.009	1.01	0.667	0.323

Таблица 3: Веса модели

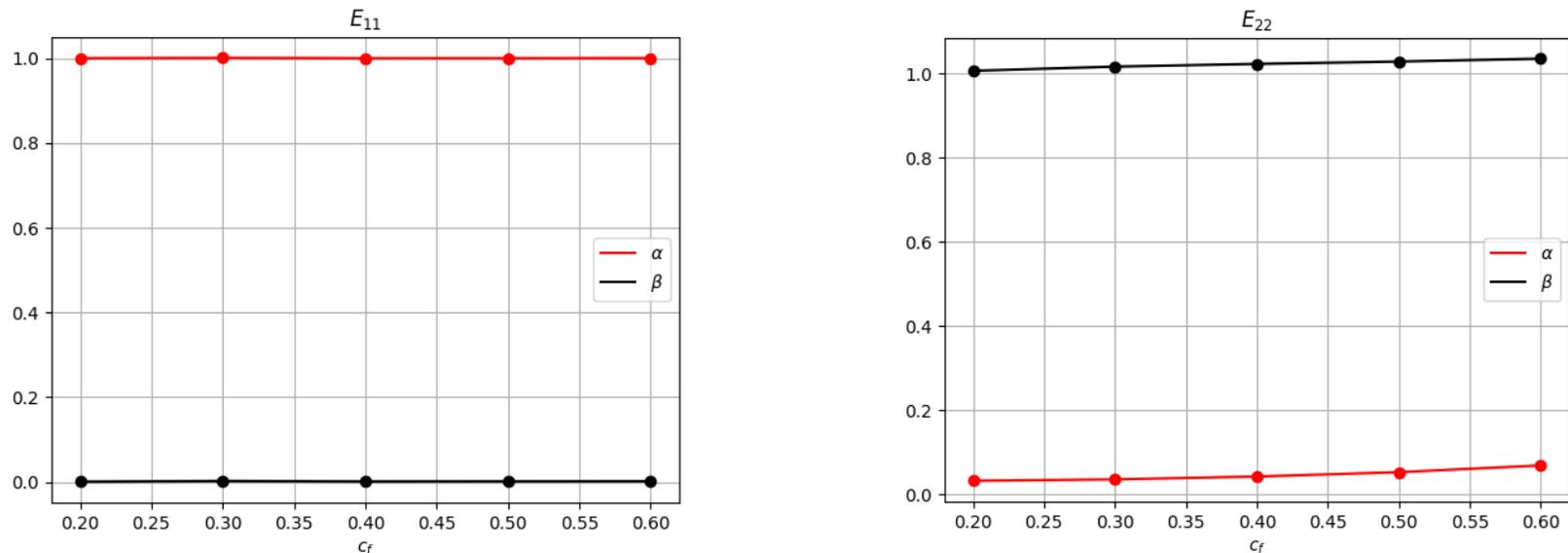


Рис. 8: График зависимости веса модели от объемной доли волокна для модуля Юнга в продольном и поперечном направлении

# Нейросетевой подход. Механически мотивированная нейронная сеть

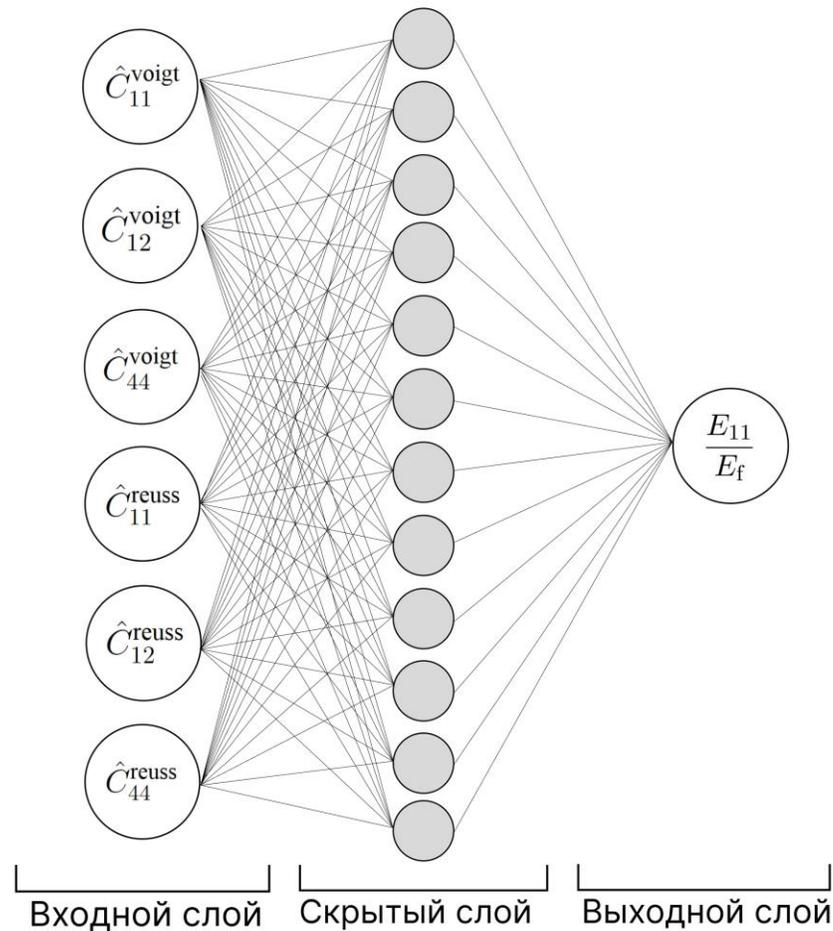


Рис. 9: Архитектура нейронной сети

$$\hat{C}_{11}^{\text{voigt}} = V_f + V_m \frac{(\lambda^m + 2G^m)}{(\lambda_f + 2G^f)}$$

$$\hat{C}_{12}^{\text{voigt}} = V_f + V_m \frac{\lambda^m}{\lambda_f}, \hat{C}_{44}^{\text{voigt}} = V_f + V_m \frac{G^m}{G^f}$$

$$\hat{C}_{11}^{\text{reuss}} = \frac{S_{11} + S_{12}}{S_{11}^2 + S_{11}S_{12} - 2S_{12}^2}$$

$$\hat{C}_{12}^{\text{reuss}} = -\frac{S_{12}}{S_{11}^2 + S_{11}S_{12} - 2S_{12}^2}, \hat{C}_{44}^{\text{reuss}} = \frac{1}{S_{44}}$$

$$S_{11} = V_f + V_m \frac{E^f}{E^m}, S_{12} = -V_f \nu^f - V_m \frac{\nu^m E^f}{E^m}, S_{44} = V_f + V_m \frac{G^f}{G^m}$$

# Нейросетевой подход. Результаты обучения

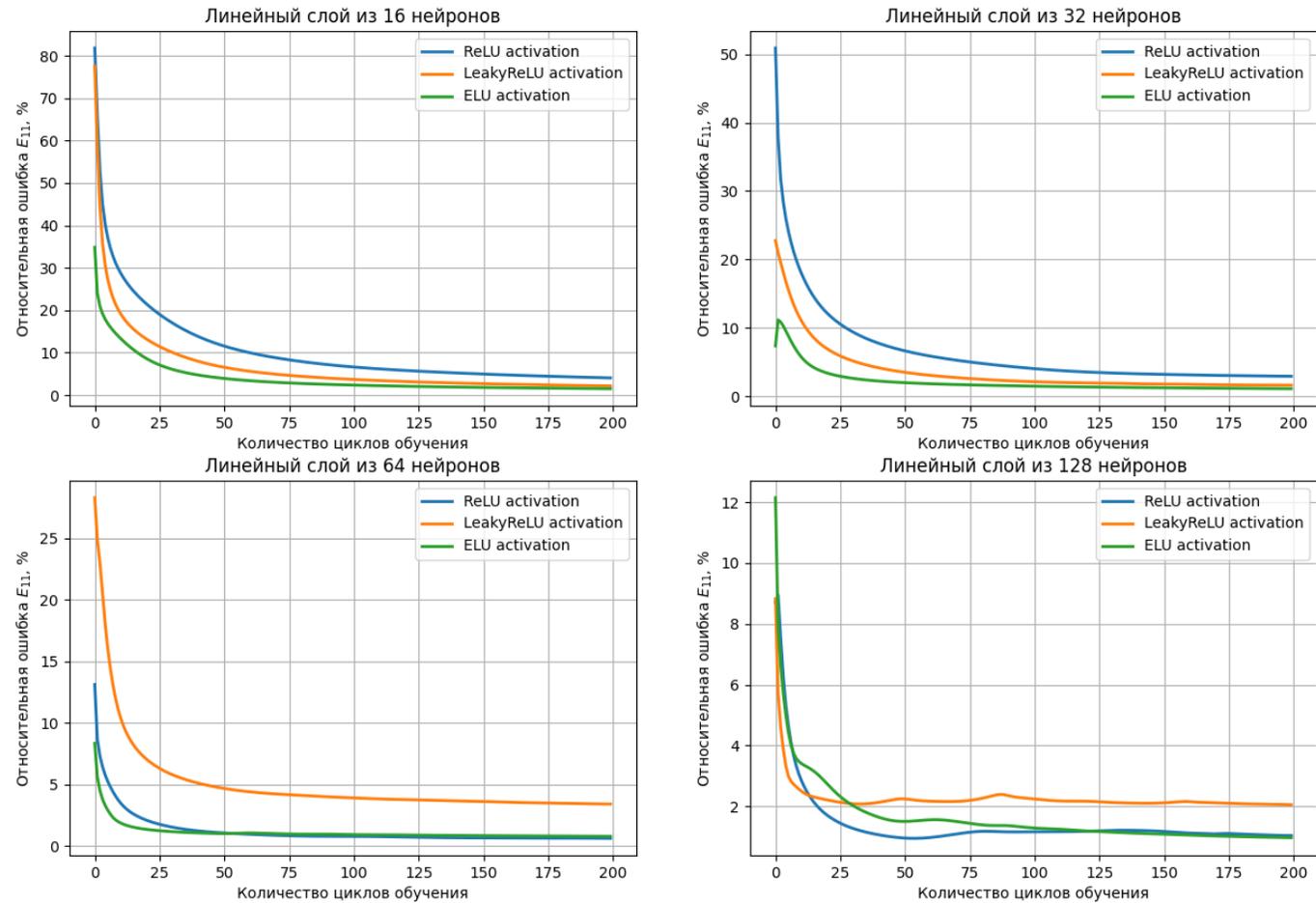


Рис. 10: Обучение механически мотивированной нейронной сети

## Нейросетевой подход. Рассмотренные варианты архитектур

	$E_{11}$ , ГПа	$E_{22}$ , ГПа	$G_{12}$ , ГПа
Эксперимент [9]	18.000	6.000	2.000
Ansys	18.116	6.021	2.047
Правило смесей	18.114	4.73130	1.740
Модель Халпина-Цая	18.114	5.556	2.318
Модель Чамиса	18.117	4.731	2.028
Мори-Танака	18.113	6.519	2.315
Нейронная сеть на основе правила смесей	18.114	6.036	2.051
Механически мотивированная нейронная сеть	18.115	6.031	2.049

Таблица 4: Сводная таблица эффективных свойств для материала с относительной жёсткостью  $\frac{E^f}{E^m} = 19$

	$E_{11}$ , ГПа	$E_{22}$ , ГПа	$G_{12}$ , ГПа
Эксперимент [10]	21.600	10.100	3.800
Ansys	21.605	10.219	3.937
Правило смесей	21.604	13.231	4.923
Модель Халпина-Цая	21.604	10.890	4.233
Модель Чамиса	21.604	10.615	4.083
Мори-Танака	21.604	10.616	3.841
Нейронная сеть на основе правила смесей	21.601	10.622	3.955
Механически мотивированная нейронная сеть	21.602	10.213	3.880

Таблица 5: Сводная таблица эффективных свойств для материала с относительной жёсткостью  $\frac{E^f}{E^m} = 10.4$

9. Wang H.W. Zhou H.W. Gui L.L. Ji H.W. Zhang X.C. «Analysis of effect of fiber orientation on Young's modulus for unidirectional fiber reinforced composites». В: Composites part B: engineering 56 (2014), p. 733—739.

10. Zhang Shaohua Caprani Colin. «Mechanical properties of pultruded GFRP at intermediate strain rates». В: Composite Structures 278 (2021), p. 114.

### Заключение

- Были проанализированы аналитические подходы и рассчитаны эффективные свойства с помощью конечно-элементных пакетов
- Была создана и обучена **механически мотивированная нейронная сеть**, для которой была проведена верификация результатов с экспериментальными данными
- Ошибка для валидационных и экспериментальных данных для всех эффективных свойств **порядка 3 процентов**

## Развитие

Определить свойства отдельных компонент однонаправленных волокнистых композиционных материалов (научные публикации) [~4 тыс. различных комбинаций]

Нахождение эффективных свойств с помощью конечно-элементных пакетов (например, Ansys)

**ЭТАП №1:** ФОРМИРОВАНИЕ НАБОРА ДАННЫХ ДЛЯ ОБУЧЕНИЯ НЕЙРОННОЙ СЕТИ

Выбор архитектуры нейронной сети [нейронная сеть на основе тензорного представления правила смесей]

Верификация нейронной сети на валидационном и тестовом наборе данных

**ЭТАП №2:** ОБУЧЕНИЕ И ВЕРИФИКАЦИЯ НЕЙРОННОЙ СЕТИ.

Создание комбинаций пар матрица-волокно. Нахождение эффективных характеристик с помощью весов обученной нейронной сети. [~100 тыс. различных комбинаций]

Поиск комбинаций компонент композита, удовлетворяющих заданным эффективным свойствам. Валидация найденных пар через конечно-элементные пакеты.

**ЭТАП №3:** МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

**БЛАГОДАРЮ ЗА ВНИМАНИЕ!**