

## Физическое материаловедение

Научная статья

УДК 539.3, 678.01

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16307>

### ОПТИМИЗАЦИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ С УЧЕТОМ ОГРАНИЧЕНИЙ НА ИХ СВОЙСТВА

А. И. Грищенко<sup>1, 2</sup> ✉, И. А. Игнатович<sup>1</sup>, О. Л. Петросян<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия;

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ [gai-gr@yandex.ru](mailto:gai-gr@yandex.ru)

**Аннотация.** Предложен подход к оптимизации микроструктуры композиционных материалов с учетом накладываемых ограничений на их свойства. Подход основан на применении методов условной оптимизации. Определение эффективных упругих свойств осуществлялось с помощью метода конечно-элементной гомогенизации. Методами искусственного интеллекта выполнена оптимизация дисперсно-армированного композита с шарообразными включениями с ограничениями на коэффициент теплопроводности и модуль упругости материала на макроуровне.

**Ключевые слова:** композиционный материал, гомогенизация, метод конечных элементов, условная оптимизация, метод искусственного интеллекта

**Финансирование.** Исследование выполнено в рамках проекта ID 94062114 Санкт-Петербургского государственного университета.

**Для цитирования:** Грищенко А. И., Игнатович И. А., Петросян О. Л. Оптимизация микроструктуры композиционных материалов с учетом ограничений на их свойства // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 3. С. 73–86. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16307>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16307>

### OPTIMIZATION OF THE MICROSTRUCTURE OF COMPOSITE MATERIALS TAKING INTO ACCOUNT THE CONSTRAINTS ON THEIR PROPERTIES

A. I. Grishchenko<sup>1, 2</sup> ✉, I. A. Ignatovich<sup>1</sup>, O. L. Petrosian<sup>1</sup>

<sup>1</sup> St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia;

<sup>2</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ [gai-gr@yandex.ru](mailto:gai-gr@yandex.ru)

**Abstract.** In the paper, an approach to optimizing the microstructure of composite materials under given restrictions on its properties has been put forward. The approach is based on the application of conditional optimization methods. The effective elastic properties were determined using the finite element homogenization procedure. As an example, the fiber-reinforced composite with ball-shaped inclusions was optimized taking into account the limitations on its thermal conductivity and elastic modulus at macro level using artificial intellect methods.

**Keywords:** composite material, homogenization, finite element method, conditional optimization, artificial intellect method

**Funding:** The reported study was carried out within the framework of the project ID 94062114 of St. Petersburg State University.

**For citation:** Grishchenko A. I., Ignatovich I. A., Petrosian O. L., Optimization of the microstructure of composite materials taking into account the constraints on their properties, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (3) (2023) 73–86. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16307>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## Введение

Композиционные материалы находят применение практически во всех областях деятельности человека. Многообразие материалов, представляющих собой отдельные компоненты современных композитов, применяемых в производстве, а также огромное число их возможных комбинаций в совокупности с широкими технологическими возможностями по созданию различных вариантов топологии структуры, позволяют создавать материалы с уникальными свойствами, зачастую превосходящими таковые у традиционных материалов. Широкие возможности по выбору компонентов, их объемного соотношения и вариантов структуры композиционных материалов делают актуальной задачу разработки и создания композитов с оптимальными свойствами.

Примером таких задач может служить разработка новых материалов для тепловой защиты аэрокосмических аппаратов, которые одновременно должны иметь высокие теплопрочностные свойства, низкую теплопроводность и плотность. Другой яркий пример – это композиционные электроизолирующие материалы. Диэлектрические материалы для систем электрической изоляции современных высоковольтных электрических машин должны обладать практически взаимоисключающими свойствами: высокой электроизоляционной способностью и одновременно высокой теплопроводностью.

В современной промышленности широкое применение нашло введение в полимерное связующее вещество дисперсных частиц с высокой теплопроводностью, например оксида алюминия  $Al_2O_3$  или нитрида бора BN. Таким образом, можно поставить задачу условной оптимизации: подобрать концентрацию дисперсных включений, которая бы обеспечивала максимальную теплопроводность композита при ограничениях на его электроизоляционные свойства.

Целью настоящего исследования является разработка методов проектирования оптимальной микроструктуры композиционных материалов с учетом накладываемых ограничений на их свойства.

## Определение эффективных свойств композиционных материалов

Наиболее достоверные данные о механических, теплофизических, диффузионных свойствах, электропроводности и других характеристиках композиционных материалов дают лабораторные исследования. Однако практически неограниченное число возможных комбинаций компонентов в совокупности с дороговизной испытаний приводят к необходимости использования аналитических или численных оценок эффективных свойств композитов.

Аналитическую оценку упругих свойств можно получить, основываясь на простейшие оценки А. Ройсса [4] или В. Фойгта [5]; некоторые подходы базируются на решениях задачи Эшелби [6 – 8] об эллиптическом включении в бесконечную однородную упругую среду. Вариационные оценки упругих свойств были получены Цви Хашином и С. Штрикманом [9 – 11], нельзя также не отметить широкое развитие методов асимптотического осреднения [1, 11 – 13].

Теплопроводность и диффузионные свойства материалов можно оценить на основе



подходов, предложенных Дж. Максвеллом [14], лордом Дж. Рэлеем [15], Д. Бруггерманом [16], Т. Мори и К. Тонакой [7], а также другими исследователями [16 – 23]. Основным недостатком аналитических оценок следует считать их низкую точность для композитов со сложной топологией.

Одним из наиболее распространенных методов определения эффективных свойств является конечно-элементная (КЭ) гомогенизация [8, 24, 25]. В основе данного метода лежит концепция существования элементарного представительного объема (ЭПО, *англ. ERV*), содержащего всю статистическую информацию относительно распределения и морфологии неоднородностей материала. ЭПО материала можно вводить при условиях статически однородного распределения характеристик материала и сепарабельности масштабов неоднородностей. На рис. 1. представлены примеры ЭПО для различных типов полимерных композиционных материалов.

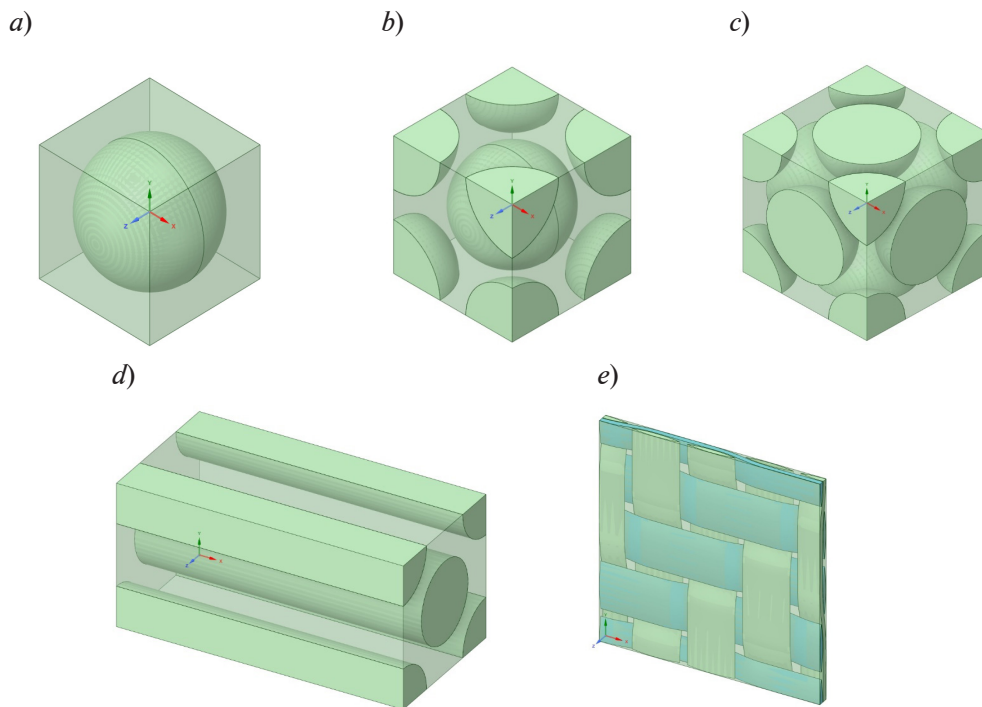


Рис. 1. Примеры ЭПО для различных типов полимерных композиционных материалов: дисперсно-армированный (a – c), однонаправленный волокнистый (d) и тканый (e)

Конечно-элементное (КЭ) моделирование процессов деформирования, теплопередачи, диффузии и других процессов применительно к ЭПО позволяет решать две основные задачи:

определять эффективные свойства ЭПО композиционного материала (задача гомогенизации);

получать экстремальные значения полей напряжений гетерогенного ЭПО в целях последующего анализа прочности (задача гетерогенизации).

В основе применяемого в расчетах КЭ-программного комплекса PANTOCRATOR [26] для решения краевых задач теории упругости используется уравнение виртуальных работ:

$$\int_V \boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \boldsymbol{\varepsilon} dV = \int_V \mathbf{f}_V \cdot \delta \mathbf{u} dV + \int_{S_\sigma} \mathbf{f}_S \cdot \delta \mathbf{u} dS, \quad (1)$$

где  $\delta \boldsymbol{\varepsilon} = (\nabla \delta \mathbf{u})^s$ ;  $\mathbf{f}_V, \mathbf{f}_S$  – заданные объемные и поверхностные силы.

С помощью уравнения (1) можно получить уравнения равновесия  $\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}_V = 0$  в объеме и статические (силовые) граничные условия  $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}|_{S_\sigma} = \mathbf{f}_S$ .

Для решения стационарных задач теплопроводности используется следующая вариационная формулировка:

$$\int_V [\nabla \cdot (\mathbf{K} \cdot \nabla T) + q_v] \delta T dV = \int_{S_{II}} [n \cdot (\mathbf{K} \cdot \nabla T) + q_s] \delta T dS + \int_{S_{III}} [n \cdot (\mathbf{K} \cdot \nabla T) + a_s (T - T_\infty)] \delta T dS, \quad (2)$$

где  $q_v, q_s$  – объемная и поверхностная плотности теплового потока, соответственно;  $\mathbf{K}$  – тензор коэффициентов теплопроводности;  $S_{II}, S_{III}$  – площади поверхностей, на которых заданы граничные условия второго (условие Неймана) и третьего (условие Коши) рода, соответственно.

Использование уравнения (2) позволяет получить уравнение теплопроводности

$$n \cdot (\mathbf{K} \cdot \nabla T) + q_s = 0$$

и естественные граничные условия Неймана и Коши:

$$-n \cdot (\mathbf{K} \cdot \nabla T) = q_s, \quad -n \cdot (\mathbf{K} \cdot \nabla T) = a_s (T - T_\infty).$$

Для определения напряженно-деформированного состояния, соответствующего гомогенизированному материалу, использовались осредненные по представительному объему значения тензоров деформаций и напряжений, полученных в КЭ решении:

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{V_{EVR}} \int_{V_{EVR}} \boldsymbol{\varepsilon} dV, \quad (3)$$

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{V_{EVR}} \int_{V_{EVR}} \boldsymbol{\sigma} dV. \quad (4)$$

Эффективные свойства гомогенизированного материала принимались соответствующими ортотропному упругому материалу, для которого закон Гука можно записать в следующем виде:

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = {}^4\bar{\mathbf{C}} \cdot \bar{\boldsymbol{\sigma}}, \quad (5)$$

где  ${}^4\bar{\mathbf{C}}$  – тензор упругих податливостей 4-го ранга, имеющий для ортотропного материала следующий вид (в собственных осях ортотропии):

$$[\bar{\mathbf{C}}] = \begin{bmatrix} \frac{1}{\bar{E}_1} & -\frac{\bar{\nu}_{21}}{\bar{E}_2} & -\frac{\bar{\nu}_{31}}{\bar{E}_3} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\bar{\nu}_{12}}{\bar{E}_1} & \frac{1}{\bar{E}_2} & -\frac{\bar{\nu}_{32}}{\bar{E}_3} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\bar{\nu}_{13}}{\bar{E}_1} & -\frac{\bar{\nu}_{23}}{\bar{E}_2} & \frac{1}{\bar{E}_3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\bar{G}_{12}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\bar{G}_{23}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\bar{G}_{31}} \end{bmatrix}, \quad (6)$$

причем  $\frac{\bar{\nu}_{12}}{\bar{E}_1} = \frac{\bar{\nu}_{21}}{\bar{E}_2}$ ,  $\frac{\bar{\nu}_{13}}{\bar{E}_1} = \frac{\bar{\nu}_{31}}{\bar{E}_3}$ ,  $\frac{\bar{\nu}_{23}}{\bar{E}_2} = \frac{\bar{\nu}_{32}}{\bar{E}_3}$ .

Эффективные коэффициенты теплопроводности определяются на основе закона Фурье, который для гомогенизированного материала записывается как



$$\bar{\mathbf{q}} = -\bar{\mathbf{K}} \cdot \overline{\nabla T}, \quad (7)$$

где  $\bar{\mathbf{q}} = -\frac{1}{V_{\text{ERV}}} \int_{V_{\text{ERV}}} \mathbf{K} \cdot \nabla T dV$  – вектор теплового потока, осредненный по объему;

$$\overline{\nabla T} = \frac{1}{V_{\text{ERV}}} \int_{V_{\text{ERV}}} \nabla T dV = \frac{1}{V_{\text{ERV}}} \int_{S_{\text{ERV}}} \mathbf{n} T dS$$
 – осредненный градиент температуры.

Тензор коэффициентов теплопроводности  $\bar{\mathbf{K}}$  для ортотропного материала имеет вид

$$\bar{\mathbf{K}} = \begin{bmatrix} \bar{\lambda}_1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{\lambda}_2 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{\lambda}_3 \end{bmatrix}. \quad (8)$$

Для определения эффективных упругих свойств гетерогенного материала можно использовать три вида граничных условий:

кинematicкие –

$$\mathbf{u}|_{S_u} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^* \cdot \mathbf{r}, \quad (9)$$

статические –

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}|_{S_\sigma} = \mathbf{n} \cdot \bar{\boldsymbol{\sigma}}^* = \mathbf{f}_s \quad (10)$$

и условия периодичности –

$$\mathbf{u}|_{S_{u1}} = \mathbf{u}|_{S_{u2}} + \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^* \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (11)$$

где  $\mathbf{u}$  – вектор перемещений;  $\mathbf{r}$  – радиус-вектор;  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^*, \bar{\boldsymbol{\sigma}}^*$  – заданные постоянные симметричные тензоры, соответствующие различным деформируемым состояниям (осевые растяжения/сжатия и сдвиги) и различным напряженным состояниям (осевые растяжения/сжатия и сдвиги), соответственно.

В работах [8, 27, 28] установлено, что при использовании условий периодичности (11) удовлетворительная точность достигается при использовании ЭПО, которые включают меньшее количество (в 2 – 4 раза) ячеек периодичности, чем при использовании граничных условий (9), (10).

Для определения эффективных коэффициентов теплопроводности использовались граничные условия первого рода (условие Дирихле):

$$T|_{S_1} = T_1^*, T|_{S_2} = T_2^*, \quad (12)$$

где  $S_1, S_2$  – поверхности ЭПО, на которых заданы значения температуры  $T_1^*$  и  $T_2^*$ , причем  $T_1^* \neq T_2^*$ .

Предполагается, что на границе раздела отдельных компонентов композиционного материала выполняется условие идеального механического и теплового контакта:

$$\mathbf{u}^{(i)} = \mathbf{u}^{(j)}; \mathbf{n}^{(i)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(i)} = \mathbf{n}^{(j)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(j)}, \quad (13)$$

$$T^{(i)} = T^{(j)}; \mathbf{n}^{(i)} \cdot (\mathbf{K} \cdot \nabla T^{(i)}) = -\mathbf{n}^{(j)} \cdot (\mathbf{K} \cdot \nabla T^{(j)}), \quad (14)$$

где верхним индексом  $(i)$  отмечены величины, относящиеся к одному компоненту, а индексом  $(j)$  – к другому.

### Постановка задачи оптимизации

В общем случае рассматривается композиционный материал, состоящий из матрицы и включений, содержащий  $N$  различных материалов. В линейной постановке каждый из материалов характеризуется упругими свойствами  ${}^4C_i$ , плотностью  $\rho_i$ , теплопроводностью  $\mathbf{K}_i$  и имеет объем  $V_i$ , где  $i = 1, N + 1$ . Аналогично можно рассматривать и другие характеристики, такие как прочностные, коэффициент диффузии, диэлектрическую проницаемость,

удельное сопротивление и т. п. Каждую из перечисленных характеристик можно рассматривать как в качестве целевой функции оптимизируемого материала, так и в качестве накладываемых ограничений.

Для определенности рассмотрим задачу минимизации массы композиционного материала с заданной топологией микроструктуры, при ограничениях на значения модуля Юнга и коэффициента теплопроводности вдоль одной из осей ортотропии:

$$M = \sum_{i=1}^{N+1} \rho_i V_i \rightarrow \min, \quad (15)$$

$$\bar{E}_1(c_i) \geq E, \quad \bar{K}_1(c_i) \leq K, \quad (16)$$

где  $c_i = V_i / V$  – объемные доли  $i$ -й фазы.

Такая задача может возникнуть, например, при проектировании консоли заданной геометрии с ограничением на максимальный прогиб или на частоту собственных колебаний, на которую планируется установка чувствительного к температуре датчика. Другие задачи оптимизации ставятся аналогичным образом.

Сведение задачи безусловной минимизации функционала (15) к задаче об условной минимизации с учетом ограничений (16) можно осуществить одним из методов искусственного интеллекта [29, 30]. Приведем их идеи.

Метод множителей Лагранжа:

$$L = \sum_{i=1}^{N+1} \rho_i c_i V + \lambda_1 [E - \bar{E}_1(c_i)] + \lambda_2 [\bar{K}_1(c_i) - K] \rightarrow \min, \quad (17)$$

где  $\lambda_1, \lambda_2$  – множители Лагранжа.

Метод штрафных функций:

$$Q_k(c_i) = \sum_{i=1}^{N+1} \rho_i c_i V + r_1^k g_1(E - \bar{E}_1(c_i)) + r_2^k g_2(\bar{K}_1(c_i) - K) \rightarrow \min, \quad (18)$$

где  $r_1^k, r_2^k$  – коэффициенты метода штрафных функций;  $g_1(E - \bar{E}_1(c_i)), g_2(\bar{K}_1(c_i) - K)$  – штрафные функции.

Отдельно упоминания требует семейство генетических алгоритмов оптимизации, позволяющих получать оптимальное решение без априорной информации о поведении целевой функции [31].

Выбор метода оптимизации является нетривиальной задачей. Так, при известных зависимостях целевой функции и ограничений от параметров системы, в отдельных случаях метод множителей Лагранжа позволяет получать аналитическое решение задачи условной оптимизации. Что касается широко распространенного класса методов штрафных функций, то его применение может приводить к «овражистости» рельефа минимизируемого функционала. Широкий класс задач позволяет решать метод Недлера – Мида [32, 33], не требующий взятия производных. Наиболее же универсальными можно считать генетические алгоритмы. Однако, несмотря на многообразие методов оптимизации, в произвольном случае ни один из алгоритмов не гарантирует нахождение глобального экстремума.

### Оптимизация дисперсно-армированного композита с шарообразными включениями

Рассмотрим задачу минимизации массы дисперсно-армированного композита с шарообразными включениями (рис. 1,  $a - c$ ). В силу симметрии и стохастического расположения включений в матрице, результирующие макросвойства материала можно считать изотропными с высокой степенью достоверности.

Важной задачей является выбор ЭПО, адекватно отражающего структуру и свойства рассматриваемого композиционного материала. В случае материалов с хаотично расположенными включениями можно рассматривать регуляризованные модели ЭПО. В противном случае, а именно – для материалов с непериодической структурой, следует рассматривать стохастическую задачу с последующей статической обработкой результатов, что существенно повышает трудоемкость и времязатратность определения эффективных





свойств. В работе [34] показано, что для случая однонаправленных волокнистых композиционных материалов максимальные различия между упругими свойствами регуляризованной модели и модели со случайным расположением армирующих волокон не превышают 10 %.

Если исходить из условия эквивалентности свойств регуляризованной модели и реального дисперсно-армированного композита, то соответствующий ему ЭПО должен обладать следующими свойствами:

объемная доля включений в ЭПО должна совпадать с их концентрацией в реальном материале;

структура ЭПО должна иметь свойства центральной симметрии.

В случае с дисперсно-армированным композиционным материалом можно рассмотреть три приближения для ЭПО: с единичным включением (см. рис. 1, *a*), объемно-центрированный кубический (см. рис. 1, *b*) и гранецентрированный кубический (см. рис. 1, *c*). В данном случае, с точки зрения изотропии эффективных свойств, наиболее адекватной моделью будет гранецентрированный кубический ЭПО, однако его использование приведет к существенно большим вычислительным затратам, по сравнению с ЭПО с единичным включением, поэтому для решения задачи оптимизации микроструктуры рассматривался ЭПО с единичным включением.

На рис. 2 представлены варианты КЭ моделей ЭПО с различной объемной долей включения. В расчетах использовали трехмерные 20-узловые изопараметрические конечные элементы.

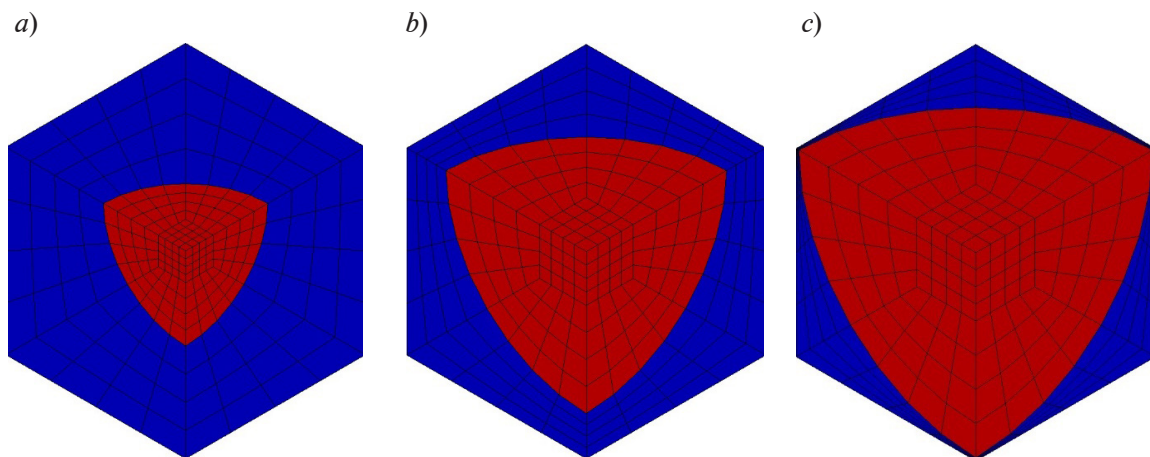


Рис. 2. Варианты конечно-элементных моделей ЭПО с различной объемной долей включения  $c$  (показана 1/8 часть ЭПО);  $c$ , %: 5 (*a*), 25 (*b*), 50 (*c*)

Для двухфазных материалов задачу о минимизации массы удобно свести к задаче о минимизации объемной доли наиболее плотной фазы, в данном случае – к минимизации объемной доли включений. Тогда функционал метода Лагранжа (17) запишется в виде

$$L = c + \lambda_1 [E - \bar{E}(c)] + \lambda_2 [\bar{\lambda}(c) - \lambda] \rightarrow \min. \quad (19)$$

Минимизацию данного функционала можно выполнить различными способами, такими как метод градиентного спуска, метод секущих (конечно-разностная аппроксимация метода Ньютона), алгоритм Левенберга – Марквардта, и многими другими. В данном случае, ввиду гладкости и монотонности зависимости эффективных свойств от объемной доли включений, мы применяли метод последовательной аппроксимации, который заключается в аппроксимации функций-ограничений дифференцируемой функцией. Для нахождения стационарных точек функционала (19) можно организовать итерационную процедуру последовательного вычисления производных, с последующим уточнением коэффициентов аппроксимирующих функций. Такой подход удобен также для поиска начального приближения при использовании других методов.

Ввиду линейности постановки, аппроксимационные зависимости модуля Юнга и коэффициента теплопроводности можно найти для широкого класса материалов матрицы и включения путем введения безразмерных параметров

$$e = \frac{E_m}{E_p}, \bar{e} = \frac{\bar{E}}{E_p} \quad \text{и} \quad l = \frac{\lambda_m}{\lambda_p}, \bar{l} = \frac{\bar{\lambda}}{\lambda_p},$$

где индекс  $m$  соответствует параметрам материала матрицы,  $p$  – материалу включения.

На рассматриваемые соотношения налагали требования монотонности во всем диапазоне изменения параметров. Рассмотрены следующие параметры, описывающие исследуемые зависимости:

$$\bar{e}(e, c) = A_E \left[ \exp(-B_E e^{C_E}) + D_E \right] (E_E c^2 + F_E c + 1), \quad (20)$$

$$\bar{l}(l, c) = A_\lambda \left[ \exp(-B_\lambda l^{C_\lambda}) + D_\lambda \right] [E_\lambda (1 + G_\lambda l) c^2 + F_\lambda c + 1]. \quad (21)$$

Таблица 1

**Значения параметров аппроксимирующих функций в двух уравнениях**

Параметр уравнений	Значение параметра в уравнении	
	(20)	(21)
$A$	32,40	9,85
$B$	0,13	0,23
$C$	4,36	2,66
$D$	$2 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-6}$
$E$	6,69	0,05
$F$	0,66	1,17
$G$	–	9,00
Коэффициент корреляции $R^2$	0,997	0,998

Путем многовариантных вычислительных экспериментов была создана база расчетных вариантов значений эффективного модуля Юнга и коэффициента теплопроводности. Параметры моделей (20), (21) были определены при помощи метода наименьших квадратов с применением алгоритма Левенберга – Марквардта. Значения параметров обеих моделей и коэффициентов корреляции  $R^2$  представлены в табл. 1. Видно, что для обеих моделей коэффициент корреляции близок к единице, что свидетельствует об их адекватности. Результаты сравнения исходных данных и их аппроксимации показаны на рис. 3.

Таким образом, в случае заданных параметров материалов матрицы и включения функционал (19), с учетом уравнений (20), (21), запишется в следующем виде:

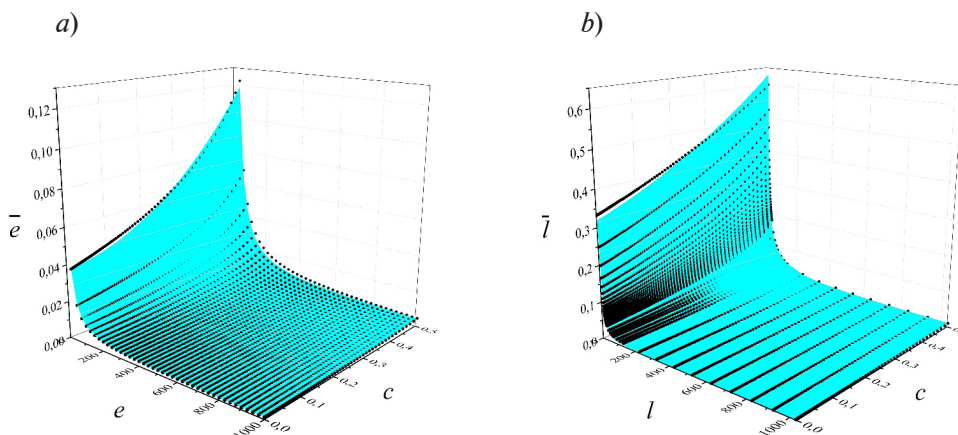


Рис. 3. Зависимости эффективных модуля Юнга (a) и коэффициента теплопроводности (b) композиционного материала от отношений  $\bar{e}$  и  $\bar{l}$  (см. формулы (20) и (21)), а также от объемной доли включений  $c$ .

Точками представлены данные базы расчетных вариантов



$$L = c + \lambda_1 \left[ E - \bar{A}_E (E_E c^2 + F_E c + 1) \right] + \lambda_2 \left[ \bar{A}_\lambda (\bar{E}_\lambda c^2 + F_\lambda c + 1) - \lambda \right] \rightarrow \min, \quad (22)$$

где  $\bar{A}_E, \bar{A}_\lambda$  и  $\bar{E}_\lambda$  – параметры, зависящие от свойств материалов матрицы и включения:

$$\begin{aligned} \bar{A}_E &= A_E \left[ \exp(-B_E e^{C_E}) + D_E \right] E_p, \\ \bar{A}_\lambda &= A_\lambda \left[ \exp(-B_\lambda l^{C_\lambda}) + D_\lambda \right] \lambda_p, \\ \bar{E}_\lambda &= E_\lambda (1 + G_\lambda l). \end{aligned} \quad (23)$$

Стационарные точки функционала (22) можно найти из следующих условий:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial c} &= 1 + \lambda_1 \bar{A}_E (2E_E c + F_E) + \lambda_2 \bar{A}_\lambda (2\bar{E}_\lambda c + F_\lambda) = 0, \\ \frac{\partial L}{\partial \lambda_1} &= E - \bar{A}_E (E_E c^2 + F_E c + 1) = 0, \\ \frac{\partial L}{\partial \lambda_2} &= \bar{A}_\lambda (\bar{E}_\lambda c^2 + F_\lambda c + 1) - \lambda = 0. \end{aligned} \quad (24)$$

Таблица 2

**Характеристики рассмотренных материалов**

Параметр	Значение параметра	
	Матрица	Включение
$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	1100	2600
$E$ , ГПа	2,0	70
$\nu$	0,20	0,35
$\lambda$ , Вт/(м·К)	0,7	0,2

Обозначения:  $\rho$  – плотность,  $E$  – модуль Юнга,  $\nu, \lambda$  – коэффициенты Пуассона и теплопроводности.

Для определенности в качестве материала матрицы рассмотрим кремнийорганическое связующее с материалом включений – стеклом. Характеристики обоих материалов представлены в табл. 2 [29]. В качестве ограничений взяты ограничения на коэффициент теплопроводности  $\lambda$  и модуль Юнга  $E$ :  $\lambda \leq 0,3$  Вт / (м · К),  $E \geq 3$  ГПа.

В силу простоты функционала, который следует минимизировать, поиск оптимального соотношения между матрицей и включениями можно проиллюстрировать графически, путем нанесения на один график зависимостей от концентрации включений эффективных значений параметров материала, на которые накладываются ограничения (рис. 4).

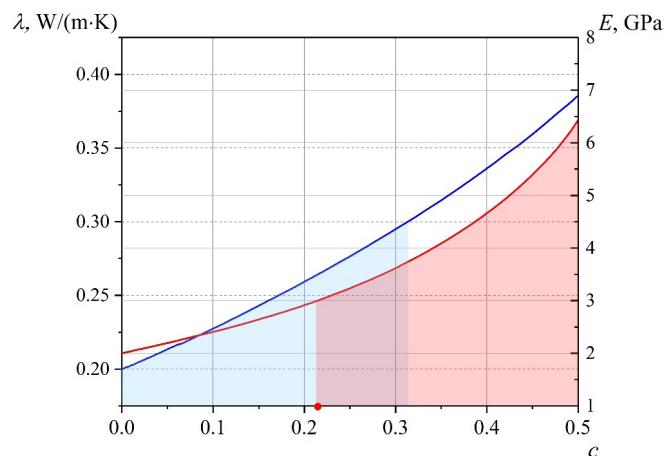


Рис. 4. Зависимости эффективных значений коэффициента теплопроводности (кривая синего цвета) и модуля Юнга (кривая красного цвета) от концентрации включений

На основе вышеизложенной оптимизационной процедуры получено оптимальное значение концентрации стеклянных включений в кремнийорганической матрице композита, которое обеспечивает минимальную массу композита при заданных ограничениях; оно составляет 21,3 %.

Важно отметить, что в общем случае нельзя гарантировать существование решения, удовлетворяющего всем накладываемым ограничениям. В таком случае решение можно найти через замену материалов, изменение структуры композита или смягчение накладываемых ограничений.

#### Заключение

В работе представлен и использован подход, позволяющий определять оптимальные параметры композиционных материалов при заданных ограничениях на его свойства. Подход основан на методе конечно-элементной гомогенизации, который позволяет находить эффективные характеристики гетерогенных материалов, а также на методах условной оптимизации. В качестве примера решена задача о минимизации плотности композита, дисперсно-армированного шаровыми включениями, с ограничениями на модуль упругости и коэффициент теплопроводности матрицы и включений. Задача условной оптимизации решалась с использованием метода множителей Лагранжа и метода последовательной аппроксимации. Предложены аппроксимирующие зависимости, адекватно описывающие изменение эффективного коэффициента теплопроводности и модуля Юнга (коэффициент корреляции  $R^2 \geq 0,99$ ).

Разработанный алгоритм можно использовать для многокритериальной оптимизации композиционных материалов с различной топологией армирования и послужить основой для создания базы данных, чтобы обучать нейронные сети. Этот подход и алгоритм позволяют ускорить поиск начального приближения задачи оптимизации.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Димитриенко Ю. И., Соколов А. П. Разработка автоматизированной технологии вычисления эффективных упругих характеристик композитов методом асимптотического осреднения // Вестник Московского государственного технического университета им. Н. Э. Баумана. Серия «Естественные науки». 2008. № 2. С. 56–67.
2. Маннанов Э. Р. О диэлектрических материалах с высокой теплопроводностью для систем электрической изоляции высоковольтных электрических машин: обзор отечественной и зарубежной литературы // Материаловедение. Энергетика. 2021. Т. 27. № 4. С. 42–67.
3. Ngo I. L., Byon C. Thermal conductivity of particle-filled polymers // Polymer Science Book Series. No. 1: Research advances, practical applications and thermal conductivity of particle-filled polymers. Edited by A. Méndez-Vilas, A. Solano. Badajoz (Spain): Formatex Research Center, 2016. Pp. 554–565.
4. Reuss A. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle // ZAMM – Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik. 1929. Vol. 9. No. 1. Pp. 49–58.
5. Voigt W. Über die Beziehung zwischen den beiden Elasticitätsconstanten isotroper Körper // Annalen der Physik. 1889. Vol. 274. No. 12. Pp. 573–587.
6. Эшелби Дж. Определение поля упругих напряжений, создаваемого эллипсоидальным включением, и задачи, связанные с этой проблемой // Сборник переводов статей 1956 – 62 гг. М.: Изд-во иностранной литературы, 1963. 248 с.
7. Mori T., Tanaka K. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions // Acta Metallurgica. 1973. Vol. 21. No. 5. Pp. 571–574.
8. Grishchenko A. I., Semenov A. S., Semenov S. G., Melnikov B. E. Influence of structural parameters of the masonry on effective elastic properties and strength // Инженерно-строительный журнал. 2014. № 5 (49). С. 95–106.
9. Hashin Z., Shtrikman S. A variational approach to the theory of elastic behavior of multiphase materials // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 1963. Vol. 11. No. 2. Pp. 127–140.
10. Светашков А. А., Куприянов Н. А., Манабаев К. К. Модификации эффективных модулей типа Хашина – Штрикмана для двухкомпонентного изотропного композита // Физическая мезомеханика. 2015. Т. 18. № 6. С. 57–65.



11. **Победря Б. Е.** Механика композиционных материалов. М.: Изд-во МГУ, 1984. 336 с.
12. **Горбачёв В. И.** Метод осреднения Бахвалова – Победри в механике композитов // Вестник Московского университета. Серия 1: Математика. Механика. 2016. № 6. С. 41–46.
13. **Бахвалов Н. С., Панасенко Г. П.** Осреднение процессов в периодических средах. М.: Наука, 1984. 352 с.
14. **Maxwell J. C.** A treatise on electricity and magnetism. Oxford: Oxford University Press, 1904. 435 p.
15. **Lord Rayleigh J. S.** On the influence of obstacles arranged in rectangular order upon the properties of a medium // The Philosophical Magazine. 1892. Vol. 34. 5-th Series. Pp. 481–502.
16. **Bruggeman D. A. G.** Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten der Mischkörper aus isotropen Substanzen // Annalen der Physik. 1935. Vol. 416. No. 7. Pp. 636–664.
17. **Пашковский Д. М., Фролова К. П., Вильчевская Е. Н.** Эффективные диффузионные свойства поликристалла // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 3. С. 154–168.
18. **Barrer R. M.** Diffusion and permeation in heterogeneous media // Diffusion in polymers, Ed. by J. Crank and G. S. Park, Academic Press, London, 1968. 452 p.
19. **Bell G. E., Crank J.** Influence of imbedded particles on steady-state diffusion // Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions. 1974. Vol. 70. No. 2. Pp. 1259–2732.
20. **Meredith R. E., Tobias C. W.** Conductivities of emulsions // Journal of the Electrochemical Society. 1961. Vol. 108. No. 3. P. 286.
21. **Fricke H.** A mathematical treatment of the electric conductivity and capacity of disperse systems. I. The electric conductivity of a suspension of homogeneous spheroids // Physical Review. 1924. Vol. 24. No. 5. Pp. 575–587.
22. **Эпов М. И., Терехов М. И., Низовцев М. И., Шурина Э. Л., Иткина Н. Б., Уколов Е. С.** Эффективная теплопроводность дисперсных материалов с контрастными включениями // Теплофизика высоких температур. 2015. Т. 53. № 1. С. 48–53.
23. **Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н., Савельева И. Ю.** Эффективная теплопроводность композита в случае отклонений формы включений от шаровой // Математическое моделирование и численные методы. 2014. № 4. С. 3–17.
24. **Borovkov A. I., Sabadash V. O.** Finite element multiscale homogenization and equential heterogenization of composite structures // Proceedings of 10th International ANSYS'2002 Conference, Pittsburgh, USA, 2002. 15 p.
25. **Borovkov A. I., Klich A. E.** Computational micromechanics of composites. Finite element homogenization methods. // Appl. Math. Mech. (Z. Angew. Math. Mech. – ZAMM). 1998. Vol. 78. Pp. 295–296.
26. **Семенов А. С.** PANTOCRATOR – конечно-элементный программный комплекс, ориентированный на решение нелинейных задач механики // Труды V-ой Международной конференции «Научно-технические проблемы прогнозирования надежности и долговечности конструкций». СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2003. С. 466–480.
27. **Семенов А. С., Грищенко А. И., Мельников Б. Е.** Конечно-элементное моделирование деформирования костной ткани на субмикроскопическом уровне // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2014. № 3 (201) С. 20–34.
28. **Грищенко А. И., Семенов А. С.** Моделирование процессов упругопластического деформирования монокристаллических сплавов // Вестник Пермского политехнического университета. Механика. 2022. № 2. С. 58–72.
29. **Maalawi K.** Introductory chapter: An introduction to the optimization of composite structures // Optimum Composite Structures. Edited by K. Maalawi. IntechOpen. Published November 5-th, 2018.
30. **Димитриенко Ю. И., Дроголюб А. Н., Соколов А. П., Шпакова Ю. В.** Метод решения задачи оптимизации структуры дисперсно-армированных композитов при ограничениях на тепловые и прочностные свойства // Наука и образование (МГТУ им. Н. Э. Баумана). 2013. № 11. С. 415–430.
31. **Hamdia K. M., Zhuang, X., Rabczuk T.** An efficient optimization approach for designing machine learning models based on genetic algorithm // Neural Computing and Applications. 2021. Vol. 33. No. 6. Pp. 1923–1933.

32. **Nelder J. A., Mead R.** A simplex method for function minimization // *The Computer Journal*. 1965. Vol. 7. No. 4. Pp. 308–313.

33. **Гецов Л. Б., Семенов А. С., Голубовский Е. Р., Грищенко А. И., Семенов С. Г.** Особенности и единое описание I, II и III стадий ползучести монокристаллических жаропрочных сплавов // *Заводская лаборатория. Диагностика материалов*. 2020. Т. 86. № 3. С. 44–54.

34. **Боровков А. И., Алеман Меца Д.** Гомогенизация однонаправленных волокнистых и гранулированных упругих композитов // *Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета*. 2009. № 3 (84) С. 135–153.

## REFERENCES

1. **Dimitrienko Yu. I., Sokolov A. P.**, Development of automated technology of calculation of effective elastic characteristics of composites by method of asymptotic averaging, *Herald of the Bauman Moscow State Techn. Univ. Natur. Sci.* (2) (2008) 56–67 (in Russian).

2. **Mannanov E. R.**, About dielectric materials with high thermal conductivity for electrical insulation systems of high-voltage electric machines: a review of domestic and foreign literature, *Mater. Sci. Power Eng.* 27 (4) (2021) 42–67 (in Russian).

3. **Ngo I. L., Byon C.**, Thermal conductivity of particle-filled polymers, *Polymer Science Book Series. No. 1: Research advances, practical applications and educational aspects*, Edit. by A. Méndez-Vilas, A. Solano, Formatex Research Center, Badajoz (Spain) (2016) 554–565.

4. **Reuss A.**, Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle, *ZAMM – J. Appl. Math. Mech. /Z. Angew. Math. Mech.* 9 (1) (1929) 49–58.

5. **Voigt W.**, Über die Beziehung zwischen den beiden Elasticitätsconstanten isotroper Körper, *Ann. Phys.* 274 (12) (1889) 573–587.

6. **Eshelby J. D.**, The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems, *Proc. R. Soc. London, Ser. A.* 241 (1226) (1957) 376–396.

7. **Mori T., Tanaka K.**, Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions, *Acta Metallurg.* 21 (5) (1973) 571–574.

8. **Grishchenko A. I., Semenov A. S., Semenov S. G., Melnikov B. E.**, Influence of structural parameters of the masonry on effective elastic properties and strength, *Mag. Civ. Eng.* 49 (5) (2014) 95–106.

9. **Hashin Z., Shtrikman S.**, A variational approach to the theory of elastic behavior of multiphase materials, *J. Mech. Phys. Solids.* 11 (2) (1963) 127–140.

10. **Svetashkov A. A., Kupriyanov N. A., Manabaev K. K.**, Modifications of effective moduli Hashin – Strickmann type for two-component isotropic composite, *Physical Mesomechanics.* 18 (6) (2015) 57–65 (in Russian).

11. **Pobedrya B. E.**, *Mechanics of composite materials*, Publishing House of Moscow State University, Moscow, 1984 (in Russian).

12. **Gorbachev V. I.**, The homogenization method of Bakhvalov – Pobedrya in the composite mechanics, *Moscow Univ. Mech. Bull.* 71 (2016) 137–141.

13. **Bakhvalov N. S., Panasenko G. P.**, *Homogenization: Averaging processes in periodic media: Mathematical problems in the mechanics of composite materials (Mathematics and its Applications, Vol. 36)* Springer, New York, 1989.

14. **Maxwell J. C.**, *A treatise on electricity and magnetism*, Oxford University Press, Oxford, 1904.

15. **Lord Rayleigh J. S.**, On the influence of obstacles arranged in rectangular order upon the properties of a medium, *Philos. Mag.* 34 (5) (1892) 481–502.

16. **Bruggeman D. A. G.**, Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten der Mischkörper aus isotropen Substanzen, *Ann. Phys.* 416 (7) (1935) 636–664.

17. **Pashkovsky D. M., Frolova K. P., Vilchevskaya E. N.**, Effective diffusion properties of a polycrystal, *St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics.* 15 (3) (2022) 154–168 (in Russian).

18. **Barrer R. M.**, Diffusion and permeation in heterogeneous media, In book: *Diffusion in polymers*, Ed. by J. Crank and G. S. Park, Academic Press, London, 1968.

19. **Bell G. E., Crank J.**, Influence of imbedded particles on steady-state diffusion, *J. Chem. Soc. Farad. Trans.* 70 (2) (1974) 1259–2732.





20. Meredith R. E., Tobias C. W., Conductivities of emulsions, J. Electrochem. Soc. 108 (3) (1961) 286.
21. Fricke H., A mathematical treatment of the electric conductivity and capacity of disperse systems. I. The electric conductivity of a suspension of homogeneous spheroids, Phys. Rev. 24 (5) (1924) 575–587.
22. Epov M. I., Terekhov V. I., Nizovtsev M. I., et al., Effective thermal conductivity of dispersed materials with contrast inclusions, High Temperature. 53 (1) (2015) 45–50.
23. Zarubin V. S., Kuvyrkin G. N., Savelyeva I. Yu., Effective thermal conductivity of a composite in case of inclusions shape deviations from spherical ones, Mat. Mod. Chisl. Met. (4) (2014) 3–17 (in Russian).
24. Borovkov A. I., Sabadash V. O., Finite element multiscale homogenization and equential heterogenization of composite structures, Proc. 10th Int. ANSYS'2002 Conf., Pittsburgh, USA, 2002.
25. Borovkov A. I., Klich A. E., Computational micromechanics of composites. Finite element homogenization methods, Appl. Math. Mech. (Z. Angew. Math. Mech. – ZAMM). 78 (Suppl. 1) (1998) S295–S296.
26. Semenov A. S., PANTOCRATOR – konechno-elementnyy programmnyy kompleks, oriyentirovanny na resheniye nelineynykh zadach mekhaniki [PANTOCRATOR – finite-element program specialized on the solution of non-linear problems of solid body mechanics], In: Proc. The V-th Int. Conf. "Scientific and engineering problems of reliability and service life of structures and methods of their decision", St. Petersburg Polytechnical University Publishing, St. Petersburg (2003) 466–480 (in Russian).
27. Semenov A. S., Grishchenko A. I., Melnikov B. E., Finite-element modeling of bone tissue deformation at the submicroscopic level, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. (3 (201)) (2014). 20–34 (in Russian).
28. Grishchenko A. I., Semenov A. S., Modeling of the elastoplastic deformation process of single crystal superalloys, PNRPU Mechanics Bulletin. (2) (2022) 58–72 (in Russian).
29. Maalawi K., Introductory chapter: An introduction to the optimization of composite structures, In book: Optimum Composite Structures. Edit. by K. Maalawi. IntechOpen. Publ. Nov. 5-th, 2018.
30. Dimitrienko Yu. I., Drogolyub A. N., Sokolov A.P., Shpakova Yu. V., Metod resheniya zadachi optimizatsii struktury dispersno-armirovannykh kompozitov pri ogranicheniyakh na teplovye i prochnostnye svoystva [Method for solving an optimization problem of the structure of fiber reinforced composites under restrictions on thermal and strength properties], Science and Education (Bauman State Technical University) (11) (2013) 415–430 (in Russian).
31. Hamdia K. M., Zhuang, X., Rabczuk T., An efficient optimization approach for designing machine learning models based on genetic algorithm, Neural Comput. Applic. 33 (6) (2021) 1923–1933.
32. Nelder J. A., Mead R., A simplex method for function minimization, Comput. J. 7 (4) (1965) 308–313.
33. Getsov L. B., Semenov A. S., Golubovsky E. R., et al., Features and uniform description of I, II, and III stages of the creep in single-crystal superalloys, Industrial Laboratory. Diagnostics of materials. 86 (3) (2020) 44–54 (in Russian).
34. Borovkov A. I., Aleman Mesa D., Homogenization of unidirectional fiber and granular elastic composites, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. (3 (84)) (2009) 135–153 (in Russian).

### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ГРИЩЕНКО Алексей Иванович** – научный сотрудник кафедры математического моделирования энергетических систем Санкт-Петербургского государственного университета, инженер лаборатории «Механика материалов» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

199034, Россия, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7-9

gai-gr@yandex.ru

ORCID: 0000-0001-6029-5670



**ИГНАТОВИЧ Игорь Антонович** – научный сотрудник кафедры математического моделирования энергетических систем Санкт-Петербургского государственного университета, Санкт-Петербург, Россия.

199034, Россия, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7-9

i.ignatovich@spbu.ru

ORCID: 0009-0009-5660-2207

**ПЕТРОСЯН Ованес Леонович** – доктор физико-математических наук, доцент кафедры математического моделирования энергетических систем Санкт-Петербургского государственного университета, Санкт-Петербург, Россия.

199034, Россия, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7-9

o.petrosyan@spbu.ru

ORCID: 0000-0001-7908-2261

## THE AUTHORS

**GRISHCHENKO Alexey I.**

*St. Petersburg State University;*

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

7-9, Universitetskaya Emb., St. Petersburg, 199034, Russia

gai-gr@yandex.ru

ORCID: 0000-0001-6029-5670

**IGNATOVICH Igor A.**

*St. Petersburg State University*

7-9, Universitetskaya Emb., St. Petersburg, 199034, Russia

i.ignatovich@spbu.ru

ORCID: 0009-0009-5660-2207

**PETROSIAN Ovanes L.**

*St. Petersburg State University*

7-9, Universitetskaya Emb., St. Petersburg, 199034, Russia

o.petrosyan@spbu.ru

ORCID: 0000-0001-7908-2261

*Статья поступила в редакцию 18.01.2023. Одобрена после рецензирования 26.06.2023.  
Принята 26.06.2023.*

*Received 18.01.2023. Approved after reviewing 26.06.2023. Accepted 26.06.2023.*