

Е. Л. Гусев^{а,б,}, В.Н. Бакулин^{б,г}*

^а*Институт проблем нефти и газа ФИЦ “Якутский научный центр Сибирского отделения РАН”, Якутск, Россия*

^б*Институт математики и информатики Северо-Восточного Федерального университета, Якутск, Россия*

^г*Институт прикладной механики РАН, Москва, Россия*

^д*Московский авиационный институт (Национальный исследовательский университет), Россия*

ОБОБЩЕННЫЕ МОДЕЛИ ДОЛГОВЕЧНОСТИ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ОПРЕДЕЛЯЮЩИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИТОВ

E. L. Gusev and V. N. Bakulin*

GENERALIZED DURABILITY MODELS AND THEIR APPLICATION TO SOLVING PROBLEMS ON PREDICTING THE DEFINING CHARACTERISTICS OF COMPOSITES

Keywords: generalized durability models, prediction, modern molecular kinetic theory, variational formulation

The promising ways to predict the durability of polymer composites under the influence of extreme factors of the external environment and operational loads are investigated. The possibilities of effective predicting the defining characteristics (the residual life, strength, reliability, and durability) of composites are studied based on the information received in the first years of their operation. The development of generalized durability models of composites under extreme conditions is based on the main provisions of the modern molecular kinetic theory (MKT). This is due to the fact that chemical transformations in composites can occur both at intermolecular and intramolecular levels. On the basis of the modern MKT, the issue of matching the defining parameters of mathematical models calculated by solving prediction problems within the framework of formulated refined variational statements taking into account the

*Автор, с которым следует вести переписку: elgusev@mail.ru
Corresponding author: elgusev@mail.ru

results of experimental measurements at the macrolevel with the corresponding defining parameters of physical models describing molecular interactions at the microlevel is investigated. Results of computational experiments are presented.

Ключевые слова: модели долговечности обобщенные, прогнозирование, молекулярно-кинетическая теория современная, постановка вариационная

Работа посвящена актуальной проблеме прогнозирования долговечности полимерных композитов при воздействии экстремальных факторов внешней среды и эксплуатационных нагрузок. Оценивали возможности эффективного прогнозирования определяющих характеристик (остаточного ресурса, прочности, надежности, долговечности) на основе информации, полученной в первые годы эксплуатации. В основу разработки обобщенных моделей долговечности композитов в экстремальных условиях положены базовые положения современной молекулярно-кинетической теории (МКТ), учитывающей возможности химических превращений в композитах как на межмолекулярном, так и на внутримолекулярном уровне. На основе современных положений МКТ исследован вопрос о согласовании определяющих параметров математических моделей, учитывающих результаты экспериментальных измерений на макроуровне, с соответствующими определяющими параметрами физических моделей, описывающих молекулярные взаимодействия на микроуровне. Приведены результаты вычислительных экспериментов.

Введение

Полимерные материалы (ПМ), полимерные композитные материалы (ПКМ) благодаря разнообразию своих свойств получили самое широкое распространение в различных областях техники. В последние десятилетия значительную актуальность приобретают вопросы эффективной эксплуатации конструкций из композитов в экстремальных условиях внешней среды [1—5]. В соответствии с этим все большее значение приобретает создание надежных методов количественной оценки работоспособности конструкций из ПКМ [6—10].

ПКМ и конструкции из них являются неотъемлемой частью современной техники в таких областях, определяющих научно-технический прогресс, как авиа- и космическая техника, судостроение, нефтяная и газовая промышленность и др., что обуславливает все возрастающую важность разработки эффективных методов долгосрочного прогнозирования определяющих характеристик композитов (прочности, надежности, долговечности, остаточного ресурса).

Применяемые модели долговечности, как правило, не позволяют достичь необходимой степени адекватности реальной ситуации, так как включают небольшое количество неопределенных параметров. В частности, в [11] приведена модель долговечности, описывающая воздействие двух факторов на композит: упрочнения и старения, и включающая в себя всего четыре параметра. При увеличении же числа параметров модели, что является необходимым условием повышения степени ее адекватности, возникает сложная проблема оптимизации многопараметрических показателей эффективности, оценивающих степень адекватности моделей реальной ситуации. Решение проблемы эффективного построения глобально-оптимальных решений — одна из важных составных частей разработки эффективных методов прогнозирования определяющих характеристик композитов. Специфические особенности рассматриваемых задач прогнозирования определяющих характеристик ПКМ при воздействии экстремальных факторов внешней среды приводят к неэффективности использования подходов, основанных на экстраполяции в традиционной постановке.

Принципиальное усовершенствование упомянутых подходов может быть достигнуто построением математических моделей, ориентированных на физические представления об изучаемых явлениях [12—15].

Цель настоящей работы — на основе современных достижений кинетической теории прочности оценить возможность согласования определяющих параметров математических моделей прогнозирования в рамках вариационных постановок с учетом экспериментальных измерений на макроуровне и физических моделей, описывающих молекулярное взаимодействие на микроуровне. Кроме того, рассмотрены перспективы развития теории прогнозирования долговечности полимерных композитов при воздействии экстремальных факторов внешней среды, возможности повышения точности прогнозирования долговечности материалов на основе информации, полученной в первые годы эксплуатации.

1. Факторы, влияющие на длительную работоспособность ПКМ

Изменение с течением времени свойств ПКМ в значительной мере отражается на их работоспособности. При оценке этих свойств необходимо учитывать контакт материалов с окружающей средой, влияние влажности, температуры, световой и проникающей радиации. Также необходимо учитывать, что скорость и характер происходящих в материале изменений зависят от интенсивности воздействия.

Факторы, влияющие на долговечность ПМ, ПКМ, можно разделить на внутренние и внешние: к внутренним относят состав и структуру ПМ, ПКМ, молекулярную массу, молекулярно-массовое распределение и др., к внешним — температуру, влажность, световую и проникающую радиацию, кислород, механические нагрузки и др.

Из множества факторов, обуславливающих старение ПК, можно выделить факторы-агенты, непосредственно взаимодействующие с полимерным материалом, и факторы-активаторы, способствующие такому взаимодействию.

При выборе полимерного материала для конкретного применения в различных областях необходимо из большого количества возможных вариантов структуры материала подобрать такой, который обеспечит сочетание необходимых показателей. При решении вопросов о выборе оптимального материала одним из важнейших преимуществ становится его способность как можно дольше сохранять свою работоспособность, т.е. противостоять старению — совокупности физико-химических обратимых и необратимых превращений под воздействием экстремальных факторов внешней среды (температуры, влажности, солнечной радиации, механических напряжений и др.). Основу для принятия решения об использовании материала составляет совокупность требуемых показателей ПМ, ПКМ при его приемлемой стоимости и способности противостоять старению, а доминирующим фактором является способность ПМ, ПКМ функционировать в заданном временном промежутке (часто до 20—30, а в необходимых случаях и более 50 лет) без замены.

Особую актуальность приобретают исследования стойкости полимерных материалов к излучению в связи со все возрастающим использованием ПКМ в авиа- и космической технике. Одним из наиболее эффективных активаторов старения является проникающая радиация, которая в отличие от световой радиации способна инициировать превращения во всем объеме полимера.

2. Проблемы прогнозирования поведения ПКМ при воздействии экстремальных факторов внешней среды

Под действием факторов-активаторов и факторов-агентов старения ПМ, ПКМ претерпевают различные превращения, обусловленные протеканием химических и физических процессов в материале. При этом примеси, содержащиеся в ПМ, ПКМ, могут оказывать дополнительное влияние на скорость и характер химических превращений. Такие внешние факторы, как температура, световая и проникающая радиация, инициируют большинство химических превращений. В большинстве случаев механическое и электрическое воздействие, как правило, способствует ускорению химических превращений. Физико-химические процессы оказывают определяющее влияние на энергию активации и интенсивность молекулярных движений в ПКМ. На основе установленной связи между энергией активации протекающих при старении материала физико-химических процессов и интенсивностью молекулярных движений в полимере энергия активации будет зависеть от температуры и физического состояния полимера.

В настоящее время механизм старения ПМ, ПКМ еще недостаточно подробно изучен, не установлена количественная связь между влиянием различных видов внешних воздействий на скорость преобладающего процесса старения.

Для удовлетворительного прогнозирования необходимо разработать эффективные и надежные соотношения между кинетическими параметрами физико-химических процессов, происходящих на молекулярном уровне, и макросвойствами материалов, определяющими их эксплуатационную пригодность. Решение данных вопросов связано с важными и актуальными проблемами, стоящими на пути создания обоснованных подходов к прогнозированию изменения свойств ПМ, ПКМ при их хранении и эксплуатации. Необходимость разработки эффективных подходов для решения данных научных проблем обусловлена тем, что без данных о характере и скорости изменения механических, электрических, теплофизических свойств ПМ, ПКМ в условиях эксплуатации изделий невозможно обеспечить рациональный выбор материалов и повысить за счет этого надежность конструкций из них.

3. Основные положения молекулярно-кинетической теории, положенные в основу разработки обобщенных моделей долговечности ПКМ

В основу разработки обобщенных моделей долговечности ПМ, ПКМ в экстремальных условиях были положены основные положения современной молекулярно-кинетической теории (МКТ), описывающие химические превращения в ПМ, ПКМ на молекулярном уровне.

В настоящее время МКТ основана на двух современных теориях, объясняющих кинетику протекания элементарных химических реакций на молекулярном уровне: теории активных столкновений (ТАС) и теории активированных комплексов (ТАК).

В рамках ТАС предполагают, что реакции осуществляются в моменты столкновения молекул, которые приводят к химическому превращению только в том случае, когда сталкивающиеся молекулы обладают определенной минимальной энергией (энергией активации E_a), чтобы преодолеть определенный энергетический барьер. В теории активированных комплексов для любой элементарной химической реакции предполагают, что начальная конфигурация атомов переходит в конечную в результате непрерывного изменения межъядерных расстояний.

Из распределения Больцмана для кинетической энергии молекул известно, что число молекул, обладающих энергией $E > E_a$, пропорционально $\exp(-E_a / RT)$ (где R — постоянная Больцмана, T — температура). В результате скорость химической реакции может быть представлена уравнением Аррениуса, полученным из термодинамических соображений. В функциональной и дифференциальной формах уравнения Аррениуса имеют вид

$$k = k_0 \exp(-E_a / RT), \quad d(\ln k) / dT = E_a / RT^2, \quad (1)$$

где k — константа скорости химической реакции. Из анализа уравнения Аррениуса в дифференциальной форме следует, что чем больше энергия активации, тем быстрее увеличивается константа скорости реакции с возрастанием температуры. Фактор частоты k_0 характеризует частоту столкнове-

ний реагирующих молекул (число активных столкновений частиц в единице объема в реакционной смеси) и выражает ту долю частиц, у которых энергия равна или больше энергии активации E_a , представляющей собой избыток энергии по отношению к средней энергии частиц при данной температуре. Избыток энергии необходим для того, чтобы реагирующие частицы могли вступить в химическую реакцию. Фактор частоты k_0 определяется свойствами реагирующих частиц, а также их энергетическим состоянием.

4. Модели молекулярных взаимодействий в ПМ, ПКМ, положенные в основу разработки оптимальных обобщенных моделей долговечности

В соответствии с основными положениями МКТ в основу исследования была положена физическая модель, в которой характер изменения во времени определяющего свойства композита D при одновременном воздействии нескольких экстремальных факторов определяется элементарными химическими реакциями на молекулярном уровне. Эти реакции описываются суперпозицией уравнений Аррениуса, моделирующих разные виды молекулярных взаимодействий, инициированных воздействием разных экстремальных факторов (ЭФ) F_1, F_2, \dots, F_p на композит:

$$D = D_0 + H \left(k_0^1 \exp \left(E_a^1 / RT \right), k_0^2 \exp \left(E_a^2 / RT \right), \dots, k_0^s \exp \left(E_a^s / RT \right), \dots \right). \quad (2)$$

Здесь H — функциональная зависимость, связывающая определяющую характеристику композита с параметрами физико-химических процессов, происходящих на молекулярном уровне; D_0 — начальное значение определяющей характеристики композита. В предположении аддитивного характера влияния результатов молекулярных взаимодействий на долговечность ПМ, ПКМ физическую модель (2) можно записать как

$$D = D_0 + \sum_s C_s \left(k_0^s \right) \exp \left(P_s \left(E_a^s \right) / RT \right), \quad (3)$$

где $C_s \left(k_0^s \right)$, $P_s \left(E_a^s \right)$ — функциональные коэффициенты, зависящие от фактора частоты k_0^s и энергии активации E_a^s , определяющие конкретный вид молекулярных взаимодействий.

В общем случае на ПМ, ПКМ, композитные конструкции могут влиять в различных комбинациях одновременно несколько разных ЭФ F_j , связанных с процессами упрочнения, воздействием солнечной и проникающей радиации, влагонасыщением, воздействием ультрафиолетового излучения и других ЭФ, воздействием эксплуатационных нагрузок как циклического, так и нециклического характера и т.п. В предположении, что разные физические факторы оказывают на полимерный композит влияние, независимое от воздействия других факторов, и обусловленные ими изменения суммируются, то можно принять что обобщенная модель долговечности, описывающая

одновременное воздействие нескольких факторов, может быть представлена в виде

$$D = D_0 + \sum_{j=1}^p F_j(u_{j,1}, u_{j,2}, \dots, u_{j,l_j}; t). \quad (4)$$

Здесь D — прогнозируемая определяющая характеристика композита; D_0 — первоначальное значение определяющей характеристики; $u_{j,1}, u_{j,2}, \dots, u_{j,l_j}$ — параметры, описывающие характер воздействия j -го фактора на композит; t — время.

В соответствии с современными положениями МКТ было принято, что воздействие каждого из факторов F_j на композит активирует на микроуровне совокупность деструктивных элементарных процессов, в которых протекающие химические реакции могут быть описаны в виде суперпозиции уравнений Аррениуса. Каждое из составляющих суперпозицию уравнений Аррениуса описывает определенный вид элементарных химических реакций с присущими ему параметрами — фактором частоты, характеризующим частоту столкновений реагирующих молекул (число активных столкновений частиц в единице объема реагирующей смеси), и энергией активации.

В соответствии со сформулированными положениями воздействие каждого фактора F_j на композит может быть представлено в виде суперпозиции уравнений Аррениуса:

$$F_j(u_{j,1}, \dots, u_{j,l_j}; t) = \sum_{k=1}^{N_j} \alpha_{kj}(u_{j,1}, \dots, u_{j,l_j}) \left[\exp(\beta_{kj}(u_{j,1}, \dots, u_{j,l_j})t) - 1 \right],$$

$$j = 1, 2, \dots, p; 0 \leq t \leq t_{\max}, \quad (5)$$

где N_j — число элементарных деструктивных процессов, протекание химических реакций в которых активируется при воздействии j -го фактора на композит. Параметры $\alpha_{kj} = \alpha_{kj}(u_{j,1}, \dots, u_{j,l_j})$ выражают долю частиц, у которых энергия больше или равна энергии активации, необходимой для инициирования k -й элементарной химической реакции ($k = 1, 2, \dots, N_j$) при воздействии на композит фактора F_j ; параметры $\beta_{kj} = \beta_{kj}(u_{j,1}, \dots, u_{j,l_j})$ связаны с энергией активации, т.е. с избытком энергии по отношению к средней энергии частиц при данной температуре, необходимым для того, чтобы реагирующие частицы могли инициировать k -ю элементарную химическую реакцию ($k = 1, 2, \dots, N_j$) при воздействии на композит фактора F_j . Избыток энергии, связанный с энергией активации, определяется свойствами реагирующих частиц, их энергетическим состоянием.

5. Вариационная постановка задач прогнозирования определяющих характеристик полимерных композитов

Под предельно допустимой погрешностью прогноза γ_R^{\max} будем понимать предельно допустимое отклонение прогнозируемой зависимости $\tilde{D}(t)$ остаточного ресурса D от реальной зависимости $D^*(t)$ на прогнозируемом отрезке времени. В соответствии с введенным определением предельно допустимая погрешность прогноза γ_R^{\max} удовлетворяет условию

$$\max_{t_{\min} \leq t \leq t_{\max}} \left| \tilde{D}(t) - D^*(t) \right| \leq \gamma_R^{\max}. \quad (6)$$

Вариационная постановка задач прогнозирования определяющих характеристик ПМ, ПКМ. На основе кратковременных испытаний, проведенных на временном интервале ретроспекции $[0, t_{\min}]$, необходимо найти оптимальные параметры $u_1^*, u_2^*, \dots, u_n^*$ обобщенной модели долговечности (ОМД) $D(u^*; t)$, доставляющие глобальный минимум критерию эффективности

$$\tilde{S} = S(u, Q) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \left[D(u_1, u_2, \dots, u_n; t) - \tilde{D}_i \right]^2 \Rightarrow \min_{u \in U} \quad (7)$$

на множестве многопараметрических ОМД $\{D(u; t)\}$, позволяющих осуществлять прогноз с погрешностью, не превышающей заранее заданную предельно допустимую точность прогноза γ_R^{\max} (2):

$$\max_{t_{\min} \leq t \leq t_{\max}} \left| \tilde{D}(t) - D^*(t) \right| \leq \gamma_R^{\max}. \quad (8)$$

Здесь $\tilde{D}_i = D_i(Q)$ — измеренные значения определяющей характеристики D в моменты времени t_1, t_2, \dots, t_m с учетом погрешностей измерений Q_1, Q_2, \dots, Q_m ; $D^*(t)$ — реальная временная зависимость; U — допустимое множество параметров ОМД. Вектор неопределенных параметров $u^*(Q)$ доставляет глобальный минимум суммарной среднеквадратической ошибке $\tilde{S} = S(u; Q)$ (7):

$$S(u^*(Q); Q) = \min_{u \in U} S(u; Q). \quad (9)$$

6. Согласование определяющих параметров физических и математических моделей на микро- и макроуровне на основе положений МКТ

На основе современных положений кинетической теории прочности был исследован вопрос о согласовании определяющих параметров математических моделей, учитывающих результаты экспериментальных измерений

на макроуровне, с соответствующими параметрами физических моделей, описывающих молекулярные взаимодействия на микроуровне.

При исследовании вопроса об оптимальном согласовании соответствующих определяющих параметров считали, что основное влияние на изменение во времени остаточного ресурса ПМ, ПКМ при воздействии экстремальных факторов внешней среды на композит оказывают активируемые ими деструктивные процессы, происходящие на молекулярном уровне. Химические реакции, связанные с этими процессами, могут быть описаны уравнениями Аррениуса в дифференциальной или функциональной формах. В соответствии с этим многофакторные деструктивные процессы, происходящие на микроуровне, допускают описание физическими моделями, представимыми в виде суперпозиции уравнений Аррениуса.

При построении математических моделей обобщенных функций долговечности, описывающих на макроуровне изменение определяющего свойства композита при воздействии экстремальных факторов внешней среды, будем считать, что для адекватного описания временной зависимости остаточного ресурса композита структура функций долговечности должна быть аналогична структуре физических моделей, описывающих деструктивные процессы, происходящие на микроуровне. В соответствии с этим структура обобщенных функций долговечности, описывающих на макроуровне изменение во времени определяющего свойства композита, также принята в виде суперпозиции экспоненциальных функций с неопределенными параметрами. В число параметров задачи кроме введенной системы неопределенных параметров входит и число экспоненциальных функций. Система неопределенных параметров затем подбирается таким образом, чтобы основные качественные закономерности структуры временной зависимости обобщенной функции долговечности, построенной на основе результатов физических экспериментов, проведенных на интервале ретроспекции, в максимальной степени соответствовали основным качественным закономерностям структуры реальной временной зависимости остаточного ресурса на данном временном интервале. Поэтому следует ожидать, что и основные качественные закономерности структуры временной зависимости обобщенной функции долговечности, построенной по такой схеме, будут соответствовать основным качественным закономерностям реальной временной зависимости остаточного ресурса и на прогнозируемом временном интервале.

Для достижения максимального согласования был введен ряд основополагающих принципов и понятий, позволяющих провести оптимальное согласование определяющих параметров, полученных на основе построенных математических моделей на макроуровне, с определяющими параметрами физических моделей, описывающими молекулярные взаимодействия на микроуровне. В результате были введены такие понятия и принципы, как принцип множественности моделей прогнозирования, понятие моделей прогнозирования оптимальной структуры и сложности, предельно-допустимой

точности прогноза и др. Разработана методика построения оптимальной модели прогнозирования оптимальной структуры и сложности [16—19].

В соответствии с принципом множественности моделей прогнозирования считается, что выбор многопараметрического семейства моделей прогнозирования $\{D^N(u; t)\}$, $(1 \leq N \leq \infty)$ осуществлен таким образом, что в данном многопараметрическом семействе находится модель, наиболее адекватная реальной прогнозируемой временной зависимости $R^*(t)$. В рамках сформулированных вариационных постановок задач прогнозирования проведено исследование параметрического семейства обобщенных моделей долговечности $\{D^N(u; t)\}$, $(1 \leq N \leq \infty)$, в котором параметром является число слагаемых N в разложении функции долговечности в ряд. В рамках введенного параметрического семейства обобщенных моделей долговечности $\{D^N\}_{N=1}^{\infty}$ строится модель прогнозирования оптимальной структуры и сложности, под которой понимается модель, содержащая оптимальное число слагаемых, позволяющая решать задачу прогнозирования с требуемой точностью. В соответствии с полученными результатами в заданном параметрическом семействе параметры модели оптимальной структуры и сложности подбираются из условия, чтобы временные качественные закономерности модели на временном отрезке ретроспекции, на котором производятся экспериментальные измерения, в максимальной степени соответствовали временным качественным закономерностям реальной временной зависимости остаточного ресурса $R^*(t)$ [16—19]. В соответствии с полученными результатами, сформулированным принципом множественности моделей прогнозирования, введенным понятием моделей прогнозирования оптимальной структуры и сложности и методологией их построения следует ожидать, что в этом случае данные временные качественные закономерности будут в максимальной степени соответствовать и временным качественным закономерностям реальной временной зависимости остаточного ресурса $R^*(t)$ и на отрезке прогнозирования $[t_{\min}, t_{\max}]$. Иными словами, построенная модель прогнозирования оптимальной структуры и сложности будет являться наиболее адекватной реальной временной зависимостью остаточного ресурса $R^*(t)$ и на отрезке прогнозирования $[t_{\min}, t_{\max}]$. При этом оптимальная модель прогнозирования оптимальной структуры и сложности должна иметь наименьшую сложность, т.е. иметь минимальное число параметров N^* , при котором уже может быть достигнута требуемая точность прогноза.

В соответствии с перечисленными требованиями проблема построения модели оптимальной структуры и сложности сводится к решению экстремальной задачи

$$\begin{aligned} \max_{t_{\min} \leq t \leq t_{\max}} \left| D^{N^*} \left(u^{*N^*}; t \right) - D^*(t) \right| = \min_{1 \leq N < \infty} \max_{t_{\min} \leq t \leq t_{\max}} \left| D^N \left(u^{*N}; t \right) - D^*(t) \right|, \\ \max_{t_{\min} \leq t \leq t_{\max}} \left| \tilde{D}(t) - D^*(t) \right| \leq \gamma_R^{\max}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$1 \leq N < \infty.$$

Здесь N^* — оптимальное число параметров модели прогнозирования оптимальной структуры и сложности D^{N^*} ; u^{*N} — оптимальный вектор параметров оптимальной модели прогнозирования параметрического семейства, соответствующей параметру N ; γ_{\max} — предельно допустимая ошибка решения задачи прогноза. В соответствии с принципом множественности моделей прогнозирования считается, что если в заданном многопараметрическом семействе обобщенных моделей прогнозирования существует модель, наиболее адекватная реальной прогнозируемой временной зависимости $D^*(t)$, то данная модель в рассматриваемом параметрическом семействе является моделью оптимальной структуры и сложности.

В результате будет построена оптимальная обобщенная функция долговечности, параметры которой по разработанной методике выбраны из условия, чтобы ее оптимальная структура в наибольшей степени была адекватна структуре реальной временной зависимости остаточного ресурса. При этом результаты воздействия каждого экстремального фактора на композит будут описаны в виде суперпозиции экспоненциальных функций, оптимальные параметры и число которых выбраны из условия наиболее адекватного описания результатов воздействия данного фактора на композит.

Полученное адекватное представление результатов воздействия каждого фактора на композит в форме суперпозиции экспоненциальных функций может позволить провести конструктивный анализ физических особенностей и характера его влияния на долговечность композита как на микро-, так и на макроуровне и разработать соответствующие рекомендации по повышению долговечности композита.

Таким образом, в соответствии с рассматриваемым подходом физические задачи восстановления параметров деструктивных химических реакций, инициированных действием экстремальных факторов внешней среды, сформулированы в математической форме в рамках уточненных вариационных постановок обратных задач прогнозирования определяющих характеристик ПМ, ПКМ. В соответствии со сформулированным принципом множественности моделей прогнозирования и введенным понятием оптимальных моделей прогнозирования оптимальной структуры и сложности в вариационной постановке, задачи восстановления неопределенных параметров моделей могут быть сведены к соответствующим многопараметрическим существенно нелинейным многоэкстремальным задачам вида [10]. Эти задачи связаны с нахождением глобального минимума функционала J , оценивающего степень адекватности многопараметрической модели, описывающей воздействие экстремальных факторов внешней среды на композит [16—19]:

$$J \left(\left\{ \left(u_{j,1}^*, u_{j,2}^*, \dots, u_{j,l_j}^* \right) \right\}_{j=1}^p \right) = \min_{\{u_{jk}\}} J \left(\left\{ \left(u_{j,1}, u_{j,2}, \dots, u_{j,l_j} \right) \right\}_{j=1}^p \right), \quad (11)$$

где p — число воздействующих на композит экстремальных факторов. Для построения глобального минимума в экстремальной задаче (11) разработа-

ны комбинированные методы поиска глобального экстремума, основанные на комбинированном применении необходимых и достаточных условий экстремума и методов полного перебора [16—19].

Разработанная методология согласования параметров математических и физических моделей на микро- и макроуровнях позволила решить задачу восстановления параметров физико-химических процессов, происходящих на молекулярном уровне и приводящих к деструктивным изменениям в композитах и ухудшению их характеристик с течением времени. Поставленная задача заключалась в том, чтобы на основе информации, полученной из краткосрочных физических экспериментов, проведенных на временном интервале ретроспекции $[0, t_{\min}]$, предшествующем прогнозируемому временному отрезку $[t_{\min}, t_{\max}]$, восстановить параметры деструктивных химических реакций в композите.

В рамках разработанной методологии согласования математическая модель долговечности на макроуровне была представлена в виде ряда, представляющего собой суперпозицию экспоненциальных функций с неопределенными параметрами (4), (5). Таким образом, структура математической модели обобщенной функции долговечности на макроуровне была выбрана аналогичной структуре физической модели, описывающей деструктивные элементарные химические реакции в композите, инициированные действием экстремальных факторов внешней среды. Неопределенные параметры обобщенной модели долговечности $u_{j,1}, u_{j,2}, \dots, u_{j,l_j}$ ($j = 1, 2, \dots, p$) (4), (5), а также число данных неопределенных параметров n подбирали на основе решения специально построенных экстремальных задач (10), (11), оптимальные решения которых в наибольшей степени соответствуют решению задачи согласования параметров математических и физических моделей на микро- и макроуровнях [16—19].

Объективная оценка параметров деструктивных элементарных химических реакций в композитах на основе проведенных физических экспериментов позволила:

- построить эффективные обобщенные модели долговечности на долгосрочный период;
- провести конструктивный анализ влияния отдельных экстремальных факторов на долговечность композита;
- дать сравнительную оценку степени влияния того или иного экстремального фактора на долговечность композита.

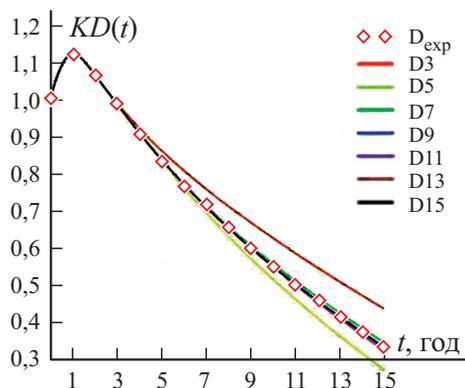
Знание параметров деструктивных элементарных химических реакций в композите, инициированных действием экстремальных факторов внешней среды, их сравнительный конструктивный анализ могут позволить разработать методику синтеза новых материалов с повышенной долговечностью.

7. Результаты вычислительных экспериментов на основе обобщенных моделей долговечности

На рисунке приведены результаты вычислительных экспериментов по прогнозированию остаточного ресурса полимерных волокнистых композитов (ПВК) в рамках разработанной методологии. Рассматривали одновременное воздействие двух факторов: упрочнения и старения.

В качестве исходных данных для построения обобщенных моделей долговечности оптимальной структуры и сложности на основе уравнений Аррениуса были использованы результаты физических экспериментов по измерению остаточного ресурса ПВК [11], в качестве которого рассматривали прочность ПВК D (D_0 — начальное значение прочности). Измерения остаточного ресурса проводили с интервалом 1 год. Для перехода к безразмерным величинам был введен обобщенный показатель сохраняемости $k_D(t)$, представляющий собой отношение остаточного ресурса ПВК $D(t)$ в момент времени t к начальному значению остаточного ресурса D_0 : $k_D(t) = D(t) / D_0$. Измеренные значения обобщенного показателя сохраняемости $k_D(t)$ с интервалом 1 год ($t = 0, 1 \text{ год} \text{—} 15$ лет) следующие: $k_D(0) = 1$, $k_D(1) = 1,125$, $k_D(2) = 1,065$, $k_D(3) = 0,990$, $k_D(4) = 0,910$, $k_D(5) = 0,835$, $k_D(6) = 0,770$, $k_D(7) = 0,715$, $k_D(8) = 0,770$, $k_D(9) = 0,600$, $k_D(10) = 0,550$, $k_D(11) = 0,500$, $k_D(12) = 0,460$, $k_D(13) = 0,415$, $k_D(14) = 0,375$, $k_D(15) = 0,335$.

На основе результатов вычислительных экспериментов по разработанной методологии осуществляли построение оптимальных многопараметрических обобщенных моделей долговечности оптимальной структуры и сложности при последовательном увеличении размера временного интервала ретроспекции. При проведении многовариантных вычислительных экспериментов верхнюю границу t_{\min} интервала ретроспекции $[0, t_{\min}]$ принимали в качестве параметра задачи. В соответствии с этим значения верхней границы



Оптимальные функции долговечности, построенные на основе оптимальных обобщенных моделей прогнозирования для разных интервалов ретроспекции.

интервала ретроспекции принимали равными $t_{\min} = 3, 5, 7, 9, 11, 13$ лет. Для каждого текущего значения t_{\min} решали задачу построения оптимальной модели долговечности оптимальной структуры и сложности $D^{N^*} \left(u^{*N^*}; t \right)$ (10), (11) и прогнозируемой зависимости остаточного ресурса на основе оптимальной модели долговечности на прогнозируемом временном интервале $[t_{\min}, t_{\max}]$ [16—19]. Поскольку введенное многопараметрическое семейство моделей долговечности $\left\{ D^N \left(u^N; t \right) \right\}_{N=1}^{\infty}$, представимых как суперпозиция экспонент в виде рядов (4), (5), отражает характер деструктивных процессов, описываемых физическими моделями (2), (3) на микроуровне, а оптимальная модель долговечности $D^{N^*} \left(u^{*N^*}; t \right)$, параметры которой вычислены на основе решения экстремальной задачи (10), (11), принадлежит данному многопараметрическому семейству, то следует ожидать, в соответствии с результатами [16—19], что данная модель будет наиболее адекватно описывать реальную временную зависимость остаточного ресурса на интервале прогнозирования $[t_{\min}, t_{\max}]$. Результаты вычислительных экспериментов подтверждают данные выводы.

На рисунке приведены одновременно все рассчитанные на основе разработанной методологии оптимальные функции долговечности соответственно для интервалов ретроспекции, размеры которых составляют последовательно 3, 5, 7, 9, 11 и 13 лет. На графике квадратиками отмечены экспериментальные значения остаточного ресурса. В первые два года процессы упрочнения превосходят процессы старения. В соответствии с этим на этом временном отрезке наблюдается рост обобщенного показателя сохраняемости $k_D(t)$. На следующем временном отрезке наблюдается преобладание процессов старения над процессами упрочнения, вследствие чего зависимость обобщенного показателя сохраняемости $k_D(t)$ является монотонно убывающей. D_3 — прогноз остаточного ресурса по данным за первые 3 года экспозиции, D_5 — по данным за первые 5 лет и т. д. На основе проведенных вычислительных экспериментов по разработанной методологии можно заключить, что уже для интервала ретроспекции 5 лет ($t_{\min} = 5$) прогнозируемая временная зависимость остаточного ресурса с достаточно высокой точностью описывает реальную временную зависимость остаточного ресурса (на графике отмечена черным цветом).

Проведение вычислительных экспериментов на основе разработанной методологии может помочь достичь баланса между временем экспонирования и точностью результатов прогноза.

Заключение

Разработанная методология согласования параметров математических и физических моделей на микро- и макроуровнях позволила решить задачу восстановления параметров физико-химических процессов, происходящих

на молекулярном уровне и приводящих к деструктивным изменениям в композитах и ухудшению их характеристик с течением времени.

Объективная оценка параметров деструктивных элементарных химических реакций в композитах на основе проведенных физических экспериментов позволила построить эффективные обобщенные модели прогнозирования на долгосрочный период, провести конструктивный анализ влияния отдельных экстремальных факторов и дать сравнительную оценку степени влияния того или иного фактора на долговечность композита. Знание параметров деструктивных элементарных химических реакций в композите, инициированных действием экстремальных факторов внешней среды, их сравнительный конструктивный анализ могут позволить разработать методику синтеза новых материалов с повышенной долговечностью.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИПНГ ФИЦ “ЯНЦ СО РАН”, Якутск, Россия (номер гос. регистрации 122011100162-9) и ИПРИМ РАН, Москва, Россия (номер гос. регистрации 121112200126-5).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Уржумцев Ю. С.* Прогнозирование длительного сопротивления полимерных материалов. — М.: Наука, 1982. — 222 с.
2. *Реутов А. И.* Прогнозирование климатической стойкости полимерных материалов, применяемых в строительстве // Вестн. ТГАСУ. — 2009. — №2. — С. 127—141.
3. *Степанов М. Н., Зинин А. В.* Прогнозирование характеристик сопротивления усталости материалов и элементов конструкций. — М.: Инновац. машиностроение, 2007. — 392 с.
4. *Стрижюс В. Е.* Методы оценки усталостной прочности элементов композитных авиаконструкций. — М.: Машиностроение, 2015. — 269 с.
5. *Бондарев А. Б.* Влияние соотношения “полимер-наполнитель” на циклическую долговечность ПКМ// Безопасность строительного фонда России. Проблемы и решения. — Курск: РААСН, 2011. — С. 233—237.
6. *Башкарев А. Я., Веттегрень В. И., Сулов М. А.* Долговечность полимерных композитов. — СПб: СППТУ, 2016. — 147 с.
7. *Lurie S. A., Solyaev Yu. O., Nguen D. Q., et al.* Experimental investigation modeling the impact of thermocycling on mechanical properties of carbon fiber-reinforced plastic // Composites: Mech., Comput., Appl. An Int. J. — 2015. — Vol. 3, No. 7. — P. 1—13.
8. *Dumansky A. M., Tairova L. P.* Time-dependent behavior of carbon fiber-reinforced laminates // Proc. 2nd Int. Conf. on Advanced Composite Materials and Technologies for Aerospace Applications. — Wrexham, North Wales, UK, 2012. — P. 75—79.
9. *Реутов А. И.* Прогнозирование надежности строительных изделий из полимерных материалов. — М.: РИФ “Стройматериалы”, 2007. — 184 с.
10. *Потапова Л. Б., Ратнер С. Б.* Прогноз долговечности хрупких полимеров по результатам кратковременных испытаний на прочность // Механика композит. материалов. — 1990. — № 4. — С. 742—745.
11. *Булманис В. Н., Старцев О. В.* Прогнозирование изменения прочности полимерных волокнистых композитов в результате климатического воздействия / Препринт. — Якутск: ЯНЦ СО РАН, 1988. — 32 с.

12. *Уржумцев Ю. С., Черский И. Н.* Научные основы инженерной климатологии полимерных и композитных материалов // *Механика композит. материалов.* — 1985. — № 4. — С. 708—714.

13. *Булманис В. Н., Ярцев В. А., Кривонос В. В.* Работоспособность конструкций из полимерных композитов при воздействии статических нагрузок и климатических факторов // *Механика композит. материалов.* — 1987. — № 5. — С. 915—920.

14. *Карпухин О. Н.* Определение срока службы полимерного материала как физико-химическая проблема // *Успехи химии.* — 1980. — № 8. — С. 1523—1553.

15. *Филатов И. С., Бочкарев Р. Н.* Некоторые проблемы оценки и прогнозирования климатической устойчивости полимерных материалов // *Методы оценки климатической устойчивости полимерных материалов.* — Якутск: ЯФ СО АН СССР, 1986. — С. 11—20.

16. *Gusev E. L., Bakulin V. N.* Variation formulations of inverse problems in forecasting the residual life of composites // *Dokl. Phys.* — 2018. — Vol. 63, No. 9. — P. 388—392.

17. *Gusev E. L., Bakulin V. N.* The use of generalized models in the variational formulation of the prediction tasks defining characteristics of composite materials // *J. Phys.: Conf. Ser. Collection of Materials of the VIII Int. Conf.* — 2020. — Vol. 1431. — P. 012017.

18. *Gusev E. L.* Using parallel procedures for the searching of the extremum for the decision of the inverse problems prediction of the defining characteristics of the composite materials // *Mater. Phys. Mech.* — 2016. — Vol. 26, No. 1. — P. 70—72.

19. *Gusev E. L., Bakulin V. N., Chernykh V. D.* Development and application of combined methods to expand the potential for predicting the defining characteristics of composites // *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng.* — 2020. — Vol. 927. — P. 010240.

Поступила в редакцию 17.01.2022

Окончательный вариант поступил 27.04.2022

Received Jan. 17, 2022 (Apr. 27, 2022)
