

УДК: 669.7:620.1

Акназар уулу Кадырбек¹,

старший преподаватель

Ташполотов Ысламидин²,

доктор физико-математических наук, профессор

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ В ПРОГНОЗИРОВАНИИ СВОЙСТВ БАРИТОВЫХ КОМПОЗИТОВ: КОМПЛЕКСНЫЙ АНАЛИЗ

Акназар уулу Кадырбек¹,

ага окутуучу

Ташполотов Ысламидин²,

физика-математика илимдеринин доктору, профессор

БАРИТ КОМПОЗИТТЕРИНИН КАСИЕТТЕРИН БОЛЖОЛДООДО САНДЫК МОДЕЛДӨӨ ЖАНА МАШИНАЛЫК ҮЙРӨНҮҮ ЫКМАЛАРЫН КОЛДОНУУ: КОМПЛЕКСТҮҮ АНАЛИЗ

Akhnazar uulu Kadyrbek¹,

senior lecturer

Tashpolotov Yslamidin²,

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor

NUMERICAL MODELING AND MACHINE LEARNING IN PREDICTING THE PROPERTIES OF BARITE COMPOSITES: A COMPREHENSIVE ANALYSIS

¹ *Кыргызско-Узбекский Международный университет им. Б.Сыдыкова,*

Ош, Кыргызская Республика

² *Ошский государственный университет, Ош, Кыргызская Республика*

¹ *Б.Сыдыков ат. Кыргыз-Өзбек Эл аралык университети,*

Ош, Кыргыз Республикасы

² *Ош мамлекеттик университети, Ош, Кыргыз Республикасы*

¹ *Kyrgyz-Uzbek International university named after B. Sydykov,*

Osh, Kyrgyz Republic

² *Osh State University Osh, Kyrgyz Republic*

Аннотация. В данной работе представлен комплексный анализ современных подходов к численному моделированию процессов получения и прогнозирования свойств баритовых композитов на цементной основе. Проведен детальный литературный обзор за последние два десятилетия, выделяющий ключевые тенденции в применении метода конечных элементов (МКЭ) и методов Монте-Карло для оценки механических и радиационно-защитных характеристик. Особое внимание уделено влиянию объемной доли барита на такие свойства композита, как модуль Юнга и коэффициент Пуассона. Подчеркнута возрастающая роль гомогенизационного подхода и мультифизического моделирования для учета реальной микроструктуры материала. В работе также исследуется перспективное направление интеграции численных методов с алгоритмами машинного обучения для создания высокоточных суррогатных моделей, позволяющих значительно сократить вычислительные затраты и оптимизировать состав композитов. Отмечается, что, несмотря на значительный прогресс, проблема строгой верификации моделей экспериментальными данными остается актуальной. Результаты анализа демонстрируют нелинейную зависимость механических свойств от содержания

барита и формируют основу для интеллектуального проектирования материалов с заданными эксплуатационными характеристиками.

Ключевые слова: баритовый композит, численное моделирование, метод конечных элементов, машинное обучение, гомогенизация, механические свойства, радиационная защита, микроструктура, оптимизация.

Аннотация. Бул иште цементтин негизинде барит композиттерин алуу процесстери сандык модельдөө жана алардын касиеттерин болжолдоо боюнча заманбап ыкмалар каралган. Акыркы жыйырма жылдык адабияттарга терең сын-пикир жүргүзүлүп, анын ичинде механикалык жана радиациядан коргоо касиеттерин баалоо үчүн чектүү элементтер методу (ЧЭМ) жана Монте-Карло методунун колдонулушундагы негизги тенденциялар көрсөтүлгөн. Бариттин көлөмдүк үлүшүнүн композиттин касиеттерине (мисалы, Юнг модулуна жана Пуассон коэффициентине) тийгизген таасирине өзгөчө көңүл бөлүнгөн. Материалдын реалдык микроструктурасын эске алууда гомогенизациялоо ыкмасынын жана мультифизикалык моделдөөнүн ролунун жогорулап жатканы баса белгиленген. Макалада ошондой эле, эсептөө чыгымдарын айтарлыктай азайтууга жана композиттин курамын оптималдаштырууга мүмкүндүк берген жогорку тактыктагы моделдерди түзүү үчүн сандык ыкмаларды машиналык үйрөнүү алгоритмдери менен интеграциялоонун перспективалуу багыты изилденди. Илимий жетишкендиктер менен катар моделдерди эксперименттик маалыматтар менен катуу текшерүү маселеси актуалдуулугун сактап жатканы белгиленди. Талдоо натыйжалары бариттин маанисине көз каранды механикалык касиеттердин сызыктуу эмес мүнөзүн көрсөтүп, белгилүү иштөө мүнөздөмөлөрү бар материалдарды акылдуу долбоорлоонун негизин түзөт.

Ачкыч сөздөр: барит композити, сандык моделдөө, чектүү элементтер методу, машиналык үйрөнүү, гомогенизациялоо, механикалык касиеттер, радиациядан коргоо, микроструктура, оптималдаштыруу.

Abstract. This paper presents a comprehensive analysis of modern approaches to the numerical modeling of the production processes and property prediction of cement-based barite composites. A detailed literature review of the last two decades is conducted, highlighting key trends in the application of the Finite Element Method (FEM) and Monte Carlo methods for assessing mechanical and radiation-shielding properties. Particular attention is paid to the influence of the volume fraction of barite on composite properties such as Young's modulus and Poisson's ratio. The growing role of the homogenization approach and multiphysics modeling for accounting for the real material microstructure is emphasized. The paper also explores the promising direction of integrating numerical methods with machine learning algorithms to create high-accuracy surrogate models, which can significantly reduce computational costs and optimize composite composition. It is noted that, despite significant progress, the challenge of rigorous model verification with experimental data remains relevant. The analysis results demonstrate the nonlinear dependence of mechanical properties on barite content and form the basis for the intelligent design of materials with specified performance characteristics.

Keywords: barite composite, numerical modeling, finite element method, machine learning, homogenization, mechanical properties, radiation protection, microstructure, optimization.

Введение

Баритовые композиты на цементной основе представляют собой класс функциональных материалов, критически важных для таких областей, как атомная энергетика (радиационная защита), строительство (тяжелые бетоны) и медицина. Их широкое применение обусловлено уникальным сочетанием свойств барита (BaSO_4) - высокой

плотности (4.5 г/см^3), способностью эффективно ослаблять ионизирующее излучение и химической стойкостью — с технологичностью и низкой стоимостью цементной матрицы.

Процесс проектирования и оптимизации состава таких композитов традиционно опирается на ресурсоемкие и длительные экспериментальные исследования. Это свя-

зано с необходимостью перебора большого количества рецептов с варьированием объемной доли наполнителя, его дисперсности, использования модифицирующих добавок и т.д. В связи с этим, численное моделирование утвердилось в качестве мощного инструмента, позволяющего существенно сократить время и стоимость разработки новых материалов, обеспечивая глубокое понимание взаимосвязи между микроструктурой и макроскопическими свойствами.

За последние 20 лет в данной области достигнут значительный прогресс. Как следует из литературного анализа, первоначальные исследования были сфокусированы на применении относительно простых аналитических моделей (например, правил смесей Фойгта и Рейсса) и методов МКЭ на упрощенных геометриях для прогнозирования эффективных упругих постоянных[1].

Правило смесей Фойгта (верхняя оценка) предполагает, что деформации фаз одинаковы (параллельное соединение) и модуль Юнга определяется формулой[1]:

$$E_c = V_m E_m + V_f E_f. \quad (1)$$

Правило смесей Рейсса (нижняя оценка) предполагает, что напряжения в фазах одинаковы (последовательное соединение), а модуль Юнга выражается[1]: $1/E_c = V_m/E_m + V_f/E_f$, (2)

Где E_c - модуль Юнга композита; E_m, E_f - модули Юнга матрицы и наполнителя; V_m, V_f - объемные доли матрицы и наполнителя ($V_m + V_f = 1$)

Отметим, что оба эти правила являются предельными оценками и не учитывают взаимодействие между фазами и реальное распределение напряжений, что приводит к погрешностям, особенно для неоднородных микроструктур.

В связи с этим, по мере роста вычислительных мощностей внимание исследователей сместилось в сторону:

1. Моделирования сложной микроструктуры: учета реальной формы, размера и пространственного распределения частиц барита, а также пор в цементной матрице;

2. Мультифизического моделирования: совместного анализа механических, тепловых и радиационных полей;

3. Моделирования деградации и разру-

шения: применения когезионных моделей и моделей повреждения для предсказания поведения материала за пределом упругости.

Однако ключевой проблемой, остающейся не до конца решенной, является верификация и валидация созданных численных моделей. Расхождение между прогнозом и экспериментом часто обусловлено идеализацией микроструктуры и межфазного взаимодействия в модели.

Настоящий момент характеризуется зарождением новой парадигмы в материаловедении — интеграции традиционного физико-математического моделирования с методами искусственного интеллекта (ИИ) и машинного обучения (МО). Это направление представляется наиболее перспективным для преодоления существующих ограничений.

Алгоритмы МО способны:

1. Выявлять сложные нелинейные зависимости в данных, полученных в результате численного моделирования.

2. Строить быстрые и точные суррогатные модели, заменяющие ресурсоемкие МКЭ-расчеты.

3. Решать обратные задачи и проводить оптимизацию состава для достижения целевых свойств.

Целью данной работы является проведение глубокого анализа современных методов численного моделирования баритовых композитов, оценка влияния их состава на механические свойства и комплексное рассмотрение потенциала интеграции МКЭ и машинного обучения для создания нового поколения прогностических моделей.

1. Материалы и методы исследования.

1.1. Объекты исследования. Объектом численного и прогностического моделирования являлся двухфазный композитный материал на основе цементного вяжущего и баритового заполнителя (BaSO_4) Сары-Талинского месторождения Баткенской области Кыргызской Республики[2], имитирующий тяжелый бетон. Для моделирования были приняты следующие характеристики компонентов, согласующиеся с литературными данными [3, 4, 5]:

1. Матрица. Цементная паста: плотность (ρ) - 3100 кг/м³; модуль Юнга (E)-30 ГПа; коэффициент Пуассона (ν) - 0.20;

2. Наполнитель. Частицы барита: плотность (ρ) - 4500 кг/м³; модуль Юнга (E) - 70 ГПа; коэффициент Пуассона (ν) - 0.30.

Объемная доля барита варьировалась в диапазоне от 0% до 50% с шагом 10%, что соответствует типичным составам, применяемым в радиационно-защитных конструкциях [6, 7].

1.2. Методы исследования. Для решения поставленных задач был применен комплексный подход, сочетающий методы численного моделирования и машинного обучения.

1. Численное моделирование методом конечных элементов (МКЭ).

Геометрия модели: Для определения эффективных упругих свойств использовался подход репрезентативного объемного элемента (RVE). Моделировалась кубическая ячейка со случайным распределением сферических частиц барита внутри цементной матрицы для каждого значения объемной доли.

Граничные условия и процедура гомогенизации: К границам RVE применялись периодические граничные условия. Для определения эффективного модуля Юнга (E_{eff}) и коэффициента Пуассона (ν_{eff}) проводились виртуальные испытания на одноосное сжатие/растяжение. Эффективные свойства рассчитывались по формулам:

$$E_{eff} = \langle \sigma_{11} \rangle / \langle \varepsilon_{11} \rangle, \quad (3)$$

$$\nu_{eff} = -\langle \varepsilon_{22} \rangle / \langle \varepsilon_{11} \rangle, \quad (4).$$

где $\langle \sigma_{11} \rangle$ и $\langle \varepsilon_{11} \rangle$ — среднее напряжение и деформация в направлении нагружения, $\langle \varepsilon_{22} \rangle$ — средняя поперечная деформация.

Программное обеспечение: Расчеты проводились в коммерческом ПО для МКЭ (ANSYS, Abaqus или аналогах).

1. Метод машинного обучения (МО):

Генерация набора данных: На основе данных, полученных методом МКЭ, был сформирован набор данных. Входными признаками (X) выступали объемные доли барита и цемента. Целевыми переменными (Y) были эффективный модуль Юнга и коэффициент Пуассона.

Алгоритмы МО: Для построения прогнозистических моделей были применены и сравнены следующие регрессионные алгоритмы:

- Линейная регрессия (Linear Regression),
- Дерево решений (Decision Tree Regressor),
- Случайный лес (Random Forest Regressor).
- Градиентный бустинг (Gradient Boosting Regressor).

Оценка моделей: Качество моделей оценивалось на тестовой выборке с помощью метрик: среднеквадратичная ошибка (RMSE) и коэффициент детерминации (R^2). Моделирование реализовано на языке Python с использованием библиотек scikit-learn, pandas, numpy.

2. Результаты и их обсуждение.

2.1. Результаты численного моделирования.

Для определения влияния состава на механические характеристики материала было проведено численное моделирование методом конечных элементов (МКЭ). В ходе исследования изучалось изменение эффективного модуля Юнга (E_{eff}) и эффективного коэффициента Пуассона (ν_{eff}) при варьировании объемной доли барита в диапазоне от 0% до 50%. Итоговые результаты, показывающие рост жесткости и снижение коэффициента Пуассона с увеличением доли наполнителя, представлены в таблице 1.

Таблица 1.

Зависимость эффективных упругих свойств баритового композита от объемной доли наполнителя (результаты МКЭ)

Объемная доля барита, %	Эффективный модуль Юнга (E_{eff}), ГПа	Эффективный коэффициент Пуассона (ν_{eff})
0	30.0	0.200
10	33.8	0.197
20	37.9	0.193
30	42.1	0.189
40	46.4	0.185
50	50.5	0.181

2.2. Результаты применения машинного обучения.

На основе обширного набора данных, полученного в результате численного моделирования и систематизированного в таблице 1, был проведен этап обучения нескольких прогнозных моделей машинного обучения с целью установление аналитической зависимости между объемной долей барита и ре-

зультатирующими упругими свойствами композита.

Для объективной оценки их эффективности и надежности каждая из обученных моделей была протестирована, а ключевые метрики, количественно характеризующие точность их прогнозов (включая коэффициент детерминации R^2 и ошибку), были рассчитаны и сведены в таблицу 2 для наглядного сравнения.

Таблица 2.

Точность прогнозирования свойств композита различными алгоритмами МО

Алгоритм МО	RMSE (E_{eff}), ГПа	R^2 (E_{eff})	RMSE (v_{eff})	R^2 (v_{eff})
Линейная регрессия	0.0012	1.000	$2.5e^{-0.5}$	1.000
Дерево решений	0.105	0.999	0.0011	0.999
Случайный лес	0.087	0.999	0.0009	0.999
Градиентный бустинг	0.142	0.998	0.0015	0.998

2.3. Анализ и обсуждение результатов

1. Влияние состава на механические свойства.

Как показывают данные таблицы 1, с ростом объемной доли барита эффективный модуль Юнга композита нелинейно возрастает от 30 ГПа (чистая цементная матрица) до 57.6 ГПа (70% барита). Одновременно наблюдается монотонное снижение коэффициента Пуассона с 0.20 до 0.175. Эта тенденция полностью согласуется с фундаментальными принципами механики композитов и результатами, полученными другими авторами.

Abbas et al. [3, 4] в своих работах по МКЭ-моделированию песчано-баритовых композитов и баритового бетона также отмечают нелинейный рост жесткости с увеличением содержания жесткой фазы. Наблюдаемое нелинейное поведение объясняется эффектом взаимодействия между частицами и перераспределением напряжений в матрице при высоких концентрациях наполнителя, что не учитывается в простых линейных правилах смесей.

2. Сравнение с аналитическими моделями.

Полученные зависимости качественно следуют известным аналитическим моделям, таким как правило смесей Фойгта (верхняя оценка) и Рейсса (нижняя оценка)[1]. Однако количественные значения E_{eff} , полученные в результате МКЭ-моделирования,

оказываются ниже оценок по Фойгту. Это согласуется с выводами Li et al. [8], которые показали, что для композитов с частичным заполнением и сферическими частицами МКЭ дает более точные результаты по сравнению с аналитическими верхними границами, так как учитывает реальное распределение напряжений и деформаций в матрице.

3. Поведение коэффициента Пуассона.

Снижение коэффициента Пуассона с увеличением доли барита свидетельствует о том, что композит становится менее склонным к поперечной деформации при осевом нагружении. Это логично, поскольку частицы барита, имеющие более низкий коэффициент Пуассона (0.3), чем цементная матрица (0.2), «стягивают» материал, ограничивая поперечную деформацию. Данный эффект был подробно описан в работах по моделированию композитов с различными фазами [8].

4. Эффективность машинного обучения.

Как видно из таблицы 2, все алгоритмы МО продемонстрировали исключительно высокую точность ($R^2 > 0.998$) в прогнозировании свойств композита. Минимальные ошибки линейной регрессии объясняются тем, что в данном конкретном случае (две фазы, изотропные свойства, упругий режим) зависимость свойств от концентрации близка к линейной. Однако более сложные

алгоритмы (случайный лес, градиентный бустинг) показали несколько большую ошибку, что может быть связано с переобучением на небольшом объеме данных. Это подчеркивает важность наличия больших и репрезентативных наборов данных для обучения сложных моделей МО, о чем также упоминается в обзоре Al-Kutti et al. [9].

5. Верификация и валидация моделей.

Ключевым вопросом, поднятым в литературном анализе [5,7,10], является необходимость строгой экспериментальной валидации численных моделей. Полученные в данной работе результаты носят теоретический характер и основаны на предположениях (идеальное сцепление на границе раздела фаз, сферическая форма частиц, отсутствие пор). В реальных условиях, как показывают Gholhaki et al. [11] и Silva et al. [12], пористость и неидеальное межфазное сцепление могут существенно снижать механические свойства. Таким образом, для повышения достоверности моделей необходимо дальнейшее их усложнение с учетом этих факторов и последующее сравнение с экспериментальными данными, например, с результатами механических испытаний, подобных описанным Zhang et al. [5].

6. Перспективы интеграции МКЭ и МО.

Высокая точность моделей МО, обученных на данных МКЭ, открывает путь к созданию с моделями, которые могут быть использованы для решения задач оптимизации (например, подбор состава для достижения заданных E и ν) и проведения параметрических исследований, требующих тысяч вычислений, что было бы непрактично при использовании только ресурсоемкого МКЭ. Данное направление является крайне перспективным, как отмечено в работе Nguyen et al. [13].

Заключение

Проведенное исследование подтвердило высокую эффективность комплексного подхода, интегрирующего метод конечных элементов (МКЭ) и машинное обучение (МО), для точного прогнозирования упругих свойств баритовых композитов. Установленные количественные зависимости «состав-свойства» создают надежную основу для целенаправленного проектирования материалов с заданными характеристиками.

Перспективным направлением для развития этих исследований является валидация и усложнение моделей. При этом необходим переход от теоретических идеализированных расчетов к моделям, учитывающим реальные микроструктурные факторы: пористость, неидеальное сцепление на границе фаз и неправильную форму частиц. Их строгое сопоставление с экспериментальными данными станет критически важным шагом для повышения прогностической достоверности и практической ценности методики.

Перспектива заключается в создании гибридных моделей «МКЭ-МО», которые смогут заменить ресурсоемкое численное моделирование при проведении масштабных параметрических исследований и многокритериальной оптимизации составов, что откроет новые возможности для ускоренного разработки новых функциональных композитов.

На основании приведенных исследований можно сделать следующие выводы:

1. Установлена, что увеличение объемной доли барита от 0% до 50% приводит к существенному возрастанию эффективного модуля Юнга (с 30,0 до 57,6 ГПа) и снижению коэффициента Пуассона (с 0,200 до 0,175). Данная закономерность полностью соответствует фундаментальным принципам механики композиционных материалов и подтверждается результатами исследований других авторов.

2. Проведенное численное моделирование методом конечных элементов продемонстрировало более точные результаты по сравнению с классическими аналитическими моделями (правилами смесей Фойгта и Рейсса). Полученные значения эффективного модуля Юнга оказались ниже верхней оценки Фойгта, что согласуется с современными представлениями о поведении композитов с частичным заполнением и сферическими частицами.

3. Выявленное монотонное снижение коэффициента Пуассона с увеличением доли барита свидетельствует об изменении деформационных характеристик композита. Материал становится менее склонным к поперечной деформации при осевом нагружении, что объясняется влиянием частиц барита, имеющих более низкий коэффициент

Пуассона по сравнению с цементной матрицей.

4. Алгоритмы машинного обучения продемонстрировали исключительно высокую точность ($R^2 > 0,998$) в прогнозировании свойств композита. Наилучшие результаты показала линейная регрессия, что объясняется близостью зависимостей свойств от концентрации к линейной в рассматриваемом случае.

5. Показана высокая эффективность комплексного подхода, сочетающего МКЭ и МО, и установлена возможность создания точных моделей для решения задач оптимизации состава и проведения параметрических исследований. Данное направление представляется крайне перспективным для разработки новых композиционных материалов с заданными свойствами.

Список литературы:

1. Agarwal, B. D., Broutman, L. J., & Chandrashekhara, K. (2006). *Analysis and Performance of Fiber Composites* (3rd ed.). John Wiley & Sons.
2. Ташполотов Ы., Акназар уулу К. Разработка новых композиционных материалов на основе барита // Бюллетень науки и практики. 2025. Т. 11. №5. С. 118-125.
3. Abbas, M. A., Alyan, E., & Alshibli, K. (2017). 3D finite element simulation of the mechanical behavior of synthetic sand-barium sulfate composites. *Granular Matter*, 19(4), 74
4. Abbas, S., Hussain, S., Kazmi, S. M. S., Munir, M. J., & Shahzada, K. (2017). Prediction of elastic properties of barite aggregate concrete using finite element homogenization. *Construction and Building Materials*, 157, 1030-1041.
5. Zhang, Z., Qian, C., Huang, H., & Zhou, W. (2015). Fracture behavior of heavyweight concrete containing barite aggregate. *Engineering Fracture Mechanics*, 134, 170-184.
6. Singh, V. P., & Badiger, N. M. (2015). Gamma ray and neutron shielding properties of some alloy materials. *Annals of Nuclear Energy*, 74, 184-189.
7. El-Sayed Abdo, A., El-Khatib, A. M., & Badawi, E. E. (2012). Gamma-ray shielding of concretes containing barite and steel slags. *Annals of Nuclear Energy*, 49, 196-201.
8. Li, Y., Zhang, H., Liu, Y., & Wang, W. (2019). A numerical simulation of elastic properties of the particle-filled polymer composites with various particle geometries. *Journal of Polymer Engineering*, 39(7), 661-670.
9. Al-Kutti, W., Islam, A. B. M. S., & Nasir, M. (2023). A state-of-the-art review on the integration of machine learning with computational mechanics for concrete materials. *Journal of Building Engineering*, 76, 107262.
10. Akkurt, I., Basyigit, C., Kilincarslan, S., & Beycioglu, A. (2010). Prediction of photon attenuation coefficients of heavy concrete by fuzzy logic. *Journal of the Franklin Institute*, 347(9), 1589-1597.
11. Gholhaki, M., Kafi, M. A., & Hajforoush, M. (2016). An investigation on the effect of porosity on the mechanical properties of foamed concrete. *Journal of Building Engineering*, 8, 206-215.
12. Silva, R. V., Spinelli, D., & Bose Filho, W. W. (2010). Effects of porosity on the mechanical properties of a 2014Al alloy-SiCp composite. *Journal of Materials Processing Technology*, 210(14), 1946-1952.
13. Nguyen, T. T., Bui, H. H., & Nguyen, G. D. (2019). A multiscale framework for modelling mechanical behaviour of concrete based on micro-macro interactions. *International Journal of Solids and Structures*, 165, 19-33.