

# Инновационное видение: изучение искусственного интеллекта и машинного обучения для развития полимерных нанокompозитов

Асиль Алшорайхи, Анагим Ибрагим

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет  
«ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)

aal\_shuraikhi@stud.etu.ru, aibrakhim@etu.ru

**Аннотация.** В этом исследовании используется машинное обучение и искусственный интеллект для разгадки сложностей полимерных нанокompозитов, армированных наночастицами золота с серебряным покрытием (AgC NP). С помощью обширного набора данных, полученных в результате испытаний на растяжение, мы исследуем механическое поведение этих нанокompозитов, уделяя особое внимание их упругим и пластическим реакциям вплоть до разрушения. Набор данных включает в себя важнейшие показатели, такие как модуль упругости, предел текучести, максимальное усилие и разрывное усилие, а также измерения деформации, собранные за время испытания. Используя расширенный анализ данных, мы выявляем закономерности и взаимосвязи в данных, показывая, как добавление NP AgC улучшает свойства материала. Модели машинного обучения обучаются прогнозировать механические характеристики на основе концентрации наночастиц, что позволяет получить представление об оптимальном составе для желаемых свойств. Подход, основанный на искусственном интеллекте, ускоряет процесс анализа и обеспечивает более глубокое понимание поведения материала, прокладывая путь к разработке нанокompозитов с адаптированными механическими характеристиками. Это исследование иллюстрирует синергию между материаловедением и вычислительными технологиями, демонстрируя, как искусственный интеллект и машинное обучение могут произвести революцию в изучении свойств материалов и их оптимизации для различных приложений.

**Ключевые слова:** машинное обучение, полимерные нанокompозиты, наночастицы золота с серебряным покрытием, испытания на растяжение, механические свойства, модуль упругости, предел текучести, максимальная сила, разрывное усилие

## I. ЗНАКОМСТВО

Нанотехнологии стали революционным научным достижением в 21 веке. Эта революционная область охватывает манипуляции, синтез и применение материалов с размерами менее 100 нанометров, охватывающих различные научные дисциплины. Наноматериалы, частицы размером от одного до ста нанометров, играют ключевую роль в различных секторах, включая экологию, сельское хозяйство,

пищевую промышленность, биотехнологии, биомедицинские исследования и медицину.

Наноматериалы продемонстрировали замечательную универсальность в решении экологических проблем. Они эффективно используются при очистке сточных вод и мониторинге окружающей среды [1, 2]. Наноматериалы имеют большое значение в пищевой промышленности. Они повышают эффективность работы пищи и эффективно борются с микробами [3, 4]. Что делает наноматериалы особенными, так это их крошечный размер, обычно от одного до ста нанометров. Эти маленькие частицы удивительны: они хорошо работают с нашим телом, борются с воспалением и микробами, доставляют лекарства и даже воздействуют на опухоли. Вот почему они часто используются в биотехнологии и микробиологии. Однако, когда размер частицы приближается к наноразмеру, а характерная шкала длин приближается или превосходит длину волны де Бройля или длину волны света, периодические граничные условия кристаллической частицы нарушаются, и это нарушение приводит к значительным различиям в физических свойствах наноматериалов по сравнению с объемными материалами, открывая широкий спектр новых применений [5, 6].

## II. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

Нанотехнологии дебютировали в 1980-х годах благодаря конвергенции ключевых экспериментальных прорывов. Заметные достижения, такие как создание сканирующего туннельного микроскопа в 1981 году и идентификация фуллеренов в 1985 году, сыграли ключевую роль в этом появлении. Концептуальные основы нанотехнологий привлекли широкое внимание с публикацией в 1986 г. книги «Двигатели созидания» [7].

Начальная фаза наноматериалов (НМС) уходит корнями в глубокую древность. Углеродные нанотрубки, например, были найдены в керамике, найденной в Килади, Индия, датированной примерно 600–300 гг. до н.э. [7]. В другом историческом контексте цементитные нанопроволоки были идентифицированы в дамасской стали, материале, возникшем около 900 года нашей эры. Несмотря на это открытие, точный способ его создания и происхождение остаются неясными [8]. Обстоятельства

разработки этих наноматериалов и то, были ли они намеренно использованы в связанных с ними артефактах, остаются неизвестными.

В 1991 году открытие углеродных наноматериалов (NMS) стало важной вехой, а два года спустя, в 1993 году, Иидзума и Итихаси объявили о синтезе одностенных углеродных нанотрубок диаметром 1 нанометр. Однако эти углеродные нанотрубки, также известные как трубки Баки, состоят из двумерной гексагональной решетки атомов углерода, изогнутых и соединенных в полую цилиндрическую структуру, и что углеродные нанотрубки расположены между фуллереном (0-мерным) и графеном (2-мерным), углеродные нанотрубки являются уникальными углеродными аллотропами [9].

Исторически сложилось так, что почти 120 лет назад М. К. Ли сообщил о синтезе стабилизированного цитратом коллоида серебра [10]. В результате этого процесса получались частицы со средним диаметром от 7 до 9 нм. Использование цитратной стабилизации и наноразмерного размера при производстве наносеребра имеет параллели с недавними методами с использованием нитрата серебра и цитрата. Использование белков для стабилизации наносеребра восходит к 1902 году [10, 12]. Коммерчески производимое с 1897 года, наносеребро, известное как «Колларгол», использовалось в медицинских целях с размером частиц около 10 нанометров (НМ). В 1953 году Мудри разработал другой тип серебряных наноматериалов, названных желатин-стабилизированными серебряными наноматериалами, диаметром от 2 до 20 нм, используя метод, отличный от колларгола. Признание необходимости наноразмерного серебра очевидно в патентном замечании, сделанном несколько десятилетий назад, в котором подчеркивается оптимальная эффективность частиц серебра размером кристаллитов менее 25 нм [10].

Золотые наноматериалы (AUNMS) имеют богатую историю в химии, восходящую к римской эпохе, когда они использовались для украшения стеклянной посуды. Более 170 лет назад работа Майкла Фарадея положила начало современному синтезу AUNP, где он заметил, что растворы коллоидного золота обладают характеристиками, отличными от объемного золота. Исследуя коллоидные суспензии «рубинового» золота в 1857 году, Фарадей продемонстрировал, как золотые наноматериалы могут создавать растворы различных цветов при определенных условиях освещения [7, 13].

### III. ПРОБЛЕМЫ КЛАССИФИКАЦИИ

Несмотря на преимущества гистограмм и наложений Kernel Density Estimate (KDE) при анализе механических свойств, при их применении сохраняется ряд проблем. Одной из заметных проблем является интерпретация сложных распределений, особенно в тех случаях, когда наблюдаемая изменчивость зависит от множества факторов. Расшифровка основных причин закономерностей распределения требует опыта в статистическом анализе и материаловедении, что создает барьер для входа для инженеров и исследователей, не обладающих специальными знаниями. Кроме того,

обеспечение точности и надежности входных данных имеет решающее значение для создания содержательных визуализаций, что подчеркивает важность строгих процедур сбора и проверки данных. Кроме того, вычислительные ресурсы, необходимые для обработки больших наборов данных и создания визуализаций с высоким разрешением, могут представлять практические ограничения, особенно для организаций с ограниченной вычислительной инфраструктурой. Решение этих проблем потребует междисциплинарного сотрудничества между материаловедами, статистиками и инженерами для разработки надежных методологий и инструментов для эффективного анализа и интерпретации данных о механических свойствах.

### IV. МЕТОДОЛОГИЯ

В нашем исследовании мы описываем метод анализа данных испытаний на растяжение с помощью Python. Мы собираем ключевые параметры, такие как максимальная сила, сила разрыва, предел текучести и модуль упругости, а затем организуем данные в структурированный формат. С помощью библиотеки Pandas Python мы анализируем набор данных статистически, используя такие показатели, как среднее значение, медиана и стандартное отклонение. Кроме того, мы визуализируем распределение данных с помощью гистограмм, ящичковых диаграмм и точечных диаграмм. Регрессионный анализ помогает нам понять взаимосвязи между переменными, такими как сила и смещение, выявляя важнейшие свойства материала, такие как модуль упругости. Методы машинного обучения применяются для прогнозного моделирования или классификации материалов. Наш подход дает представление о поведении материалов и имеет значение для инженерных приложений.

### V. ЭКСПЕРИМЕНТЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Парный график дает всесторонний обзор взаимосвязей между механическими свойствами, включая модуль упругости, предел текучести, разрывную силу и максимальную силу. К числу примечательных наблюдений относятся точечные диаграммы, где каждая внедиагональная диаграмма иллюстрирует корреляцию между двумя свойствами. Более того, линейные или нелинейные тренды на этих графиках предполагают потенциальные корреляции между переменными, что требует дальнейшего изучения. Кроме того, диагональные графики представляют собой графики плотности (оценки плотности ядер) для каждого свойства, демонстрируя распределение значений. Пики на этих графиках обозначают наиболее распространенные значения, в то время как ширина указывает на изменчивость.

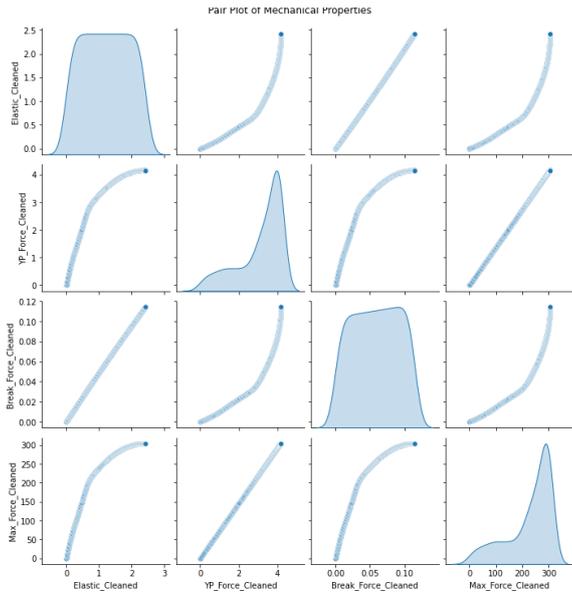


Рис. 1. Визуализации (Pair Plot) обеспечивают детальное изучение механических свойств исследуемых материалов. (АГК)

Более узкий пик предполагает меньшую изменчивость значений свойств, что дает представление об их распределении.

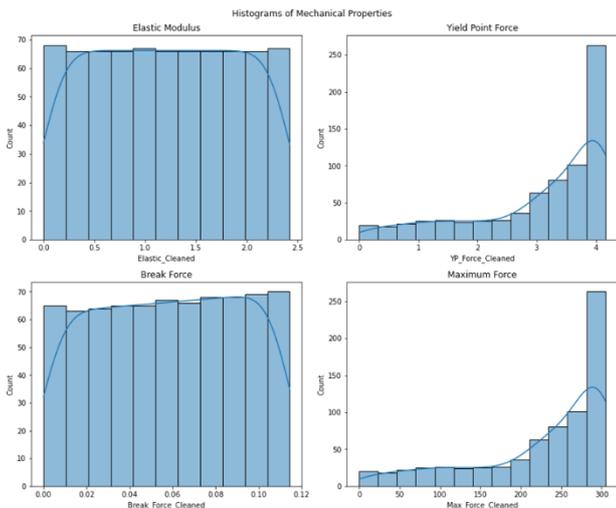
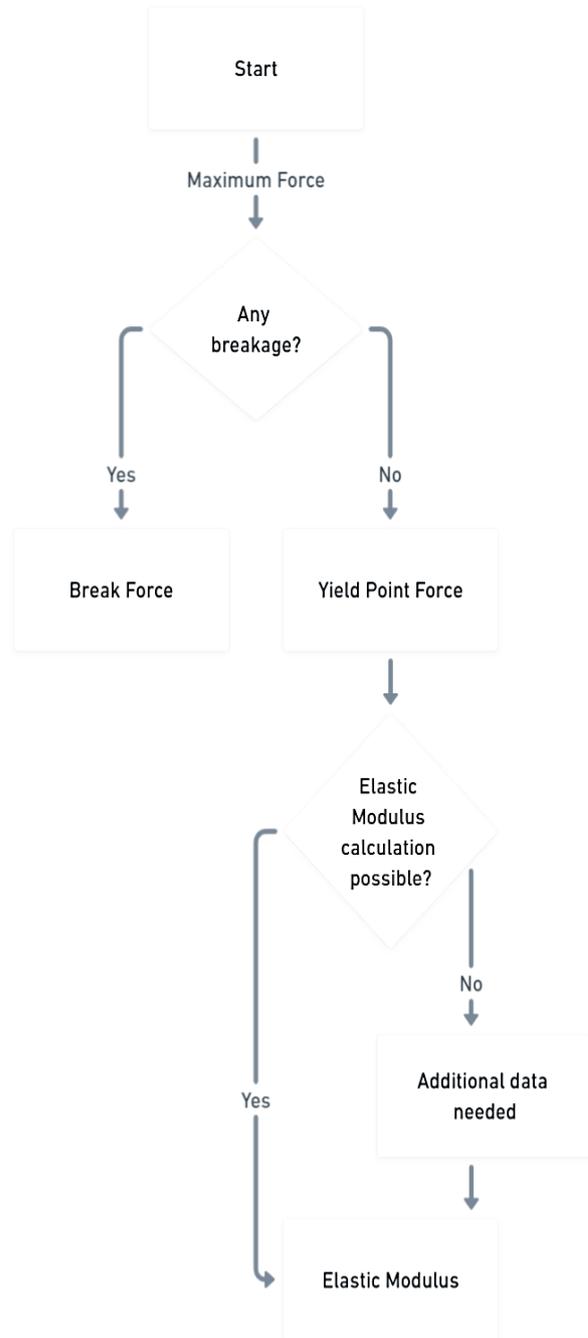


Рис. 2. Гистограммы дают представление о распределении каждого механического свойства

Гистограммы, сопровождаемые наложениями Kernel Density Estimate (KDE), представляют собой детальное исследование каждого механического свойства. Например, гистограмма Elastic Modulus иллюстрирует распределение значений жесткости между материалами, давая представление об общих уровнях жесткости и изменчивости образца. Аналогичным образом, график Предел текучести (Предел текучести) дает представление о силах, при которых материалы начинают необратимо деформироваться, в то время как гистограмма Сила разрушения (Break Force) демонстрирует распределение сил, при которых материалы разрушаются, что имеет решающее значение для оценки предельной прочности. Кроме того, гистограмма максимальной силы показывает максимальную грузоподъемность материалов. Вместе

эти визуализации дают всестороннее представление о механических свойствах, их взаимосвязях и распределениях, служа ценным руководством для дальнейших исследований, выбора материалов и инженерных приложений.



## VI. ОБСУЖДЕНИЕ

Анализ механических свойств с помощью гистограмм и наложений Kernel Density Estimate (KDE) дает бесценную информацию о поведении материала, позволяя инженерам принимать обоснованные решения в различных отраслях промышленности. Визуализации, предоставляемые этими инструментами, такие как гистограмма модуля упругости, график предела текучести, гистограмма силы разрыва и гистограмма максимальной силы, служат критически важными

помощниками при выборе материала, оптимизации конструкции и оценке целостности конструкции. Понимая распределение и изменчивость механических свойств, инженеры могут определять материалы, отвечающие конкретным требованиям к эксплуатационным характеристикам, прогнозировать точки отказа и повышать надежность и производительность спроектированных систем. В дальнейшем использование этих визуализаций будет по-прежнему играть ключевую роль в развитии материаловедения и инженерии, стимулировании инноваций и повышении эффективности и результативности инженерных практик в различных областях применения.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Захра З., Хабиб З., Чунг С. и Бадшах. (2020). Путь воздействия  $\text{TiO}_2$  NPS от промышленного применения до очистки сточных вод и их влияние на агроокружающую среду. *Наноматериалы* 10:1469. DOI: 10.3390/nano10081469.
- [2] Рассай, Л., Маркен, Ф., Силланпяя, М., Амири, М., Чиртиу, К. М., и Силланпяя, М. (2011). Наноматериалы в электрохимических сенсорах для мониторинга окружающей среды. *Trac Trends Anal. Chem.* 30, 1704–1715.
- [3] Чэнь Дж., Го Ю., Чжан Х., Лю Дж., Гун Су, З., и др. (2023). Новые наноматериалы в пищевой промышленности: источники, применение и безопасность. *Я. Агрикульт. Food Chem.* 71, 3564–3582.
- [4] Ислам Ф., Шохаг С., Уддин М.Дж., Ислам М.Р., Нафади М.Х., Актер А., и др. (2022). Изучение пути наноматериалов оксида цинка (zno-NPS) к биомедицинским приложениям. *Материалы* 15:2160. DOI: 10.3390/ma15062160
- [5] Го Д., Се Г., и Ло Д. (2013). Механические свойства наноматериалов: основы и области применения. *J. Phys. D* 47:013001.
- [6] Хасан С. (2015). Обзор на тему «Наноматериалы: их синтез и виды». *Res. J. Recent Sci.* 2277:2502.
- [7] Байда С., Адил М., Туччинарди Т., Кордани М., и Риццолло, Ф. (2019). История наноауки и нанотехнологий: от химико-физических приложений до наномедицины. *Молекулы* 25:112. DOI: 10.3390/molecules25010112
- [8] Кокарнесваран М., Сельварадж, Ашокан Т., Перумал С., Селлаппан, Муруган К.Д. и др. (2020). Открытие углеродных нанотрубок в керамике VI века до н.э. из Килади, Индия. *Sci. Rep.* 10, 1–6. DOI: 10.1038/s41598-020-76720-z
- [9] Чэнь Дж., Вэй С., и Се Х. (2021). «Краткое введение в углеродные нанотрубки: история, синтез и свойства», в *Proceedings of the Journal of Physics: Conference Series, (United Kingdom: IOP Publishing), 012184.* DOI: 10.1088/1742-6596/1948/1/012184
- [10] Новак Б., Круг Х.Ф., и Хайт М. (2011). 120 лет истории наносеребра: последствия для политиков. Вашингтон, округ Колумбия: ACS Publications.
- [11] Маджид Хан М.А., Кумар С., Ахамед М., Альрокаян С.А., и Альсалхи М.С. (2011). Структурно-термические исследования наноматериалов серебра и электроперенос их тонких пленок. *Наноск. Res. Lett.* 6, 1–8.
- [12] Бейене Х.Д., Веркне А.А., Безабх Х.К., и Амбайе Т.Г. (2017). Парадигма синтеза и применение наноматериалов серебра (agnps), обзор. *Поддерживать. Матер. Технол.* 13, 18–23.
- [13] Гилйоханн Д.А., Сеферос Д.С., Даниэль В.Л., Массич М.Д., Патель С., и Миркин К.А. (2020). Золотые наноматериалы для биологии и медицины. *Сферические нуклеиновые кислоты* 49, 3280–3294.