

## РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ РЕЗИН ПРИ ВВЕДЕНИИ КОМПЛЕКСНОГО АКТИВАТОРА ВУЛКАНИЗАЦИИ

© 2024 г. С. Г. Тихомиров<sup>а</sup>, О. В. Карманова<sup>а,\*</sup>, М. Е. Семенов<sup>б</sup>,  
Д. А. Полуэктов<sup>б</sup>, А. А. Голякевич<sup>а</sup>

<sup>а</sup>Воронежский государственный университет инженерных технологий, Воронеж, Россия

<sup>б</sup>Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

\*e-mail: karolga@mail.ru

Поступила в редакцию 27.06.2024

После доработки 24.09.2024

Принята в печать 30.09.2024

Разработано математическое описание для прогнозирования физико-механических свойств серных вулканизатов диеновых каучуков, полученных в присутствии комплексных активаторов вулканизации. В качестве входных параметров выбраны концентрации компонентов комплексного активатора вулканизации, а также технологические режимы его получения. На основе выборки объемом более 800 экспериментов установлены зависимости изменения модулей и условной прочности при растяжении, относительного удлинения при разрыве от соотношения компонентов активатора, температуры и продолжительности его синтеза и проведена статистическая обработка данных, в том числе по статистическим тестам Шапиро–Уилка. С использованием аппарата нейронных сетей синтезирована математическая модель влияния состава активатора вулканизации и условий его синтеза на физико-механические показатели вулканизатов. Обучение нейронной сети осуществлено с использованием выборки, содержащей 784 эксперимента, оценка качества аппроксимации проведена на контрольной выборке из 76 экспериментов. Полученные значения относительной ошибки определения условной прочности и относительного удлинения расчетным методом составили ~ 6%. Приведено графическое представление результатов имитационного моделирования.

**Ключевые слова:** математическое моделирование, нейронная сеть, вычислительный эксперимент, резины, физико-механические свойства, активатор вулканизации

DOI: 10.31857/S0040357124060069 EDN: VIFVTE

### ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известно, что процесс вулканизации, завершающий производство резиновых изделий, является самым ответственным и важным с точки зрения достижения оптимальных параметров конечного продукта.

К настоящему времени установлены основные закономерности формирования свойств резиновых изделий в зависимости от рецептуры резиновой смеси, в первую очередь от типа и концентрации компонентов вулканизирующей группы, в которой активатор вулканизации играет роль центра формирования пространственной структуры и оказывает доминирующее влияние на физико-механические показатели получаемых вулканизатов [1–3]. Актуальными являются работы, продолжающие это направление, в частности в области описания свойств эластомеров, содержащих структурирующие системы на осно-

ве комбинации вулканизирующих агентов, ускорителей и активаторов вулканизации.

Создание современных эластомерных материалов, удовлетворяющих повышенным эксплуатационным требованиям, невозможно без разработки новых подходов к рецептуростроению резиновых смесей и моделированию их свойств. Вопросам моделирования сложных химико-технологических систем (ХТС) уделено достаточно внимания в работах отечественных и зарубежных ученых. Так, на протяжении ряда лет в научной школе под руководством академика Кафарова В.В. учеными Мешалкиным В.П., Ветохиным В.Н., Дороховым И.Н., Писаренко В.Н., Гордеевым Л.С., Бояриновым А. [4–9], а также в работе Н.Н. Зиятдинова [10] разработаны концептуальные подходы к моделированию ХТС.

Применительно к технологии разработки полимеров ХТС действуют в условиях некон-

тролируемых возмущений. В настоящее время развитие получили методы моделирования, основанные на математическом аппарате нейронных сетей [11–15, 18]. Кроме того, связи между входными параметрами и отвечающими им выходными параметрами существенно нелинейны, идентификация таких связей не всегда возможна в рамках серий экспериментов (как будет показано ниже, распределения соответствующих параметров имеют достаточно сложную структуру и формализация соответствующих зависимостей не всегда очевидна), поэтому разработка и исследование математических моделей, позволяющих описывать влияние состава вулканизирующей системы на свойства получаемых резин, является актуальной задачей.

Прогнозированию физико-химических и технологических свойств композиций в зависимости от их молекулярной структуры с использованием компьютерного моделирования на основе зависимости “структура – свойство – техническая функция” посвящен ряд работ. В работе [16] представлены результаты исследования по идентификации влияния различных факторов на изменение вулканизационных свойств резиновых смесей, проведенных в рамках системного анализа. Это обеспечивает возможность решения задачи поиска оптимального состава композиционных материалов с помощью многокритериальной оптимизации. В [10, 17] разработана методика прогнозирования технологической активности низкомолекулярных органических добавок к полимерным композиционным материалам. В работе [19] предложено для описания структуры и свойств резины на молекулярном уровне использовать комплексный подход компьютерного моделирования. Этот подход позволил совместить методы молекулярной динамики и метод Монте–Карло применительно к исследованию физико-химических свойств полимерных композиций.

В резиновой промышленности практически во всех рецептах резиновых смесей серной вулканизации в качестве активатора используются дорогостоящие и дефицитные цинковые белила, содержание цинка в которых в пересчете на оксид цинка должно составлять не менее 99.7% мас. В научно-технической литературе активно обсуждаются разнообразные способы сокращения концентрации оксида цинка или даже его полной замены активными наполнителями, на поверхности которых адсорбированы соли цинка [20–24], что делает возможным снижение общего количества цинка в резиновых изделиях.

Известно [20], что при создании ингредиентов из комбинаций химических веществ важно знать влияние каждого реагента и продуктов реакции на свойства конечного продукта и эластомеров, полученных на его основе.

Целью работы явилось установление влияния состава композиционного активатора вулканизации и режима его изготовления на физико-механические свойства эластомеров, полученных на его основе, разработка алгоритмов прогнозирования параметров качества резины и оценка их точности с использованием искусственного интеллекта (аппарата нейронных сетей).

## МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Объектами исследования являлись композиционные активаторы вулканизации далее (активаторы), полученные в виде сплавов оксида цинка со стеариновой кислотой на поверхности минерального носителя с их различным соотношением.

Активаторы вулканизации синтезировали в реакторе при  $t = 80–130^\circ\text{C}$  в течение 10–90 минут. Для изучения физико-механических свойств резин с использованием активаторов изготавливали композиции на основе каучука СКС30АРК по стандартной рецептуре (ASTMD 3185) на лабораторных вальцах с фрикцией 1 : 1.28 и температурой поверхности валков  $(50 \pm 5)^\circ\text{C}$ , продолжительность смешения – 20 минут. Образцы для физико-механических испытаний изготавливали прессованием композиций в вулканизационном прессе под давлением 50 МПа при температуре  $160^\circ\text{C}$  и времени прессования 20 минут. Упруго-прочностные свойства вулканизатов определяли в соответствии с ГОСТ 270–75.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

При получении активаторов использованы несколько компонентов: оксид цинка, стеариновая кислота, минеральный наполнитель в разных соотношениях, которые во время синтеза вступают во взаимодействие с образованием новых соединений. Выбор соотношений исходных компонентов производили с позиций минимизации концентрации оксида цинка в конечном изделии, что является важной задачей с точки зрения экологии. Таким образом, в настоящей работе решается задача оптимизации, минимизации содержания оксида цинка в резиновых изделиях при выполнении ограничений–неравенств на условия процесса и требований к упруго-прочностным свойствам резин:

$$\begin{aligned}
 C_{\text{ZnO}} &\rightarrow \min, \\
 M_{300} &\geq 13.0, \\
 f_p &\geq 22.5, \\
 \varepsilon &\geq 420.
 \end{aligned}$$

В качестве инструмента моделирования процесса использованы нейросетевые подходы в сочетании с инструментами регрессионного анализа. При использовании этого подхода решается прямая задача класса “состав–свойство”, в которой оптимизации подлежит концентрация веществ в конечном продукте (резине).

Состав обучающих данных включал два основных входных параметра, а именно: массовые доли оксида цинка и стеариновой кислоты. Дополнительными входными параметрами являлись температура и время синтеза активатора. Выходными параметрами, подлежащими прогнозированию, являлись условное напряжение при удлинении на 300% ( $M_{300}$ ), условная прочность при растяжении ( $f$ ), относительное удлинение при разрыве ( $\varepsilon$ ). Экспериментально установлено, что процесс синтеза целесообразно проводить в течение 60 мин, поскольку по истечении этого времени полученный активатор обладает наивысшей активностью, оцененной по показателям физико-механических свойств.

Исходный набор данных для обучения модели включал в себя более 800 записей результатов экспериментов. Перед началом обучения данные прошли процесс предподготовки, включающий в себя операции по удалению выбросов и нормализации данных.

Удаление выбросов осуществлялось путем исключения из записей тех значений, в которых выходные параметры отклонялись от среднего значения более чем на 3 среднеквадратических отклонения. После указанной операции набор исходных данных содержал 784 записи.

Нормализация данных является стандартной процедурой, отображающей диапазон изменения входных параметров в интервал [0, 1]:

$$x_{scal} = \frac{x - x_{min}}{x_{max} - x_{min}}. \quad (1)$$

Принято допущение, что выходные параметры определяются функциональной зависимостью от входных параметров и аддитивной случайной компонентой, поскольку в каждом из экспериментов присутствовала случайная составляющая.

Для идентификации распределения случайной компоненты использовались статистические тесты Шапиро–Уилка [25–26].

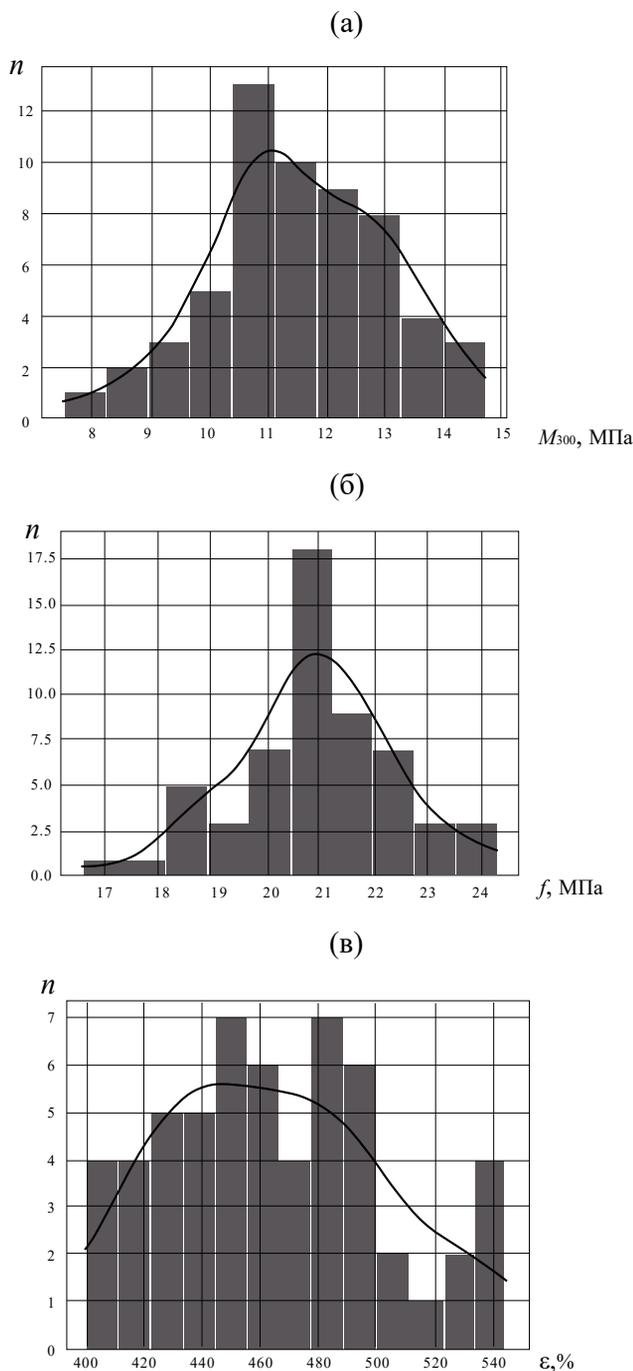
Рассмотрение распределений выходных параметров производилось на основании записей, содержащих максимальное количество фиксированных входных параметров, а именно, при массовых частях компонентов (в пересчете на 100 мас. ч. каучука): оксида цинка – 1.32 мас. ч., стеариновой кислоты – 0.8 мас. ч. при температуре смешения 85°C. В результате получены зависимости распределения экспериментальных данных по каждому исследуемому свойству: условное напряжение при удлинении на 300% (рис. 1а), условная прочность при растяжении (рис. 1б), относительное удлинение при разрыве (рис. 1в). В таблице представлены характеристики распределения исследуемых свойств.

Формулируются две гипотезы:  $H_0$  – выборка подчиняется нормальному закону распределения;  $H_1$  – следует отвергнуть нулевую гипотезу. При уровне значимости 0.2 нулевая гипотеза не отвергается.

Тест Шапиро–Уилка для ошибок прогнозирования параметров распределения условной прочности при растяжении и относительного удлинения при разрыве применялся для про-

**Таблица.** Характеристики распределения физико-механических показателей резин с комплексным активатором вулканизации

Характеристики	Показатели свойств		
	$M_{300}$ , МПа	$f_p$ , МПа	$\varepsilon$ , %
$\bar{x}$	11.51	20.89	465.15
$\sigma$	1.49	1.51	38.09
$x_{min}$	7.50	16.59	400.00
25%	10.72	20.21	435.00
50%	11.26	20.88	465.00
75%	12.51	21.84	490.00
$x_{max}$	14.73	24.29	545.00
$As$	-0.170	-0.184	0.324
$K$	-0.0008	0.5900	-0.6600



**Рис. 1.** Распределение экспериментальных данных по значениям условного напряжения при удлинении на 300% (а), условной прочности при растяжении (б), относительному удлинению при разрыве (в).

верки соответствия нормальному закону распределения. Для условной прочности при разрыве получены результаты: статистика – 0.98, p-value – 0.45; для относительного удлинения статистика – 0.98, а p-value – 0.48. Таким образом, гипотеза о нормальном распределении рассматриваемых параметров не отвергается.

Для построения модели, аппроксимирующей зависимость выходных параметров от входных значений, необходимо идентифицировать ее характер. Предварительный анализ исходных данных, основанный на построении корреляционных зависимостей между выходными и входными параметрами, показал, что все парные корреляции между входными и выходными параметрами имеют малые абсолютные значения (рис. 2). Следовательно, между входными и выходными параметрами отсутствуют линейные зависимости, поэтому учет нелинейности связей осуществлен с использованием модели, основанной на искусственной нейронной сети.

**Многослойный персептрон.** Нейронная сеть допускает трактовку как отображение признакового пространства в пространство выходов. Наиболее простой и естественный способ описания нейронной сети заключается в идентификации ее слоев и функций активации отдельных нейронов. Многослойный персептрон является одной из популярных архитектур нейронных сетей, которая характеризуется количеством слоев и нейронов в них, а также функциями активации отдельных нейронов. Каждый слой допускает трактовку как преобразования выходного сигнала предыдущего слоя в вектор входных сигналов текущего слоя [27]. За основу искусственной нейронной сети выбран многослойный персептрон.

Функцией активации в многослойном персептроне является ReLU (Rectified Linear Unit), которая задается соотношением:

$$\text{ReLU}(x) = \max(0, x). \tag{2}$$

Преобразование входного сигнала одного слоя в вектор выхода определяется выражением:

$$X_l^{(1 \times n)} = \text{ReLU}\left(X_{(l-1)}^{(1 \times n)} W_{(l-1)}^{(n \times m)} + b_{(l-1)}^{(1 \times m)}\right), \tag{3}$$

где  $X_l^{(1 \times n)}$  – вектор выходных значений слоя номер  $l$ ;  $X_{(l-1)}^{(1 \times n)}$  – вектор выходных значений слоя номер  $l-1$ ;  $W_l^{(n \times m)}$  – матрица весов слоя  $l$ ; – вектор

смещений слоя  $l$ ; аргументом следующего слоя будет являться вектор  $X_l$ ;  $n, m$  – размерности соответствующих векторов и матриц.

Обучение нейронной сети заключалось в оценке элементов матрицы весов  $W$  и вектора смещений  $b$ , значения которых подлежат идентификации в процессе обучения.

С целью повышения точности аппроксимации использована измененная архитектура многослойного персептрона (рис. 3), которая представляет собой сеть с трансляцией входных данных на выходной слой персептрона, с бло-

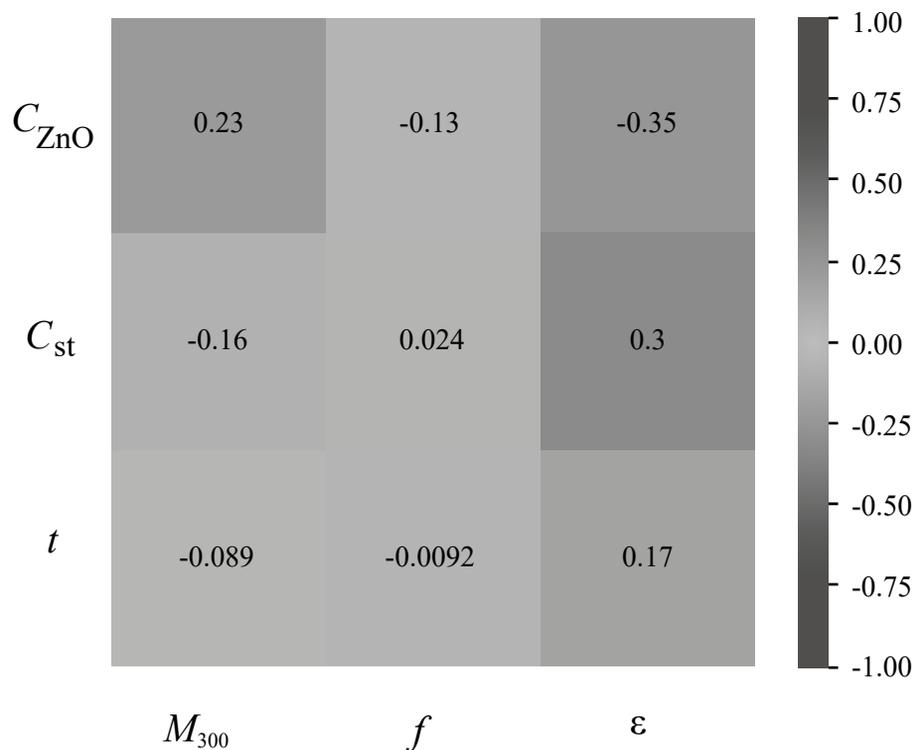


Рис. 2. Матрица попарных корреляций.

ком скрытых слоев, представленных на рис. 4. Указанная сеть имеет следующие особенности: используется механизм, обеспечивающий уско-

ренное обучение [27–28], а также обладает большой шириной относительно количества входных параметров.

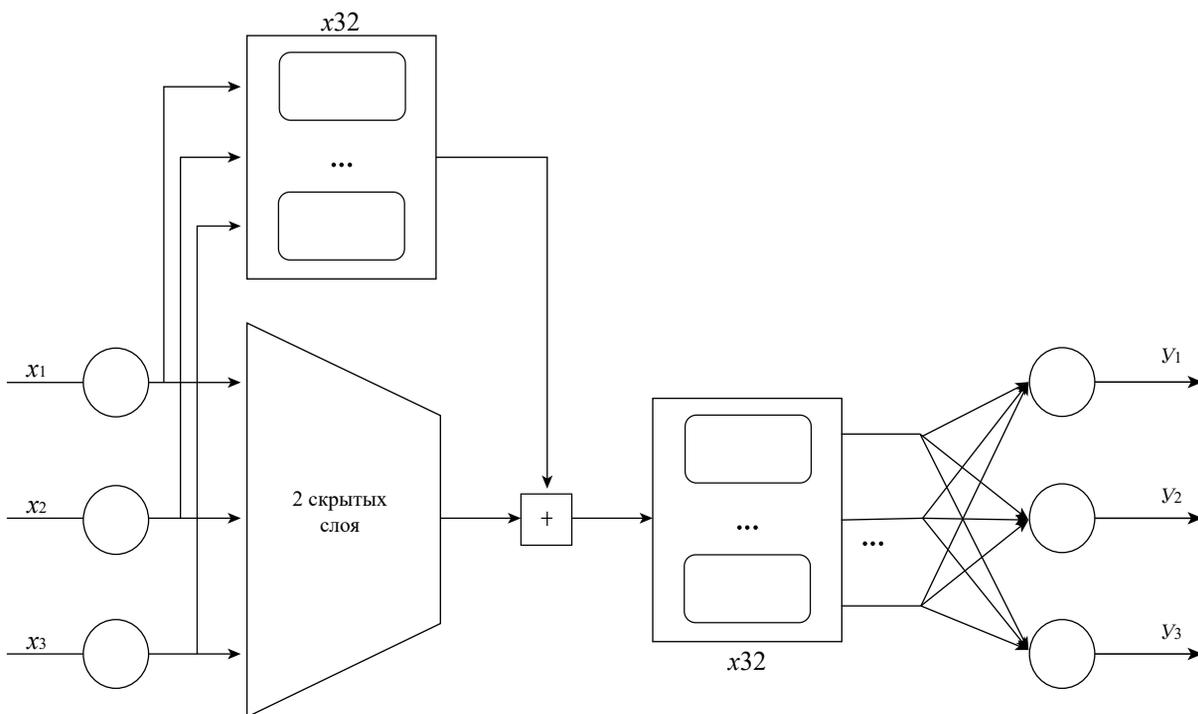


Рис. 3. Архитектура нейронной сети.

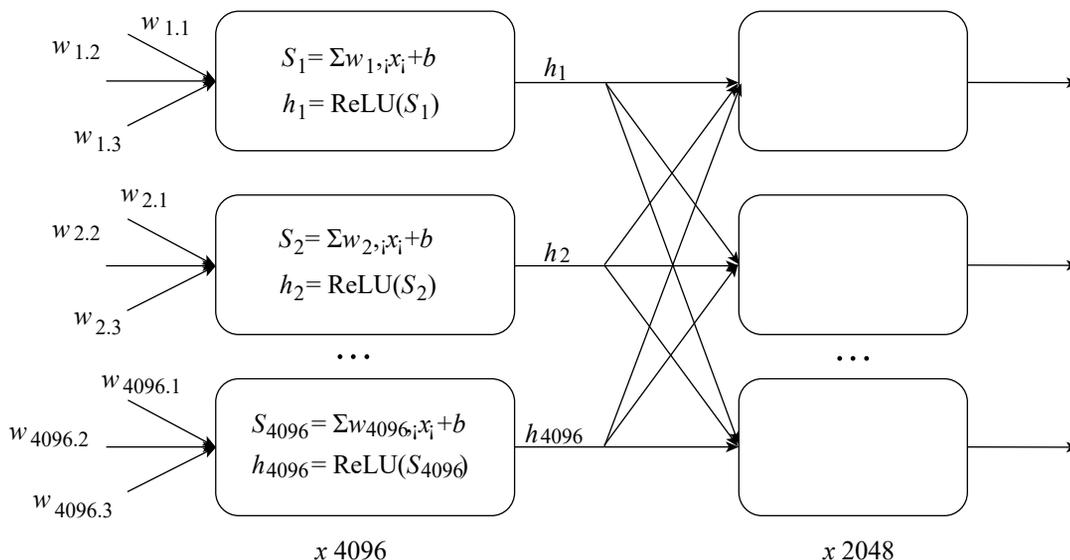


Рис. 4. Блок скрытых слоев.

В работах [29–31] показано, что при увеличении сложности модели, которая выражается в значительном количестве обучаемых параметров, может возрасти ее “выразительность”, заключающаяся в существенной нелинейной зависимости результата моделирования от количества нейронов. Применительно к рассматриваемой задаче эффект выразительности проявлялся следующим образом: при незначительном увеличении количества нейронов в первых экспериментах результаты моделирования ухудшались. Однако при кратном увеличении числа нейронов предсказательная сила нейронной сети существенно увеличилась.

Механизм, ускоряющий обучение нейронной сети также помогает решить проблему деградации точности за счет снижения симметрии параметрического пространства модели (уменьшается число локальных экстремумов).

В ходе обучения модели важным параметром является коэффициент скорости обучения – весовой коэффициент перед градиентом функции ошибки. В настоящей работе этот параметр рассматривался как управляющий для достижения оптимальной скорости обучения. Для наискорейшего достижения минимума целевой функции в области больших абсолютных значений градиента шаг принимается достаточно большим; при достижении области малого абсолютного значения градиента шаг автоматически уменьшается.

**Обучение нейронной сети.** Обучение нейронной сети основывается на минимизации среднеквадратических отклонений экспериментальных данных от модельных:

$$Q(X, y, W) = \sum_i L(y_i, f(x_i, W)) \rightarrow \min_W, \quad (4)$$

$$L(y_i, f(x_i, W)) = (y_i - f(x_i, W))^2, \quad (5)$$

где  $y$  – вектор предсказываемых значений, полученных из датасета;  $Q$  – оптимизируемая функция;  $f(x, W)$  – функция, которая аппроксимирует зависимость, параметризованной  $W$ ;  $W$  – матрица весов.

Для обучения нейронной сети использовался вариант градиентного спуска Adam [28]:

$$g_t = \nabla(f(w_t)), \quad (6)$$

$$m_t = \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1) g_t, \quad (7)$$

$$u_t = \beta_2 u_{t-1} + (1 - \beta_2) g_t^2, \quad (8)$$

$$\hat{m}_t = m_t / (1 - \beta_1^t), \quad (9)$$

$$\hat{u}_t = u_t / (1 - \beta_2^t), \quad (10)$$

$$w_t = w_{t-1} - \gamma \hat{m}_t / \sqrt{\hat{u}_t + \epsilon}, \quad (11)$$

где  $g_t$  – градиент функции;  $m_t$  – первый момент градиента на шаге  $t$ ;  $u_t$  – второй момент градиента на шаге  $t$ ;  $\beta_1, \beta_2$  – гиперпараметры, контролирующие скорость обновления моментов;  $\hat{m}_t, \hat{u}_t$  – усредненные значения моментов;  $w_{t-1}$  – значение веса модели на шаге  $t-1$ ;  $w_t$  – значение веса модели на шаге  $t$  (после обновления);  $\gamma$  – коэффициент скорости обучения;  $\epsilon$  – малая константа, предотвращающая деление на ноль.

**Оценка качества аппроксимации.** Оценка качества аппроксимации исследуемой модели проводилась на контрольной выборке из 76 записей, которые не участвовали в обучении нейронной

сети. Относительная ошибка, используемая для оценки модели, определяется соотношением:

$$\delta = \frac{1}{n} \sum_i \frac{|y_i - \hat{y}_i|}{y_i} \cdot 100\%, \quad (12)$$

где  $y_i$  – реальное значение эксперимента;  $\hat{y}_i$  – прогнозируемое значение;  $n$  – количество точек в выборке.

Полученные значения относительных ошибок составили: для условного напряжения при удлинении на 300% – 13%, для условной прочности при растяжении – 6%, для относительного удлинения при растяжении – 6%.

Результатом проведенного моделирования с использованием аппарата нейронных сетей является установление связи между входными параметрами (массовая часть оксида цинка, массовая часть стеариновой кислоты, температуры смешения) и выходными параметрами процесса (условное напряжение при удлинении на 300%, условная прочность при растяжении, относительное удлинение при разрыве). Результаты моделирования представлены на следующих рисунках (рис. 5–7).

Результаты вычислительного эксперимента показали, что максимум целевой функции (условное напряжение при удлинении на 300%, условная прочность при растяжении, относительное удлинение при разрыве) достигается на границе исследуемой области значений входных параметров. Кроме того, необходимо отметить тот факт, что исследуемые выходные параметры в исследуемой области изменения входных пара-

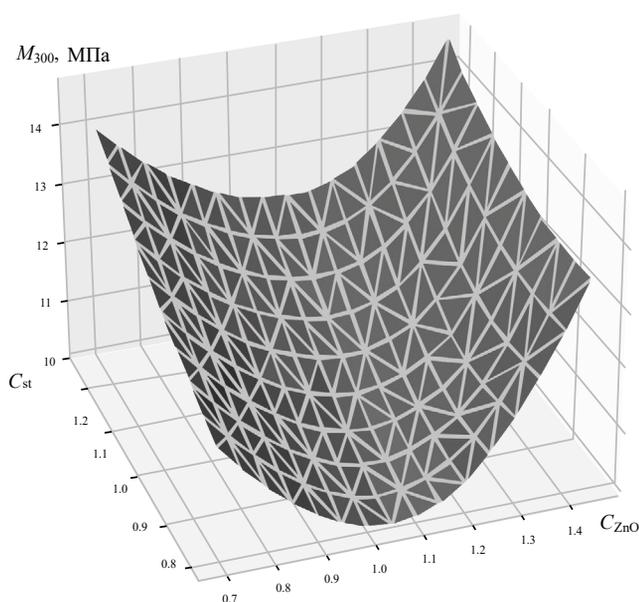


Рис. 5. Зависимость условного напряжения при удлинении на 300% от концентрации оксида цинка и стеариновой кислоты.

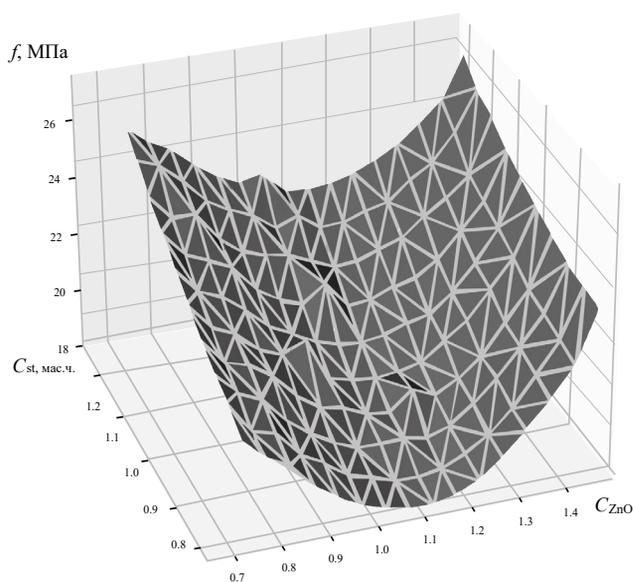


Рис. 6. Зависимость условной прочности при растяжении от концентрации оксида цинка и стеариновой кислоты.

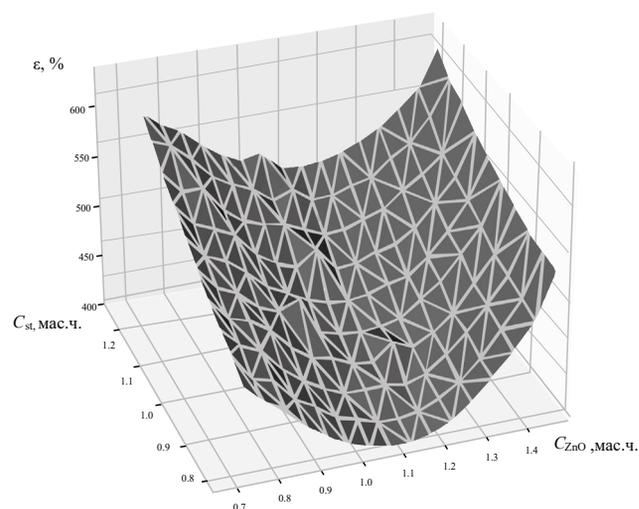


Рис. 7. Зависимость относительного удлинения при разрыве от концентрации оксида цинка и стеариновой кислоты.

метров имеют локальные экстремумы, а именно при значениях массовых долей стеариновой кислоты, оксида цинка и температуры (1.25; 0.7; 100), (0.85; 1.45; 100) соответственно.

Таким образом, рассмотренный в настоящей статье аппарат нейросетевого моделирования применительно к задаче вулканизации позволил, с одной стороны, обеспечить минимизацию содержания оксида цинка в конечном продукте, с другой, – выбрать входные параметры таким образом, чтобы обеспечивались ограничения на физико-механические свойства резиновых изделий.

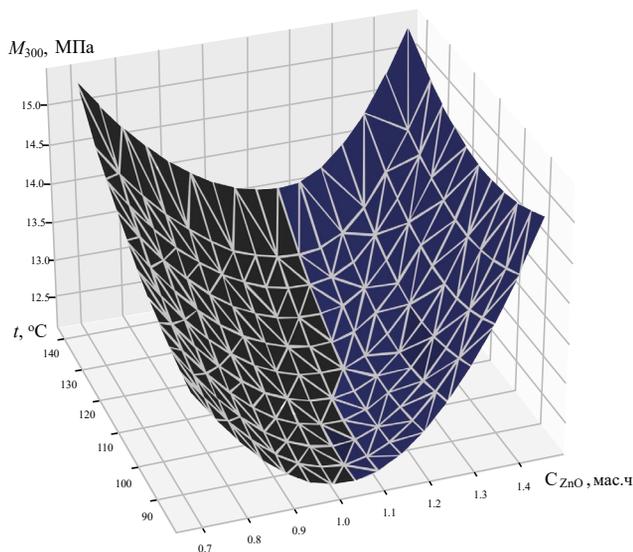


Рис. 8. Зависимость условного напряжения при удлинении на 300% от концентрации оксида цинка и температуры.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрена задача выбора оптимальных параметров получения комплексного активатора вулканизации с точки зрения достижения максимальных показателей условного напряжения при удлинении на 300%, условной прочности при растяжении, относительного удлинения при разрыве. В качестве значимых входных параметров в задаче рассматривались массовые доли оксида цинка, стеариновой кислоты, а также температуры синтеза. Инструментом моделирования являлась нейросетевая модель, основанная на архитектуре многослойного персептрона, дополненная механизмом, ускоряющим процесс обучения, что позволило обеспечить высокую точность аппроксимации выходных данных.

Указанная модель апробирована на наборе независимых данных. Получены модельные зависимости условного напряжения при удлинении на 300%, условной прочности при растяжении, относительного удлинения при разрыве от исходного набора входных параметров (концентрация оксида цинка, стеариновой кислоты, температуры синтеза). Решена задача оптимизации состава комплексного активатора вулканизации, позволившая обеспечить снижение оксида цинка в резинах и усовершенствовать производство резиновых изделий с точки зрения соответствия современным экологическим требованиям.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда содействия инновациям, договор № 2ГУРБ/2022 от 24.05.1022 г.

### ОБОЗНАЧЕНИЯ

$A_s$	коэффициент асимметрии;
$K$	эксцесс;
$M_{300}$	условное напряжение при удлинении на 300%;
$Q$	оптимизируемая функция;
$W$	матрица весов;
$W_l^{(n \times m)}$	матрица весов слоя $l$ ;
$X_l^{(1 \times n)}$	вектор выходных значений слоя номер $l$ ;
$X_{l-1}^{(1 \times n)}$	вектор выходных значений слоя номер $l-1$ ;
$b$	вектор смещений слоя $l$ ;
$f(x, W)$	функция, аппроксимирующая зависимость, параметризованной $W$ ;
$f_p$	условная прочность при растяжении;
$g_t$	градиент функции;
$m_t$	первый момент градиента на шаге $t$ ;
$\hat{m}_t, \hat{u}_t$	усредненные значения моментов;
$t$	температура синтеза, °C;
$u_t$	второй момент градиента на шаге $t$ ;
$w_{t-1}$	значение веса модели на шаге $t-1$ ;
$w_t$	значение веса модели на шаге $t$ (после обновления);
$\bar{x}$	среднее значение;
$x_{\min}$	минимальное значение;
$x_{\max}$	максимальное значение;
$y$	вектор предсказываемых значений, полученных из датасета;
$\beta_1, \beta_2$	гиперпараметры, контролирующие скорость обновления моментов;
$\gamma$	коэффициент скорости обучения;
$\varepsilon$	относительное удлинение при разрыве;
$\sigma$	среднеквадратичное отклонение;
p-value	вероятность получения результатов теста, по крайней мере, таких же экстремальных, как фактически наблюдаемый результат, при условии, что нулевая гипотеза верна;
$\in$	малая константа, предотвращающая деление на ноль.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шершнев В.А. Развитие представлений о роли активаторов серной вулканизации углеводородных эластомеров. Часть 1 // Каучук и резина. 2012. № 1. С. 31.
2. Карманова О.В., Калмыков В.В. Особенности формирования структуры вулканизатов // Конденсированные среды и межфазные границы. 2006. Т. 8. № 2. С. 112.
3. Ghosh P. Sulfur vulcanization of natural rubber for benzothiazole accelerated formulations: from reaction

- mechanisms to a rational kinetic model // *Rubber Chem. Technol.* 2003. V. 76. P. 592.
4. Кафаров В. В., Дорохов И. Н., Дранишников Л. В. Системный анализ процессов химической технологии: Процессы полимеризации. М.: Наука, 1991.
  5. Писаренко Е. В. Метод оценки констант нелинейных кинетических моделей многостадийных химических реакций // Программные продукты и системы. 2011. № 4. С. 163.
  6. Кафаров В. В., Дорохов И. Н., Ветехин В. Н., Волков Л. П. Анализ физико-химических свойств элементов третьей группы Периодической системы Д. И. Менделеева // Докл. АН СССР. 1991. Т. 320, № 6. С. 1400.
  7. Гордеев Л. С., Кафаров В. В., Бояринов А. И. Оптимизация процессов химической технологии: учеб. Пособие. М.: МХТИ им. Д. И. Менделеева, 1972.
  8. Кафаров В. В., Дорохов И. И. Системный анализ процессов химической технологии. Основы стратегии. М.: Наука, 1976.
  9. Баженов В. И., Говоров А. А., Кафаров В. В., Мешалкин В. П. и др. Алгоритмы анализа и оптимизации автоматических систем регулирования с расширенными функциональными возможностями для химико-технологических процессов // Теорет. основы хим. технологии. Т. 26. № 4. 1992. С. 562.
  10. Ziyatdinov N. N. Modeling and Optimization of Chemical Engineering Processes and Systems // *Theor. Found. Chem. Eng.* 2017. V. 51. № 6. P. 889. [Зиятдинов Н. Н. Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов и систем // Теорет. основы хим. технологии. 2017. Т. 51. № 6. С. 613.]
  11. Гусак Ю. В. и др. Малоранговое представление нейронных сетей // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2021. Т. 61. № 5. С. 800.
  12. Матвеев С. А. и др. Обзор методов визуализации искусственных нейронных сетей // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2021. Т. 61. № 5. С. 896.
  13. Sosnovik I., Oseledets I. Neural networks for topology optimization // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling.* 2019. Т. 34. №. 4. С. 215.
  14. Dvurechensky P., Gasnikov A. Stochastic intermediate gradient method for convex problems with stochastic inexact oracle // *Journal of Optimization Theory and Applications.* 2016. Т. 171. С. 121.
  15. Rogozin A. et al. Decentralized convex optimization over time-varying graphs: a survey // arXiv preprint arXiv: 2210.09719. 2022.
  16. Pogodaev A. K., Tikhomirov, S. G., Karmanova, O. V. et al. Modeling elastomer properties in presence of a composite vulcanization activator. *Journal of Chemical Technology and Metallurgy.* 2018. V. 53. № 5. P. 807–815.
  17. Tikhomirov S. G., Karmanova O. V., Bityukov V. K. [et al.] Study and Modeling of Polymer Degradation in Bulk // *Theor. Found. Chem. Eng.* 2018. V. 52. № 1. P. 78. [Тихомиров С. Г., Карманова О. В., Битюков В. К. и др. Исследование и моделирование процесса деструкции полимера в массе // Теорет. основы хим. технологии. 2018 Т. 52. № 4. С. 83.]
  18. Бурнаев Е. В. и др. Фундаментальные исследования и разработки в области прикладного искусственного интеллекта // Доклады РАН. Математика, информатика, процессы управления. 2022. Т. 508. № 1. С. 19.
  19. Tikhomirov S. G., Khaustov I. A., Bitukov V. K., Karmanova O. V. Polymer Degradation in a Solution: Monitoring and Predicting Quality Parameters / *Theor. Found. Chem. Eng.* – 2018. – Vol. 52. № 4. P. 568. [Тихомиров С. Г., Хаустов И. А., Битюков В. К., Карманова О. В. и др. Контроль и прогнозирование параметров качества полимеров в процессе их деструкции в растворе // Теорет. основы хим. технологии. 2018. Т. 52. № 4. С. 466.]
  20. Экологические аспекты модификации ингредиентов и технологии производства шин / *под науч. ред. проф. А. А. Мухутдинова.* Казань: Изд-во “Фэн”, 1999.
  21. Tahon J. M. F. C. et al. Rubber composition containing pre-hydrophobated silica with zinc salt fatty acid processing aid and tire with tread : pat. 9556331 USA, 2017.
  22. Pajarito B. B. et al. Effect of Replacing Carbon Black with Organo-Modified Bentonite and Acid-Activated Zeolite on Vulcanization Characteristics of Natural Rubber Tire Tread // *Materials Science Forum.* Trans Tech Publications. 2017. V. 890. P. 59.
  23. Alam M. N., Potiyaraj P. Synthesis of nano zinc hydroxide via sol-gel method on silica surface and its potential application in the reduction of cure activator level in the vulcanization of natural rubber. *Journal of Sol-Gel Science and Technology.* 2017. V. 81. № 3. P. 903.
  24. Gujel A. A. et al. Evaluation of vulcanization nanoactivators with low zinc content: characterization of zinc oxides, cure, physico-mechanical properties, Zn<sup>2+</sup> release in water and cytotoxic effect of EPDM compositions. *Polymer Engineering & Science.* 2018. V. 58. № 10. P. 1800.
  25. Le Q. V. et al. Learning hierarchical invariant spatio-temporal features for action recognition with independent subspace analysis // *CVPR 2011. IEEE, 2011.* С. 3361.
  26. Maas A. et al. Learning word vectors for sentiment analysis // *Proceedings of the 49th annual meeting of the association for computational linguistics: Human language technologies.* 2011. С. 142.
  27. Coates A., Ng A., Lee H. An analysis of single-layer networks in unsupervised feature learning // *Proceedings*

- of the fourteenth international conference on artificial intelligence and statistics. – JMLR Workshop and Conference Proceedings. 2011. С. 215.
28. *Diederik P. Kingma, Jimmy Lei Ba.* Adam: A Method for Stochastic Optimization <https://doi.org/10.48550/arXiv.1412.6980>.
29. *Kaiming He, Xiangyu Zhang, Shaoqing Ren, Jian Sun.* Deep Residual Learning for Image Recognition / <https://doi.org/10.48550/arXiv.1512.03385>.
30. *Ngiam J. et al.* Tiled convolutional neural networks // Advances in neural information processing systems. 2010. Т. 23.
31. *Antipina E. V., Antipin A. F., Mustafina S. A.* Search for the Optimal Regime Parameters of a Catalytic Process Based on Evolutionary Computations // Theor. Found. Chem. Eng. 2022. V. 56, №. 2. P. 16. [*Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф.* Поиск оптимальных режимных параметров каталитического процесса на основе эволюционных вычислений // Теорет. основы хим. технологии. 2022. Т. 56. № 2. С. 158–166.