

橡胶热氧老化寿命预测的理论、模拟与挑战

赵 军¹, 程娅楠², 朱思佳¹, 山永林¹, 杨 威¹, 胡仕凯^{2*}

(1. 中海油田服务股份有限公司油田化学研究院, 河北 廊坊 065201;

2. 北京化工大学先进弹性体材料研究中心, 北京 100029)

摘要:综述了橡胶热氧老化的寿命预测研究进展, 重点分析了 Arrhenius 方程与 WLF 方程等经典理论的优化路径及其在寿命预测中的应用。通过回顾分子动力学模拟 (MD)、蒙特卡罗模拟 (MC) 和人工神经网络 (ANN) 等计算技术的研究成果, 探讨了这些方法在揭示橡胶热氧老化机理、预测寿命及优化参数等方面的优势与局限性。指出目前模型存在的主要问题包括多环境因子协同效应建模不足、复合材料界面多尺度效应未有效纳入、计算精度与效率之间的平衡挑战。未来的研究应着重发展光-热-湿-化学介质多场耦合模型, 结合贝叶斯优化与 GPU 加速等计算策略, 推动橡胶寿命预测从经验驱动向数据驱动转型。

关键词:橡胶; 热氧老化; 寿命预测

中图分类号: TQ33

文献标志码: A

文章编号: 0253-4320(2026)08-0044-06

DOI: 10.16606/j.cnki.issn0253-4320.2026.08.009

Theories, simulations, and challenges in predicting the thermal-oxidative aging life of rubber

ZHAO Jun¹, CHENG Ya-nan², ZHU Si-jia¹, SHAN Yong-lin¹, YANG Wei¹, HU Shi-kai^{2*}

(1. China Oilfield Services Limited Oilfield Chemicals Research Institute, Langfang 065201, China; 2. Research Center of Advanced Elastomer Materials, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: This review summarizes the progress in rubber thermal-oxidative aging lifetime prediction, with a focus on optimizing the classical theories such as the Arrhenius equation and the WLF equation, and their applications in lifetime prediction. The review examines the research on computational techniques such as molecular dynamics (MD) simulations, Monte Carlo (MC) simulations, and artificial neural networks (ANN), highlighting their advantages and limitations in revealing the mechanisms of rubber thermal-oxidative aging, predicting lifetime, and optimizing parameters. The article also discusses the main issues in current models, including insufficient modeling of multi-environment factor interactions, inadequate incorporation of multi-scale effects of composite material interfaces, and the challenge of balancing computational accuracy and efficiency. Future research should focus on the development of multi-field coupling models of light, heat, humidity, and chemical media, and integrate Bayesian optimization and GPU acceleration techniques to drive the transition of rubber lifetime prediction from experience-driven to data-driven design.

Key words: rubber; thermo-oxidative aging; lifetime prediction

橡胶在航空航天、汽车等领域中具有重要应用, 其密封性和弹性在关键部件中至关重要。然而, 热氧老化引发的性能退化会导致安全隐患和经济损失, 因此, 对橡胶的寿命预测显得尤为重要。热氧老化是温度与氧气协同作用的结果, 伴随分子链断裂等化学反应及材料硬化等物理劣化, 进而导致力学性能下降。目前, 研究面临的挑战包括温度、氧气和机械应力的非线性耦合、加速试验难以模拟真实环境, 以及填料或复合材料异质性增加模型复杂性等难点。

本文中系统综述了橡胶热氧老化寿命预测的最新进展, 探讨了 Arrhenius 方程和 WLF 方程等经典理论的优化路径, 评析了分子动力学模拟、蒙特卡罗模拟和人工智能驱动方法等计算机技术在机理揭示中的作用, 并探讨了理论与工业需求的协同策略, 为未来材料开发与可靠性评估提供参考。

1 基于热力学的寿命预测理论

橡胶热氧老化是温度驱动的化学与物理过程, Arrhenius 方程与 WLF 方程通过量化温度对反应速

收稿日期: 2025-10-22; 修回日期: 2026-06-01

基金项目: 中央高校基本科研业务费专项资金项目 (JD2618); 中海油田服务股份有限公司科研项目 (YHB23YF002)

作者简介: 赵军 (1979-), 男, 学士, 高级工程师, 研究方向为固井技术研究及应用等, zhaojun13@cosl.com.cn; 胡仕凯 (1988-), 男, 博士, 副教授, 研究方向为弹性体与橡胶材料, 通讯联系人, skhu@mail.buct.edu.cn。

率和黏弹行为的影响,揭示了从分子运动到宏观性能退化的过程。

1.1 Arrhenius 方程

Arrhenius 方程由 Svante Arrhenius 于 1889 年提出,用于描述反应速率与温度的关系。1948 年 Dakin 首次将其应用于材料寿命预测,广泛用于均相反应中的基元反应和复杂反应^[1],数学形式为:

指数式(积分式)

$$k = A \exp(-E/RT)$$

对数式

$$\ln k = \ln A - E/RT \quad (1)$$

微分式

$$d \ln k / dT = E/RT^2$$

式中, k 为反应速率常数; A 为频率因子; E 为活化能; R 为摩尔气体常数,8.314 J/(mol·K); T 为热力学温度。

在橡胶老化过程中, $\ln t$ 与热力学温度的倒数 $1/T$ 呈线性关系,斜率为 E/R ,方程表达式为:

$$\ln t = B + E/RT \quad (2)$$

在固定温度下,材料性能随时间变化至失效。利用 $\ln t$ 与 $1/T$ 的线性关系及恒定活化能,可以外推短期数据预测长期寿命。例如,Yin 等^[2]通过氯丁橡胶的热加速老化实验,结合 Arrhenius 方程与蒙特卡洛方法构建区间预测模型,实现寿命精确预测。

Kong 等^[3]通过热老化实验发现,石墨烯填充量为 3 phr 时,天然橡胶复合材料活化能为 117.9 kJ/mol,预测寿命 14.5 a;而填充量增至 5 phr 时,因填料团聚导致寿命缩短至 4.92 a。这一非线性关系揭示了填料效应对寿命预测的关键影响,并表明了传统 Arrhenius 方程忽略填料效应导致预测误差的局限性。橡胶所处介质的约束也可能通过改变氧气扩散速率,影响寿命预测精度。Jin 等^[4]通过砂浆嵌入天然橡胶,在 80、100℃ 下进行老化实验,利用 Arrhenius 模型外推,得出 25℃ 下 40 a 后橡胶硬度稳定,损耗因子降至 61.4%,揭示了介质约束对活化能偏差的影响。

Guo 等^[5]提出了一种改进模型,解决了传统 Arrhenius 方程假设 Ea 恒定导致的长期预测偏差问题。该模型通过人工蜂群算法计算加速因子,引入幂指数因子 n ,描述 EPDM 橡胶老化中的非 Arrhenius 行为,形式为:

$$k(T) = Ae^{-(E_b/RT)^n} \quad (3)$$

改进后模型的分散系数从 1.665 3 降至 1.035 1,

预测精度提升 38%,更符合实际机制。外推至 25℃ 自然老化条件下,预测寿命为 8 289 d,与实际偏差小于 10%,为橡胶制品寿命评估提供了可靠理论依据。

Moon 等^[6]提出了氧渗透阻塞模型,解决橡胶老化中交联密度增加导致氧气渗透受阻、反应速率下降的非线性特性。该模型将反应速率常数修正为时间函数:

$$k^* = k/(t+1) \quad (4)$$

改进后特征方程为:

$$P/P_0 = 1 - k^* \ln(t+1) \quad (5)$$

通过关联活化能与交联密度量化老化行为,实验表明,改进模型在 23~100℃ 范围内将预测误差从 42% 降至 3%,在 17℃ 下 365 d 老化误差仅 5.3%。

Arrhenius 方程适用于预测以化学松弛为主导的橡胶热氧老化过程。该方程通过温度与老化速率的关系,评估高温下橡胶制品的长期性能与寿命,为工程选材与耐久性设计提供理论支持。

1.2 WLF 方程与时温等效原理

WLF 方程由 Williams、Landel 和 Ferry 于 20 世纪 50 年代提出,是表征聚合物黏弹行为的重要模型,基于时间-温度叠加原理,描述橡胶材料的力学响应如何通过转换因子 α_T 在时间与温度体系中实现动态等效,表达式为:

$$\log \alpha_T = \log \tau / \tau_0 = [-C_1(T-T_0)]/[C_2 + (T-T_0)] \quad (6)$$

式中, T_0 为参考温度,通常取材料玻璃化转变温度 T_g ; τ 和 τ_0 分别为温度在 T 、 T_0 时的松弛时间; C_1 、 C_2 为材料本征常数。

WLF 方程通过描述温度对活化能的非线性调节,突破了传统寿命预测中活化能恒定的假设,利用时-温等效原理将高温短时数据映射到低温长时条件,提升了预测精度和普适性^[7]。

然而,WLF 方程的有效应用依赖于精确测定参考温度 T_r 和玻璃化转变温度 T_g 的精确测定。Zanzi 等^[8]在研究丁腈橡胶垫片热氧老化时,取 110℃ 为 T_r ,拟合数据得到 WLF 参数 $C_1 = -6.693$ 、 $C_2 = 593.2$,预测 60、140℃ 下寿命分别为 731、80 d,且在 80~140℃ 范围内符合良好。Li 等^[9]则以 $T_g = -45℃$ 为基准、 $T_r = -10℃$ 为参考,拟合得到 $C_1 = 59.38$ 、 $C_2 = 571.27$,成功构建了存储模量与应力的主曲线,预测未硫化橡胶的动态黏弹性,且在 10℃ 时预测与实验的决定系数 R^2 达 0.991 2。这些研究表明,WLF 方程在特定温度范围内具有较高的预测精度,但其适用性取决于关键温度的选取与参数拟

合的精度。

在多相橡胶材料的热氧老化研究中,组分复杂性(如填料、基体、增塑剂)及其界面相互作用对 WLF 方程的适用性构成挑战。填料的分散状态和界面效应会显著影响材料弛豫行为,导致动态力学参数非线性变化。

Li 等^[10]提出分数阶时间-温度叠加模型(FTTSPM),将 WLF 方程与分数阶导数结合,描述位移因子为:

$$\alpha_T = \sqrt[1/B']{1/e^{B'\Delta T}} \quad (7)$$

其中, α 为表征材料黏弹性的分数阶阶次, B' 为反映界面弛豫异质性的环境参数。该模型通过 α 和 B' 量化材料本构行为与环境异质性,突破了传统 WLF 方程仅依赖 C_1 、 C_2 参数的局限。实验表明 FTTSPM 在扩展频率范围内对存储模量 E' 和损耗模量 E'' 的预测精度显著优于传统 WLF 方程,但与 FSLSM 模型相比,损耗因子 η 存在偏差,揭示了多相体系界面弛豫的复杂性。

Yin 等^[11]从工程应用角度改进了动态 WLF 模型,发现即使存在 Payne 效应,位移因子仍保持线性关系,因此提出了经验线性模型:

$$\log \alpha_T = 0.117T + 2.304 \quad (8)$$

该模型仅需斜率和截距即可高效表征温度依赖性,简化了参数标定过程。同时,结合滞后损耗 D 与损失模量 E'' 的对数关系:

$$\log D = C + \log E'' \quad (9)$$

其中, C 为与动态应变相关的常数,将线性移位因子拓展至温度、频率与预应变多变量耦合场景,实现了多条件下动态力学性能的协同预测。该模型通过高温短时数据外推长期性能,为多相橡胶体系在热氧老化过程中的寿命评估提供了高效、实用的预测工具。2 项研究共同表明,针对多相体系需从界面弛豫异质性和非线性动力学出发,通过结构-性能关联建模提升 WLF 类模型在复杂老化场景中的预测可靠性。

WLF 方程是表征橡胶时间-温度等效行为的重要工具,尤其适用于物理弛豫主导的老化过程。该模型可通过中低温区($T_g < T < T_g + 100^\circ\text{C}$)的动态力学数据,预测实际工况下材料的物理性能衰减,为橡胶制品在复杂温度环境中的设计与寿命评估提供依据。

2 计算机模拟与寿命评估预测

传统的橡胶热氧老化评估方法依赖高温长周期

实验,成本高且难以反映实际工况。近年来,分子模拟技术能动态模拟分子链断裂和交联等微观老化过程,人工智能技术则通过数据挖掘构建高精度寿命预测模型。多尺度计算与机器学习正推动该领域向数字化、智能化转型。

2.1 分子动力学(MD)模拟

MD 模拟通过计算原子/分子在力场下的运动,研究橡胶材料的微观结构与动力学行为。首先构建全原子或粗粒化模型,采用 COMPASS、ReaxFF 等力场验证其对橡胶弹性和热力学性质的预测能力。通过高温、紫外光能量加载及 NPT 系综模拟老化环境,分析链断裂、交联退化、氧化机制及力学性能变化,最终与实验数据对比揭示性能退化机理^[12]。

在复合橡胶体系研究中,MD 模拟揭示了多组分材料界面相互作用和添加剂延缓老化的机制。Qian 等^[13]通过 MD 模拟研究了 MoS_2 对丁腈橡胶复合材料的影响,发现 MoS_2 降低内聚能密度(CED) 6%~7%,平均平方位移(MSD)降低 25%,显著提高了抗氧剂 4020 与 NBR 的相容性,并通过增强界面结合能抑制高温氧化扩散。研究通过模拟与实验验证,为耐老化复合材料设计提供了理论依据。Yang 等^[14]通过 MD 模拟研究氧化老化对丁腈橡胶的影响。引入羟基和羰基构建老化模型,利用 COMPASS 力场分析发现,氧化官能团增强了分子极性与氢键作用,使 OH-CO-NBR 的自扩散系数下降约 50%,分子链迁移率显著降低,压缩应变加剧了分子链堆积与扩散抑制,该研究揭示了热氧老化下的性能退化机制,为寿命预测提供了理论支持。

2.2 蒙特卡罗(MC)模拟

WLF 方程与 Arrhenius 方程为基于统计经验的不确定性模型,存在计算误差。MC 模拟通过随机采样量化参数不确定性,为橡胶老化提供概率化寿命预测^[15]。流程包括:建立老化模型(如幂律模型、多因素耦合模型等);为温度、活化能等参数设定概率分布(如正态分布、对数正态分布);通过随机采样计算性能退化轨迹;最终生成性能的概率分布,进行多因素耦合的风险评估。

橡胶在热氧老化过程中的寿命预测常因初始性能分散性而存在不确定性。为此,Liu 等^[16]结合 Peck 动力学模型与 MC 模拟,生成 10 000 组初始硬度样本,模拟不同硬度橡胶的压缩永久变形退化轨迹。结果表明,45 硬度橡胶平均寿命为 13.52 a,而 65 硬度橡胶为 2.65 a,揭示了硬度差异对寿命的显著影响。Lee 等^[17]针对橡胶密封件组装过程,利用

MC 模拟分析 Yeoh 模型参数随机性对结构变形的影响。通过有限元分析与 1 000 次随机采样,优化后外钢部件位移标准差从 0.003 6 mm 降至 0.000 3 mm,分布由正态转为偏态,体现了 MC 模拟在提升结构抗分散性中的有效性。Belkhiria 等^[18] 则基于 Wöhler 曲线构建概率化疲劳寿命模型,利用 MC 模拟生成 10 000 条概率曲线,计算天然橡胶与丁苯橡胶的失效概率。结果表明,在特定载荷下,天然橡胶可靠性为 66.44%,远高于丁苯橡胶的 2.5%,凸显了材料类型与应变结晶效应对可靠性的关键影响。

2.3 人工神经网络(ANN)

人工神经网络(ANN)模拟人脑结构,通过数据学习规律,适用于橡胶老化性能预测。输入包括温度、湿度、材料配方和老化时间等参数,输出为性能指标。根据数据特征可选择不同类型的网络结构,如全连接网络(FNN)、循环神经网络(RNN/LSTM)或卷积神经网络(CNN),通过训练后设定失效阈值,估算橡胶寿命^[19]。

ANN 在橡胶热氧老化寿命预测中展现了强大的非线性建模能力,并通过与优化算法结合显著提升了预测精度和稳定性。Hong 等^[20] 为解决传统

BP 神经网络随机权重导致的预测波动,引入遗传算法(GA)构建 GA-BP 混合模型。该模型以温度、老化时间和力学性能为输入,预测相对误差控制在 10%以内,显著提升了收敛性与可靠性。Kopal 等^[21] 采用多层前馈网络(FF-BP-ANN)建模炭黑填充橡胶的拉伸行为,利用 2-6-1 网络架构、Levenberg-Marquardt 算法及正则化处理,验证集均方误差(MSE)达 10^{-4} 量级。通过数据增强策略生成虚拟训练数据,预测误差小于 3%,为老化性能退化建模提供了可扩展技术框架。Yuan 等^[22] 通过 APSO 算法优化网络参数,构建了四维输入的应力-应变预测模型,揭示硬度超过 70 Shore A 时应变率敏感性指数非线性激增 30% 的现象,解决了丁腈橡胶硬度-应变率多因素耦合建模难题。

2.4 方法互补性讨论

MD、MC 与 ANN 在橡胶热老化寿命预测中具有互补性,如图 1 所示。MD 从原子尺度揭示微观机制但受时空尺度限制;MC 通过概率统计量化不确定性,依赖模型合理性;ANN 以数据驱动建立非线性映射,擅长复杂工况预测,但需结合物理约束提升解释性。

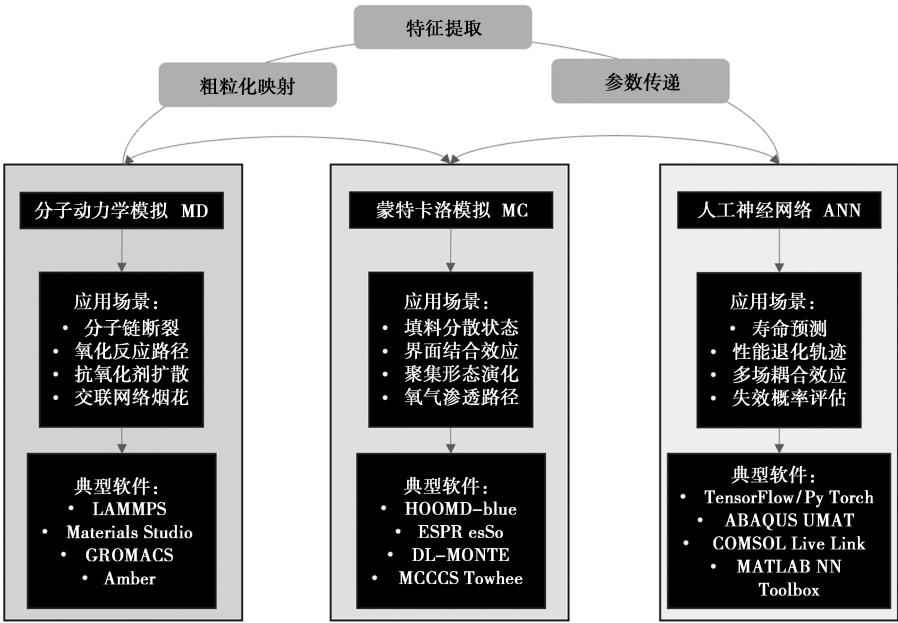


图 1 计算机模拟方法对比

3 类方法协同应用成为前沿趋势:MD 数据可训练 ANN 模型,MC 为 MD 提供参数不确定性量化,贝叶斯优化提升 MC 效率。未来需构建“多尺度模拟-机器学习-实验验证”闭环框架,发展机理透明且预测鲁棒的智能寿命评估体系,推动橡胶老化研究向数字孪生范式转型。

3 当前挑战与未来方向

尽管橡胶热氧老化寿命预测理论与方法已取得显著进展,但面对实际工况的复杂性和材料体系的多样性,现有模型与技术仍存在亟待突破的瓶颈。通过批判性审视现有研究的不足,为未来理论创新

与技术突破指明方向,推动橡胶老化预测从实验室模型向工业实际应用的深度转化。

3.1 现有模型的不足

尽管现有寿命预测理论与计算机模拟方法在橡胶热氧老化寿命预测方面取得了进展,但面对复杂工况和多样材料体系时,仍面临挑战。现有模型常过度简化交互机制,难以准确描述热、湿、光及化学介质等因素的非线性耦合作用。Gao 等^[23]通过 MD 模拟发现,硅橡胶在湿热耦合场下存在竞争性老化路径,传统单因素模型预测偏差高达 40%。尽管建立了 Arrhenius-Eyring 组合模型进行温湿度双参数寿命预测,推算室温寿命为 31.6 a,但未涵盖光辐射与气体渗透等变量。Ning 等^[24]构建了复合绝缘子硅橡胶在山区环境中的老化寿命模型,但未量化紫外线、污染物沉积等参数及其协同机制,限制了模型的普适性。未来需发展光-热-湿-化学介质耦合老化模型,结合原位监测与多尺度模拟,揭示多因子交互机制,提升复杂工况下的预测精度与适用性。

另一方面,现有的橡胶基复合材料本构模型尚未有效涵盖填料-基体协同效应,寿命预测体系仍有局限。Qian 等^[25]通过 MD 模拟首次量化了 CNT 填料与—CN 极性基团的协同抗老化机制,发现 CNT 通过吸附分子链降低自由体积并固定抗氧化剂 RD,结合极性相互作用提升界面结合能 6%。该研究为界面参数化寿命模型提供了原子尺度依据,但未考虑填料分散性的负面影响,缺乏界面参数与宏观寿命的定量关联。未来研究需结合原位界面表征技术与多物理场耦合模型,建立填料形貌-界面能-扩散系数的映射关系,以精准预测复杂工况下的寿命。

3.2 模型验证与实验偏差

当前橡胶材料的多尺度本构方程虽能反映交联网络降解机制,但数值模拟与加速老化实验数据间仍有 20%~35% 的误差,面临工程适用性挑战。例如,Liao 等^[26]通过 MD 模拟与实验协同研究发现,NaOH 处理 SBR-聚氨酯界面模拟预测改善率为 20%,而实测为 64.7%,偏差为 44.7%,原因是模型仅考虑单一基团,忽略了多组分复杂性。

为提高预测精度,需建立“模型驱动-数据驱动”双轮驱动体系,结合化学结构演变与性能退化的同步监测,利用数据同化技术校正老化动力学参数。Li 等^[27]在分析橡胶循环载荷热累积时,发现初始模型未考虑动态软化效应,心部温度模拟值高于实验约 10℃。引入 Van der Waals 超弹性本构方程

并修正动态软化及蠕变后,误差降至 1~2℃,证实了多尺度模拟与实验协同的必要性。Xie 等^[28]通过 MD 与多尺度实验协同,揭示接枝活化胶粉(GR)通过酰胺基与沥青酸酐反应减少极性分子含量,模拟显示 GR 改性沥青自由体积分数最高、分子聚集最低,模拟与实验密度误差<4.2%,组分偏差<1.2%,验证了“化学改性-分子运动-宏观性能”的协同机制。

3.3 计算效率与成本的挑战

在橡胶材料老化数值模拟中,模型精度与计算资源消耗的平衡已成为制约工程化应用的核心挑战。传统连续模拟方法在单机环境下求解时间呈指数增长,难以满足工程研发周期需求。例如,Arrhenius 型老化方程的参数辨识问题,传统蒙特卡洛方法耗时长,效率低。前沿提升效率的方法是采用贝叶斯优化框架加速参数辨识,利用高斯过程回归等代理模型建立目标函数概率分布,基于采集函数智能选择评估点,实现高效全局搜索^[29]。在橡胶老化的多尺度模拟中,高计算成本是关键挑战。Ghaderi 等^[30]提出物理信息驱动的多智能体模型,通过顺序降阶技术将复杂 3D 张量问题转化为 1D 映射子问题,大幅降低计算成本同时保持热力学一致性。这些技术挑战表明,橡胶老化模拟需构建“精度-效率-成本”三维优化体系:结合分子模拟、连续介质力学和数据驱动模型,在云端计算资源池中智能分配计算任务,最终在确保精度的前提下降低研发成本。

4 结语

在橡胶热氧老化研究中,已形成从理论模型到计算模拟的多维度体系。Arrhenius 方程及其改进模型解决了活化能非恒定及非线性老化预测问题;WLF 方程结合时温等效原理,在多相体系黏弹行为预测中展示了更高精度。分子动力学模拟揭示了微观老化机制,蒙特卡罗模拟量化了性能分散性与随机性,人工神经网络通过 GA-BP 混合模型实现了多参数协同预测,且将相对误差控制在 10% 以内。

尽管如此,现有研究仍面临多环境因子协同效应建模不足、复合材料界面多尺度效应未被有效纳入、计算模拟精度与效率失衡等挑战。未来应聚焦发展光-热-湿-化学介质多场耦合模型,构建基于界面能-扩散系数映射的寿命预测体系,并结合贝叶斯优化与 GPU 加速等计算策略,推动橡胶材料设计从经验驱动向数据驱动的转型。

参考文献

- [1] 印永嘉.物理化学简明教程[M].4版.北京:高等教育出版社, 2007:130-350.
- [2] Yin S, Bai Y, Kong F, *et al.* An interval prediction of chloroprene rubber crack propagation characteristics based on thermal accelerated aging[J]. *Polymers*, 2023, 15(11): 2445.
- [3] Kong E, Yoon B, Nam J D, *et al.* Accelerated aging and lifetime prediction of graphene-reinforced natural rubber composites[J]. *Macromolecular Research*, 2018, 26(11): 998-1003.
- [4] Jin H, Tian Q, Li Z. Aging test and performance prediction of rubber in mortar medium[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2022, 331: 129981.
- [5] Guo X, Yuan X, Hou G, *et al.* Natural aging life prediction of rubber products using artificial bee colony algorithm to identify acceleration factor[J]. *Polymers*, 2022, 14(17): 3439.
- [6] Moon B, Jun N, Park S, *et al.* A study on the modified Arrhenius equation using the oxygen permeation block model of crosslink structure[J]. *Polymers*, 2019, 11(1): 136.
- [7] 董炎明, 张海良. 高分子科学简明教材[M]. 北京: 科学出版社, 2008.
- [8] Zanzi M S, de Souza E L, Dutra G B, *et al.* Service lifetime prediction of nitrile butadiene rubber gaskets used in plate heat exchangers[J]. *Journal of Applied Polymer Science*, 2022, 139(28): e52523.
- [9] Li Y, Sun X, Miao Y, *et al.* Prediction formula describing viscoelasticity of unvulcanized rubber compound based on time-temperature equivalent superposition principle[J]. *International Journal of Polymer Science*, 2023, 2023(1): 6916484.
- [10] Li Z L, Qin Y, Sun B, *et al.* A fractional approach to the time-temperature dependence of dynamic viscoelastic behavior[J]. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 2019, 33(1): 139-147.
- [11] Yin B, Jiao X, Fang Y, *et al.* Dynamic viscoelasticity and hysteresis loss of carbon black filled rubber: Measurements and prediction[J]. *Polymer Composites*, 2025, 46(1): 132-141.
- [12] Li X, Dong C, Li J, *et al.* Molecular dynamics simulation of aging properties in polymer materials: A review[J]. *Polymer Bulletin*, 2025, 82(6): 1723-1753.
- [13] Qian C, Chen J, Wang S, *et al.* Molecular dynamics investigation on the thermal-oxidative aging and mechanical properties of nitrile butadiene rubber composites with molybdenum disulfide[J]. *Applied Physics A*, 2024, 130(4): 256.
- [14] Yang J, Lou W. Molecule dynamics simulation of the effect of oxidative aging on properties of nitrile rubber[J]. *Polymers*, 2022, 14(2): 226.
- [15] Georgescu I. The early days of Monte Carlo methods[J]. *Nature Reviews Physics*, 2023, 5(7): 372.
- [16] Liu Q, Shi W, Chen Z, *et al.* Rubber accelerated ageing life prediction by Peck model considering initial hardness influence[J]. *Polymer Testing*, 2019, 80: 106132.
- [17] Lee S P, Kang K W. Deformation analysis of rubber seal assembly considering uncertainties in mechanical properties[J]. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 2019, 33(7): 3345-3353.
- [18] Belkhiria S, Seddik R, Atig A, *et al.* Fatigue reliability prediction of rubber parts based on Wöhler diagrams[J]. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2018, 96(1): 439-450.
- [19] Liu X, Tian S, Tao F, *et al.* A review of artificial neural networks in the constitutive modeling of composite materials[J]. *Composites Part B: Engineering*, 2021, 224: 109152.
- [20] Hong H E, Hu W Q, Gao S J. Prediction of rubber aging life by intelligent neural network[C]. *MATEC Web of Conferences*. EDP Sciences, 2018, 175: 03070.
- [21] Kopal I, Labaj I, Harničárová M, *et al.* Prediction of the tensile response of carbon black filled rubber blends by artificial neural network[J]. *Polymers*, 2018, 10(6): 644.
- [22] Yuan Z, Niu M Q, Ma H, *et al.* Predicting mechanical behaviors of rubber materials with artificial neural networks[J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2023, 249: 108265.
- [23] Gao Y, Li S, He S, *et al.* Molecular dynamics supported thermal-moisture aging effects on properties of silicone rubber[J]. *Progress in Organic Coatings*, 2024, 192: 108503.
- [24] Ning K, Lu J, Jiang Z, *et al.* Aging characteristics and lifespan prediction for composite insulator silicone rubber in a mountainous region environment[J]. *Polymer Testing*, 2023, 122: 108023.
- [25] Qian C, Li Y, Zhao J, *et al.* Thermal-oxidative aging and tribological properties of carbon nanotube/nitrile butadiene rubber composites with varying acrylonitrile content: Molecular dynamics simulations[J]. *Polymer Engineering & Science*, 2023, 63(5): 1516-1527.
- [26] Liao G, Fang X, Wang H, *et al.* Durability improvement of poroelastic road surface with treated rubber: Molecular dynamics simulation and experimental observations[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2022, 369: 133334.
- [27] Li F, Liu J, Yang H, *et al.* Numerical simulation and experimental verification of heat build-up for rubber compounds[J]. *Polymer*, 2016, 101: 199-207.
- [28] Xie J, Li S, Lin J, *et al.* Influence of graft-activated crumb rubber on the aging performance of modified bitumen: Experimental analysis and molecular dynamics simulation[J]. *Materials Today Communications*, 2024, 39: 109249.
- [29] Shahriari B, Swersky K, Wang Z, *et al.* Taking the human out of the loop: A review of Bayesian optimization[J]. *Proceedings of the IEEE*, 2015, 104(1): 148-175.
- [30] Ghaderi A, Morovati V, Chen Y, *et al.* A physics-informed multi-agents model to predict thermo-oxidative/hydrolytic aging of elastomers[J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2022, 223: 107236. ■