

---

УДК 621.793:539.23

**С.И. Сидоренко**, чл.-кор. НАН Украины,  
**С.А. Замулко**, канд. техн. наук, **С.И. Конорев**  
Национальный технический университет Украины  
«Киевский политехнический ин-т»  
(Украина, 03056, Киев, пр. Победы, 37, корп. 9,  
тел. +38044 4549199, email: sidorenko@kpi.ua;  
тел. +38044 4549771, +380503587069, email: zamulko@kpm.kpi.ua;  
тел. +38044 4549773, +38097 7047837, email: konorev@kpm.kpi.ua)

## **Обобщенный алгоритм инженерного синтеза материалов**

Разработан алгоритм метода инженерного синтеза (конструирования) материалов (ИКМ) как итерационный цикл, состоящий из нескольких шагов, который может быть применен при создании новых материалов. Алгоритм основан на комбинации имитационного, в частности квантово-имитационного, моделирования и экспериментальной проверки его предполагаемых результатов. Алгоритм ИКМ объединяет прямую и обратную задачи компьютерного синтеза материалов и указывает кратчайший путь достижения поставленной цели.

Розроблено алгоритм метода інженерного синтезу (конструювання) матеріалів (ИКМ) як ітераційний цикл, що складається з декількох кроків, який може бути застосований при створенні нових матеріалів. В основу алгоритму покладено комбінацію імітаційного, зокрема квантово-імітаційного, моделювання та експериментальної перевірки його передбачуваних результатів. Алгоритм ИКМ об'єднує пряму і обернену задачі комп'ютерного синтезу матеріалів та вказує найкоротший шлях досягнення поставленої мети.

*К л ю ч е в ы е с л о в а: инженерное конструирование материалов, новые материалы с перед заданными свойствами, прямая задача, обратная задача.*

Использование информационно-коммуникационных технологий расширяет возможности как имитационного компьютерного моделирования и вычислительных экспериментов [1], так и инженерного «конструирования» новых материалов [2—5], под которым подразумевается решение задач по созданию новых материалов с использованием методов имитационного моделирования, в том числе квантово-имитационного.

Как указано в работе [6], инженерное конструирование материалов (ИКМ) сводится к следующим трем задачам: прямой задаче, обратной задаче первого рода и обратной задаче второго рода. Решением первых

© С.И. Сидоренко, С.А. Замулко, С.И. Конорев, 2014

двух задач является создание новейших знаний на основе уже накопленных с использованием материаловедческих баз данных. Решение обратной задачи второго рода осуществляется с помощью методов квантово-имитационного моделирования (например, *ab initio* методов [7] как одного из наиболее точных вычислительных методов) [4, 8, 9], в результате чего получают материалы с наперед заданными свойствами [10, 11].

В задачах физического материаловедения и физики твердого тела, решаемых в рамках указанного подхода, предусматривается использование вычислительных Грид-технологий, т.е. программно-аппаратных средств, которые могут работать в распределенных и географически отдаленных разнородных вычислительных средах для расчетных процедур большого объема.

Таким образом, в материаловедении акценты сегодня смещаются в сторону теоретического конструирования (прогнозирования) новых материалов и поиска их новых свойств на основе накопления и анализа мировых баз данных. В мире обсуждается идея развития глобальной сети [12—14], которая являлась бы специализированным информационным пространством не только для интеграции баз данных, накапливаемых в научных центрах мира, но и для реализации идеологии компьютерного конструирования материалов (*Data Base Science and Science on Materials Design*).

При создании новых материалов особое значение имеет предварительная теоретическая работа, а компьютерный эксперимент становится не менее важным, чем физический. В среднесрочной перспективе (5—10 лет) средства компьютерного конструирования материалов с использованием методов имитационного моделирования, в том числе методов квантового компьютерного моделирования, будут играть такую же важную роль в нанотехнологиях, как системы *Computer-Aided Engineering (CAE)* и расчеты на их основе в современном машиностроении. Поэтому в рамках теоретического материаловедения возникает необходимость в построении алгоритмов и обобщенных схем, по которым могут быть созданы материалы с наперед заданными свойствами.

В основе предлагаемого алгоритма ИКМ лежит комбинация имитационного, в частности квантово-имитационного, моделирования и экспериментальной проверки результатов прогнозирования такого моделирования.

**Алгоритмы и схемы ИКМ**, которые могут быть использованы в алгоритмах ИКМ при решении прямой и обратной задач первого рода, следующие.

1. Кластерный анализ — может быть интегрирован в алгоритмы ИКМ для анализа экспериментов с получением большого количества данных.

2. Модели прогнозирования — могут быть интегрированы в алгоритмы ИКМ для классификации данных и идентификации процессов, свойств, признаков и других исследуемых и прогнозируемых объектов. Условием их применения является конечность набора свойств и признаков исследуемых объектов.

3. Анализ на ассоциации — может быть интегрирован в алгоритмы ИКМ и использован для разработки эвристических правил анализа свойств материалов и их поведения на основе больших массивов данных.

4. Обнаружение аномалий — может быть интегрировано в завершающие этапы алгоритмов ИКМ как стадия оценки и проверки полученных данных на их адекватность.

В работе [15] представлен обзор 87 наиболее полных материаловедческих баз данных. В большинстве из них уже реализованы элементы перечисленных схем.

В работе [16] рассмотрены начальные стадии конструирования новых материалов. Приведены схемы, используемые для выбора перспективных составов материалов, основанного на желаемых эксплуатационных характеристиках в сочетании со структурой и физическими свойствами, т.е. этапах схем, предшествующих стадиям квантово-имитационного моделирования. Осуществлена попытка алгоритмизировать процессы выбора материалов для проведения исследований. Однако в работе [16] не дан ответ на вопрос, как довести теоретически разработанный материал до промышленной эксплуатации.

Еще одним важным примером применения вычислений на основе *ab initio* подходов является исследование термодинамических, структурных, электронных, упругих, механических и других свойств высокоэнтропийных сплавов на основе FeTiCoNiVCrMnCuAl, FeNiCrCuCo и др. [17, 18]. Это научное направление весьма перспективно в плане использования ИКМ для прямой и обратной задач первого и второго рода.

Использование указанных алгоритмов ИКМ и схем конструирования материалов позволяет разработчикам ограничить область поиска при создании материала с наперед заданными свойствами.

Создание новых материалов с наперед заданными свойствами предусматривает проведение большого числа дорогостоящих исследований, часть которых можно заменить более экономически выгодными вычислительными экспериментами.

Методами квантово-имитационного моделирования необходимо установить химический состав материала и определить, какие кристаллографические структуры обеспечивают его необходимые наперед заданные свойства. Следовательно, наперед заданные свойства — это исходные условия задачи, а поиск состава и кристаллографических структур, с помощью

которых эти наперед заданные свойства могут быть достигнуты, — цель, которая должна быть достигнута в результате решения задачи.

Согласно [19] алгоритм ИКМ может быть представлен как итерационный процесс со следующими шагами:

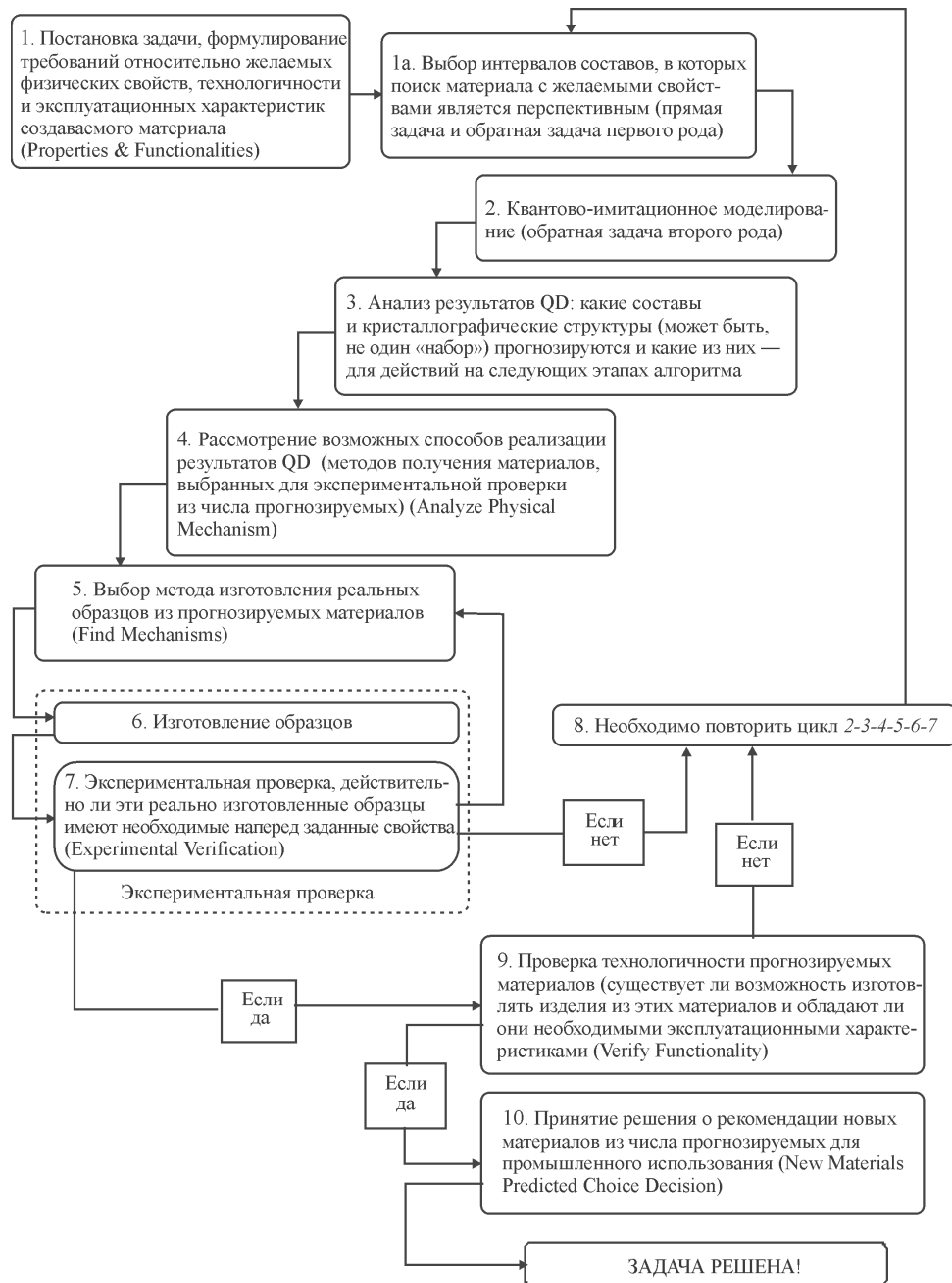
1. Квантово-имитационное моделирование, результаты которого являются основанием для рекомендации нового материала;
2. Выбор метода производства и рекомендованного материала (например, ионное распыление, электролитическое и вакуумное осаждение и др.);
3. Экспериментальная проверка, действительно ли рекомендуемый материал имеет наперед заданные свойства;
4. Прямая экспериментальная технологическая проверка выбранного материала (т.е. можно ли из этого материала изготовить необходимые детали, элементы и др.).

Эти шаги повторяются до тех пор, пока исследователь не разработает материал, обладающий необходимыми свойствами. Однако представленная схема методически не является исчерпывающей. Так, например, исходный пункт обратной задачи — формулирование наперед заданных свойств — в ней отсутствует, а также есть другие методические неточности. Но авторам работы [19] удалось осуществить главное: в результате практического использования предложенного ими алгоритма Computational materials design на основе вычислительных (обратной задачи второго рода) и реальных экспериментов созданы новые комбинации тонкопленочных материалов для повышения плотности записи магнитных носителей информации. Коэффициент гигантского магнетосопротивления шестислойной пленочной композиции Fe-Co-Cu-Ru-Mn, который используется в настоящее время, составляет 19 %, а коэффициент гигантского магнетосопротивления трехслойной тонкопленочной композиции Cr-Ca-Ni-As-Fe-Cr-S — 720 %.

Рассмотрим предлагаемый алгоритм ИКМ [20], который представлен на рисунке. Исходным этапом данного алгоритма является шаг 1 — физические свойства, технологичность и эксплуатационные характеристики. На данном этапе определяется, какими свойствами должен обладать и для решения каких задач будет использован материал, состав и кристаллографическую структуру которого необходимо спрогнозировать.

На следующем этапе (шаг 1а) необходимо осуществить выбор интервалов, в которых поиск материала с желаемыми свойствами (прямая задача и обратная задача первого рода) является перспективным. Этот этап описан в работе [15].

Переход к шагу 2 осуществляется после определения указанного интервала. На этом этапе применяются методы квантово-имитационного моделирования (Quantum Design (QD)), позволяющие рассчитывать и ин-



Алгоритм ИКМ для решения прямой и обратной задач

терпретировать следующие свойства и характеристики: зонная энергетическая структура; плотность состояний; зарядовая плотность; полная энергия; магнитный момент; период кристаллической решетки; модуль всестороннего сжатия; энергия образования; когезия; фононный колебательный спектр; модуль упругости; диэлектрические свойства; оптическая проводимость и др. Поскольку методы квантово-имитационного моделирования быстро развиваются, в ближайшей перспективе станет возможным прогнозировать еще более широкий спектр свойств материалов.

Следует заметить, что при поиске материалов с желаемыми механическими свойствами более точные результаты дают одни методы квантово-имитационного моделирования, а при поиске, например, электрофизических свойств, — другие. Какие именно методы будут использованы на этом этапе алгоритма, зависит от квалификации экспериментатора и теоретика. Далее происходит переход к шагу 3.

После выполнения шагов 3—5 происходит экспериментальная проверка (шаги 6 и 7): изготовление образцов и определение, действительно ли эти реально изготовленные образцы имеют необходимые наперед заданные свойства. Число циклов экспериментальной проверки (5-6-7) может быть многократным, в зависимости от объективных и субъективных факторов. В случае недостижения успеха на стадиях экспериментальной проверки необходимо повторить итерационный цикл 1а-2-3-4-5-6-7.

Если экспериментальная проверка дала положительные результаты, то переходим к шагу 9. Если результаты проверки на шаге 9 исследователя удовлетворяют, задание считается выполненным — создан новый материал. Если результаты проверки не удовлетворяют исследователя, необходимо повторить итерационный цикл, начиная с шага 2.

Число итерационных циклов, которые необходимо будет осуществить, предвидеть невозможно. Это зависит как от объективных факторов, например природная сложность поставленного задания (есть задания, которые выполнить невозможно), так и от субъективных (интуиция, опыт и глубина знаний экспериментатора и теоретика и др.). Однако понятно, что использование предложенного и аналогичных алгоритмов экономически выгоднее, чем изготовление сотни сплавов и их исследование в надежде отыскать «счастливый» состав с необходимыми свойствами.

## **Выводы**

Разработанный алгоритм ИКМ как итерационный цикл может быть применен при создании новых материалов. В его основе лежит комбинация имитационного, в частности квантово-имитационного, моделирования и

экспериментальной проверки результатов прогнозирования такого моделирования.

Алгоритм ИКМ позволяет структурировать и обобщать процесс конструирования материалов с наперед заданными свойствами, а также обоснованно прогнозировать физически возможные свойства нового материала.

Алгоритм ИКМ объединяет прямую и обратную задачи компьютерного конструирования материалов и указывает кратчайший путь достижения поставленной цели.

Использование ИКМ способствует сокращению сроков создания нового продукта и выведения его на рынок, уменьшению расходов на его разработку, тем самым повышая конкурентоспособность.

The algorithm of the Computational Materials Design (CMD) method as an iterative loop with several steps has been developed. The algorithm is based on a combination of simulation (in particular — quantum-simulation modeling) and experimental verification of its supposed results. The algorithm proposed combines both «a direct» as well as «an inverse» problems of CMD and shows the shortest way to achieve the formulated goal.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Огородников В.В. , Покропивный В.В. , Штерн М.Б.* Компьютерное моделирование в материаловедении. Неорганическое материаловедение: Энциклопед. изд.: В 2 т. / Под ред. В.В. Скорохода, Г.Г. Гнесина. — Киев: Наук. думка, 2008. — Т. 1: Основы науки о материалах/ В.В. Скороход, Г.Г. Гнесин, В.М. Ажажа и др. — С. 1092—1145.
2. *Billinge S.J.L., Rajan K. , Sinnott S.B.* From Cyberinfrastructure to Cyberdiscovery in Materials Science: Enhancing outcomes in materials research, education and outreach // Report from a workshop held in Arlington, August 3—5. — Virginia, 2006. —
3. *Iwata S., Ohsawa Y., Tsumoto Sh. et al.* Communications and Discoveries from Multidisciplinary Data. — Springer, 2008. — 340 p.
4. *Rajan K.* Materials informatics // Materials Today. — 2005. — Vol. 8. — P. 38—45.
5. *Raabe D.* Computational Materials Science. — Wiley-VCH, Weinheim, 1998. — 379 p.
6. *Сидоренко С.І., Замулко С.О.* Прямая та обернена задачі в комп'ютерному конструюванні матеріалів. — Наукові вісті НТУУ «КПІ». — 2013. — № 4. — С. 148—151.
7. *Toyohiro Chikyow.* Trends in Materials Informatics in Research on Inorganic Materials// Quarterly Review. — 2006.—No 20.— P. 59—71.
8. *Changwon Suh, Arun Rajagopalan, Xiang Li, Krishna Rajan.* The Application of Principal Component Analysis to Materials Science Data// Data Science Journal. — 2002. — Vol. 1. — P. 19—26.
9. *Frenkel D., Smit B.* Understanding Molecular Simulations: From Algorithms to Applications. — San Diego: Academic Press, 1996.
10. *Yamamoto T., Ohnishi S., Chen Ying, Iwata S.* Effective Interatomic Potentials Based on The First-Principles Material Database // Data Science Journal. — 2009.—Vol. 8.— P. 62—69.
11. *Gang Yu, Jingzhong Chen, Li Zhu.* Data mining techniques for materials informatics: datasets preparing and applications. Second International Symposium on Knowledge Acquisition and Modeling // IEEE. — 2009.—Vol 2.— P. 189—192.

12. *Abicht L., Freikamp H., Schumann U.* Identification of Skills Needs in Nanotechnology. CEDEFOP Panorama Series, 2006. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: [http://www.trainingvillage.gr/etv/Information\\_resources/Bookshop/publication\\_details.asp?pub\\_id=426](http://www.trainingvillage.gr/etv/Information_resources/Bookshop/publication_details.asp?pub_id=426)
13. *Lei Liu, Hui Zhang, Jianhui Li. et al.* Building a Community of Data Scientists: an Explorative Analysis // *Data Science Journal*. — 2012. — Vol. 8. — P. 201—207.
14. *Tan P.-N., Steinbach M., Kumar V.* Introduction to Data Mining. — NY: Addison-Wesley, 2000. — P. 769.
15. *Ramalhete P.S., Senos A.M.R., Aguiar C.* Digital Tools for Material Selection in Product Design // *Materials and Design*. — 2010. — Vol. 31. — P. 2275—2287.
16. *Deng Y.-M., Edwards K.L.* The role of Materials Identification and Selection in Engineering Design // *Ibid.*—2007.—P. 131—139.
17. *Nong Zhi-sheng, Zhu Jing-chuan, Yu Hai-ling, Lai Zhong-hong.* First Principles Calculation of Intermetallic Compounds in FeTiCoNiVCrMnCuAl System High Entropy Alloy // *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*. — 2012. — Vol. 22, Issue 6. — P. 1437—1444.
18. *Shaoqing Wang, Hengqiang Ye.* First-Principles Studies on the Component Dependences of High-Entropy Alloys // *Advanced Materials Research*. — 2011.— Vol. 338.— P. 380—383.
19. *Akai H., Ogura M., Long N.H.* Computational Materials Design and its Application to Spintronics. — Japan—Germany Joint Workshop, 2009, Kyoto, 21—23 Jan.— [Электронный ресурс]. — Режим доступа: [http://www.jst.go.jp/sicp/ws2009\\_ge3rd/presentation/29.pdf](http://www.jst.go.jp/sicp/ws2009_ge3rd/presentation/29.pdf)
20. **А.с. № 45279 Україна.** Алгоритм комп'ютерного конструювання нових матеріалів/ Сидоренко С.І., Замулко С.О., Волошко С.М., Конорев С.І. Опубл. 22.08.2012. Бюл.№ 27.

Поступила 28.01.14;  
после доработки 14.02.14

*СИДОРЕНКО Сергей Иванович, чл.-кор. НАН Украины, проректор по научно-педагогической работе и международным связям Национального технического университета Украины «Киевский политехнический ин-т». В 1971 г. окончил Московский ин-т стали и сплавов. Область научных исследований — изучение диффузионных характеристик, физических и механических свойств металлов и тонких металлических пленок спектральными и структурными методами; компьютерное конструирование материалов.*

*ЗАМУЛКО Сергей Александрович, канд. техн. наук, докторант кафедры физики металлов Национального технического университета Украины «Киевский политехнический ин-т», который окончил в 2001 г. Область научных исследований — изучение и прогнозирование свойств наноструктурированных материалов методами, позволяющими рассчитать электронную структуру, а также методами молекулярной динамики и статистической механики; компьютерное конструирование материалов и интеллектуальный анализ данных.*

*КОНОРЕВ Сергей Игоревич, ассистент кафедры физики металлов Национального технического университета Украины «Киевский политехнический ин-т», который окончил в 2001 г. Область научных исследований — компьютерное конструирование материалов и интеллектуальный анализ данных; моделирование процессов реакционной диффузии в тонкопленочных системах.*