

# РАЗРАБОТКА ШАБЛОНА ТРЕБОВАНИЙ ДЛЯ СИСТЕМЫ ИНФОРМАЦИОННОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ РАЗРАБОТКИ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ BIG DATA

Ф.В. Гречников, А.И. Хаймович

Самарский государственный аэрокосмический университет им. академика С.П. Королева  
(национальный исследовательский университет)

Высокая конкуренция в условиях глобального рынка требует постоянного улучшения потребительских свойств выпускаемой продукции, существенная часть которых зависит от используемых в товарах материалов. В этой связи быстрая разработка новых материалов с необходимыми свойствами является критически важной, причём порой не только для конкретных предприятий, но и для целых отраслей экономики страны. Разработка методов организации взаимодействия разнородных виртуальных сервисов и приложений в Big Data позволит создать в России систему информационного обеспечения разработки новых материалов. Она позволит интегрировать на единой с точки зрения пользователя платформе весь необходимый учёному-материаловеду набор разнородных данных для прогнозирования развития дефектов при создании новых материалов.

Одна из основных проблем, с которой сталкиваются ведущие КБ и технологи, осуществляющие разработку изделий для аэрокосмической техники с использованием новых материалов заключается в том, что все прочностные расчеты (структурный анализ) изделий из этих материалов производятся с учетом механических теплофизических и прочих свойств материалов на макро- уровне. Однако на микро – уровне (область микроструктуры) материалам свойственна анизотропия структуры из-за наличия разнородного фазового состава, точечных и других локальных дефектов, неоднородности кристаллического строения, инородных включений и прочее. Эти локальные дефекты, а также внешние микромеханические повреждения поверхности деталей являются причиной образования и развития трещин, которые приводят к нерасчетным случаям и выходу из строя деталей в процессе их эксплуатации. Особенно это касается композиционных материалов с механическим легированием, композитов типа «связующее – армирующее волокно» и других. Широко известны случаи (например, компании AIRBUS, BOEING), когда композиционные детали были изъяты с серийных изделий в силу упомянутых причин.

Жизненный цикл материалов состоит из нескольких стадий:

- разработка нового состава материала;
- оптимизация его свойств;
- проектирование и разработка изделий из материала;
- испытания и сертификация;
- производство;
- эксплуатация, включая ремонт и восстановление;
- утилизация.

Инфраструктура инноваций в разработке новых материалов показана на рисунке 1 [1]. Для проектирования новых материалов требуется создать базу данных существующих материалов: математических моделей материалов, экспериментальных данных по материалам в виде фотографий и данных виброакустической эмиссии, а также цифровых данных о процессах получения образцов изделий из этих материалов.

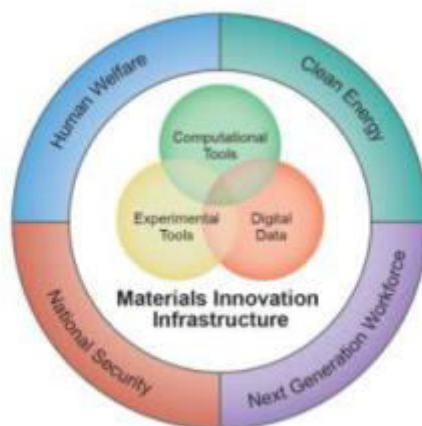


Рисунок 1 - Инфраструктура инноваций в разработке новых материалов

При разработке базы данных о материалах используется интеграция следующих методов:

1. Инструментарий компьютерного моделирования (физические модели нано- и микро- уровня, численные модели и системы имитационного моделирования механики сплошных сред макро-уровня).
2. Инструментальные средства и методики экспериментального анализа.
3. Форматы обмена цифровыми данными и хранилища цифровой информации.

Для работы по проектированию нового материала требуется создание интегрированной среды в системе BIG DATA, так как в эту базу данных должны входить и звуковые данные, и фотографии экспериментальных данных и математические модели существующих материалов.

Исходными данными для анализа (база данных о материале) являются:

1. Результаты имитационного моделирования структуры – ПО, моделирующее структуру материала (фазовый состав, взаимодействие, объемные доли, пространственное распределение и ориентация фаз).
2. Результаты натурального эксперимента (стандартных тестов) - фрагменты микроструктуры и субмикроструктуры материала, полученные средствами световой и электронной микроскопии, результаты рентгено-структурного анализа, характеризующие структуру материала и дефекты структуры, прочие виды анализа. Итоговые модели структуры материала, полученные в результате оцифровки данных натурального эксперимента (требуется разработка специальной методики и ПО), привязанные к моделям п.1.
3. Механические и пр. свойства материала (по результатам экспериментов п.2) - в строгом соответствии с моделями структуры.

Выходными данными в системе моделирования новых материалов должен быть сервис прогноза разрушения на основе нейронной сети. Принцип работы сервиса: на основе множества поименованной выборки из фрагментов структур с дефектами, а также др. параметров, характеризующих макро и микросостояние материала, параметров геометрии детали, условий эксплуатации и просчитанных или экспериментально полученных вариантов разрушения или развития патологии производится обучение сети. Принципиальная схема работы сервисов по диагностике и прогнозу разрушения представлена на рисунке 2.

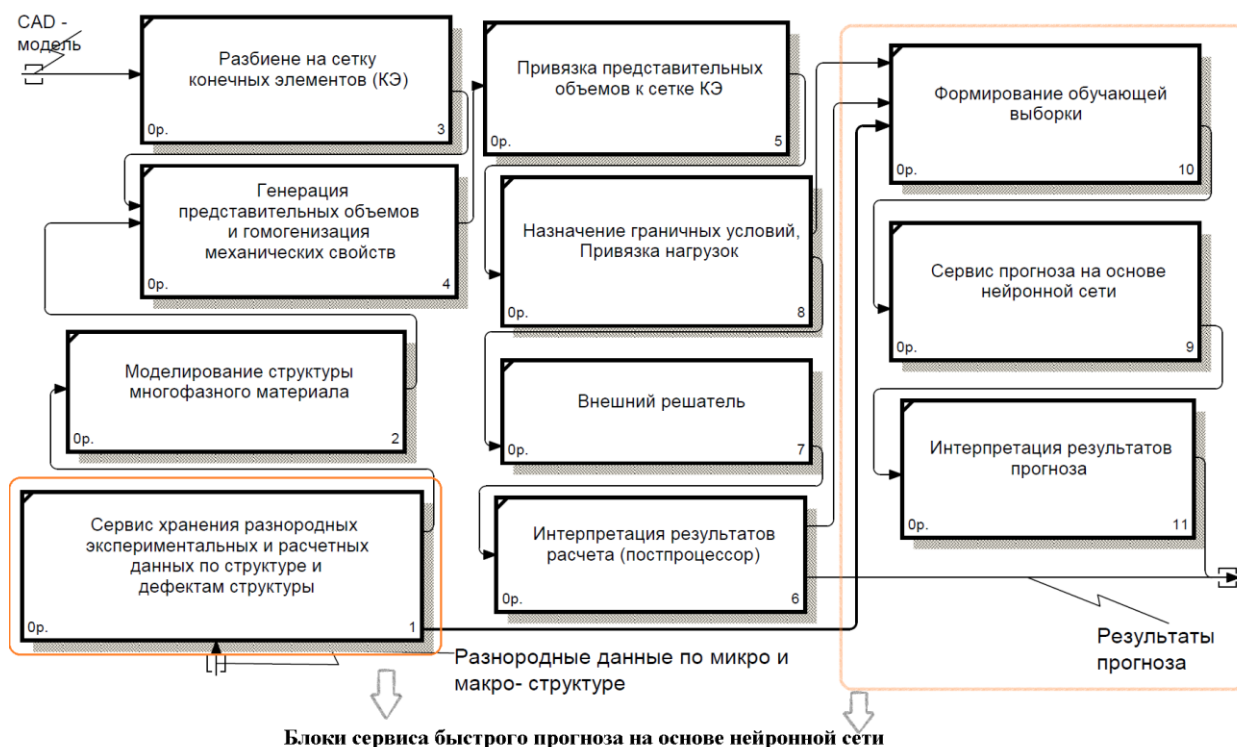


Рисунок 2- Принципиальная схема работы сервисов по диагностике и прогнозу разрушения

Прогноз осуществляется следующим образом: на вход в сеть подается выборка параметров аналогичная элементам из обучающего множества выборок. Параметры из выборки получены для материала тестируемой детали отобранной из промышленной партии деталей. Для требуемых (возможно критических) условий эксплуатации сеть выдает прогноз поведения материала.

В случае неблагоприятного прогноза производится серия уточняющих расчетов и экспериментов, экспертно принимают окончательное решение и осуществляют корректирующие действия, предупреждающие выход из строя изделия.

Обучение и уточнение прогноза сети осуществляется периодически за счет роста размера обучающего множества.

Часть этапов при создании новых материалов выполняется с помощью вычислительной техники и специализированного программного обеспечения. Причём каждый из этапов может выполняться в отдельном прикладном пакете, что предполагает наличие доступа у учёного-материаловеда ко всему их набору. Более того, научные приложения зачастую требуют особой квалификации для своей установки, настройки и запуска, которой большинство исследователей не обладают.

Предлагается разработать методы построения облачной системы информационного обеспечения разработки новых материалов, которая позволит интегрировать в единую среду весь необходимый исследователю набор программных инструментов и получить возможность им пользоваться с помощью интуитивно понятного веб-интерфейса с доступом через Интернет с помощью веб-браузера. Веб-интерфейс, также как и компьютерное моделирование, с использованием прикладных пакетов будут реализованы в облачной среде.

Запуск вычислений в облаке предлагается реализовать следующим образом. В облачном веб-интерфейсе системы пользователь должен будет выбрать из списка поддерживаемый системой прикладной пакет и задать набор специфических для выбранного пакета и конкретно этой задачи входных параметров (включая количество ядер и объём оперативной памяти, необходимых для выполнения расчёта), а также при необходимости указать путь к файлу или директории с исходными метаданными, необходимыми для выполнения расчетов. После инициирования запуска задачи из веб-

интерфейса, система проверит наличие всех обязательных данных и корректность их ввода. В случае успешного прохождения проверки и при наличии указанного количества свободных ресурсов, система инициирует запуск соответствующего количества виртуальных машин с предустановленным прикладным ПО, необходимым для выполнения заданного пользователем расчёта. После окончания выполнения расчёта система сохранит результаты по указанному пользователем пути в облачном хранилище.

Созданная на основе разработанных методов система также позволит хранить различного рода информацию о свойствах уже известных материалов и экспериментальные данные о выполненных ранее их испытаниях, а также осуществлять поиск по этим данным с целью предсказания свойств новых материалов без проведения натуральных экспериментов.

В США и Европе по данному направлению проводятся аналогичные работы в рамках создания генома материала с использованием технологии Big Data. В России разработка методов с целью последующего создания на их основе портала для исследователей в области материаловедения только начинает создаваться.

24 июня 2011 Президент США объявил об Инициативе Создания Генома Материала, чтобы удвоить скорость, с которой производится разработка и производство новых материалов. Ускорение разработки современных материалов имеет решающее значение для достижения глобальной конкурентоспособности ([http://www.whitehouse.gov/sites/default/files/microsites/ostp/materials\\_genome\\_initiative-final.pdf](http://www.whitehouse.gov/sites/default/files/microsites/ostp/materials_genome_initiative-final.pdf)). Новые материалы являются сложными: имеют многокомпонентную и многофазную структуру: без адекватного имитационного моделирования, информационного ресурса и обмена данными, развитие материалов новой генерации при существующем эмпирическом подходе невозможно либо долговременно ввиду их сложности. Инициатива Создания Генома Материала призвана продвигать развитие новых материалов, делает этот процесс быстрее и дешевле. 4 декабря 2014г. стратегический план Инициативы Создания Генома Материала был опубликован (<http://www.nist.gov/mp/upaocl/MGI-StrateQicPlan-2014.pdf>) NSTC (Национальный научно-технический совет). Подкомитет по геному материалов включает NIST, Министерство энергетики, Министерства обороны, NSF, NASA, NIH, USGS, DARPA в координации с инфраструктурой Нанотехнологии Знаний (НКИ).

Подобно тому, как проект Генома Человека ускорил развитие биологических наук благодаря идентификации и расшифровке базовых строительных блоков генетического кода человека, Инициатива Создания Генома Материала (MGI) ускорит понимание основ науки о материалах, предоставляя информацию, обеспечивающую создание новых продуктов и процессов. MGI потребует беспрецедентного уровня сотрудничества участников, включая правительство, промышленность, академию, профессиональные сообщества, национальные лаборатории, приводящего к возрождению американской промышленности. Для интеграции результатов экспериментов, численных методов (методов конечных элементов и др.), теории, стратегический план предусматривает создание сети MGI (Инициатива Создания Генома Материала) ресурсов, для разработки надежных методов точного имитационного моделирования, улучшения инструментария проведения и обработки результатов экспериментов. Направленность этих интегрированных данных - открытие новых материалов, разработка аналитической информации для повышения ценности полученных экспериментальных и расчетных данных. Другие цели плана, связанные с интенсивной обработкой данных, включают в себя создание средств для реализации информационной инфраструктуры материалов, а также разработки наилучших методик поддержки хранилищ баз данных по материалам.

Для того, чтобы начать диалог в рамках сообщества MSE (Инженерия разработки и исследования материалов), Национальный институт стандартов и технологий США (NIST) провел семинар по цифровым данным материалов в мае 2012 под эгидой MGI (Инициатива по созданию генома материала). Семинар определил ряд барьеров, которые

необходимо решить в процессе создания стратегии данных для материалов, они включают в себя: схемы/онтологии материалов, стандарты представления данных и метаданных о материалах, репозитории данных/ архивы данных, качество данных, стимулы для совместного использования данных, интеллектуальные системы и инструменты для поиска данных [2].

Европейский союз разрабатывает стандартов для обмена данными по конструкционным материалам в рамках Европейского комитета по стандартизации [3]. Главным образом эти стандарты акцентированы на конструкционных материалах для авиационно-космической промышленности. Европейская Комиссия финансирует деятельность экспертной группы, которая называется Integrated Computational Materials Engineering (ICMEg) - группа интегрированной вычислительной инженерии материалов, созданная с целью разработки стандартов и протоколов, необходимых для поддержки цифрового обмена данными о материалах [4].

В России необходимо начинать разработки по созданию генома материалов с использованием технологии Big Data. Для этого необходимо формирование требований к цифровым данным большого объема, охватывающим стадию сбора и обработки результатов эксперимента по исследованию механических свойств, например в динамике, либо фрагментов микроструктуры, стадию численного имитационного моделирования процесса поведения материала с использованием полученных экспериментальных данных для формирования интегрированной модели знаний о материале. Интегрированная модель знаний включает информацию, необходимую для заключения прогноза о поведении материала (в том числе с некритическими дефектами) при эксплуатации или в технологическом процессе. Апробация сквозной информационной поддержки и формирования списка требований к данным о геноме материала (для случая прогноза разрушения) может, например, осуществляться на примерах, приведенных в таблице 1.

Таблица 1. Примеры применения (use case) сервисов информационной поддержки материалов по прогнозу разрушения.

Экспериментальные данные о патологии (дефектах, неоднородностях) в структуре материала	Имитационная модель поведения материала (численная модель). Технология идентификации дефектов по косвенной информации	Модель прогноза поведения
Хранилище неструктурированных данных по микроструктуре материала с микротрещинами	Моделирование развития трещины в CAE - системе с подготовкой сетки конечных элементов на основе отобранных облачным сервисом фрагментов микроструктуры	Прогнозная (обучаемая) модель изменения прочности материала на основе нейронных сетей
Фрагмент (sample) сигнала виброакустической эмиссии при критическом нагружении материала (например, при статических испытаниях, при отклонениях эксплуатационных режимов и геометрии от допустимых (мехобработка, листовая штамповка и др. для известных и новых материалов))	Технология спектрального анализа распознавания критических ситуаций на основе идентификации параметров эмиссии	Прогнозная (обучаемая) система мониторинга поведения материалов в критических ситуациях.

Существуют коммерческое программное обеспечение в виде связанных модулей, предназначенных для решения сопряженных задач структурного анализа, в которых осуществляется учет влияния микроструктуры композиционного материала на свойства разрабатываемой конструкции, например Digimat, MultiMech. Однако не существует сервиса по прогнозу (решение на основе нейронных сетей), которое позволяет на основе выполненных расчетов и экспериментов для аналогов из Big Data данных получить быстрое прогнозное решение.

#### Литература

1. Materials Genome Initiative National Science and Technology Council Committee on Technology Subcommittee on the Materials Genome Initiative <https://www.google.ru/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=1&cad=rja&uact=8&ved=0CBwQFjAA&url=http%3A%2F%2Fwww.nist.gov%2Fmgi%2Fupload%2FMGI-StrategicPlan-2014.pdf&ei=dAkxVZ7aM4OssAGG6oAI&usg=AFQjCNEpbZmKYXJXntVo-CIza4OKLFP5OA&bvm=bv.91071109.d.bGg>
2. Making materials science and engineering data more valuable research products (2014) Charles H Ward, James A Warren and Robert J Hanisch <http://www.immijournal.com/content/3/1/22>
3. Austin T, Bullough C, Gagliardi D, Leal D, Loveday M (2013) Prenormative research into standard messaging formats for engineering materials data. Int J Dig Curation 8:5-13 doi:10.2218/ijdc.v8i1.245
4. Schmitz GJ, Prah U (2014) ICMEg, The integrated computational materials engineering expert group a new European coordination action. Integr Mater Manuf Innov 3:2 doi:10.1186/2193