

Абрикосов Игорь Анатольевич

Качество данных - ключ к успешному использованию методов многомасштабного моделирования

Лаборатория моделирования и разработки новых материалов,
Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС"

ГОД НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ В РОССИИ



Homo ·
Science

РОСАТОМ





Homo
Science
РОСАТОМ

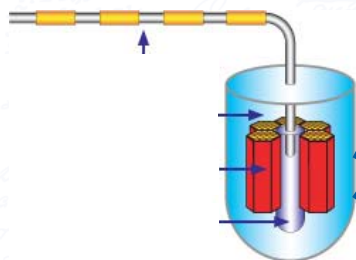
Многомасштабное моделирование



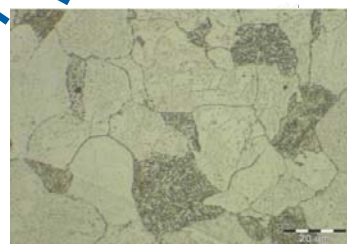
НАУКА
И ИННОВАЦИИ
РОСАТОМ

Цель:
теоретические расчеты и
экспериментальная
верификация
параметров моделей
высокого уровня
в реальных условиях
эксплуатации

Методы достижения цели:
расчеты с использованием
современных средств
компьютерного
моделирования,
машинного обучения и
искусственного интеллекта

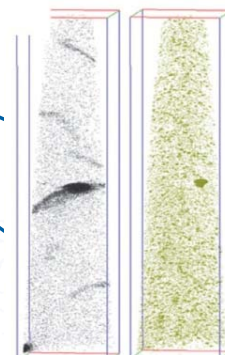


Проблема:
параметры моделей (данные
о свойствах материалов)

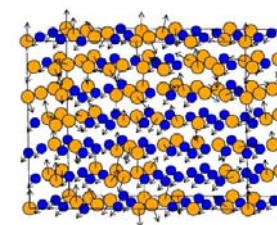


Микроструктура
- Зерна, 1 – 10 мм
≈ 1 – 10 мм

Свойства:
Предел текучести
Предел прочности
Пластичность
Твердость
Жаропрочность
Жаростойкость
Радиационная стойкость

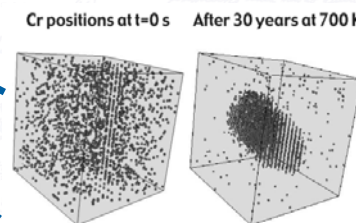


Микроструктура
- Фазы
(метод фазовых полей)
≈ 3-100 нм



Электроны
(квантовая механика)
≈ 0.1-5 нм

Свойства:
Стабильность фаз
Энергии образования
Модули упругости
Межатомные
взаимодействия



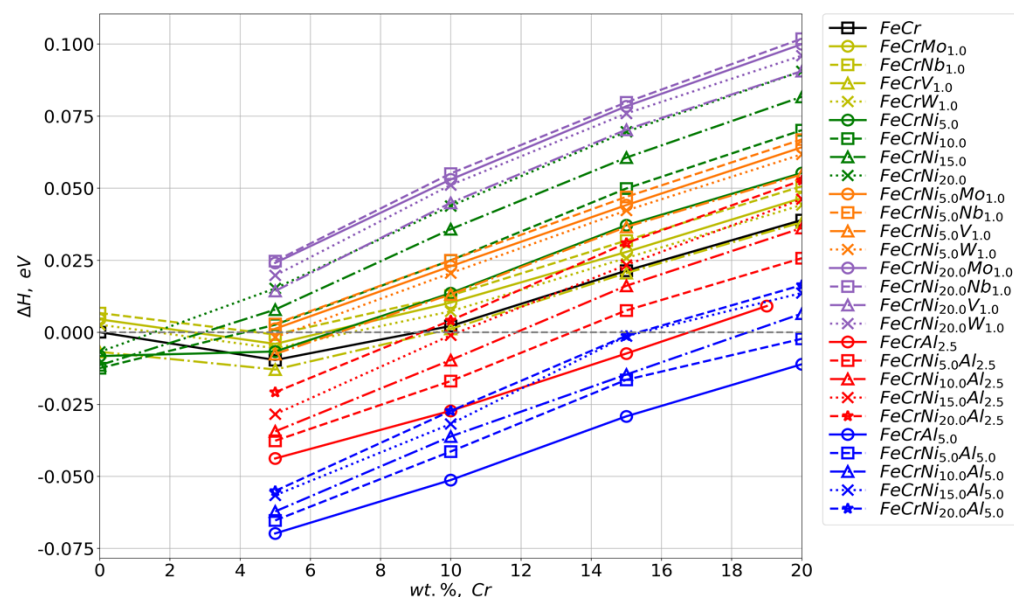
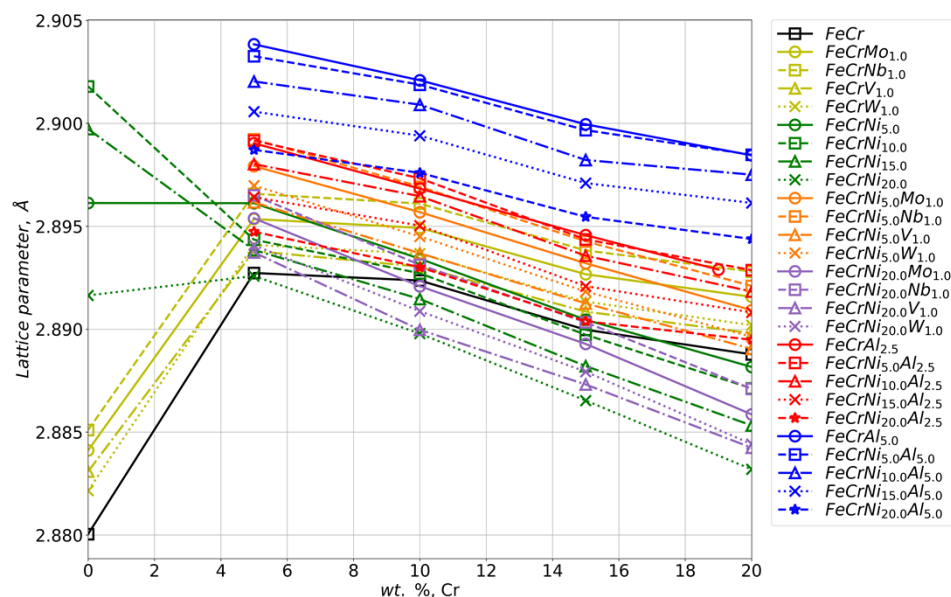
Фазы – Атомы (статистическая физика,
термохимия), 5-10 нм

Свойства:
Фазовый состав
Образование дефектов
Устойчивость к
радиационным дефектам



Homo
Science
РОСАТОМ

Высокопроизводительное квантовомеханическое моделирование эффектов многокомпонентного легирования на свойства ОЦК твердых растворов в системе Fe-Cr



Зависимости значений параметров решетки и энтальпии смешения сплавов на основе системы Fe-Cr от концентрации хрома. Расчеты энтальпии смешения показывают, что добавление алюминия в бинарные Fe-Cr сплавы обеспечивает максимальный стабилизирующий эффект, в то время как никель оказывает дестабилизирующее воздействие, усиленное добавлением Nb, W, Mo.

A. V. Ponomareva, *et al.* Phys. Rev. Materials **4**, 094406 (2020).

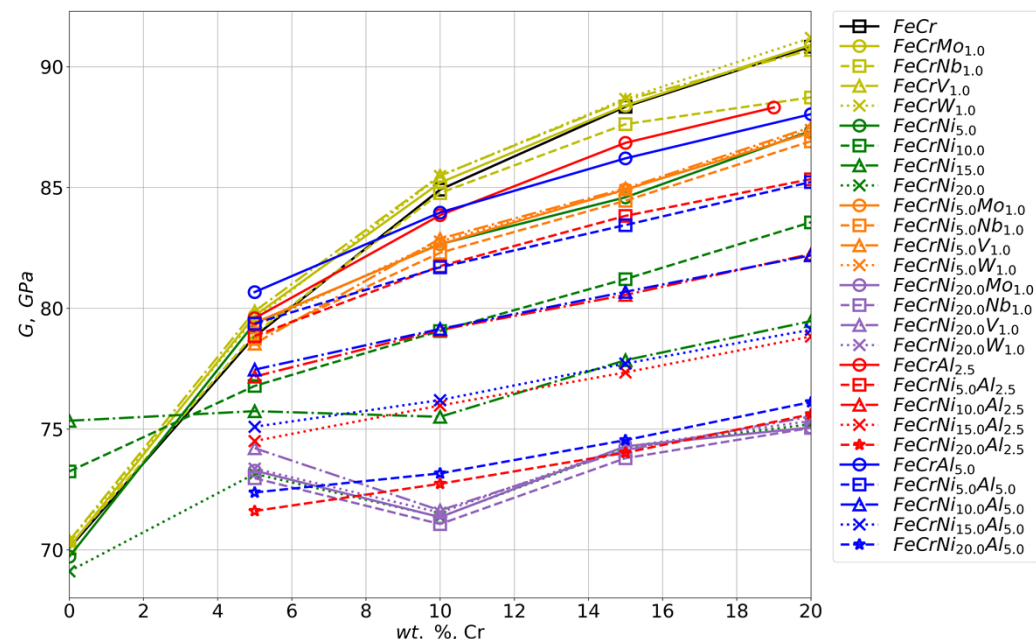
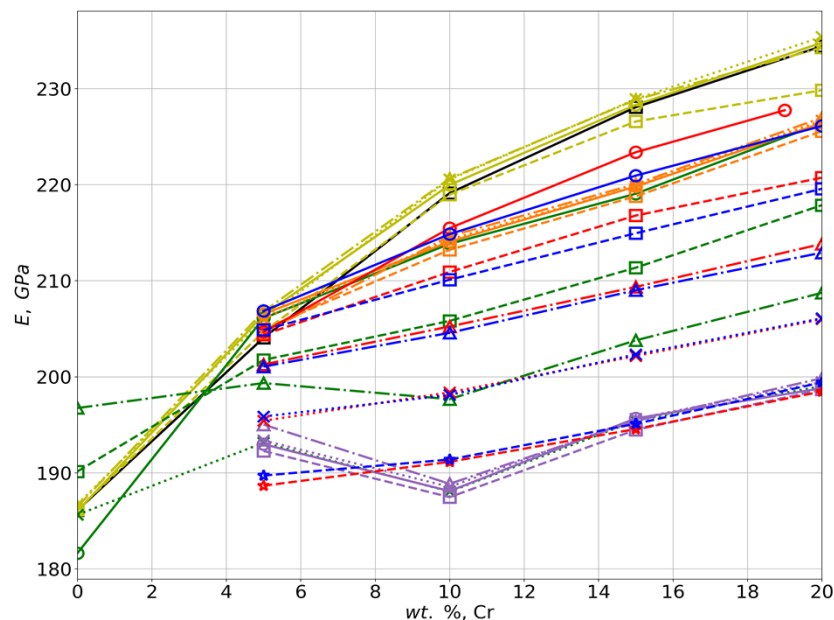


НАУКА
И ИННОВАЦИИ
РОСАТОМ



Homo
Science
РОСАТОМ

Высокопроизводительное квантовомеханическое моделирование эффектов многокомпонентного легирования на свойства ОЦК твердых растворов в системе Fe-Cr



Зависимости модуля Юнга E и модуля сдвига G поликристаллов сплавов на основе системы Fe-Cr от концентрации хрома. Сплавы Fe-Cr-Ni-Al показывают одновременно существенное увеличение стабильности и пластичности без значительной деградации механических свойств, в которых модули E и G лежат в пределах значений бинарных низкохромистых сталей.

A. V. Ponomareva, *et al.* Phys. Rev. Materials **4**, 094406 (2020).



НАУКА
И ИННОВАЦИИ
РОСАТОМ



Homo
Science
РОСАТОМ

Машинное обучение: активное обучение

1. Дескрипторы:

TEN — Total Pauling electronegativity

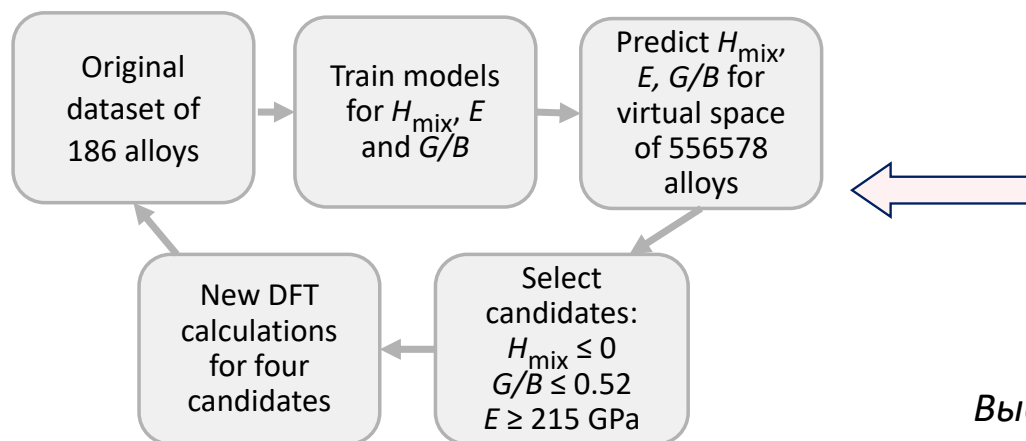
VEC — Valence electrons concentration

S_{mix} — Mixing entropy

V — Average atomic volume

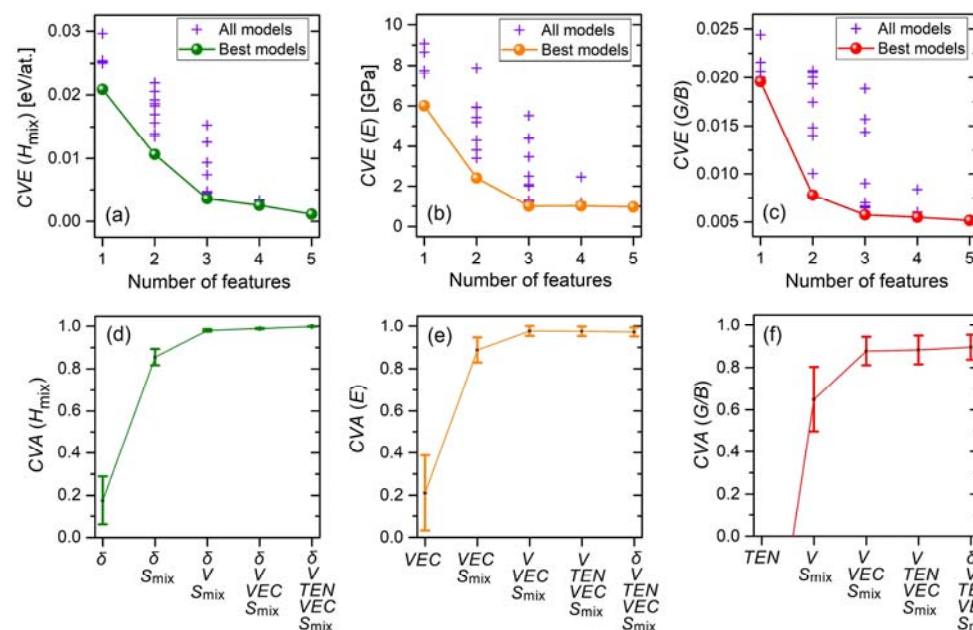
δ — Atomic size difference

3. Схема активного обучения:



2. Машинное обучение для предсказания H_{mix} , E and G/B

Алгоритмы: 1) Artificial neural network, 2) Support vector machines



Выбор дескрипторов:

CVE and CVA — Cross-validation error and accuracy



НАУКА
И ИННОВАЦИИ
РОСАТОМ



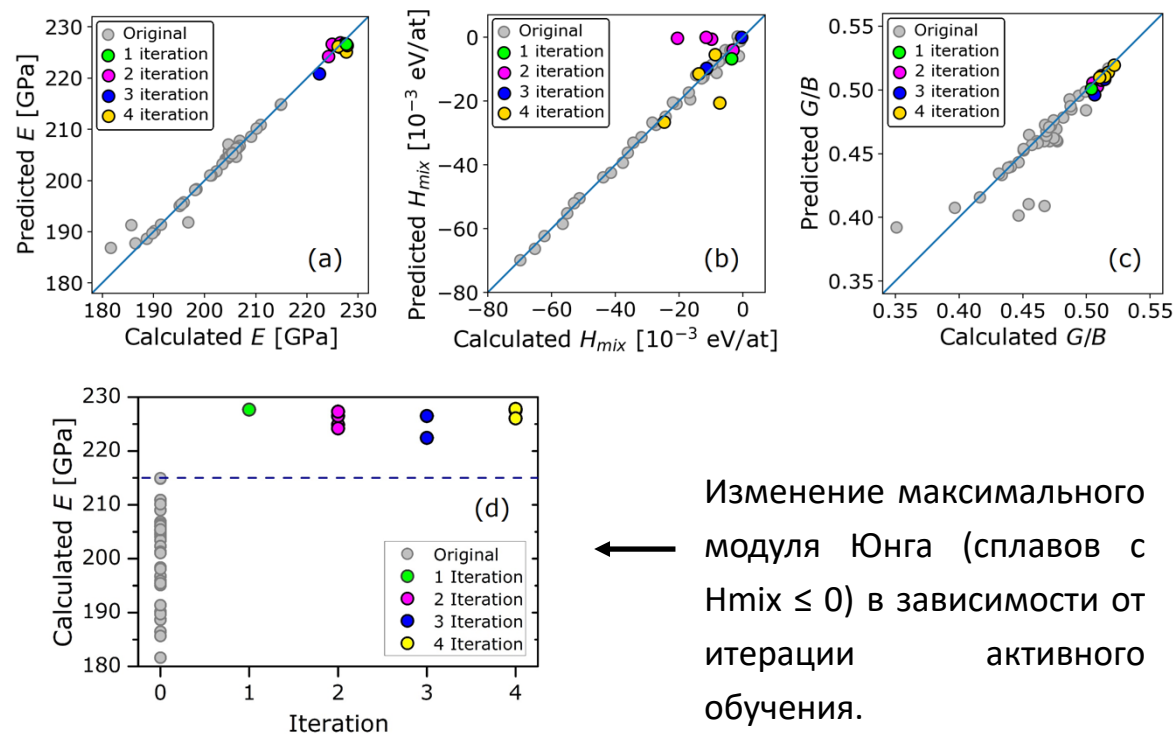
Homo
Science
РОСАТОМ

Машинное обучение: активное обучение

Сплавы отобранные после 4 итераций активного обучения. После каждой итерации к обучаемой выборке добавляются новые сплавы, и модели переобучаются.

Итерация	Состав (wt.%)								Расчет ТФП		
	Fe	Cr	Ni	Mo	V	W	Nb	Al	E , GPa	H_{mix} , eV/at	G/B
1	74	20	0	0	0	0	2	4	225.4	0.0178	0.493
	75	20	0	0	0	0	1	4	226.5	0.0071	0.498
	76	19	0	0	0	0	1	4	225.6	0.0035	0.499
	76	20	0	0	0	0	0	4	227.7	-0.0036	0.504
2	72	22	0	0	0	0	0	6	224.9	-0.0099	0.505
	74	21	0	0	0	0	0	5	226.5	-0.0032	0.508
	71	22	0	0	1	0	0	6	227.3	-0.0115	0.512
	69	21	1	0	2	0	0	7	224.2	-0.0205	0.512
3	65	22	4	0	0	0	2	7	219.3	0.0086	0.496
	64	23	4	0	0	2	0	7	222.4	-0.0004	0.506
	68	24	1	0	0	0	0	7	226.5	-0.0114	0.514
	68	24	1	0	0	0	0	7	226.5	-0.0114	0.514
4	66	25	0	0	0	0	1	8	227.6	-0.0073	0.517
	71	20	0	0	2	0	1	6	227.7	-0.0139	0.514
	71	22	0	0	0	0	1	6	227.8	-0.0087	0.510
	66	25	0	0	0	0	0	9	226.0	-0.0247	0.520

Сравнение предсказанных значений E , H_{mix} , G/B с рассчитанными значениями после каждой итерации. Предсказаны значения E , H_{mix} и G/B для более чем 500000 сплавов на основе Fe-Cr.



← Изменение максимального модуля Юнга (сплавов с $H_{mix} \leq 0$) в зависимости от итерации активного обучения.

B. O. Mukhamedov, I. A. Abrikosov, et al., in preparation

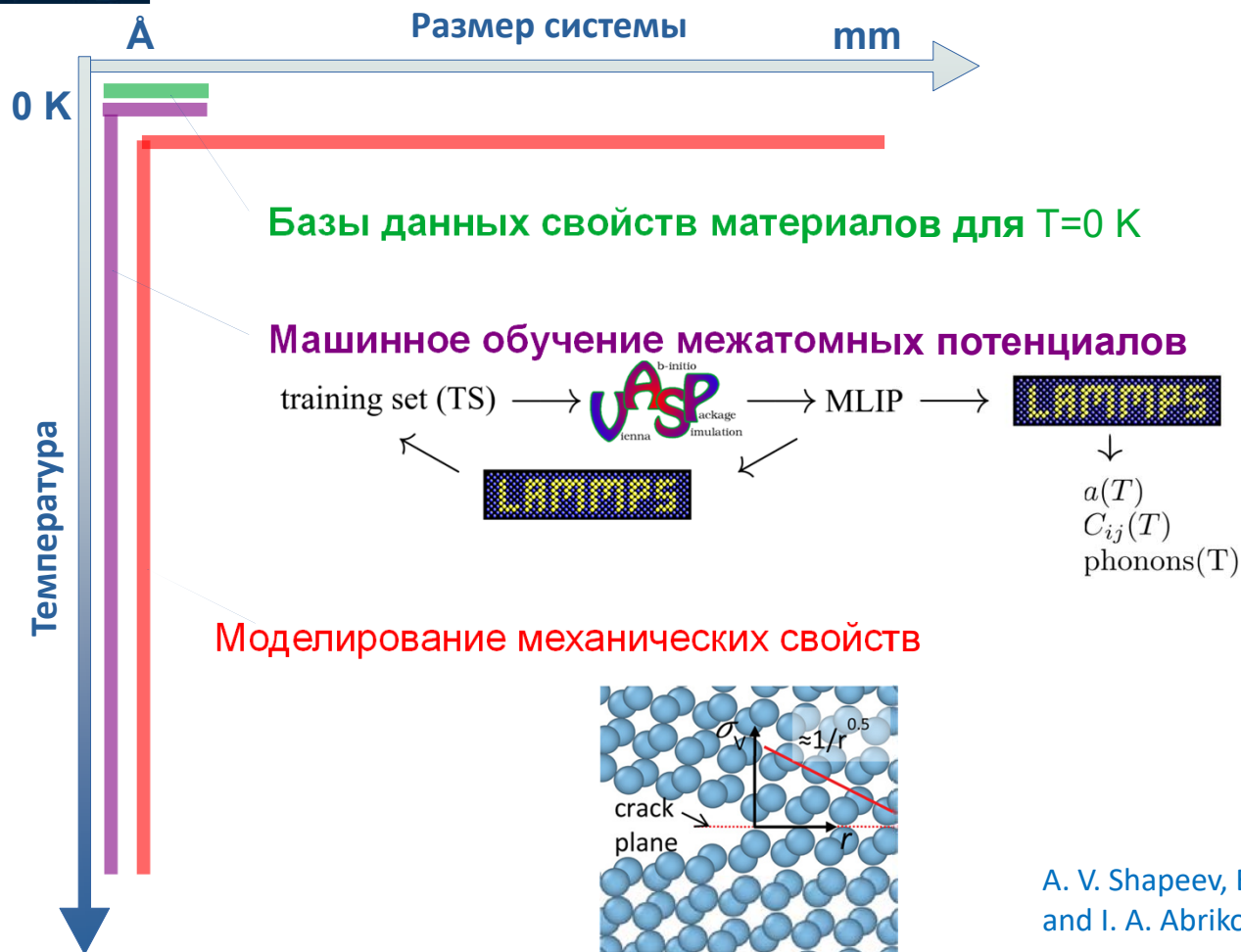


НАУКА
И ИННОВАЦИИ
РОСАТОМ

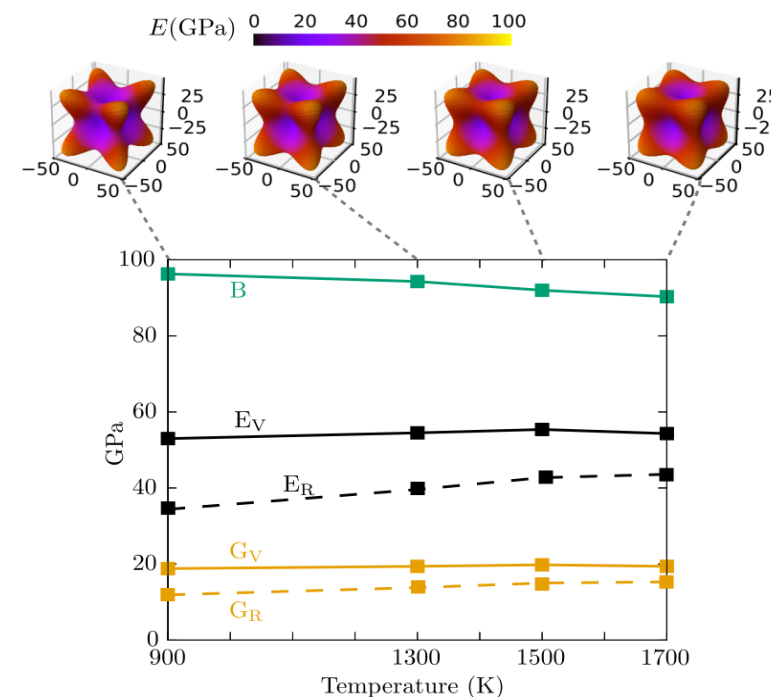


Homo
Science
РОСАТОМ

Расчеты параметров моделей высокого уровня в реальных условиях эксплуатации



Температурная зависимость упругих модулей ОЦК Ti



A. V. Shapeev, E. V. Podryabinkin, K. Gubaev, F. Tasnádi,
and I. A. Abrikosov, New J. Phys. **22** 113005 (2020).



НАУКА
И ИННОВАЦИИ
РОСАТОМ



Homo
Science
РОСАТОМ

Выводы

- Качество данных (параметров моделей) - ключ к успешному использованию методов многомасштабного моделирования.
- Теоретические расчеты и экспериментальная верификация параметров моделей высокого уровня необходимо проводить для реальных условий эксплуатации.
- Для достижения данной цели эффективным инструментом являются расчеты с использованием современных средств компьютерного моделирования, машинного обучения и искусственного интеллекта.
- Высокая гомогенность обучаемой выборки позволяет строить модели машинного обучения высокой точности.

Спасибо

ГОД НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ В РОССИИ



Homo ·
Science
РОСАТОМ

