

ИНИЦИАТИВА «ГЕНОМ МАТЕРИАЛА» В МИРЕ И РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

© 2017 Ф.В. Гречников¹, И.Н. Бобровский², Я.А. Ерисов², А.И. Хаймович¹¹ Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королёва² Самарский научный центр Российской академии наук

Статья поступила в редакцию 30.05.2017

Представлена первая попытка, из известных коллективу авторов, ознакомить научное сообщество с концепцией «Геном материала», которая реализуется в США с 2011 года в рамках инициативы «Materials genome initiative» (MGI). В РФ существует множество коллективов, применяющих отдельные методы, вошедшие в MGI. Однако отсутствуют труды, комплексно представляющие концепцию, описанную в инициативе. В статье приведен анализ результатов применения концепции MGI в США, формализованной в виде набора методов и подходов. Авторы считают, что переосмысление и адаптация методов и подходов, предложенных в MGI позволит сократить время и затраты на разработку новых материалов отечественными исследователями.

Ключевые слова: геном материала, новые материалы, технологии разработки, big data, конструкционные материалы.

ВВЕДЕНИЕ

Недостаточно, по мнению авторов, представлены в русскоязычной литературе современные методы и подходы, вошедшие в MGI и позволяющие получать максимальный эффект по направлениям концепций известных в РФ, таких как Big data, компьютерные технологии для моделирования и производства деталей, аддитивное производство, новые материалы и др. [1, 2].

Особенностью подготовки данной статьи является отсутствие общепринятых аналогов у многих терминов на русском языке. С благодарностью будут приняты любые корректировки и предложения по упомянутым в статье терминам.

Авторами приведено обоснование применимости новых методов на примере зарубежных исследований и подведены некоторые итоги уже ведущихся в РФ исследований на примере конструкционных материалов. Рассмотрение методов MGI в отношении функциональным материалам, мягким материалам и композитам, а также принципов построения киберструктуры планируется выполнить в отдельных публикациях.

Гречников Федор Васильевич, академик РАН, доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой обработки металлов давлением. E-mail: gretch@ssau.ru
Бобровский Игорь Николаевич, кандидат технических наук, научный сотрудник. E-mail: Bo-bri@yandex.ru
Ерисов Ярослав Александрович, кандидат технических наук, инженер отдела металлофизики авиационных материалов. E-mail: yaroslav.erisov@mail.ru
Хаймович Александр Исаакович, доктор технических наук, доцент кафедры обработки металлов давлением. E-mail: berill_samara@bk.ru

ПЕРЕДОВЫЕ ПРОИЗВОДСТВЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ПОСТИНДУСТРИАЛЬНЫХ СТРАНАХ

Интегральным показателем, иллюстрирующим благополучие граждан, является индекс человеческого развития (ИЧР), который исчисляется на основании данных об ожидаемой продолжительности жизни, уровне грамотности и жизни, валовом национальном доходе на душу населения. Один из наиболее высоких показателей ИЧР в мире в США (РФ – 50 место). Преимущество стран-лидеров по ИЧР обеспечивается за счет сосредоточения ресурсов в областях, имеющих наибольшую добавленную стоимость: НИОКР и проектирование. При этом производство (материальная стадия) имеет наименьшую добавленную стоимость и не обеспечивает повышения ИЧР (например, Китайская народная республика – 90 место). Таким образом, повышение благосостояния граждан невозможно без развития научного комплекса страны.

Основные направления НИОКР в развитых странах – создание передовых производственных технологий (ППТ). ППТ представляют комплекс процессов проектирования и изготовления на современном технологическом уровне индивидуализированных материальных объектов (товаров) различной сложности, стоимость которых сопоставима со стоимостью товаров массового производства, в т.ч. в странах с дешевой рабочей силой [3]. ППТ позволяют достичь преимуществ над странами с дешевой рабочей силой, что необходимо для создания не только выгодных внешних условий для привлечения инвестиций, но и конкурентоспособности технологий на мировых рынках. К сожалению, в настоящее время стоимость труда в РФ сравнялась

со стоимостью труда в КНР, что однако не означает уменьшение актуальности ППТ для экономики РФ.

В публичном аналитическом докладе по развитию новых производственных технологий, представленном в октябре 2014 года Сколтехом, выделены четыре направления, формирующие облик перспективного производства в мире:

- 1) компьютерные технологии для моделирования и производства деталей;
- 2) промышленная и сервисная робототехника;
- 3) аддитивное производство;
- 4) новые материалы.

Аддитивные технологии (АТ) являются ППТ, которые могут повысить конкурентоспособность российской экономики и благосостояние граждан [4]. Однако, развитие только внутренних составляющих АТ (технологий и оборудования для получения порошкового материала, синтеза изделия и последующей постобработки без совершенствования сопутствующих направлений не позволяет получить максимального эффекта. Классический цикл разработки новых материалов при переходе на АТ требует пересмотра.

Концепция «Геном материала» позволяет консолидировать усилия по развитию направлений «новые материалы», «компьютерные технологии для моделирования и производства деталей» и «аддитивное производство» путем предоставления единого инструментария, способствующего достижению прорывных результатов за счет применения новых методов и подходов.

ГЕНОМ МАТЕРИАЛА – НОВАЯ ПАРАДИГМА ДЛЯ РАЗВИТИЯ ППТ

В июне 2011 года после речи президента США Обамы на сайте правительства США была представлена инициатива «Геном материала: глобальное превосходство», подготовленная Национальным советом по науке и технологии США.

MGI – набор инструментов, реализующих итеративную концепцию разработки новых материалов, которая позволяет снизить на 50% ресурсоемкость (время и стоимость) цикла [5]. Суть концепции состоит в непрерывном обмене информацией на разных стадиях разработки новых материалов не только в рамках одной предметной области (например, конструкционные или функциональные материалы), а для всех типов материалов (рис. 1). В США сформировано саморегулирующееся общество объединяющие ученых, занимающихся разработкой и коммерциализацией новых материалов по концепции MGI. Накопление массивов информации (Big data), представление инструментов для их использования и создания других инструментов обеспечивает переход из количества в качество. Принципы открытой архитектуры обеспечивает концентрацию новых идей именно в сообществе MGI.

Линейный цикл создания нового материала включает следующие стадии:

- 1) разработка состава материала;
- 2) оптимизация свойств материала;
- 3) проектирование изделий из материала, включая технологии изготовления;
- 4) испытания и сертификация материала;
- 5) коммерциализация материала.

Итеративный цикл, предложенный в рамках концепции MGI, позволяет объединить отдельные этапы по разным направлениям для ускорения достижения результатов (рис. 1).

Необходимость применения нового подхода, реализующего итеративный цикл разработки новых материалов, подкрепляется примером развития ионно-литиевых батарей. Не смотря на прошедшее с момента открытия данного типа материалов время (70-е годы), их потенциал до сих пор не раскрыт, что, например, тормозит развитие электромобилей. Применение методов MGI позволило менее чем за полгода предсказать возможности синтеза более 400 материалов для батарей до непосредственного проведения экспериментальных исследований (при этом с 70-х годов предлагалось «всего» по 150 таких материалов ежегодно).

Формирование концепции MGI стало возможным благодаря успехам в области информационных технологий (ИТ) за последние 10 лет, а именно снижению стоимости передачи и хранения информации, повышению скорости передачи и обработки информации.

По мнению авторов, получение практико-ориентированных результатов с использованием методов MGI возможно в среднесрочной перспективе, следовательно, изучив формат реализации MGI в США необходимо с учетом имеющегося опыта реализовывать собственную инициативу схожей концепции в РФ.

MGI В США

В июне 2014 года был опубликован стратегический план подкомитета по MGI (The Subcommittee on the Materials Genome Initiative, SMGI) технологического комитета национального научно-технологического совета США (The National Science and Technology Council's Committee on Technology, NSTC) для обсуждения и принятия предложений [6]. В SMGI вошли NIST, DoE, NSF, DoD, NASA, NIH, USGS, DARPA в координации с национальной сетью нанотехнологической инфраструктуры (National Nanotechnology Infrastructure Network, NNIN). Итоговый документ пока не опубликован. Также MGI поддерживалась Департаментом Обороны США (DoD), Департаментом Энергетики (DoE), Национальным институтом Стандартов и Технологий (NIST) и NSF.

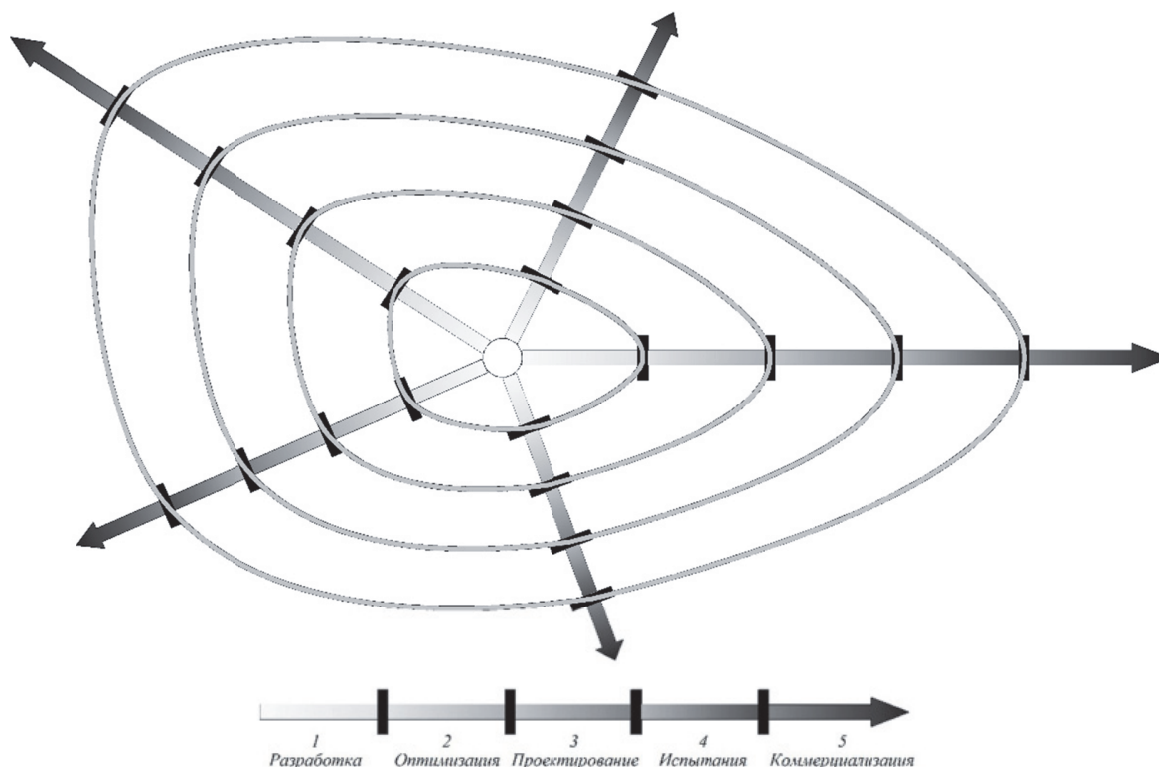


Рис. 1. Итеративная концепция разработки материалов

По проектам MGI поддержанным DoD имеется отрывочная информация, известно, что тематика курируется Центром материалов для экстремальных динамических сред (The Center for Materials in Extreme Dynamic Environments (CMEDE), включающим в свою очередь Университет Джона Хопкинса (John Hopkins University), лабораторию военных исследований (Army Research Laboratory) и 13 других организаций [7].

В открытых источниках присутствует информация только по поддержанным NSF проектам по программе «Разработка материалов для революции и инженерии нашего будущего» (DMREF). Обязательные условия для всех волн конкурса: два научных руководителя из одной или нескольких научных организаций.

Первые 14 проектов были запущены в 2012 году. Почти все проекты были выполнены в кооперации с минимум тремя соисполнителями («Collaboration projects»). Не смотря на скромный для США уровень финансирования первой волны DMREF (общий объем проектов примерно 13\$ млн. на 14 проектов, со средним финансированием в 280\$ тыс. в год на 3-4 года) проекты были представлены из совершенно разных сфер: от разработки пептидов и протеинов до функциональных/электронных/спинтронных кристаллов и конструкционных материалов (табл. 1). Некоторые (3 из 14 проектов) включали также внебюджетное финансирование через программу GOALI (аналог отечественной программы по Постановлению Правительства РФ №218): 2-3 коллектива одной или нескольких

организаций при взаимодействии с промышленным партнером выполняют междисциплинарный проект (общий объем привлеченных средств 5 млн. долл.).

В январе 2014 был объявлен второй конкурс (NSF 14-591) с объемом для каждого проекта 0,5-1,5 млн. долл. и общим финансированием в 22 млн. долл. В январе 2015 был объявлен третий конкурс (NSF 15-608), количество победителей увеличилось с 20 до 25, общий объем финансирования проектов около 30 млн. долл. (0.75-1.6 млн. долл. на проект).

Средний срок между объявлением конкурса и окончанием приема заявок составляет приблизительно один год, срок рассмотрения заявок – от 8 месяцев. Также внимание авторов привлек тот факт, что в конкурсной документации непосредственно перед любыми пояснениями приводится перечень изменений по сравнению с прошлой итерацией конкурса, многократно упрощающий процесс подготовки для участвующих в конкурсе повторно (в отечественных конкурсах подобное авторами не встречалось).

Приоритетными направлениями для отбора по конкурсу 2015 года являются:

- оптимизация технологий разработки сложных высокоразмерных фазовых пространств;
- эффективные методы анализа экспериментальных данных для определения взаимосвязи между свойствами различного уровня (например, между микроструктурой, химсоставом, обработкой и объемными свойствами);

Таблица 1. Перечень проектов, спонсированных NSF в рамках программы в первой волне конкурса DMREF

Название проекта		Руководители проектов	Организации
на английском языке	на русском языке		
Nitride Discovery - Creating the Knowledge Base for Hard Coating Design ¹	Исследование нитридов – Создание базы знаний по методике нанесения износостойких покрытий	Sanjay Khare	University of Toledo
		Daniel Gall	Rensselaer Polytechnic Institute
Discovery, Development, and Deployment of High Temperature Coating/Substrate Systems ²	Исследования, разработка и применение высокотемпературных систем «покрытие-подложка»	Tresa Pollock	University of California-Santa Barbara
Multi-Scale Modeling and Characterization of Twinning-Induced Plasticity and Fracture in Magnesium Alloys ¹	Многоуровневое моделирование и описание процессов деформирования и разрушения магниевых сплавов двойникованием	Sean Agnew	University of Virginia
		Haitham El Kadiri	Mississippi State University
		Mohammed Cherkaoui	Georgia Institute of Technology
Multi-Scale Fundamental Investigation of Sintering Anisotropy ¹	Многоуровневое фундаментальное исследование анизотропии при спекании	Rajendra Bordia	University of Washington
		Eugene Olevsky	San Diego State University
High Efficiency Hierarchical Thermoelectric Composites by Multiscale Materials Design and Development ²	Многоуровневое проектирование и разработка высокоэффективных иерархических термоэлектрических композитов	Jihui Yang	University of Washington
Enhanced Functionalities in 5d Transition- Metal Compounds from Large Spin-Orbit Coupling ¹	Улучшение функциональности переходных металлов 5-го периода за счет сильного спин-орбитального взаимодействия	David Vanderbilt	Rutgers University
		Janice Musfeldt	University of Tennessee
First-Principles Based Design of Spintronic Materials and Devices ¹	Основные принципы разработки спинтронных материалов и устройств	William Butler	University of Alabama, Tuscaloosa
		Avik Ghosh	University of Virginia
Engineering Organic Glasses	Разработка аморфных органических материалов	Lian Yu	University of Wisconsin-Madison
High-Pressure Synthesis of Novel Oxynitride Photocatalysts Directed by Theory and In Situ Scattering	Синтез высокого давления оксинитридных фотокатализаторов на базе теоретических расчетов и исследований In Situ	John Parise	SUNY at Stony Brook
Multifunctional Interfacial Materials by Design	Разработка многофункциональных межфазных материалов	Chang-Beom Eom	University of Wisconsin-Madison
A Fundamental Approach to Study the Effect of Structural and Chemical Composition in Functionalized Graphene Materials	Фундаментальный подход к исследованию структурного и химического состава функциональных графеновых материалов	Horacio Espinosa	Northwestern University
Computational and Experimental Discovery and Development of Additives for Novel Polymer Morphology and Performance ²	Численное и экспериментальное исследование и разработка добавок для новых полимерных структур и их свойств	Gregory Rutledge	Massachusetts Institute of Technology
Programmable Peptide-Based Hybrid Materials ¹	Программируемые гибридные материалы на основе пептидов	Darrin Pochan	University of Delaware
		Jeffery Saven	University of Pennsylvania
Simulation-Based Design of Functional Sub-nanometer Porous Membranes ¹	Моделирование и разработка функциональных субнанометровых пористых мембран	Sinan Ketten	Northwestern University
		Ting Xu	University of California-Berkeley

Примечания:

1 - совместные исследования академических организаций;

2- исследования в интересах промышленных предприятий

- фундаментальные исследования поведения материалов;
- инструменты для анализа экспериментальных данных и взаимосвязь между экспериментальными данными и прогнозным моделированием;
- пересмотр теорий, доработка моделей и методов, постановка новых экспериментов, обусловленные расхождением между теорией, новыми экспериментальными данными и моделированием.

Результаты каждого проекта, поддержанного NSF, взаимосвязаны, что позволяет обеспечить максимальную точность разрабатываемых моделей, которая подтверждается экспериментальными исследованиями, планируемыми в соответствии с теорией и моделированием. Проекты стирают границы между широким спектром материалов в областях, где уже применяются численные методы – конструкционные материалы, в том числе композиционные, до тех областей, где они еще почти не используются – мягкие материалы (жидкости, полимеры, гели, порошки и т.п.).

Установить суть применяемых в MGI подходов можно на основании проведенного в 2013 году в США семинара по проектам первой волны DMREF, [8]. Было подчеркнуто, что модели поведения для монокристаллов и модели механики сплошных сред разработаны в достаточной степени, тогда как мезомасштабные модели, соединяющие оба элемента, не могут в достаточной степени точно описать комплексные структурно-зависимые характеристики. В рамках семинара было представлено текущее состояние моделирования в материаловедении и сделана попытка сформулировать иерархию характеристик материалов в зависимости от надежности и простоты их определения, исходя из базовых принципов, например, таких как теория функционала плотности Кона-Шэма, с учетом микроструктуры (табл. 2).

Также была представлена дополнительная точка зрения, в которой было описано значение стохастической природы микроструктуры материалов и зависимых микроструктурных характеристик. В качестве подтверждения тезиса были приведены специфические примеры техник глубинного анализа больших, взаимосвязанных и многомерных данных о структуре и свойствах материалов, а также технологиях их обработки. Продемонстрировано, что даже такие простые технологии анализа, как метод главных компонент, могут быть мощными инструментами для определения связей между структурой и характеристиками. В целом был сделан вывод о «необходимости глобальных трансформаций (включая культурные изменения) в подходах к разработке материалов и протоколов» для достижения целей MGI.

MGI В КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛАХ

Подходы MGI активно применяются при разработке конструкционных материалов и технологий их обработки. В зависимости от моделируемого свойства, объекта, процесса выделяют атомный-, микро-, мезо- и макроуровни, соответственно условные диапазоны размеров:

$0 < A - nm, nm - \mu m, \mu m - mm, > mm$. Для каждого уровня характерны определенные методы моделирования (табл. 3).

Моделирование на атомном уровне широко применяется при разработке новых материалов и прогнозировании их свойств. Используются численные молекулярно-динамические модели, а также теория функционала плотности Кона-Шэма.

На микроуровне определяются данные о стабильности фаз, как входных данных для термодинамических моделей, применяемых для расчета фазовых диаграмм и диаграмм кристаллизации.

Таблица 2. Иерархия сложности некоторых характеристик материалов с точки зрения моделирования

Степень реализации	Характеристики материала
Реализуемые на данный момент	модули упругости, характеристики монокристалла (без микроструктуры)
Практически осуществимые	механические свойства (предел текучести, предел прочности, коэффициенты Лэнкфорда)
Представляющие сложность	деформационное упрочнение, пластичность, усталостная прочность, теплопроводность, электропроводность, водородное охрупчивание
Труднодостижимые	коррозия, жидкометаллическое охрупчивание, сварка

Таблица 3. Некоторые методы и программное обеспечение для моделирования на разных уровнях представления материалов

Уровень	Методы моделирования	Исследуемые объекты/ процессы	Программное обеспечение
Атомный	Квантовая механика Теория функционала плотности Молекулярная динамика	Кристаллы, геометрия молекул, энтропия, энтальпия, химические реакции, электрические свойства, трибология	VASP [9] FLAPW [10] LAMMPS [11] Materials Project [12]
Микро	Молекулярная динамика Метод Монте Карло Потенциал Леннарда Джонса	Вязкость, фазовое равновесие, уравнения состояния, полимеры, реология жидких сред	ThermoCalc [13] Pandat [14] FACTSage [15]
Мезо	Дислокационная теория Метод Монте Карло Метод клеточных автоматов Модель фазового поля Метод конечных элементов	рост зерен, кристаллизация, фазовые превращения, дислокации, диффузия, упругость, пластичность и механика разрушения поликристаллов	MICRESS [16] ParaDis [17] VPSC [18] UMAT [19] DAMASK [20] ABAQUS [21]
Макро	Численные методы механики сплошных сред: -метод конечных элементов; -метод конечных объемов; -метод конечных разностей.	Течение жидких сред, упругость, пластичность и механика разрушения макрообъектов	ANSYS ABAQUS NASTRAN LS-DYNA

Задачи, решаемые моделированием на мезоуровне, лежат на стыке микро- и макроуровней. Коммерческих программных продуктов для моделирования на мезоуровне практически нет, однако разработано большое количество пользовательских подпрограмм расширяющих возможности стандартных вычислительных пакетов. При этом используются такие вычислительные методы как модель фазового поля, дискретная дислокационная динамика, физическая теория пластичности и др.

На макроуровне с использованием методов конечных элементов и разностей решаются задачи механики сплошных сред. В последнее время активно развивается подход, связанный со созданием структурных и мультифизических моделей на основе МКЭ [22].

Для большинства проектов, выполняемых в рамках MGI, характерно комплексное использование моделей различных уровней для всестороннего изучения создаваемых материалов и технологий их обработки. Например, в проекте направленном на совершенствование процессов создания и обработки керамических материалов, применяется как МКЭ (макро), так и кинетический метод Монте-Карло (мезо).

ГЕНОМ МАТЕРИАЛА В РФ: ТЕКУЩЕЕ СОСТОЯНИЕ

В РФ реализуется несколько направлений, для которых применение методов и подходов MGI было бы полезно: «Новые материалы» и «BigData» (реализуются Агентством Стратегических Инициатив), «Аддитивные технологии» (Фонд перспективных исследований). Научные области, реализуемые с использованием концепции MGI, не являются новыми, однако, новизна заключается в методах и подходах реализации задач.

Достижение цели по созданию ППТ, позволяющих достичь высокой степени обороноспособности и благосостояния за счет технологического лидерства, возможно в РФ лишь при кооперации ведущих организаций.

Авторы статьи считают, что применение методов MGI для их научных направлений позволит достичь новых научных результатов в более сжатые сроки и расширить применение результатов их научных исследований в труднодоступные ранее области. MGI является связующим звеном между отдельными научными направлениями авторов.

Одной из фундаментальных механических характеристик металлических материалов, от-

ражающей их кристаллическое строение и последующее текстурообразование при больших пластических деформациях, является анизотропия физико-механических свойств [23]. В научно-технической литературе рассмотрено большое количество примеров существенного влияния естественной анизотропии свойств кристаллов, как на процессы пластического деформирования, так и на служебные характеристики самых различных изделий [24, 25]. Примером целенаправленного формирования и эффективного использования преимущественной кристаллографической ориентации (КГО) структуры являются материалы для микроэлектроники, трансформаторные стали, конденсаторная лента и т.д. [26].

Что же касается публикаций по исследованию влияния анизотропии на процессы пластической деформации металлов и сплавов, то в них отражено, в основном, ее негативное проявление, приводящее к искажению формы и размеров деталей, ограничению допустимой степени формообразования, завышению толщины, диаметра заготовок и обусловленные этим потери металла, увеличение веса конструкций [27]. Предлагаемые решения этих проблем сводятся, как правило, к механическому учету фактора анизотропии в технологических расчетах и рекомендациям по соответствующей корректировке формы и размеров заготовки и инструмента [28].

Вместе с этим в ряде работ отмечается, что в отличие от однозначного поведения изотропной среды при формообразовании анизотропных листов и лент могут существенно повышаться деформационные возможности металла и эксплуатационные характеристики изделий в определенных направлениях. Показательной в этом отношении является работа [29], в которой установлено, что независимо от многократных колебаний величины относительного удлинения (от 3% до 60%) предельная степень вытяжки заготовки постоянно увеличивается именно с повышением показателя анизотропии. Следовательно, перспективным направлением повышения технологических свойств заготовок и эксплуатационных параметров изделий является формирование в листах при прокатке, заданной КГО структуры, обеспечивающей требуемые значения показателей анизотропии для конкретных процессов формообразования и условий эксплуатации.

Классическая теория пластичности не имеет в своем аппарате переменных, отражающих свойства или параметры КГО структуры материала [24, 30]. В результате этого образовался естественный пробел в теории, не позволяющий учесть КГО листа в технологических расчетах процессов обработки давлением, а главное априорно расчетным путем определить КГО струк-

туры, отвечающей требованиям повышения деформационных возможностей материалов и эксплуатационных характеристик изделий.

Развитие данного направления возможно только при условии применения принципов и подходов MGI, т.к. требует моделирования на всех уровнях, начиная атомным и заканчивая макроуровнем.

Еще одним возможным направлением применения MGI являются АТ. Технологии прямого и послойного лазерного синтеза позволяют получить изделия с направленной анизотропией свойств, благодаря возможности управления траекторией движения лазера при сплавлении, назначении таких технологических параметров, как диаметр пятна лазера, линейная плотность энергии, геометрия сканирования. Формирование изделия с участками, различающимися по характеристикам в зависимости от локальных условий нагружения, возможно за счет применения технологий прямого лазерного выращивания. Возможность проектирования топологии макроструктуры синтезируемого материала является одним из основных преимуществ АТ в рамках концепции создания «умных» материалов (smart materials). Вместе с тем, укладка сплавляемых частиц и их размер во многом носят стохастический характер, что приводит к структурной неоднородности материала и появлению дефектов в виде остаточной пористости. Кроме того, несмотря на применении технологии повторного проплавления поверхностного слоя, полученная шероховатость не удовлетворяет техническим требованиям. В этой связи широкое распространение получили методы постобработки синтезированных деталей, которые подразделяются на технологии объемного воздействия – горячее изостатическое прессование в газостатах (ГИП) и технологии поверхностного воздействия – отделочная механическая (лезвийная или абразивная) обработка, электрофизические и электрохимические методы, методы модификации поверхностного слоя.

Особое внимание при этом следует обратить на способы прогнозирования свойств готовых изделий с учетом их неоднородности, а также на методы коррекции этих свойств, например, с помощью модификации поверхностного слоя изделий.

Применение технологий модификации поверхностного слоя позволит расширить возможности АТ путем формирования новых функциональных свойств поверхностного слоя синтезированных изделий.

Авторы считают, что развитие и использование методов MGI при проектировании АТ позволит повысить точность прогнозирования свойств материала изделий и их поверхностного слоя после его модификации. Поверхностное пластическое деформирование (ППД) является

одним из наиболее развитых методов модификации поверхностного слоя, разработанных отечественными учеными [2].

ППД представлено комплексом технологий, выбираемых в зависимости от специфики производства (аэрокосмический или автомобилестроительный сектор). ППД позволяет влиять на большинство параметров топографии поверхности, включающей в себя следующие группы параметров [31]: структуру (характерные признаки), форму (плоскостность, цилиндричность, сферичность), текстуру (шероховатость и приповерхностные слои на глубину до 100 нм).

Влияние на текстуру и структуру позволит формировать свойства готовых изделий, не только в очевидной области повышения микротвёрдости поверхностного слоя, но и в обеспечении повышенной антикоррозионной и эрозионной стойкости; а также трещиностойкости за счет формирования напряжений сжатия.

ГЕНОМ МАТЕРИАЛА В РФ: АСПЕКТЫ РАЗВИТИЯ

Целесообразным, по мнению авторов, является адаптация подходов, предложенных учеными развивающими концепцию MGI в США, с учетом специфики отечественных научных направлений. При этом с учетом низкой вероятности принятия отечественных научных организаций в качестве соисполнителей в проекты связанные с MGI в США требуется развитие собственной многодисциплинарной инициативы. Далее рассмотрены аспекты развития наиболее важные при создании такой структуры в РФ.

Международная кооперация. Возможна по некоторым научным направлениям с зарубежными учеными, в т.ч. выходцами из бывшего СССР с помощью Международной ассоциации русскоговорящих ученых (RASA). Активно действует созданный RASA совместно с СПбПУ в 2014 г. Центр «RASA-Политех», руководство центра готово к сотрудничеству не только с СПбПУ, но и другими организациями РФ.

Целесообразно привлечение ученых, которые могут способствовать формированию центров компетенций по концепции MGI в РФ в рамках постановления №220. Так, например, среди научных руководителей проекта программы DMREF в США одним из соруководителей проекта «Многомерное фундаментальное исследование анизотропии при спекании» является Олевский Е.А., который также возглавляет лабораторию электромагнитных методов производства новых

материалов в МИФИ, созданной в рамках Постановления Правительства РФ №220.

Консорциумы. Создание новых компетенций в текущих внешних условиях, а также с учетом изменяющейся экономической ситуации, требует консолидированных усилий научных коллективов ведущих организаций РФ. Необходимостью также является расширение взаимодействия между исследовательскими и промышленными организациями, что подтверждается позитивным опытом совместных проектов в рамках подпрограмм GOALI в США.

В настоящее время реализация подобной работы в РФ требует определенных усилий. В РФ имеется положительный опыт выполнения проектов формата «наука-производству» по постановлению Правительства РФ № 218. Однако, современное производство включает в себя сложные цепочки поставок, включающие десятки и сотни предприятий, промышленные мощности которых требуют новых наукоемких решений. Следовательно, даже в рамках одного региона требуется координация целей и задач по различным отраслям и предприятиям. В регионах РФ данная проблема решается, в т.ч. созданием региональных агентств науки и технологий.

Оборонно-промышленный комплекс. Исходя из личного опыта авторы осознают, что в открытом доступе находится около 10% материалов, касающихся MGI в США, с учетом ее поддержки такими организациями как DoD, DoE, NIST и др. Необходимо при разработке подробного плана реализации концепции «Геном материала» предусмотреть несколько уровней реализации, включающих как общенаучные, так и стратегические направления исследований для потребностей оборонного сектора.

Образование. Ученым, развивающим MGI в США, одной из основных преград на пути развития MGI представляются не технические трудности, а трудность подбора новых молодых исследователей [8]. Для обеспечения кадрами формируемой исследовательской системы требуется введение в курсы подготовки бакалавров и магистров новых дисциплин. С учетом преобразования аспирантуры в отдельную ступень образования, также целесообразно введение элементов, касающихся методов, используемых в MGI.

В мае 2016 года на заседании научно-координационного совета при ФАНО ак. Хохловым А.Р. были представлены формы интеграции учебной и научной деятельности в РФ: совместные НИР, создание НИИ лабораторий в ВУЗах, создание кафедр ВУЗов в НИИ. Планируется поддержка наиболее активных интегрированных структур

после составления «Карты партнерства». Возможно, создание подобных структур целесообразно и для развития концепции MGI в РФ.

Ядро. Ядром концепции «Геном материала» в РФ, по нашему мнению, может выступить консорциум «Новые материалы и аддитивные технологии» включающий, в настоящее время: ВИАМ, СПбПУ, МГТУ им. Н.Э. Баумана [32]. Расширение сферы деятельности консорциума возможно путем разработки методики включения новых членов в консорциум. Вновь формируемое сообщество исследователей, объединенное общими целями и обеспеченное инструментами взаимодействия, будет представлять собой устойчивую систему.

Киберструктура. Широко принятой концепцией проведения НИР в зарубежных странах является интеграция отдельных методов и подходов, разработанных исследователями в рамках локальных научных коллективов или университетов, в единую систему знаний. Кроме известных традиционных путей в виде публикаций активно развиваются интерактивные интернет порталы, на которых доступны онлайн разработанные модели. К сожалению, данная форма проведения исследований в РФ все еще широко не применяется. Авторы считают целесообразным создание отечественного портала по тематике «Геном материала», как платформы для обмена теориями, результатами экспериментов и симуляций. Первым этапом работы по созданию портала является формирование шаблонов цифровых данных о материалах для обеспечения в дальнейшем единства принципов расчета [33].

Проблема постановки задач в единой терминологии. Одной из первых проблем, которую будет необходимо решить, является выработка единой терминологии для правильного понимания терминов, которые отсутствуют в зарубежных стандартах и тем более отечественных государственных стандартах. Данная работа не может быть выполнена императивно, т.к. разнообразие тематик столь велико, что неверно выбранные трактовки терминов для отдельных узких областей будут негативно сказываться на принятии концепции в целом.

Кроме того, необходимо учитывать структурные и культурные различия в проведении исследований в США и РФ при построении аналогичной саморегулирующейся системы в РФ, например, в США лаборатории являются самостоятельной единицей, генерирующей новые знания и могут по масштабу сравниться с институтами в РФ, а лаборатории в РФ – это небольшие мобильные группы ученых, обеспеченные малым количеством различного оборудования.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Общим выводом, сделанным авторами по результатам анализа публикаций и программных материалов по MGI, является необходимость формирования собственных инициатив в РФ. Целесообразным авторам кажется создание рабочей группы по формированию концепции инициативы на базе Российской академии наук для дальнейшей совместной работы с ФАНО. Формирование в настоящее время перечня экспертов РАН позволит привлечь к работе ученых из РФ, в т.ч. из образовательных организаций. При этом успешность инициативы будет определена готовностью к участию в ее развитии со стороны Министерства образования и науки РФ, Министерства промышленности и торговли РФ, а также фондов РФФИ и РНФ.

Невозможно и нецелесообразно «скопировать» имеющийся в США опыт MGI, однако можно его адаптировать, приоритизировать направления, консолидировать усилия промышленных и исследовательских организаций для ускорения разработки новых материалов и получить результаты мирового уровня на базе существующих в РФ научных направлений. С учетом области применения методов MGI возможно выделение не одного, а нескольких направлений для дальнейшего развития, соответствующим вызовам, с которыми Российская Федерация может столкнуться в среднесрочной, долгосрочной и дальнесрочной перспективе.

Главной целью запуска отечественной инициативы авторы считают не только экономию средств на разработке новых материалов, а сокращение сроков их разработки, т.к. именно скорость появления новых образцов военной и гражданской техники определяет конкурентоспособность государств. Данный аспект отмечается в послании президента России Владимира Путина Федеральному Собранию, в котором предложено реализовать национальную технологическую инициативу, которая позволила бы обеспечить безопасность нашего государства, высокое качество жизни людей, развитие отраслей нового технологического уклада. В послании приводится цитата Н.М. Карамзина, которая точно отражает цель предлагаемой к реализации концепции: «Кто сам себя не уважает, того, без сомнения, и другие уважать не будут. Не говорю, что любовь к Отечеству должна ослеплять нас и уверять, что мы всех и во всем лучше. Но русский должен знать цену свою».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Grechnikov F.V., Antipov V.V., Erisov Y.A., Grechnikova A.F. A manufacturability improvement of glass-fiber reinforced aluminum laminate by forming an effective crystallographic texture in V95 alloy sheets // Russian Journal of Non-Ferrous Metals. 2015. Vol. 56, № 1. Pp. 39-43.
2. Bobrovskij N.M., Melnikov P.A., Grigoriev S.N., Bobrovskij I.N. Modeling of Surface Topography After Burnishing Processing // Applied Mechanics and Materials. 2015. Vol. 770. Pp. 397-401.
3. Дежина И., Пономарев А. Перспективные производственные технологии: новые акценты в развитии промышленности. Форсайт. М.: ВШЭ, 2014. Т. 8. № 2. С.16–29.
4. Материалы, из которых сделаны крылья родины / Независимая газета №86 от 27.04.2016. URL: http://www.ng.ru/science/2016-04-27/9_wings.html (дата обращения: 23.05.2016).
5. Materials Genome Initiative. URL: <https://www.mgi.gov> (access date: 29.05.2016).
6. Materials Genome Initiative Strategic Plan, Federal Register. 2014. URL: <https://federalregister.gov/a/2014-14392> (access date: 29.05.2016).
7. Center for materials in extreme dynamic environments (CMEDE). URL: <http://hemi.jhu.edu/cmede> (access date: 29.05.2016).
8. Feldman K., Agnew S.R. The Materials Genome Initiative at the National Science Foundation: A Status Report after the First Year of Funded Research // JOM. 2014. Vol. 66, № 3. Pp. 336-344. DOI: 10.1007/s11837-014-0888-0
9. Vienna Ab initio Simulation Package (VASP). URL: <http://www.vasp.at> (access date: 29.05.2016).
10. Full Potential Linearized Augmented PlaneWave (FLAPW). URL: <http://www.flapw.de/pm/index.php> (access date: 29.05.2016).
11. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. URL: <http://lammps.sandia.gov/> (access date: 29.05.2016).
12. The Materials Project. URL: <http://www.materialsproject.org> (access date: 29.05.2016).
13. Thermo-Calc Software. URL: <http://www.thermocalc.com/> (access date: 29.05.2016).
14. CompuTherm LLC. URL: <http://compuTherm.com> (access date: 29.05.2016).
15. FACTSage. URL: <http://www.factsage.com/> (access date: 29.05.2016).
16. The MICROstructure Evolution Simulation Software (MICRESS). URL: <http://web.micress.de/> (access date: 29.05.2016).
17. The Parallel Dislocation Simulator (ParaDiS). URL: <http://paradis.stanford.edu/> (access date: 29.05.2016).
18. Dr. Ricardo A. Lebensohn, VPSC (ViscoPlastic Self-Consistent) Code. URL: <http://public.lanl.gov/lebenso> (access date: 29.05.2016).
19. User Material Subroutine for Single Crystal Plasticity. URL: http://www.columbia.edu/~jk2079/Kysar_Research_Laboratory/Single_Crystal_UMAT.html (access date: 29.05.2016).
20. DAMASK — the Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit. URL: <https://damask.mpie.de/Home/WebHome> (access date: 29.05.2016).
21. Abaqus Unified FEA. URL: <http://www.3ds.com/products-services/simulia/products/abaqus/> (access date: 29.05.2016).
22. 1st World Congress on Integrated Computational Materials Engineering // The Minerals, Metals & Materials Society (TMS). July 10-14, 2011. URL: <http://www.tms.org/meetings/specialty/icme2011/home.aspx> (access date: 29.05.2016).
23. Гречников Ф.В. Деформирование анизотропных материалов. М.: Машиностроение, 1998. 446с.
24. Grechnikov F.V., Erisov Y.A. Virtual material model with the given crystallographic orientation of the structure // Key Engineering Materials. 2016. Vol. 684. Pp. 134-142.
25. Wu X.J., Wallace W., Raizenne M.D., Koul A.K. The orientation dependence of fatigue-crack growth in 8090 Al-Li plate // Metallurgical and Materials Transactions A. 1994. Vol. 25. № 3. Pp. 575-588.
26. Moses A.J. Electrical steels. Past, present and future developments // IEE Proceedings A: Physical Science. Measurement and Instrumentation. Management and Education. Reviews. 1990. Vol. 137. Pp. 233-245.
27. Barlat F. Crystallographic texture, anisotropic yield surfaces and forming limits of sheet metals // Materials Science and Engineering. 1987. Vol. 91(C). Pp. 55-72.
28. Lo S.-W., Lee J.-Y. Optimum blank shapes for prismatic cup drawing - Consideration of friction and material anisotropy // Journal of Manufacturing Science and Engineering, Transactions of the ASME. 1998. Vol. 120 (2). Pp. 306-315.
29. Wilson D.V. Plastic anisotropy in sheet metals // J. Inst. Metals. 1966. Vol. 94. № 84. Pp. 3-8.
30. Erisov Y.A., Grechnikov F.V., Surudin S.V. Yield function of the orthotropic material considering the crystallographic texture // Structural Engineering and Mechanics. 2016. Vol. 58. Iss. 4. Pp. 677-687.
31. Ковальчук М.В., Тодуа П.А. Нанотехнологии, метрология, стандартизация и сертификация в терминах и определениях. М.: Техносфера. 2009. С. 136.
32. Ректор СПбПУ А.И. Рудской и генеральный директор ВИАМ Е.Н.Каблов подписали соглашение о научно-производственном консорциуме, 24 декабря 2015 г. URL: <http://www.spbstu.ru/media/news/partnership/rector-spbpu-ai-rudskoy-general-director-viam-en-kablov/> (дата обращения: 29.05.2016).
33. Grechnikov F.V., Khaimovich A.I. Development of the

requirements template for the information support system in the context of developing new materials involving Big Data // CEUR Work-shop Proceedings

Information Technology and Nanotechnology (ITNT – 2015). 2015. Pp. 364-375. DOI: 10.18287/1613-0073-2015-1490-364-375.

MATERIALS GENOME INITIATIVE IN THE WORLD AND RUSSIAN FEDERATION

© 2017 F.V. Grechnikov¹, I.N. Bobrovskii², Ya.A. Erisov², A.I. Khaimovich¹

¹Samara National Research University

²Samara National Research University named after Academician S.P. Korolyov

The first of the known to the team of authors attempt is presented to familiarize the scientific community with the concept of the «Materials genome», which is being implemented in the USA since 2011 as part of the «Materials genome initiative» (MGI). In the Russian Federation there are many teams that apply individual methods that are included in the MGI. However, there are no works that fully represent the concept described in the initiative. The article analyzes the results of the application of the MGI concept in the USA, formalized in the form of a set of methods and approaches. The authors believe that rethinking and adapting the methods and approaches proposed by MGI will reduce the time and costs for the development of new materials by domestic researchers.

Keywords: Materials genome, new materials, development technologies, big data, structural materials.

Fedor Grechnikov, Full Member of Russian Academy of Science, Doctoral Degree in Engineering, Professor, Head of Metal Forming Department. E-mail: gretch@ssau.ru

Igor Bobrovskii, Candidate Degree in Engineering, Researcher. E-mail: Bobri@yandex.ru

Yaroslav Erisov, Candidate Degree in Engineering, Engineer at the Physics of Aviation Materials Department.

E-mail: yaroslav.erisov@mail.ru

Aleksandr Khaimovich, Doctoral Degree in Engineering, Associate Professor of Metal Forming Department.

E-mail: berill_samara@bk.ru