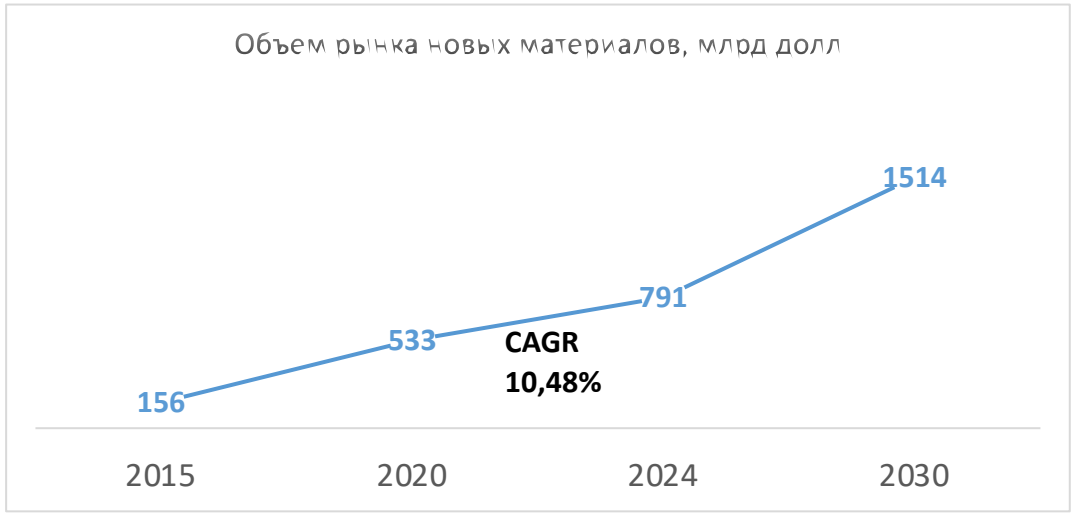
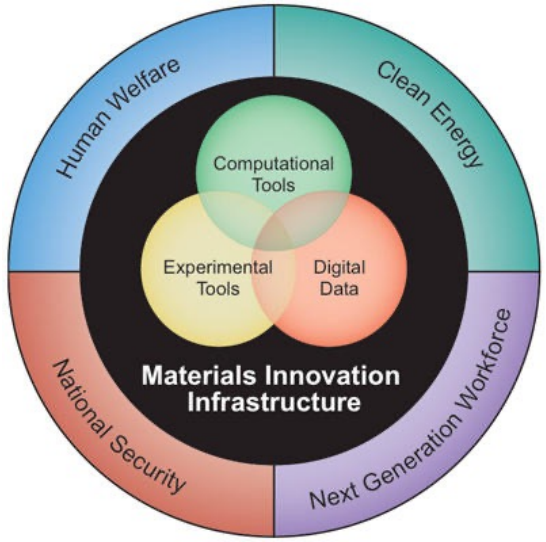
ЦИФРОВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ





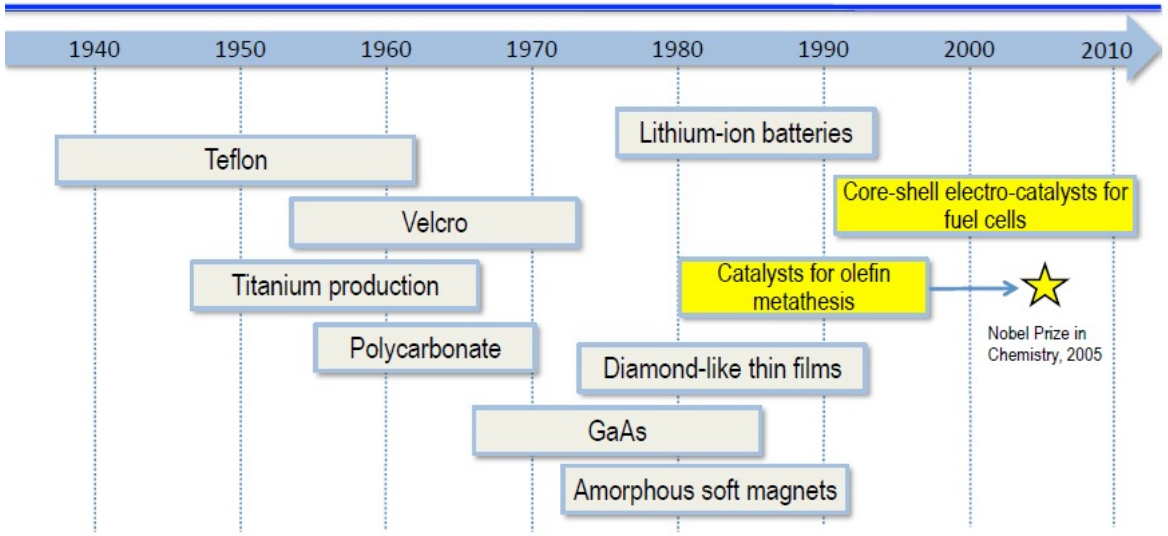
Национальные материаловедческие инициативы:

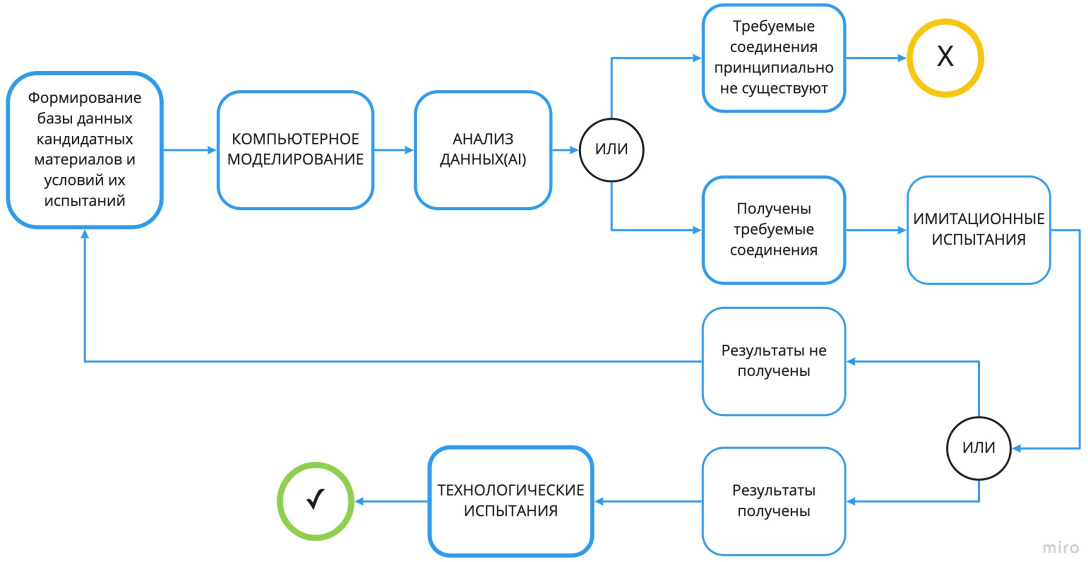
США, 2005 год, 100 млн долл/год - Materials Genome initiative

КНР, 2010 год, ок 70 млн. долл/ год China MGI

Европейский союз, 2012 год, 30 млн долл/год – NoMaD

Ключевые открытия новых материалов 20го века





ПРЕДПОСЫЛКИ ПРОЕКТА

фонды материалов отечественных институтов

>1 млн

записей о свойствах

уровень оцифровки

< 30 %

32

материаловедческие организации

ЦЕЛИ ЗАКРЕПЛЕНЫ НА ГОСУДАРСТВЕННОМ УРОВНЕ:

1. Стратегия национальной безопасности
2. Национальные цели развития Российской Федерации
3. Приоритетный проект социально-экономического развития «Новые материалы»
4. Решение Совета по образованию и науке при Президенте Российской Федерации от 18 апреля 2021 г.

ИСТОЧНИКИ ОПРЕДЕЛЕНЫ:

1. Госпрограмма «Развитие промышленности и повышение ее конкурентоспособности»
2. Госпрограмма «Развитие науки и технологий»
3. Приоритетный проект «Новые промышленные технологии»

НАЦИОНАЛЬНАЯ ЗНАЧИМОСТЬ

ПРОБЛЕМА	РЕШЕНИЕ	ЧТО ПОЛУЧАЕМ
ФИНАНСИРОВАНИЕ НАУКИ НЕ НАПРАВЛЕНО НА ДОСТИЖЕНИЕ НАЦИОНАЛЬНЫХ ЦЕЛЕЙ		
1. Большие объемы государственного финансирования не стимулируют вовлечения науки в решение практических задач достижения национальных целей	совмещение промышленных НИОКР и научных грантов за счет встречного интереса в получении софинансирования	Новые материалы с практическим внедрением в промышленное производство на основе НИОКР выполненных с привлечением государственных субсидий
ОТЕЧЕСТВЕННЫЕ РАЗРАБОТКИ ДОРОГИ И НЕДОСТУПНЫ ДЛЯ КОММЕРЧЕСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ		
2. Преобладание технологического заимствования вместо вовлечения отечественных разработок в создание новых технологий	- стандартизация моделей данных, - оцифровка фондов, - мета-база данных с умным параметрическим поиском материалов - предсказательные алгоритмы поиска новых материалов	- цифровые базы данных стандартных моделей, в том числе для коммерческого использования, невозможность переиспользования старых разработок для получения нового финансирования, - сетецентричная модель разработки новых материалов на основе алгоритмов искусственного интеллекта
НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ ВОСПИРИНМАЮТСЯ КАК ФАНТАСТИКА, А НЕ ОСНОВА ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО РАЗВИТИЯ		
3. Отсутствие образовательной инфраструктуры для замены эмпирического материаловедения на цифровое	- образовательный и практические модули цифрового материаловедения для образовательных программ использующие централизованный доступ к базам данных и вычислительным мощностям, обеспечивающие непрерывное обучение поискового механизма новых материалов	- специалистов по созданию и практическому применению новых материалов - развитие профессий будущего*:

НАУКА ДЛЯ НАЦИОНАЛЬНЫХ ПРИОРИТЕТОВ

ФОРМУЛА: 1% привлекаемых субсидируемыми компаниями средств на НИОКР расходуется на исследование новых материалов, при этом для реализации таких работ должен быть получен научный грант на смежное исследование.

НАУЧНЫЙ ГРАНТ	**+**	**СРЕДСТВА СУБСИДИРУЕМЫХ КОМПАНИЙ**	**=**	**МОТИВ ПОЛУЧЕНИЯ ПРАКТИЧЕСКИХ РЕЗУЛЬТАТОВ**
1. гарантия качественной экспертизы 2. привлечение передовых ученых 3. признание результатов международным научным сообществом		1. гарантия востребованности разработок реальным сектором 2. софинансирование промышленностью		удвоение средств на разработку новых материалов в интересах реализации национальных приоритетов и обеспечение их практического применения исключая дополнительные бюджетные расходы
грантов на новые материалы >1000 9% от общего числа грантов 250 млн рублей/год		субсидии на НИОКР для промышленных предприятий ок 11 млрд руб/ год 120 млн рублей/год		**до 400 млн руб/год** СОВОКУПНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ИССЛЕДОВАНИЙ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ В ИНТЕРЕСАХ ДОСТИЖЕНИЯ НАЦИОНАЛЬНЫХ ЦЕЛЕЙ

ДАННЫЕ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

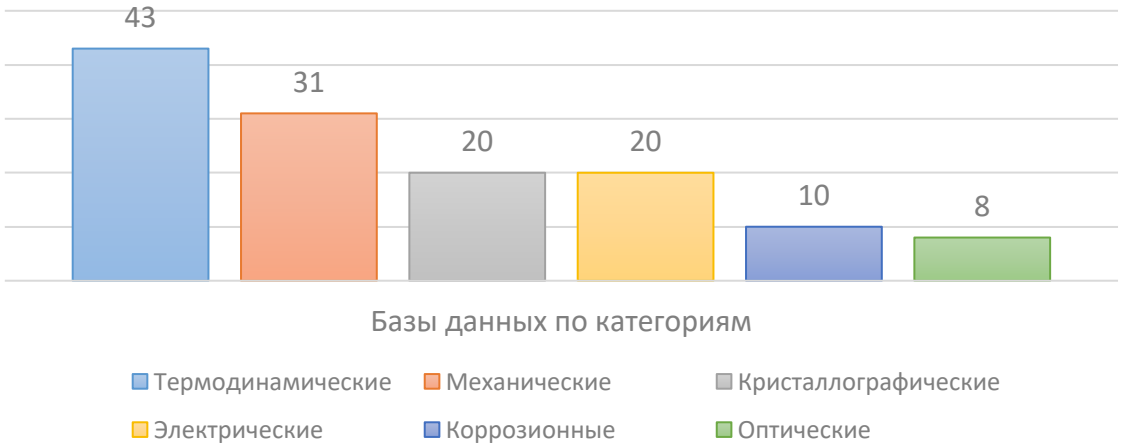
вызовы:

1. Никто не знает полностью чем обладаем
2. Выдаем старые разработки за новые
3. Большая часть результатов не вовлечена в коммерческий оборот
4. Результаты малодоступны из-за разобщенности институциональной среды
5. Форматы результатов усложняют их использование

География пользователей отечественных данных о материалах в мире в 2020 году

Количество баз данных свойств материалов по странам

Базы данных по свойствам веществ



Базы данных по категориям

Термодинамические
Механические
Кристаллографические
Электрические
Коррозионные
Оптические

ПРИМЕРЫ БАЗ ДАННЫХ

База данных Ивтантермо

Настоящий раздел сервера содержит ограниченную выборку (около 300) соединений из базы данных Ивтантермо.

Если в таблице приводятся две различные строки для одной и той же температуры, имеется в виду, что в этой точке происходит фазовый переход (но это может означать также, что это - точка сочленения полиномов, использованных для аппроксимации данных).

Для выбора соединения найдите его в списке (в разделе, относящемся к любому из входящих в это соединение элементов, например, H_2O приводится как в разделе водорода, так и кислорода)

H

H(g)	H_2(g)	OH(g)	HO_2(g)	H_2O(c)
H_2O(g)	H_2O_2(c)	H_2O_2(g)	HF(g)	H_2F_2(g)
H_3F_3(g)	H_4F_4(g)	H_5F_5(g)	H_6F_6(g)	HOF(g)
HCl(g)	HOCl(g)	SH(g)	H_2S(g)	HSO(g)
SOH(g)	HSOH(g)	H_2SO(g)	H_2SO_4(g)	HSO_3F(g)
HSO_3Cl(g)	NH(g)	NH_2(g)	NH_3(g)	N_2H_2(g)
N_2H_2(g;1,1)	N_2H_2(g;cis)	N_2H_2(g;trans)	N_2H_4(g)	HN_3(g)
HNO(g)	HNO_2(g)	HNO_2(g;cis)	HNO_2(g;trans)	HNO_3(g)
NH_2OH(g)	NH_2NO_2(g)	NH_4NO_3(c)	NHF(g)	NH_2F(g)
NH_4F(c)	NHF_2(g)	CH(g)	CH_2(g)	CH_3(g)
CH_4(g)	C_2H(g)	C_2H_2(g)	C_2H_3(g)	C_2H_4(g)
C_2H_5(g)	C_2H_6(g)	HCO(g)	COOH(g)	H_2CO(g)
HCOOH(g)	CH_2O_2(g)	HCOOH(g;cis)	HCOOH(g;trans)	CH_3O(g)
CH_2OH(g)	CH_3OH(g)	C_2H_2O(g)	C_2H_4O(g)	C_2H_4O(g;*)
$C_2H_4O_2$(g)	$C_2H_4O_2$(g;*)	$C_2H_4O_3$(g)	$C_2H_4O_3$(g;1)	C_2H_5OH(g)
CHF(g)	CH_2F(g)	CH_3F(g)	CHF_2(g)	CH_2F_2(g)
CHF_3(g)	C_2HF(g)	C_2H_3F(g)	C_2H_5F(g;*)	$C_2H_2F_2$(g)
$C_2H_2F_2$(g;1,1)	$C_2H_2F_2$(g;cis)	$C_2H_2F_2$(g;trans)	$C_2H_4F_2$(g;*)	C_2HF_3(g)

Информация	Двойные системы	Тройные системы	Литературные ссылки	Крист. мод. хим. элем.

Двойные системы

Система Bi-Se

Экспериментальные данные (точки) диаграммы системы

[Просмотр рисунков]

Все данные о двойной системе

Все данные о двойных системах с фиксированным компонентом

Прочая информация

Линия	N	x % (ат.) 1-го эл-та	Оценка качества (погр.)	T, K	Оценка качества (погр.)	P, бар	Оценка качества (отн.погр.)	Ссылка
(A-B)l	1	88	3	693	3			2
(A-B)l	1	100	3	543	4			588
(A-B)l	2	79	3	741	4			588
(A-B)l	1	99	3	578	3			589
(A-B)l	2	91	3	673	3			589
(A-B)l	3	86	3	703	3			589
(A-B)l	4	82	3	733	3			589
(A-B)l	5	77	3	753	3			589
(A-B)l	1	99	4	542	4			590
(A-B)l	2	95	3	606	3			590
(A-B)l	3	90	3	658	3			590
(A-B)l	4	80	3	743	4			590

BatteryMaterials 1.3

Home Upload new data Release Notes

ID: 575

Formula: Ca_2CuCO_5

Working Ion: Ca

Space Group: P4/mmm (123)

Migration Map: 1D

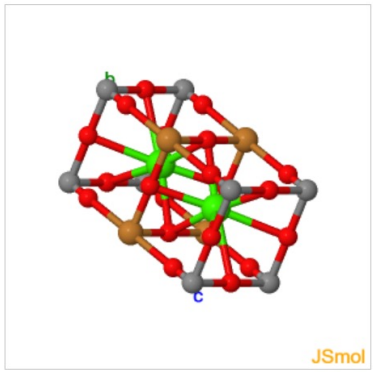
Direction of Migration: [0 0 1]

ICSD: 98033

Download CIF File

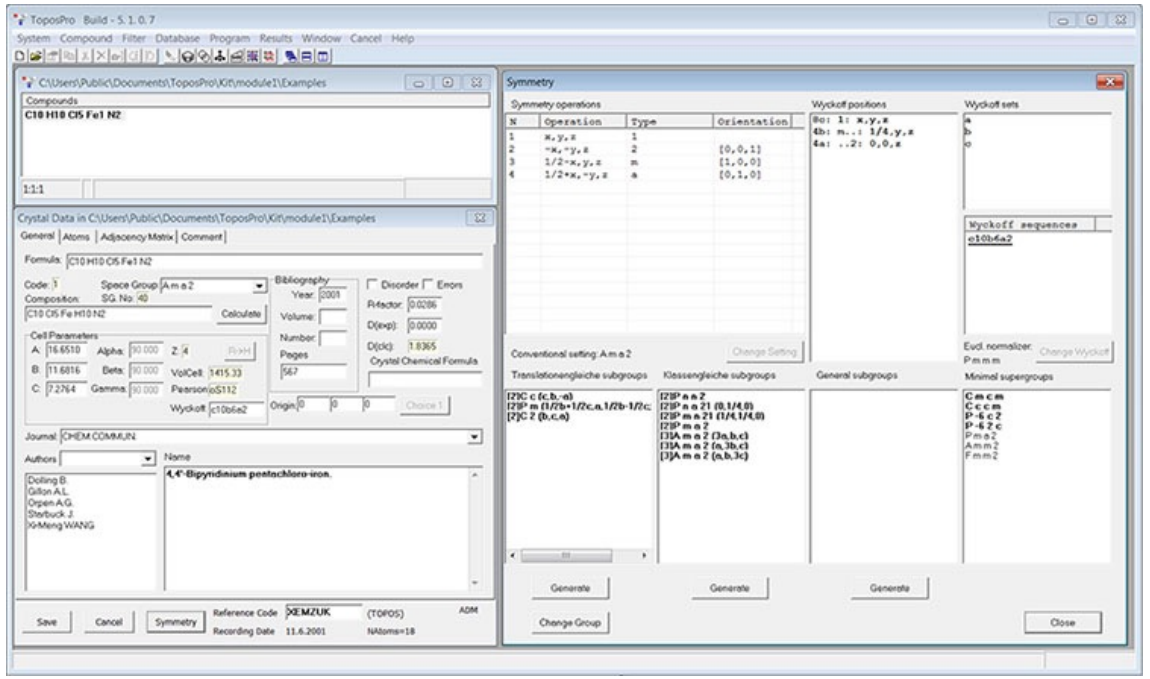
Data

Migration Energy (exp), eV/ion:



Style: ○ Wireframe ○ Capped sticks ○ Spacefill ● Ball&Sticks

Labels: ● No Labels ○ All Atoms



ЦИФРОВИЗАЦИЯ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

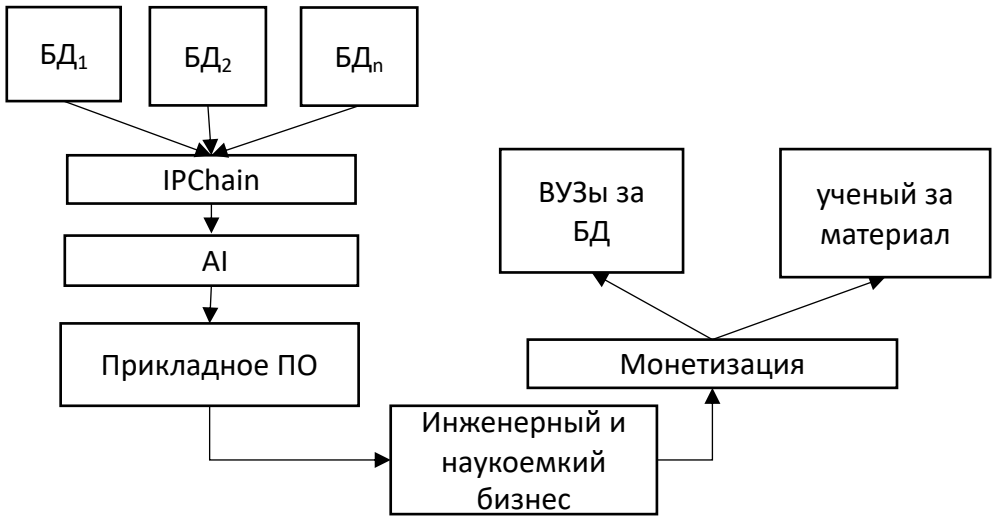
решения:

1. Стандартизация моделей данных
2. Оцифровка баз данных и их интеграция
3. Присвоение данным исключительных прав
4. Подключение к данным средств AI для поиска и проектирования
5. Включение баз данных в пакеты инженерного ПО

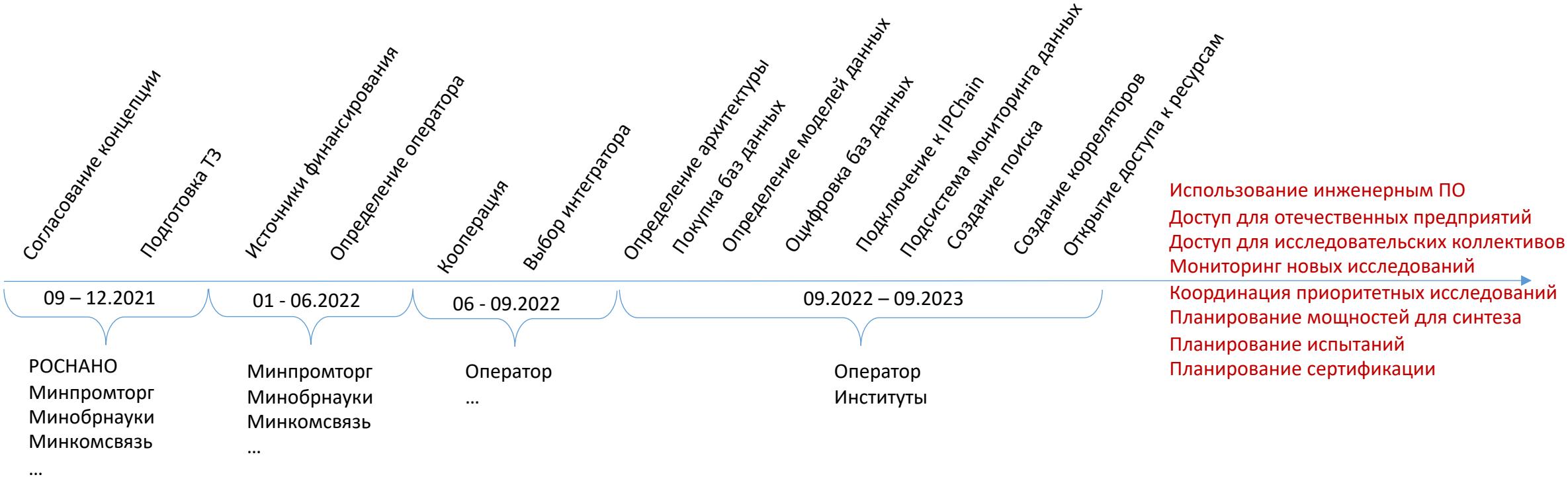
что получаем?

1. Готовая для практического применения, коммерческая система предоставления доступа к цифровым моделям материалов для инженерного и промышленного ПО
2. Зафиксированные права и прозрачная востребованность разработанных материалов и баз данных
3. Материальное стимулирование научных коллективов и отдельных исследователей на разработку материалов практического применения

принципиальная схема:



ПОРЯДОК РАБОТ ИНТЕГРАЦИИ БАЗ ДАННЫХ

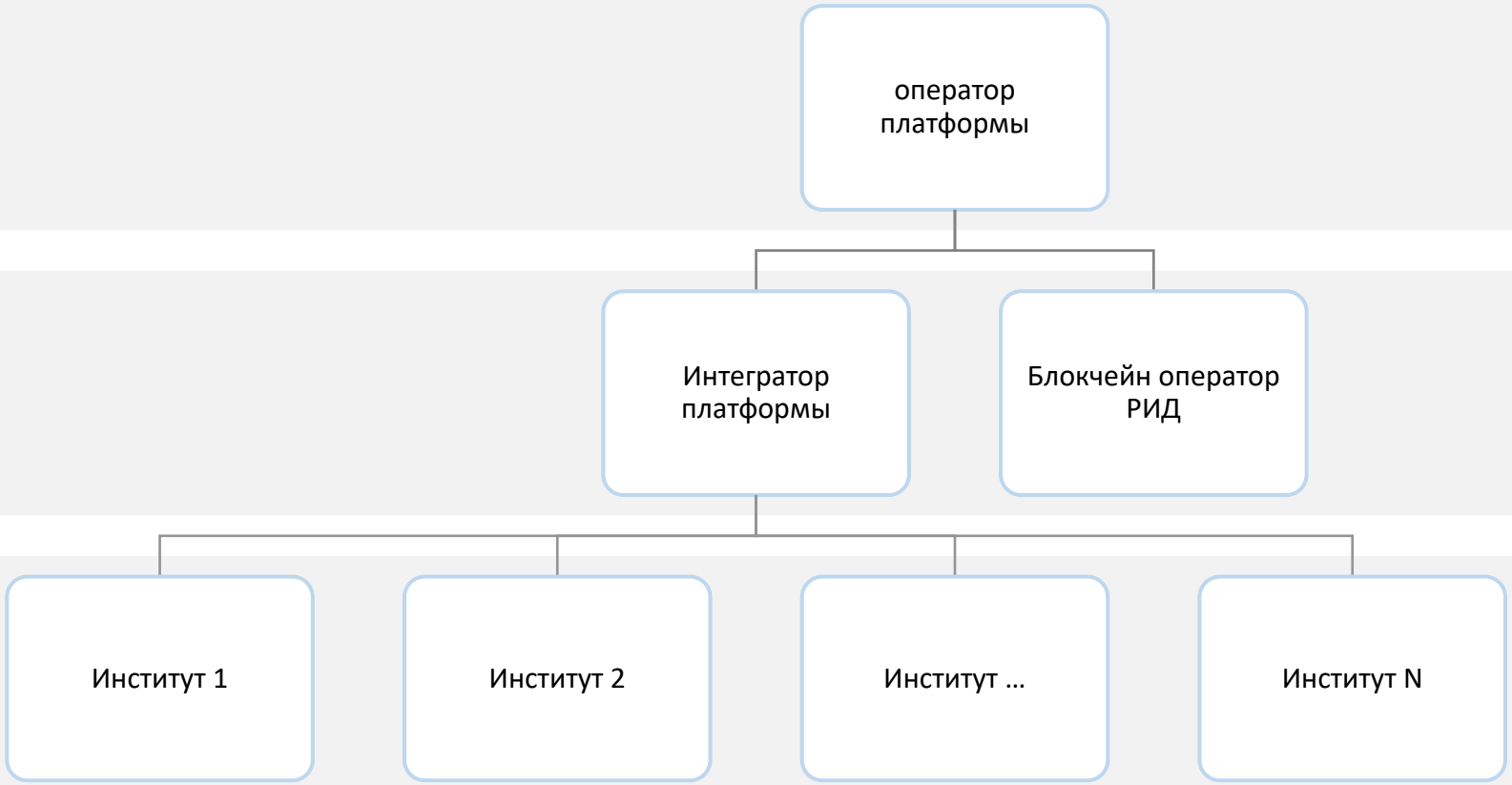


МОДЕЛЬ ПЛАТФОРМЫ ЦИФРОВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ

1. Формирование ТЗ, планирование работ
2. Координация участников
3. Разработка НПА
4. Обеспечение финансирования
5. Коммерциализация

1. Поисковая система, компиляторы, визуализация
2. Защита информации
3. Контроль качества
4. Стандарты представления и обмена информацией

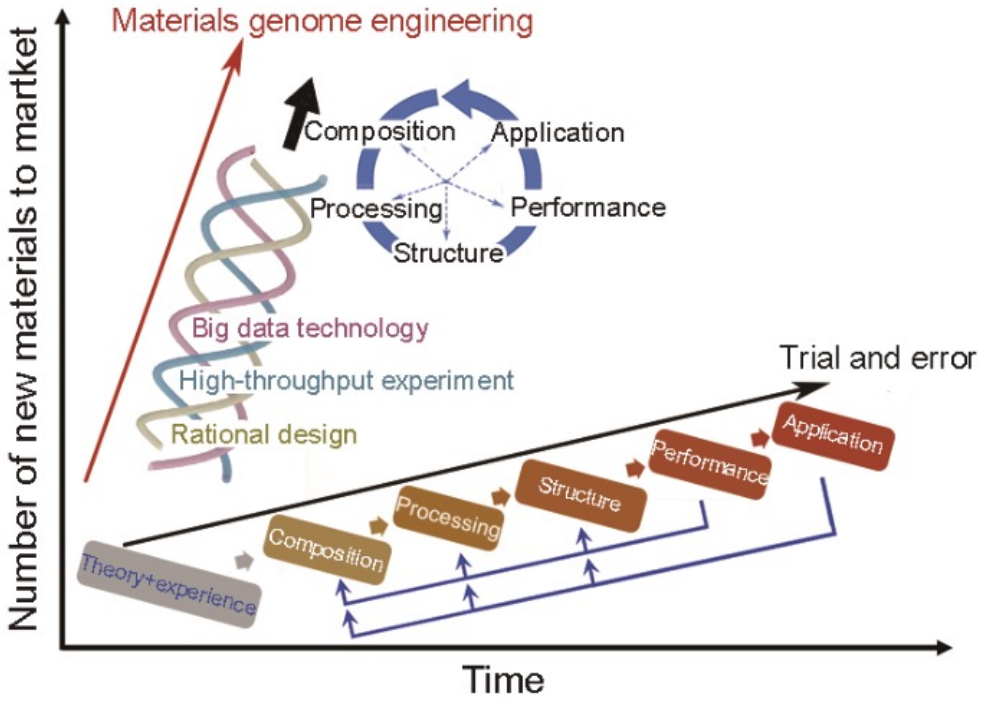
1. Заполнение и верификация данных



НОВЫЙ ЭТАП РАЗВИТИЯ ОТЕЧЕСТВЕННОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

вызовы:
1. Преобладание эмпирического материаловедения
2. Отсутствие единой методики
3. Использование инструментов до которых «смогли дотянуться»
4. Отсутствие доступа к использованию передового оборудования

решение:
создание сетецентрической модели обучения:
1. все в едином информационном и ресурсном поле, при этом, каждый занимается своей областью интересов
2. Единая среда данных и инструментов обработки
3. Общий набор обучающихся алгоритмов обработки и проектирования
4. Единая среда защиты интеллектуальных прав
5. Цифровой сервис записей результатов работ и отчетности
6. Цифровое сообщество исследователей, статей, лекций, семинаров, конференций



ключевые партнеры:

ВЫСШАЯ ТЕХНИЧЕСКАЯ ШКОЛА
ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ ПЛАТФОРМА

Сириус

ЭРА
ВОЕННЫЙ ИННОВАЦИОННЫЙ ТЕХНОПОЛИС

АГЕНТСТВО СТРАТЕГИЧЕСКИХ ИНИЦИАТИВ

ФОНД ИНФРАСТРУКТУРНЫХ И ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ПРОГРАММ
Группа РОСНАНО

Профессии будущего:
- Проектировщик «умных материалов»
- Проектировщик нанотехнологических материалов
- Системный инженер композитных материалов
- Специалист по безопасности в наноиндустрии

НАЦИОНАЛЬНАЯ ИНИЦИАТИВА ДЛЯ ВСЕХ

ГОСУДАРСТВО	БИЗНЕС	НАУКА	ИНСТИТУТЫ РАЗВИТИЯ
Совмещение интересов науки и промышленности	Получение конкурентных преимуществ за счет использования новых материалов	Экономическая мотивация на исследование практических областей	Новые материалы основа создания и развития технологических стартапов во всех отраслях
Направление поддержки на финансирование создания нового	Сокращение времени и затрат на разработку	Общий доступ к данным, моделям, ПО различных институтов и собственности	Единая цифровая среда взаимодействия с исследователями и получение информации о новейших разработках
Цифровизация отечественного материаловедения и создание самообучающейся системы	Использование данных о современных материалах при проектировании продукции и техпроцессов	Защита интеллектуальных прав	Сквозная технологическая экспертиза и единый скоринг исследовательских компетенций команд стартапов

ИНИЦИАТИВЫ ДЛЯ ОБСУЖДЕНИЯ В ГРУППАХ

Меры повышения мотивации исследователей и реального сектора

1. Целевые гранты подкрепленные заказом реального сектора
2. Нормативное определение в субсидиарных программах доли затрат на применение новых материалов
3. Создание ассоциации исследователей и предприятий реального сектора по принципу allowance program
4. Продвижение результатов исследований через создание малых инновационных компаний и их акселерацию
5. Формирование долгосрочных конкурсных программ на целевые технологии (5 лет, 500 млн руб призовой фонд одной технологии, материалы для: накопителей энергии, поглощения CO, фотовольтаики, термоэлектрики, графеновые композиты и т.д.)
6. Включение предприятий реального сектора в процесс формирования государственных заданий исследовательских организаций

Образовательный модуль:

1. Формирование современного курса цифрового материаловедения с привлечением ключевых исследовательских организаций
2. Использование в системе обучения современного программного и расчетного комплекса
3. Доступ к средствам высоконагруженных вычислений
4. Возможность формирования распределенных сетецентричных команд
5. Содействие в коммерциализации РИД. Акселерационная программа как обязательное условие образовательной программы
6. Создание профессионального стандарта разработчика новых материалов
7. Включение разработанного образовательного модуля в учебные курсы инженерных специальностей

Единое цифровое пространство данных о свойствах веществ и материалов:

1. Онтология описаний и стандартизация моделей данных
2. Перевод в цифровой вид накопленных данных за счет государственных заданий
3. Перераспределение прав использования РИД между государством, учреждениями и исследователями
4. Формирование системы патентных платежей за используемые материалы и доступ к базам данных
5. Создание системы интеллектуального поиска и инструментов сопоставления, анализа и компиляции данных различных источников
6. Коммерциализация баз данных через использование в инженерном программном обеспечении
7. Определение перечня ключевых перспективных материаловедческих исследований для концентрации усилий по созданию пилотного рыночного продукта