

УДК 621.793:539.23

С.І. Сидоренко, С.О. Замулко

“ПРЯМА ЗАДАЧА” Й “ОБЕРНЕНА ЗАДАЧА” ІНЖЕНЕРНОГО КОНСТРУЮВАННЯ МАТЕРІАЛІВ

The paper analyzes tasks associated with new materials design recently applied in material science in light of the principle stating that new knowledge design should be based on the previously accumulated knowledge, as well as wide application of computer technologies and operating with material science databases. We show that the general problem of computer design of materials should be divided into 3 problems. The aim of the direct problem is to construct the interpolation polynomial based on available materials science discrete databases available. Accumulation, analysis and algorithms of materials science databases operation is a relatively independent task. After solving the direct problem (when interpolation polynomial is constructed) an inverse problem may be solved using this polynomial: what chemical composition of material can provide obtaining predetermined properties (inverse problem of the first order). The inverse problem can be solved (what chemical composition will provide predetermined properties) through quantum-simulation modeling (from *ab initio*, for example). In this case, some restrictions are to be imposed on Schrödinger equation. When it is solved, the researcher obtains the chemical composition providing predetermined properties under conditions of imposed restrictions (inverse problem of the second order). Solving these problems for specific systems will facilitate creating new materials with predetermined properties.

Вступ

Сьогодні в теоретичному матеріалознавстві все більш широко застосовуються методи “інженерного конструювання матеріалів” – побудови новітніх знань на основі вже накопичених оперуванням матеріалознавчими базами даних [1–9] та розв’язуванням задач “із перших принципів”.

Одним із найбільш цитованих вчених у галузі інженерного “конструювання” матеріалів є професор університету штату Айова (США) К. Раджан, який підтримує портал CoSMIC [10], що накопичує і структурує інформацію в цій сфері.

Методи “інженерного конструювання матеріалів” одержали назву “Data Base Science and Science on Materials Design” (“Наука оперування базами даних та конструювання матеріалів”), які активно розвиваються завдяки світовим науково-освітнім програмам і мережам. Ця тенденція є проявом більш загальної тенденції – створення фізико-матеріалознавчих основ “конструювання” – наперед заданого, цілеспрямованого формування складу (хімічного і фазового) та структури (кристалографічної, дефектної, електронної) з метою отримання матеріалів з новими необхідними властивостями та новим поєднанням властивостей [6, 11].

Актуальність напрямку “Data Base Science and Science on Materials Design” зумовлена змінами співвідношення між безпосередньо експериментальною роботою дослідника в лабора-

торії і роботою у віртуальних об’єднаннях вчених, у віртуальних інтелектуальних просторах, що пов’язано з новими можливостями в отриманні, накопиченні та поширенні знань – завдяки розвитку світових інформаційно-комунікаційних мереж [5].

Ці пропорції сьогодні змінюються [9, 12] на користь теоретичного матеріалознавства: накопичення баз даних у світових мережах, Internet-ресурсах та їх аналізу [13–15] як основи для пошуку нових матеріалів і нових властивостей, теоретичного “конструювання” (передбачення) матеріалів “із перших принципів” із застосуванням GRID-технологій у суперкомп’ютерних кластерах [15–19].

Постановка задачі

Мета статті – модифіковане зображення “прямої задачі” й “оберненої задачі” в інженерному “конструюванні” матеріалів.

“Пряма задача” й “обернена задача” у методах інженерного “конструювання” матеріалів

Всі задачі з інженерного “конструювання” матеріалів зводяться до трьох: прямої задачі, оберненої задачі 1-го роду і оберненої задачі 2-го роду. Охарактеризуємо кожну з них.

Припустимо, що є велика кількість баз даних, у яких кожному складу або інтервалам складів матеріалу поставлені у відповідність фізичні властивості (їх може бути 1, 2, ..., j і

т.д.). Метою розв'язання “прямої задачі” є побудова інтерполяційного полінома на основі наявних дискретних баз даних. У цій побудові (в цих обчислювальних процедурах) склад матеріалу є аргументом, а властивості – функцією (у загальному випадку – частково-неперервною).

Необхідно побудувати узагальнений алгоритм розв'язання “прямої задачі”. Вона має такий вигляд.

Нехай існує K хімічних елементів, з яких може бути створений новий матеріал: $N_1, N_2, \dots, N_i, \dots, N_k$.

Тоді j -ю властивістю матеріалу F_j є

$$F_j(N_1^{(C1)}, N_2^{(C2)}, \dots, N_i^{(Ci)}, \dots, N_k^{(Ck)}, T),$$

де C_i – концентрація хімічного елемента N_i , що входить до складу нового матеріалу, $\sum C_i = 1$, T – температура.

Функція F_j – неперервна у певних інтервалах концентрацій і температур, що визначається діаграмою фазових рівноваг.

Ставиться задача побудувати інтерполяційний поліном функції F_j по закладених у бази даних дискретних значеннях F_j :

$$F_j(N_1^{(C1)}, N_2^{(C2)}, \dots, N_i^{(Ci)}, \dots, N_k^{(Ck)}, T) = f_0 + \sum_{n=1}^m \sum_{i=1}^k f_n(N_i^{(Ci)})^n + \sum_{n=1}^m f_n T^n,$$

де m – ступінь, за якого досягається бажана (за критерієм, що встановлений дослідником) точність інтерполяції експериментальних даних, f_n – шукані коефіцієнти інтерполяційного полінома C_i на відрізку $C_{i0}-C_{i1}$, T на відрізку $[T_0-T_1]$.

Складність побудови алгоритму пов'язана не тільки з тим, що існуючі бази даних дискретні, а дані в них нееквідистантні, але й також з тим, що ці бази різномірні і мають різну розмірність. Приклади, наведені на рисунку, підтверджують це.

Крім того, на сьогодні відсутнє світове єдине інформаційне поле баз даних, у якому алгоритми звернення до баз даних і оперування ними були б уніфікованими (що полегшило б роботу дослідників). Існуючі бази даних створені різними колективами дослідників, у різних країнах, з використанням різних стандартів і містять інформацію різного типу, різного рівня

агрегування тощо. Все перелічене, звичайно ж, ускладнює завдання побудови загального алгоритму.

Таким чином, матеріалознавча спільнота іде шляхом створення єдиної уніфікованої розподіленої інтегрованої бази даних (РІБД), що має відповідати критеріям достовірності даних, уніфікації одиниць вимірів тощо.

Загальний алгоритм можна застосувати до низки конкретних випадків для розв'язання багатьох практично важливих завдань (контактні системи, бар'єрні шари, поєднання матеріалів тощо).

Коли “пряму задачу” вже розв'язано (інтерполяційний поліном побудовано), тоді з використанням цього полінома може розв'язуватися і “обернена задача”: які склади матеріалу можуть забезпечити отримання наперед заданих властивостей (це завдання ми називаємо “оберненою задачею 1-го роду”).

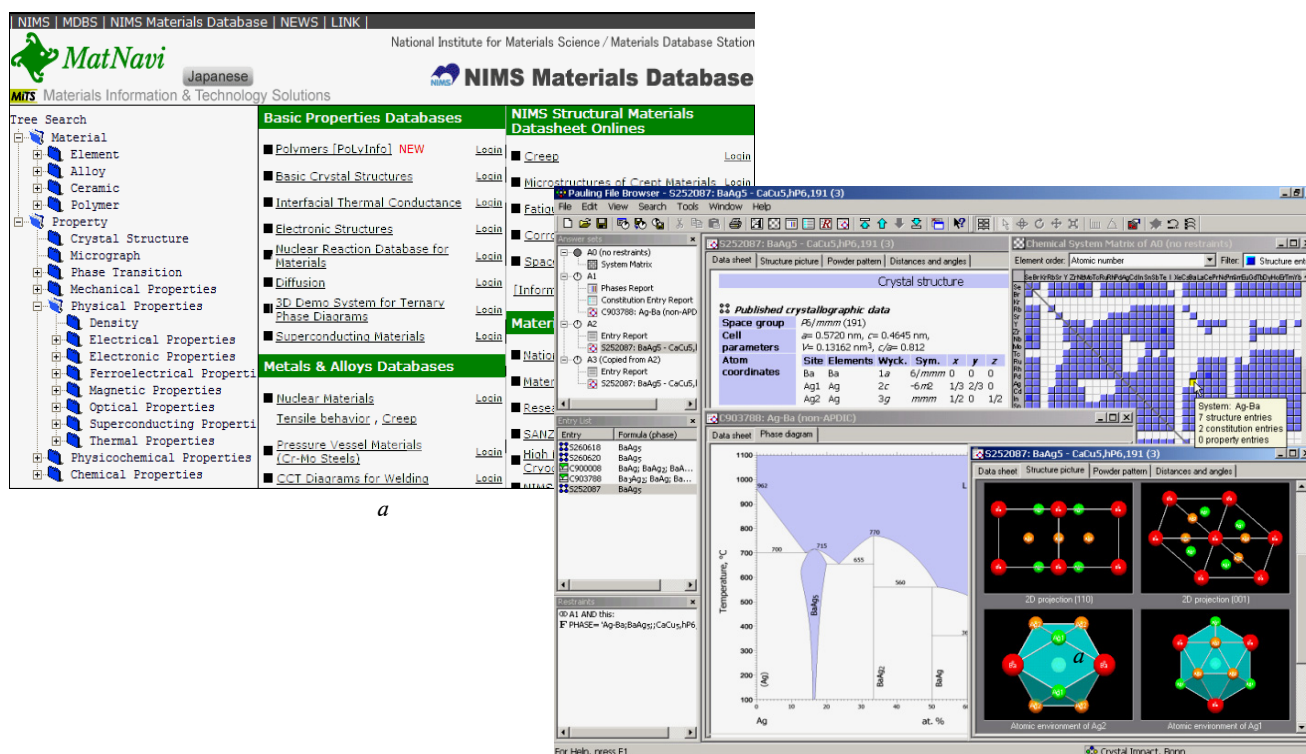
Розв'язання “оберненої задачі” може бути здійснене й іншим шляхом – “із перших принципів”. При цьому на рівняння Шредінгера накладаються певні обмеження, а в результаті його розв'язання дослідник отримує склади [2, 8, 16, 18, 21], що забезпечують наперед задані властивості за умов накладених обмежень (цю “обернену задачу” ми називаємо “оберненою задачею 2-го роду”).

Як властивість, яка ставиться у відповідність складу, може бути вибрана структура. Структура може також виступати як аргумент, а функцією в цьому випадку будуть властивості.

Взагалі і склад, і структура є аргументами, а властивості – функцією, тому що склад визначає структуру, а структура – властивості. Та обставина, що структура – складне комплексне поняття (розрізняють три типи структури: кристалографічну, електронну та дефектну), а хімічний склад – поняття просте, приводить до висновку, що на початковому етапі досліднику простіше мати справу з обчислювальними процедурами, де як аргумент виступає хімічний склад.

Крім того, як аргумент (крім складу) повинна виступати також і температура.

Всупереч сумнівам скептиків щодо практичних результатів інженерного “конструювання” матеріалів наведемо приклад розв'язання задачі інженерного конструювання нових плівкових матеріалів проф. Х. Акаї з університету Осака [22], який за алгоритмами з використанням задачі по типу “оберненої задачі 2-го роду” розробив нові комбінації тонкоплівкових



б

Приклади матеріалознавчих баз даних: а) On-line база даних NIMS (Національного інституту матеріалознавства, Японія) “Materials: Elements and Compounds” щодо властивостей різних груп матеріалів (розміщена на сайті NIMS [20]); б) Off-line база даних LPF (Linus Pauling File) для двокомпонентних систем, люб’язно надана професором Ш. Івата, розгорнута в локальній мережі PhysMetNet кафедри фізики металів НТУУ “КПІ”

матеріалів для підвищення щільності запису магнітних носіїв інформації. GMR ratio 6-шарової плівкової композиції Fe–Co–Cu–Ru–Mn, що використовується в наш час, становить 19 %, а GMR ratio 3-шарової тонкоплівкової композиції Cr–Ca–Ni–As–Fe–Cr–S, запропонованої проф. Х. Акаї, – 720 %.

Висновки

Представлено модифіковані задачі, пов’язані з інженерним “конструюванням” нових матеріалів, що останнім часом набувають застосування у матеріалознавстві у зв’язку із фор-

муванням ідеології “конструювання нових знань на основі вже накопичених знань”, а також у зв’язку із широким залученням технологій оперування матеріалознавчими базами даних.

Вперше показано, що загальну задачу з інженерного “конструювання” матеріалів необхідно розділити на 3 задачі: пряму, обернену задачу 1-го роду, обернену задачу 2-го роду, які сформульовано в загальному вигляді.

Розв’язання цих задач для конкретних систем дає змогу прискорити та більш точно визначити критерії для створення нових матеріалів із наперед заданими властивостями.

1. S. Iwata *et al.*, “Communications and Discoveries from Multidisciplinary Data”, Springer, 2008, 354 p.
2. K. Rajan, “Materials informatics”, Materials Today, vol. 8, no. 10, pp. 38–45, 2005.
3. D. Raabe, Computational Materials Science. New York: Wiley-VCH, Weinheim, 1998, 380 p.
4. R.W. Cahn, The Coming of Materials Science. Oxford: Elsevier, 2001, pp. 491–502.
5. Сидоренко С.І., Волошко С.М., Макогон Ю.М. Применение ИКТ в преподавании тонкопленочного металловедения // Актуальні проблеми тонкоплівкового металознавства. — 2-ге вид. — К.: Наук. думка, 2009. — С. 238–290.
6. Сидоренко С.І., Пугачов А.Т. Сучасні проблеми тонкоплівкового металознавства // 36. наук. статей ВФТПМ НАНУ “Физико-технические проблемы со-

- временного матеріалознавства”, присвячений 95-річчю від дня заснування НАНУ. — К., 2013.
7. *R.W. Cahn*, The Coming of Materials Science. Oxford: Elsevier, 2001, pp. 503–538.
 8. *Changwon Suh et al.*, “The application of Principal Component Analysis to materials science data”, *Data Sci. J.*, vol. 1, pp. 19–26, 2002.
 9. *S.J.L. Billinge et al.*, “From Cyberinfrastructure to Cyberdiscovery in Materials Science: Enhancing outcomes in materials research, education and outreach”, Report from a workshop held in Arlington, Virginia, 2006.
 10. *Combinatorial Sciences and Materials Informatics Collaboratory* [Online]. Available: <http://cosmic.mse.iastate.edu/index.html>
 11. *Сидоренко С.И.* Тонкие металлические пленки. Неорганическое материаловедение. В 2 т.: Энциклопед. изд. / Под ред. Г.Г. Гнесина, В.В. Скорохода. — К.: Наукова думка, 2008. — Т. 2, кн. 2. Материалы и технологии. — С. 469–492.
 12. *Toyohiro Chikyow*, “Trends in Materials Informatics in Research on Inorganic Materials”, *Quarterly Rev.*, no. 20, pp. 59–71, 2006.
 13. *Doreswamy et al.*, “Data Mining Technique for Knowledge Discovery”, *Eng. Mat. Data Sets*, pp. 512–522, 2011.
 14. *P.S. Pamallete et al.*, “Digital tools for material selection in product design”, *Materials and Design*, vol. 31, pp. 2275–2287, 2010.
 15. *Xuyun Hong et al.*, “Study on the Material Requisition System Based on Data Mining”, *Modern Appl. Sci.*, vol. 3, no. 8, pp. 9–14, 2009.
 16. *T. Yamamoto et al.*, “Effective Interatomic Potentials Based on The First-Principles Material Database”, *Data Sci. J.*, vol. 8, pp. 62–69, 2009.
 17. *S.R. Broderick et al.*, “Data mining of Ti–Al semi-empirical parameters for developing reduced order models”, *Physica B, Elsevier B*, vol. 406, pp. 2055–2060, 2011.
 18. *D. Frenkel and B. Smit*, Understanding Molecular Simulations: From Algorithms to Applications. San Diego: Academic Press, 1996.
 19. *C.-H. Wu*, “Data mining applied to material acquisition budget allocation for libraries: design and development”, *Expert Systems with Applications*, vol. 25, no. 3, pp. 401–411, 2003.
 20. *MatNavi* [Online]. Available: http://mits.nims.go.jp/db_top_eng.htm
 21. *Gang Yu et al.*, “Data mining techniques for materials informatics: datasets preparing and applications”, 2nd Int. Symposium on Knowledge Acquisition and Modeling, *IEEE*, vol. 2, pp. 189–192, 2009.
 22. *H. Akai et al.* (2009). Computational materials design and its application to spintronics [Online]. Available: http://www.jst.go.jp/sicp/ws2009_ge3rd/presentation/29.pdf

Рекомендована Радою
інженерно-фізичного факультету
НТУУ “КПІ”

Надійшла до редакції
23 жовтня 2012 року