

Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана

Цифровая платформа с инструментами искусственного интеллекта и моделирования материалов и конструкций

Александров Евгений Викторович
Д.х.н., директор
aleksandrov@bmstu.ru

Центр НТИ

«Цифровое материаловедение: новые материалы и вещества»



История появления Центра НТИ

2020

28 декабря создан **Центр НТИ «Цифровое материаловедение: новые материалы и вещества»** на базе **МИЦ «Композиты России»**.

Миссия

«Реализуем цифровой подход к «быстрому» и «сквозному» проектированию, разработке, испытанию и применению новых материалов и веществ»

Перед **Центром** поставлена задача формирования национального банка данных и знаний по материалам и их «цифровым двойникам», обеспечивающих получение «цифровых паспортов» и ускоренную сертификацию новых материалов.

2023

Центр становится головной площадкой для реализации Дорожной карты «Перспективные материалы и цифровое материаловедение» совместно с научно-образовательными организациями и промышленными партнерами.

Консорциум:

- пять образовательных организаций,
- восемь научных организаций.

С момента образования Центра НТИ (2021-2025 гг.)

50+

статей Q1, Q2

40+

соглашений о
сотрудничестве

> 1 млрд

коммерциализация

1 сентября 2024 года

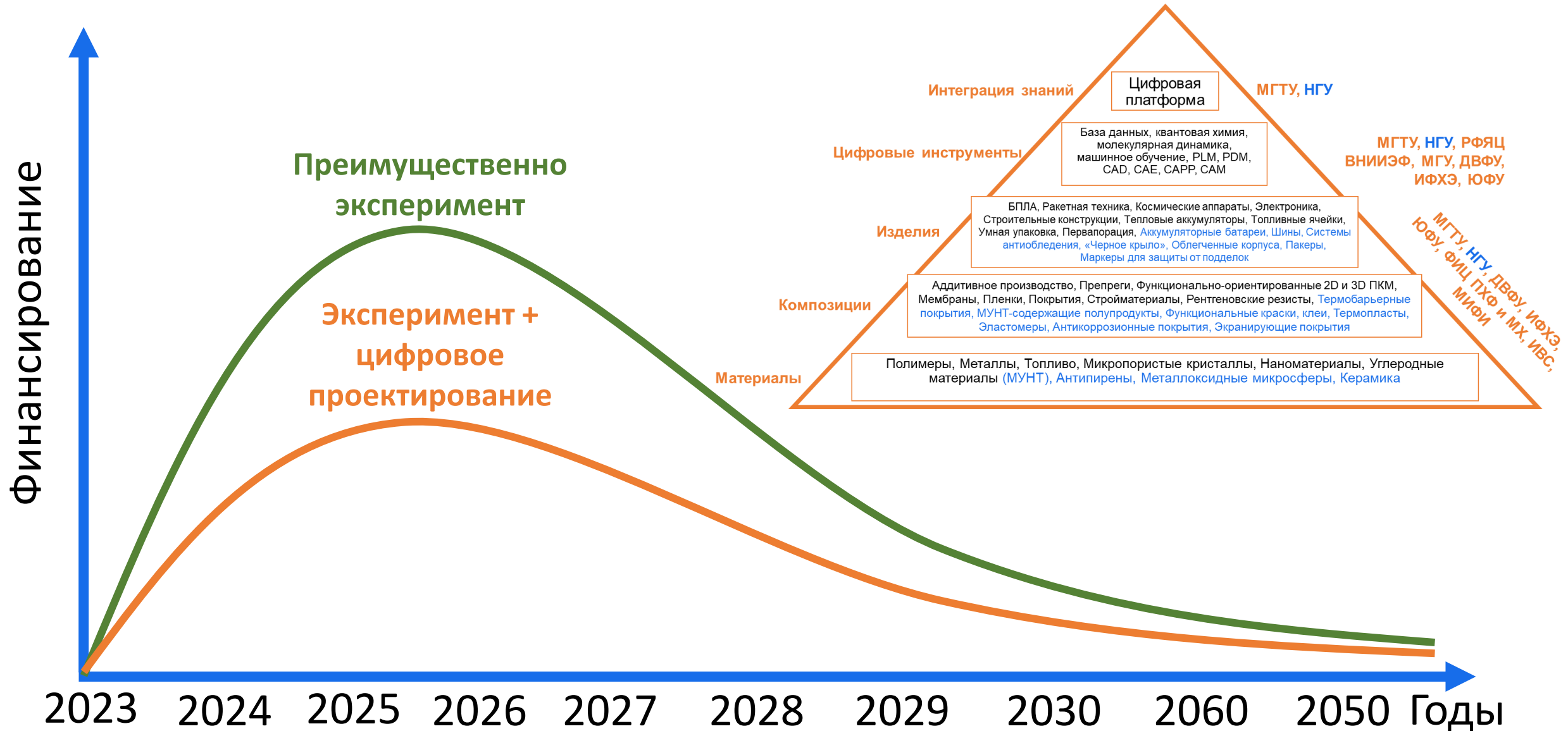
7200 кв. м.

Оснащение
оборудованием на
2 млрд руб.

Численность сотрудников:
100 человек

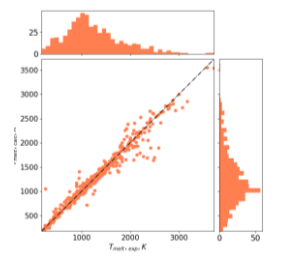
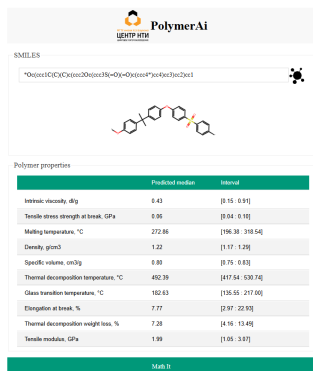


Цифровизация

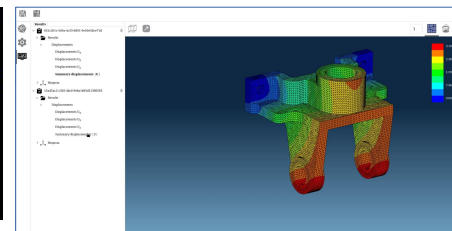
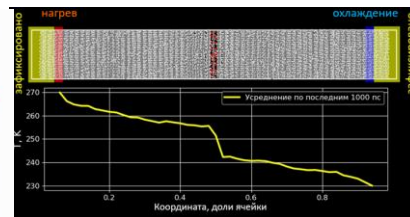
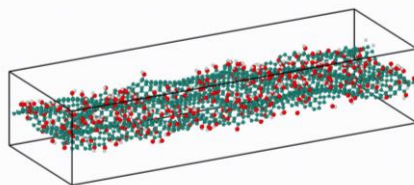
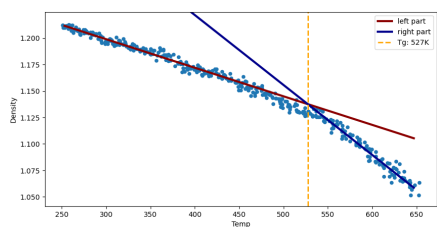


Результаты

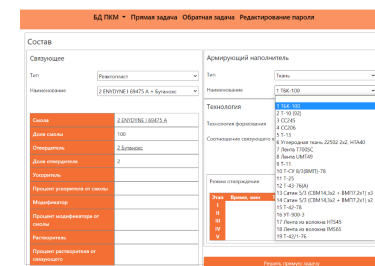
Прогноз полимеров кристаллов



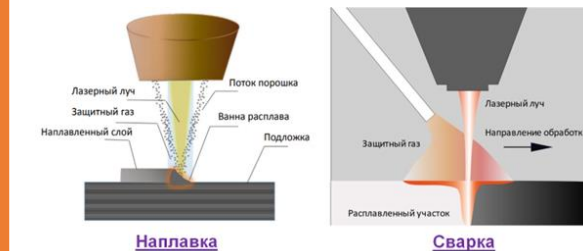
Машино-обучаемая молекулярная динамика



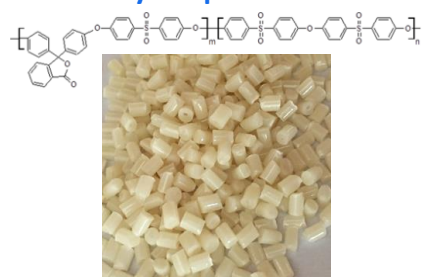
PLM система с FEM-анализом



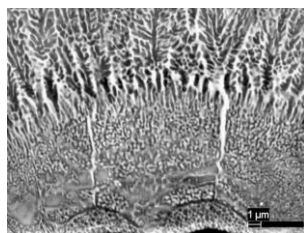
3D печать



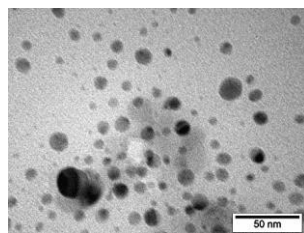
10+ суперпластиков



Припои



Нанонаполненные ПКМ



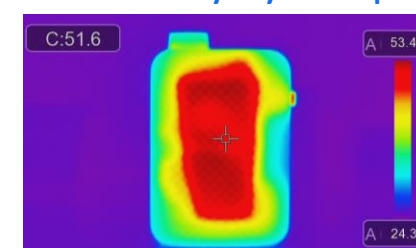
Роботизация синтеза



75 MOFs синтезировано:

- Zn-МОК (ZIF-8, ZIF-65, ZIF-69, ZIF-68, ZIF-7-I, ZIF-7-III),
- In-МОК (СРМ-5 (серия), JUC-120 (серия), MIL-68(In) (серия), In(chdc) (серия), In-NDC),
- Ga-МОК (MIL-53(Ga) (серия), MIL-53(Ga)-NDC (серия), Ga-МОК (серия), СОМОС-4, SNUU-63-H₂PDC (серия))
- Каркасные структуры с германием
- Пленки с хитозаном

Теплоаккумуляторы



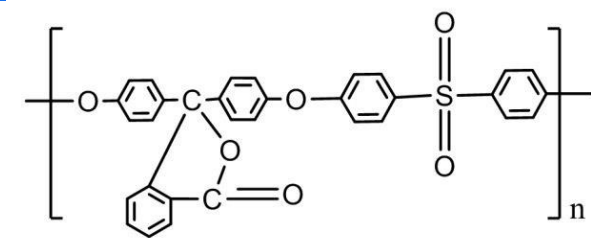
Цифровая платформа «Цифровое материаловедение»



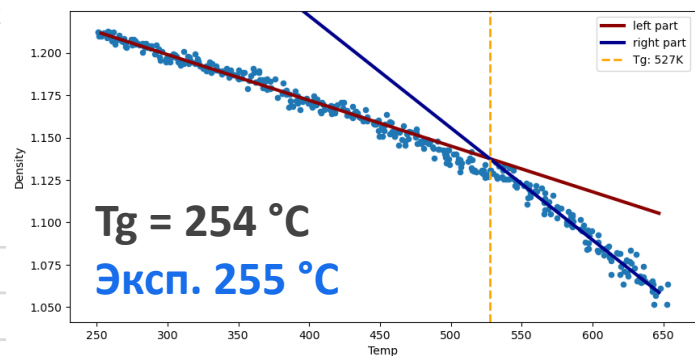
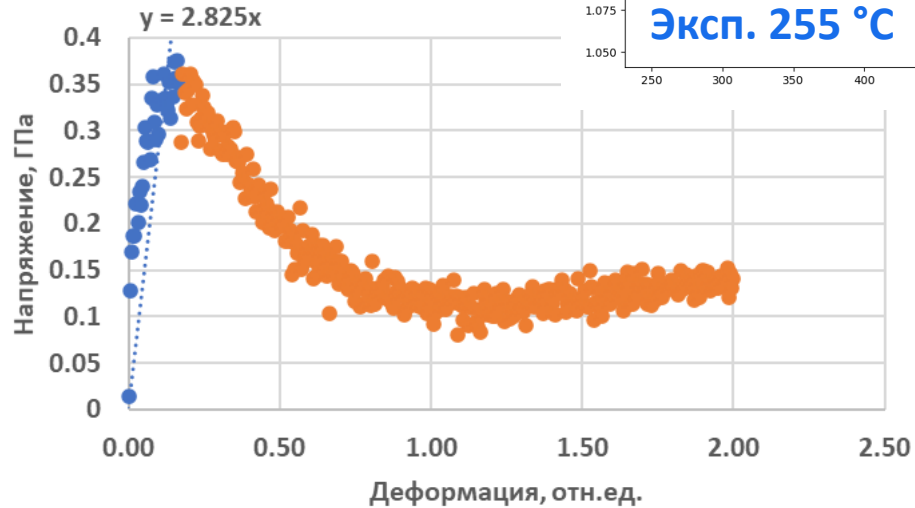
WEB-интерфейс: <https://digmat.alternance.ru/>

Моделирование температуры стеклования и модуля упругости методами молекулярной динамики

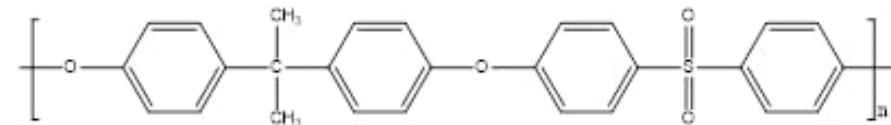
ПЭС-255 - сополимер фенолфталеина и дихлордифенилсульфона (бисфенол С)



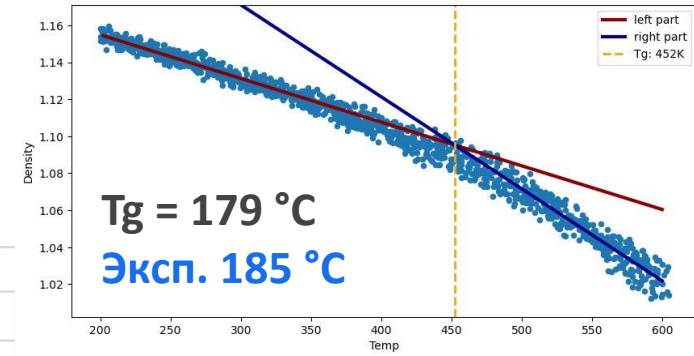
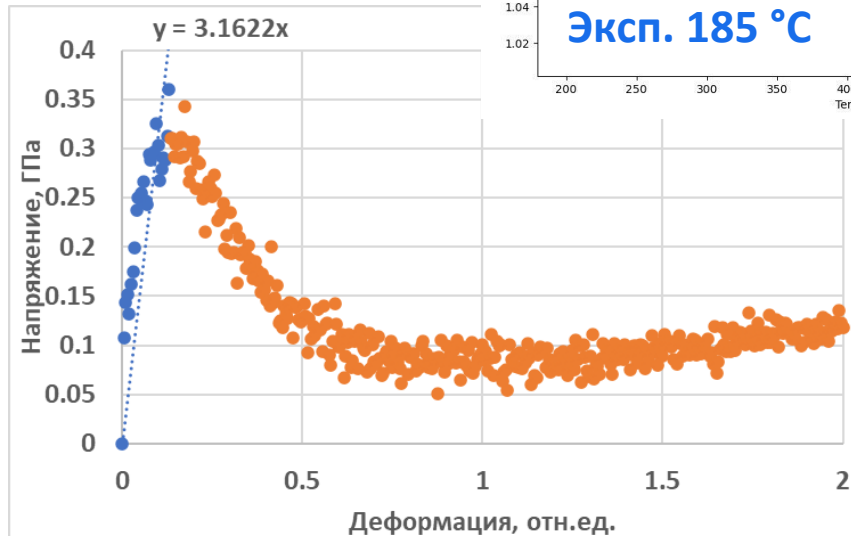
Эксперимент:
 $E = 2.8$ ГПа $E = 2,6-2,9$ ГПа



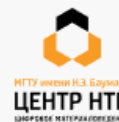
ПЭС-185 – сополимер бисфенола А и бисфенола С



$E = 3.2$ ГПа



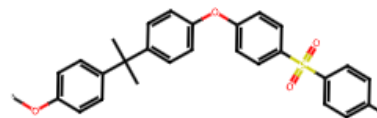
Программный модуль предсказания физических свойств полимеров на основе моделей машинного обучения



PolymerAi

SMILES

Oc(ccc1C(C)(C)c(ccc2Oc(ccc3S(=O)(=O)c(ccc4)cc4)cc3)cc2)cc1



Polymer properties

	Predicted median	Interval
Intrinsic viscosity, dl/g	0.43	[0.15 : 0.91]
Tensile stress strength at break, GPa	0.06	[0.04 : 0.10]
Melting temperature, °C	272.86	[196.38 : 318.54]
Density, g/cm3	1.22	[1.17 : 1.29]
Specific volume, cm3/g	0.80	[0.75 : 0.83]
Thermal decomposition temperature, °C	492.39	[417.54 : 530.74]
Glass transition temperature, °C	182.63	[135.55 : 217.00]
Elongation at break, %	7.77	[2.97 : 22.93]
Thermal decomposition weight loss, %	7.28	[4.16 : 13.49]
Tensile modulus, GPa	1.99	[1.05 : 3.07]

Math It

Система автоматизированного принятия решений в производстве ПКМ

ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ПОТРЕБИТЕЛИ

- Аэрокосмическая отрасль и ОПК
- Авиацонная промышленность
- Судостроение
- Автомобилестроение
- Машиностроение, включая атомное, нефтегазовое, тяжелое, специальное машиностроение, железнодорожный транспорт

РЕШАЕМЫЕ ПРОБЛЕМЫ ПОТРЕБИТЕЛЕЙ

- Снижение риска ошибок при внедрении ранее не опробованных материалов и технологий их переработки, а также в случае модернизации изделий из традиционных материалов с применением композитов
- Кратное сокращение объема производства и испытаний опытных образцов, как следствие сокращение стоимости разработок в десятки раз
- Сокращение времени на разработку новых и модификацию существующих изделий, как следствие значительное сокращение времени с начала разработок до серийного выпуска

БД ПКМ ▾ Прямая задача Обратная задача

Прочность на растяжение по основе	<input type="text"/>	-	<input type="text"/>	МПа	Стоимость к соленой воде	<input type="text"/>
Прочность на изгиб по основе	<input type="text"/>	-	<input type="text"/>	МПа	Стоимость к УФ	<input type="text"/>
Модуль упругости по основе	<input type="text"/>	-	<input type="text"/>	ГПа	Стоимость к горению	<input type="text"/>
Модуль сдвига по основе	<input type="text"/>	-	<input type="text"/>	МПа	Стоимость к грибам и плесени	<input type="text"/>
Температура размягчения	<input type="text"/>	-	<input type="text"/>	°C	Стоимость к химическим веществам	<input type="text"/>
ТКЛР	<input type="text"/>	-	<input type="text"/>	х10 ^{^6} , К ^{^1}	Стоимость к биологической коррозии	<input type="text"/>
Плотность	<input type="text"/>	-	<input type="text"/>	кг/м3	Стоимость к стандартным растворителям	<input type="text"/>
					Стоимость к воде	<input type="text"/>

Свойства	Связующее	Армирующий наполнитель	Метод формования	Соотношение связующего к армирующему наполнителю	Паспорта	Комментарий	Найти
Посмотреть	0	1 T-10 (92)	Ручная выкладка / Выкладка с мешком	70/30	,		
Посмотреть	3	1 T-10 (92)	Горячее прессование	40/60	,	1	Добавить
Посмотреть	4	14 BMPC6 14.4x1	Горячее прессование	40/60	,	2	
Посмотреть	5	4 UMT49-12K-EP	Горячее прессование	40/60	,	3	
Посмотреть	6	15 CBM14.3x2	Горячее прессование	40/60	,	4	
Посмотреть	20	5 UMT430-12K-EP	Горячее прессование	40/60	,	5	Редактировать
Посмотреть	7	8 TWARON 805 tex	Горячее прессование	40/60	,	6	
Посмотреть	7	7 VETROTTEX P185-EC14-2400 tex	RTM/Lite RTM	50/50	,	7	
Посмотреть	7	9 Kamenny Vek KV42	Вакуумная инфузия	55/45	,	8	Удалить

Решение прямой задачи

- Прогнозирование свойств ПКМ на основе анализа свойств его компонентов и технологических условий его производства.
- Используется модуль машинного обучения, способный к поиску гипотезы решения задачи и оценке погрешности гипотезы решения.

БД ПКМ ▾ Прямая задача Обратная задача Редактирование пароля

Состав

Связующее

Тип

Наименование

2 ENVDYNE I 69475 A + Бутанокс

Смола

Доля смолы

Отвердитель

Доля отвердителя

Ускоритель

Процент ускорителя от смолы

Модификатор

Процент модификатора от смолы

Растворитель

Процент растворителя от связующего

Армирующий наполнитель

Тип

Наименование

1 ТБК-100

Технология

Технология формования

Соотношение связующего

Режим отверждения

Этап

Время, мин

1 ТБК-100

2 T-10 (92)

3 CC245

4 CC206

5 T-13

6 Углеродная ткань 22502 2x2, HTA40

7 Лента T700SC

8 Лента UMT49

9 T-11

10 T-CU 8/3(BMP)-78

11 T-25

12 T-43-76(A)

13 Сатин 5/3 (CBM14,3x2 + BMP7,2x1) x3

14 Сатин 5/3 (CBM14,3x2 + BMP7,2x1) x2

15 T-42-78

16 UT-900-3

17 Лента из волокна HTS45

18 Лента из волокна IMS65

19 T-42/1-76

Решить прямую задачу

БД ПКМ ▾ Прямая задача Обратная задача Редактирование пароля

Состав

Связующее

Армирующий наполнитель

Тип

Наименование

Смола

Доля смолы

Отвердитель

Доля отвердителя

Ускоритель

Процент ускорителя от смолы

Модификатор

Процент модификатора от смолы

Растворитель

Процент растворителя от связующего

Результат

Плотность:

1962.21

кг/м3

Download PDF

Решить прямую задачу

В качестве **ВХОДНЫХ ПАРАМЕТРОВ** для решения **ПРЯМОЙ** задачи модуль машинного обучения использует:

- набор основных свойств компонентов ПКМ (введение данных осуществляется посредством выбора компонентов ПКМ)
- технологию формования

В качестве **РЕШЕНИЯ** прямой задачи модуль машинного обучения возвращает:

- гипотезу решения прямой задачи, которая представляет собой набор основных свойств ПКМ
- погрешность гипотезы решения прямой задачи.

Решение обратной задачи

Прогнозирование свойств компонентов ПКМ и технологических условий его производства на основе анализа свойств ПКМ.

БД ПКМ ▾

Прямая задача

Обратная задача

Редактирование пароля

Основные свойства ПКМ

Прочность на растяжение по основе800МПа

Прочность на растяжение по утку800МПа

Прочность на сжатие по основе600МПа

Прочность на сжатие по утку600МПа

Прочность на изгиб по основе1000МПа

Прочность на изгиб по утку1000МПа

Модуль упругости при растяжении по основе50ГПа

Модуль упругости при растяжении по утку50ГПа

Модуль межслоевого сдвига5000МПа

Относ. удлинение при разрыве по основе2%

Относ. удлинение при разрыве по утку2%

КЛТР по основе2*10⁻⁶, К⁻¹

Плотность1500кг/м³

Адгезия25МПа

Трещиностойкость по моде 10,9кДж/м²

Решить обратную задачу

Запустить обучение на основе данных из БД

БД ПКМ ▾

Прямая задача

Обратная задача

Редактирование пароля

Результаты

Download PDF

Основные свойства ПКМ

Прочность на растяжение по основе, МПа: 800

Прочность на растяжение по утку, МПа: 800

Прочность на сжатие по основе, МПа: 600

Прочность на сжатие по утку, МПа: 600

Прочность на изгиб по основе, МПа: 1000

Прочность на изгиб по утку, МПа: 1000

Модуль упругости при растяжении по основе, : 50

Модуль упругости при растяжении по утку, : 50

Модуль межслоевого сдвига, : 5000

Относ. удлинение при разрыве по основе, %: 2

Относ. удлинение при разрыве по утку, %: 2

КЛТР по основе, : 2

Плотность, кг/м³: 1500

Адгезия, МПа: 25

Трещиностойкость по моде 1, МПа: 0,9

Основные свойства ткани

Вид плетения, : Саржа

Прочность при растяжении по основе, МПа: 243.23

Прочность при растяжении по утку, МПа: 229.28

Модуль упругости при растяжении по основе, ГПа: 42.98

Модуль упругости при растяжении по утку, ГПа: 38.08

Удлинение на разрыв по основе, %: 2.14

Удлинение на разрыв по утку, %: 2.16

Основные свойства нити

Тип, : Углерод

Прочность при растяжении волокна, : 3446.95

Основные свойства связующего

Прочность на растяжение, МПа: 62.83

Прочность на сжатие, МПа: 162.64

В качестве **ВХОДНЫХ ПАРАМЕТРОВ** для решения **ОБРАТНОЙ** задачи модуль машинного обучения использует:

- набор основных свойств полимерных композиционных материалов (вводятся пользователем системы)

В качестве **РЕШЕНИЯ** обратной задачи модуль машинного обучения возвращает:

- гипотезу решения обратной задачи, которая представляет собой технологию формования, состав полимерного композиционного материала и свойства компонентов ПКМ
- погрешность гипотезы решения обратной задачи

Оценка эффективности прогнозирования

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ РЕШЕНИЯ ПЗ

На основе выбранных компонентов ПКМ изготовлены образцы ПКМ и проведены их испытания.

ОБРАЗЦЫ ДЛЯ ИСПЫТАНИЙ ИЗГОТАВЛИВАЛИ СЛЕДУЮЩИМИ МЕТОДАМИ:

- RTM (Resin Transfer Moulding) - методом инъекции связующего в закрытую форму
- вакуумной инфузии
- горячего прессования

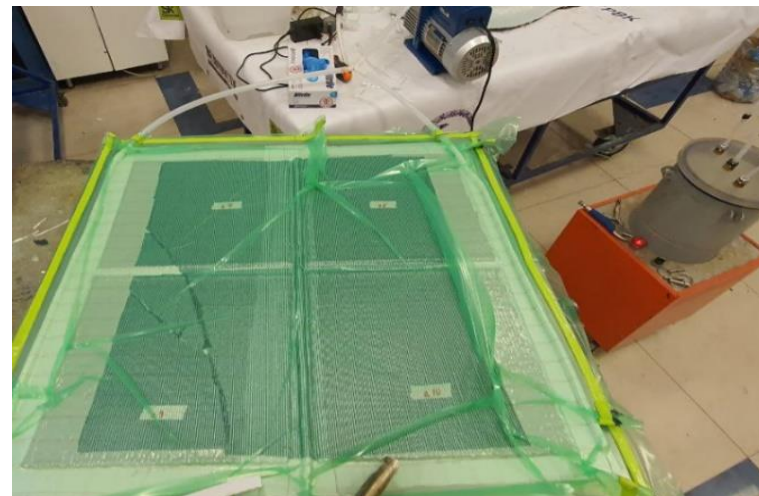
ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ РЕШЕНИЯ ОЗ

На основе выбранных системой принятия решений компонентов ПКМ были изготовлены образцы ПКМ и проведены их испытания.

Проведено сравнение данных о свойствах ПКМ полученных в результате расчета и испытания ПКМ изготовленных с использованием рекомендаций системы.

Рассчитаны относительная ошибки и точность прогнозирования для каждого из свойств ПКМ

ИЗГОТОВЛЕНИЕ ОБРАЗЦОВ ПКМ МЕТОДОМ ВАКУУМНОЙ ИНФУЗИИ



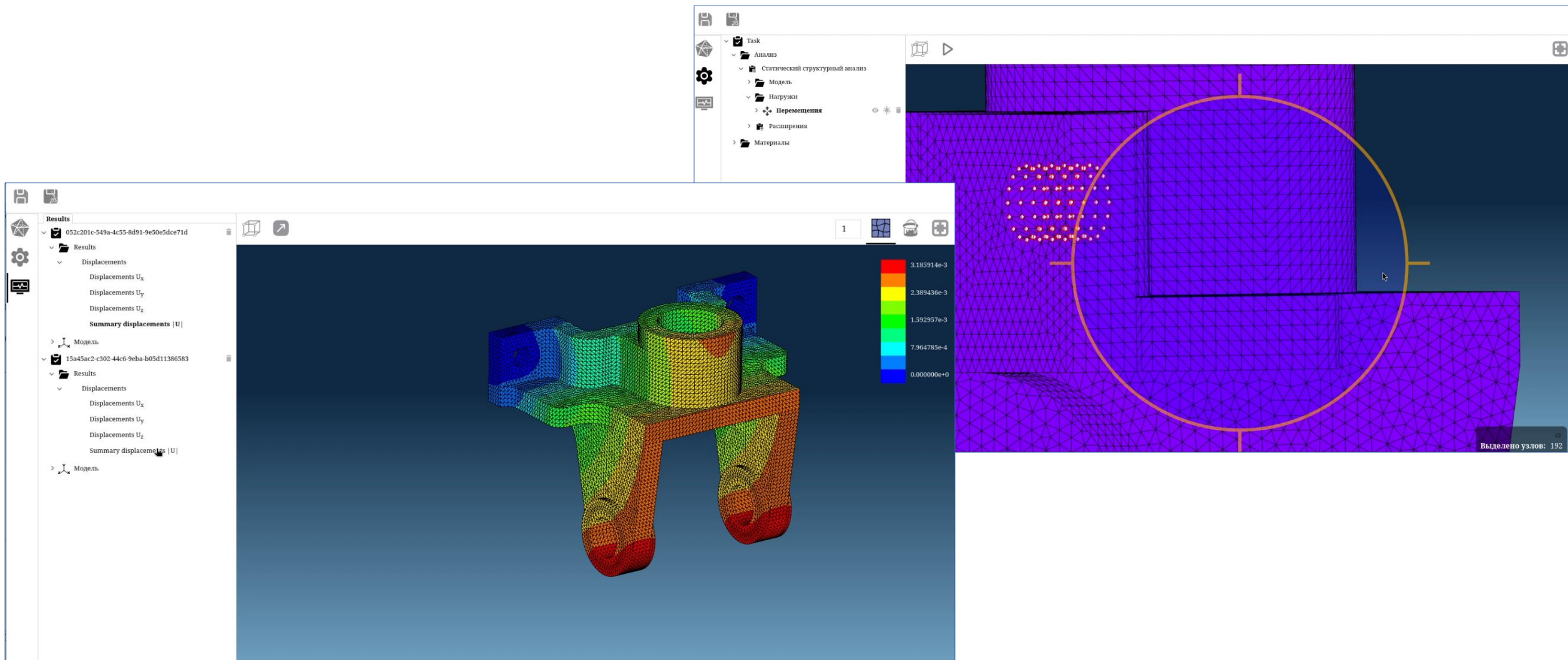
ТОЧНОСТЬ ПРОГНОЗА ПЗ

При решении прямой задачи средняя относительная ошибка для свойства ПКМ составила **8,6 %**, а точность прогноза **91,4 %**

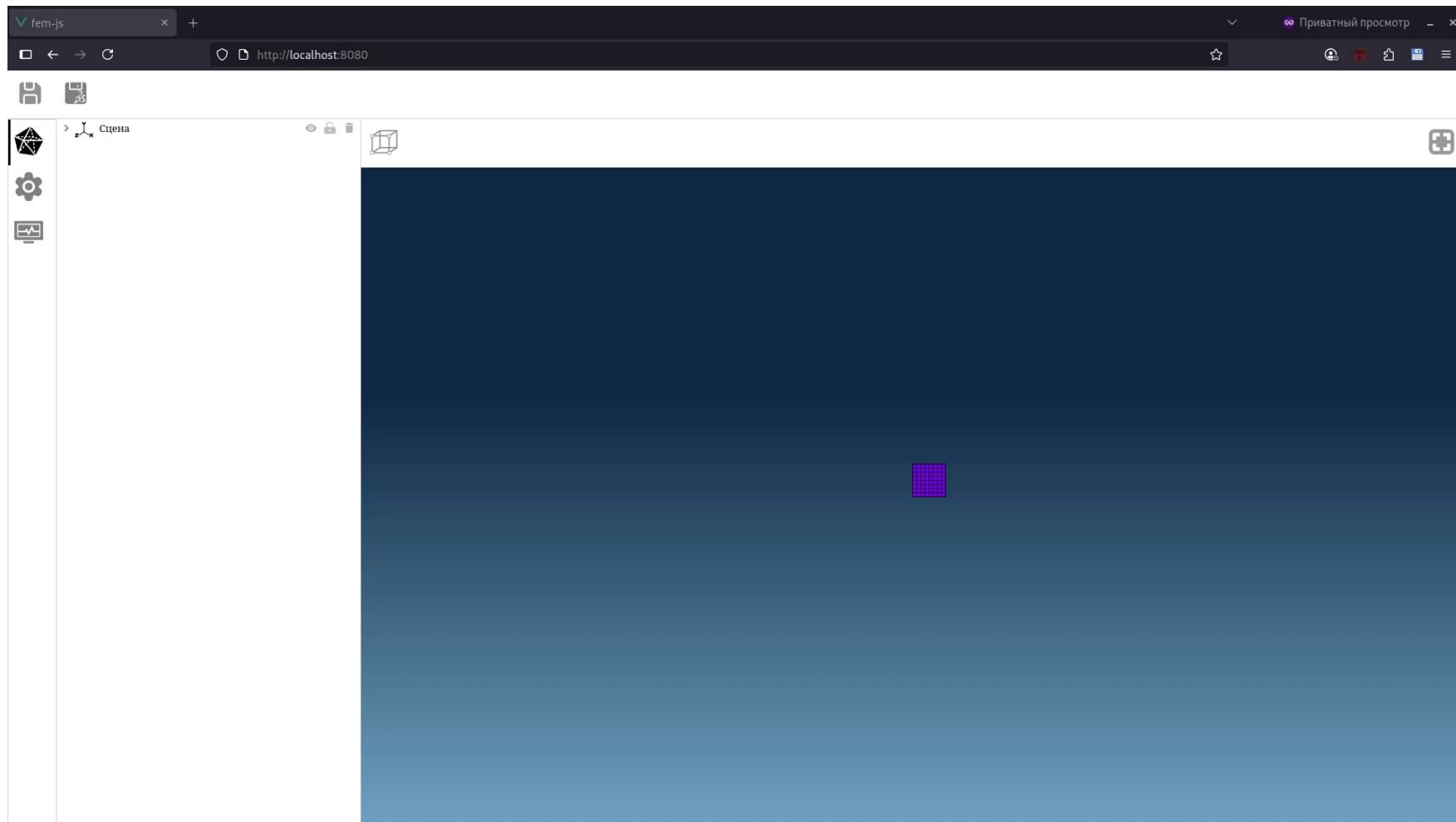
ТОЧНОСТЬ ПРОГНОЗА ОЗ

При решении обратной задачи средняя относительная ошибка для свойств ПКМ составила **10,5 %**, а точность прогноза **89,5 %**

Подсистема FEM-анализа



Оптимизация параметров моделирования



Цифровое решение для управления жизненным циклом изделий из композиционных материалов (РФЯЦ ВНИИЭФ)

ЗАДАЧИ >>>

- ❖ **Использование композиционных материалов** при проектировании и производстве изделий;
- ❖ **Создание облегченных конструкций из композиционных материалов** (например, БПЛА и др.);
- ❖ **Повышение эксплуатационных характеристик** создаваемых изделий;
- ❖ **Подбор альтернативных материалов** без потери прочности;
- ❖ **Оптимизация производственных операций** (выкладка, раскрой, подготовка данных для оборудования);
- ❖ **Расширение возможностей производства** изделий (аддитивные технологии, генеративный дизайн).

Реализованный функционал

Навигатор композитов
Управление

Создать пакет

Композитная система координат

Создать слой

Сечение плоскостью

Драпировка

Развертка

Вырез

Тонкий надрез

Линия ширины материала

Разделение слоёв

Послойное проектирование

Анализ пакета

Технологическая подготовка

Создать пакет

Композитная система координат

Создать слой

Сечение плоскостью

Линия ширины материала

Разделение слоёв

Навигатор композитов

Навигатор композитов

Навигатор композитов

Вырез

Тонкий надрез

Массово-инерционные характеристики пакета [10]

Создать пакет

Композитная система координат

Создать слой

Сечение плоскостью

Линия ширины материала

Разделение слоёв

Навигатор композитов

Навигатор композитов

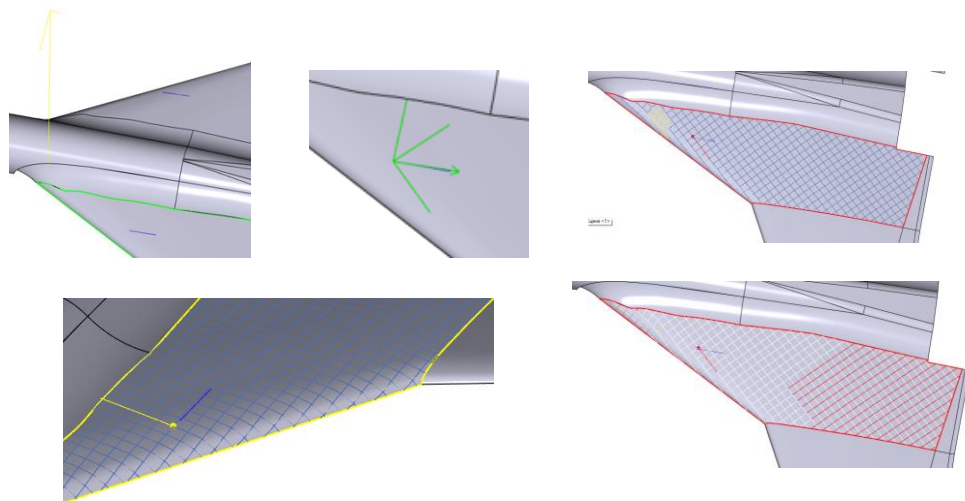
Навигатор композитов

Вырез

Тонкий надрез

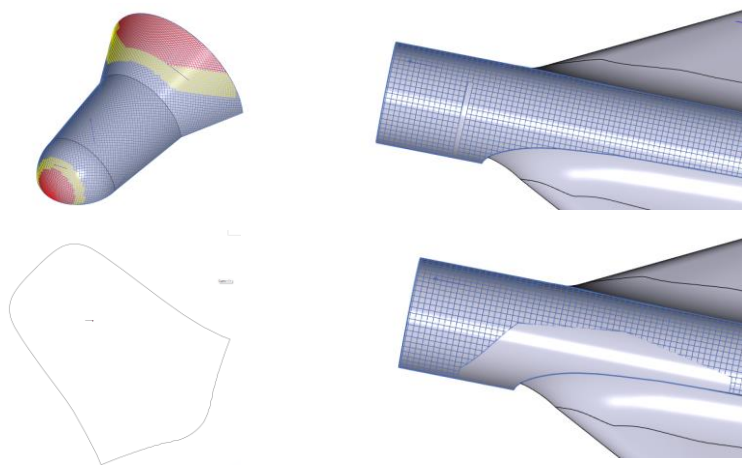
Массово-инерционные характеристики пакета [10]

ПОСЛОЙНОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ



- Создание композитного пакета
- Создание композитной системы координат
- Создание слоев
- Выбор материала
- Выбор шага
- Настройка сетки-драпировки
- Выбор типа укладки
- Выбор направления выкладки и точки укладки
- Выбор угла выкладки
- Выбор поверхности выкладки
- Выбор границ: для пакета, для слоя
- Выбор границ пакета/слоя с припуском

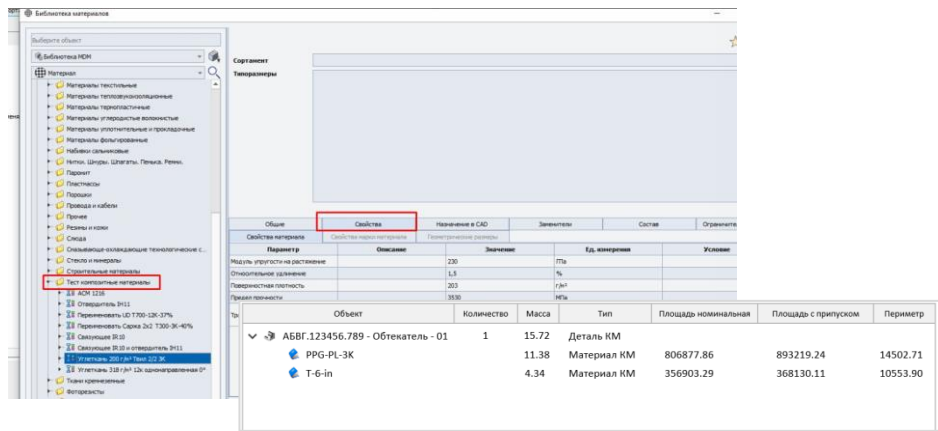
ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ ПОДГОТОВКА ПРОИЗВОДСТВА



- Имитация выкладки материала
- Отображение зон деформации материала
- Получение контуров разверток
- Расчет масс-инерционных характеристик пакета
- Расчет суммарных периметров по каждому материалу
- Расчет суммарной площади по каждому материалу
- Создание тонких надрезов
- Создание вырезов
- Создание сечений
- Выбор зоны сечения
- Настройка сечения: масштаб, точки разреза

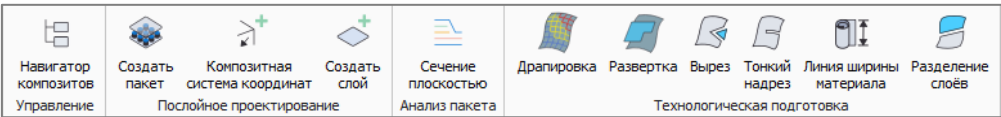
Реализованный функционал

УПРАВЛЕНИЕ ДАННЫМИ, УПРАВЛЕНИЕ МАТЕРИАЛАМИ



- Возможность создания композиционного материала в CAPUS.MDM
- Возможность применения композиционного материала в CAPUS.CAD
- Возможность описания структуры композитной детали в CAPUS.PDM
- Синхронизация изменений о составе и атрибутах композитной детали между CAPUS.CAD и CAPUS.PDM
- Выгрузка данных о материалах в электронную модель детали и хранение данных по используемым материалам в модели
- Выгрузка данных о результатах расчета МИХ композитной детали
- Выгрузка данных в CAPUS.PDM о результатах расчета суммарных периметров по каждому материалу
- Выгрузка данных в CAPUS.PDM о результатах расчета суммарной площади по каждому материалу

ИНТЕРФЕЙС

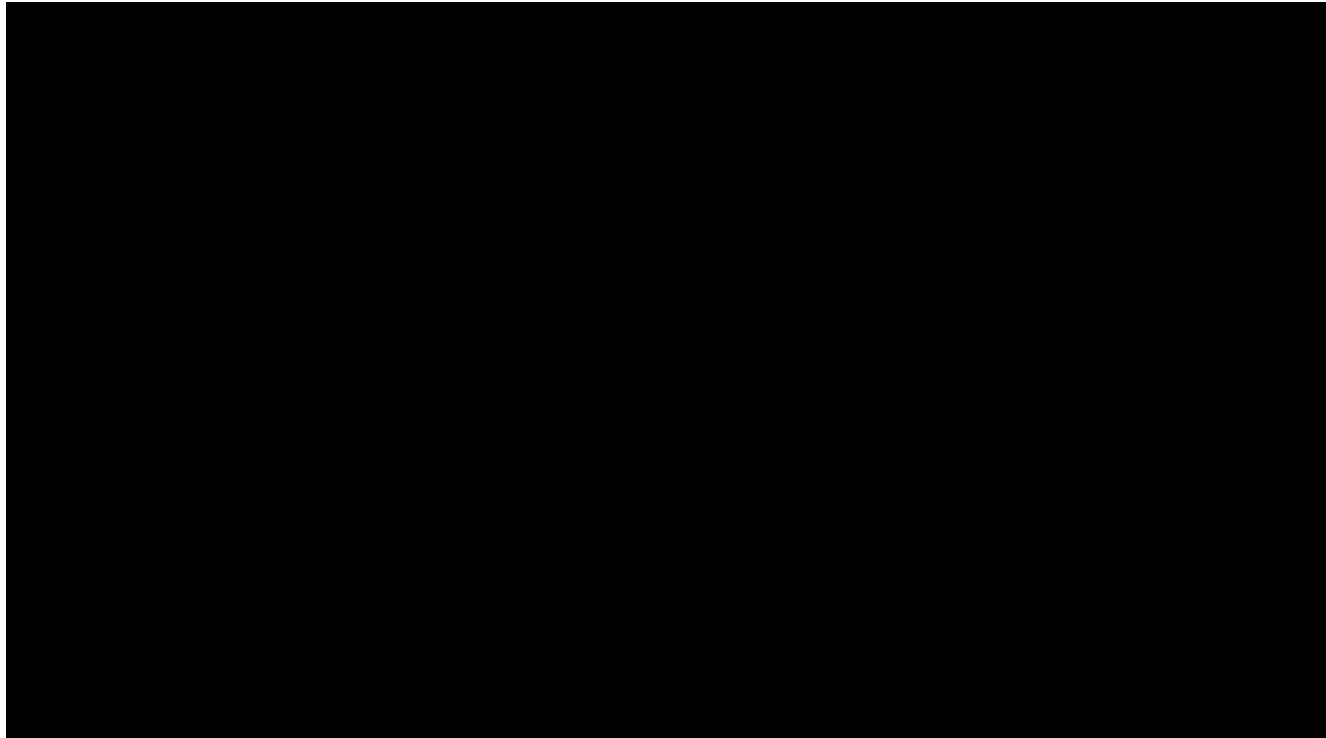


Навигатор композитов							
				Технологический слой	Материал	Поиск	
Тип	Наименование	Шаг	Ориентация	Материал	Система координат	Родитель	Статус
Слой	Слой <427> (P)	100	0°	PPGPL3K	Композитная СК <...	Пакет <411> (Но...	Технологический слой
Слой	Слой <430> (P_1)	100	0°	PPGPL3K	Композитная СК <...	Пакет <411> (Но...	Технологический слой
Слой	Слой <432> (P_2)	100	0°	PPGPL3K	Композитная СК <...	Пакет <411> (Но...	Технологический слой
Слой	Слой <434> (P_3)	100	0°	PPGPL3K	Композитная СК <...	Пакет <411> (Но...	Технологический слой

- Бесшовная интеграция с CAPUS.PLM
- Интуитивно-понятный интерфейс
- Навигатор композитов
- Послойная структура композитной детали в навигаторе композитов
- Фильтрация компонентов композитной детали
- Массовые операции с компонентами композитного пакета (слои): создание, редактирование, удаление
- Возможность внесения изменений в структуру композитного пакета в навигаторе
- Возможность визуализации соответствующих связанных объектов в навигаторе и на 3D-сцене
- Возможность сортировки компонентов композиционного пакета
- Возможность выполнения поиска по навигатору композитов

Конструирование и прототипирование в условиях быстрого изменения требований к изделию

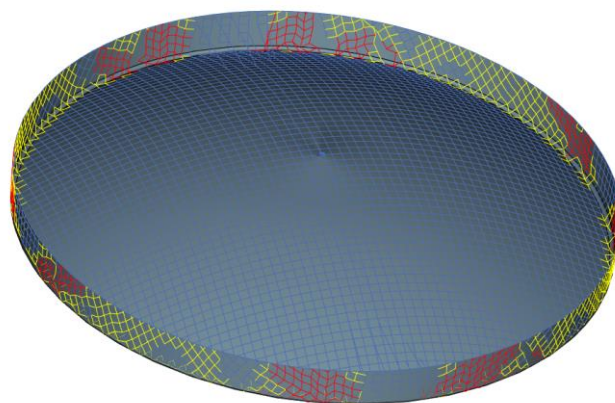
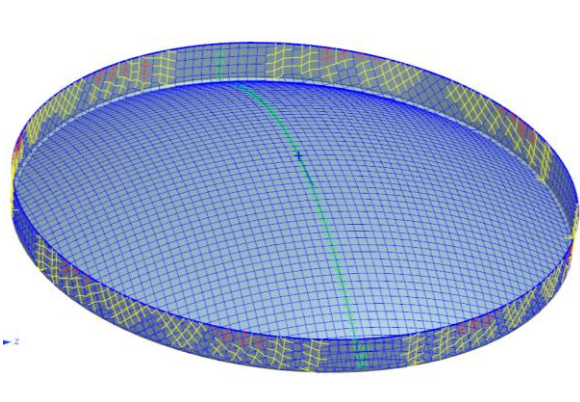
- Проектирование;
- Технологическая подготовка производства;
- Управление данными;
- Управление материалами;
- Маршруты изготовления,
- Технологическая документация;
- Интеграция с раскройными станками, проекционными системами, роботами для выкладки.



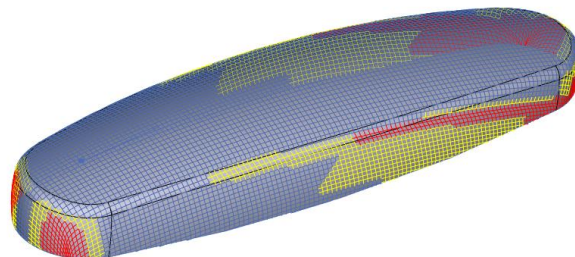
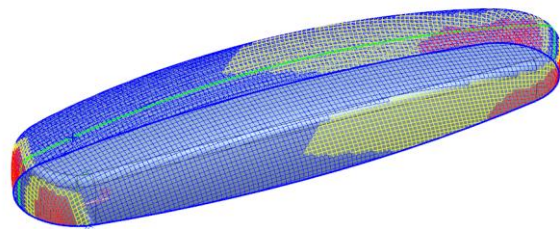
Платформа для проектирования, анализа и подготовки производства изделий из композиционных материалов (СПЖЦ.Композиты, САРУС.КМ). РФЯЦ ВНИИЭФ.
№ 2025663401 от 28.05.2025.

Реализованные проекты

Рефлектор



Звено робота-манипулятора



FiberSim

Прототип

Совместная магистратура Центра НТИ с кафедрой ФН-5 «Химия» 18.01.04 «Химическая технология», направленность **«Цифровое моделирование химических технологий»**

Программа направлена на подготовку специалистов, способных:

- создавать и внедрять передовые цифровые технологии в проектирование, разработку, производство, исследование новых материалов и веществ;
- синтезировать новые материалы и вещества;
- создавать «цифровые двойники» материалов и технологий;
- проводить инженерные расчеты;
- строить математические модели на основе технологий машинного обучения;
- разрабатывать программное обеспечение, комплексно решать задачи моделирования материалов, процессов их получения и эксплуатации;
- решать научные и практические задачи в области химии и материаловедения.



Приглашаем на 2-ю Всероссийскую конференцию «Цифровое материаловедение», которая состоится **24.11-25.11.2025** в Центре НТИ «Цифровое материаловедение: новые материалы и вещества» МГТУ им. Н.Э. Баумана.

Задача конференции – обмен опытом и лучшими практиками между ведущими специалистами и обсуждение современных трендов моделирования и машинного обучения в разработке материалов.



Следите за актуальной информацией в телеграм-канале Центра НТИ

Контактное лицо: к.т.н., ученый секретарь – Терентьева Зинаида Сергеевна
Тел. +7 (916) 324-30-26, e-mail: conf.nti@bmstu.ru

Благодарю за внимание!

Александров Евгений
aleksandrov@bmstu.ru

