

HEA Express

Система моделирования структуры зёрен
и прогноза свойств высокоэнтропийных
сплавов на основе аperiodических решёток

Дмитрий Воынов
студент 4-го курса Международной Академии Информационных Технологий «ИТ ХАБ»



1

БРОНЗА

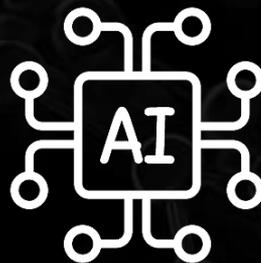
3000 г. до н.э.



2

**ТИТАНОВЫЕ
СПЛАВЫ**

20 век



3

HEA Express



Состав

Макс. температура

Макс. время (мин)



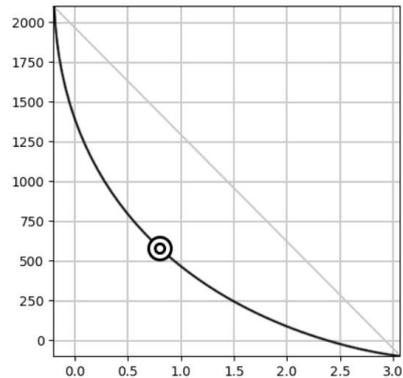
Co1Cr1Fe1Ni1

2000

3

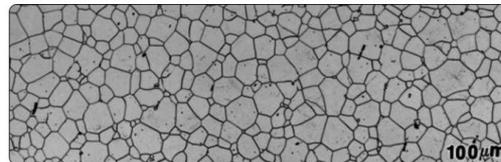


Термический цикл



Рассчитать

Сгенерированная структура

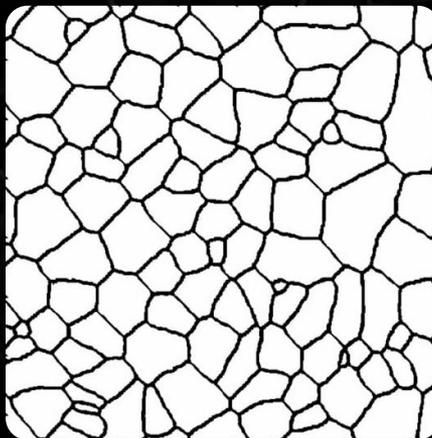


Свойство	Значение	Погрешность
Температура плавления	2322.24	1031
Плотность	11.73	1.208
Модуль Юнга	194.97	1.857
Разница в атомном радиусе	6.03	2.456
Электроотрицательность	1.20	0.429
Энергия дефекта решетки	0.38	2.138
Энтропия смешивания	5.15	0.972
Энтальпия смешивания	-16.64	2.942
Температура отпуска	1.80	3.558
Теплопроводность	-0.39	2.105
Энтальпия смешивания (высокая температура)	1.41	0.843
Атомный фактор упаковки	1.38	2.761

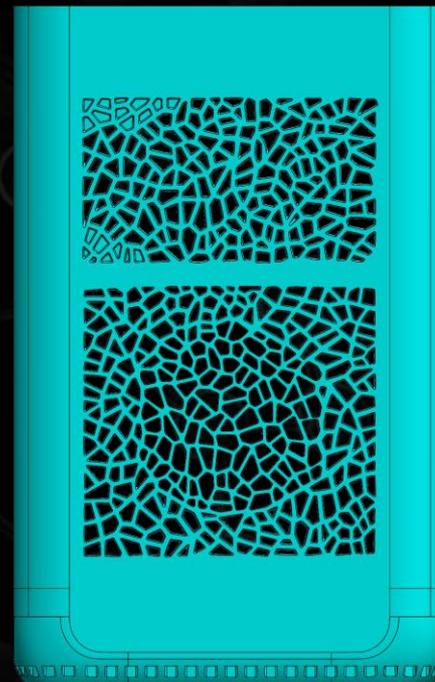
СТРУКТУРА СПЛАВА
ПОД МИКРОСКОПОМ



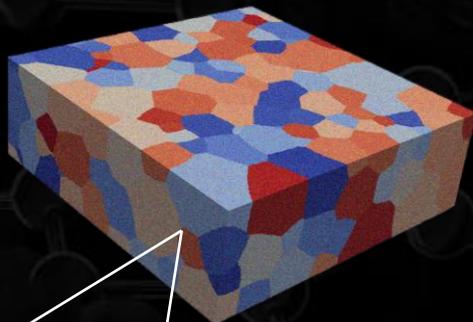
АПЕРИОДИЧЕСКАЯ
РЕШЕТКА



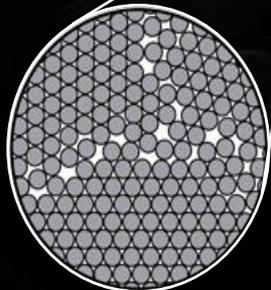
ЯНДЕКС СТАНЦИЯ 2



Co1Cr1Fe1Ni1

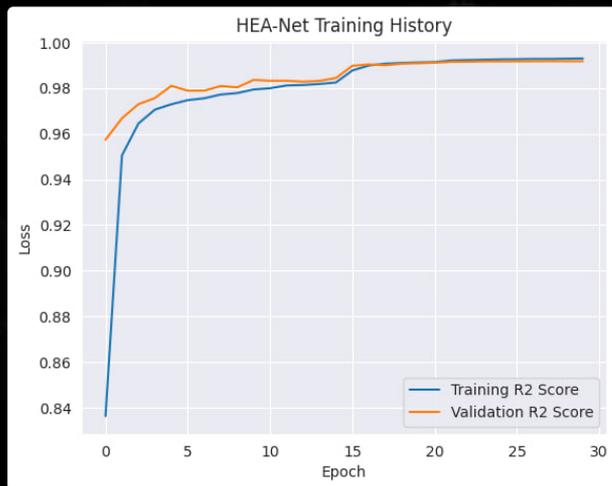


```
[  
[0.236, 0.141, ..., 0.000, 0.045],  
[0.006, 0.652, ..., 0.270, -0.556],  
[0.305, 0.569, ..., 0.023, 0.496],  
...,  
[0.421, 0.195, ..., -0.058, 0.477],  
[0.236, -0.141, ..., 0.000, 0.045],  
[0.844, -0.001, ..., 0.763, 0.201]  
]
```



АЛГОРИТМ МНОГОМАСШТАБНОЙ ВЕКТОРИЗАЦИИ СПЛАВА

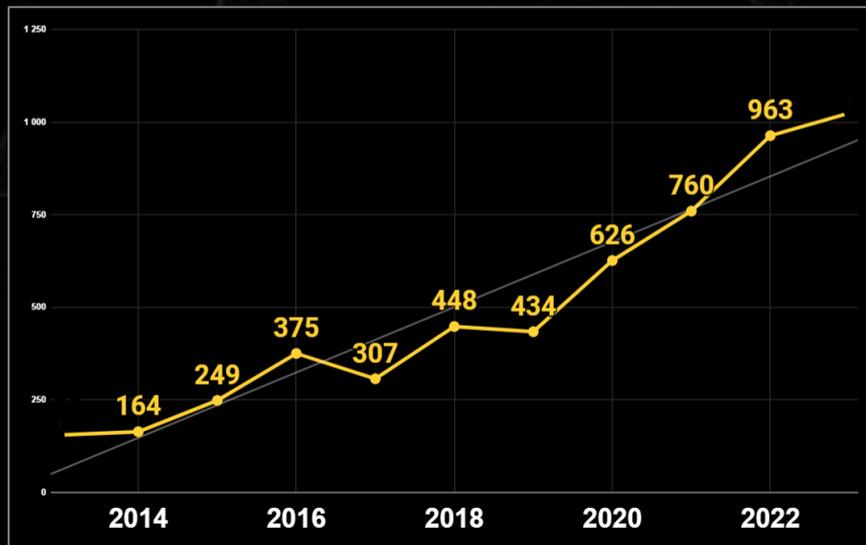
генерация зерновой структуры на основе
аперiodических решеток



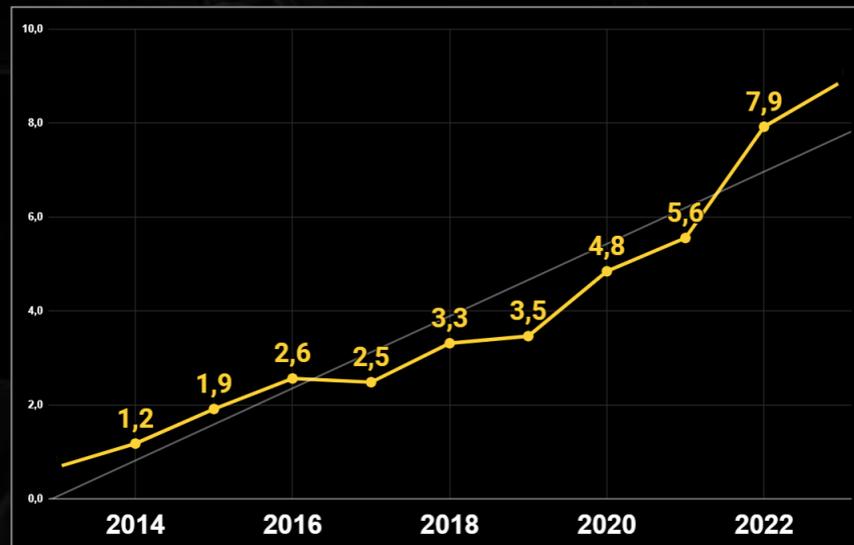
Свойство	Значение	Погрешность
Температура плавления	2322.24	1.031
Плотность	11.73	1.208
Модуль Юнга	194.97	1.857
Разница в атомном радиусе	6.03	2.456
Электроотрицательность	1.20	0.429
Энергия дефекта решетки	0.38	2.138
Энтропия смешивания	5.15	0.972
Энтальпия смешивания	-16.64	2.942
Температура отпуска	1.80	3.558
Теплопроводность	-0.39	2.105
Энтальпия смешивания (высокая температура)	1.41	0.843
Атомный фактор упаковки	1.38	2.761



Выручка Thermocalc, млн руб



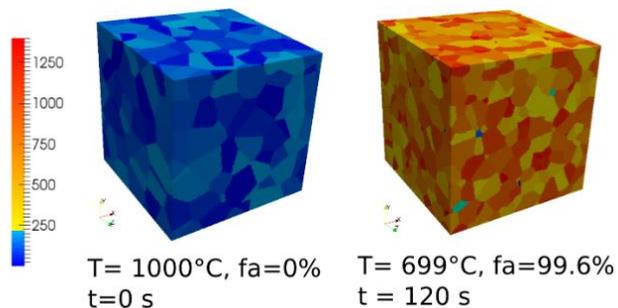
Выручка Comsol Multiphysics, млрд руб



MICRESS

Программное обеспечение для моделирования эволюции микроструктуры

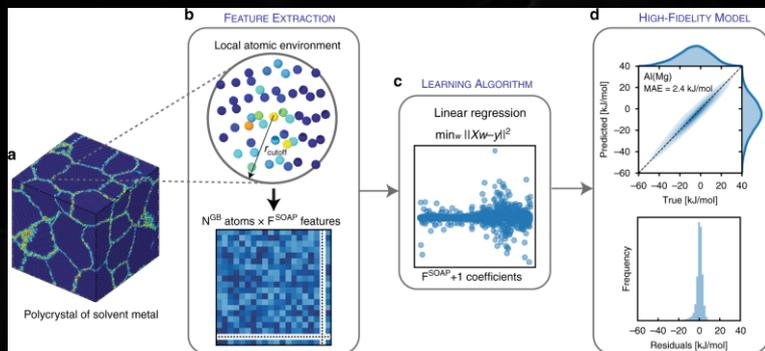
- Недоступность рядовому пользователю
- Для получения результатов требуется интеграция с другим ПО (Thermocalc)
- Санкционные риски



MIT

Изучение энергетических спектров сегрегации границ зерен в поликристаллах

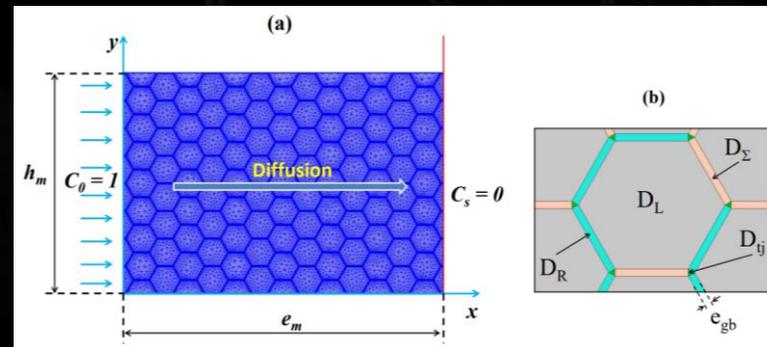
- Не коммерческий продукт
- Маленькая база данных (250 составов)
- Недоступность рядовому пользователю



University of La Rochelle

Моделирование диффузии водорода в гетерогенных материалах: влияние связности границ зерен. Материалы.

- Зарубежное ПО (COMSOL Multiphysics)
- Санкционные риски
- Дороговизна (8.6 млн руб)
- Периодичная решетка, не отражающая реальную структуру



- Подписка на месяц
- Тарификация по кол-ву расчетов



План реализации



ЦЕЛЕВЫЕ РАСХОДЫ

- 1** Увеличение вычислительных ресурсов
 - аренда сервера (70 тыс. руб. / год)
- 2** Консультации с профильными специалистами
 - консультации со специалистами (5-10 тыс. руб. / час)
- 3** Проверка результатов лабораторией
 - анализ 10 реальных образцов (178 тыс. руб.)
- 4** Разработка онлайн платформы
 - время разработчика (100 тыс. руб. / 2 месяца)

СПАСИБО ЗА ВАШЕ ВНИМАНИЕ!

TELEGRAM



HEA Express

Система моделирования структуры зёрен
и прогноза свойств высокоэнтропийных
сплавов на основе аperiodических решёток

Дмитрий Волынов

DVOLYNOV@GMAIL.COM