

# Федеральная целевая программа

«Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014—2020 годы»

## Информационно-телекоммуникационные системы

**Тема:** Разработка программно-вычислительного комплекса для компьютерного моделирования новых материалов на основе РЗМ и оценки их прочностных свойств в условиях сверхвысоких нагрузок

**Соглашение** 14.578.21.0095  
на период 2014 - 2016 гг.

**Руководитель проекта:** Заведующий кафедрой ЭАФУ,  
Горюнов Алексей Германович

**Получатель субсидии:** федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

### Цели и задачи проекта

Цель проекта - создание комплекса научно-технических решений (методов и алгоритмов), обеспечивающих высокую эффективность процесса исследования материалов на основе РЗМ путем компьютерного моделирования их структуры и свойств на базе масштабируемой системы распределенных вычислений.

Сокращение времени, материальных затрат и энергоресурсов на создание новых материалов с требуемыми характеристиками возможно за счет применения высокопроизводительных информационных систем и технологий автоматизации проектирования. Программный комплекс компьютерного моделирования свойств материалов на основе РЗМ позволит сократить затраты на разработку и испытание новых материалов.

### Ожидаемые результаты проекта

В результате выполнения ПНИЭР будут разработаны: компьютерные модели, обеспечивающие исследование физических свойств материалов на основе РЗМ; научно-технические основы для создания программно-вычислительного комплекса моделирования свойств материалов на основе РЗМ; алгоритмы и программное обеспечение, обеспечивающие в совокупности процесс проектирования материалов и исследования их характеристик в условиях сверхвысоких нагрузок.

Математические модели и алгоритмы разрабатываемые для программного комплекса позволят проводить исследования свойств материалов в автоматическом режиме с применением распределенной вычислительной ГРИД-сети.

### Перспективы практического использования

Результаты теоретических и экспериментальных исследований будут применяться при создании новых и повышении эффективности существующих подходов к проектированию высокотехнологичных материалов на основе РЗМ.

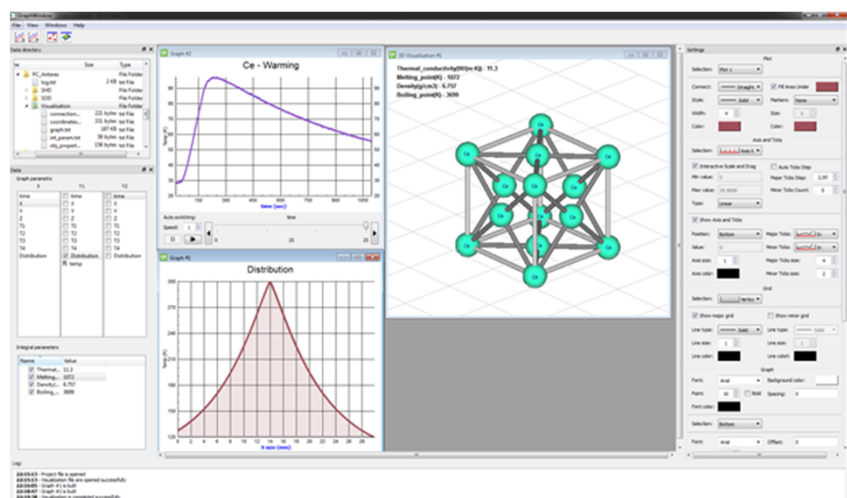
Полученные результаты окажут положительное влияние на развитие научных методов в области создания новых материалов и инструментальных средств для автоматизации исследования их свойств.

### Результаты исследовательской работы, полученные в 1-ом полугодии 2016 г.

В ходе 4 этапа проведены экспериментальные исследования базовых алгоритмов программного комплекса моделирования материалов на основе РЗМ, протокола и формата передачи данных, обеспечивающих внутреннее взаимодействие его компонентов и функции масштабирования вычислительной ГРИД-сети на основе гетерогенных вычислительных ресурсов, проведены экспериментальные исследования математической модели для расчетной оценки свойств материалов на основе РЗМ.

Новыми научными результатами, созданными на этапе 4, являются: способ организации распределенных систем хранения данных, способ организации распределенных систем обработки данных и математическая модель, обеспечивающая расчет свойств кристаллических структур на основе РЗМ.

Результаты экспериментальных исследований показали: разработанные алгоритмы обеспечивают преимущества программного комплекса моделирования материалов на основе РЗМ в части организации ресурсов памяти и масштабирования вычислительных ресурсов, программные модули в составе ЭО ПК обеспечивают его функционирование на базе одноранговой сети персональных компьютеров и централизованных серверов с клиент-серверной архитектурой.



Форма окна графического интерфейса пользователя экспериментального образца программного комплекса моделирования свойств материалов.

### Партнеры проекта

Индустриальным партнером получателя субсидии является научно-производственная коммерческая организация «Дипос», г. Томск. Сферой деятельности индустриального партнера является разработка и внедрение проблемно-ориентированного программного обеспечения, в том числе, в области автоматизации научных исследований. Внебюджетное финансирование работ по проекту, обеспечиваемое индустриальным партнером, составляет 6.3 млн. руб.

Соисполнителем работ по проекту является Национальный исследовательский Томский государственный университет. В ходе 4 этапа проекта ПНИЭР соисполнителем проведены экспериментальные исследования в части верификации разработанных математических моделей для расчетной оценки свойств и характеристик материалов.