

# 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 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 физико-химических свойств и элементного состава сплавов и лигатур на основе РЗМ; научно-технические основы для создания программно-вычислительного комплекса моделирования 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 научно-технических направлений в области автоматизации исследований и проектирования новых материалов.

Планируемые результаты могут применяться при создании международной базы материалов и методов расчетной оценки их свойств.

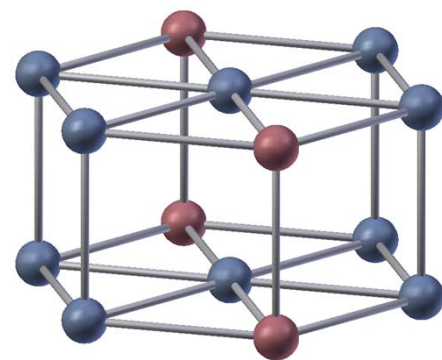
### Результаты исследовательской работы, полученные в 2015 г.

В настоящее время разработаны базовые функциональные алгоритмы программного комплекса моделирования материалов на основе РЗМ, протокол и формат передачи данных, обеспечивающие внутреннее взаимодействие его компонентов и функции масштабирования вычислительной ГРИД-сети на основе графических ускорителей, разработаны математические модели для расчетной оценки свойств материалов на основе РЗМ. Разработанные алгоритмы реализованы в виде подпрограмм.

Новым научным результатом является способ сохранения и разметки неструктурированных метаданных для полного описания процесса синтеза материалов в программном комплексе.

При синтезе функциональных алгоритмов программного комплекса учитывались достоинства и недостатки мировых аналогов, в том числе: OpenFOAM, MATLAB, GIMM\_FPEIP и Gaussian. Разработанные алгоритмы обеспечивают преимущества создаваемого программного комплекса моделирования материалов на основе РЗМ в части организации ресурсов памяти и масштабируемых вычислительных ресурсов.

Для организации взаимодействия компонентов программного комплекса поверх пользовательского протокола применены открытые протоколы сервера приложений Globus Toolkit 5 и сервера СУБД PostgreSQL. Обмен данными в программном комплексе осуществляется с помощью головного файла XML. Разметка файла соответствует логической структуре базы, в которой сохраняются данные об исследуемых материалах.



Структура элементарной ячейки кристаллической решетки сплава Al<sub>3</sub>Ti.  
Расчет характеристик выполнен с применением разработанных алгоритмов.

### Партнеры проекта

Индустриальным партнером получателя субсидии является 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 рамках проекта соисполнитель решает задачи верификации разработанных математических моделей для расчетной оценки свойств и характеристик материалов.