



Исследования
и разработки
Москва 2016

Приоритетное направление:
Информационно-телекоммуникационные системы
Программное мероприятие:
Проведение прикладных научных исследований и разработок, направленных на создание продукции и технологий

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

Соглашение № 14.578.21.0095 от 28.11.2016 на период 2014 - 2016 гг.

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

Руководитель проекта: Горюнов Алексей Германович

Получатель субсидии

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Национальный исследовательский Томский политехнический университет"

Индустриальный партнер

Научно-производственная коммерческая организация - Общество с ограниченной ответственностью "Дипос".

Основным видом деятельности Индустриального партнера является: проектирование и внедрение автоматизированных систем управления предприятиями; разработка и внедрение программного обеспечения автоматизации научных исследований.

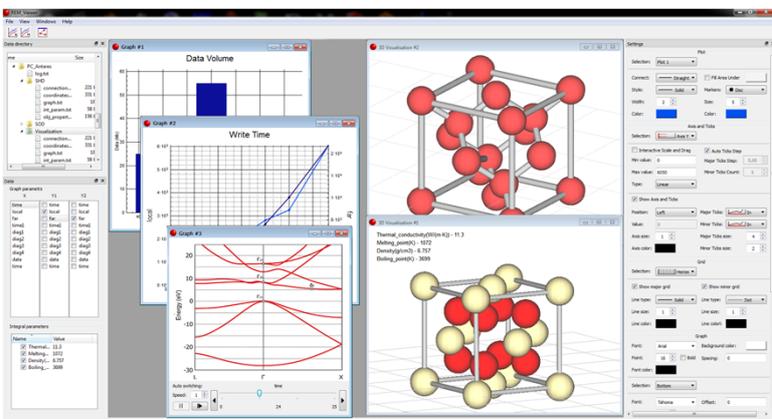
Роль Индустриального партнера заключается в разработке вспомогательного программного обеспечения и стендовой базы для проведения экспериментальных исследований разрабатываемых алгоритмов и программного комплекса моделирования материалов на основе редкоземельных металлов, а также в дальнейшей коммерциализации результатов проекта.

Ожидаемые результаты проекта

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

Текущие результаты проекта



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

При решении задач проекта разработаны алгоритмы и программный модуль для экспериментального образца программного комплекса моделирования материалов (ЭО ПК), обеспечивающие расчет базовых параметров кристаллической решетки материала с помощью метода молекулярной динамики. С помощью математической модели осуществляется расчет свойств материалов с учетом особенностей их атомной структуры.

Цели и задачи проекта

Создание комплекса научно-технических решений (методов и алгоритмов), обеспечивающих повышение эффективности научных исследований материалов на основе редкоземельных металлов (РЗМ) посредством компьютерного моделирования их структуры и свойств на базе масштабируемой ГРИД-сети персональных компьютеров.

Задачи проекта:

- разработка архитектуры, алгоритмов, математического и информационного обеспечения программного комплекса;
- разработка и программная реализация экспериментального образца программного комплекса;
- испытание программного комплекса и подтверждение достоверности модельных расчетов, выполняемых с его помощью.

Перспективы практического использования

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

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

Входящие в состав программного комплекса моделирования материалов алгоритмы и программное обеспечение распределенного хранения и обработки сверхбольших наборов данных, созданные в ходе проекта, обладают перспективой индивидуального практического применения в системах автоматизации научных исследований и в системах управления промышленными предприятиями.

Функционирование экспериментального образца программного комплекса моделирования материалов основано на применении одноранговой архитектуры сетевого взаимодействия.

В ходе проекта разработаны, реализованы в виде программ и экспериментально исследованы базовые алгоритмы программного комплекса моделирования материалов, протокол и формат передачи данных, обеспечивающие 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.

Новыми научными результатами являются: способ организации распределенных систем хранения данных, способ организации распределенных систем обработки данных и математическая модель обеспечивающие в совокупности расчет свойств кристаллических структур на основе РЗМ в автоматическом режиме.

Результаты экспериментальных исследований показали: разработанные алгоритмы обеспечивают преимущество программного комплекса моделирования материалов 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 централизованной сети с клиент-серверной архитектурой.

В ходе проекта создан экспериментальный образец информационной базы ЭО ПК, обеспечивающий поиск материалов по набору задаваемых макросвойств.