

**Министерство образования и науки Российской Федерации**  
федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

---

Институт – Физико-технический

Направление – Ядерные физика и технологии

Кафедра – Электроника и автоматика физических установок

Специальность – Электроника и автоматика физических установок

**ДИПЛОМНАЯ РАБОТА**

| Тема работы                                                              |
|--------------------------------------------------------------------------|
| <b>РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ<br/>ПРОЕКТИРОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ</b> |

УДК 004.415:620.22

Студент

| Группа | ФИО            | Подпись | Дата |
|--------|----------------|---------|------|
| 0711   | Золотарев А.А. |         |      |

Руководитель

| Должность | ФИО            | Ученая степень, звание      | Подпись | Дата |
|-----------|----------------|-----------------------------|---------|------|
| Доцент    | Обходский А.В. | канд. техн. наук,<br>доцент |         |      |

**КОНСУЛЬТАНТЫ:**

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

| Должность | ФИО             | Ученая степень, звание       | Подпись | Дата |
|-----------|-----------------|------------------------------|---------|------|
| Доцент    | Меньшикова Е.В. | канд. филос. наук,<br>доцент |         |      |

По разделу «Социальная ответственность»

| Должность | ФИО         | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|-----------|-------------|------------------------|---------|------|
| Ассистент | Акимов Д.В. |                        |         |      |

**ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:**

| Зав. кафедрой | ФИО          | Ученая степень, звание    | Подпись | Дата |
|---------------|--------------|---------------------------|---------|------|
| ЭАФУ          | Горюнов А.Г. | д-р техн. наук,<br>доцент |         |      |

Томск – 2017 г.

## ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП

| Код<br>результата                | Результат обучения<br>(выпускник должен быть готов)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
|----------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <i>Универсальные компетенции</i> |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
| Р1                               | Представлять современную картину мира на основе целостной системы естественнонаучных и математических знаний, а также культурных ценностей; понимать социальную значимость своей будущей профессии, обладать высокой мотивацией к выполнению профессиональной деятельности, защите интересов личности, общества и государства; быть готовым к анализу социально-значимых процессов и явлений, применять основные положения и методы гуманитарных, социальных и экономических наук при организации работы в организации, к осуществлению воспитательной и образовательной деятельности в сфере публичной и частной жизни. |
| Р2                               | Обладать способностями: действовать в соответствии с Конституцией РФ, исполнять свой гражданский и профессиональный долг, руководствуясь принципами законности и патриотизма, правилами и положениями, установленные законами и другими нормативными правовыми актами; к логическому мышлению, обобщению, анализу, прогнозированию, постановке исследовательских задач и выбору путей их достижения; понимать основы национальной и военной безопасности РФ; работать в многонациональном коллективе; формировать цели команды, применять методы конструктивного разрешения конфликтных ситуаций;                        |

|    |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
|----|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|    | использовать на практике навыки и умения в организации научно-исследовательских и научно-производственных работ.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| P3 | Самостоятельно, методически правильно применять методы самостоятельного физического воспитания для повышения адаптационных резервов организма и укрепления здоровья, готовностью к достижению и поддержанию должного уровня физической подготовленности для обеспечения полноценной социальной и профессиональной деятельности.                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
| P4 | Свободно владеть литературной и деловой письменной и устной речью на русском языке, навыками публичной и научной речи. Уметь создавать и редактировать тексты профессионального назначения, владеть одним из иностранных языков как средством делового общения.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
| P5 | Находить организационно-управленческие решения в нестандартных ситуациях и нести за них ответственность; быть готовым к принятию ответственности за свои решения в рамках профессиональной компетенции, принимать решения в нестандартных условиях обстановки и организовывать его выполнение, самостоятельно действовать в пределах предоставленных прав; самостоятельно применять методы и средства познания, обучения и самоконтроля для приобретения новых знаний и умений, в том числе в новых областях, непосредственно не связанных со сферой деятельности, развития социальных и профессиональных компетенций. |
| P6 | Применять основные законы естественнонаучных дисциплин, математический аппарат, вычислительную технику, современные методы исследований процессов и объектов для формализации, анализа и выработки решения профессиональных задач.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |

| <b><i>Профессиональные компетенции</i></b> |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
|--------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| P7                                         | <p>Уметь самостоятельно повышать уровень знаний в области профессиональной деятельности, приобретать с помощью информационных технологий и использовать в практической деятельности новые знания и умения; использовать научно-техническую информацию, отечественный и зарубежный опыт, методы научно-исследовательской и практической деятельности, современные компьютерные технологии и базы данных в своей предметной области; работать с информацией в глобальных компьютерных сетях; оценивать перспективы развития АСУ и АСНИ физических установок (вооружения и техники, процессов и аппаратов атомной промышленности и энергетики), использовать современные достижения в научно-исследовательских работах.</p> |
| P8                                         | <p>Применять знания о процессах в ядерных энергетических и физических установках, и о технологических процессах ядерного топливного цикла используя методы математического моделирования отдельных стадий и всего процесса для разработки АСУ ТП и АСНИ с применением пакетов автоматизированного проектирования и исследований.</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| P9                                         | <p>Использовать знания о протекающих процессах в ядерных энергетических установках, аппаратах производств ядерного топливного цикла, теории и практики АСУ ТП, при проектировании, настройке, наладке, испытаниях и эксплуатации современного оборудования, информационного, организационного, математического и программного обеспечения, специальных технических средств, сооружений, объектов и их систем; организовать эксплуатацию физических установок (вооружения и техники, процессов и аппаратов</p>                                                                                                                                                                                                            |

|     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|-----|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|     | <p>атомной промышленности и энергетики), современного оборудования и приборов с учетом требований руководящих и нормативных документов; быть готовым к освоению новых образцов физических установок, составлению инструкций по эксплуатации оборудования и программ испытаний.</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
| P10 | <p>Использовать технические средства и информационные технологии, проводить предварительное технико-экономического обоснования проектных расчетов устройств и узлов приборов и установок, расчет, концептуальную и проектную проработку программно-технических средств АСУ ТП и АСНИ, применять методы оптимизации, анализа вариантов, поиска решения многокритериальных задач с учетом неопределенностей объекта управления, разрабатывать способы применения программно-технических средств АСУ ТП и АСНИ, решать инженерно-физические и экономические задачи, применяя знания теории и практики АСУ, включающее математическое, информационное и техническое обеспечения, для проектирования, испытания, внедрения и эксплуатации АСУ ТП и АСНИ.</p> |
| P11 | <p>Понимать сущность и значение информации в развитии современного общества, соблюдать основные требования безопасности и защиты государственной тайны; выполнять мероприятия по восстановлению работоспособности физических установок (вооружения и техники, процессов и аппаратов атомной промышленности и энергетики) при возникновении аварийных ситуаций, разрабатывать методы уменьшения риска их возникновения; проводить анализ и оценку обстановки для принятия решения в случае возникновения аварийных ситуаций, экологическую</p>                                                                                                                                                                                                           |

|     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
|-----|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|     | безопасность, нормы и правило производственной санитарии, пожарной, радиационной и ядерной безопасности.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
| P12 | Разрабатывать проекты нормативных и методических материалов, технических условий, стандартов и технических описаний средств АСУ ТП и АСНИ, регламентирующих работу в сфере профессиональной деятельности; осуществлять разработку технического задания, расчет, проектную проработку современных устройств и узлов приборов, установок (образцов вооружения, программно-технических средств АСУ ТП и АСНИ), использовать знания методов анализа эколого-экономической эффективности при проектировании и реализации проектов.                                      |
| P13 | Использовать в профессиональной деятельности нормативные правовые акты в области защиты государственной тайны, интеллектуальной собственности, авторского права и в других областях; осуществлять поиск, изучение, обобщение и систематизацию научно-технической информации, нормативных и методических материалов в сфере своей профессиональной деятельности.                                                                                                                                                                                                    |
| P14 | Проявлять и активно применять способность к организации и управлению работой коллектива, в том числе: находить и принять управленческие решения в сфере профессиональной деятельности; разрабатывать планы работы коллективов; контролировать соблюдение технологической дисциплины, обслуживания, технического оснащения, размещения технологического оборудования; организовывать учет и сохранность физических установок (вооружения и техники), соблюдение требований безопасности при эксплуатации; использовать основные методы защиты персонала и населения |

|     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
|-----|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|     | от возможных последствий аварий, катастроф, стихийных бедствий.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| P15 | <p>Демонстрировать способность к осуществлению и анализу научно-исследовательских, технологических и пуско-наладочных работ, разработке планов и программ их проведения, включая ядерно-физические эксперименты, выбору методов и средств решения новых задач с применением современных электронных устройств, представлению результатов исследований и формулированию практических рекомендаций их использования в формах научно-технических отчетов, обзоров, публикаций по результатам выполненных работ; выполнять полный объем работ, связанных с техническим обслуживанием физических установок с учетом требований руководящих и нормативных документов.</p> |

**Министерство образования и науки Российской Федерации**  
федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

---

Институт – Физико-технический

Направление – Ядерные физика и технологии

Кафедра – Электроника и автоматика физических установок

Специальность – Электроника и автоматика физических установок

**УТВЕРЖДАЮ**

Зав. кафедрой ЭАФУ ФТИ

\_\_\_\_\_ А.Г. Горюнов

«3» октября 2016 г.

**ЗАДАНИЕ**

**на выполнение выпускной квалификационной работы**

**В форме:**

|                  |
|------------------|
| Дипломной работы |
|------------------|

**Студенту:**

|        |                 |
|--------|-----------------|
| Группа | ФИО             |
| 0711   | Золотареву А.А. |

**Тема работы:**

|                                                               |                        |
|---------------------------------------------------------------|------------------------|
| Разработка программного обеспечения проектирования материалов |                        |
| <b>Утверждена приказом директора ФТИ</b>                      | от 31.10.2016 № 9286/с |

|                                                |                   |
|------------------------------------------------|-------------------|
| <b>Дата сдачи студентом выполненной работы</b> | 23 января 2016 г. |
|------------------------------------------------|-------------------|

**ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:**

|                                 |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
|---------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Исходные данные к работе</b> | Объектом исследования является программное обеспечение проектирования материалов, функционирующее в составе программного пакета моделирования материалов.<br>Программное обеспечение должно обеспечивать:<br>1. Формирование исходной структуры и ее параметров для моделируемого материала.<br>2. Уточнение параметров исходной структуры материала методом МД.<br>3. Автоматизированную настройку исходных данных для расчета параметров структуры материала. |
|---------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|



|                                                                               |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
|-------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                               | <p>4. Автоматизированную настройку исходных данных для расчета свойств материала методом Хартри-Фока.</p> <p>5. Функционирование на базе ЭВМ x86 с минимальными техническими характеристиками:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– частота процессора, ГГц – 1,5;</li> <li>– объем ОЗУ, ГБ – 2;</li> <li>– объем ПЗУ ГБ – 20;</li> <li>– ОС Windows/Linux.</li> </ul> <p>6. Формирование результатов расчета параметров материала для последующей визуализации.</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
| <b>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</b> | <ul style="list-style-type: none"> <li>– Аналитический обзор существующих решений для создания ПО проектирования материалов.</li> <li>– Разработка алгоритма автоматизированного расчета параметров атомных структур методом молекулярной динамики.</li> <li>– Разработка структуры ПО проектирования материалов.</li> <li>– Разработка обобщенного алгоритма расчета исходных данных для моделирования материалов и отдельных программных модулей в составе ПО проектирования материалов.</li> <li>– Программная реализация разработанных алгоритмов ПО проектирования материалов.</li> <li>– Экспериментальные испытания алгоритмов и ПО проектирования материалов.</li> <li>– Верификация математической модели МД в составе ПО проектирования материалов.</li> </ul> <p>В результате выполнения дипломной работы разработан алгоритм и ПО проектирования материалов, обеспечивающие автоматизированный расчет параметров атомных структур в составе программного пакета моделирования материалов.</p> |
| <b>Перечень графического материала</b>                                        | <p>Схема алгоритма автоматизированного расчета параметров атомных структур. Схемы алгоритмов функционирования программных модулей ПО проектирования материалов.</p> <p>Чертежи форм графического интерфейса пользователя ПО проектирования материалов.</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
| <b>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</b>             |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
| <b>Раздел</b>                                                                 | <b>Консультант</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
| Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение               | доцент, канд. филос. наук<br>Меньшикова Е.В.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |

|                                                                                                              |                                            |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------|
| Социальная ответственность                                                                                   | ассистент<br>Акимов Д.В.                   |
| Аналитический обзор                                                                                          | канд. техн. наук, доцент<br>Обходский А.В. |
| Разработка ПО проектирования материалов для функционирования программного комплекса моделирования материалов |                                            |

|                                                                                                 |                   |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------|
| <b>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</b> | 3 октября 2016 г. |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------|

**Задание выдал руководитель:**

| Должность           | ФИО            | Ученая степень, звание      | Подпись | Дата    |
|---------------------|----------------|-----------------------------|---------|---------|
| Доцент каф.<br>ЭАФУ | Обходский А.В. | канд. техн.<br>наук, доцент |         | 3.10.16 |

**Задание принял к исполнению студент**

| Группа | ФИО            | Подпись | Дата    |
|--------|----------------|---------|---------|
| 0711   | Золотарев А.А. |         | 3.10.16 |

## РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работы 108 с., 14 рис., 20 табл., 30 источников, 2 прил, 16 л. граф. материалов.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАТЕРИАЛОВ,  
АВТОМАТИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА МОДЕЛИРОВАНИЯ, МЕТОД  
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ, ПОТЕНЦИАЛ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ,  
ПАРАМЕТРЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

Цель работы – обеспечить автоматизированный режим проектирования и расчета параметров атомных структур в программном пакете моделирования материалов.

В работе был проведен обзор литературы по методам молекулярно-динамических расчетов. Проведен обзор существующих программных решений. Составлен и реализован на языке программирования алгоритм проектирования материалов, обеспечивающий автоматизированное проектирование и расчет параметров атомных структур для последующих расчетов свойств материалов методами из первых принципов. Определены основные требования к программному продукту. Разработан программный модуль для выполнения расчетов параметров атомных структур методом молекулярной динамики.

## **ОПРЕДЕЛЕНИЯ, ОБОЗНАЧЕНИЯ, СОКРАЩЕНИЯ, НОРМАТИВНЫЕ ССЫЛКИ**

В данной работе использованы ссылки на следующие стандарты:

ГОСТ Р 53325–2012 Технические средства пожарной автоматики.  
Общие технические требования и методы испытаний

ГОСТ 12.1.003–83 Система стандартов безопасности труда. Шум. Общие  
требования безопасности

В данной работе применены следующие обозначения и сокращения:

Программное обеспечение проектирования материалов; ППМ.

Программная библиотека математической модели; ПБММ.

Программное обеспечение; ПО.

Графический процессор; GPU.

Метод молекулярной динамики; МД.

Микроканонический ансамбль; NVE.

Канонический ансамбль; NVT.

Трудовой кодекс; ТК.

Жидкокристаллический; ЖК.

Техника безопасности; ТБ.

Электронно-вычислительная машина; ЭВМ.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

|                                                                                                     |    |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Введение.....                                                                                       | 16 |
| 1 Аналитический обзор информационных источников .....                                               | 17 |
| 1.1 Обзор существующих решений для создания программного обеспечения проектирования материалов..... | 17 |
| 1.2 Программный пакет GROMACS .....                                                                 | 18 |
| 1.3 Пакет моделирования LAMMPS .....                                                                | 18 |
| 1.4 Программный пакет CP2K .....                                                                    | 19 |
| 1.5 Метод молекулярной динамики .....                                                               | 20 |
| 1.6 Вывод по разделу .....                                                                          | 22 |
| 2 Разработка программного обеспечения проектирования материалов .....                               | 25 |
| 2.1 Разработка структуры.....                                                                       | 25 |
| 2.2 Алгоритмы функционирования программных компонентов.....                                         | 27 |
| 2.2.1 Модуль формирования исходной структуры.....                                                   | 27 |
| 2.2.2 Модуль настройки МД расчетов .....                                                            | 29 |
| 2.2.3 Расчетный модуль молекулярной динамики .....                                                  | 32 |
| 2.2.4 Модуль настройки программной библиотеки математической модели .....                           | 35 |
| 2.3 Структура входных и выходных файлов.....                                                        | 39 |
| 2.4 Вывод по разделу. ....                                                                          | 42 |
| 3 Экспериментальная часть.....                                                                      | 44 |
| 3.1 Проверка работоспособности ПО .....                                                             | 44 |
| 3.2 Верификация расчетной модели МД в составе ПО проектирования материалов .....                    | 45 |
| 4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение..                                 | 47 |
| 4.1 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения..... | 47 |
| 4.2 FAST-анализ .....                                                                               | 49 |

|                                                                                  |     |
|----------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 4.3 SWOT-анализ.....                                                             | 52  |
| 4.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации.....                            | 54  |
| 4.5 Инициация проекта.....                                                       | 56  |
| 4.6 Бюджет научного исследования.....                                            | 59  |
| 4.7 Реестр рисков проекта.....                                                   | 67  |
| 4.8 Оценка сравнительной эффективности исследования.....                         | 67  |
| 5 Социальная ответственность .....                                               | 72  |
| 5.1 Введение.....                                                                | 72  |
| 5.2 Характеристика вредных и опасных факторов, имеющих место в лаборатории ..... | 74  |
| 5.3 Электробезопасность.....                                                     | 74  |
| 5.4 Мероприятия по борьбе с производственным шумом.....                          | 77  |
| 5.5 Мероприятия по пожарной безопасности .....                                   | 78  |
| 5.6 Мероприятия по выполнению норм естественного и искусственного освещения..... | 79  |
| 5.7 Мероприятия по выполнению норм вентиляции и отопления.....                   | 82  |
| 5.8 Охрана окружающей природной среды.....                                       | 82  |
| 5.9 Выводы по разделу .....                                                      | 83  |
| Заключение .....                                                                 | 84  |
| Список используемых источников.....                                              | 86  |
| Приложение А. Текст программы .....                                              | 89  |
| Приложение Б. Презентация дипломной работы на отдельных листах.....              | 108 |
| Титульный лист                                                                   |     |
| Актуальность работы                                                              |     |
| Цель и задачи                                                                    |     |
| Анализ существующих программных решений                                          |     |
| Функции ПО проектирования материалов                                             |     |
| Структура ПО                                                                     |     |
| Алгоритм проектирования материала                                                |     |
| Разработка интерфейса пользователя                                               |     |

Математическая модель расчета параметров материала методом МД  
Выходные данные ПО проектирования материалов  
Испытание разработанного ПО  
Результаты работы  
Затраты на разработку  
Публикации по теме дипломной работы  
Диск CD-R в конверте на обороте обложки  
643.ФЮРА.00002-01 81 01. Пояснительная записка ВКР. Файл  
Золотарев\_ВКР.doc  
Презентация к ВКР. Файл Золотарев\_ВКР\_презентация.pptx  
Текст программы. Файл Золотарев.txt  
Входной файл для программы. Файл base.txt  
Входной файл для программы. Файл initCoordinates.txt  
Выходной файл. Файл Coordinates.txt  
Выходной файл. Файл Temperature.txt  
Выходной файл. Файл Energy.txt  
Выходной файл. Файл inputMath.txt

## ВВЕДЕНИЕ

Рост производительности вычислительной техники дает все большие возможности для расчетов, которые раньше произвести было невозможно. Одновременно с этим ростом идет расширение теоретической базы, задачи которой направлены как в сторону оптимизации существующих, так и создания новых методов расчетной оценки свойств атомных структур. Практически всегда существует спрос на новые материалы с выдающимися свойствами, применяемые в самых разных областях. Преимущества внедрения компьютерного моделирования новых материалов перед экспериментом очевидны. Получение теоретических значений свойств того или иного материала освобождает исследователей от ручных расчетов. С другой стороны, можно использовать компьютерное моделирование при исследовании свойств уже существующих материалов. В любом случае моделирование является выгодным как экономически, так и по временным затратам.

В существующих программных продуктах отсутствует возможность автоматизированной настройки методов и параметров расчетов. Это весьма затрудняет процесс исследования материалов, а пользователям необходимо тратить продолжительное время на формирование исходных данных для проведения расчетов. Так же следует отметить, что разрабатываемый программный продукт будет использоваться в составе программного пакета моделирования материалов, что обеспечит возможность распределенного хранения экспериментальных данных, а также их визуализацию.

|                  |             |                  |                |             |                                              |             |               |
|------------------|-------------|------------------|----------------|-------------|----------------------------------------------|-------------|---------------|
|                  |             |                  |                |             | <i>643.ФЮРА.00002-01 81 01</i>               |             |               |
|                  |             |                  |                |             |                                              |             |               |
| <i>Изм.</i>      | <i>Лист</i> | <i>№ докум.</i>  | <i>Подпись</i> | <i>Дата</i> |                                              |             |               |
| <i>Разраб.</i>   |             | <i>Золотарев</i> |                |             | <i>Введение</i>                              |             |               |
| <i>Провер.</i>   |             | <i>Обходский</i> |                |             |                                              |             |               |
| <i>Консульт</i>  |             |                  |                |             |                                              |             |               |
| <i>Н. Контр.</i> |             | <i>Ефремов</i>   |                |             |                                              |             |               |
| <i>Утверд.</i>   |             | <i>Горюнов</i>   |                |             |                                              |             |               |
|                  |             |                  |                |             | <i>Лит.</i>                                  | <i>Лист</i> | <i>Листов</i> |
|                  |             |                  |                |             |                                              |             |               |
|                  |             |                  |                |             | <i>ТПУ      ФТИ</i><br><i>Группа    0711</i> |             |               |



# 1 Аналитический обзор информационных источников

## 1.1 Обзор существующих решений для создания программного обеспечения проектирования материалов

На сегодняшний день существует множество методов для расчета различных параметров атомных структур. Каждый имеет свою специализацию, точность, критерии применимости и т.д. Все методы компьютерного моделирования атомных структур можно разделить на методы из первых принципов и эмпирические методы [1]. Как правило, расчеты из первых принципов обладают более высокой точностью в сравнении с эмпирическими методами [2]. Однако они требуют большие вычислительные ресурсы, при относительно малом количестве атомов в моделируемой системе. Наиболее востребованным эмпирическим методом, на сегодняшний день, является метод молекулярной динамики. Метод МД позволяет моделировать системы, состоящие из большого числа атомов (более десятков тысяч) [3].

Метод молекулярной динамики и методы из первых принципов (HF, DFT) широко используется в ПО для расчета свойств материалов. Каждое из существующих ПО имеет свои достоинства и недостатки [4]. В основном, главным недостатком существующих программных продуктов, является высокое требование к уровню знаний пользователя в области компьютерного моделирования материалов. Также, существенным недостатком является отсутствие возможности проведения расчетов в автоматизированном режиме. Под автоматизированным режимом понимается такой режим проведения экспериментальных расчетов, при котором участие пользователя в формировании исходных данных минимально. Химик-исследователь, в свою очередь, не всегда обладает знаниями и имеет опыт в проведении

|           |           |          |         |      |                                                     |  |  |             |      |        |
|-----------|-----------|----------|---------|------|-----------------------------------------------------|--|--|-------------|------|--------|
|           |           |          |         |      | 643.ФЮРА.00002-01 81 01                             |  |  |             |      |        |
| Изм.      | Лист      | № докум. | Подпись | Дата |                                                     |  |  |             |      |        |
| Разраб.   | Золотарев |          |         |      | Аналитический обзор<br>информационных<br>источников |  |  | Лит.        | Лист | Листов |
| Провер.   | Обходский |          |         |      |                                                     |  |  |             |      |        |
| Консульт  |           |          |         |      |                                                     |  |  | ТПУ ФТИ     |      |        |
| Н. Контр. | Ефремов   |          |         |      |                                                     |  |  | Группа 0711 |      |        |
| Утверд.   | Горюнов   |          |         |      |                                                     |  |  |             |      |        |

компьютерного моделирования материалов с помощью сложного, специального ПО. Существующие программные продукты не обеспечивают такой режим проведения экспериментов, а требования к уровню знаний пользователя в области компьютерного моделирования остаются весьма велики.

## **1.2 Программный пакет GROMACS**

Программный пакет GROMACS разработан для моделирования биомолекул, но имеется возможность моделировать кристаллические структуры. Считается одним из самых быстрых программных продуктов моделирования методом МД. Имеется возможность переноса части расчетов парных потенциалов на GPU. Gromacs является свободным ПО с открытым исходным кодом. Пакет Gromacs поддерживает исполнение на ОС Windows и Linux [4,5].

Пакет моделирования Gromacs состоит из набора отдельных исполняемых файлов, каждый из которых выполняет отдельный этап проведения эксперимента [6]. Главным, и самым существенным недостатком данного программного продукта является отсутствие графического интерфейса. Формирование исходных данных, задание параметров и условий для проведения расчетов осуществляется в ручном режиме, путем ввода интерпретируемых команд в консольное приложение или в текстовый файл. Такой подход в формировании исходных данных отнимает довольно существенную часть времени у химика-исследователя.

## **1.3 Пакет моделирования LAMMPS**

Программный пакет LAMMPS является свободным ПО с открытым исходным кодом с возможностью компиляции кода под ОС Linux, Windows.

Он предназначен для моделирования материалов в твердом состоянии методом МД. В пакете LAMMP реализована поддержка множества парных короткодействующих потенциалов взаимодействия. Также, реализованы более сложные потенциалы, такие как EAM и AI-REBO. Для расчета сил в системах с кулоновским взаимодействием предусмотрен метод суммирования по Эвальду. Пакет LAMMPS содержит в себе встроенные методы стабилизации давления (баростаты) и температуры (термостаты) в системе. Имеется возможность проведения анализа данных, полученных в результате моделирования. Пакет моделирования LAMMP позволяет проводить расчеты на графических процессорах (поддерживающих технологию CUDA). Графические процессоры используются только для расчетов кулоновских потенциалов взаимодействия и потенциалов взаимодействия Леннарда-Джонса. Визуализация результатов моделирования осуществляется с помощью сторонних программ визуализации [7,8].

Пакет LAMMPS давно используется авторами для моделирования материалов и компонентов сложных объектов. Он обеспечивает хорошую точность описания структурных и энергетических характеристик систем, включающих до нескольких миллионов атомов [9,10]. Однако несмотря на все его преимущества, пакет LAMMPS остается сложным в освоении программным продуктом. Формирование исходных данных для моделирования занимает у химика-исследователя довольно продолжительное время. Как и в случае с GROMACS, LAMMPS обладает аналогичными недостатками.

#### **1.4 Программный пакет CP2K**

CP2K это программа предназначенная для симуляции твердых кристаллических веществ, жидкостей, молекулярных и биологических систем. Помимо симуляции методом молекулярной динамики, существует возможность проведения расчетов из первых принципов методом DFT.

Включена поддержка ряда полуэмпирических методов и классических силовых полей (AMBER, CHARMM). Пакет CP2K имеет возможность интеграции в комплекс моделирования GAUSSIAN. Для расчетов методом молекулярной динамики доступен целый ряд ансамблей и сопутствующих термостатов, баростатов. Имеется возможность проведения параллельных вычислений [11,12]. Как и вышеперечисленные программные продукты, CP2K не лишен аналогичного недостатка – отсутствие простого и в тоже время функционального интерфейса.

### **1.5 Метод молекулярной динамики**

Преимуществом метода МД является возможность получения как информации о структуре исследуемой атомной системы, так и ее термодинамических характеристик [13]. Метод МД может дать информацию о параметрах, которые с высокой достоверностью описывают реальные, экспериментальные параметры веществ [14,15]. Рассчитанные параметры исследуемой атомной системы, такие как координаты атомов при определенных термодинамических условиях, возможно использовать для дальнейших расчетов методами из первых принципов.

В методе МД для описания движения атомов применяется классическая Ньютоновская механика. Силы межатомного взаимодействия описываются в форме потенциальных сил [16,17]. Общий алгоритм метода МД представлен следующим образом:

1. Начальные массы, скорости и положения каждого атома определены;
2. Метод использует заранее определенные межатомные потенциалы парного взаимодействия, как функции потенциальной энергии, в простейшем случае зависящие от расстояния между атомами;
3. Используя исходные скорости и координаты атомов, рассчитываются новые координаты атомов через определенный временной шаг моделирования. Полученные координаты и скорости атомов

используются для расчета новых координат и скоростей на следующем шаге моделирования.

4. Как правило, моделирование методом МД может включать до нескольких тысяч временных шагов, каждый из которых соответствует доле пикосекунды [18,19].

На больших промежутках времени точное определение траекторий движения атомов в системе не является необходимым для получения результатов термодинамического и макроскопического характеров. Полученные в ходе расчетов методом МД конфигурации, распределены в соответствии с некоторым термодинамическим ансамблем.

Алгоритм МД, по существу, – интеграция уравнений движения материальной точки во времени, что приводит к определению скоростей и координат атомов [20].

$$\begin{cases} m_i \frac{d^2 \bar{r}_i}{dt^2} = \bar{F}_i = -\bar{\nabla}_i \left( \left\{ \bar{r}_j, j=1...N \right\} \right), \\ i=1...N \end{cases} \quad (1.1)$$

где

$$\bar{\nabla}_i = \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{e}_x + \frac{\partial}{\partial y_i} \bar{e}_y + \frac{\partial}{\partial z_i} \bar{e}_z$$

В методе МД можно использовать различные схемы интегрирования, от простейших методов Эйлера первого порядка до схем прогноза и коррекции. Особенно важным критерием при выборе схемы интегрирования является его высокая точность и скорость работы. В молекулярной динамике наиболее широко используется схема Верле в скоростной форме, являющаяся компромиссом между скоростью и точностью процедуры. Эта схема является, одной из самых точных схем интегрирования первого порядка. Схема Верле:

$$\bar{r}_i(t + \Delta t) = \bar{r}_i(t) + \bar{v}_i(t)\Delta t + \frac{1}{2}\bar{a}_i(t)\Delta t^2 \quad (1.2)$$

$$\bar{v}_i(t + \Delta t) = \bar{v}_i(t) + \frac{1}{2}[\bar{a}_i(t) + \bar{a}_i(t + \Delta t)]\Delta t, \quad (1.3)$$

где

$\bar{r}_i$  – радиус-вектор i-го атома;

$\bar{v}_i$  – скорость i-го атома;

$\bar{a}_i$  – ускорение i-го атома;

$t$  – время.

## 1.6 Вывод по разделу

При использовании большинства программных пакетов, указанных в таблице 1, как новые, так и опытные пользователи испытывают множество затруднений. Затруднения возникают при формировании данных о исследуемой структуре, а также при ручной настройке методов расчета. В большинстве программных комплексов исходные данные о исследуемой структуре, выбор и настройка потенциалов взаимодействия, выбор и настройка базисных наборов осуществляется ручным вводом команд. Те же программные продукты, которые относительно просты в использовании имеют малое количество инструментов для работы с материалами, что ставит их использование под вопрос.

Таблица 1 – Сравнительный анализ программных продуктов, обеспечивающий расчет исходных параметров материалов

| Название | Условия распространения | Поддержка ММ | Поддержка HF, DFT | Поддержка GPU | Автоматизированный подбор потенциалов взаимодействия | Автоматизированный подбор базисного набора |
|----------|-------------------------|--------------|-------------------|---------------|------------------------------------------------------|--------------------------------------------|
| Gaussian | Платная                 | +            | +                 | -             | -                                                    | +                                          |
| CP2K     | Бесплатная              | +            | +                 | +             | -                                                    | -                                          |
| GROMACS  | Бесплатная              | +            | -                 | +             | -                                                    | -                                          |
| GROMOS   | Платная                 | +            | -                 | +             | -                                                    | -                                          |
| GULP     | Платная                 | +            | -                 | -             | -                                                    | -                                          |
| LAMMPS   | Бесплатная              | +            | -                 | +             | -                                                    | -                                          |
| RedMD    | Платная                 | +            | -                 | -             | -                                                    | -                                          |

Разрабатываемый на кафедре ЭАФУ ПО моделирования материалов, подразумевает наличие некоего модуля автоматизированной настройки расчетов. Этот модуль предоставляет рекомендации по выбору потенциалов взаимодействия для проведения расчетов методом МД. Выходные рассчитанные координаты атомов в системе могут использоваться в качестве входных данных для расчетов методом Хартри-Фока. При настройке расчетов методом Хартри-Фока также предоставляются рекомендации по выбору базисного набора. Реализация алгоритмов молекулярно-динамических расчетов в разрабатываемом ПО обусловлена необходимостью формирования исходных данных (координат атомов при определенных термодинамических условиях) для проведения расчетов методом Хартри-Фока в автоматизированном режиме.

При формировании исходных данных расчета, пользователю необходимо внести минимальное количество данных: данные о изначальной исследуемой структуре, выбрать статистический ансамбль и соответствующие

ему термодинамические параметры. После окончания вычислений методом МД, уточненные координаты атомов в системе передаются на вход метода Хартри-Фока. Для опытных пользователей необходимо иметь возможность более тонкой настройки расчетов.

Такой подход, может обеспечить простой и автоматизированный расчет свойств материалов, в сравнении с существующими решениями.



## 4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

### 4.1 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

В данной части работы проводится оценка коммерческой ценности разрабатываемого программного продукта. Стоит помнить о том, что коммерческая привлекательность исследования зависит не только от технических характеристик полученного продукта, но и от того, насколько проект востребован, какова будет его стоимость и сколько времени потребуется для выхода на рынок. На эти вопросы призвана ответить экономическая часть данной работы.

Для определения конкурентоспособности продукта и направлений ее повышения большое значение имеет анализ конкурентных технических решений. Необходимо оценить их сильные и слабые стороны. Для этого может быть использована любая имеющаяся информация о продукте-конкуренте, которая может быть наглядно представлена в виде оценочной карты.

Бк1 – пакет программ под названием GROMACS. Этот пакет разработан командой исследователей из университета Гронингена и предназначен для компьютерного моделирования атомных систем методом молекулярной динамики. В настоящее время поддерживается командой исследователей из королевского технологического института и университета Упсалы.

|           |            |          |         |      |                                                                       |        |        |
|-----------|------------|----------|---------|------|-----------------------------------------------------------------------|--------|--------|
|           |            |          |         |      | 643.ФЮРА.00002-01 81 01                                               |        |        |
| Изм.      | Лист       | № докум. | Подпись | Дата |                                                                       |        |        |
| Разраб.   | Золотарев  |          |         |      | Финансовый менеджмент,<br>ресурсоэффективность и<br>ресурсосбережение | Лит.   | Лист   |
| Провер.   | Меньшикова |          |         |      |                                                                       |        | Листов |
| Консульт  |            |          |         |      |                                                                       |        |        |
| Н. Контр. | Ефремов    |          |         |      |                                                                       | ТПУ    | ФТИ    |
| Утверд.   | Горюнов    |          |         |      |                                                                       | Группа | 0711   |

Бк2 – программный пакет LAMMPS. Предназначен для расчетов методом классической молекулярной динамики. Разработан группой исследователей из Сандийских национальных лабораторий.

Анализ конкурентных технических решений целесообразно проводить с помощью оценочной карты (таблица 4).

Таблица 4 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

| Критерии оценки                                 | Вес критерия | Баллы |     |     | Конкурентоспособность |      |      |
|-------------------------------------------------|--------------|-------|-----|-----|-----------------------|------|------|
|                                                 |              | Бф    | Бк1 | Бк2 | Кф                    | К1   | К2   |
| Цена                                            | 0,10         | 5     | 3   | 5   | 0,5                   | 0,3  | 0,5  |
| Поддержка методов моделирования                 | 0,10         | 2     | 3   | 3   | 0,2                   | 0,3  | 0,3  |
| Количество доступных потенциалов взаимодействия | 0,20         | 3     | 3   | 4   | 0,6                   | 0,6  | 0,6  |
| Поддержка GPU                                   | 0,03         | 1     | 5   | 3   | 0,03                  | 0,15 | 0,09 |
| Качество интерфейса                             | 0,20         | 5     | 2   | 3   | 1                     | 0,6  | 0,6  |
| Простота эксплуатации                           | 0,25         | 4     | 2   | 3   | 1                     | 0,5  | 0,75 |
| Визуализация                                    | 0,09         | 2     | 1   | 3   | 0,18                  | 0,09 | 0,27 |
| Занимаемое место на диске                       | 0,03         | 2     | 5   | 4   | 0,06                  | 0,15 | 0,12 |
| Итого:                                          | 1            | 24    | 24  | 28  | 3,57                  | 2,69 | 3,23 |

В соответствии с соотношением:

$$\frac{3,57}{3,23} = 1,2; \quad (4.1)$$

можно сделать вывод, что разработка достаточно конкурентно способна.

Из таблицы 3 можно сделать вывод о том, что наиболее важными параметрами являются простота эксплуатации и количество доступных потенциалов взаимодействия.

## 4.2 FAST-анализ

В качестве объекта fast-анализа выступает разрабатываемый программный продукт, предназначенный для расчетов параметров атомных структур. Основной функцией, выполняемой объектом, расчет параметров атомных структур. Главная, основные и вспомогательные функции приведены в таблице 5.

Таблица 5 – Функции, выполняемые программой

| Наименование процесса                                 | Выполняемая функция                                                                                                                        | Ранг функции |          |                 |
|-------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|----------|-----------------|
|                                                       |                                                                                                                                            | Главная      | Основная | Вспомогательная |
| Автоматизированный процесс подготовки исходных данных | Предоставление пользователю возможности автоматизированного сбора и подготовки исходных данных для проведения расчетов из первых принципов | х            |          |                 |

|                                                       |                                                                                                  |  |   |   |
|-------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------|--|---|---|
| Автоматизированный процесс подготовки исходных данных | Уточнение исходной атомной структуры методом МД                                                  |  |   | х |
| Автоматизированный процесс подготовки исходных данных | Сбор исходных данных и подготовка их для передачи в программную библиотеку математической модели |  | х |   |

Далее необходимо построить матрицу смежности таблица 6.

Таблица 6 – матрица смежности

|           | Функция 1 | Функция 2 | Функция 3 |
|-----------|-----------|-----------|-----------|
| Функция 1 | =         | >         | >         |
| Функция 2 | <         | =         | <         |
| Функция 3 | <         | >         | =         |

На следующем этапе необходимо построить матрицу качественных соотношений функций, нумерация функций такая же, как и в предыдущей таблице:

Таблица 7 – Матрица качественных соотношений функций

|           | Функция 1 | Функция 2 | Функция 3 | Итого |
|-----------|-----------|-----------|-----------|-------|
| Функция 1 | 1         | 1,5       | 1,5       | 4     |
| Функция 2 | 0,5       | 1         | 0,5       | 2     |
| Функция 3 | 0,5       | 1,5       | 1         | 3     |
| $\Sigma$  |           |           |           | 9     |

Задача анализа стоимости функций заключается в том, что с помощью специальных методов оценить уровень затрат на выполнение каждой функции. Сделать это возможно с помощью применения нормативного метода. Расчет стоимости функций приведен в таблице 8.

Таблица 8 – Определение стоимости функций

| Наименование процесса                                 | Выполняемая функция                                                                                                                        | Трудоемкость процесса, нормо-ч | Себестоимость, тыс.руб. |
|-------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------|-------------------------|
| Автоматизированный процесс подготовки исходных данных | Предоставление пользователю возможности автоматизированного сбора и подготовки исходных данных для проведения расчетов из первых принципов | 0,0003                         | 63                      |
| Автоматизированный процесс подготовки исходных данных | Уточнение исходной атомной структуры методом МД                                                                                            | 0,0001                         | 21                      |
| Автоматизированный процесс подготовки исходных данных | Сбор исходных данных и подготовка их для передачи в программную библиотеку математической модели                                           | 0,0002                         | 42                      |

Информация об объекте исследования, собранная в рамках предыдущих стадий, на данном этапе обобщается в виде функционально-стоимостной диаграммы, изображенной на рисунке 14.



Рисунок 14 – Функционально-стоимостная диаграмма

### 4.3 SWOT-анализ

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта. SWOT-анализ применяют для исследования внешней и внутренней среды проекта.

Он проводится в несколько этапов.

Первый этап заключается в описании сильных и слабых сторон проекта, в выявлении возможностей и угроз для реализации проекта, которые проявились или могут появиться в его внешней среде. Дадим трактовку каждому из этих понятий.

1) Сильные стороны. Сильные стороны – это факторы, характеризующие конкурентоспособную сторону научно-исследовательского проекта.

2) Слабые стороны. Слабость – это недостаток, упущение или ограниченность научно-исследовательского проекта, которые препятствуют достижению его целей.

3) Возможности. Возможности включают в себя любую предпочтительную ситуацию в настоящем или будущем, возникающую в условиях окружающей среды проекта.

4) Угроза представляет собой любую нежелательную ситуацию, тенденцию или изменение в условиях окружающей среды проекта, которые имеют разрушительный или угрожающий характер для его конкурентоспособности в настоящем или будущем. Результаты первого этапа SWOT-анализа представлены в таблице 9.

Таблица 9 – Итоговая матрица SWOT-анализа

|                                                                                                                      |                                                                                                                                                                       |                                                                                                                         |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                                                      | <p>Сильные стороны проекта:</p> <p>1 Удобство в использовании.</p> <p>2 Автоматизированный режим проведения расчетов.</p> <p>3 Универсальность к разным системам.</p> | <p>Слабые стороны проекта:</p> <p>1 Относительно низкая точность.</p> <p>2 Малое количество поддерживаемых методов.</p> |
| <p>Возможности проекта:</p> <p>1 Повышение стоимости конкурентных разработок.</p> <p>2 Появление дополнительного</p> | <p>Внедрение новых методов увеличит универсальность ПО для различных видов систем.</p>                                                                                | <p>Добавление модификаций существующих методов повысит точность.</p>                                                    |

|                                                                                                                       |                                                                                                 |                                                                                       |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|
| спроса на новый программный продукт.                                                                                  |                                                                                                 |                                                                                       |
| Угрозы проекта:<br>1 Появление более быстрого и достоверного метода, который невозможно будет интегрировать в проект. | При таком случае необходимо будет увеличить скорость расчета или достоверность выходных данных. | Необходимо добавлять методы, которые отсутствуют у аналогичных программных продуктов. |

#### 4.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации

На любой стадии жизненного цикла проекта полезно оценивать степень его готовности к коммерциализации. Для этого необходимо оценить степень проработанности научного проекта и уровень имеющихся знаний у разработчика (таблица 10).

Таблица 10 – Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

| Наименование                                                 | Степень проработанности научного проекта | Уровень имеющихся знаний у разработчика |
|--------------------------------------------------------------|------------------------------------------|-----------------------------------------|
| 1 Определен имеющийся научно-технический задел               | 4                                        | 4                                       |
| Определены перспективные направления коммерциализации задела | 4                                        | 4                                       |



|                                                                           |   |   |
|---------------------------------------------------------------------------|---|---|
| Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке | 4 | 4 |
| Определена товарная форма задела для представления на рынок               | 2 | 2 |
| Определены авторы и осуществлена охрана их прав                           | 1 | 1 |
| Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности                 | 3 | 2 |
| Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта                         | 2 | 2 |
| Разработан бизнес-план коммерциализации разработки                        | 1 | 1 |
| Определены пути продвижения разработки на рынок                           | 2 | 2 |
| Разработана стратегия (форма) реализации разработки                       | 2 | 2 |
| Проработаны вопросы международного                                        | 1 | 1 |

|                                                                                               |    |    |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------|----|----|
| сотрудничества и выхода<br>на зарубежный рынок                                                |    |    |
| Проработаны вопросы<br>использования услуг<br>инфраструктуры<br>поддержки, получения<br>льгот | 1  | 1  |
| Проработаны вопросы<br>финансирования<br>коммерциализации<br>научной разработки               | 1  | 1  |
| Имеется команда для<br>коммерциализации<br>научной разработки                                 | 1  | 1  |
| Проработан механизм<br>реализации научного<br>проекта                                         | 2  | 2  |
| <b>ИТОГО БАЛЛОВ</b>                                                                           | 31 | 30 |

Исходя из оценок степени готовности проекта к коммерциализации видно, что проект имеет среднюю степень готовности. По вопросам маркетинговых исследований, финансирования коммерциализации, необходимо привлечение в команду проекта специалистов из данных областей.

#### 4.5 Инициация проекта

Инициация проекта состоит из процессов, которые выполняются для нового проекта или новой стадии проекта. Для этого определяются начальные

цели, содержание, фиксируются ресурсы. Также определяются внутренние и внешние заинтересованные стороны проекта. Заинтересованные стороны проекта отображены в таблице 11.

Таблица 11 – Заинтересованные стороны проекта

| Заинтересованные стороны проекта    | Ожидания заинтересованных сторон                                                                    |
|-------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Министерство Образования и Науки РФ | Получение ПО проектирования материалов                                                              |
| НИ ТПУ, кафедра ЭАФУ                | Внедрение ПО проектирования материалов в разрабатываемый программный пакет моделирования материалов |

В таблице 12 представлена информация о целях проекта, критериях достижения целей, а также требования к результатам проекта.

Таблица 12– Цели и результаты проекта

|                                     |                                                                                                                                   |
|-------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Цели проекта                        | Обеспечить автоматизированный режим проектирования и расчета параметров материалов в программном пакете моделирования материалов. |
| Ожидаемые результаты проекта        | Значительное уменьшение времени моделирования свойств атомных структур.                                                           |
| Критерии приемки результата проекта | Адекватность выходных данных.                                                                                                     |
| Требования к результату проекта     | Необходимая точность и скорость вычислений.                                                                                       |

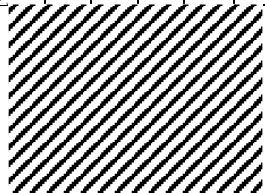
Рабочая группа проекта отображена в таблице 13.

Таблица 13 – Рабочая группа проекта

| ФИО,<br>место<br>должность                         | основное<br>работы,<br>роль в<br>проекте | Функции                                                                             | Трудозатраты,<br>час |
|----------------------------------------------------|------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|----------------------|
| Обходский А.В., НИ<br>ТПУ, кафедра<br>ЭАФУ, доцент | Научный<br>руководитель                  | Контроль<br>выполнения работ,<br>принятие<br>решений, выдача<br>задания.            | 84                   |
| Золотарев А.А., НИ<br>ТПУ, кафедра<br>ЭАФУ, техник | Инженер<br>(дипломник)                   | Анализ<br>литературных<br>источников,<br>создание<br>алгоритма,<br>программирование | 504                  |

В рамках планирования научного проекта необходимо построить календарный график проекта, который может быть представлен в виде линейного графика или диаграммы Ганта.

Таблица 14 – Диаграмма Ганта

| Код работ | Вид работ                                                         | Исполнители               | Количество дней | Продолжительность выполнения работ                                                  |                                                                                                                                                                               |                                                                                       |        |   |   |         |                                                                                       |   |
|-----------|-------------------------------------------------------------------|---------------------------|-----------------|-------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|--------|---|---|---------|---------------------------------------------------------------------------------------|---|
|           |                                                                   |                           |                 | Октябрь                                                                             |                                                                                                                                                                               |                                                                                       | Ноябрь |   |   | Декабрь |                                                                                       |   |
|           |                                                                   |                           |                 | 1                                                                                   | 2                                                                                                                                                                             | 3                                                                                     | 1      | 2 | 3 | 1       | 2                                                                                     | 3 |
| 1         | Составление ТЗ                                                    | Руководитель              | 4               |  |                                                                                                                                                                               |                                                                                       |        |   |   |         |                                                                                       |   |
| 2         | Анализ существующих программных продуктов и методов моделирования | Дипломник                 | 8               |  |                                                                                                                                                                               |                                                                                       |        |   |   |         |                                                                                       |   |
| 3         | Составление алгоритма функционирования компонента                 | Руководитель<br>Дипломник | 10              |                                                                                     | <br> |                                                                                       |        |   |   |         |                                                                                       |   |
| 4         | Программная реализация алгоритма                                  | Дипломник                 | 52              |                                                                                     |                                                                                                                                                                               |  |        |   |   |         |                                                                                       |   |
| 5         | Тестирования разработанного ПО                                    | Дипломник                 | 14              |                                                                                     |                                                                                                                                                                               |                                                                                       |        |   |   |         |  |   |



– Руководитель



– Дипломник

#### 4.6 Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения.

В данной разработке планируемыми расходами являются основная заработная плата, а также расходы на электроэнергию при работе с компьютером.

Затраты на сырьё и материалы учитываются только в качестве затраченной электроэнергии. Мощность ноутбука DNS C20, при помощи которого выполнялись разработка ПО, равна 50 Вт. Тогда, потребляемая им за час работы энергия равна 50 Вт×ч. Значит, в течение рабочего дня будет затрачено энергии  $E$ :

$$E = 50 \cdot 6 = 300 \text{ Вт.} \quad (4.2)$$

Зная, что стоимость энергии в 1 кВт×ч, затрачивающейся для промышленности в Томской области составляет 5,8 р., тогда стоимость затраченной электроэнергии за один рабочий день  $C_1$  составляет:

$$C_1 = \frac{300 \cdot 5,8}{1000} = 1,74 \text{ р.} \quad (4.3)$$

Тогда стоимость всей энергии  $C$ , затраченной в ходе разработки, составляет:

$$C = 84 \cdot 1,74 = 146 \text{ р.} \quad (4.4)$$

В статью «затраты на специальное оборудование для научных работ» включают все затраты, связанные с приобретением специального оборудования (приборов, контрольно-измерительной аппаратуры, стендов, устройств и механизмов), необходимого для проведения работ по конкретной

теме. В эту статью следует отнести персональный ноутбук, который использовался непосредственно как средство разработки. Стоимость оборудования, используемого при выполнении конкретного проекта, учитывается в виде амортизационных отчислений.

Таблица 15 – Затраты на оборудование

| Наименование оборудования    | Кол-во единиц оборудования | Цена единицы оборудования, тыс.р. | Общая стоимость оборудования, тыс.р. |
|------------------------------|----------------------------|-----------------------------------|--------------------------------------|
| Персональный ноутбук DNS C20 | 1                          | 17,25                             | 17,25                                |

Норма амортизации рассчитывается:

$$K = \frac{1}{n} \cdot 100\% = \frac{1}{5} \cdot 100 = 20\% \quad (4.5)$$

где:

K – норма амортизации в процентах;

n – срок полезного использования в годах.

Ежегодная норма амортизации:

$$\frac{17250}{5} = 3450 \text{ руб.} \quad (4.6)$$

Ежемесячная сумма амортизации:

$$\frac{3450}{12} = 287 \text{ руб.} \quad (4.7)$$

Сумма амортизации на время проекта:

$$287 \cdot 3 = 861 \text{ руб.} \quad (4.8)$$

Величина расходов по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы оплаты труда. В состав основной заработной платы включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы. Основная заработная плата руководителя рассчитывается на основании отраслевой оплаты труда. Отраслевая система оплаты труда в ТПУ предполагает следующий состав заработной платы:

- оклад;
- стимулирующие выплаты;
- районный коэффициент.

Сначала рассчитывается месячный должностной оклад руководителя  $Z_m$ :

$$Z_m = Z_{\text{б}} \cdot (k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}} = 26300 \cdot 1,2 \cdot 1,3 = 41028 \text{ р.} \quad (4.9)$$

где:

$Z_{\text{б}}$  – базовый оклад;

$k_{\text{пр}}$  – премиальный коэффициент;

$k_{\text{д}}$  – коэффициент доплат и надбавок;

$k_{\text{р}}$  – районный коэффициент.

Затем рассчитывается месячный должностной оклад разработчика  $Z_m$ :

$$Z_m = Z_{\text{б}} \cdot (k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}} = 5128 \cdot 1,2 \cdot 1,3 = 8000 \text{ р.} \quad (4.10)$$

где:

$Z_{\text{б}}$  – базовый оклад;



$k_{пр}$  – премиальный коэффициент;

$k_{д}$  – коэффициент доплат и надбавок;

$k_{р}$  – районный коэффициент.

Перед тем, как рассчитать дневную заработную плату необходимо найти годовой фонд рабочего времени, для этого необходимо вычесть из общего количества дней в году выходные и праздничные дни, а также отпуск. Требуемые для расчета значения приведены в таблице 16.

Таблица 16 – Баланс рабочего времени

| Показатели рабочего времени                     | Руководитель |
|-------------------------------------------------|--------------|
| Календарное число дней                          | 365          |
| Количество нерабочих дней                       |              |
| - выходные дни                                  | 52           |
| - праздничные дни                               | 14           |
| Потери рабочего времени                         |              |
| - отпуск                                        | 48           |
| - невыходы по болезни                           |              |
| Действительный годовой фонд<br>рабочего времени | 299          |

Далее была рассчитана среднедневная заработная плату для руководителя  $З_{дн}$ :

$$З_{дн} = \frac{З_{м} \cdot М}{F_{д}} = \frac{41028 \cdot 10,4}{299} = 1427 \text{ р.} \quad (4.11)$$

Среднедневная заработная плату для дипломника  $З_{дн}$ :

$$З_{\text{дн}} = \frac{З_{\text{м}} \cdot М}{F_{\text{д}}} = \frac{8000 \cdot 10,4}{299} = 278 \text{ р.} \quad (4.12)$$

где  $М$  – количество месяцев работы без отпуска в течение года;

$F_{\text{д}}$  – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала

В результате основная заработная плата руководителя  $З_{\text{осн}}$ :

$$З_{\text{осн}} = З_{\text{дн}} \cdot T_{\text{раб}} = 1427 \cdot 14 = 19978 \text{ р.} \quad (4.13)$$

Основная заработная плата дипломника  $З_{\text{осн}}$ :

$$З_{\text{осн}} = З_{\text{дн}} \cdot T_{\text{раб}} = 278 \cdot 84 = 23325 \text{ р.} \quad (4.14)$$

где  $T_{\text{раб}}$  – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником.

Расчетные данные основной заработной платы приведены в таблице 17.

Таблица 17 – Расчёт основной заработной платы

| Этап                                                 | Исполнитель  | Трудоемкость<br>чел.-дн. | З/п на<br>один чел.-<br>дн., р. |               |
|------------------------------------------------------|--------------|--------------------------|---------------------------------|---------------|
|                                                      |              |                          |                                 | Всего з/п, р. |
| Составление ТЗ                                       | Руководитель | 4                        | 1427                            | 5708          |
| Анализ<br>существующих<br>программных<br>продуктов и | Дипломник    | 8                        | 278                             | 2224          |

|                                                             |              |    |      |       |
|-------------------------------------------------------------|--------------|----|------|-------|
| методов<br>моделирования                                    |              |    |      |       |
| Составление<br>алгоритма<br>функционирова<br>ния компонента | Руководитель | 10 | 1427 | 14270 |
|                                                             | Дипломник    | 10 | 278  | 2780  |
| Программная<br>реализация<br>алгоритма                      | Дипломник    | 52 | 278  | 14456 |
| Тестирования<br>разработанного                              | Дипломник    | 14 | 278  | 3892  |
| Итого                                                       |              |    |      | 43330 |

Дополнительная заработная плата  $Z_{\text{доп}}$  рассчитывается исходя из 10–15% от основной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнение темы:

$$Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot Z_{\text{осн}} = 0,1 \cdot 43330 = 4333 \text{ р.} \quad (4.15)$$

где:

$Z_{\text{доп}}$  – дополнительная заработная плата, р.;

$k_{\text{доп}}$  – коэффициент дополнительной зарплаты;

$Z_{\text{осн}}$  – основная заработная плата, р.

Отчисления во внебюджетные фонды рассчитываются:

$$C_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}) = 0,3 \cdot (43330 + 4333) = 14298 \text{ р.} \quad (4.16)$$

где  $k_{\text{внеб}}$  – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды

Накладные расходы составляют 80-100 % от суммы основной и дополнительной заработной платы работников, непосредственно участвующих в выполнение темы.

Расчет накладных расходов ведется по следующей формуле:

$$C_{\text{накл}} = k_{\text{накл}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}) = 43330 + 4333 = 47663 \text{ р.} \quad (4.17)$$

Рассчитанные затраты на исследования и итоговая плановая себестоимость отображены в таблице 18.

Таблица 18 – Затраты на разработку

| Статьи                                                         | Сумма, тыс. р. |
|----------------------------------------------------------------|----------------|
| Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ | 17,25          |
| Основная заработная плата                                      | 43,33          |
| Дополнительная заработная плата                                | 4,33           |
| Отчисления на социальные нужды                                 | 14,29          |
| Накладные расходы                                              | 47,66          |
| Итого плановая себестоимость                                   | 126,86         |

#### 4.7 Реестр рисков проекта

Идентифицированные риски проекта включают в себя возможные неопределенные события, которые могут возникнуть в проекте и вызвать последствия, которые повлекут за собой нежелательные эффекты.

Таблица 19 – Реестр рисков

| Риск                       | Потенциальное воздействие        | Вероятность наступления (1-5) | Влияние риска (1-5) | Уровень риска | Способы смягчения риска      | Условия наступления                      |
|----------------------------|----------------------------------|-------------------------------|---------------------|---------------|------------------------------|------------------------------------------|
| Прекращение финансирования | Нехватка ресурсов для разработки | 2                             | 5                   | высокий       | Сокращение сроков разработки | Сокращение или перераспределение бюджета |

#### 4.8 Оценка сравнительной эффективности исследования

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности  $I_{\text{ф}}^{\text{Р}}$  и ресурсоэффективности  $I_{\text{м}}^{\text{Р}}$ .

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают  $I_{\text{ф}}^{\text{Р}}$  в ходе оценки бюджета затрат для вариантов исполнения научного исследования. Для разрабатываемого комплекса затратами на ее разработку составили 126,86 тыс. р.

Цена разработанного продукта в случае продажи следует установить на уровне 80 тыс. р., при такой цене продукт будет дешевле, чем аналогичная разработка, стоимость которой составляет 193 тыс. р. Для того, чтобы разработка окупилась, необходимо продать  $T^P$  лицензий:

$$T^P = \frac{C_{\text{сум}}}{\Phi_p} = \frac{126,86}{80} = 1,59 \approx 2; \quad (4.18)$$

В качестве аналога выступает программа LAMMPS ориентировочная цена которой составляет 176 тыс. р.

Тогда затраты на приобретение аналогичной программы будут являться наибольшим интегральным показателем реализации технической задачи  $\Phi_{\text{max}}$ . Интегральный финансовый показатель разработки  $I_{\Phi}^P$  определяется как:

$$I_{\Phi}^P = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}} = \frac{80}{176} = 0,45; \quad (4.19)$$

Соответственно интегральный финансовый показатель аналога будет  $I_{\Phi}^a$  :

$$I_{\Phi}^P = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}} = \frac{176}{176} = 1; \quad (4.20)$$

Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта была приведена ранее в таблице 4. Интегральный показатель

ресурсоэффективности  $I_m^p$  текущего проекта определяется следующим образом:

$$I_m^p = \sum_{i=1}^n a_i \cdot b_i^p = 3,57; \quad (4.21)$$

где:

$a_i$  – весовой коэффициент  $i$ -го параметра;

$b_i^p$  – бальная оценка  $i$ -го параметра для разработки;

$n$  – число параметров сравнения.

Тогда, интегральный показатель ресурсоэффективности  $I_m^a$  аналога:

$$I_m^a = \sum_{i=1}^n a_i \cdot b_i^a = 3,23; \quad (4.22)$$

Интегральный показатель эффективности разработки  $I_{финр}^p$  определяется так:

$$I_{финр}^p = \frac{I_m^p}{I_{ф}^p} = \frac{3,57}{0,45} = 8; \quad (4.23)$$

Интегральный показатель эффективности аналога  $I_{финр}^a$  определяется по формуле:

$$I_{\text{финр}}^a = \frac{I_m^a}{I_{\text{ф}}^a} = \frac{3,23}{1} = 3,23; \quad (4.24)$$

Сравнение интегрального показателя эффективности текущего проекта  $I_{\text{финр}}^p$  и аналога  $I_{\text{финр}}^a$  позволяет определить сравнительную эффективность проекта  $\mathcal{E}_{\text{ср}}$ :

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{финр}}^p}{I_{\text{финр}}^a} = \frac{8}{3,23} = 2,48 \quad (4.25)$$

Результаты расчётов сравнительной эффективности проекта приведены в таблице 20.

Таблица 20 – Сравнительная эффективность проекта

| Показатели                                              | Аналог | Разработка |
|---------------------------------------------------------|--------|------------|
| Интегральный финансовый показатель разработки           | 1      | 0,45       |
| Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки | 3,23   | 3,57       |
| Интегральный показатель эффективности                   | 3,23   | 8          |
| Сравнительная эффективность проекта                     | 2,48   |            |



Вывод: при продаже разработанной программы по цене 80 тыс.р. для окупаемости нужно продать 2 лицензий, а эффективность проекта при такой стоимости сильно отличается от аналогичного продукта.