

# РАЗВИТИЕ ОСНОВНЫХ МЕТОДИК И ПРОГРАММ ИТМФ

Р. М. ШАГАЛИЕВ, А. Ю. АРТЕМЬЕВ, В. И. БУДНИКОВ, А. Н. ГРЕБЕННИКОВ

В последние годы в связи с созданием высокопроизводительных многопроцессорных систем И. Д. Софроновым и Р. М. Шагалиевым была сформулирована концепция дальнейшего развития методик и программных комплексов нового поколения для проведения численного моделирования многомерных задач по основной тематике института на ЭВМ с массовым параллелизмом. Особое место уделялось разработке эффективных алгоритмов распараллеливания. Создаваемые двумерные и трехмерные программные комплексы нового поколения были ориентированы на проведение расчетов на числе процессоров от сотен до нескольких тысяч с высокой эффективностью в безавстном режиме и с использованием новых и усовершенствованных физико-математических моделей. Создаваемые комплексы, число которых было сокращено по сравнению с уже имевшимся к тому времени, объединили различные математические методы и методики в едином для них интерфейсе. При этом по возможности были сконцентрированы все работы по разработке сервисных программ путем выработки и введения определенных стандартов, единых библиотек, необходимых для производственного счета модулей и констант (реализация уравнений состояний, библиотеки нейтронных констант, решатели систем линейных уравнений и т. д.). Возросла актуальность вопросов повышения безавстности многомерных расчетов, полноты математического моделирования, использования в математических методиках и комплексах программ более совершенных физических моделей.

При проведении расчетно-теоретических работ по обоснованию основных характеристик ядерных зарядов по-прежнему большую роль играют одномерные расчеты, за счет небольшого календарного времени их исполнения, простоты подготовки и возможности серийного счета. За последние годы под руководством А. Н. Гребенникова и А. А. Горшихина на базе нескольких производственных программ, которые развивались в течение нескольких десятков лет (АРКТУР, РОСА, СНД, ОДК, УП и др), создан

комплекс программ КПД-1D (рис. 1) решения задач механики сплошной среды, переноса частиц и излучения, энерговыделения и др. Комплекс обладает развитым графическим интерфейсом, ориентирован на широкий круг пользователей и позволяет вести расчеты в отрыве от разработчиков. Расчеты в комплексе КПД-1D могут проводиться как в последовательном, так и в параллельном режиме. Есть варианты алгоритмов, работающих на общей памяти (OpenMP) и на распределенной памяти (MPI).

Большое внимание за последние годы было уделено созданию высокопараллельных комплексов программ и расчетной замкнутой технологии моделирования в двумерной и трехмерной геометриях. Под руководством О. А. Винокурова на базе двух математических методик МИМОЗА и Д создан единый комплекс программ МИД (рис. 2) для решения в параллельном режиме двумерных и трехмерных задач газовой динамики с учетом процессов детонации, теплопроводности, турбулентного перемешивания, упруго-пластических свойств веществ. В рамках комплекса разработаны программы для расчета задач магнитной гидродинамики, расчета переноса

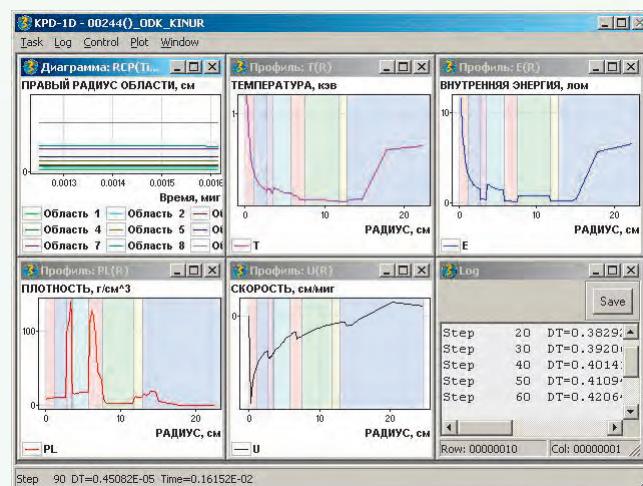


Рис. 1. Пример динамической визуализации различных величин в процессе расчета по комплексу КПД-1D

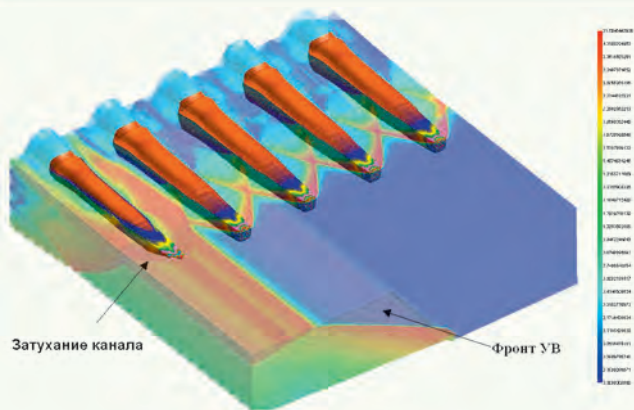


Рис. 2. Численное моделирование по комплексу МИД эффекта затухания детонации в каналах

спектрального рентгеновского излучения, введены различные модели кинетики и модели разрушения вещества.

Под руководством С. И. Скрышника разработан методика и создан комплекс высокопараллельных программ КОРОНА (рис. 3) для решения двумерных и трехмерных задач газодинамики с теплопроводностью. Отличительной чертой этого комплекса является то, что в процессе счета в отличие от метода концентраций отслеживаются контактные границы между веществами за счет применения составных ячеек расчетной сетки (т. е. ячеек, состоящих из компонентов, каждый из которых соответствует определенному веществу). При получении конечно-разностных уравнений используется переменный разностный шаблон, размер которого зависит от степени неортогональности расчетной сетки и от количества компонентов в составных ячейках.

Под руководством Б. Л. Воронина и А. Н. Быкова создан комплекс параллельных программ

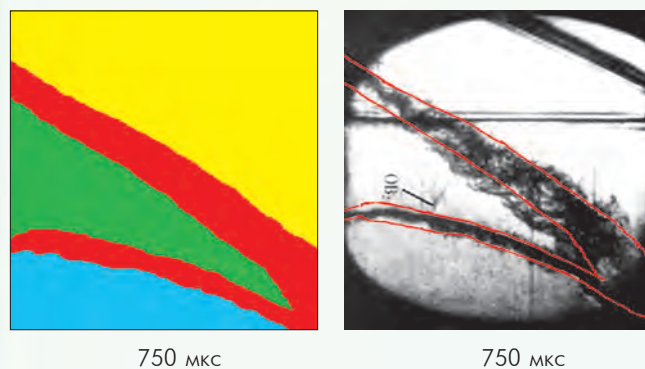


Рис. 3. Сравнение положения зон ТП (турбулентного перемешивания), полученных в расчете по комплексу КОРОНА с экспериментальными данными

РАМЗЕС-КП для расчета пространственных (одно-, двух- и трехмерных) движений многокомпонентных теплопроводных сред в эйлерово-лагранжевых координатах на параллельных вычислительных системах. Характерной чертой комплекса является использование параллельных вычислений на всех этапах (подготовка, счет и анализ результатов) прохождения задачи на многопроцессорной ЭВМ с распределенной памятью.

Важным элементом замкнутой двумерной и трехмерной технологии является комплекс параллельных программ САТУРН, разработанный под руководством Р. М. Шагалиева и И. М. Белякова, комплекс предназначен для расчетов двумерных и трехмерных нестационарных задач переноса нейтронов с учетом кинетики нейтронно-ядерного взаимодействия и энерговыделения, нестационарных нелинейных задач переноса энергии тепловым излучением, электронами, ионами с учетом неравновесности процессов взаимодействия между излучением и средой, а также между электронами и ионами и стационарных задач расчета критического параметра. Задачи переноса нейтронов рассматриваются в групповом кинетическом приближении, а задачи переноса излучения — в групповом кинетическом, диффузионном или приближении лучистой теплопроводности. В рамках комплекса созданы программы расчета переноса гамма-квантов в многогрупповом кинетическом приближении, переноса быстрых заряженных частиц с учетом реакций на лету и многие другие. Разработан и реализован безитерационный алгоритм распараллеливания решения трехмерных задач переноса с использованием матричной декомпозиции по трем пространственным направлениям. Алгоритмы мелкоблочного распараллеливания (параллельный бегущий счет) развиты за счет использования ресурсов энергетических групп и трехмерных слоев. Все это позволяет проводить расчеты в параллельном режиме с высокой эффективностью.

Под руководством А. К. Житника создан комплекс программ С-007 для решения в параллельном режиме методом Монте-Карло систем связанных линейных уравнений переноса нейтронов, гамма-квантов, электронов и позитронов. Программа может решать широкий круг линейных задач теории переноса частиц. Это нестационарные задачи расчета полей излучения от заданного независимого источника частиц, стационарные задачи расчета эффективного коэффициента размножения нейтронов и временной постоянной размножения нейтронов (расчеты за-

дач физики реакторов, в том числе расчеты параметров импульсных исследовательских реакторов); задачи, связанные с ядерной безопасностью (расчеты характеристик ускорителей электронов, выбор и оптимизация их мишеней; расчеты тока, заряда и поглощенной энергии в детекторах ионизирующих излучений при их облучении, обеспечение расчетами стадии разработки детекторов, расчеты функции отклика сцинтилляционных детекторов), каскадные задачи с решением связанных уравнений переноса нейтронов, гамма-квантов и заряженных частиц и многие другие.

Создание вышеперечисленных программных комплексов нового поколения, а также программ их связи позволило не только проводить расчетное моделирование работы изделий с более полным учетом физических процессов, но и существенно расширить класс решаемых задач от задач создания неядерного вооружения до задач гражданских наукоотраслей (атомная энергетика, медицина, экология и т. д.).

Большой прогресс за последние 5 лет произошел в области создания и практической реализации новой технологии проведения массового производственного счета на многопроцессорных вычислительных системах двумерных и трехмерных задач, возникающих при разработке и обосновании надежности ядерных зарядов. В этой новой технологии согласованно сочетаются вопросы точности и надежности («безавостности») расчетов за счет комбинации лагранжева и эйлера подхода к описанию контактных границ при использовании регулярных счетных сеток. Под руководством В. Ф. Спиридонова создан комплекс программ ЛЭГАК-3D (рис. 4), предназначенный для решения трехмерных и двумер-

ных задач газовой динамики, детонации и упругопластичности в многокомпонентных сплошных средах. В первую очередь — для задач расчета штатных, аварийных и специальных режимов работы ядерных зарядов, а так же исследований по тематике обычных вооружений (кумулятивные, снарядоформирующие, осколочные и т. п. заряды, воздействие, защита и т. д.). Разработанная параллельная технология расчетов по комплексу ЛЭГАК-3D с использованием сотен (для 2D задач) и тысяч (для 3D задач) процессоров современных высокопроизводительных параллельных вычислительных систем резко сократила календарные сроки проведения исследований, повысила точность и надежность численных результатов и обеспечила возможность новых подходов в математическом моделировании при использовании на порядок большего числа счетных точек. Стали возможными двумерные расчеты на последовательно сгущающихся счетных сетках и отработка на их основе технологии проведения двумерных расчетов с «контролируемой математической» точностью. То есть, определения для каждой задачи, в зависимости от преследуемых целей, той необходимой степени подробности счетной сетки, при которой разница в результатах трех расчетов на последовательно сгущающихся счетных сетках меньше требуемой, например, меньше погрешности экспериментальных данных и неопределенности, связанной с физической постановкой.

Большая работа выполнена по дальнейшему развитию численных методов на нерегулярной счетной сетке, родоначальником которых был И. Д. Софронов, долгое время являвшийся руководителем математического отделения. Так под руководством С. С. Соколова разработана мето-

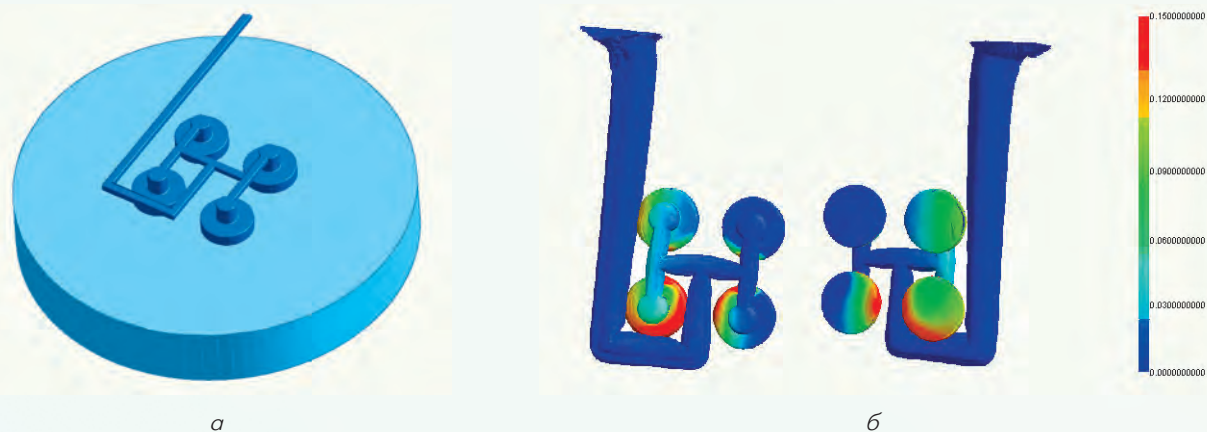


Рис. 4. Численное моделирование по комплексу ЛЭГАК-3D распространения детонационной волны в каналах: а) начальная геометрия; б) после предварительного воздействия на каналы из ВВ

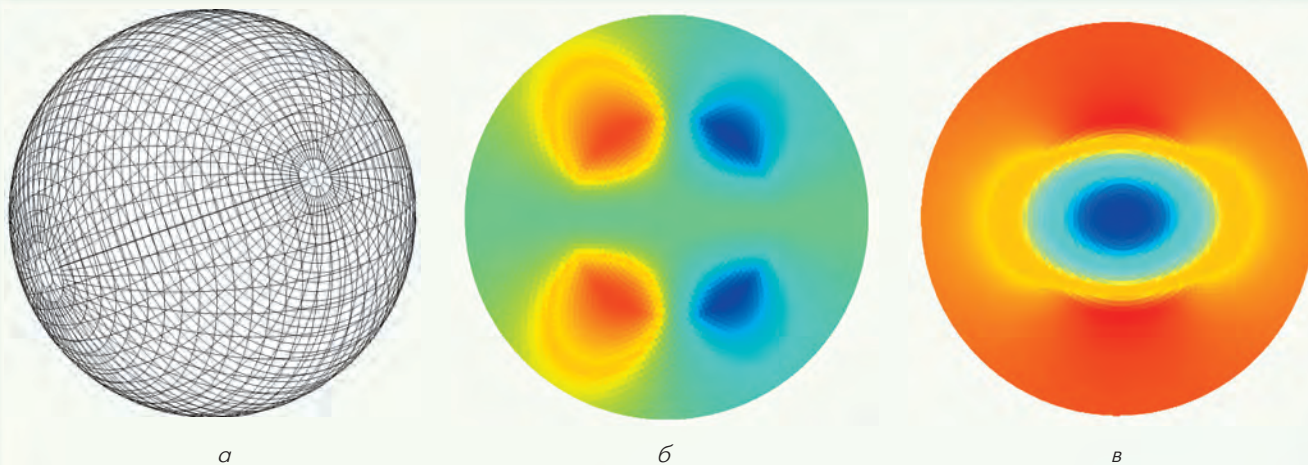


Рис. 5. Распределения компонент магнитного поля в расчетах по комплексу ТИМ:  
 а) трехмерная расчетная сетка; б)  $H_x$ ; в)  $H_y$

дика ТИМ-2D (рис. 5) и на ее базе создан комплекс программ, предназначенный для расчета двумерных задач газовой динамики, упругопластичности, детонации, теплопроводности, магнитной гидродинамики (МГД) с учетом диффузии магнитного поля в многообластной постановке на нерегулярных сетках с произвольным количеством связей в узлах. Для расширения класса задач по магнитной гидродинамике были разработаны дополнительно методики и созданы программы для расчета магнитных полей в трех различных приближениях. Комплекс программ позволяет проводить расчеты, как в последовательном, так и в параллельном режимах счета. Для расчета связанных задач МГД разработаны алгоритмы и созданы программы связи с методиками моделирования процессов переноса частиц и излучения С-95. Под руководством О. И. Бутнева создан комплекс программ нового поколения МЕДУЗА-П для расчета двумерных задач газодинамики, теплопроводности, детонации и упругопластичности на неструктурированных сетках. В данной методике используется расщепление по физическим процессам. Методика позволяет проводить расчеты в областях произвольной формы без ограничений на типы накладываемых граничных условий. Распараллеливание методики было осуществлено с использованием распределенной памяти на интерфейсе MPI. Счетная область декомпозируется на параобласти с помощью собственных методов геометрической или топологической декомпозиции. Параобласти могут также менять свою связность. В процессе счета для повышения эффективности может использоваться автоматическая передекомпозиция счетной области.

Под руководством Ю. Н. Дерюгина разработана методика, основанная на методе Годунова, и создан комплекс программ ДИАДА-3D для решения на неструктурированных и структурированных адаптивных подвижных эйлеровых сетках трехмерных задач газовой динамики с выделением особенностей решения (ударные и детонационные волны, контактные разрывы, фронты пламени и т. д.) на многопроцессорных ЭВМ с массовым параллелизмом. Комплекс программ широко используется при обосновании надежности проведения неядерно-взрывных экспериментов на Центральном полигоне Российской Федерации.

Получила развитие методика расчета на неподвижной четырехугольной в 2D случае и шестигранной в 3D случае сетке с возможностью использования адаптивно встраивающейся дробной сетки в окрестности некоторых особенностей течения (фронт ударной волны, фронт детонационной волны, область горения ВВ, тонкие слои веществ, области разрушения материалов). Под руководством Ю. В. Янилкина создан комплекс программ ЭГАК-3D (рис. 6), направленный на решение таких задач, как пробивание преград, взрывы в различных средах, соударения, прочность конструкций, разрушение трубопроводов, пожары и др. При реализации программ реализовано поточечное мелкозернистое распараллеливание, что позволяет достичь высокой эффективности распараллеливания без ограничения на количество процессоров.

Под руководством В. Мельникова разработана методика СОЛЯРИС и создан программный комплекс для решения многомерных задач переноса излучения в вакуумном приближении и за-

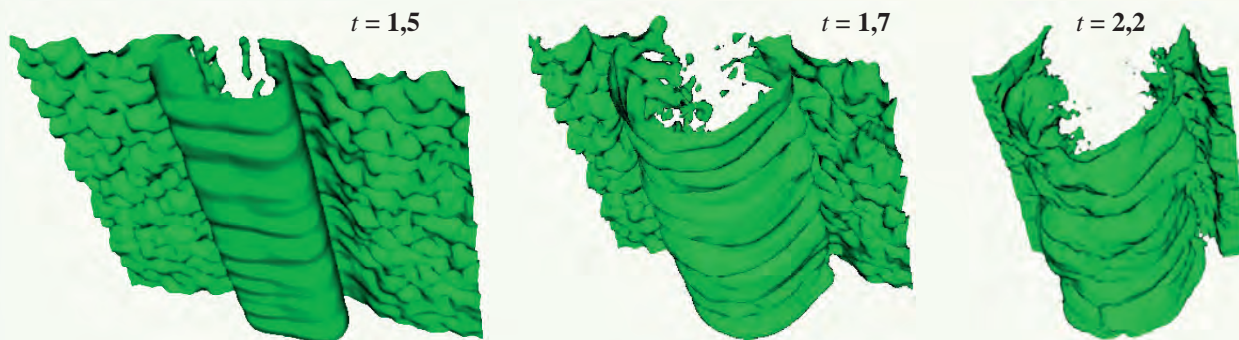


Рис. 6. Моделирование развития турбулентного перемешивания на границе раздела воздух- $SF_6$  по комплексу ЭГЭК

дач теплопроводности с учетом газодинамического движения вещества и других физических процессов на многопроцессорных ЭВМ. Комплекс СОЛЯРИС предназначен для численного решения на многопроцессорных ЭВМ трехмерных задач переноса излучения и теплопроводности в произвольных областях с вакуумными полостями с учетом газодинамического движения вещества в оптически плотных слоях и других физических процессов, сопровождающих эти явления. Основные классы задач, которые могут решаться с помощью комплекса СОЛЯРИС — анализ поведения специзделий в условиях пожара и расчеты мишеней ЛТС.

Одним из достаточно новых направлений в развитии методов численного моделирования является молекулярно-динамическое моделирование. Разрабатываемые методы молекулярной динамики предназначены, в первую очередь, для решения задач развития радиационных каскадов, моделирования отклика радиационно состаренного материала на внешние нагрузки, моделирования процессов взаимодействия наночастиц с поверхностями и других задач. Под руководством Б. Л. Воронина созданы методика и высокопараллельный комплекс программ MD для решения системы уравнений движения ансамбля частиц методом классической молекулярной динамики. В общем случае это уравнения движения классической динамики системы Гамильтона материальных точек, находящихся в потенциальном поле сил межчастичного взаимодействия. В комплексе имеется широкий набор потенциалов (парные потенциалы Леннарда-Джонса или Морзе, многочастичные потенциалы «погруженного» атома). Существует возможность проведения расчетов по различным конечно-разностным схемам от явной двухслойной до явной трехслойной. Создана версия программы MoDyS для расчетов на ЭВМ с гибридной

архитектурой, где за счет использования графических ускорителей на различных задачах было получено значительное ускорение по сравнению с расчетами по программе MD.

С целью обеспечения расчетов по основной тематике и их стандартизации под руководством В. Г. Куделькина и Л. Ф. Гударенко создана единая библиотека уравнений состояния (УРС), пробегов фотонов и моделей для расчета упругопластических свойств веществ. На сегодняшний день в ней содержится более 1600 УРС для конкретных веществ и смесей, более 800 наборов констант пробегов и 15 моделей УП с более чем 100 наборами констант для различных веществ. Из последних разработок следует отметить создание широкодиапазонного (т. е. в широкой области температур и плотностей веществ) УРС с учетом прочности, вязкости и фазовых переходов. Разработана интерактивная справочная система (рис. 7), позволяющая с наименьшими затратами времени выбирать уравнения состояния, пробеги фотонов и модели упругопластического деформирования (с возможностью просмотра справочной информации) для решения конкретной задачи. Для расчета пробегов излучения используются две основные программы, в которых реализованы различные модели Томаса-Ферми и Хартри-Фока-Слэтера, что дает возможность проводить сравнительные расчеты и повышает надежность результатов. Разработана эффективная технология получения пробегов в смесях конкретного состава по известным пробегам их компонентов.

Самое пристальное внимание уделялось разработке и созданию программ общего сервиса, позволяющих единым образом задавать геометрию многомерных задач, рассчитывать начальные данные для всех методик и программных комплексов, представлять результаты расчета, а также обрабатывать и визуализировать эти

данные. Над реализацией этих задач активно работает лаборатория под руководством В. И. Будникова и В. И. Тарасова. Большинство программ общего сервиса базируются на универсальном формате представления двумерных и трехмерных сеточных данных, ориентированном на схему раздельного счета по математическим областям. Данные могут быть определены как на регулярной, так и на нерегулярной топологии расчетной сетки. Многообразии структур и типов расчетных данных максимально формализовано и систематизировано, разработаны методы прямого доступа, позволяющие обращаться к произвольному фрагменту данных на диске без накладных расходов на буферную прокатку промежуточных данных. Разработаны алгоритмы и методы распределенного хранения данных для работы на многопроцессорных комплексах. Все эти методы интегрированы в единую кроссплатформенную библиотеку ЕФР (Единый файловый разрез). На основе библиотеки ЕФР были разработаны различные графические приложения (EFR-Viewer, SolidEditor, ScientificView и многие другие), позволяющие представлять расчетные данные как в табличном виде с возможностью редактирования, прореживания и выделения практически любых интересных особенностей вплоть до построения графиков зависимостей, так и в виде растровой двумерной и трехмерной визуализации с богатыми возможностями по фильтрации данных на регулярных и нерегулярных сетках.

Для решения больших задач неявными методами, например, задач диффузии, теплопроводности на многопроцессорных ЭВМ важное значение имеет разработка экономичных методов решения линейных систем алгебраических уравнений большого порядка. Под руководством Ю. Г. Бартечева и А. С. Сухих созданы библиотека ParSol/PMLP и модуль Newt параллельных решателей разреженных линейных систем, предназначенных для использования многими прикладными программными комплексами.

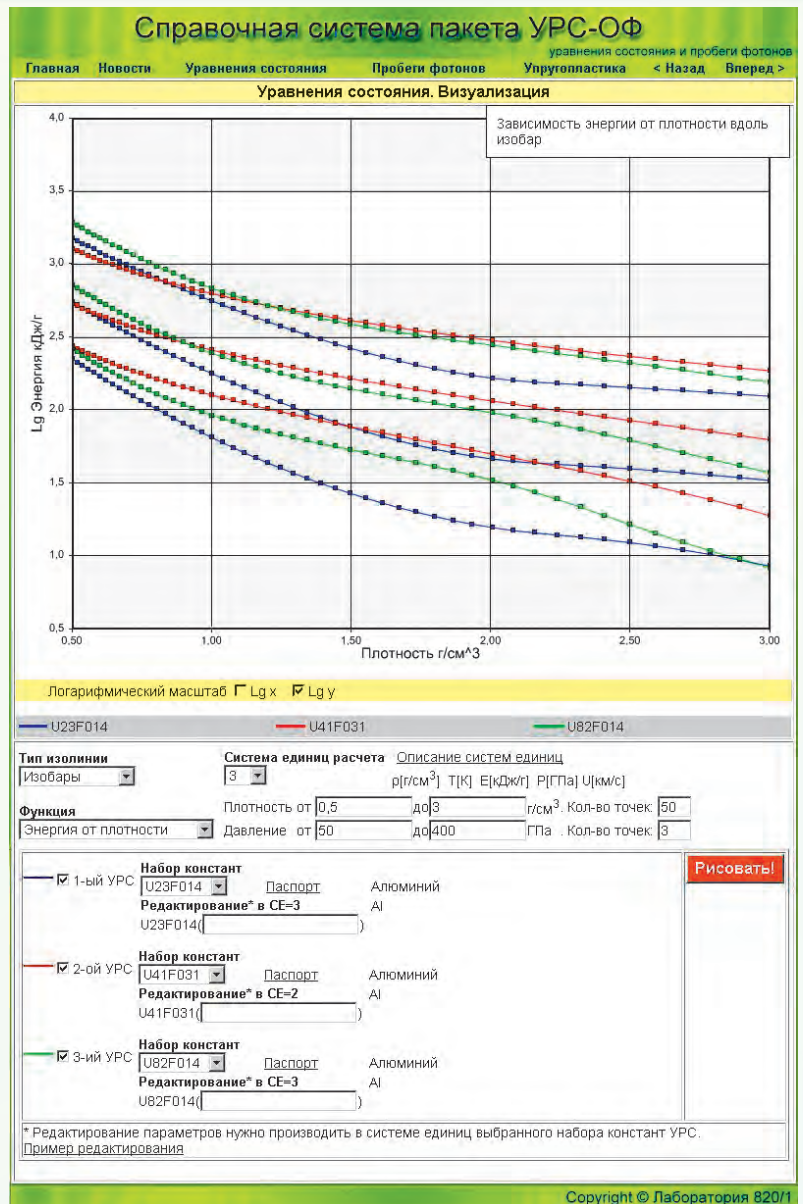


Рис. 7. Пример визуализации термодинамических характеристик вещества в интерактивной справочной системе пакета УРС-ОФ

**ШАГАЛИЕВ Рашит Мирзагалиевич** –  
начальник математического отделения ИТМФ  
РФЯЦ-ВНИИЭФ, доктор физ.-мат. наук, лауреат  
Государственной премии и премии Правительства РФ

**АРТЕМЬЕВ Анатолий Юрьевич** –  
зам. начальника отделения ИТМФ  
РФЯЦ-ВНИИЭФ, кандидат физ.-мат. наук

**БУДНИКОВ Валерий Игоревич** –  
зам. начальника отделения ИТМФ  
РФЯЦ-ВНИИЭФ, кандидат физ.-мат. наук

**ГРЕБЕННИКОВ Андрей Николаевич** –  
зам. начальника отделения ИТМФ  
РФЯЦ-ВНИИЭФ кандидат физ.-мат. наук