

ISSN 0367-5203

ВОПРОСЫ
АТОМНОЙ
НАУКИ И
ТЕХНИКИ

**Российский
федеральный
ядерный
центр –
ВНИИЭФ**

СЕРИЯ

**Математическое моделирование
физических процессов**

2015

ВЫПУСК 4

ФГУП
"РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР —
ВНИИЭФ"

ВОПРОСЫ
АТОМНОЙ НАУКИ
И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ:

Математическое моделирование
физических процессов

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СБОРНИК

ВЫПУСК 4

Издается с 1978 г.

Саров — 2015

Главный редактор
Шагалиев Рашит Мирзагалиевич, д. ф.-м. н. (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров)

Заместители главного редактора:
Алексеев Александр Витальевич, к. ф.-м. н. (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),
Тишкин Владимир Федорович, д. ф.-м. н., профессор (ИПМ им. Келдыша РАН, г. Москва)

Ответственный секретарь:
Соколовская Елена Валентиновна (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров)

Члены редколлегии:

Бартенев Юрий Германович, д. ф.-м. н. (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),
Бетелин Владимир Борисович, д. ф.-м. н., академик РАН (ФНЦ ФГУ НИИСИ РАН, г. Москва),
Бочков Алексей Иванович, к. ф.-м. н. (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),
Бутнев Олег Игоревич, к. ф.-м. н. (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),
Быков Александр Николаевич, к. ф.-м. н. (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),
Вронский Михаил Александрович, к. ф.-м. н. (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),
Дрёмов Владимир Владимирович, д. ф.-м. н. (РФЯЦ-ВНИИТФ, г. Снежинск),
Залялов Наиль Надырович, к. ф.-м. н. (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),
Иванов Николай Владимирович, к. ф.-м. н. (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),
Козелков Андрей Сергеевич, к. ф.-м. н. (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),
Козманов Михаил Юрьевич, д. ф.-м. н. (РФЯЦ-ВНИИТФ, г. Снежинск),
Мжачих Сергей Викторович (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),
Спирidonов Валентин Федорович, д. ф.-м. н. (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),
Степаненко Сергей Александрович, д. ф.-м. н. (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),
Храмченков Максим Георгиевич, д. ф.-м. н., профессор (КФУ, г. Казань),
Шестаков Александр Александрович, д. ф.-м. н. (РФЯЦ-ВНИИТФ, г. Снежинск)

Адрес редакции: 607188, г. Саров Нижегородской обл.,
пр. Мира, 37, тел. (83130)28406,
e-mail: sokol@vniief.ru

УДК 519.642:621.039.5

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРОГРАММЫ TDMCC ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ С ДОМИНАНТНЫМ ОТНОШЕНИЕМ, БЛИЗКИМ К ЕДИНИЦЕ

Е. Ф. Митенкова, Т. В. Семенова

(ИБРАЭ РАН, г. Москва; ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Представлены новые возможности программы TDMCC для анализа распределений скорости деления нейтронов в слабосвязанных системах. Рассмотрены методы вычисления доминантного отношения и энтропии Шеннона, реализованные в программе TDMCC. Для систем с доминантным отношением, близким к единице, продемонстрирована связь между сходимостью вычисляемых функционалов и энтропией Шеннона. Приведен пример, в котором недооценка погрешностей вычисляемых функционалов и специфика алгоритмов, используемых в задачах на критичность, приводят к несогласованным результатам вариантных расчетов, связанных с малыми изменениями исходных параметров системы.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, метод поколений, слабосвязанная система, доминантное отношение, энтропия Шеннона.

Введение

Предназначенные для моделирования нейтронно-физических процессов алгоритмы, использующие методы Монте-Карло, были изначально ориентированы на вычисление коэффициента эффективного размножения нейтронов $K_{эф}$. В отечественных (MCU, TDMCC и др.) и зарубежных (KENO, MCNP и др.) кодах Монте-Карло для решения задач на критичность традиционно используется метод поколений (power iteration method), обеспечивающий корректность вычисления $K_{эф}$ [1]. Для систем с доминантным отношением, близким к единице, при вычислении нейтронных потоков и соответствующих функционалов могут возникнуть определенные трудности, обусловленные как чисто расчетными проблемами, связанными с выбором адекватных значений статистических параметров (количество нейтронов в поколении, число неактивных поколений и др.), так и алгоритмически [2].

В научном мире интерес к вычислению доминантного отношения методом Монте-Карло проявился сравнительно недавно, и в последнее время исследования в этом направлении [3–5] заметно активизировались. Доминантное отношение, близкое к единице, могут иметь системы

разной степени сложности и гетерогенности в компоновке и композиционном составе, включая простые ячейки, макроячейки, а также более сложные модели объектов ядерной энергетики. Важность знания доминантного отношения будет продемонстрирована на примере бенчмарк-расчетов для слабосвязанных систем, выполненных с помощью программы TDMCC [6].

Вычисление доминантного отношения в TDMCC

Исторически доминантное отношение рассматривалось в качестве некоторого маркера при оценке сходимости итерационных процессов, поэтому вычисление доминантного отношения всегда связано с используемым методом расчета нейтронно-физических характеристик.

Для вычисления доминантного отношения применяются различные алгоритмы. Наиболее естественным представляется FM-метод (Fission Matrix Method) [3] с использованием матрицы деления, для которой вычисляются собственные значения $\lambda_0, \lambda_1, \dots$. Матрица деления M размером $N \times N$ формируется для N пространственных областей. Элемент матрицы m_{ij} равен числу нейтронов, появившихся в ячейке i от одного

нейтрона деления в ячейке j предыдущего поколения. В соответствии с FM-методом главное собственное значение λ_0 матрицы деления является всегда положительным, тождественным $K_{эф}$, а соответствующая собственная функция отражает в первом приближении пространственное распределение нейтронного источника деления. Если для матрицы деления определены собственные значения $\lambda_0 > |\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \dots$, то отношение $|\lambda_1|/\lambda_0$ называется доминантным отношением (DR).

Матрица деления M есть дискретное представление ядра интегрального оператора $K(x', x)$ перехода точки деления x' в x . Элементы матрицы деления можно рассчитать с помощью практически любой программы, использующей метод Монте-Карло. В программе TDMCC расчет матрицы деления возможен при использовании разделов *Тактика счета* и *Параметры и результаты*. Для этого необходимо каждому нейтрону источника деления приписать метку, характеризующую его положение в пространстве, например номер пространственной ячейки, в которой он находится, и число делений распределять по номеру финальной пространственной ячейки и номеру метки нейтрона.

Использование такого подхода оказывается весьма неудобным из-за необходимости проведения специальной постобработки большого объема выходных данных, требуемых для формирования матрицы деления, и в связи с этим в программе TDMCC реализована возможность вычисления доминантного отношения FM-методом в рамках стандартного расчета методом поколений. При моделировании траектории нейтрона запоминаются номера исходной и финальной пространственных ячеек. Перед записью фазовых координат точки деления для следующего поколения проводится суммирование весовых коэффициентов нейтронов и запись в массив, из которого формируется матрица деления. Для этой матрицы вычисляются собственные значения и соответственно доминантное отношение. Вычисление собственных значений для полученной матрицы возможно с помощью любого стандартного математического пакета. При этом надежность вычисляемых собственных значений зависит от вида матрицы. Возникающие сложности носят чисто математический характер.

Матрица деления рассчитывается при моделировании каждого поколения нейтронов, включая неактивные, поскольку каждая траектория ней-

трона дает вклад в оценку элементов матрицы деления. При этом матрица деления сильно зависит от сегментации и количества подобластей исходной системы, что подробно обсуждается, например, в [3]. Если при моделировании реакторных систем число подобластей оказывается достаточно большим (порядка 100, 1000 или более), то для матриц большого размера (размер матрицы деления равен квадрату числа подобластей) могут возникнуть проблемы с вычислением собственных значений. В то же время для "хорошей" матрицы деления (малое число обусловленности и др.) оказывается возможным вычисление собственных функций не только для главного собственного значения λ_0 , но и для $\lambda_1, \lambda_2, \dots$, которые могут быть полезны при обосновании корректности распределения нейтронных потоков и скоростей реакций в размножающей системе [3].

Расчет доминантного отношения с помощью NPM-метода (Noise Propagation Matrix Method) [4, 5] основан на использовании шумовой переходной матрицы (NP-матрицы), которая получается из корреляционных матриц источников деления, рассчитываемых в процессе итераций поколений нейтронов методом Монте-Карло. Этот метод подробно описан и математически обоснован в [4], где, в частности, доказывается, что доминантное отношение есть наибольшее по модулю собственное значение NP-матрицы, вычисляемое стандартными алгебраическими методами. Для NPM-метода отчасти снимается проблема надежности вычисления главного и первого собственных значений.

В отличие от матрицы деления NP-матрица требует гораздо меньше памяти, но она рассчитывается на активных поколениях [4], и корректность NPM-метода обеспечивается для систем с установившимся распределением нейтронов деления при отсутствии нулевых элементов в NP-матрице.

С учетом специфики FM- и NPM-методов при расчете доминантного отношения в программе TDMCC реализованы оба метода. Реализация FM-метода допускает рассмотрение только делящихся областей, что приводит к автоматическому уменьшению ранга матрицы деления и сокращению объема требуемой памяти. Корректность FM- и NPM-методов проанализирована на примерах бенчмарков GODIVA [5], K_of_the_World [6] (табл. 1, 2 и рис. 1, 2, см. также цветную вкладку) и шахматная доска [6].

Тестовые DR-расчеты бенчмарка GODIVA

Метод	Разбиение системы	DR*	Источник
FM	2×2×2	0,56	[4]
	4×4×4	0,60	
	8×8×8	0,65	
ARMA(2,1)	2×2×2	0,63±0,04	
FM	2×2×2	0,56	TDMCC
	6×6×6	0,63	
	9×9×9	0,64	
NPM	2×2×2	0,60±0,04	

*Результаты FM-метода приводятся без указания погрешности.

Тестовые DR-расчеты бенчмарков K_of_the_World и шахматная доска

Источник	K_of_the_World, 5×5×1	Шахматная доска
[6]	0,9037	0,9970
TDMCC, FM-метод	0,9031	0,9977
TDMCC, NPM-метод	0,9101	0,9975

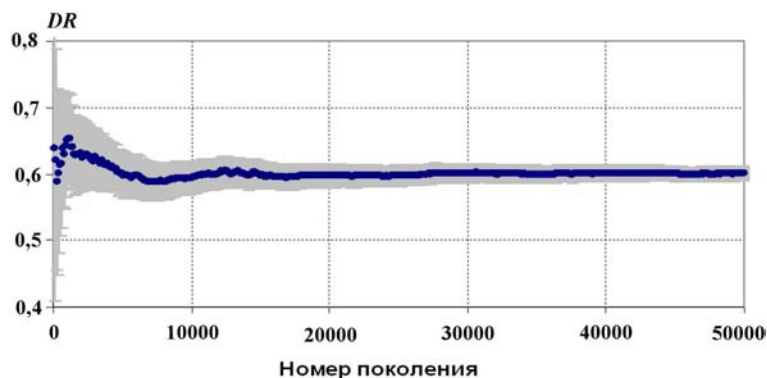


Рис. 1. Динамика доминантного отношения в расчете NPM-методом бенчмарка GODIVA ($NPAC^1 = 20\,000$)

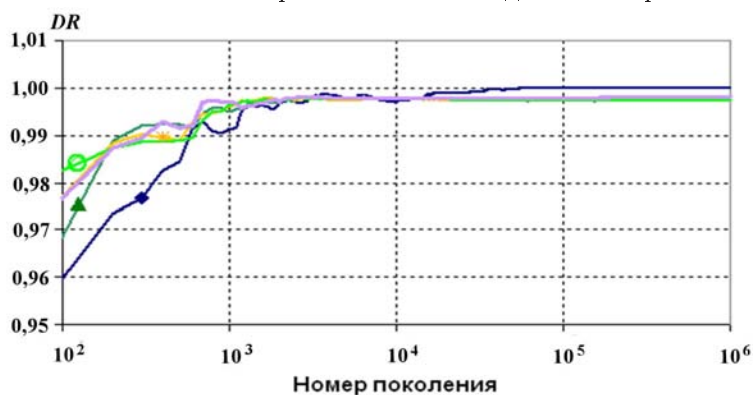


Рис. 2. Динамика доминантного отношения в расчетах NPM-методом бенчмарка шахматная доска: \blacklozenge — $NPAC = 400$; \blacktriangle — $NPAC = 8\,000$; \ast — $NPAC = 20\,000$; \ominus — $NPAC = 100\,000$; \blacksquare — $NPAC = 200\,000$

¹Здесь и всюду далее $NPAC$ — количество нейтронов в поколении.

Вычисление энтропии Шеннона в TDMCC

Проблема обоснования гарантированной устойчивости нейтронно-физических характеристик, вычисляемых с помощью кодов Монте-Карло, имеет особую значимость в связи с возможностью выполнения больших объемов вычислений на многопроцессорных кластерных системах.

Для оценки устойчивости вычисляемых характеристик в задачах на критичность в ряде зарубежных кодов (MCNP, SERPENT) используется энтропия Шеннона [7]. В теории информации энтропия Шеннона является мерой неопределенности, приходящейся на единицу информации, и определяется как

$$H_{src} = - \sum_{i=1}^N P_i \log_2 (P_i), \quad (1)$$

где P_i — вероятность появления i -го символа в сообщении длины N .

В расчетах на критичность использование энтропии Шеннона предлагается, в частности, для исследования сходимости источника деления [7]. Вся область источника деления разбивается на N пространственных подобластей. В качестве P_i ($i = 1, \bar{N}$) берется значение функции распределения средней скорости деления R_i в подобласти i :

$$P_i = \frac{R_i}{\sum_{i=1}^N R_i}. \quad (2)$$

Предполагается, что выход H_{src} на стационарное значение свидетельствует о достижении устойчивых значений вычисляемых нейтронно-физических характеристик. При этом отсутствует математическая формулировка критерия устойчивости и указание погрешности вычисляемых характеристик.

Реализация расчета энтропии Шеннона в TDMCC обеспечивает вычисление H_{src} как для всей системы, так и для любой подобласти фазового пространства. Сравнительный анализ динамики энтропии Шеннона для отдельных ТВС помогает оценить достаточность вычислений с точки зрения устойчивости получаемых результатов. Реализованный алгоритм вычисления энтропии Шеннона в программе TDMCC позволяет исследовать сходимость H_{src} по разным параметрам, включая пространственные координаты, энергию, угловые переменные и др.

Для бенчмарков GODIVA и K_of_the_World приведено изменение энтропии Шеннона при увеличении числа активных поколений (рис. 3). В системе GODIVA, не являющейся слабосвязанной системой ($DR = 0,63$), энтропия Шеннона достаточно быстро выходит на стационарное значение при ~ 500 активных поколениях в отличие от слабосвязанной системы K_of_the_World с $DR = 0,90$, которая не выходит на стационар даже после 6 000 активных поколений.

Анализ нейтронно-физических характеристик бенчмарка *шахматная доска*

Бенчмарк *шахматная доска* рассматривается как модель хранилища ядерного топлива легководных реакторов [8], состоящая из трех рядов размещенных в шахматном порядке ТВС и заполненных водой ячеек, окруженных с трех сторон бетонными стенками и с одной стороны водой (рис. 4). В ТВС используется свежее диоксидурановое топливо с обогащением 3,5%. Бенчмарк *шахматная доска* предполагает расчет $K_{эф}$ и покассетного распределения скорости делений. Расчеты выполнены для трехмерной модели с потвэльным описанием геометрии.

Данная система относится к слабосвязанным системам, особенностью которых является крайне малая вероятность попадания нейтрона из одной ТВС в другую. При этом для нейтрона, родившегося в одной ТВС, вероятность деления в другой составляет десятые или даже сотые доли процента. Значения $K_{эф}$, проанализированные при разных статистических параметрах, приведены во многих ранее опубликованных работах (см., например, [7–10]). Целью данной работы является анализ распределения скорости деления (R_f -распределение), полученного по программе TDMCC при разных статистических параметрах.

Вариантные расчеты проведены с числом нейтронов в поколении от 400 до 400 000² и общей статистикой до 1 млн поколений (рис. 5, см. также цветную вкладку). Результаты $K_{эф} = 0,884$ с максимальным значением R_f -распределения $\sim 0,403$ в ячейке 1 согласуются с результатами работ [8–10]. Анализ полученных результатов показывает, что для обеспечения устойчивых

²Это эквивалентно $\sim 1\,000$ и 1 млн нейтронов в поколении в расчетах по MCNP и MCU.

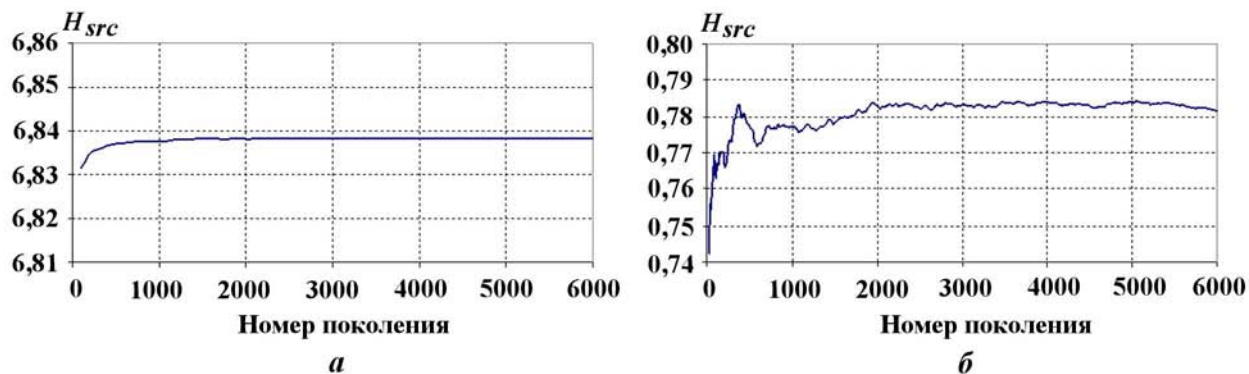


Рис. 3. Изменение H_{src} в расчетах систем: а — GODIVA; б — K_of_the_World

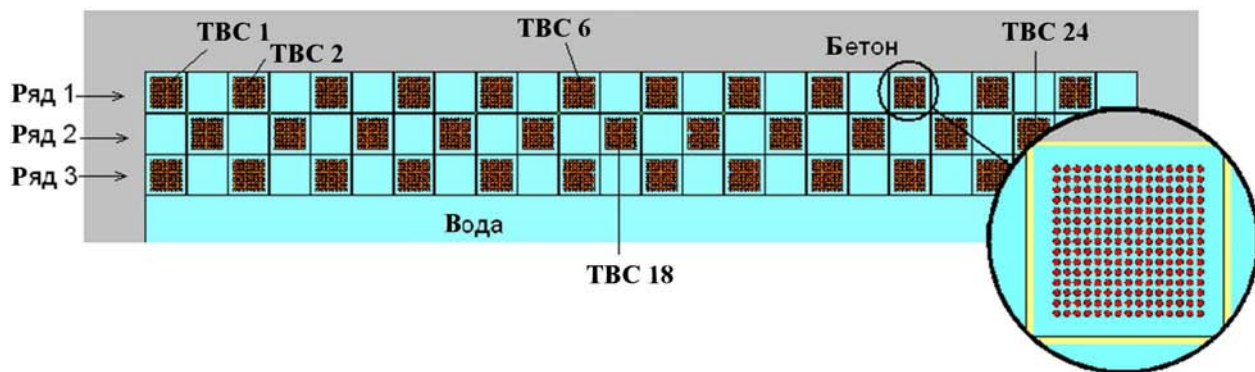


Рис. 4. Геометрия бенчмарка шахматная доска

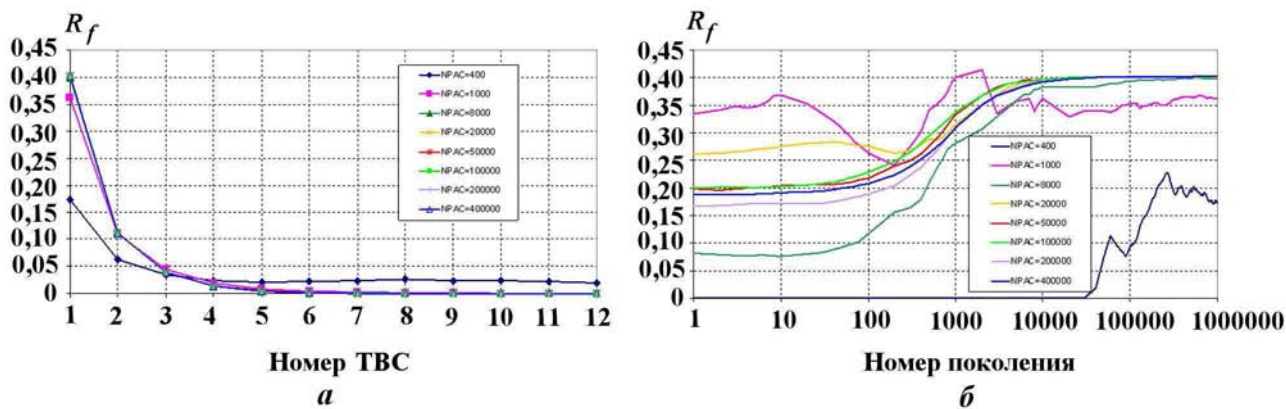


Рис. 5. R_f -распределение в системе шахматная доска: а — покассетное в ряду 1; б — в TBC 1 (бетон)

R_f -распределений необходимо задавать не менее 8 000 частиц в одном поколении и моделировать не менее 10 000 активных поколений нейтронов. Для рассматриваемой системы с достаточно простой геометрией указанная статистика выглядит непропорционально большой. Для осмысления полученного результата используется энтропия Шеннона.

Анализ значений энтропии Шеннона H_{src} с заметными перепадами показывает, в частности (рис. 6, см. также цветную вкладку), что для $NPAC = 1\,000$ завершение расчета после $2 \cdot 10^5$ поколений не гарантирует получения корректного распределения. Схожий характер изменения H_{src} наблюдается и для $NPAC \geq 20\,000$, что подтверждает нецелесообразность дальней-

шего увеличения числа нейтронов в поколении для улучшения сходимости.

Характерные изменения H_{src} для выделенных ТВС (см. рис. 4) и всей системы в потвэльном приближении (рис. 7, см. также цветную вкладку) позволяют оценить степень "неустойчивости" распределений R_f в ТВС на фоне изменения энтропии Шеннона всей системы.

Анализ H_{src} подтверждает существенно более медленную покассетную сходимость по сравнению с потвэльной сходимостью внутри отдельной ТВС. При прогнозировании сходимости распределений наряду с анализом динамики изменения H_{src} возможно использование и самих значений H_{src} , меняющихся в интервале $[0, \log_2 N]$ согласно (1). При этом нулевое значение соответствует вырожденному (точечному) распределению, а максимальное — равномерному. Вы-

ход энтропии Шеннона на стационарное значение служит основанием для завершения расчета. Наметившаяся тенденция изменения H_{src} только в сторону убывания или только в сторону возрастания указывает на сходимость к более острому или пологому распределению соответственно. Так, для ТВС 1 энтропия Шеннона с меньшим стационарным значением по сравнению со значениями для других ТВС (см. рис. 7) указывает на явное различие R_f -распределений в ТВС 1 и ТВС 2, 6, 18, 24.

Таким образом, используя значения энтропии Шеннона и учитывая ее изменения, можно улучшить прогноз сходимости и устойчивости вычисляемых распределений. Также энтропия Шеннона может быть полезна при определении оптимальных расчетных параметров при проведении многовариантных расчетов.

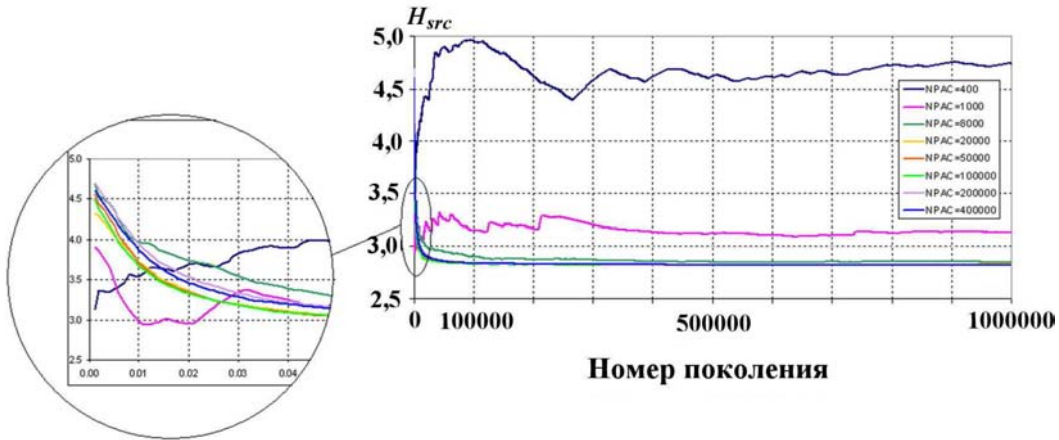


Рис. 6. Изменение энтропии Шеннона H_{src} для разного числа нейтронов в поколении в зависимости от статистики

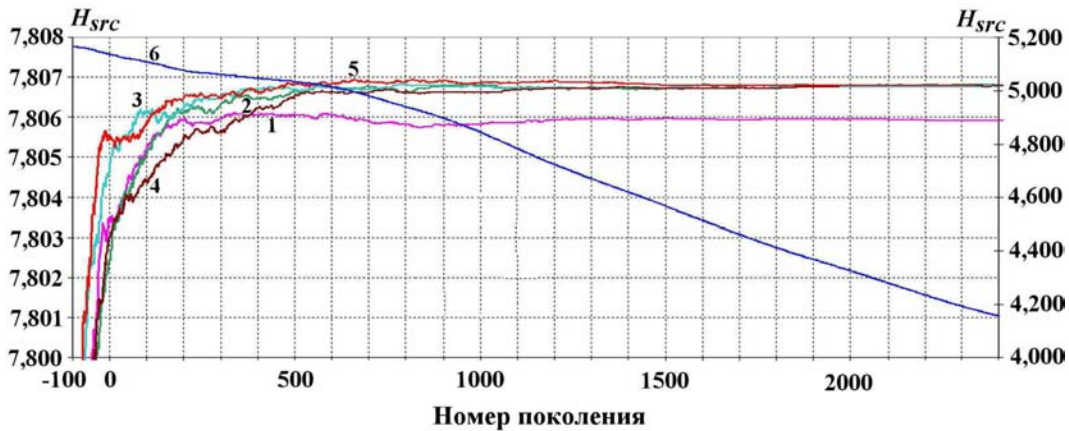


Рис. 7. Изменение H_{src} для ТВС 1 (1), 2 (2), 6 (3), 18 (4), 24 (5) (шкала слева) и всей системы шахматная доска (6) (шкала справа)

Особенности распределений в системе шахматная доска при малых изменениях состава бетонных стенок. Для систем с доминантным отношением, близким к единице, обоснование корректности полученных результатов приобретает особую значимость. При этом оценка чувствительности вычисляемых нейтронно-физических характеристик к малым возмущениям представляется одним из обязательных и естественных этапов в расчетах таких систем. В качестве малого возмущения для бенчмарка *шахматная доска* рассмотрены незначительные различия в композиционных составах материала граничных стенок (табл. 3). Во многих опубликованных работах, посвященных этой проблеме, в частности [12, 13], выводы о корректности R_f -распределений сделаны для базового варианта рассматриваемой системы. Вместе с тем R_f -распределения в системе, отличающейся от базового варианта лишь незначительными изменениями состава бетонных сте-

нок, демонстрируют сильную чувствительность результата к малым возмущениям.

Для системы *шахматная доска* с железобетонными (ж/б) стенками максимумы показетного R_f -распределения в ряду 1 приходятся на разные ТВС центральной области (рис. 8, см. также цветную вкладку).

Наглядное отображение позволяет оценить различия полученных R_f -распределений в системе с бетонными и ж/б стенками (рис. 9, см. также цветную вкладку, где синий цвет соответствует минимальному значению, а красный — максимальному). Для системы с бетонными стенками максимум R_f -распределения находится в ячейке 1 ряда 1, что соответствует результатам работ [8, 9]; в системе с ж/б стенками максимум оказывается размазанным по нескольким центральным ТВС. Полученные различия вызывают вопрос о корректности вычисляемого R_f -распределения.

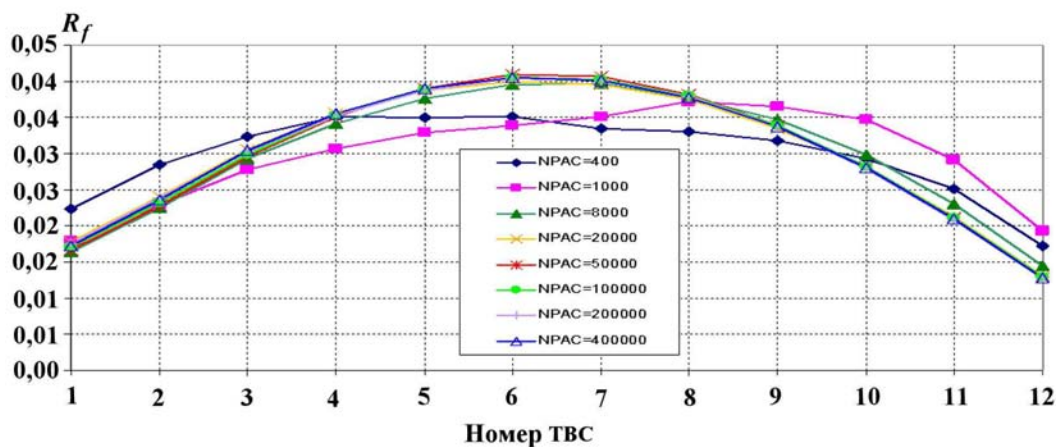
Для выяснения особенностей отражающих свойств бетонных стенок разного композиционного состава рассмотрены системы с укрупненными топливными макроэлементами, состоящими из 3×3 и 3×1 исходных ТВС (рис. 10). Для обеих систем максимум R_f -распределения достигается в макроэлементах 1 со значениями около 0,99 и 0,95 соответственно. Таким образом, практически одинаковое балансовое соотношение нейтронов *поглощение—отражение* для обоих составов бетона позволяет сделать вывод, что измененный состав бетонных стенок не может быть определяющим фактором качественного изменения R_f -распределений, что требует дополнительного анализа корректности R_f -распределения.

Таблица 3

Композиционный состав стенок хранилища

Нуклид	Бетон, 10^{24} ат/см ³ [8]	Железобетон, 10^{24} ат/см ³ [14, 15]*
O	$4,33854 \cdot 10^{-2}$	$3,61 \cdot 10^{-2}$
Fe	—	$9,12 \cdot 10^{-4}$
H	$5,54439 \cdot 10^{-3}$	$1,15 \cdot 10^{-2}$
C	$6,98002 \cdot 10^{-3}$	—
Si	$7,71090 \cdot 10^{-3}$	$8,81 \cdot 10^{-3}$
Ca	$8,95927 \cdot 10^{-3}$	$2,96 \cdot 10^{-3}$
Al	—	$9,06 \cdot 10^{-4}$

*Один из вариантов бетона на основе портландцемента.

Рис. 8. R_f -распределение в ряду 1 для системы с ж/б стенками

Использование энтропии Шеннона позволяет оценить устойчивость R_f -распределения. Для системы с бетонными стенками характер изменений H_{src} (кривая 1, рис. 11) указывает на медленную сходимость R_f -распределения. В то же время для системы с ж/б стенками поведение энтропии Шеннона со скачкообразными изменениями (кривая 2, рис. 11) указывает на неустойчивость получае-

мого распределения на стадии счета неактивных поколений и устойчивость R_f -распределения после счета примерно 2000 активных поколений. При этом необходимы специальные исследования для оценки корректности или некорректности получаемого распределения.

Анализ собственных коэффициентов размножения нейтронов для каждой ТВС, вычисленных при загрузке вторичных нейтронов деления в остальных ТВС (рис. 12), так-

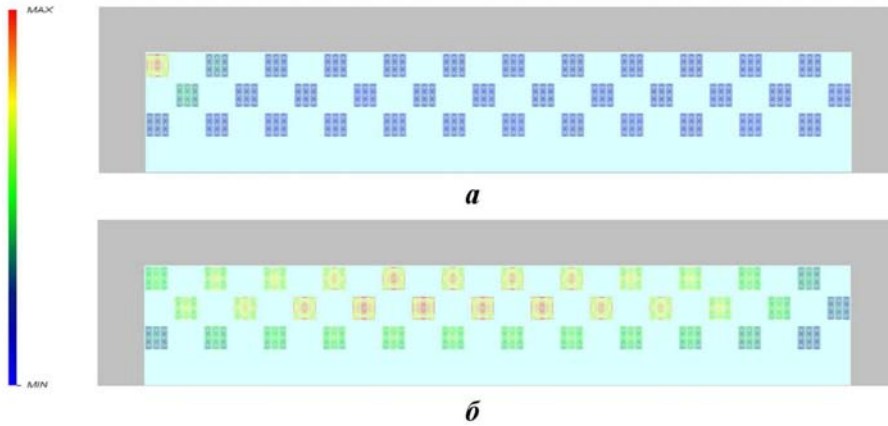


Рис. 9. R_f -распределение в системе с бетонными (а) и ж/б (б) стенками

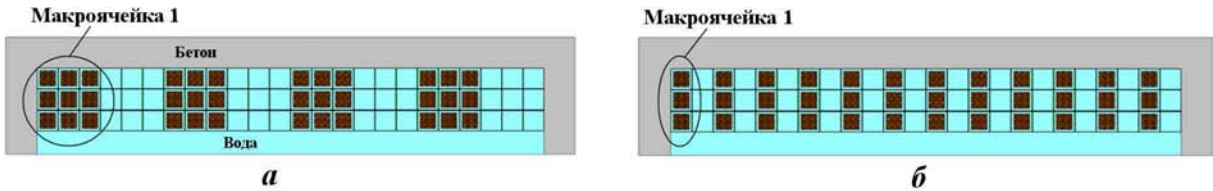


Рис. 10. Геометрия бенчмарка шахматная доска с макроячейками 3×3 (а) и 3×1 (б)

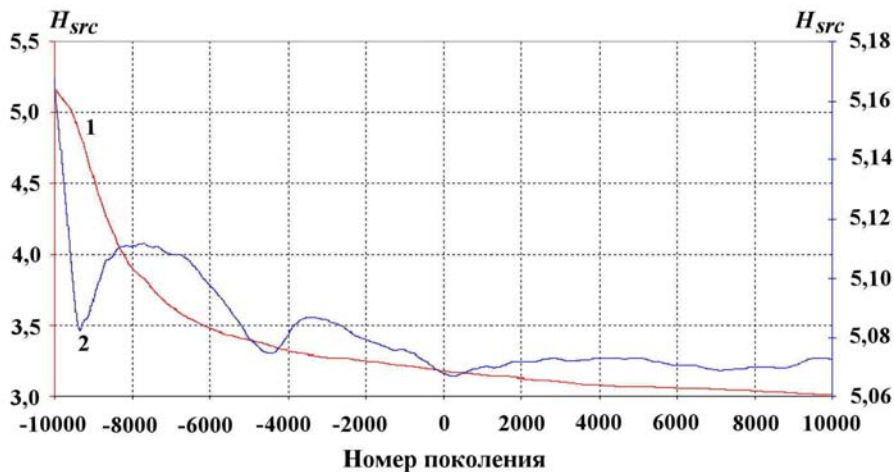


Рис. 11. Изменение энтропии Шеннона в бенчмарке шахматная доска с бетонными (1, шкала слева) и ж/б (2, шкала справа) стенками

же заставляет усомниться в корректности R_f -распределений на рис. 8. Сравнение кривых R_f -распределений (рис. 13) дает основание предположить, что в системе с ж/б стенками R_f -распределение должно быть равномерным или со слабо выраженным максимумом в ТВС 1.

Доминантное отношение для системы с исходными бетонными и ж/б стенками составляет 0,9974 и 0,9996 соответственно (рис. 14). В настоящее время не существует универсального критерия, позволяющего ранжировать исследуемые системы в соответствии с DR -значением. При сопоставлении результатов для однотипных систем значение доминантного отношения позволяет выявлять тенденции, обуславливающие проведение уточняющих расчетов с детальным анализом нейтронно-физических характеристик.

Полученные результаты демонстрируют необходимость расширения алгоритмических возможностей при моделировании переноса ней-

тронов в системах с доминантным отношением, близким к единице. Возможно, для таких систем целесообразно использование смешанных алгоритмов, поскольку использование только традиционного метода поколений при моделировании переноса нейтронов не позволяет получать истинные распределения ни при каких расчетных параметрах.

Основные сложности при обосновании полученных распределений обусловлены, прежде всего, недооцененной погрешностью расчета. Известно, что при моделировании методом поколений имеется устойчивая корреляция между соседними поколениями. Еще в 1970-е годы отмечалась некорректность вычисляемой погрешности в реакторных расчетах нейтронных потоков и функционалов с помощью методов Монте-Карло [2, 11, 13]. На сегодняшний день универсального метода корректного вычисления погрешности, пригодного для расчета распределений в любых реакторных системах, не существу-

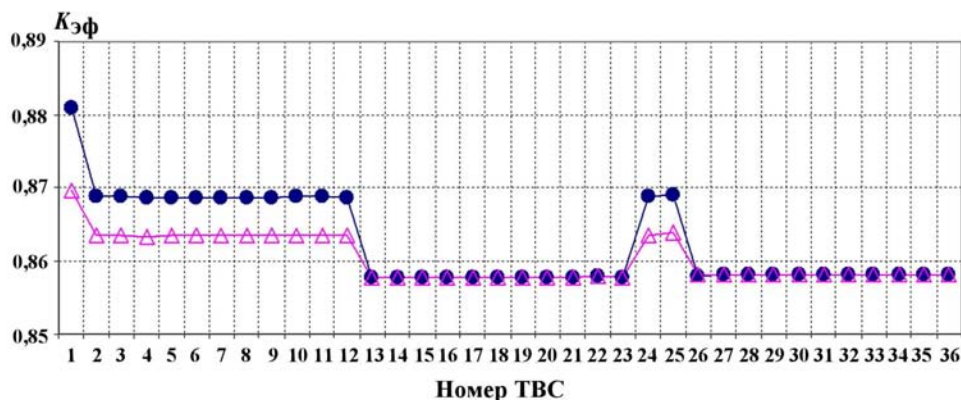


Рис. 12. Собственные коэффициенты размножения нейтронов в системе шахматная доска с бетонными (—●—) и ж/б (—△—) стенками

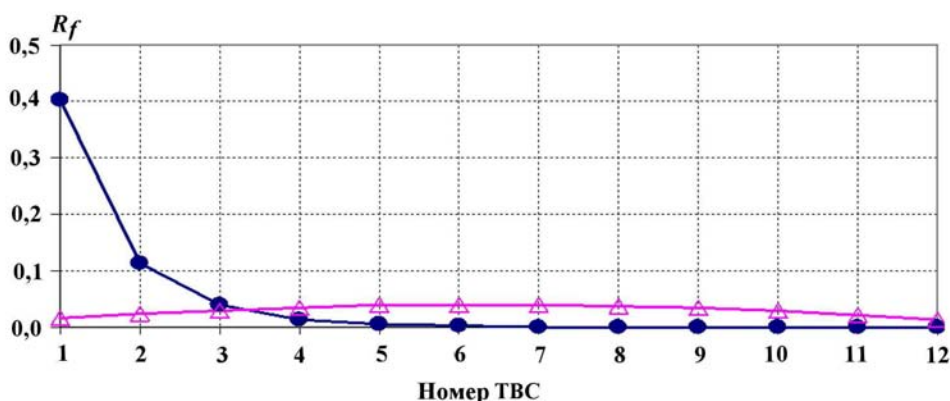


Рис. 13. R_f -распределение в бенчмарке шахматная доска с бетонными (—●—) и ж/б (—△—) стенками

ет. Изменение подхода к вычислению погрешности при расчете функционалов с использованием кодов Монте-Карло, увеличение погрешности как минимум на порядок при расчете нейтронных потоков в реакторных системах неоднократно обсуждались на международных форумах и рассматривались в научной литературе.

Для конкретных систем с учетом особенностей их компоновки предлагаются различные методы оценки поправочных коэффициентов для корректировки (всегда в сторону увеличения) вычисляемых погрешностей. В частности, в [12] рассматривается возможность использования формулы, содержащей отношение площади модели к площади миграции в среде, которое обратно пропорционально отличию доминантного отношения от единицы. Для систем с доминантным отношением, близким к единице, проблема вычисления погрешности еще больше

усложняется. Для бенчмарка шахматная доска с ж/б стенками поправочный коэффициент приводит к расширению границ доверительного интервала (σ^*) почти в 20 раз. Аппроксимируемая в пределах только $3\sigma^*$ -интервала кривая R_f -распределения может рассматриваться в качестве реального распределения с максимумом в ТВС 1 (рис. 15).

В настоящей версии TDMCC, так же как в известных зарубежных кодах Монте-Карло MCNP-4, MCNP-5 и KENO, погрешность вычисляемых функционалов представляется только на основе среднеквадратичного отклонения результатов от среднего без учета корреляции соседних поколений. В большей степени подобная корреляция проявляется в расчетах слабосвязанных систем, что в результате может приводить к смещению оценок локальных функционалов и недооценке их погрешности.

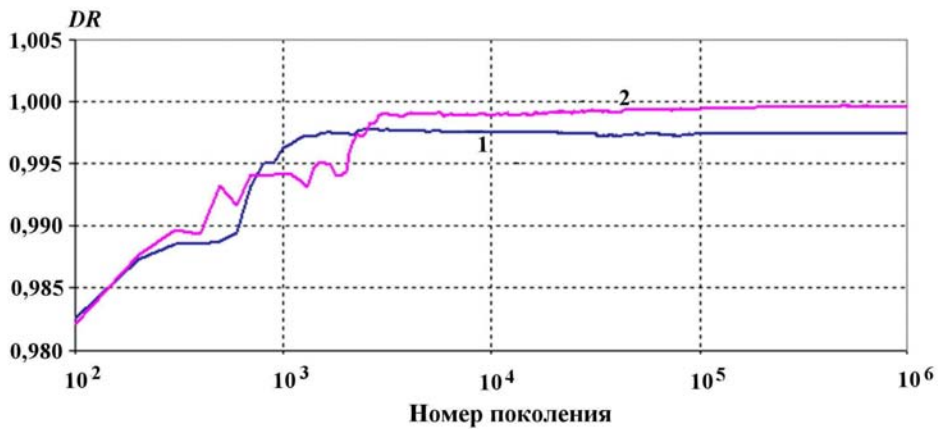


Рис. 14. Изменение DR в зависимости от статистики в бенчмарке шахматная доска с бетонными (1) и ж/б (2) стенками

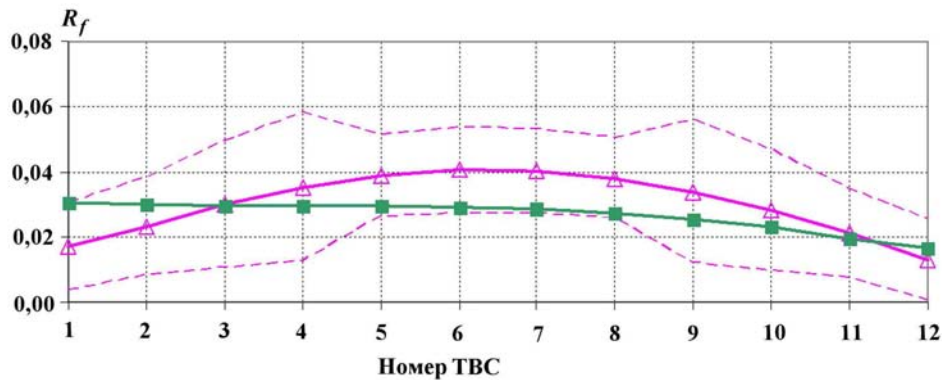


Рис. 15. Кривые R_f -распределения бенчмарка шахматная доска с ж/б стенками: \triangle — расчетная; \square — аппроксимируемая; \cdots — окаймляющие $3\sigma^*$ -интервал;

Заключение

По итогам выполненной работы можно сделать следующие выводы:

1. Знание доминантного отношения и энтропии Шеннона способствует улучшению прогнозирования и обоснованию распределений функционалов.
2. Реализация в программе TDMCC двух методов вычисления доминантного отношения, учитывающих особенности компоновки исследуемых систем, повышает надежность расчета доминантного отношения.
3. Распределения скоростей реакций в системе шахматная доска с доминантным отношением, близким к единице, наглядно демонстрируют имеющиеся ограничения в расчетах нейтронных потоков методом поколений. Возможно, для подобных систем повышение надежности вычисляемых функционалов можно обеспечить с помощью гибридных методов, включающих специально разработанные алгоритмы Монте-Карло, базирующиеся на использовании матрицы деления, и детерминистские подходы.

Список литературы

1. *Соболь И. М.* Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973.
2. *Armishaw M., Blomquist R., Naito Y. et al.* Source Convergence in Criticality Safety Analyses. No 5431. OECD/NEA, 2006.
3. *Carney S. E., Brown F.B., Kiedrowski B. C., Martin W. R.* Fission Matrix capability for MCNP. Part I — Theory // M&C. Sun Vallue, Idaho. May 5—9, 2013.
4. *Sutton T. M., Romano P. K., Nease B. R.* On-the-fly Monte Carlo dominance ratio calculation using the Noise Propagation Matrix progress // Nuclear Science and Technology. 2011. Vol. 2. P. 749—756.
5. *Nease B., Brown F., Ueki T.* Dominance ratio calculations with MCNP // Int. Conf. on the Physics of Reactors. Switzerland. September 14—19, 2008.

6. Программа: TDMCC (Time-Dependent Monte Carlo Code). Свидетельство о гос. регистрации №2010614412 // Электронный бюллетень. 2010. № 2. <http://www.fips.ru>.
7. *Brown F. B.* On the use of Shannon entropy of the fission distribution for assessing convergence of Monte Carlo criticality calculations // PHYSOR-2006. Vancouver, Canada. September 10—14, 2006.
8. Source Convergence Benchmark 1: Checkerboard storage of assemblies / Ed. by N. Smith. OECD/NEA, 2002.
9. *Олейник Д. С.* Расчет слабосвязанных систем методом Монте-Карло // Атомная энергия. 2005. Т. 99. Вып. 4. С. 256—264.
10. *Митенкова Е. Ф., Колташев Д. А., Кузуб П. А.* Распределение скорости реакции деления в слабосвязанной системе для тестовой модели "Шахматная доска" // Там же. 2014. Т. 116. Вып. 6. С. 345—349.
11. *Майоров Л. В.* Оценки смещения результатов при расчете реакторов и хранилищ ядерного топлива методом Монте-Карло // Там же. 2005. Т. 99. Вып. 4. С. 243—256.
12. *Городков С. С.* Быстрая оценка погрешности распределения нейтронов в большом реакторе при расчете методом Монте-Карло // Там же. 2007. Т. 103. Вып. 2. С. 115—119.
13. *Blomquist R., Nouri A., Armirshaw M. et al.* OECD/NEA source convergence benchmark program: overview and summary of results // Proc. of the 7th Int. Conf. on Nuclear Criticality Safety. Tokai, Ibaraki, Japan. October 20—24, 2003. OECD/NEA, 2003. Vol. 1. P. 278—282.
14. *Машкович В. П., Кудрявцева А. В.* Защита от ионизирующих излучений. Справочник. М.: Энергоатомиздат, 1995.
15. *Бродер Д. Л., Зайцев Л. Н., Комочков М. Н. и др.* Бетон в защите ядерных установок. М.: Атомиздат, 1973.

Статья поступила в редакцию 20.03.15.

TDMCC CODE APPLICATION TO SOLVE PROBLEMS WITH A DOMINANT RATIO CLOSE TO ONE / E. F. Mitenkova, T. V. Semenova (the RAS IBRAE, Moscow; FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, Nizhny Novgorod region).

New capabilities of the TDMCC code for the analysis of the fission rate distribution in weakly coupled systems are presented. The methods implemented in the TDMCC code to calculate the dominant ratio and Shannon's entropy are considered. For systems with the dominant ratio value close to 1, the relation between the convergence rate of functionals and Shannon's entropy is demonstrated. An example is given, in which underestimation of errors in the calculated functionals and the specifics of the algorithms used to solve the criticality problems lead to inconsistent results in various options of computations with small variations of the original system parameters.

Keywords: Monte Carlo method, method of generations, a weakly coupled system, dominant ratio, Shannon entropy.

УДК 629.039.58

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАВЛЕНИЯ ОБОЛОЧКИ ТВЭЛА И ПЕРЕМЕЩЕНИЯ РАСПЛАВА В ТВС РЕАКТОРОВ ТИПА "БН" КОДОМ "СОКРАТ-БН"

И. С. Вожаков, Э. В. Усов, В. С. Жданов, М. Е. Кузнецова, А. Е. Киселёв, Р. В. Чалый
(Новосибирский филиал ИБРАЭ РАН; ИБРАЭ РАН, г. Москва)

Представлена модель для описания процессов плавления и перемещения расплава оболочки твэла внутри ТВС быстрых реакторов с натриевым теплоносителем. Модель основана на предположении о пленочном характере течения расплава оболочки твэла. Проведена первичная верификация разработанной модели на задачах, имеющих аналитическое решение, а также кросс-верификация на эксперименте серии R, выполненном на реакторе TREAT.

Ключевые слова: быстрый реактор, твэл, оболочка, плавление, моделирование, СОКРАТ-БН.

Введение

Одним из ключевых элементов при обосновании безопасной эксплуатации ядерных энергетических установок (ЯЭУ) является расчет процессов, протекающих при развитии тяжелых аварий с плавлением и разрушением тепловыделяющих элементов (твэлов) активной зоны (АЗ).

Для описания процессов, протекающих при плавлении АЗ легководных реакторов, наилучшие предсказания дают модели, которые опираются на результаты экспериментальных исследований [1]. Это позволяет разработать подробные модели для перемещения расплава и учесть основные факторы, которые влияют на его динамику. Подобные модели используются в кодах СОКРАТ, ICARE2, SCDAP/RELAP5 [2–4].

В процессе разработки интегрального кода СОКРАТ-БН [5] было выяснено, что из-за особенностей конструкции и физических свойств материалов твэлов реакторов, охлаждаемых жидким натрием (реакторы типа БН), использовать модели, разработанные для легководных реакторов, не представляется возможным.

Особенностями быстрых реакторов являются высокие удельные энерговыделения и низкие рабочие давления, которые приводят к тому, что при закипании теплоносителя в процессе развития аварии с потерей расхода скорость течения паров натрия может достигать сотен метров в се-

кунду, что оказывает значительное влияние на динамику течения расплава материалов твэлов.

Для обоснования безопасности быстрых реакторов с натриевым теплоносителем за рубежом используются расчетные коды семейств SAS и SIMMER.

Код SAS4A применяется для описания начальной стадии аварии с плавлением АЗ. Модель, используемая в коде SAS4A [6] для расчета разрушения твэла, предполагает детальное описание многих процессов, происходящих на начальном этапе аварии: плавление и перемещение оболочки, плавление и перемещение топлива внутри твэла, разрушение твэла и выброс расплава топлива и оболочки в канал теплоносителя.

Семейство кодов SIMMER [7] изначально разрабатывалось для анализа переходной стадии аварии, которая сопровождается полным разрушением АЗ. Современная версия кода может быть использована также и для анализа процессов, происходящих в единичной ТВС. В настоящее время широкая область применимости кода связана с развитой системой соотношений, используемых для описания динамики поведения многофазного потока.

В России основные работы по обоснованию проектов реакторных установок типа БН проводились в ГИЦ РФ-ФЭИ им. Лейпунского. Там же был разработан код COREMELT [8], который

для моделирования физических процессов на этапе тяжелой аварии использует подходы, близкие к применяемым в коде SIMMER-III. Процессы разрушения АЗ в коде COREMELT рассчитываются в приближении пористого тела [9]. При расчете перемещения расплава в каналах с теплоносителем используется многоконтинуальная модель [10].

В настоящей работе для анализа событий в быстром реакторе предполагается применять подход, учитывающий особенности конструкции твэла быстрого реактора, т. е. подробно рассматривать структуру твэла и связанные с этим особенности в процессах плавления и перемещения расплава. Предложенный подход позволяет детально описывать поведение расплава на начальном этапе тяжелой аварии.

Модель плавления и перемещения расплава

В реакторной установке БН могут реализовываться два основных механизма разрушения твэла. Первый механизм обусловлен высокой энергонапряженностью АЗ и низкой теплопроводностью оксидного топлива. В условиях резкого роста реактивности (авария типа УТОР в международной классификации) быстрое увеличение мощности при низкой скорости отвода тепла может привести к плавлению или диспергированию топливного сердечника еще до того, как будет разрушена оболочка. Второй механизм обусловлен разогревом оболочки из-за ухудшения отвода тепла с поверхности твэла при кризисе кипения, вызванного снижением расхода теплоносителя (авария типа ULOF). При таких условиях твэл нагревается постепенно, а значительное различие температур плавления топлива и оболочки приводит к тому, что первой начинает плавиться оболочка твэла.

Модель, представленная в настоящей работе, описывает разрушение твэла в соответствии со вторым механизмом. Результаты экспериментов, проведенных на реакторе TREAT [11], и визуальных наблюдений перемещения расплава оболочки [12] могут быть интерпретированы как свидетельства о том, что при умеренных скоростях набегающего газового потока (до 100 м/с) расплав перемещается по твэлу в виде пленки. При больших скоростях пленка разбивается на ручейки. Поэтому базовым предположением модели является представление о том, что после

плавления расплав оболочки движется в виде жидкой пленки под действием сил гравитации и трения с потоком газа.

Предположение о преобладании в начале движения расплава пленочной структуры позволяет построить соответствующую данному режиму математическую модель, что нашло отражение в работах многих авторов [13–15]. Однако недостатком работ [14, 15] является предположение о равенстве толщины пленки во всех точках вдоль направления движения. Использование данного предположения не совсем корректно. Так, в работе [16] показано, что пленка, увлекаемая трением со стороны газового потока (без учета капиллярных и инерционных сил), имеет линейный профиль по толщине: $\delta(z, t) \approx \frac{\mu_m z}{\tau_i t}$. При движении под действием силы тяжести профиль становится еще более неравномерным: $\delta(z, t) \approx \sqrt{\frac{\mu_m z}{\rho_m g t}}$. Здесь, δ — толщина пленки расплава; z — координата в направлении движения; τ_i — напряжение трения на границе с газовым потоком; μ_m — динамическая вязкость расплава; ρ_m — плотность расплава. Для того чтобы с хорошей точностью рассчитывать перемещение расплава, необходимо учитывать значительную неравномерность толщины пленки вдоль направления ее движения, т. е. решать полное уравнение сохранения массы для каждой пространственной точки.

Изменение массы расплава в выделенном объеме может быть найдено из уравнения баланса

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho_m dV = - \oint_S \rho_m v_m dS + \Gamma. \quad (1)$$

Данное уравнение можно решить с использованием метода конечных объемов:

$$\frac{\partial}{\partial t} m = (\rho_m v_m S)_l - (\rho_m v_m S)_r + \Gamma. \quad (2)$$

В (1) и (2) m — масса расплава в расчетном объеме; v_m — скорость движения расплава; Γ — количество массы, образующееся (исчезающее) за единицу времени в результате плавления (затвердевания); S — площадь поперечного сечения пленки расплава; индексы r и l показывают, что значения переменных берутся на двух (правой и левой) границах (одномерный случай).

Аналогично для выделенного объема записывается уравнение сохранения импульса. При расчете учитывается взаимодействие с газовым

потоком, сила тяжести и трение расплава с твердой стенкой:

$$\begin{aligned} \frac{\partial (mv_m)}{\partial t} + (\rho_m v_m^2 S)_r - (\rho_m v_m^2 S)_l = \\ = F_{gas} + F_{grav} + F_{fric}. \end{aligned}$$

Здесь $F_{gas} = \tau_i S_{gas}$; $\tau_i = \lambda_g \frac{\rho_g v_g^2}{8}$, где $\lambda_g = 0,02 \left(1 + 300 \frac{\delta}{D}\right)$, v_g — скорость газового потока; S_{gas} — площадь расплава, взаимодействующего с газовым потоком; D — гидравлический диаметр канала; $F_{grav} = mg$ — сила тяжести; $F_{fric} = \lambda_w \frac{\rho_m v_m^2}{8} S_{wall}$ — сила трения с твердой стенкой, где S_{wall} — площадь соприкосновения расплава с твердой стенкой.

Трение с газовым потоком рассчитывается по известной формуле [17], которая была получена для течения пленки воды. Использование формулы для расплава металла оправдано по причине подобия гидродинамики жидких металлов и воды. Так как скорость газового потока ($v_g \approx 100$ м/с) значительно выше скорости перемещения расплава ($v_m < 1$ м/с), скоростью расплава можно пренебречь. То есть расплав можно считать неподвижным относительно газового потока. Выбор коэффициента трения определяется режимом течения газового ядра.

Для ламинарного режима используется коэффициент трения, полученный для гладкой ламинарной пленки, стекающей по поверхности, которая расположена под углом θ к горизонту:

$$\begin{aligned} \lambda_w = \frac{64}{Re_m} - \frac{8 \sin \theta}{3Fr}, \\ Re_m = \frac{\rho_m v_m 4\delta}{\mu_m}, \quad Fr = \frac{v_m^2}{g\delta}. \end{aligned} \quad (3)$$

В то же время в модели стекания оболочки кода SAS4A [13] используется следующее соотношение для расчета коэффициента трения расплава со стенкой:

$$\lambda_w = \frac{64}{Re_m}. \quad (4)$$

Можно показать, что скорость течения расплава при чисто гравитационном стекании, рассчитанная с помощью (3), совпадает с результатами теоретических расчетов работы [16], тогда как по формуле (4) скорость будет завышена в полтора раза.

Для турбулентного режима с удовлетворительной точностью для расчета коэффициента

трения пленки со стенкой могут быть использованы обычные эмпирические корреляции для трения в круглых трубах, например корреляция Блазиуса:

$$\lambda_w = \frac{0,316}{Re_m^{0,25}}.$$

Для решения тепловой задачи с учетом фазовых переходов и определения массы образовавшегося материала было предложено решать уравнение теплопроводности в энтальпийной формулировке в отличие, например, от кодов SAS4A [13] и SIMMER [7], использующих температурную формулировку. Преимущество энтальпийной формулировки состоит в том, что она позволяет с хорошей точностью описывать процессы плавления и затвердевания. Кроме того, по сравнению с температурной формулировкой энтальпийная является более естественной, поскольку энтальпия при фазовом переходе изменяется непрерывно [18]:

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} = \text{div} (\lambda \text{grad } T) + q.$$

Здесь ρ — плотность; h — удельная энтальпия; λ — коэффициент теплопроводности; T — температура; q — объемные источники тепла.

Использование энтальпии позволяет однозначно определить температуру и фазовое состояние контрольных объемов.

Тестирование модели

Верификация разработанной модели проводилась на задачах, которые имеют аналитическое решение, а также на результатах вне реакторных экспериментов исследования плавления твэлов.

В частности, решение уравнения теплопроводности с учетом фазового перехода проверялось на известной задаче Стефана о плавлении цилиндра. При проведении численного эксперимента рассматривался цилиндр с твердым материалом при температуре плавления T_m . В начальный момент времени температура боковой поверхности мгновенно повышается до температуры $T_w > T_m$ и поддерживается такой на протяжении всего процесса.

Процесс плавления в цилиндре при постоянной температуре стенки описывается системой уравнений, в которую входят уравнение теплопроводности и граничные условия, в том числе на подвижной границе фаз, с учетом фазового перехода.

Решение такой задачи известно [19] и может быть представлено в виде зависимости координаты фронта плавления от времени:

$$\frac{\eta^2}{2} \ln \frac{R}{\eta} - \frac{1}{4} (R^2 - \eta^2) = \frac{-\lambda(T_w - T_m)}{\rho L} t.$$

Здесь λ — коэффициент теплопроводности; ρ — плотность (считается, что она не меняется при фазовом переходе); L — скрытая теплота плавления; η — расстояние от оси цилиндра до фронта плавления; R — радиус цилиндра.

Время полного плавления цилиндра будет равно

$$t_m = \frac{\rho L R^2}{4\lambda(T_w - T_m)}. \quad (5)$$

Зависимость координаты фронта плавления от времени была найдена численно решением уравнения (5) методом Ньютона. На рис. 1 представлено сравнение аналитического решения и расчетных значений. Проведено три численных эксперимента с различными параметрами, так что в соответствии с формулой (5) время полного плавления должно было составить 250, 500 и 1000 с. Результаты расчетов представлены на рисунке тремя соответствующими наборами точек.

Расхождение в самом конце процесса плавления обусловлено дискретизацией расчетной области. Скорость движения фронта плавления зависит от соотношения площади оставшейся твердой части к ее объему. Но в результате разбиения расчетной области на конечные объемы

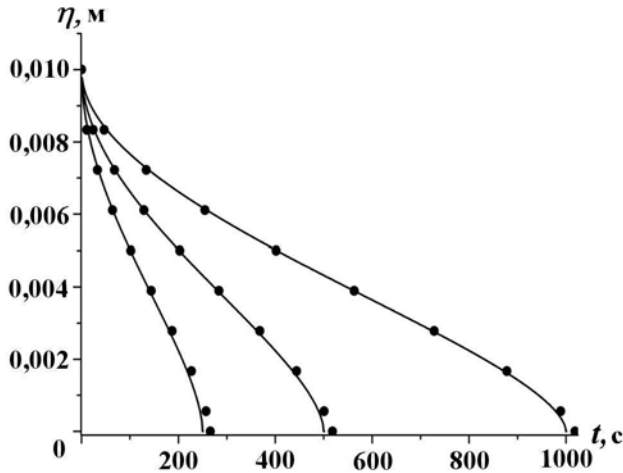


Рис. 1. Координаты фронта плавления в зависимости от времени: • — расчет; — — аналитическое решение

это соотношение меняется скачком при переходе фронта плавления из одной расчетной ячейки в другую, что приводит к накоплению численной ошибки, которая становится наиболее заметной, когда объем и площадь стремятся к нулю.

Для проверки разработанной модели стекания было проведено моделирование перемещения расплава стальной оболочки по одномерному стержню под действием гравитационных сил и сил трения со стороны газового потока. При моделировании предполагалось, что расплав не обменивается энергией ни со стержнем, ни с газовым потоком.

В численном эксперименте рассматривались два сценария. В первом сценарии конечная масса расплава, находящаяся на одном из концов горизонтального стержня, перемещается под действием сил трения со стороны газового потока. Во втором сценарии расплав находится на верхнем конце вертикального стержня и стекает под действием силы тяжести.

Стационарная скорость пленки при воздействии на нее силы трения со стороны газового потока [16] имеет вид

$$v_m = \frac{\tau_i \delta_m}{2\mu_m}.$$

В таком случае расстояние, на которое переместилась граница расплава [16], равно

$$x_n = \left(\frac{2A\tau_i t}{\mu_m} \right)^{1/2}.$$

Здесь A — площадь поперечного сечения пленки:

$$A = \int_0^{x_n} \delta_m(x, t) dx = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{\mu_m x^3}{\rho_m g t}}.$$

Стационарная скорость течения пленки при воздействии на нее только гравитационных сил имеет вид [16]

$$v_m = -\frac{\rho_m g \delta_m^2 \sin \theta}{3\mu_m},$$

где θ — угол наклона стержня к горизонту. В таком случае расстояние, на которое переместилась граница расплава, равно

$$x_n = \left(\frac{9A^2 \rho_m g t}{4\mu_m} \right)^{1/3}.$$

На рис. 2 представлено сравнение результатов численного расчета положения границы расплава и его аналитического решения. Расчеты выполнены для двух сценариев — перемещения под действием силы трения со стороны газового потока и стекания под действием гравитации. Видно хорошее согласие результатов расчетов с использованием кода СОКРАТ-БН и аналитического решения.

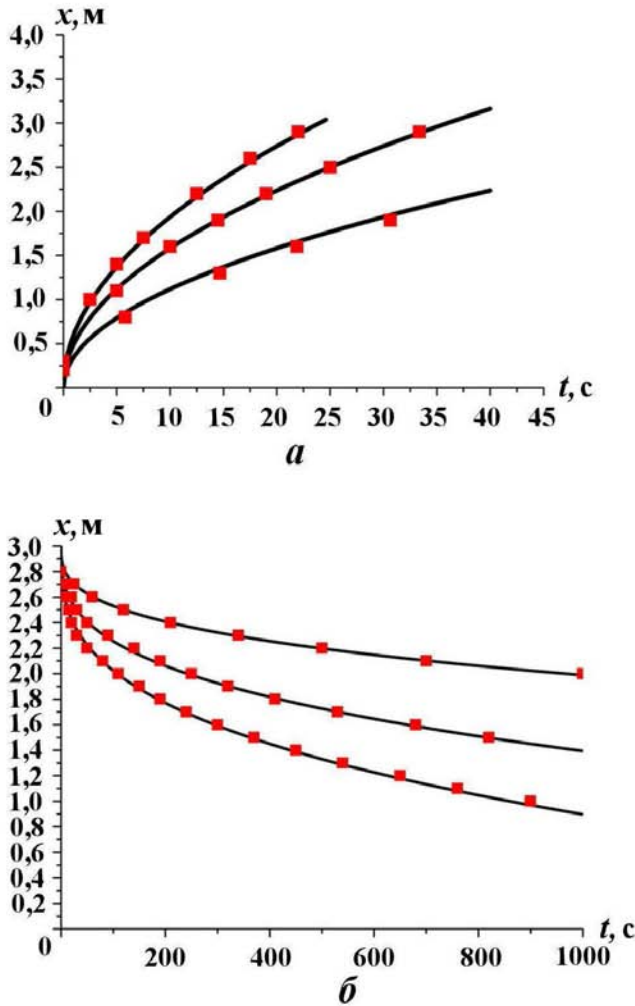


Рис. 2. Положение границы пленки в различные моменты времени: *a* — при воздействии газовым потоком; *б* — при стекании под действием гравитации; — — аналитическое решение; ■ — расчет

Для верификации модели плавления и стекания оболочки было проведено моделирование эксперимента, выполненного в Аргонской национальной лаборатории на 7-стержневой сборке с натриевым теплоносителем [20].

Эксперимент выполнен в рамках R-серии на петле реактора TREAT. Петля включала в се-

бя напорную камеру, участок входного дросселирования, пучок из семи твэлов типа FFTF и специальный резервуар, имитирующий верхнюю камеру реактора со свободным уровнем натрия и газовой подушкой над ним. Петля имела U-образную форму и представляла собой разомкнутую систему. Вход был подключен к питательному баку высокого давления, а выход — к сбросному резервуару с относительно низким давлением. Разность давлений между баками образовывала движущий напор циркуляции. Имитация условий аварии ULOF осуществлялась посредством сброса давления в газовой подушке питательного бака.

На рис. 3 представлено сравнение результатов расчетов границ расплава с использованием кодов СОКРАТ-БН и SAS3A.

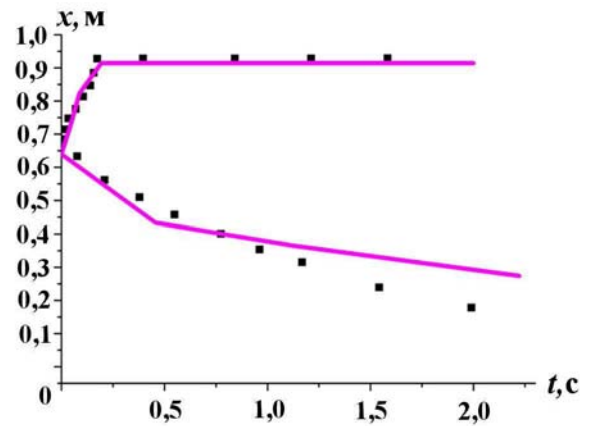


Рис. 3. Границы расплавленной оболочки в эксперименте R-4 в зависимости от времени после начала плавления: — СОКРАТ-БН; ■ — SAS3A

Заключение

Разработана и внедрена модель, позволяющая описывать плавление и перемещение расплавленных оболочек твэлов реакторов типа БН. Тестирование модели проведено на задачах, имеющих аналитическое решение, с использованием кода SAS3A выполнена кросс-верификация на эксперименте серии R реактора TREAT.

Представленная модель может быть применена только к начальной стадии аварии, когда расплавлены только несколько твэлов и можно пренебречь эффектом реактивности, связанным с разрушением твэлов.

Список литературы

1. Палагин А. В. Физическая модель перемещения расплавленных материалов на начальном этапе разрушения активной зоны АЭС // Известия АН. Энергетика. 2002. № 4. С. 93—100.
2. Adroguer B., Bourdon S., Gonzalez R. Analysis of Fuel-Cladding Interaction in PHEBUS SFD Tests Using the ICARE2 Code. IAEA-TECDOC-706, 1993.
3. Allison C. M., Hohorst J. K. An assessment of RELAP/SCDAPSIM/MOD3.2 using bundle heating and melting experiments with irradiated fuel // 11th Int. Conf. on Nuclear Engineering (ICONE-11). Tokyo, Japan. April 20—23, 2003.
4. Mladin M., Dupleac D., Prisecaru I. SCDAP/RELAP5 application to CANDU6 fuel channel analysis under postulated LLOCA/LOECC conditions // Nucl. Eng. and Design. 2009. Т. 239, No 2. P. 353—364.
5. Кудашов И. Г., Лежнин С. И., Семёнов В. Н. и др. Моделирование процессов кипения натрия в одномерном двухжидкостном приближении кодом СОКРАТ-БН // Атомная энергия. 2011. Т. 111. Вып. 3. С. 137—139.
6. Tentner A. M., Miles K. J., Kalimullah et al. Fuel Relocation Modeling in the SAS4A Accident Analysis Code System. Argonne National Laboratory Reactor Analysis and Safety Division, 1986.
7. Yamano H., Fujita S., Tobita Y. et al. SIMMER-III: A Computer Program for LMFR Core Disruptive Accident Analysis. Japan Nuclear Cycle Development Institute. JNC TN9400 2003-071, 2003.
8. Ашурко Ю. М., Волков А. В., Раскач К. Ф. Разработка программных модулей для расчета запроектных аварий в быстрых реакторах с учетом пространственно-временной кинетики // Атомная энергия. 2013. Т. 114, № 2. С. 63—67.
9. Ingham D. V., Por I. Transport Phenomena in Porous Media. Oxford, Pergamon, 2002.
10. Нигматуллин Р. И. Динамика многофазных сред. Ч. 1. М.: Физматлит, 1987.
11. Dickerman C. E., Rothman A. B., Klickman A. E. et al. Summary of TREAT Experiments on Oxide Core-Disruptive Accidents. ANL-79-13. Argonne National Laboratory, Reactor Analysis and Safety Division, 1979.
12. Wright S. A., Schumacher G., Henkel P. R. Investigation of fuel and clad relocation during LMFBR initiation phase accidents: the STAR experiment program-1 // Int. Topical Mtg. on Fast Reactor Safety. Knoxville, Tennessee. April 21—25, 1985.
13. ANL/NE-12/4. Chapter 13: Cladding Motion Model CLAP: The SAS4A/SASSYS-1 Safety Analysis Code System. Nuclear Engineering Division, Argonne National Laboratory, 2012.
14. Ishii M., Chen W. L., Grolmes M. A. Molten clad motion model for fast reactor loss-of-flow accidents // Nuc. Sci. and Eng. 1976. Vol. 60. P. 435—451.
15. Власичев Г. Н. Расчетная модель расплавления твэла с учетом перемещения расплавленной оболочки в активной зоне реактора БН при запроектной аварии // Известия вузов. Ядерная энергетика. 2001. № 3. С. 21—32.
16. Kataoka D. E., Troian S. M. A Theoretical Study of instabilities at the advancing front of thermally driven coating films // J. Colloid and Interface Science. 1997. Vol. 192. P. 350—362.
17. Уоллис Г. Одномерные двухфазные течения. М.: Мир, 1972.
18. Alexiades V., Solomon A. D. Mathematical Modeling of Melting and Freezing Processes. Washington: Hemisphere Publishing Corporation, 1993.
19. Лыков А. В. Теория теплопроводности. М.: Высшая школа, 1967.
20. Dickerman E. Status and summary of TREAT in-pile experiments on LMFBR response to hypothetical core disruptive accidents // ASME Symp. on Thermal and Hydraulic Aspects of Nuclear Reactor Safety. Atlanta, Georgia, 1977.

Статья поступила в редакцию 16.01.15.

SIMULATION OF THE FUEL ELEMENT CLADDING MELTING AND THE MELT TRANSPORT IN A FUEL ASSEMBLY OF THE "BN"-TYPE REACTOR USING THE "SOKRAT-BN" CODE / I. S. Vozhakov, E. V. Usov, V. S. Zhdanov, M. E. Kuznetsova, A. E. Kiselev, R. V. Chalyi (Novosibirsk Branch of the RAS IBRAE; the RAS IBRAE, Moscow).

A model describing the processes of melting and transporting a fuel element cladding inside a fuel assembly of fast reactor with a sodium coolant is presented. The model is based on the assumption of the film-type behavior of a flowing molten cladding of fuel element. The initial verification of the developed model has been performed using problems having analytical solutions, as well as the cross-verification on the results of the series R experiment in TREAT reactor.

Keywords: fast reactor, fuel element, cladding, melting, simulation, SOKRAT-BN.

УДК 519.245

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАДИАЦИОННО-ИНДУЦИРОВАННОГО НАКОПЛЕНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В ГИДРИДЕ ТИТАНА МЕТОДОМ КИНЕТИЧЕСКОГО МОНТЕ-КАРЛО

В. А. Хлебников, А. В. Янилкин
(ВНИИА им. Н. Л. Духова, г. Москва)

Представлены результаты моделирования процессов образования и эволюции дефектов, возникающих в титановых мишенях импульсных нейтронных источников при их эксплуатации. Сопоставляются два подхода: явное описание атомарной диффузии на жесткой решетке и решение системы кинетических уравнений кластерной динамики. В обоих случаях используется метод *кинетического* Монте-Карло. Получены временные зависимости концентраций точечных дефектов и их комплексов, построены распределения по размерам комплексов.

Ключевые слова: радиационная поврежденность, метод кинетического Монте-Карло (kinetic Monte Carlo method), кластерная динамика, программный пакет SPPARKS.

Введение

Гидрид титана используют в качестве мишени, облучаемой ионами дейтерия, с целью получения в результате ядерной реакции потока нейтронов. Моделируется процесс накопления точечных дефектов — междоузлий и вакансий титана — и их комплексов в толще гидрида титана при его облучении с постоянной интенсивностью. С учетом релаксации первичных повреждений скорость образования пары Френкеля на атом принята равной $G = 4 \cdot 10^{-5} \text{ с}^{-1}$. Мишень применяется в диапазоне температур 400—600 К.

Для моделирования многочисленных кинетических задач широко используют метод *кинетического* Монте-Карло (kinetic Monte Carlo method) [1].

Методом Монте-Карло называется алгоритм, моделирующий реализации случайной величины с заданным распределением. В задаче моделирования накопления дефектов таким распределением является список скоростей всевозможных процессов-реакций. На каждой итерации алгоритма случайно выбирается один процесс из списка возможных. Вероятность выбора того или иного процесса пропорциональна его темпу. В методе кинетического Монте-Карло также разыгрывается временной шаг. В среднем он оказывается обратно пропорционален сумме скоростей всех возможных процессов. После того как процесс реализован и конфигурация системы изменена, список обновляется, и по нему вычисляется временной шаг для следующей итерации [2]. Скорости процессов так или иначе являются входными данными.

Разные материаловедческие приложения метода кинетического Монте-Карло, среди которых описание роста зерен в кристаллах, рост и эволюция поверхностей, диффузия в пористых средах, накопление радиационной поврежденности, содержатся в открытом программном пакете SPPARKS [3]. Во многих случаях SPPARKS дает возможность выполнять параллельно многопроцессорные расчеты.

1. Используемые подходы

После необходимых доработок пакет SPPARKS использовался авторами для реализации и сопоставления двух подходов: атомистической кинетики на жесткофиксированной кристаллической решетке (АкМК) и решения кинетических уравнений кластерной динамики (КД).

Подход АкМК. В АкМК конфигурация атомов задается явно на фиксированной кристаллической решетке в конечном объеме. Все расчеты производятся в ячейке с периодическими граничными условиями. Список скоростей процессов — темпов образования дефектов, скоростей их рекомбинации и объединения, вероятностей диффузионных скачков — обновляется на каждом шаге (после каждого события), так как эти скорости могут зависеть от меняющегося локального состава. Вероятность в единицу времени диффузионного перехода атома типа X обычно параметризуют законом Аррениуса

$$\Gamma_X = Z\nu_X \exp\left(-\frac{E_X^a}{kT}\right). \quad (1)$$

Здесь множитель ν_X — характерная частота колебаний атома типа X ; E_X^a — энергия активации для данного перехода. Эти величины могут зависеть от ближайшего окружения. Их значения обычно вычисляют для данного вещества в рамках теории функционала электронной плотности и в молекулярно-динамических расчетах. Множитель Z — количество вариантов осуществления элементарного диффузионного перехода.

АкМК позволяет явно наблюдать эволюцию плотности локального химического состава, рост структур; измерять коэффициенты диффузии отдельных атомов, точечных дефектов и их комплексов в зависимости от состава материала, наличия/отсутствия протяженных стоков и их геометрии; измерять некоторые кинетические коэффициенты; строить распределения комплексов по размерам. В АкМК по сравнению с другими подходами на основе метода Монте-Карло требуется наименьшее количество входных данных; он позволяет различать пространственные распределения компонентов и их комплексов. Однако, поскольку отслеживаются передвижения отдельных атомов, требуется значительно больше вычислительного времени, чем в других кинетических подходах для аналогичных задач.

Стохастическая КД. КД называют химическую кинетику, в которой реагенты различаются не только по составу, но и по размеру. Система уравнений КД описывает эволюцию концентраций однородно распределенных по пространству примесных атомов, дефектов и их комплексов, также называемых кластерами. Изменение концентрации происходит из-за радиационного накопления точечных дефектов со скоростью G (темп образования пар Френкеля) и их взаимодействия с кластерами, обусловленного диффузией по кристаллической решетке.

В выполненных авторами расчетах два вида кластеров — вакансионные поры (v) и объемные кластеры из междоузлий (i) — участвовали в диффузионно-обусловленных реакциях взаимной рекомбинации кластеров разного вида (rec) и объединении кластеров одного вида ($clus$). Также кластеры могли распадаться на соответствующего вида точечный дефект и кластер размером на один точечный дефект меньше ($diss$). Авторским нововведением стал учет бездиффузионного слияния и рекомбинации дефектов, образующихся в непосредственной близости от уже имеющихся, уменьшение со временем доли объема, свободного от кластеров. Используемая в расчетах система уравнений КД выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{dC_1^i}{dt} &= \left\{ G^i \left(1 - \sum_n (\alpha_n + n) C_n^i - \sum_m \beta_m C_m^v \right) - G^i \alpha_1 C_1^i - G^v \beta_1 C_1^i + G^v \beta_2 C_2^i \right\} + \\ &+ \sum_n k_{n+1,n}^{rec} C_{n+1}^i C_n^v + k_2^{diss} C_2^i + \sum_n k_{n+1}^{diss} C_{n+1}^i - \\ &- \sum_n k_{1,n}^{rec} C_1^i C_n^v - k_{1,1}^{clus} C_1^i C_1^i - \sum_n k_{1,n}^{clus} C_1^i C_n^i; \quad (2) \\ \frac{dC_m^i}{dt} &= \left\{ G^i \alpha_{m-1} C_{m-1}^i + G^v \beta_{m+1} C_{m+1}^i - G^i \alpha_m C_m^i - G^v \beta_m C_m^i \right\} + \sum_n k_{m+n,n}^{rec} C_{m+n}^i C_n^v + \\ &+ \sum_{n < m} k_{m-n,n}^{clus} C_{m-n}^i C_n^i + k_{m+1}^{diss} C_{m+1}^i - \sum_n k_{m,n}^{rec} C_m^i C_n^v - \sum_n k_{m,n}^{clus} C_m^i C_n^i - k_m^{diss} C_m^i. \end{aligned}$$

Полная система содержит также уравнения, получающиеся из (2) заменой i на v . Суммирование ведется по размерам кластеров, начиная с единичного (размер кластера — количество атомов в нем).

Для кинетических коэффициентов $k_{m,n}$ используют теоретические выражения, такие, что переменные в выражениях допускают рекуррентное по размеру n описание. Так, константы скоростей реакций рекомбинации и объединения взяты в форме стационарной части кинетического коэффициента из задачи Смолуховского. Например, скорость реакции рекомбинации межузельного кластера размером в m атомов и вакансионной поры размером n вакансий равна

$$k_{m,n}^{rec} = 4\pi R_{m,n}^{i,v} (D_m^i + D_n^v), \quad (3)$$

где $R_{m,n}^{i,v} = R_m^i + R_n^v + d^{rec}$ — радиус сферы (например, в единицах постоянной решетки), внутри которой мгновенно происходит реакция между блуждающими с коэффициентами диффузии $D_m^{i(v)}$ компонентами [4]. При этом R_m — геометрический радиус кластера, а d^{rec} — модельно зависимое расстояние со значением порядка постоянной решетки.

Для описания процесса кластеризации дефектов применяется модель связей (см. разд. 2), в которой энергия кластера оказывается пропорциональна площади его поверхности. Поэтому крупные кластеры естественно считать шарообразными, так как их энергия минимальна, и для радиуса использовать выражение $R_n = (3n\Omega/4\pi)^{1/3}$, в котором Ω — характеристика кристаллической решетки — объем, приходящийся на один атом. Отметим также, что в АкМК рекомбинация кластеров может ограничиться уменьшением размеров на единицу и дальнейшим диффузионным расхождением кластеров; в то же время в КД при рекомбинации кластер меньшего размера полностью исчезает.

Скорость реакций диссоциации можно параметризовать выражением вида

$$k_n^{diss} = N_n \Gamma_X \exp\left(-\frac{E_n^b}{kT}\right). \quad (4)$$

Здесь N_n — геометрический и комбинаторный фактор, учитывающий количество позиций, из которых может произойти отрыв мономера (при больших n пропорционален площади кластера $4\pi R_n^2/\Pi$, где Π — площадь, приходящаяся на один атом). В (4) вероятность диффузионного отрыва Γ_X мономера подавлена экспоненциальным фактором, в котором E_n^b — энергия связи отрывающегося мономера с кластером. В гидриде титана энергии связи в кластерах размером больше четырех оказываются настолько велики, что реакциями диссоциации больших кластеров можно пренебречь. Скорости распада малых кластеров приведены в разд. 2.

Наконец, слагаемые в фигурных скобках (2) описывают накопление дефектов в отсутствие диффузии. Коэффициент α_n — это количество ближайших положений на кристаллической решетке вокруг кластера размером n . Так, $G\alpha_n C_n$ есть вероятность того, что снова образовавшийся точечный дефект появился в доле объема $\alpha_n C_n$. Другими словами, $G\alpha_n C_n$ — это скорость образования кластера размером $n+1$ за счет случайного образования элементарного дефекта по соседству с кластером размером n . Число β_n — это количество положений на кристаллической решетке, из которых мгновенно произойдет рекомбинация точечного дефекта с кластером противоположного вида размером n . Скорость такой рекомбинации равна $\sum_n G\beta_n C_n$. Множитель в круглых скобках первого уравнения системы (2) описывает уменьшение скорости образования отдельностоящих мономеров.

Убедиться в самосогласованности этой части системы (2) можно следующим образом. Доля объема, занятого дефектами одного вида: $\sum_n n C_n = C$. Пусть имеется только один вид дефектов. Тогда

$\beta_n = 0$ и легко убедиться, что C удовлетворяет уравнению $\frac{dC}{dt} = G(1 - C)$. Таким образом, слагаемые в фигурных скобках, действительно, описывают бездиффузионное заполнение кристаллической решетки дефектами с учетом уменьшения доли объема, в котором может происходить образование элементарных дефектов. В интересующем диапазоне температур эффект от учета таких слагаемых невелик, однако уже при температуре $T = 300$ К различие с чисто диффузионно-обусловленной кинетикой становится заметным (рис. 1¹, 2, см. также цветную вкладку).

¹В экспериментах по облучению материалов продолжительность процессов принято выражать величиной *смещение на атом* (сна), или, что то же самое, дозой. В рассматриваемом случае доза связана со временем соотношением $Dose = Gt$.

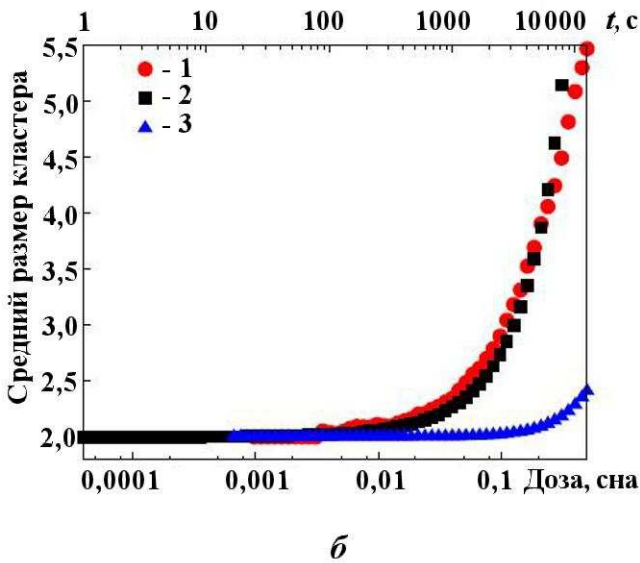
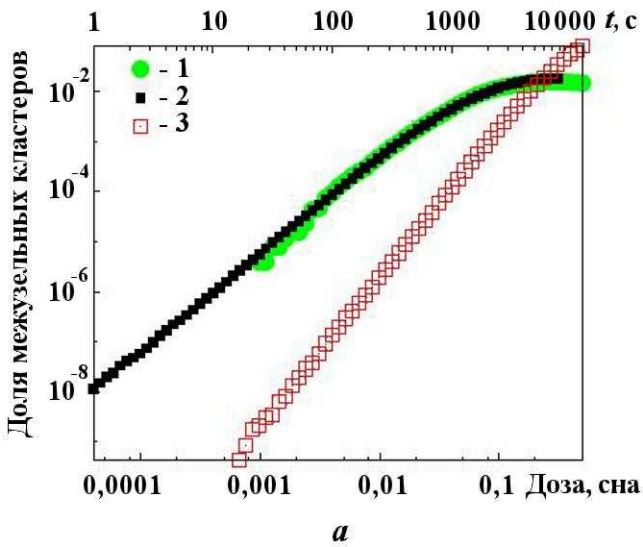


Рис. 1. Иллюстрация эффекта от учета слагаемых в фигурных скобках из полной системы (2) при расчете концентрации межузельных кластеров (а) и роста размера кластеров (б), $T = 300$ К: 1 — расчет АкМК; 2 — расчет КД с учетом слагаемых; 3 — расчет КД без учета слагаемых

Стохастический подход к решению систем уравнений химической кинетики [5] заключается в замене непрерывных функций концентрации C_X дискретными значениями N_X/V (N_X — количество реагентов типа X ; V — конечный объем). Выбор реакции осуществляется методом Монте-Карло с весом, пропорциональным темпу реакции и концентрации реагента. Для вычисления слагаемых в фигурных скобках системы (2) требуется введение дополнительных фиктивных компонентов gh . Например, уменьшение темпа образования отдельных межузельных за счет уменьшения свободного от кластеров объема достигается при помощи цепочки реакций: $C_n^i \rightarrow C_n^i + gh$; $C_1^i + gh \rightarrow C_1^i$. Первая протекает с темпом Gn , темп второй реакции нужно брать по возможности большим.

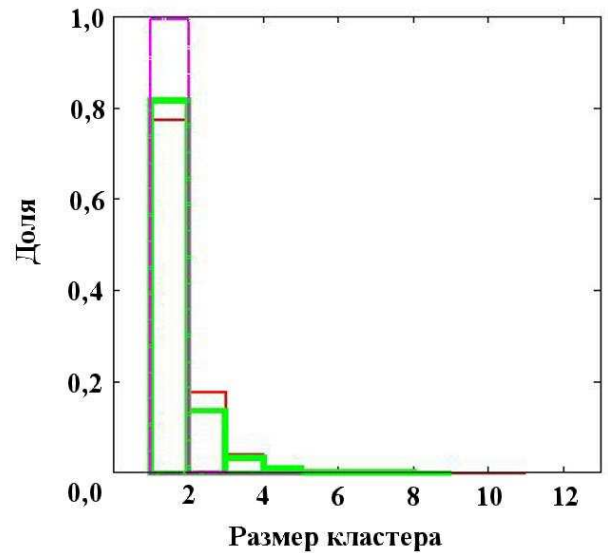


Рис. 2. Иллюстрация эффекта от учета слагаемых в фигурных скобках из полной системы (2) при расчете распределения по размерам кластеров, $T = 300$ К, $t = 1000$ с: \square — расчет АкМК; \square — расчет КД с учетом слагаемых; \square — расчет КД без учета слагаемых

2. Модель гидрида титана

Модель гидрида титана строится на представлениях, полученных в [6] методом функционала электронной плотности и в молекулярно-динамических расчетах для соединения TiH_x с содержанием водорода $1,75 \leq x \leq 2$. Для описания накопления дефектов в подрешетке титана от самого гидрида взят тип подрешетки титана и ее период, а также энергии миграции и скорости образования дефектов, энергии их связи. Специально разработанный для этих задач потенциал [6] воспроизводит в диапазоне температур 300–600 К стабильную гранецентрированную кубическую (ГЦК) решетку, занимаемую атомами титана (основная решетка) (рис. 3), с периодом $a = 4,4 \text{ \AA}$ (для сравнения см., например, справочник [7]). Координационное число (количество ближайших соседей) в такой ре-

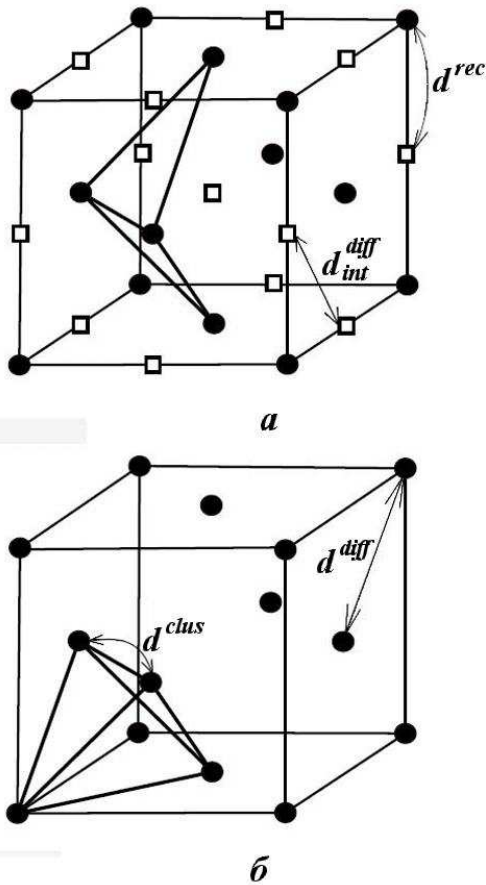


Рис. 3. Схемы положений ГЦК решетки (•) и ее октаэдрических междузельных положений (□): а — с формой подвижного комплекса из четырех атомов; б — с формой неподвижного комплекса в виде тетраэдра

Для отрыва точечного дефекта от комплекса требуется дополнительно преодолеть разность энергий системы E_f и E_i — после и до скачка. Так в модели связей объясняется склонность дефектов к объединению. Для энергии активации использовалось выражение

$$E_a = E_0^a + \lambda(E_f - E_i), \quad (5)$$

где E_0^a — барьер миграции при неизменной энергии системы; λ — положительный множитель. Второе слагаемое в (5) позволяет регулировать эффективное притяжение дефектов друг к другу из положения вторых ближайших соседей за счет уменьшения барьера реакции по слиянию в сравнении с диффузионным барьером миграции E_0^a . При этом с точки зрения кинетики меняется радиус реакции (точнее, меняется величина d , входящая в коэффициент R из формулы (3)). В авторских расчетах, выполненных с использованием АкМК, брались значения $\lambda = 1$ для реакций распадов (отделения мономера от комплекса) и $\lambda = 0$ во всех остальных случаях. Так что реакции слияния и рекомбинации происходят при максимальном сближении дефектов (см. рис. 3): $d^{diff} = d^{clus} = a/\sqrt{2}$ — расстояние между ближайшими соседями в ГЦК решетке; $d^{rec} = a/2$ — наименьшее расстояние между положениями основной решетки и октаэдрическими положениями (3).

²Скорость образования пары Френкеля на атом G вычислялась в молекулярно-динамических расчетах по известным спектрам первично выбитых атомов и дана с учетом релаксации первичных повреждений.

шетке $Z_{coord} = 12$; объем, приходящийся на атом, равен $\Omega = a^3/4$. С темпом $G = 4 \cdot 10^{-5} \text{ c}^{-1}$ случайно выбранные атомы титана заменяются вакансиями. С тем же темпом G атомы титана занимают междузельные положения, образующие октаэдрическую подрешетку² (см. рис. 3). Свободные от титана октаэдрические положения считаются занятыми вакансиями. Барьеры миграции дефектов вычислялись в рамках теории функционала электронной плотности методом упругой ленты [6] при нулевой температуре. Энергия миграции вакансии по положениям основной решетки $E_0^a = 2 \text{ эВ}$; энергия миграции междуузлия $E_0^b = 1 \text{ эВ}$. Собственная частота из (1) принята одинаковой для обоих типов дефектов: $\nu = 0,4 \cdot 10^{12} \text{ c}^{-1}$. Энергия когезии, приходящаяся на атом, $E_{coh} = 4,85 \text{ эВ}$ [6].

В подходе АкМК удобно использовать модель связей. В этой модели паре узлов решетки ставится в соответствие энергия, значение которой зависит от типа атомов (дефектов), расположенных в данных узлах, и от расстояния между ними. В простейшем случае, когда имеется всего один тип атомов и учитываются связи только между ближайшими соседями, энергия образования вакансии как энергия, необходимая для переноса атома на поверхность, совпадает с энергией когезии на атом [8]. Авторы приняли, что каждое соседство титана с вакансией добавляет $0,4042 \text{ эВ}$ к энергии системы. При этом энергия системы с одной вакансией в ГЦК подрешетке оказывается равной $12 \cdot 0,4042 = 4,8504 \text{ эВ}$ (то же для одного междуузлия) и совпадает по значению с энергией когезии. Энергия дивакансии (димеждуузлия) $E_2 = 2 \cdot 11 \cdot 0,4042 = 8,924 \text{ эВ}$, что меньше энергии двух отдельностей вакансий (междуузлий) $2E_1 = 2 \cdot 12 \times 0,4042 = 9,7008 \text{ эВ}$ на значение энергии связи дивакансии (димеждуузлия) $E_2^b = 2E_1 - E_2 = 0,8084 \text{ эВ}$. Близкое значение энергии связи димеждуузлия $E_2^b = 0,82 \text{ эВ}$, полученное методом функционала электронной плотности, свидетельствует о правильности используемой модели связей.

В КД геометрические размеры кластеров определялись с использованием представления об их сферичности: $R_n = a(3n/16\pi)^{1/3}$ при $n > 1$ и $R_1 = 0$. Например, радиус реакции осаждения одиночного междоузлия на кластер размером n принимался равным $R_{n,1}^{i,i} = a(3n/16\pi)^{1/3} + a/\sqrt{2}$. Радиусы реакций могут быть рассчитаны с использованием подхода АкМК. Для этого создается равномерное распределение атомов в объеме V . Их концентрация C меняется за счет диффузионного стока на абсолютно поглощающий кластер, размер которого n остается постоянным. Ситуация моделируется уравнением $\frac{dC}{dt} = -4\pi \left(R_n + \frac{a}{\sqrt{2}} \right) \frac{DC_s C}{\Omega} \equiv \frac{1}{\gamma} R_{n,1}^{i,i} C$ с начальным условием $C(t=0) = C_0$, совпадающим с (2) в части описания реакций второго порядка. В этом уравнении D — коэффициент диффузии, $C_s = 1/(4V)$ — концентрация стоков, объем измеряется в единицах объема элементарной ячейки 4Ω (аналогичным способом радиус реакции вычислялся методом молекулярной динамики в работах [9, 10]).

На рис. 4 изображено изменение со временем логарифма обратной концентрации атомов, стекающих на кластер размером 5, полученное с использованием подхода АкМК. Координаты выбраны таким образом, что угол наклона имеет значение $R_{5,1}^{i,i}$ в единицах постоянной решетки a . Результаты расчетов радиусов реакций кластеризации одиночных междоузлий на кластерах малого размера приведены на рис. 5 совместно с линией $R_{n,1}^{i,i} = a(3n/16\pi)^{1/3} + a/\sqrt{2}$, значения которой использовались в КД. Завышение скоростей реакции при использовании представления о сферичности кластеров приводит к систематическому ускорению кинетики в подходе КД по сравнению с АкМК. Сильнее всего это проявляется на начальных этапах расчета, когда велика доля кластеров малого размера, для которых максимальна несферичность.

Отдельное исследование показало, что кинетика дефектов на решетке в действительности отличается от кинетики реакций второго порядка: константы скоростей реакций $k_{m,n}$ зависят от концентраций реагентов. Поскольку подтверждается линейная зависимость констант скоростей реакций от коэффициентов диффузии компонентов, будем по-прежнему выделять множитель 4π , но теперь вести речь об эффективном радиусе реакций R_n^{eff} (3). Радиус реакции возрастает при увеличении концентрации стоков C_n (рис. 6, а) или, что то же самое, уменьшении среднего расстояния между ними (рис. 6, б). На рис. 6 приведены результаты расчета радиуса реакции при стоке атомов на кластер, занимающий положения на решетке внутри сферы радиусом a . Такой кластер состоит из 19 атомов и имеет в действительности форму октаэдра, поэтому предельное значение R_{19} (при малых концентрациях) оказывается меньше, чем должно быть для сферического кластера. Игнори-

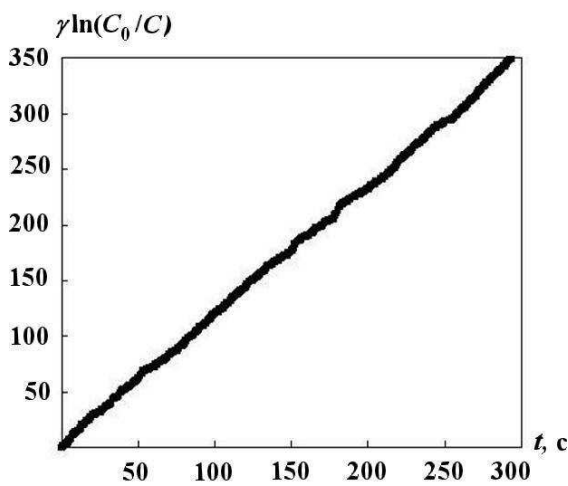


Рис. 4. Расчет радиуса $R_{5,1}^{i,i}$ реакции с использованием подхода АкМК по тангенсу угла наклона линии логарифма обратной концентрации междоузлий в зависимости от времени, $C_s = 1,6 \cdot 10^{-5}$

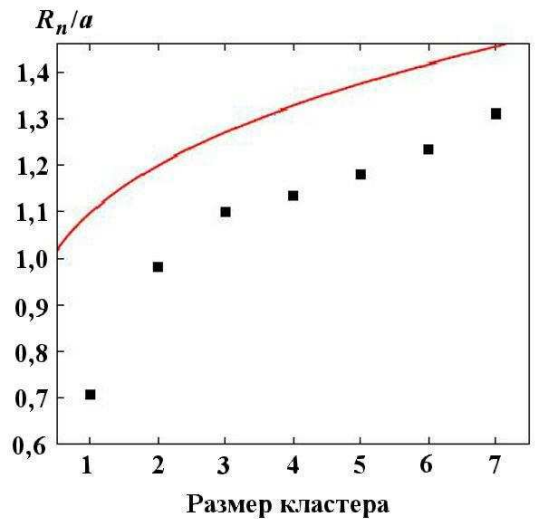


Рис. 5. Сравнение радиусов реакций кластеризации, рассчитанных с использованием АкМК, с вычисленными по формуле $R_{n,1}^{i,i} = a(3n/16\pi)^{1/3} + a/\sqrt{2}$, $C_s = 1,6 \cdot 10^{-5}$: ■ — АкМК; — — КД

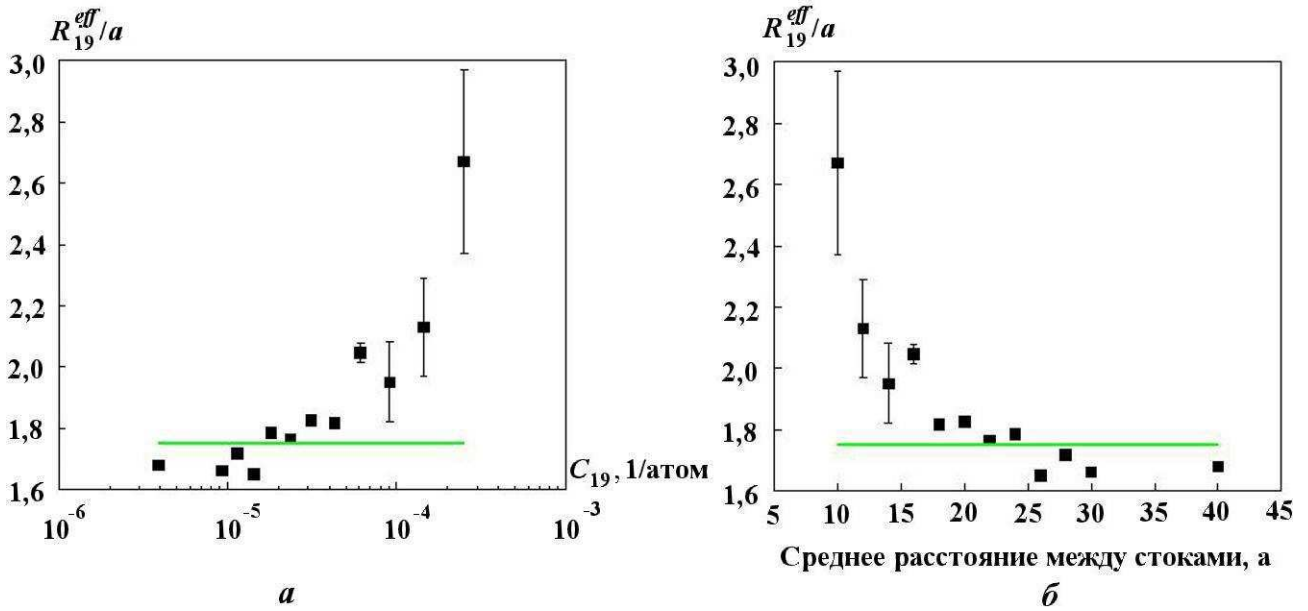


Рис. 6. Зависимости константы скорости реакции (эффективного радиуса в единицах постоянной решетки) при осаждении одиночных междуузлий на кластеры размером 19: *a* — от концентрации стоков; *б* — от среднего расстояния между стоками; ■ — АкМК; — — $R_{19}^{eff} = 1,75a$ (принято в КД в предположении сферичности стока); | — максимальные отклонения от среднего значения в серии расчетов

рование в КД того факта, что скорости реакций растут вместе с концентрациями стоков, приводит к замедлению кинетики в КД по сравнению с АкМК.

Коэффициент диффузии дефекта по трехмерной решетке равен

$$D_X = \frac{d^2 \Gamma_X}{6} \quad (6)$$

при длине d элементарного перехода и частоте переходов Γ_X (1). Для точечного дефекта количество вариантов совершить такой переход $Z = Z_{coord} = 12$ и $d = d^{diff} = a/\sqrt{2}$, так что коэффициент диффузии междуузлия (вакансии) $D_1^{i(v)} = a^2 \nu \exp\left(-\frac{E_0^{ai(v)}}{kT}\right)$. Легко видеть, что димеждуузлия

(дивакансии) также являются подвижными дефектами. Для них $Z = 2 \cdot 4 = 8$; $d^2 = a^2/8$. Поэтому $D_2^{i(v)} = D_1^{i(v)}/6$. Результаты расчетов по АкМК показывают, что кластеры размером в три элементарных дефекта в основном пребывают в форме треугольника (каждый дефект соседствует с двумя другими), центр масс которого не покидает пределов тетраэдра, изображенного на рис. 3, б. Моделирование с использованием АкМК также показало, что в 9/10 случаев кластер из четырех дефектов собирается в форму типа сдвоенных треугольников (см. рис. 3, а) и в остальных случаях — в форму с меньшей энергией в виде тетраэдра. Часто встречающаяся форма оказывается к тому же подвижной с коэффициентом диффузии, который близок к значению $d_4^{i(v)} = D_1^{i(v)}/(3 \cdot 16)$, где D_1 — коэффициент диффузии междуузлий в гидриде титана при температуре 600 К (рис. 7). Подвижность указанных кластеров есть следствие используемой в подходе АкМК модели, в частности, числовые множители в выражениях для $D_2^{i(v)}$ и $d_4^{i(v)}$ свойственны именно ГЦК решетке. В качестве коэффициента диффузии кластеров размером 4 в КД использовалось значение $D_4^{i(v)} = (9/10)D_1^{i(v)}/48$. Других подвижных кластеров не выявлено.

В рамках модели связей можно оценить скорости реакций диссоциации. Для разрыва димера один из двух дефектов, колеблющихся с частотой ν , должен тепловым образом преодолеть барьер $E_0^a + E_2^b$, причем есть 7 вариантов разрыва (см. рис. 3). Таким образом скорость диссоциации

димера $k_2^{diss} = 2 \cdot 7\nu \exp\left(-\frac{E_0^a + E_2^b}{kT}\right)$, что с точностью 10% совпадает с результатом расчета числа распадов димера в единицу времени в АкМК. Треугольный кластер может распаться, либо сразу разорвав двойную связь, либо в два этапа: с образованием разомкнутой цепочки и ее дальнейшим разрывом. Оба варианта характеризуются темпом k_3^{diss} порядка $A\nu \exp\left(-\frac{E_0^a + 2E_2^b}{kT}\right)$ с префактором $A \simeq 100$. В силу особенности строения кластера размером 4 для его разрыва требуется также преодолеть барьер в $E_0^a + 2E_2^b$, однако с чуть меньшим префактором. Для диссоциации любого большего кластера в компактной конфигурации требуется разорвать по крайней мере три связи (если мономер отрывается от угла), а чаще четыре (отрыв от плоской границы), что соответствует преодолению энергетических барьеров $E_0^a + 3E_2^b$ и $E_0^a + 4E_2^b$ соответственно и делает темп такой реакции в гидриде титана исчезающе малым.

Коэффициенты α_n и β_n в (2) также могут быть легко получены в рамках АкМК на решетке. Для кластеров размером $n \geq 6$ использовались рекуррентные соотношения $\alpha_n = 33 + 4(n - 6)$; $\beta_n = 20 + 3(n - 6)$.

3. Результаты

При описании радиационной поврежденности изменение механических свойств испытуемых материалов связывают с накоплением точечных дефектов и их комплексов. Метод просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) позволяет получить представление о концентрациях и характерных размерах дефектов, образующихся в толще материала при его облучении. Поэтому модели поврежденности должны воспроизводить и предсказывать распределения по размерам образующихся дефектов. В приведенных ниже расчетах поврежденности при разных температурах в КД изменялся только коэффициент диффузии.

$T = 600$ К. При использовании подхода АкМК расчеты производились в ячейке размером $100a \times 100a \times 100a$ (4 000 000 узлов основной решетки). При температуре 600 К частота диффузионных переходов (1) междоузлий $\Gamma^i = 20\,000 \text{ с}^{-1}$ значительно превышает скорость образования дефектов G , поэтому слагаемые в фигурных скобках (2) вносят малый вклад в кинетику междоузлий. Отдельные междоузлия быстро находят стоки.

На рис. 8, а (см. также цветную вкладку) линия C_2^* описывает выход на стационарное значение концентрации междоузлий по реакции их взаимного объединения. Стационарное значение $C_1^{i*} = \sqrt{G/k_{1,1}^{clus}}$ достигается за время $t = C_1^{i*}/G \sim 0,5 \text{ с}$. Чуть позже ($t = \sqrt{1/Gk_{1,1}^{rec}} \sim 0,8 \text{ с}$) закон накопления вакансий начинает отличаться от линейного (линия Gt на рис. 8, а), что свидетельствует о начале рекомбинации. Дальнейшее снижение концентрации одиночных междоузлий связано с их рекомбинацией на вакансиях, а также с осаждением на кластерах растущего размера. Когда число одиночных междоузлий становится меньше количества кластеров, рост концентрации последних сильно замедляется (рис. 8, б, см. также цветную вкладку), при этом, кластеры продолжают увеличиваться в размерах. Начальный закон увеличения концентрации кластеров, связанный с диффузионным объединением отдельных междоузлий, имеет вид $\propto t^3$ (линия C_c на рис. 8, б). Закон накопления вакансионных пор определяется исключительно слагаемыми в фигурных скобках (2),

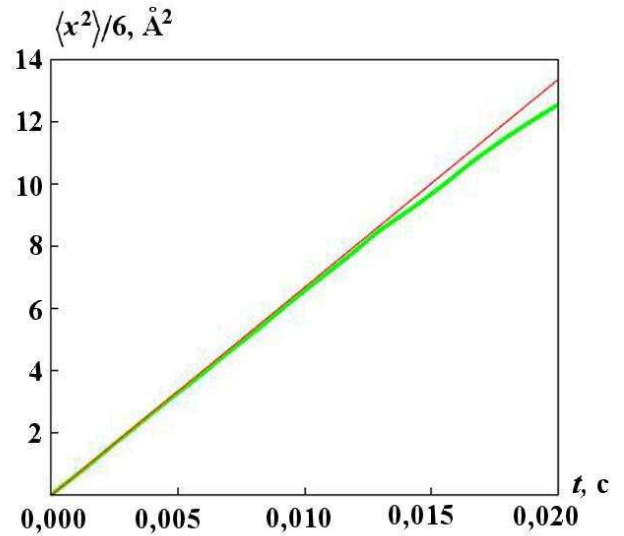


Рис. 7. Рассчитанные в рамках АкМК $1/6$ среднеквадратичного отклонения подвижного кластера размером 4 (—) и прямая с углом наклона $D_1/(6 \times 32)$ (—)

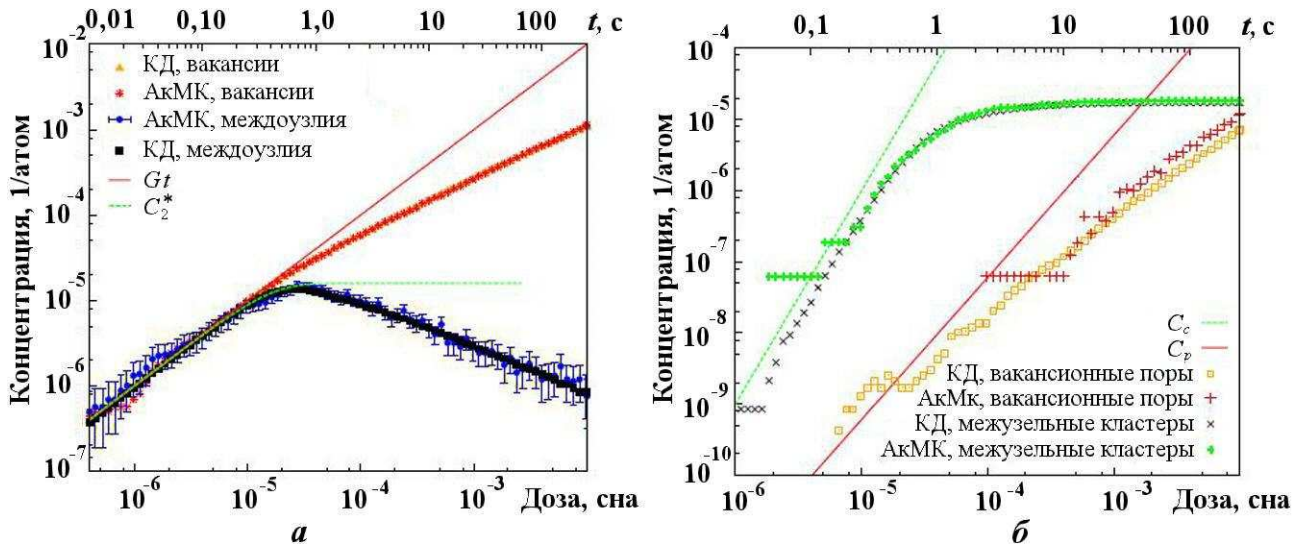


Рис. 8. Эволюция концентраций точечных дефектов (а) и их комплексов (б) в гидриде титана при температуре $T = 600$ К и скорости набора дозы $G = 4 \cdot 10^{-5}$ сна/с

так как диффузия вакансий пренебрежимо мала. Этот закон также имеет степенной характер, но с меньшим показателем: $\propto t^2$ (линия C_p на рис. 8, б). Отклонение от квадратичного закона накопления связано с активной рекомбинацией междоузлий на порах — ко времени окончания решения уравнений КД в системе не образуется ни одной поры размером больше 3 вакансий (при температуре $T = 400$ К и той же дозе успевают образоваться поры размером в 6 вакансий). Указанные на рисунке разбросы значений соответствуют одному стандартному отклонению, представленному в виде $\sqrt{N_X}/N_{tot}$, где N_X — число дефектов типа X ; N_{tot} — число узлов кристаллической решетки в расчетной ячейке. Все концентрации нормированы на N_{tot} .

Важным результатом моделирования является построение зависимости от времени среднего размера кластера, а также получение распределений кластеров по размерам (рис. 9, см. также цветную вкладку). Средний размер кластеров вычислялся как отношение суммарного количества междоузлий в кластерах к числу кластеров; распределение нормировалось на полное число дефектов данного вида. На момент окончания расчета средний размер кластеров в системе составил $\sim 0,7$ нм, расчетная ячейка АкМК содержала 76 междоузельных кластеров; в расчете КД успело образоваться 42 714 междоузельных дефектов.

Решение уравнений КД заняло примерно 15 минут в объеме $5 \cdot 10^{-20}$ м³, подход АкМК потребовал 22 часа.

$T = 400$ К. Расчет с использованием подхода АкМК при температуре $T = 400$ К проводился в ячейке размером $80a \times 80a \times 80a$ (2 048 000 атомов) и продолжался 70 мин. Система уравнений КД считалась 100 мин в объеме $5 \cdot 10^{-20}$ м³. При понижении температуры диффузионные скачки происходят реже, что позволяет производить расчеты поврежденности до больших значений дозы. На рис. 10 (см. также цветную вкладку) приведены кривые изменения концентрации точечных дефектов и их комплексов при температуре $T = 400$ К. Видно, что кинетика накопления дефектов аналогична случаю $T = 600$ К, но смены режимов эволюции концентраций происходят позже и при больших концентрациях. Увеличение комплексов в размере (рис. 11, см. также цветную вкладку) происходит медленнее также за счет медленной диффузии точечных дефектов. опережение роста среднего размера кластеров в АкМК по сравнению с КД авторы связывают с ощутимым увеличением радиусов реакций при достигнутых в расчетах концентрациях стоков (см. рис. 6).

Сравнить разные температурные режимы можно по рис. 12. На нем изображены расчетные ячейки АкМК к моменту набора дозы в 0,01 сна при разных температурах. Соответствующие этой дозе распределения междоузельных кластеров по размерам, также полученные в рамках АкМК, показаны на рис. 13. Видно, что при одинаковой дозе и большей температуре концентрация дефектов меньше.

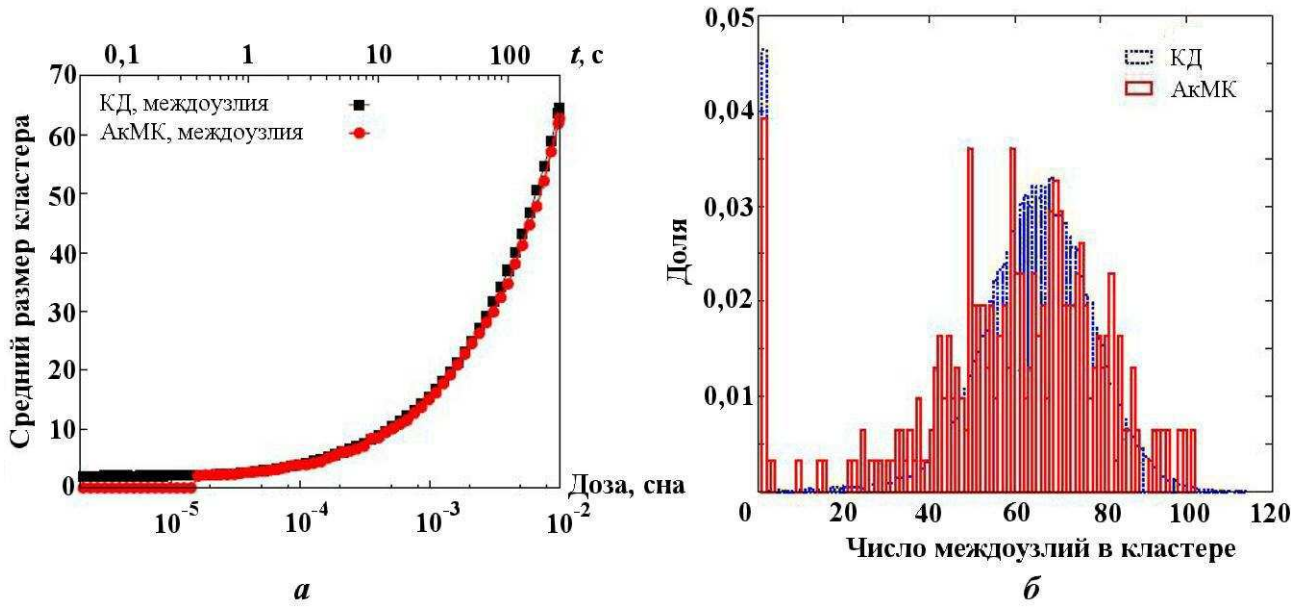


Рис. 9. Расчет роста среднего размера междуузельных кластеров в гидриде титана при температуре $T = 600$ К и скорости набора дозы $G = 4 \cdot 10^{-5}$ сна/с (а) и распределение междуузельных кластеров (б) на момент окончания этого расчета (250 с, или 0,01 сна)

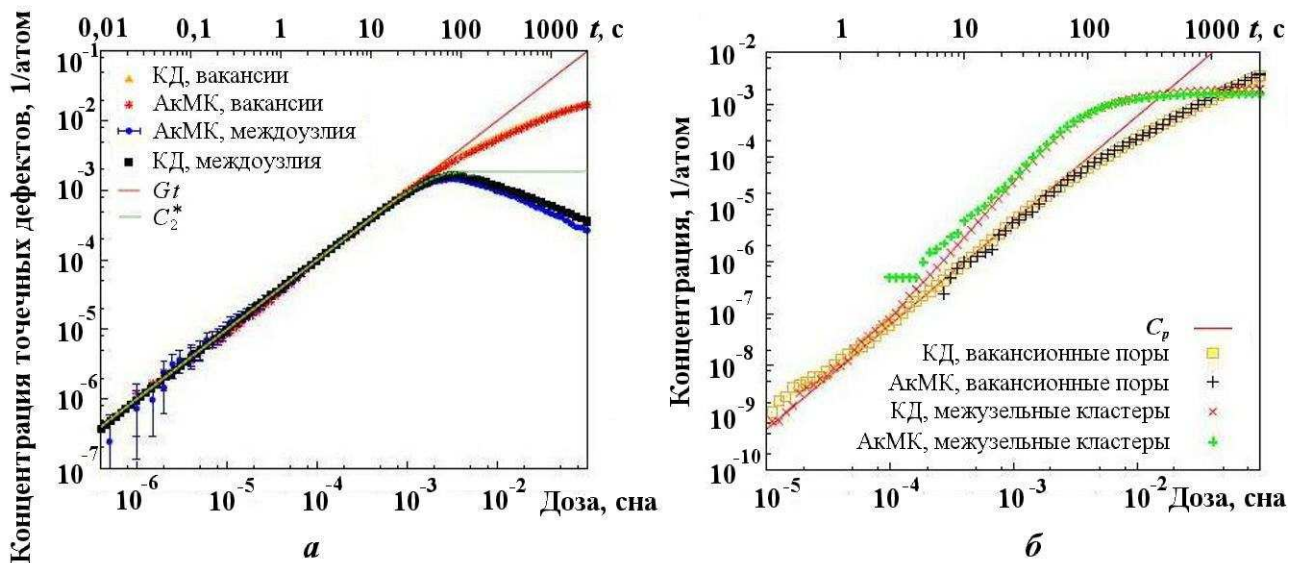


Рис. 10. Эволюция концентраций точечных дефектов (а) и их комплексов (б) в гидриде титана при температуре $T = 400$ К и скорости набора дозы $G = 4 \cdot 10^{-5}$ сна/с

Заключение

Проведено моделирование радиационно-индуцированного накопления дефектов в титановой под решетке гидрида титана с использованием подходов КД и АкМК. В исследуемом диапазоне температур 300–600 К оба подхода дают хорошее согласие друг с другом. В систему уравнений КД добавлены слагаемые (в фигурных скобках системы (2)), учитывающие уменьшение доли объема, свободного от дефектов, а также уменьшение скорости образования новых дефектов. Это обеспечивает согласие двух подходов между собой в моделировании кинетики при низкой температуре (см. рис. 1, 2).

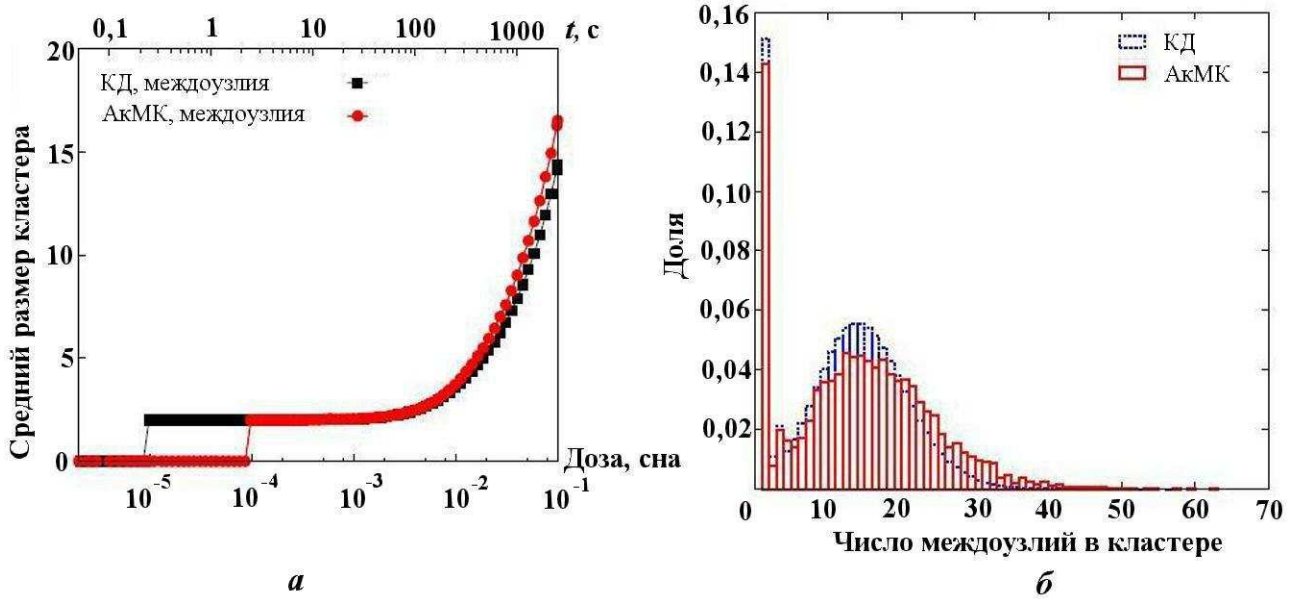


Рис. 11. Расчет роста среднего размера междуузельных кластеров в гидриде титана при температуре $T = 400$ К и скорости набора дозы $G = 4 \cdot 10^{-5}$ сна/с (а) и распределение междуузельных кластеров (б) на момент окончания этого расчета (2 500 с, или 0,1 сна)

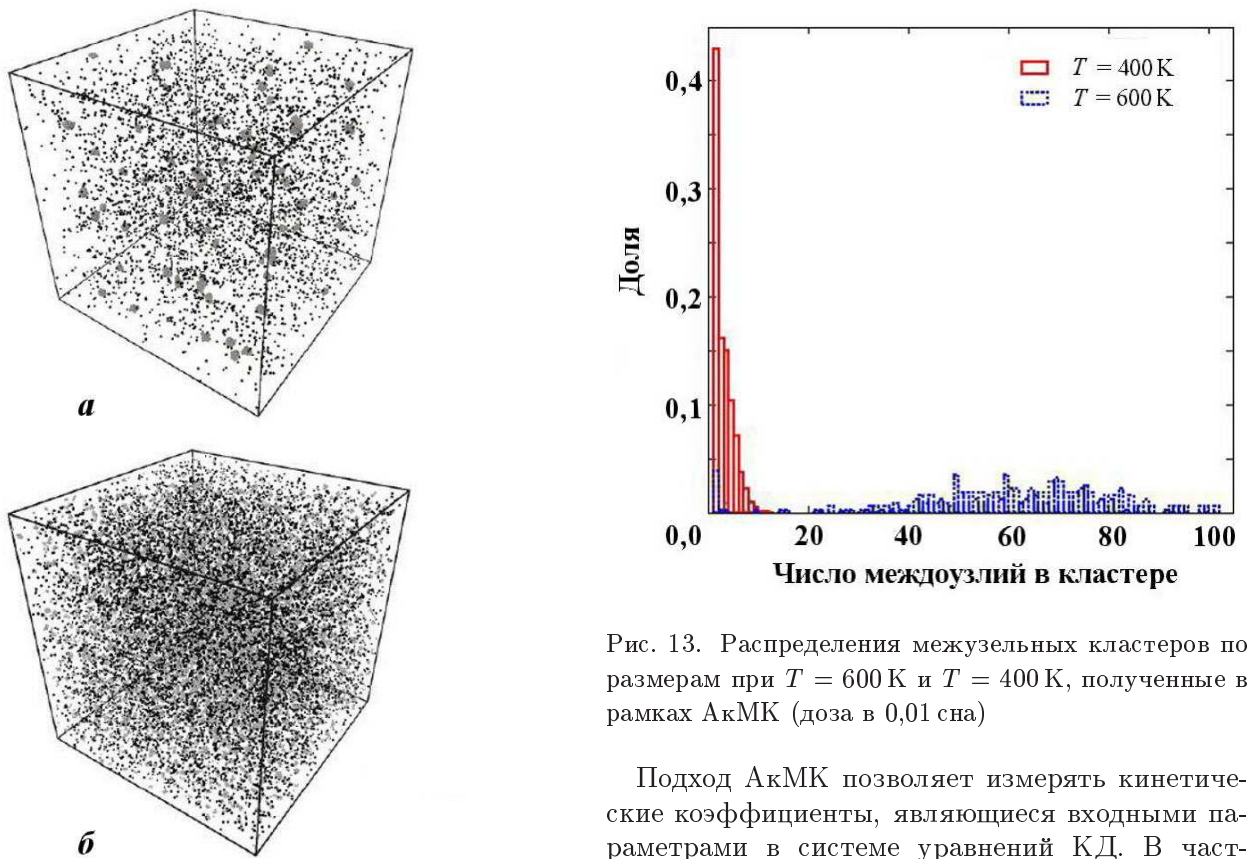


Рис. 13. Распределения междуузельных кластеров по размерам при $T = 600$ К и $T = 400$ К, полученные в рамках АкМК (доза в 0,01 сна)

Рис. 12. Визуализация расчетных ячеек (черный цвет — вакансии и вакансионные поры; серый — междуузельные кластеры) в АкМК к моменту набора дозы в 0,01 сна при $T = 600$ К (а) и $T = 400$ К (б)

Подход АкМК позволяет измерять кинетические коэффициенты, являющиеся входными параметрами в системе уравнений КД. В частности, были измерены коэффициенты диффузии кластеров, "константы" скоростей реакций диссоциации, кластеризации и рекомбинации дефектов. Выявлено, что радиусы реакций кластеризации и рекомбинации зависят от concentra-

ции стоков (см. рис. 6). АкМК дает представление о пространственном распределении дефектов. КД позволяет моделировать поврежденность вплоть до больших доз с надежной статистикой. Надежность предсказаний КД возрастает с увеличением подвижности дефектов.

Авторы признательны коллегам — сотрудникам Центра фундаментальных и прикладных исследований ВНИИА М. Ю. Ромашке, О. В. Сергееву, А. Э. Муханову, С. И. Глазырину за участие в обсуждении результатов и помощь в решении технических вопросов.

Расчеты проведены на вычислительном кластере ВНИИА.

Список литературы

1. Voter A. Introduction to the kinetic Monte Carlo method // Rad. Eff. Solids. 2007. Vol. 235. P. 1–23.
2. Bortz A. B., Kalos M. H., Lebowitz J. L. A new algorithm for Monte Carlo simulation of ising spin systems // J. Comp. Phys. 1975. Vol. 17. P. 10.
3. Plimpton S., Battaile C., Chandross M. et al. Crossing the Mesoscale No-Man's Land via Parallel Kinetic Monte Carlo. October 2009. <http://spparks.sandia.gov/pdf/sand09.pdf>.
4. Туницкий Н. Н., Каминский В. А., Тимашев С. Ф. Методы физико-химической кинетики. М.: Химия, 1972.
5. Gillespie D. T. Exact stochastic simulation of coupled chemical reactions // J. Phys. Chem. 1977. Vol. 81, No 25. P. 2340–2361.
6. Kuksin A. Yu., Rokhmanenkov A. S., Yanilkin A. V. Atomistic simulation of diffusion of hydrogen in titanium hydrides TiHx // Gordon Research Conf. "Hydrogen-Metal Systems". Lucca, Italy. July 14–19, 2013.
7. Мюллер В., Блэкледж Д., Либовиц Дж. Гидриды металлов. М.: Атомиздат. 1973.
8. Коптелов Э. А. Радиационные эффекты в твердых телах. Т. 1. М.: Изд. отд. ИЯИ РАН, 2001.
9. Insepov Z., Rest J., Kuksin A. et al. Derivation of kinetic coefficients by atomistic methods for studying defect behavior in Mo // J. Nucl. Mat. 2012. Vol. 425. P. 41–47.
10. Yanilkin A., Insepov Z., Norman G. et al. Atomistic simulation of clustering and annihilation of point defects in molybdenum // Defect and Diffusion Forum. 2012. Vol. 323-325. P. 95–100.

Статья поступила в редакцию 29.05.15.

SIMULATION OF THE RADIATION-INDUCED ACCUMULATION OF POINT DEFECTS IN TITANIUM HYDRIDE USING THE KINETIC MONTE CARLO METHOD / V. A. Khlebnikov, A. V. Yanilkin (N. L. Dukhov VNIIA, Moscow).

The paper presents simulation results for the generation and evolution of defects in titanium targets of pulse neutron sources during their operation. Two approaches are compared: the explicit description of atomic diffusion on a rigid lattice and solution of a system of kinetic equations of the cluster dynamics. The kinetic Monte Carlo method is used in the both approaches. The time dependencies have been obtained for the concentrations of point defects and their aggregates, the size distribution of aggregates has been constructed.

Keywords: radiation damage, the kinetic Monte Carlo method, cluster dynamics, SPPARKS program package.

УДК 533.951

ПРИМЕНЕНИЕ АЛГОРИТМА ВЫДЕЛЕНИЯ РАВНОВЕСНОЙ ЧАСТИ СПЕКТРА ПРИ РАСЧЕТЕ ЗАДАЧ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ В СПЕКТРАЛЬНОЙ ДИФФУЗИОННОЙ ПОСТАНОВКЕ

Н. Г. Карлыханов, И. В. Чиндяев
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИТФ", СФТИ НИЯУ МИФИ, г. Снежинск)

Рассматриваются вопросы построения алгоритма выделения равновесной части спектра, который использовался при расчете задач переноса излучения в спектральной диффузионной постановке. Реализация алгоритма включает в себя автоматический выбор равновесных групп, а также разрешение возникающих при этом внутренних граничных условий. Применимость рассматриваемого метода иллюстрируется на примере решения ряда задач.

Ключевые слова: перенос излучения, спектральная диффузия, выделение равновесной части спектра.

Введение

На практике часто приходится решать задачи переноса излучения, в которых коэффициент поглощения излучения меняется в очень широком диапазоне в зависимости от энергии квантов, пространственных координат и времени. В этом случае существует вероятность, отличная от нуля, что в некоторых пространственных интервалах в некоторые моменты времени и для некоторых энергий квантов будет выполнено условие

$$U_\varepsilon \approx B_\varepsilon(T), \quad (1)$$

т. е. U_ε — плотность излучения с энергией ε в некотором пространственном интервале — совпадает с некоторой точностью с $B_\varepsilon(T)$ — плотностью энергии равновесного излучения. Энергии квантов, для которых выполнено условие (1), составляют равновесную часть спектра.

В данной работе рассматриваются вопросы построения алгоритма выделения равновесной части спектра, который использовался при расчете задач переноса излучения в спектральной диффузионной постановке.

Основной особенностью предлагаемого алгоритма является то, что в счетном интервале по пространству могут быть как равновесные, так и неравновесные группы, причем количество тех и других групп в каждом интервале в каждый момент времени может быть своим. Такой способ организации счета позволяет более широко без потери точности использовать простые приближения для описания теплового излучения.

При реализации алгоритма выделения равновесной части спектра были решены вопросы автоматического выбора равновесных групп, а также постановки и разрешения возникающих при этом внутренних граничных условий. В настоящей работе соответствующие алгоритмы были рассмотрены применительно к модифицированному методу Фотрие [1] для решения задач переноса излучения в спектральной диффузионной постановке.

Постановка задачи

Для простоты изложения рассмотрим перенос излучения в спектральном диффузионном приближении для случая одномерной плоской геометрии без учета движения. В этом случае перенос излучения описывается следующей системой уравнений:

$$\frac{\partial U_\varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial S_\varepsilon}{\partial x} = c\chi_\varepsilon (U_\varepsilon - B_\varepsilon(T)); \quad (2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \int_0^\infty c\chi_\varepsilon (B_\varepsilon(T) - U_\varepsilon) d\varepsilon; \quad (3)$$

$$S_\varepsilon = -\frac{c}{3}\chi_\varepsilon^{-1}\frac{\partial U_\varepsilon}{\partial x}. \quad (4)$$

Здесь S_ε — спектральный поток излучения; U_ε — плотность энергии излучения; $\chi_\varepsilon(T)$ — коэффициент поглощения излучения; $E(T)$ — внутренняя энергия вещества; T — температура вещества; c — скорость света; $B_\varepsilon(T)$ — функция Планка.

Система уравнений (2)–(4) дополняется начальными условиями, вид которых для дальнейшего исследования не существен, и граничными условиями для левой и правой границ следующего вида [2]:

$$\alpha_{left,\varepsilon}S_\varepsilon + \beta_{left,\varepsilon}U_\varepsilon + \gamma_{left,\varepsilon} = 0; \quad (5)$$

$$\alpha_{right,\varepsilon}S_\varepsilon + \beta_{right,\varepsilon}U_\varepsilon + \gamma_{right,\varepsilon} = 0. \quad (6)$$

Разностная аппроксимация исходных уравнений

Запишем уравнения (2)–(4) в конечно-разностном виде. Определим температуру вещества и плотность энергии излучения в центрах интервалов и будем обозначать их (как и номера интервалов) полуцелыми индексами. Спектральные потоки излучения отнесем к границам интервалов и будем обозначать целыми индексами.

Тогда уравнения (2)–(4) примут следующий вид:

$$\frac{U_{k,i+1/2}^{n+1} - U_{k,i+1/2}^n}{\tau} + \frac{S_{k,i+1}^{n+1} - S_{k,i}^{n+1}}{\Delta x_{i+1/2}} = c\chi_k \left(B_k \left(T_{i+1/2}^{n+1} \right) - U_{k,i+1/2}^{n+1} \right); \quad (7)$$

$$\frac{E \left(T_{i+1/2}^{n+1} \right) - E_{i+1/2}^n}{\tau} = c \sum_{k=1}^K \chi_k \left(T_{i+1/2}^{n+1} \right) \left(U_{k,i+1/2}^{n+1} - B_k \left(T_{i+1/2}^{n+1} \right) \right) \Delta \varepsilon_k; \quad (8)$$

$$S_{k,i}^{n+1} = -\frac{c}{3}l_{k,i} \frac{U_{k,i+1/2}^{n+1} - U_{k,i-1/2}^{n+1}}{\Delta x_{i+1/2}}. \quad (9)$$

Здесь и далее $l_{k,i} = \frac{1}{\Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i-1/2}} \left(\frac{\Delta x_{i+1/2}}{\chi_{k,i-1/2}} + \frac{\Delta x_{i-1/2}}{\chi_{k,i+1/2}} \right)$ — пробег излучения, интерполированный на грань; K — количество энергетических групп; k — номер группы; N — количество интервалов по пространству; i — номер граничной точки интервала по пространству; n — номер временного слоя; $x_{i+1/2}$ — шаг по пространству; τ — шаг по времени; $\{\varepsilon_k\}$ — граничные значения сетки по спектру; $\Delta \varepsilon_k = \varepsilon_{k+1} - \varepsilon_k$ — шаг сетки по спектру.

Разностная аппроксимация граничных условий (5) и (6) будет иметь вид

$$\alpha_{left,k}S_{0,k} + \beta_{left,k}U_{-1/2,k} + \gamma_{left,k} = 0; \quad (10)$$

$$\alpha_{right,k}S_{N,k} + \beta_{right,k}U_{N+1/2,k} + \gamma_{right,k} = 0. \quad (11)$$

Метод решения разностных уравнений

Исходная система разностных уравнений (7)–(9) является нелинейной. Для решения этой системы используем метод Ньютона–Канторовича [3]. Разложим все нелинейные члены исходной системы разностных уравнений в ряд Тейлора с точностью до членов первого порядка. В этом случае система уравнений (7)–(9) примет следующий вид:

$$\begin{aligned} & \frac{U_{k,i+1/2}^s + \Delta U_{k,i+1/2}^{s+1} - U_{k,i+1/2}^n}{\tau} + \frac{S_{k,i+1}^s + \Delta S_{k,i+1}^{s+1} - S_{k,i}^s - \Delta S_{k,i}^{s+1}}{\Delta x_{i+1/2}} = c \chi_k(T_{i+1/2}^s) \left(B_k(T_{i+1/2}^s) - U_{k,i+1/2}^s \right) + \\ & + c \left[\frac{\partial \chi_k(T_{i+1/2}^s)}{\partial T_{i+1/2}^s} \left(B_k(T_{i+1/2}^s) - U_{k,i+1/2}^s \right) + \chi_k(T_{i+1/2}^s) \frac{\partial B_k(T_{i+1/2}^s)}{\partial T_{i+1/2}^s} \right] \Delta T_{k,i+1/2}^{s+1} - \\ & - c \chi_k(T_{i+1/2}^s) \Delta U_{k,i+1/2}^{s+1}; \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} & \frac{E_{i+1/2}^s + \frac{\partial E(T_{i+1/2}^s)}{\partial T_{i+1/2}^s} \Delta T_{i+1/2}^{s+1} - E_{i+1/2}^n}{\tau} = c \sum_{k=1}^K \chi_k(T_{i+1/2}^s) \left(U_{k,i+1/2}^s - B_k(T_{i+1/2}^s) \right) \Delta \varepsilon_k + \\ & + c \sum_{k=1}^K \frac{\partial \chi_k(T_{i+1/2}^s)}{\partial T_{i+1/2}^s} \left(U_{k,i+1/2}^s - B_k(T_{i+1/2}^s) \right) \Delta \varepsilon_k - \chi_k(T_{i+1/2}^s) \frac{\partial B_k(T_{i+1/2}^s)}{\partial T_{i+1/2}^s} \Delta \varepsilon_k \Delta T_{i+1/2}^s - \\ & - c \sum_{k=1}^K \chi_k(T_{i+1/2}^s) \Delta \varepsilon_k U_{k,i+1/2}^{s+1}; \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \Delta S_{k,i}^{s+1} + S_{k,i}^s &= -\frac{c}{3} l_{i,k} \frac{U_{k,i+1/2}^s - U_{k,i-1/2}^s}{\Delta x_{i+1/2}} + \frac{c}{6} \frac{1}{\chi_k^2(T_{i+1/2}^s)} \frac{U_{k,i+1/2}^s - U_{k,i-1/2}^s}{\Delta x_{i+1/2}} \frac{\partial \chi_k(T_{i+1/2}^s)}{\partial T_{i+1/2}^s} \Delta T_{i+1/2}^{s+1} + \\ & + \frac{c}{6} \frac{1}{\chi_k^2(T_{i-1/2}^s)} \frac{U_{k,i+1/2}^s - U_{k,i-1/2}^s}{\Delta x_{i+1/2}} \frac{\partial \chi_k(T_{i-1/2}^s)}{\partial T_{i-1/2}^s} \Delta T_{i-1/2}^{s+1} - \\ & - \frac{c}{3 \Delta x_{i+1/2}} l_{i,k} \Delta U_{i+1/2}^{s+1} + \frac{c}{3 \Delta x_{i+1/2}} l_{i,k} \Delta U_{i-1/2}^{s+1}. \end{aligned} \quad (14)$$

При записи формул (12)–(14) введены обозначения: s – номер ньютоновской итерации; $\Delta \xi^{s+1} = \xi^{s+1} - \xi^s$, где в качестве ξ могут быть T , S , U . После приведения подобных членов систему уравнений (12)–(14) запишем в следующем виде относительно переменных $\Delta T_{i+1/2}^{s+1}$, $\Delta U_{i+1/2,k}^{s+1}$, $\Delta S_{i,k}^{s+1}$:

$$A \Delta U_{k,i+1/2}^{s+1} + B \Delta S_{k,i+1}^{s+1} + C \Delta S_{k,i}^{s+1} + D \Delta T_{i+1/2}^{s+1} = F; \quad (15)$$

$$\alpha \Delta T_{i+1/2}^{s+1} + \sum_k \beta_{k,i+1/2} \Delta U_{k,i-1/2}^{s+1} = \gamma; \quad (16)$$

$$a \Delta S_{k,i}^{s+1} + b \Delta U_{k,i+1/2}^{s+1} + e \Delta U_{k,i-1/2}^{s+1} + d \Delta T_{i+1/2}^{s+1} + f \Delta T_{i-1/2}^{s+1} = g, \quad (17)$$

где $A = \frac{1}{\tau} + c \chi_k(T_{i+1/2}^s)$; $B = \frac{1}{\Delta x_{i+1/2}}$; $C = -\frac{1}{\Delta x_{i+1/2}}$;

$$D = -c \left[\frac{\partial \chi_k(T_{i+1/2}^s)}{\partial T_{i+1/2}^s} \left(B_k(T_{i+1/2}^s) - U_{i+1/2,k}^s \right) + \frac{\partial B_k(T_{i+1/2}^s)}{\partial T_{i+1/2}^s} \chi_k(T_{i+1/2}^s) \right];$$

$$F = \frac{U_{i+1/2,k}^n - U_{i+1/2,k}^s}{\tau} + \frac{S_k(T_i^s) - S_k(T_{i+1}^s)}{\Delta x_{i+1/2}} + c \chi_k(T_{i+1/2}^s) \left(B_k(T_{i+1/2}^s) - U_{i+1/2,k}^s \right);$$

$$a = 1; \quad b = \frac{cl_{i,k}}{1,5 (\Delta x_{i-1/2} + \Delta x_{i+1/2})}; \quad e = -\frac{cl_{i,k}}{1,5 (\Delta x_{i-1/2} + \Delta x_{i+1/2})};$$

$$d = -\frac{c}{6} \frac{1}{\chi_k^2 (T_{i+1/2}^s)} \frac{U_{k,i+1/2}^s - U_{k,i-1/2}^s}{\Delta x_{i+1/2}} \frac{\partial \chi_k (T_{i+1/2}^s)}{\partial (T_{i+1/2})};$$

$$f = -\frac{c}{6} \frac{1}{\chi_k^2 (T_{i-1/2}^s)} \frac{U_{k,i+1/2}^s - U_{k,i-1/2}^s}{\Delta x_{i+1/2}} \frac{\partial \chi_k (T_{i-1/2}^s)}{\partial (T_{i-1/2})};$$

$$g = -S_{k,i}^s - \frac{c}{3} \frac{\chi_k^{-1} (T_{i+1/2}^s) - \chi_k^{-1} (T_{i-1/2}^s)}{2} \frac{U_{k,i+1/2}^s - U_{k,i-1/2}^s}{\Delta x_{i+1/2}};$$

$$\alpha = \frac{\partial E (T_{i+1/2}^s)}{\partial T_{i+1/2}} \frac{1}{\tau} - c \sum_{k=1}^K \frac{\partial \chi_k (T_{i+1/2}^s)}{\partial T_{i+1/2}} \left(U_k^s - B_k (T_{i+1/2}^s) \right) \Delta \varepsilon_k - \chi_k \frac{\partial B_k (T_{i+1/2}^s)}{\partial T_{i+1/2}} \Delta \varepsilon_k;$$

$$\beta = -c \chi_k \Delta \varepsilon_k; \quad \gamma = \frac{-E_{i+1/2}^s + E_{i+1/2}^n}{\tau} + c \sum_{k=1}^K \chi_k (T_{i+1/2}^s) \left(U_k^s - B_k (T_{i+1/2}^s) \right) \Delta \varepsilon_k.$$

Граничные условия (10), (11) в линеаризованном виде:

$$\alpha_{left,k} \Delta S_{0,k}^{s+1} + \beta_{left,k} \Delta U_{-1/2,k}^{s+1} + \alpha_{left,k} S_{0,k}^s + \beta_{left,k} U_{-1/2,k}^s + \gamma_{left,k} = 0; \quad (18)$$

$$\alpha_{right,k} \Delta S_{N,k}^{s+1} + \beta_{right,k} \Delta U_{N+1/2,k}^{s+1} + \alpha_{right,k} S_{N,k}^s + \beta_{right,k} U_{N+1/2,k}^s + \gamma_{right,k} = 0. \quad (19)$$

Исходная система разностных уравнений (15)–(17) с учетом граничных условий (18), (19) решается методом Гаусса. Нумерация неизвестных $\Delta T_{i+1/2}^{s+1}$, $\Delta U_{i+1/2,k}^{s+1}$, $\Delta S_{i,k}^{s+1}$ осуществляется следующим образом:

1	2	...	K + 1	K + 2	...	2K + 1	...
$\Delta T_{-1/2}^{s+1}$	$\Delta U_{-1/2,1}^{s+1}$...	$\Delta U_{-1/2,K}^{s+1}$	$\Delta S_{0,1}^{s+1}$...	$\Delta S_{0,K}^{s+1}$...
...
$1 + (2K + 1)i$	$2 + (2K + 1)i$...	$K + 1 + (2K + 1)i$	$K + 2 + (2K + 1)i$...	$(2K + 1)(i + 1)$...
$\Delta T_{i-1/2}^{s+1}$	$\Delta U_{i-1/2,1}^{s+1}$...	$\Delta U_{i-1/2,K}^{s+1}$	$\Delta S_{i,1}^{s+1}$...	$\Delta S_{i,K}^{s+1}$...
...
$1 + (2K + 1)(N + 1)$	$2 + (2K + 1)(N + 1)$...	$K + 1 + (2K + 1)(N + 1)$				
$\Delta T_{N+1/2}^{s+1}$	$\Delta U_{N+1/2,1}^{s+1}$...	$\Delta U_{N+1/2,K}^{s+1}$				

Система (15)–(17) с учетом граничных условий (18), (19) относительно неизвестных

$$\Delta T_{i-1/2}, \quad i = \overline{0, N + 1}; \quad \Delta U_{i-1/2,k}, \quad i = \overline{0, N + 1}, \quad k = \overline{1, K}; \quad \Delta S_{i,k}, \quad i = \overline{0, N + 1}, \quad k = \overline{1, K}$$

имеет $(N + 2)(2K + 1) - K$ уравнений. Матрица исходной системы уравнений будет иметь многодиагональный вид с шириной $(2K + 1)$ (число диагоналей влево и вправо от главной диагонали).

В отличие от классического метода Фотрие [1] авторы не исключили поток излучения из уравнения (7) с помощью соотношения (9), хотя при таком исключении количество уравнений и ширина матрицы сокращаются в 2 раза и соответственно время обращения матрицы уменьшается в 8 раз. Это было сделано сознательно по двум причинам:

1. Оставляя уравнение (9), получаем преимущество потокового варианта метода прогонки [4]. Как показано в работе [4], такой подход позволяет решать задачи с вакуумными областями, в которых коэффициент поглощения мал.

2. Такой подход существенно упрощает организацию алгоритма счета задачи с выделением равновесной части спектра.

Алгоритм выделения равновесной части спектра

Критерий выделения равновесной части спектра. Рассмотрим условие выполнения соотношения (1). Из уравнений (2), (4) следует

$$\frac{\partial U_\varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{cl_\varepsilon}{3} \frac{\partial U_\varepsilon}{\partial x} = c\chi_\varepsilon (B_\varepsilon(T) - U_\varepsilon). \quad (20)$$

Воспользуемся приемом, который был описан в работе [5]. По порядку величины значения производных можно представить в виде $\frac{\partial U_\varepsilon}{\partial t} \approx \frac{U_\varepsilon}{T_h}$; $\frac{\partial U_\varepsilon}{\partial x} \approx \frac{U_\varepsilon}{H_h}$, где T_h — характерный масштаб времени задачи, H_h — характерный пространственный масштаб. Используя эти соотношения, уравнение (20) можно записать в следующем виде:

$$\frac{U_\varepsilon}{T_h} + \frac{cl_\varepsilon}{3} \frac{U_\varepsilon}{H_h^2} = c\chi_\varepsilon B_\varepsilon(T) - c\chi_\varepsilon U.$$

Приведа подобные члены, получим

$$U_\varepsilon \left(\frac{1}{T_h} + \frac{cl_\varepsilon}{3H_h^2} + c\chi_\varepsilon \right) = c\chi_\varepsilon B_\varepsilon(T).$$

Отсюда видно, что соотношение (1) будет выполняться при условии

$$c\chi_\varepsilon \gg \frac{1}{T_h} + \frac{cl_\varepsilon}{3H_h^2},$$

или в другом виде:

$$\frac{l_\varepsilon}{T_h c} + \frac{l_\varepsilon^2}{3H_h^2} \ll 1. \quad (21)$$

Выражение (21) отражает очевидный факт, что равновесие наступает тогда, когда длина свободного пробега излучения много меньше характерного пространственного масштаба задачи и много меньше расстояния, которое проходит свет за характерное время задачи.

Использовать на практике критерий (21) не всегда возможно в силу сложности получения оценки характерных масштабов задачи. Для проведения практических расчетов сформулируем аналогичный критерий, исходя из разностных уравнений. Запишем уравнение (20) в разностном виде:

$$\begin{aligned} & \frac{U_{i+1/2,k}^{n+1} - U_{i+1/2,k}^n}{\tau} - \left[\frac{cl_{i+1}}{3} \frac{U_{i+3/2,k}^{n+1} - U_{i+1/2,k}^{n+1}}{0,5(\Delta x_{i+3/2} + \Delta x_{i+1/2})} - \frac{cl_i}{3} \frac{U_{i+1/2,k}^{n+1} - U_{i-1/2,k}^{n+1}}{0,5(\Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i-1/2})} \right] \frac{1}{\Delta x_{i+1/2}} = \\ & = c\chi_{i+1/2,k} \left(B_k(T_{i+1/2}^{n+1}) - U_{i+1/2,k}^{n+1} \right). \end{aligned}$$

Приведа подобные члены, получим

$$U_{i+1/2,k}^{n+1} (A_1 + c\chi_{i+1/2,k}) = c\chi_{i+1/2,k} B_k(T_{i+1/2}^{n+1}) + \frac{U_{i+1/2,k}^n}{\tau} + C_1 U_{i+3/2,k}^{n+1} + D_1 U_{i-1/2,k}^{n+1}, \quad (22)$$

где $A_1 = \frac{1}{\tau} + \frac{l_{i+1,k}}{3} \frac{1}{0,5(\Delta x_{i+3/2} + \Delta x_{i+1/2}) \Delta x_{i+1/2}} + \frac{l_{i,k}}{3} \frac{1}{0,5(\Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i-1/2}) \Delta x_{i+1/2}}$;
 $C_1 = \frac{l_{i+1,k}}{3} \frac{1}{0,5(\Delta x_{i+3/2} + \Delta x_{i+1/2}) \Delta x_{i+1/2}}$; $D_1 = \frac{l_{i,k}}{3} \frac{1}{0,5(\Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i-1/2}) \Delta x_{i+1/2}}$.

Из уравнения (22) следует, что условие равновесия наступает при одновременном выполнении двух условий:

$$c\chi_{i+1/2,k} \gg A_1; \quad (23)$$

$$B_k \left(T_{i+1/2}^{n+1} \right) \gg \frac{U_{i+1/2,k}^n}{\tau c\chi_{i+1/2,k}} + \frac{C_1 U_{i+3/2,k}^{n+1} + D_1 U_{i-1/2,k}^{n+1}}{c\chi_{i+1/2,k}}. \quad (24)$$

Отметим, что при выполнении условия (23) условие (24) выполняется автоматически, поскольку все величины, входящие в правую часть (24), пропорциональны пробегу, а он в силу условия (23) мал. На практике критерий (23) используется в следующем виде:

$$C_m c\chi_{i+1/2,k} > A_1, \quad (25)$$

где $C_m < 1$ — константа, подбираемая экспериментально соответственно классу решаемых задач.

Система уравнений переноса излучения с учетом равновесных групп. Отметим, что если слева и справа от i -й границы для k -й группы находятся равновесные плотности энергии излучения, то поток энергии для этой группы будет называться равновесным. Поскольку равновесные потоки зависят только от температуры в интервалах $i - 1/2$ и $i + 1/2$, то их можно просуммировать и определить как отдельную переменную, не зависящую от номера группы. Как отмечено выше, в каждом интервале может присутствовать свое количество равновесных групп. Нумерация переменных совпадает с той, которая имеет место при отсутствии равновесных групп, за исключением того, что плотности энергии излучения для равновесных групп не нумеруются. Вместо группы равновесных потоков появляется один равновесный поток. Очевидно, что при наличии равновесных групп сокращается размерность исходной матрицы, а также ее ширина, что должно сократить время счета задачи.

Запишем уравнение (8) для случая, когда в интервале $i + 1/2$ присутствуют равновесные группы. Для всех равновесных групп к уравнению (8) прибавим уравнение (7), умноженное на $\Delta\varepsilon_k$. Получим

$$\begin{aligned} & \frac{E_{i+1/2}^{n+1} + \sum_{kr} B_{kr} \left(T_{i+1/2}^{n+1} \right) \Delta\varepsilon_{kr} - E_{i+1/2}^n - \sum_{kr} U_{kr}^n \Delta\varepsilon_{kr}}{\tau} + \frac{\sum_{kr} S_{i+1,kr}^n \Delta\varepsilon_{kr} - \sum_{kr} S_{i,kr}^n \Delta\varepsilon_{kr}}{\Delta x_{i+1/2}} = \\ & = \sum_{kn} \chi_{i+1/2,kn}^n \left(U_{i+1/2,kn}^n - B_{kn} \left(T_{i+1/2}^n \right) \right) \Delta\varepsilon_{kn}. \end{aligned} \quad (26)$$

Индексы kn и kr означают, что суммирование происходит в интервале $i + 1/2$ по неравновесным и равновесным группам соответственно. В (26) потоки выражаются следующей формулой:

$$\sum_{kr} S_{i,kr} \Delta\varepsilon_{kr} = S_{i,r} + \sum_{kn} S_{i,kn} \Delta\varepsilon_{kn}. \quad (27)$$

Равновесная часть потока

$$S_{i,r} = - \sum_{kr} \frac{cl_{i,kr}}{3} \frac{B_{kr} \left(T_{i+1/2}^n \right) - B_{kr} \left(T_{i-1/2}^n \right)}{\Delta x_{i+1/2}} \Delta\varepsilon_{kr}. \quad (28)$$

Суммирование в правой части выражения (27) производится только по тем потокам, которые вычисляются по формуле

$$S_{i,kn} = - \frac{cl_{i,kn}}{3} \frac{U_{i+1/2,kn}^{n+1} - B_{kn} \left(T_{i-1/2}^{n+1} \right)}{\Delta x_{i+1/2}} \quad (29)$$

или

$$S_{i,kn} = -\frac{cl_{i,kn}}{3} \frac{B_{kn} \left(T_{i+1/2}^{n+1} \right) - U_{i-1/2,kn}^{n+1}}{\Delta x_{i+1/2}}. \quad (30)$$

Формула (29) используется в случае, когда для k -й группы точка $i - 1/2$ равновесная, а точка $i + 1/2$ неравновесная. Формула (30) используется в случае, когда для k -й группы точка $i - 1/2$ неравновесная, а точка $i + 1/2$ равновесная.

Уравнение (26) после линеаризации примет вид

$$A \Delta T_{i+1/2}^{s+1} + B \Delta S_{i+1,r}^{s+1} + \sum_{kn} B' \Delta S_{i+1,kn}^{s+1} + C \Delta S_{i,r}^{s+1} + \sum_{kn} C' \Delta S_{i,kn}^{s+1} + \sum_{kn} D \Delta U_{i+1/2,kn}^{s+1} = F,$$

где

$$A = \frac{\frac{\partial E \left(T_{i+1/2}^s \right)}{\partial T_{i+1/2}} + \sum_{kr} \frac{\partial B_{kr} \left(T_{i+1/2}^s \right)}{\partial T_{i+1/2}} \Delta \varepsilon_{kr}}{\tau} - \sum_{kn} \frac{\partial \chi_{kn} \left(T_{i+1/2}^s \right)}{\partial T_{i+1/2}} \left(U_{i+1/2,kn}^s - B_{kn} \left(T_{i+1/2}^s \right) \right) \Delta \varepsilon_{kn} +$$

$$+ \sum_{kn} \chi_{kn} \left(T_{i+1/2}^s \right) \frac{\partial B_{kn} \left(T_{i+1/2}^s \right)}{\partial T_{i+1/2}} \Delta \varepsilon_{kn};$$

$$B' = \frac{\Delta \varepsilon_{kr}}{\Delta x_{i+1/2}}; \quad B = \frac{1}{\Delta x_{i+1/2}}; \quad C = -\frac{1}{\Delta x_{i+1/2}}; \quad C' = -\frac{\Delta \varepsilon_{kr}}{\Delta x_{i+1/2}}; \quad D = -\chi_{kn} \left(T_{i+1/2}^s \right) \Delta \varepsilon_{kn};$$

$$F = \frac{-E_{i+1/2,k}^s + E_{i+1/2,k}^n - \sum_{kr} B_{kr} \left(T_{i+1/2}^s \right) \Delta \varepsilon_{kr} + \sum_{kr} U_{i+1/2,kr}^n \Delta \varepsilon_{kr}}{\tau} +$$

$$+ \frac{\sum_{kr} S_{i,kr}^s \Delta \varepsilon_{kr} - \sum_{kr} S_{i+1,kr}^s \Delta \varepsilon_{kr}}{\Delta x_i} + \sum_{kn} \chi_{i+1/2,kn}^s \left(U_{i+1/2,kn}^s - B_{kn} \left(T_{i+1/2}^s \right) \right) \Delta \varepsilon_{kn}.$$

Выражение (28) после линеаризации примет вид

$$\alpha_1 \Delta S_{i,r}^{s+1} = -\beta_1 \Delta T_{i+1/2,k}^{s+1} + \gamma_1 \Delta T_{i-1/2,k}^{s+1} + \lambda_1,$$

где

$$\alpha_1 = 1;$$

$$\beta_1 = \sum_{kr} \left(-\frac{c}{6} \frac{1}{\chi_{kr}^2 \left(T_{i+1/2}^s \right)} \frac{B_{kr} \left(T_{i+1/2}^s \right) - B_{kr} \left(T_{i-1/2}^s \right)}{\Delta x_{i+1/2}} \frac{\partial \chi_{kr} \left(T_{i+1/2}^s \right)}{\partial \left(T_{i+1/2} \right)} + \frac{c}{3} l_{i,kr} \frac{1}{\Delta x_{i+1/2}} \frac{\partial B_{kr} \left(T_{i+1/2}^s \right)}{\partial \left(T_{i+1/2} \right)} \right);$$

$$\gamma_1 = \sum_{kr} \left(\frac{c}{6} \frac{1}{\chi_{kr}^2 \left(T_{i-1/2}^s \right)} \frac{B_{kr} \left(T_{i+1/2}^s \right) - B_{kr} \left(T_{i-1/2}^s \right)}{\Delta x_{i+1/2}} \frac{\partial \chi_{kr} \left(T_{i-1/2}^s \right)}{\partial \left(T_{i-1/2} \right)} + \frac{c}{3} l_{i,kr} \frac{1}{\Delta x_{i+1/2}} \frac{\partial B_{kr} \left(T_{i-1/2}^s \right)}{\partial \left(T_{i-1/2} \right)} \right);$$

$$\lambda_1 = -S_{i,r}^s - \sum_{kr} \frac{c}{3} l_{i,kr} \frac{B_{kr} \left(T_{i+1/2}^s \right) - B_{kr} \left(T_{i-1/2}^s \right)}{\Delta x_{i+1/2}}.$$

Легко заметить, что коэффициенты β_1 и γ_1 могут быть знакопеременными. Отрицательность одного из этих коэффициентов с точки зрения физики означает перетекание тепла от "холодной" ячейки к "горячей", что является термодинамически неустойчивым процессом и может привести к неустойчивости счета. Чтобы избежать этого, воспользуемся следующим приемом [6]: если какой-то

из коэффициентов β_1 и γ_1 становится отрицательным, то при его вычислении зануляем производную от коэффициента поглощения по температуре. Тем самым отказываемся от ньютоновского итерационного процесса в пользу устойчивости счета.

Выражение (29) после линеаризации примет вид

$$\alpha_2 \Delta S_{i,r}^{s+1} + \beta_2 \Delta T_{i+1/2,k}^{s+1} + \gamma_2 \Delta T_{i-1/2,k}^{s+1} + \varphi_2 \Delta U_{i+1/2,kn}^{s+1} = \lambda_2,$$

где

$$\begin{aligned} \alpha_2 &= 1; \quad \beta_2 = -\frac{c}{6} \frac{1}{\chi_{kn}^2(T_{i+1/2}^s)} \frac{U_{i+1/2,kn}^s - B_{kn}(T_{i-1/2}^s)}{\Delta x_{i+1/2}} \frac{\partial \chi_{kn}(T_{i+1/2}^s)}{\partial (T_{i+1/2}^s)}; \\ \gamma_2 &= \frac{c}{6} \frac{1}{\chi_{kn}^2(T_{i-1/2}^s)} \frac{U_{i+1/2,kn}^s - B_{kn}(T_{i-1/2}^s)}{\Delta x_{i+1/2}} \frac{\partial \chi_{kn}(T_{i-1/2}^s)}{\partial (T_{i-1/2}^s)} - \frac{c}{3} l_{i,kr} \frac{1}{\Delta x_{i+1/2}} \frac{\partial B_{kn}(T_{i-1/2}^s)}{\partial (T_{i-1/2}^s)}; \\ \varphi_2 &= \frac{c}{3} l_{i,kr} \frac{1}{\Delta x_{i+1/2}}; \quad \lambda_2 = -S_{i,kn}^s - \frac{c}{3} l_{i,kr} \frac{U_{i+1/2,kn}^s - B_{kn}(T_{i-1/2}^s)}{\Delta x_{i+1/2}}. \end{aligned}$$

Выражение (30) после линеаризации примет вид

$$\alpha_3 \Delta S_{i,r}^{s+1} + \beta_3 \Delta T_{i+1/2,k}^{s+1} + \gamma_3 \Delta T_{i-1/2,k}^{s+1} + \varphi_3 \Delta U_{i-1/2,kn}^{s+1} = \lambda_3,$$

где

$$\begin{aligned} \alpha_3 &= 1; \\ \beta_3 &= -\frac{c}{6} \frac{1}{\chi_{kn}^2(T_{i+1/2}^s)} \frac{B_{kn}(T_{i+1/2}^s) - U_{i-1/2,kn}^s}{\Delta x_{i+1/2}} \frac{\partial \chi_{kn}(T_{i+1/2}^s)}{\partial (T_{i+1/2}^s)} + \frac{c}{3} l_{i,kr} \frac{1}{\Delta x_{i+1/2}} \frac{\partial B_{kn}(T_{i+1/2}^s)}{\partial (T_{i+1/2}^s)}; \\ \gamma_3 &= -\frac{c}{6} \frac{1}{\chi_{kn}^2(T_{i-1/2}^s)} \frac{B_{kn}(T_{i+1/2}^s) - U_{i-1/2,kn}^s}{\Delta x_{i+1/2}} \frac{\partial \chi_{kn}(T_{i-1/2}^s)}{\partial (T_{i-1/2}^s)}; \\ \varphi_3 &= \frac{c}{3} l_{i,kr} \frac{1}{\Delta x_{i+1/2}}; \quad \lambda_3 = -S_{i,kn}^s - \frac{c}{3} l_{i,kr} \frac{B_{kn}(T_{i+1/2}^s) - U_{i-1/2,kn}^s}{\Delta x_{i+1/2}}. \end{aligned}$$

Граничные условия при наличии равновесных групп будут задаваться уравнениями

$$\begin{aligned} S_{0,r} \sum_{kr} \alpha_{left,k} \Delta \varepsilon_{kr} + \sum_{kr} \left(\beta_{left,k} B_{kr}(T_{-1/2}) + \gamma_{left,k} \right) \Delta \varepsilon_{kr} &= 0; \\ S_{N,r} \sum_{kr} \alpha_{right,k} \Delta \varepsilon_{kr} + \sum_{kr} \left(\beta_{right,k} B_{kr}(T_{N+1/2}) + \gamma_{right,k} \right) \Delta \varepsilon_{kr} &= 0. \end{aligned}$$

После их линеаризации получим

$$\begin{aligned} \Delta S_{0,r}^{s+1} \sum_{kr} \alpha_{left,k} \Delta \varepsilon_{kr} + \Delta T_{-1/2}^{s+1} \sum_{kr} \beta_{left,k} \frac{\partial B(T_{-1/2})_{kr}^s}{\partial T_{-1/2}} \Delta \varepsilon_{kr} + \\ + S_{0,r}^s \sum_{kr} \alpha_{left,k} \Delta \varepsilon_{kr} + \sum_{kr} \left(\beta_{left,k} B(T_{-1/2})_r^s + \gamma_{left,k} \right) \Delta \varepsilon_{kr} &= 0; \\ \Delta S_{N,r}^{s+1} \sum_{kr} \alpha_{right,k} \Delta \varepsilon_{kr} + \Delta T_{N+1/2}^{s+1} \sum_{kr} \beta_{right,k} \frac{\partial B(T_{N+1/2})_{kr}^s}{\partial T_{N+1/2}} \Delta \varepsilon_{kr} + \\ + S_{N,r}^s \sum_{kr} \alpha_{right,k} \Delta \varepsilon_{kr} + \sum_{kr} \left(\beta_{right,k} B(T_{N+1/2})_r^s + \gamma_{right,k} \right) \Delta \varepsilon_{kr} &= 0. \end{aligned}$$

Примеры численных расчетов

Для иллюстрации эффективности применяемого подхода приведем расчеты трех задач, аналогичных задачам из работы [7]. В данной серии расчетов проверялись зависимости времени счета задачи и точности полученных результатов от параметра C_m из формулы (25). За *точное* принято решение без выделения равновесной части спектра ($C_m = 0$). Отклонение от точного решения рассчитывалось в норме L_2 по следующей формуле:

$$\Delta f_{||L_2||} = \frac{\int_0^4 (f_0 - f_{cm})^2 dx}{\int_0^4 (f_0)^2 dx}, \quad (31)$$

где f_0 — точное решение; f_{cm} — решение, полученное с различными параметрами C_m .

В таблицах и на графиках приняты следующие обозначения: $time_n$ — нормированное время счета (время выполнения задачи с параметром $C_m \neq 0$, деленное на время выполнения задачи без выделения равновесной части спектра); kol_ur — среднее количество уравнений на временном шаге; kol_d_l , kol_d_r — среднее количество диагоналей слева и справа от главной на временном шаге; err_T , err_Tf , err_s — ошибки, рассчитанные по формуле (31) соответственно по температуре вещества, температуре излучения и по спектральным потокам.

Задача 1. На левой поверхности плоского слоя толщиной 4 см задана плотность энергии излучения, распределенная согласно функции Планка с температурой 1 кэВ, что соответствует следующим параметрам для граничного условия (18): $\alpha_{left,k} = 0$; $\beta_{left,k} = 1$; $\gamma_{left,k} = B_k(T = 1)$. Слой состоит из одной физической области: $x \in \{0; 4\}$. На правой границе задано условие свободной поверхности, что соответствует следующим параметрам для граничного условия (19): $\alpha_{right,k} = 1$; $\beta_{right,k} = -c/2$; $\gamma_{right,k} = 0$. Коэффициент поглощения излучения вычисляется по формуле

$$\chi_\varepsilon = \frac{\chi_0 \left(1 - \exp\left(-\frac{\varepsilon}{T}\right)\right)}{\varepsilon^3 T^{0,5}}, \quad (32)$$

где $\chi_0 = 27$. Уравнение состояния вещества взято в виде $E = 0,81T$.

Пространственная сетка — равномерная на всей области: $x_0 = 0$; $x_1 = 0,074$; $x_2 = 0,148$; ...; $x_{55} = 4$ (55 интервалов, $h = 0,74$). Задача считалась с постоянным шагом по времени $\tau = 10^{-5}$. Сетка по спектру задавалась следующими значениями: $\{\varepsilon_k\} = 0; 0,02; 0,04; 0,06; 0,08; 0,1; 0,15; 0,2; 0,3; 0,4; 0,5; 0,6; 0,7; 0,8; 0,9; 1,0; 1,1; 1,2; 1,3; 1,4; 1,5; 1,6; 1,7; 1,8; 1,9; 2,0; 2,1; 2,3; 2,5; 2,6; 2,7; 3,0; 3,5; 4,0; 5,5; 6,0; 7,0; 8,0; 9,0; 10; 11; 15$. Начальная температура $T = 10^{-3}$ кэВ, начальная плотность энергии излучения задавалась равной нулю. Расчеты проводились до момента времени $ct = 36$.

Проведена серия расчетов с различными значениями константы C_m из формулы (25). Значения константы брались равными $0; 10^{-4}; 3 \cdot 10^{-4}; 10^{-3}; 10^{-2}; 10^{-1}; 1$ ($C_m = 0$ соответствует счету без равновесных групп).

Результаты расчетов представлены на рис. 1–3 (см. также цветную вкладку). Видно, что наибольшее отличие от точного решения происходит при $C_m = 1$, для остальных констант отклонение не настолько большое.

Как видно из рис. 4 (см. также цветную вкладку), для этой задачи время счета сокращается практически в 2,5 раза при $C_m = 10^{-4}$, в то время как ошибка, вычисленная по формуле (31) для температуры вещества, имеет порядок 10^{-9} . При остальных рассмотренных значениях C_m ошибка еще меньше. Приемлемая ошибка $\approx 10^{-2}$ достигается при $C_m = 10^{-2}$. Отметим, что в этом случае время счета сокращается примерно в 3 раза.

В табл. 1 приведены основные параметры задачи 1 в зависимости от C_m .

Задача 2. Постановка данной задачи практически повторяет задачу 1, за исключением константы χ_0 в формуле (32): значение этой константы было задано $\chi_0 = 27000$. Счет проводился до момента времени $ct = 2250$ с постоянным шагом по времени $\tau = 10^{-4}$.

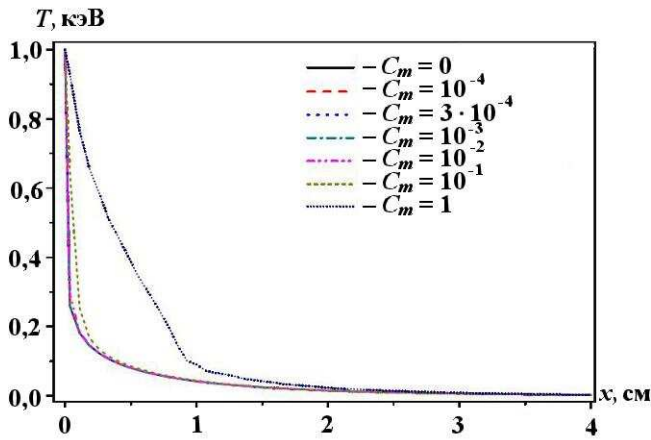


Рис. 1. Задача 1. Зависимость температуры излучения T от координаты x для различных значений C_m

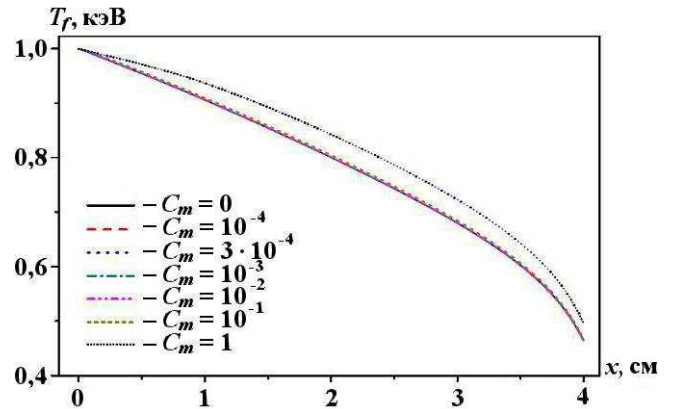


Рис. 2. Задача 1. Зависимость температуры излучения T_f от координаты x для различных значений C_m

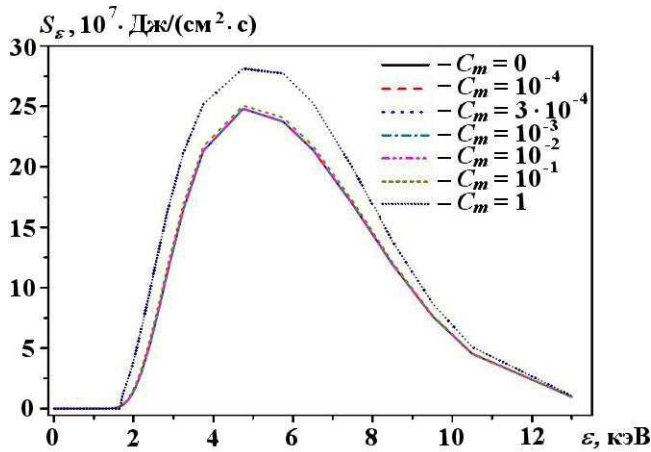


Рис. 3. Задача 1. Зависимость спектрального потока излучения от энергии квантов в точке $x = 2$ для различных значений C_m

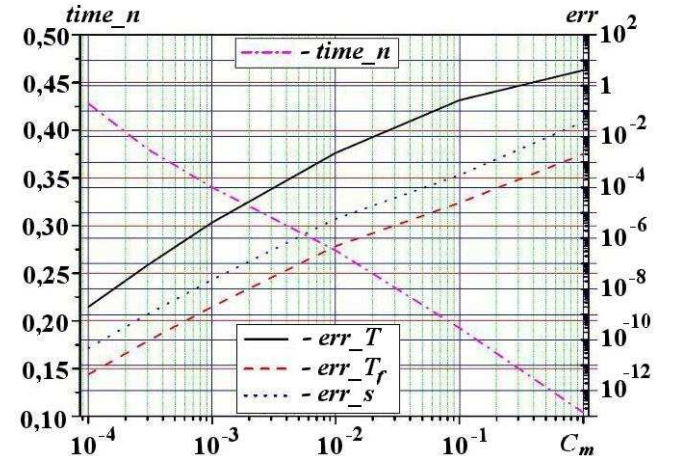


Рис. 4. Задача 1. Зависимости нормированного времени счета задачи (левая ось ординат) и ошибок в норме L_2 (правая ось ординат) от параметра C_m

Таблица 1

Основные параметры задачи 1 в зависимости от C_m

C_m	$time_n$	kol_ur	kol_d_l	kol_d_r	err_T	err_T_f	err_s
0	1	4607	83	83	0	0	0
10^{-4}	0,4281	4125	40	79	$1,98 \cdot 10^{-9}$	$4,34 \cdot 10^{-12}$	$4,76 \cdot 10^{-11}$
$3 \cdot 10^{-4}$	0,3804	3998	38	76	$8,65 \cdot 10^{-8}$	$8,91 \cdot 10^{-11}$	$9,98 \cdot 10^{-10}$
10^{-3}	0,3401	3866	37	73	$4,18 \cdot 10^{-6}$	$2,03 \cdot 10^{-9}$	$2,32 \cdot 10^{-8}$
10^{-2}	0,2738	3567	34	68	0,00231	$4,93 \cdot 10^{-7}$	$5,801 \cdot 10^{-6}$
10^{-1}	0,1926	2940	33	65	0,27065	$2,46 \cdot 10^{-5}$	$3,02 \cdot 10^{-4}$
1	0,1038	1976	29	58	4,08744	0,00204	0,03747

Результаты расчетов приведены на рис. 5–7 (см. также цветную вкладку). Из рисунков следует, что значительное отличие от точного решения наступает при $C_m = 10^{-2}$, при $C_m = 10^{-3}$ отличие заметное, при $C_m = 10^{-4}$; $3 \cdot 10^{-4}$; 0 решение хорошо согласовано с точным решением.

Рис. 8 (см. также цветную вкладку) демонстрирует, что для данной задачи время счета сокращается практически в 10 раз при $C_m = 10^{-4}$, в то время как ошибка, вычисленная по формуле (31) для температуры вещества, имеет порядок 10^{-6} . При остальных рассмотренных значениях C_m ошибка еще меньше. Приемлемая ошибка $\approx 10^{-2}$ достигается при $C_m = 10^{-3}$. Отметим, что в этом случае время счета сокращается примерно в 25 раз.

В табл. 2 приведены основные параметры задачи 2 в зависимости от C_m .

Задача 3. Система состоит из трех физических областей: $x \in \{0; 2\}$ — первая область; $x \in \{2; 2,4\}$ — вторая область; $x \in \{2,4; 4\}$ — третья область. Коэффициент поглощения излучения вычисляется по формуле (32) при $\chi_0 = 27$ в первой и третьей областях и $\chi_0 = 27000$ во второй области. Уравнение состояния вещества взято в виде $E = 0,81T$.

Пространственная сетка — неравномерная в каждой области и взята из работы [8]: $x_0 = 0; 0,004; 0,04; x_3 = 0,1; \dots; x_{21} = 1,9$ (18 интервалов, $h = 0,1$); $x_{22} = 1,987; 1,999; 2; 2,001; 2,004; 2,013; x_{28} = 2,04; \dots; x_{36} = 2,36$ (8 интервалов, $h = 0,004$); $x_{37} = 2,396; 2,4; 2,404; 2,44; x_{41} = 2,5; \dots; x_{56} = 4$

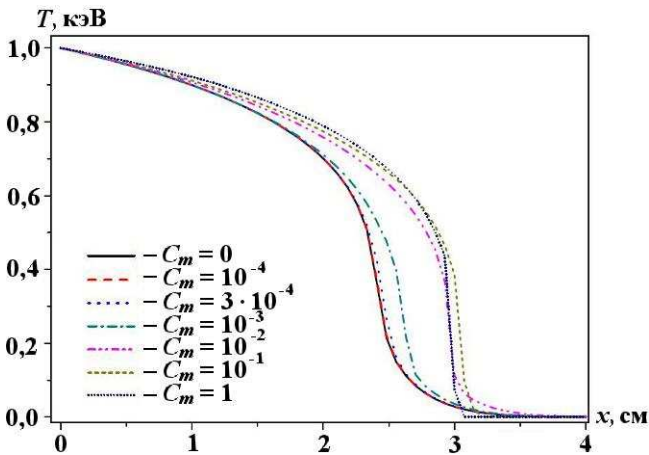


Рис. 5. Задача 2. Зависимость температуры вещества T от координаты x для различных значений C_m

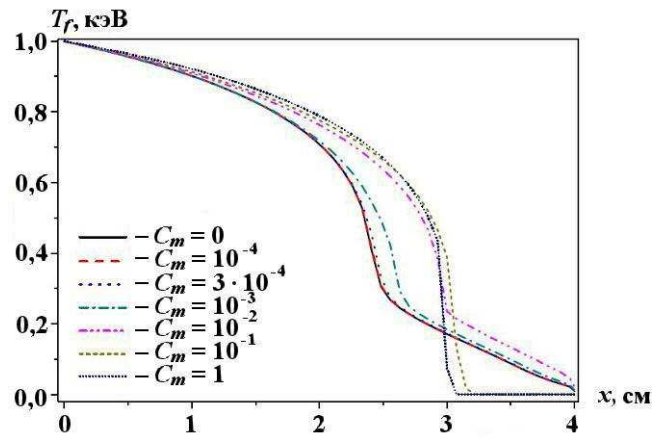


Рис. 6. Задача 2. Зависимость температуры излучения T_f от координаты x для различных значений C_m

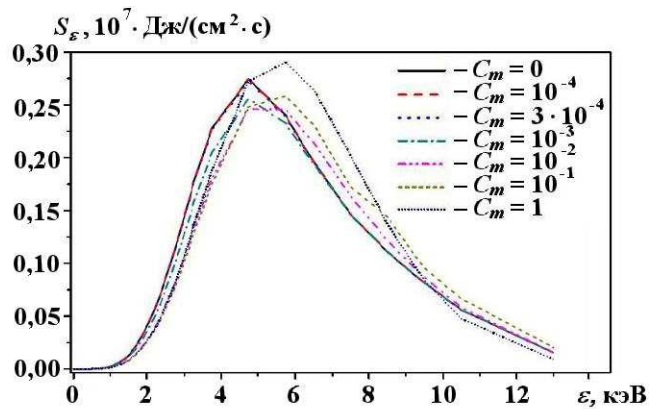


Рис. 7. Задача 2. Зависимость спектрального потока излучения от энергии квантов в точке $x = 2$ для различных значений C_m

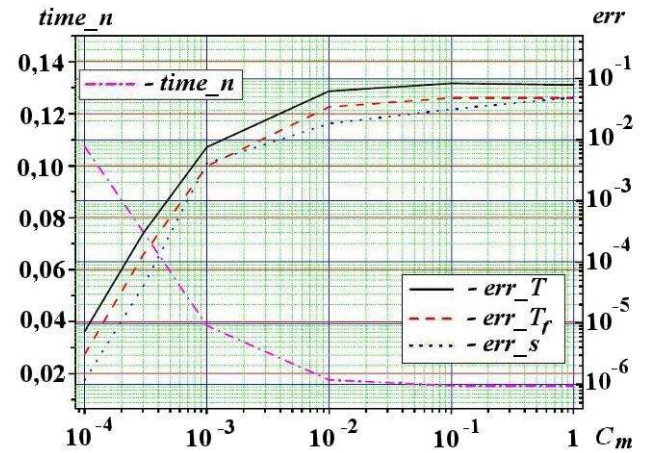


Рис. 8. Задача 2. Зависимости нормированного времени счета задачи (левая ось ординат) и ошибок в норме L_2 (правая ось ординат) от параметра C_m

Основные параметры задачи 2 в зависимости от C_m

C_m	$time_n$	kol_ur	kol_d_l	kol_d_r	err_T	err_T_f	err_s
0	1	4607	83	83	0	0	0
10^{-4}	0,1074	2257	28	56	$7,28 \cdot 10^{-6}$	$3,08 \cdot 10^{-6}$	$1,15 \cdot 10^{-6}$
$3 \cdot 10^{-4}$	0,0747	1828	24	48	$2,91 \cdot 10^{-4}$	$1,29 \cdot 10^{-4}$	$3,98 \cdot 10^{-5}$
10^{-3}	0,0384	1327	17	34	0,00758	0,0037	0,00413
10^{-2}	0,0176	613	8	16	0,06243	0,0343	0,01835
10^{-1}	0,0153	331	5	8	0,0835	0,04814	0,03151
1	0,0153	131	1	2	0,07847	0,04795	0,04896

(15 интервалов, $h = 0,1$). Число интервалов в первой, второй и третьей областях равно 24, 14 и 18 соответственно, всего 56 интервалов по пространству. Сетка по спектру та же, что в задаче 1. Задача считалась с постоянным шагом по времени $\tau = 10^{-5}$. Начальная температура $T = 10^{-3}$ кэВ, начальная плотность энергии излучения задавалась равной нулю. Расчеты проводились до момента времени $ct = 36$. Проведена серия расчетов с различными значениями константы C_m из формулы (25). Значения константы брались равными 0; 10^{-4} ; $3 \cdot 10^{-4}$; 10^{-3} ; 10^{-2} ; 10^{-1} ; 1.

Результаты расчетов представлены на рис. 9–11 (см. также цветную вкладку). Видно, что значительное отличие от точного решения происходит при $C_m = 1$ и $C_m = 0,1$; при остальных значениях решение хорошо согласуется с точным.

Как показано на рис. 12 (см. также цветную вкладку), время счета задачи сокращается практически в 3 раза при $C_m = 10^{-4}$, в то время как ошибка, вычисленная по формуле (31) для температуры вещества, имеет порядок 10^{-7} . Приемлемая ошибка $\approx 10^{-2}$ достигается при $C_m = 10^{-2}$. Отметим, что в этом случае время счета сокращается примерно в 5 раз.

В табл. 3 приведены основные параметры задачи в зависимости от C_m .

Выводы

На примере решения ряда методических задач экспериментально обоснован критерий автоматического выбора равновесной части спектра. Разработан и реализован алгоритм расчета задач с выделением равновесной части спектра применительно к решению задач переноса излучения в

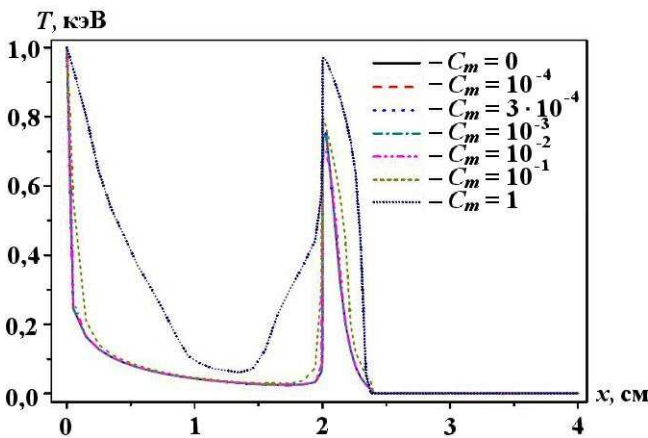


Рис. 9. Задача 3. Зависимость температуры вещества T от координаты x для различных значений C_m

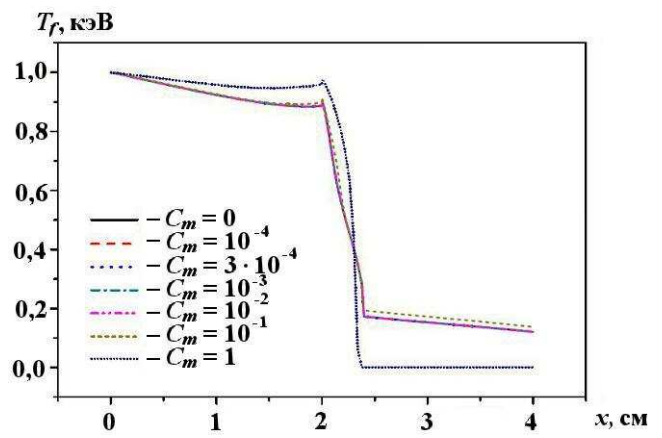


Рис. 10. Задача 3. Зависимость температуры излучения T_f от координаты x для различных значений C_m

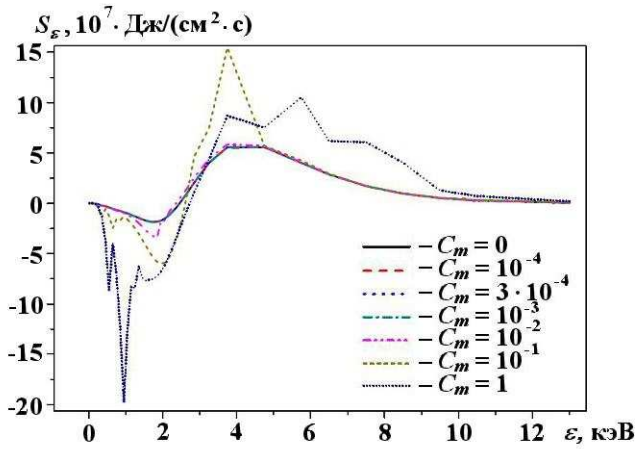


Рис. 11. Задача 3. Зависимость спектрального потока излучения от энергии квантов в точке $x = 2$ для различных значений C_m

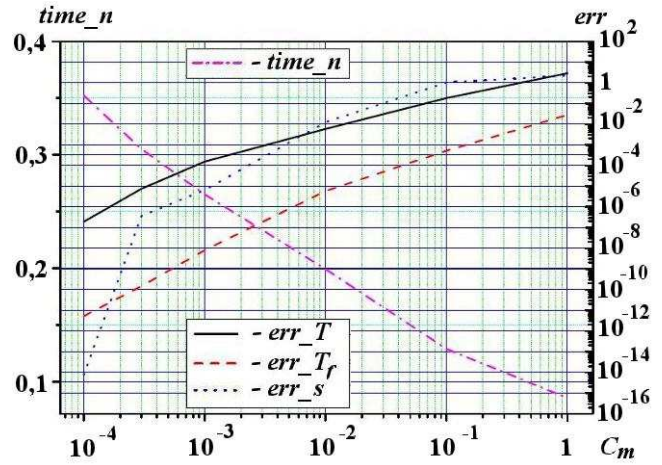


Рис. 12. Задача 3. Зависимости нормированного времени счета задачи (левая ось ординат) и ошибок в норме L_2 (правая ось ординат) от параметра C_m

Таблица 3

Основные параметры задачи 3 в зависимости от C_m

C_m	$time_n$	kol_ur	kol_d_l	kol_d_r	err_T	err_T_f	err_s
0	1	4 607	83	83	0	0	0
10^{-4}	0,3523	3 882	39	78	$1,91084 \cdot 10^{-7}$	$5,26012 \cdot 10^{-12}$	$7,62988 \cdot 10^{-15}$
$3 \cdot 10^{-4}$	0,305	3 690	38	76	$7,55658 \cdot 10^{-6}$	$1,45915 \cdot 10^{-10}$	$3,61404 \cdot 10^{-7}$
10^{-3}	0,2651	3 463	37	73	$1,53616 \cdot 10^{-4}$	$8,08384 \cdot 10^{-9}$	$6,4898 \cdot 10^{-6}$
10^{-2}	0,1991	3 019	35	69	0,00591	$5,83858 \cdot 10^{-6}$	0,01251
10^{-1}	0,1288	2 416	33	66	0,182	$5,24257 \cdot 10^{-4}$	1,04642
1	0,0856	1 677	33	65	2,91617	0,0285	2,20422

спектральной диффузионной постановке. Показано, что применение данного алгоритма без существенной потери точности в несколько раз сокращает время счета задачи.

Список литературы

1. Feautrier P. C. // Acad. Sci. Paris. 1964. Vol. 258. P. 3198.
2. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
3. Канторович Л. В. О методе Ньютона // Труды Математического института АН СССР. 1949. Т. 28. С. 104–144.
4. Дегтярёв Л. М., Фаворский А. П. Поточковый вариант метода прогонки // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1968. Т. 8, № 3. С. 679–684.
5. Карлыханов Н. Г., Селиванова Н. В. Об одном алгоритме склейки кинетического уравнения с P_1 -приближением уравнения переноса излучения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2012. Вып. 2. С. 51–63.
6. Барышева Н. М., Зуев А. И. Об устойчивости прогонки для нелинейного уравнения теплопроводности // Числ. методы мех. спл. среды. 1980. Т. 11, № 1. С. 12–19.
7. Fleck J. A., Cummings Jr. J. D. An implicit Monte Carlo scheme for calculating time and frequency depend nonlinear radiation transport // J. Comp. Phys. 1971. Vol. 8. P. 313–342.

8. Завьялов В. В., Козманов М. Ю., Селезнёв В. Н. и др. Результаты численных расчетов одномерных тестовых задач переноса излучения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2005. Вып. 3. С. 26—36.

Статья поступила в редакцию 20.01.15.

APPLICATION OF THE ALGORITHM IDENTIFYING AN EQUILIBRIUM PART OF SPECTRUM DURING THE SIMULATION OF THE RADIATION TRANSPORT PROBLEMS WITH SPECTRAL DIFFUSION / N. G. Karlykhanov, I. V. Chindyaev (FSUE "RFNC-VNIITF", SPhTI OF NNRU MPhI, Snezhinsk).

The issues of constructing an algorithm identifying an equilibrium part of spectrum, which has been used to solve the radiation transport problems with spectral diffusion, are discussed. The algorithm implementation includes the automatic selection of equilibrium groups, as well as the account of the resulting internal boundary conditions. The method applicability is illustrated by the example of solving a number of problems.

Keywords: radiation transport, spectral diffusion, identification of an equilibrium part of spectrum.

УДК 004.4'2

ЯЗЫКОВОЙ СЕРВИС FRIS ДЛЯ ЭФФЕКТИВНОЙ РАЗРАБОТКИ FORTRAN-ПРИЛОЖЕНИЙ. ОБЗОР ВОЗМОЖНОСТЕЙ

И. С. Раткевич

(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Рассматриваются возможности языкового сервиса FRIS по расширенной поддержке эффективной разработки приложений на языке программирования Fortran в Microsoft Visual Studio. Проводится сравнение возможностей FRIS с имеющимися в наиболее распространенных аналогах от Intel и PGI.

Ключевые слова: FRIS, Fortran Intelligent Solutions, расширение Visual Studio, языковой сервис, Fortran-2003.

Введение

В настоящее время для большинства языков программирования существует множество интегрированных сред разработки приложений, которые позволяют решать самые разнообразные задачи, начиная от написания текста и заканчивая отладкой и автоматическим тестированием полученного приложения.

Для программирования в операционной системе Windows наиболее распространенной средой разработки является Microsoft Visual Studio (VS). Она поставляется с интеграциями для языков программирования, поддерживаемых Microsoft, например C++, C#, Visual Basic, которые реализуют широкие возможности по поддержке программиста при написании текста программы, предоставляя множество списков автоматического дополнения элементов программы и разнообразные виды контекстной помощи. Необходимо отметить, что VS является расширяемой и позволяет дополнять свои базовые возможности практически любым функционалом, например вводить поддержку новых языков программирования.

Однако далеко не все интеграции для поддержки языков программирования реализуют все доступные возможности. Сказанное в полной мере относится к наиболее распространенным интеграциям для языка Fortran [1] от Intel [2] и PGI [3]: разработка приложений с их помощью менее эффективна, чем могла бы быть. Именно такая ощутимая разница между Fortran

и базовыми языками от Microsoft явилась основанием для разработки FRIS.

FRIS — это языковой сервис, являющийся расширением для Microsoft VS, который поддерживает все возможности технологии IntelliSense [4] для языка программирования Fortran с использованием стандарта Fortran-2003 [1], повышая эффективность разработки Fortran-приложений.

IntelliSense является ключевой технологией, которая используется в VS для быстрой разработки приложений и обеспечивает возможности поддержки:

- списка членов типов данных (List Members);
- сведений о параметрах подпрограмм и функций (Parameter Info);
- кратких сведений об элементе языка программирования (Quick Info);
- завершения слова или автодополнения (Complete Word).

Эти возможности ускоряют процесс программирования, позволяя улучшить качество разрабатываемых программ и уменьшить время разработки за счет расширения видов контекстной помощи. Возможности IntelliSense отчасти реализованы в интеграциях Fortran от Intel и PGI.

Основные возможности и особенности FRIS

В настоящее время FRIS может функционировать в Microsoft VS 2005/2008/2010. К основ-

ным возможностям, реализованным во FRIS, относятся:

- подсветка синтаксиса;
- выделение структурных элементов кода;
- поддержка панели навигации в текущем документе;
- поддержка XML-комментариев документирования;
- все функции технологии IntelliSense:
 - поддержка списка элементов производных типов данных;
 - поддержка списков автодополнения;
 - отображение сведений о параметрах подпрограмм и функций;
 - отображение кратких сведений об элементе языка программирования;
- переход к определению элемента языка программирования;
- работа со сниппетами (фрагментами) исходного кода;
- работа с панелью *Список ошибок (Error List)*;
- общий механизм расширенной поддержки произвольных (пользовательских) библиотек программ:
 - выделение цветом элементов библиотек в файле исходного кода;
 - предоставление контекстной помощи об элементах библиотек;
 - поддержка встроенных функций и подпрограмм Fortran-2003; библиотек УРС-ОФ [5], используемой при расчете уравнений состояния, и ЕФР [6] для параллельного ввода-вывода сеточных данных.

Отличительной особенностью FRIS является обработка программы, которую редактирует программист в VS, в реальном времени.

В подавляющем большинстве случаев в момент редактирования текст программы является недопустимым с точки зрения лексических и синтаксических правил языка. Это представляет значительную сложность для классической реализации соответствующих анализаторов, поскольку они, как правило, ориентированы на работу с полными грамматиками в предположении, что тексты анализируемых программ не содержат ошибок. В случае обнаружения ошибки такие анализаторы прекращают дальнейший разбор файла исходного кода.

Во FRIS эта сложность преодолевается оригинальной стратегией лексического, синтаксичес-

кого и семантического разбора. Анализаторы, разработанные и используемые во FRIS, построены с применением генератора анализаторов ANTLR [7] и имеют свои особенности. В частности, разбор осуществляется при помощи стратегии LL(*) [7], включающей разбор с возвратами, сохранением обнаруженных альтернатив разбора и использованием предикатов.

При лексическом анализе неизвестные символы исключаются из входного потока и токены для них не формируются. При синтаксическом анализе, когда фактическая последовательность токенов не соответствует ни одному из возможных правил, возникает ошибка разбора, которую перехватывает FRIS. Он использует специально разработанное правило, которое позволяет обработать такую (недопустимую) последовательность токенов. После этого разбор продолжается.

Рассмотрим более подробно перечисленные выше возможности FRIS.

Подсветка синтаксиса (рис. 1, см. также цветную вкладку) — это выделение цветом различных смысловых частей исходного кода: ключевых слов, строковых литералов, комментариев и т. п. Отличительной особенностью FRIS является возможность выделения цветом элементов библиотек конечного пользователя, а также XML-комментариев документирования.

Выделение структурных элементов (см. рис. 1) позволяет наглядно представить структуру исходного кода путем выделения в самостоятельный блок текста программы между парными конструкциями, например подпрограммы, модуля, условного оператора, оператора цикла и т. п.

Панель навигации (в верхней части рис. 1) позволяет быстро переходить к интересующим элементам, расположенным в текущем файле. Она состоит из двух выпадающих списков. Левый предназначен для отображения информации об областях видимости (модулях и типах), правый — об их членах.

Поддержка XML-комментариев документирования является одной из ключевых возможностей FRIS. Такие комментарии используются для документирования программного кода, а их содержимое включается в выводимые средой разработки контекстные подсказки. При этом комментарий должен иметь следующий вид:

```
!!!<Имя тэга>
```

```
!!!Текст комментария. . .
```

```
!!!</Имя тэга>
```

```

( ) (глобальная область видимости)
!!!<summary>
!!!Модуль для тестирования работы FRIS
!!!</summary>
module TestMod
implicit none
#Директива препроцессора
!Комментарий
!!!<summary>Комментарий документирования</summary>
character(255) :: str = "Строка"
!!!<summary>Пример BOZ констант</summary>
integer(4) :: myInt = b'11' + o'87' + z'FA01'
!!!<summary>Пример логической константы и оператора</summary>
logical(4) :: myFlag = .false. .and. .true.

```

Рис. 1. Текст редактора с использованием языкового сервиса FRIS

FRIS трактует любой комментарий, начинающийся с последовательности из трех восклицательных знаков ("!!!") как комментарий документирования, за которым может следовать один или несколько XML-тэгов документирования. Например, тэг **summary** служит для краткого описания общей информации. Полный список поддерживаемых комментариев документирования приведен на рис. 2.

FRIS обеспечивает возможность *построения списка элементов*, определенных в различных типах данных, с учетом механизма наследования типов. Поддерживается работа со всеми компонентами производных типов данных, включая связанные с типом процедуры. На рис. 3 показано применение данной возможности. При этом в список элементов данных производного наследуемого типа включен особый компонент **secondtype** — ссылка на базовый тип данных. На рис. 4 показан пример работы с процедурами, связанными с типом данных.

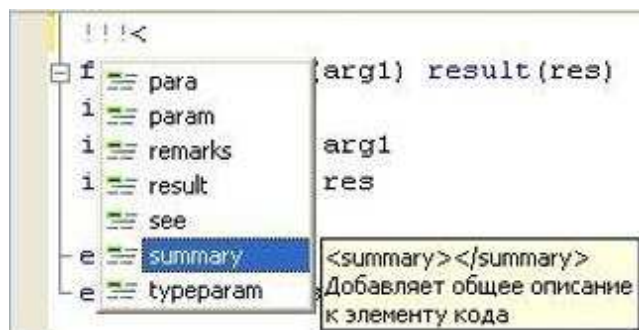


Рис. 2. Поддерживаемые во FRIS комментарии документирования

Автодополнение является основополагающей возможностью для быстрой разработки приложений. Во FRIS реализованы возможности автодополнения:

- имен модулей;
- имен производных типов данных;
- имен переменных, доступных в текущей области видимости;
- имен подпрограмм.

Рис. 5 демонстрирует автодополнение имен переменных, доступных в текущей области видимости, для правой части оператора. В правой части оператора могут появиться переменные (**b, c, ex, i**), константы (**real_value**), в том числе члены перечислений (enum) (**blue, green, orange, red**), и функции (**fun1**). На принадлежность переменной к одной из перечисленных групп указывает пиктограмма, расположенная слева от ее имени.

Отображение сведений о параметрах подпрограмм и функций (процедур) позволяет работать

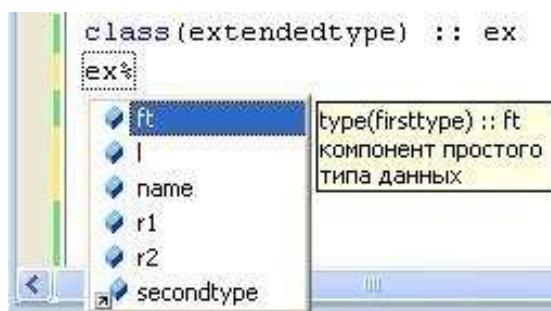


Рис. 3. Список компонентов производного наследуемого типа

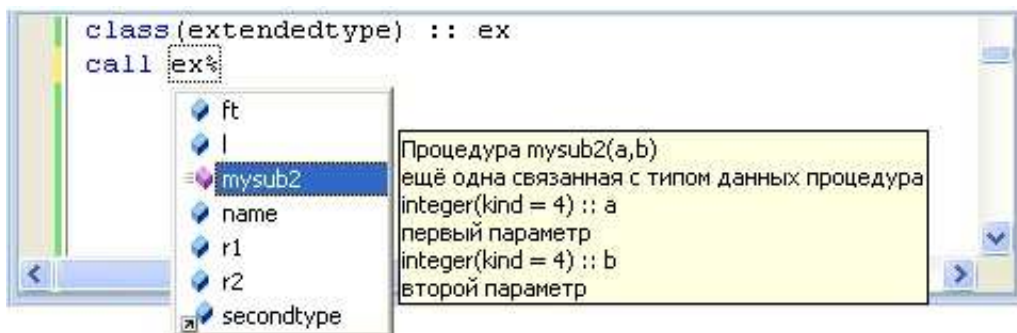


Рис. 4. Работа с процедурами, связанными с типом данных

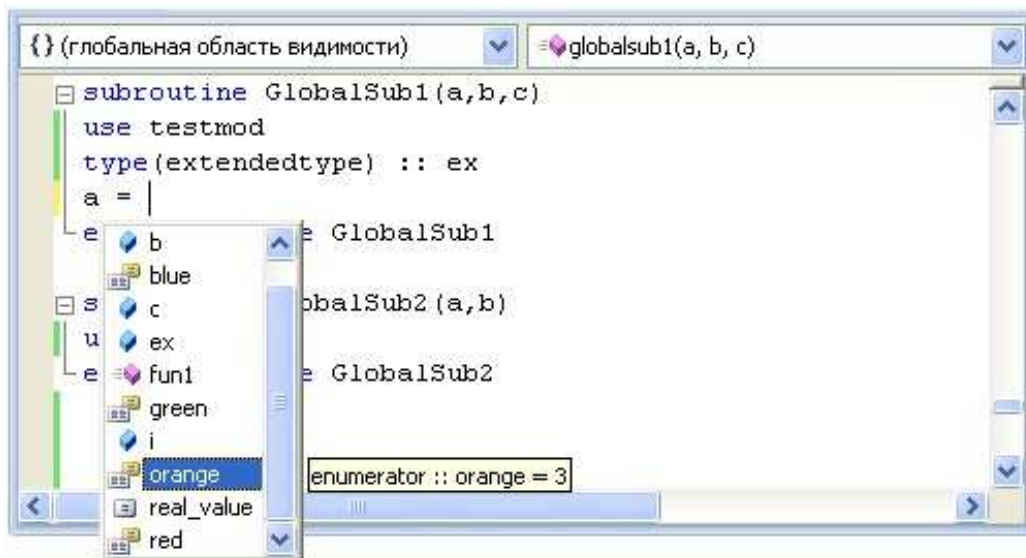


Рис. 5. Автодополнение имен переменных, доступных в текущей области видимости, для правой части оператора

с процедурами, точную сигнатуру которых Fortran-программист может не знать. Вся необходимая информация о наличии перегруженных процедур, их аргументах, их количестве, названиях и типах данных будет отображена во всплывающей подсказке (рис. 6).

FRIS поддерживает работу с родовыми (обобщенными) интерфейсами, когда для группы процедур объявляется одно имя (рис. 7).

К отображению кратких сведений об элементе языка программирования относится любая контекстная помощь, отображаемая в виде подсказок. В контекстные подсказки, выводимые FRIS, включается информация, полученная не только из определения элемента языка программирования, но и из комментариев документирования (рис. 8).

Довольно часто встречающейся на практике задачей является переход к определению того

или иного элемента языка программирования для получения наиболее полной информации о нем (рис. 9).

FRIS поддерживает работу со *снимками* (фрагментами) исходного кода. Снимок представляет собой некоторый шаблонный фрагмент исходного кода, в котором могут содержаться пустые, предназначенные для заполнения места. Создание и использование таких шаблонов существенно ускоряет процесс разработки программного обеспечения.

Необходимо отметить, что все доступные снимки включаются FRIS в списки автодополнения (рис. 10). Снимки снабжены заготовками для комментариев документирования. На рис. 11 показан результат вставки снимка FRIS для модуля.

Сразу после вставки снимка происходит переход в режим его редактирования. В этом ре-

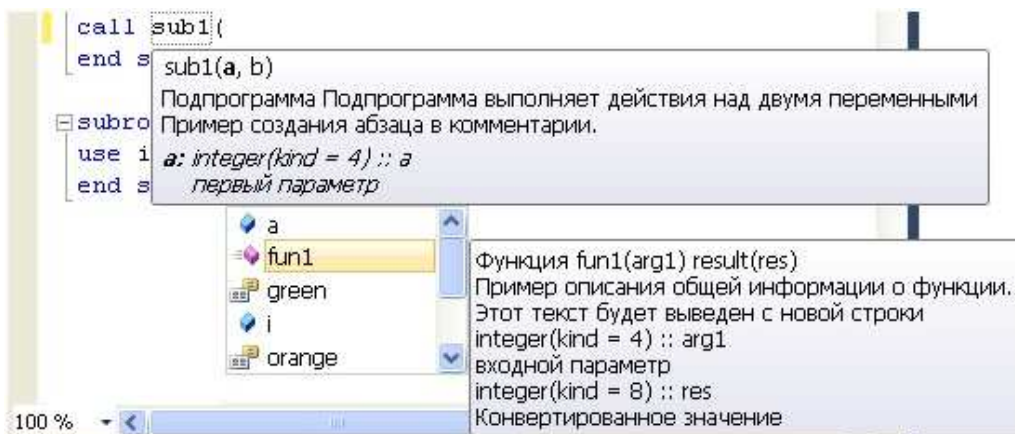


Рис. 6. Отображение параметров подпрограммы и автодополнение ее аргументов

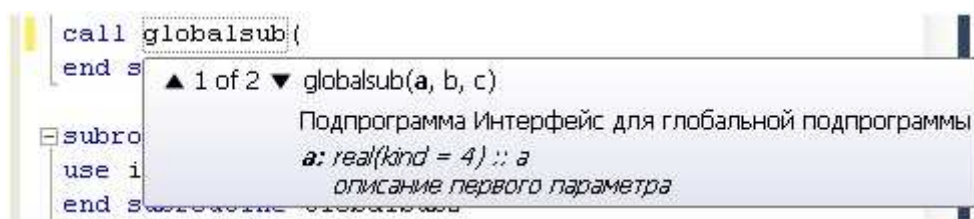


Рис. 7. Отображение параметров для родового интерфейса

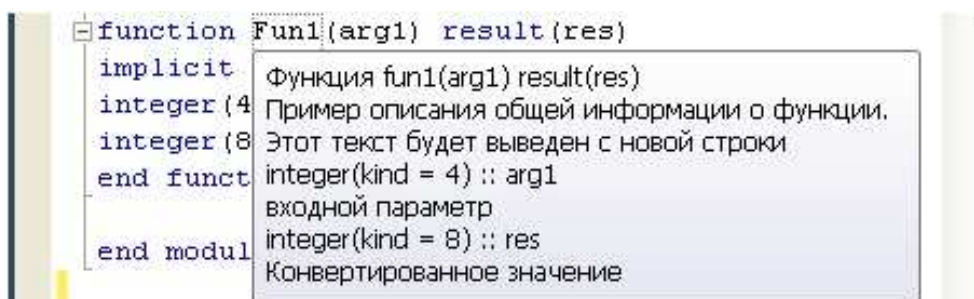


Рис. 8. Отображение информации о функции

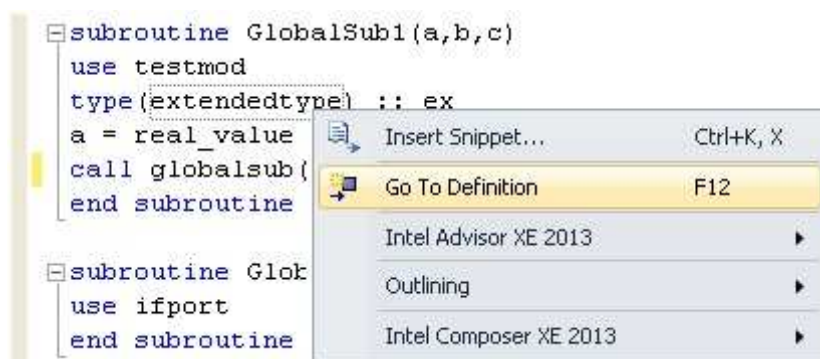


Рис. 9. Переход к определению производного типа данных

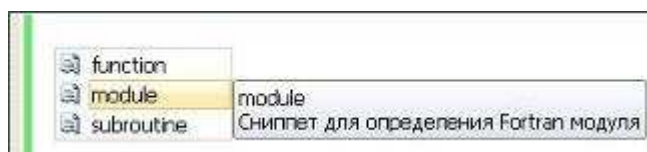


Рис. 10. Сниппеты исходного кода в списке автодополнения



Рис. 11. Вставка сниппета FRIS для модуля

жиме пользователь может заполнить шаблонные части нужными значениями. Переход между шаблонными частями осуществляется при помощи клавиши **<Tab>**, ввод шаблонной части заканчивается нажатием клавиши **<Enter>**.

FRIS поддерживает работу с панелью *Список ошибок (Error List)*, которая предназначена для вывода сообщений об обнаруженных ошибках. На данный момент *Список ошибок* содержит предупреждения, относящиеся к работе с комментариями документирования, а также сообщения о грубых синтаксических ошибках (рис. 12).

Особенностью FRIS является возможность *поддержки произвольных библиотек*, которая включает в себя:

- 1) предоставление контекстно-зависимой помощи для элементов библиотеки;
- 2) обозначение цветом элементов библиотеки.

Первая задача решается автоматически, если определения модулей, производных типов данных, интерфейсов, подпрограмм и функций библиотеки содержатся в файлах исходного кода, непосредственно подключаемых к программному проекту. В РФЯЦ-ВНИИЭФ таким способом подключаются библиотеки УРС-ОФ и ЕФР.

Если для подключения библиотек используются не файлы исходного кода, а, например, двоичные файлы *.mod, то используются специаль-

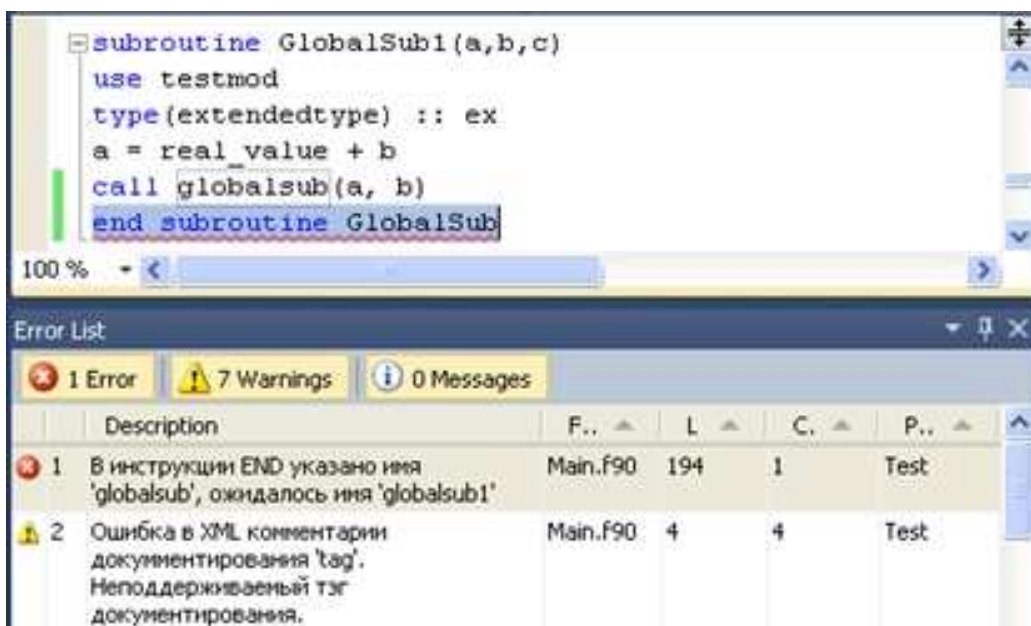


Рис. 12. Поддержка работы с панелью *Список ошибок*

ные XML-файлы, в которых содержатся описания необходимых программных элементов: модулей, подпрограмм, функций, типов данных и т. п. Заметим, что для описания каждой библиотеки используются два файла: первый содержит описание прикладных программных интерфейсов библиотеки в специально разработанном автором формате Fortran API, второй — документацию к элементам библиотеки. Реализована возможность по автоматическому созданию та-

ких файлов для выбранного программного проекта. Еще одна задача, которая может быть решена с использованием данных файлов, — это генерация документации пользователя или разработчика библиотеки с использованием специализированных программ автоматической генерации документации, например Sandcastle [8].

Примером подключения библиотеки с использованием XML-файлов являются встроенные в язык подпрограммы и функции. На рис. 13

```

<!--Описание интерфейса функции-->
<api id="M:ACHAR(I, [KIND])">
  <!--Указываем, данные об элементе-->
  <apidata name="ACHAR" group="method" subgroup="function" />
  <!--указываем что это элементарный метод-->
  <methoddata elemental="true"/>
  <!--Указываем, что это функция-->
  <functiondata />
  <!--Описание аргументов функции-->
  <parameters>
    <!--Имя, использование - только входной-->
    <parameter name="I" intent="in">
      <!--Указываем, что это переменная-->
      <variabledata/>
      <!--Указываем тип данных. Целочисленный, с размерностью по умолчанию-->
      <type api="T:integer"/>
    </parameter>
    <!--Имя, использование - только входной, необязательный-->
    <parameter name="KIND" intent="in" optional="true">
      <!--Указываем, что это переменная-->
      <variabledata/>
      <!--Указываем тип данных. Целочисленный, с размерностью по умолчанию-->
      <type api="T:integer"/>
    </parameter>
  </parameters>
  <!--Указываем имя результирующего значения-->
  <result name="ACHAR">
    <!--Указываем, что это переменная-->
    <variabledata/>
    <!--Указываем тип данных возвращаемого значения. Символьный, единичной
длинны, с размерностью KIND, либо по умолчанию-->
    <type api="T:character(len=1,kind=KIND)"/>
  </result>
  <!--Указываем где содержится элемент, т.е. обратную связь-->
  <containers>
    <!--Имя библиотеки-->
    <library assembly="intrinsics"/>
    <!--Указываем имя родительского элемента - глобальная область видимости-->
    <element api="N:"/>
  </containers>
</api>

```

Рис. 13. Пример API-описания для функции ACHAR

представлен пример API-описания для встроенной функции ACHAR, а на рис. 14 — ее документации.

Расширенная поддержка библиотек конечно-го пользователя в части визуального выделения элементов библиотек демонстрируется на примере библиотеки УРС-ОФ (рис. 15), который показывает, что данная возможность позволяет визуально акцентировать внимание пользователя на наиболее важных элементах библиотеки.

Аналогично осуществляется поддержка библиотеки ЕФР. На рис. 16 приведен пример возможности получения информации об аргументах процедуры для перегруженной подпрограммы библиотеки ЕФР.

Сравнение возможностей FRIS и других языковых сервисов

В таблице сравниваются возможности FRIS и языковых сервисов от Intel и PGI.

Необходимо отметить, что языковой сервис FRIS не только осуществляет полную поддержку технологии IntelliSense, но и предоставляет существенно больше возможностей по расширению данной поддержки. Например, он позволяет пользователю документировать элементы своей программы и получать затем эти сведения во всех видах контекстной помощи. Немаловажна также возможность работы с произвольными библиотеками конечно-го пользователя. Благодаря разработанной модели Fortran API и ком-

```

<?xml version="1.0" encoding="utf-8" ?>
<doc>
  <!--Указываем все элементы, для которых есть документация-->
  <members>
    <!--Документация для одного элемента-->
    <!--13.7.2 ACHAR (I [, KIND])-->
    <member name="ACHAR(I, [KIND])">
      <summary>
        Возвращает символ, находящийся в указанной позиции в схеме упорядочения ASCII. Это инверсия значения функции IACHAR.
      </summary>
      <param name="I">
        Номер позиции, типа integer
      </param>
      <param name="KIND">
        Необязательный параметр, размерность типа возвращаемого значения
      </param>
      <result>Символ character(len=1,kind=[kind])</result>
    </member>
  </members>
</doc>

```

Рис. 14. Пример документации к функции ACHAR

```

type(UrsOfData) ofdata
call ReleaseUrsOf(ofdata,ko,kan)

```

↓

```

type(UrsOfData) ofdata
call ReleaseUrsOf(ofdata,ko,kan)

```

Рис. 15. Подсветка синтаксиса УРС-ОФ (сверху отсутствует, снизу присутствует)

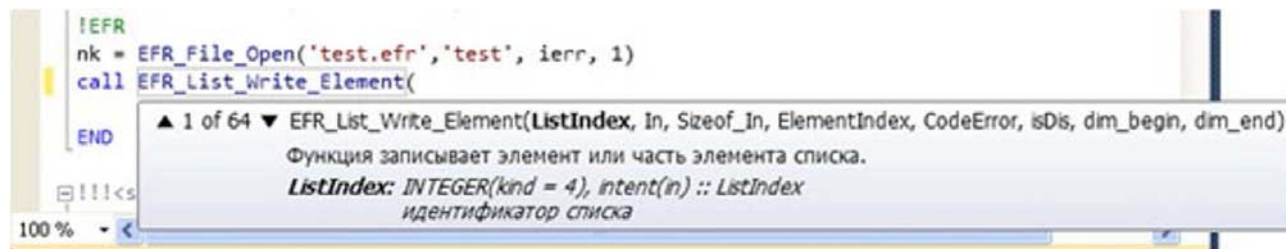


Рис. 16. Работа с перегруженными подпрограммами ЕФР

Сравнение возможностей FRIS и языковых сервисов от Intel и PGI

Возможность	Intel	PGI	FRIS
Построение списка членов типов данных	Отсутствует	Отсутствует	Есть
Отображение сведений о параметрах подпрограмм и функций	Есть, за исключением методов, связанных с типом данных, и перегруженных методов с использованием родového интерфейса	Только для встроенных подпрограмм и функций	Есть
Отображение кратких сведений об элементе языка программирования	Есть, за исключением полей и методов производных типов данных	Только для встроенных подпрограмм и функций	Есть
Автодополнение	Для имен модулей и подпрограмм, и функций	Только для ключевых слов	Есть
Поддержка сниппетов исходного кода	Есть, но только как команды меню	Нет	Есть. Сниппеты во FRIS включены в списки автодополнения
Поддержка комментариев документирования	Нет	Нет	Есть
Поддержка библиотек конечного пользователя	Нет	Нет	Есть

ментариям документирования можно получать оперативную помощь по функциям библиотеки, даже если тексты библиотеки недоступны.

Заключение

Создан языковой сервис FRIS, который предназначен для повышения производительности разработки Fortran-приложений. Реализованная во FRIS расширенная поддержка XML-комментариев документирования позволяет получать контекстно-зависимую помощь об используемых элементах языка программирования без обращения к специализированным справоч-

ным системам. С помощью механизма работы со сниппетами исходного кода пользователь может создавать и повторно использовать полноценные библиотеки шаблонов кода, а включение сниппетов в списки автодополнения обеспечивает мгновенный доступ к ним.

Особым видом адаптации к требованиям конечного пользователя является обеспечение расширенной поддержки пользовательских библиотек программ. В частности, FRIS может предоставлять возможности визуального выделения тех или иных элементов в файле исходного кода для акцентирования внимания пользователя. Для этого реализовано два универсальных под-

хода: первый из них заключается в автоматической обработке файлов исходного кода на языке Fortran, второй — в создании специальных XML-файлов с описанием программных компонентов, экспортируемых библиотек.

Разработанная модель прикладных программных интерфейсов Fortran-элементов (Fortran API) вместе с комментариями документирования, сохраняемыми в виде двух XML-файлов, позволяют в дальнейшем задействовать программы автоматической генерации документации пользователя или программиста библиотеки программ.

На основе средств расширенной поддержки библиотек реализована "интеллектуальная" поддержка использования библиотек УРС-ОФ и ЕФР, а в будущем планируется поддержка средств параллельного программирования MPI3.0 и OpenMP4.0.

Использование FRIS при разработке Fortran-приложений повышает производительность труда за счет предоставления различных видов контекстной помощи. Ранее Fortran-программист был вынужден знать наизусть имена всех используемых им функций, модулей, переменных и типов данных либо проводить полнотекстовый поиск для их уточнения. Теперь в этом нет необходимости. Использование FRIS особенно полезно при командной работе над одним проектом.

Список литературы

1. Information technology. Programming languages. Fortran. Part 1: Base Language.

ISO/IEC 1539-1:2004. ISO Publications Department.

2. Intel® Fortran Composer XE 2013 SP1 Release Notes. <http://software.intel.com/enus/articles/intel-fortran-composer-xe-2013-sp1-release-notes>.
3. PGI Visual Fortran. <http://www.pgroup.com/products/pvf.htm>.
4. Using IntelliSense. [http://msdn.microsoft.com/enus/library/hcw1s69b\(v=vs.110\).aspx](http://msdn.microsoft.com/enus/library/hcw1s69b(v=vs.110).aspx).
5. Гордеев Д. Г., Голубкова Е. Ф., Гударенко Л. Ф. и др. Современное состояние пакета программ УРС-ОФ для расчета термодинамических и механических свойств веществ // 12 Межд. конф. "Супервычисления и математическое моделирование". г. Саров, 11—15 ноября 2010 г.
6. Волгин А. В., Тарасов В. И., Красов А. В., Кузнецов М. Ю. Библиотека ЕФР для универсального представления расчетных данных // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. Вып. 11. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2007. С. 130—135.
7. Parr T. Language Implementation Patterns. The Pragmatic Bookshelf, Raleigh, NC and Dallas, TX, 2009.
8. Eric Woodruff's Sandcastle Help File Builder Documentation. <http://ewsoftware.github.io/SHFB/html/bd1ddb51-1c4f-434f-bb1ace2135d3a909.htm>.

Статья поступила в редакцию 26.02.15.

FRIS LANGUAGE SERVICE FOR THE EFFECTIVE DEVELOPMENT OF FORTRAN APPLICATIONS: A REVIEW OF CAPABILITIES I. S. Ratkevich (FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, Nizhny Novgorod region).

The FRIS language service capabilities providing an extended support for the effective development of Fortran applications in Microsoft Visual Studio are discussed. The FRIS capabilities are compared with those of the most commonly used analogs by Intel and PGI.

Keywords: FRIS, Fortran Intelligent Solutions, Visual Studio extension, language service, Fortran-2003.

УДК 519.6

АНАЛИЗ И ОЦЕНКА СИСТЕМ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

В. Л. Авербух, О. Г. Анненкова, М. О. Бахтерев, Д. В. Манаков
(ИММ УрО РАН, УрФУ, г. Екатеринбург)

Рассмотрены подходы к визуализации трасс и графов вызовов *параллельных* программ на основе использования ряда метафор визуализации программного обеспечения. Проведен анализ применимости метафор на основе критериев оценки визуализации. Приведены примеры использования средств визуального сопровождения разработки системного программного обеспечения нижнего уровня для современных процессоров с параллельной архитектурой.

Авторы ставят проблему формального описания и/или верификации визуализации.

Ключевые слова: визуализация программного обеспечения, трасса выполнения, граф вызовов, метафора визуализации.

Введение

Под визуализацией программного обеспечения (ПО) — *Software Visualization* — понимается совокупность методик использования компьютерной графики и средств взаимодействия человека и машины, применяемых для спецификации и представления программных объектов и сущностей в процессе создания, отладки и анализа программ, а также для эффективной эксплуатации ПО. Наиболее перспективными представляются системы визуализации ПО параллельных и распределенных вычислений, прежде всего средства отладки правильности и эффективности *параллельных* программ [1–3]. При этом возникает задача отображения фактической структуры алгоритмов и программ, состояния потоков управления и данных, отдельных элементов структур данных, последовательности обменов и других программных событий, для чего естественно применение анимации.

Изучение литературы, посвященной практике использования средств визуализации ПО параллельных вычислений, указывает на определенный застой в этой области. Попытки создать универсальные системы, предпринятые в 90-е годы прошлого века, в целом не увенчались успехом, что объясняется целым рядом причин, в том числе недостаточным вниманием со стороны

проектировщиков к тем аспектам систем, которые можно отнести к проблемам человеческого фактора. В рассматриваемом случае человеческий фактор касается в основном задач проектирования адекватных видов отображения для сред визуализации, а также трудностей восприятия больших объемов сложно структурированных визуальных данных. В связи с этим необходима система качественных и формализованных оценок визуализации.

Данная работа посвящена вопросам анализа и оценки систем визуализации ПО, прежде всего методов представления трасс и графов вызовов параллельных программ.

Визуализация трасс и графов вызовов программ

Трассы программ и их графы вызовов применяются в том или ином виде во многих отладочных системах для описания динамики выполнения программ. Трасса программы отображает динамику конкретного выполнения программы. Визуализация и "проигрывание" трасс программ является важным элементом отладочных систем. Визуальное представление графа вызовов активно используется в системах отладки (настройки) производительности параллельных программ.

В системах отладки 70-х и 80-х годов XX века часто применялись методы, основанные на представлении программы в виде какой-либо схемы или диаграммы. Соответственно трасса отображалась в виде "прыжков" по схеме/диаграмме с изменением интенсивности закрашки фона элемента схемы, на который переходило управление. Также имело место использование "прохода" (точнее "пробега") по тексту программы с выделением цветом текущей позиции. В случае высокопроизводительных вычислений такие методы визуализации малопригодны.

В целом ряде систем, включая разработанные для "промышленного" счета в последние годы, реализованы наборы комплексных видов отображения, включающих использование различных модификаций статистических диаграмм [4]. В системе Zinsight [5] имеет место отображение потока событий в виде последовательности цветных линий (рис. 1). Диаграммы используются для визуализации статистики выполнения по событиям и схем, отображающих последовательность переключения контекста. В публикациях [6, 7] описывается использование набора двумерных видов отображения для визуализации трасс сложных программных комплексов. Этот набор включает диаграмматические и текстовые представления как структуры программы, так и ее выполнения за счет показа последовательности событий. Анализ и интерпретация проводятся пользователями в ходе (и за счет) взаимодействия с визуальными объектами. Для увеличения возможностей по восприятию данных используется анимация. Так, в системе SYNCTRACE [8] для представления трассы многонитевых программ применены двумерные виды отображения, основанные на модификации круговых диаграмм и содержащие возможность анимации выполняемых участков кода (рис. 2). В работах [9, 10] для представления трассы также используются комплексные виды отображения, сочетающие представление вызовов основных программных сущностей системы в хронологическом порядке и методику визуализации, опирающуюся на метафору *круговых узелков* (circular bundles). При этом используются специальные круговые диаграммы, в которых все сущности проецируются на окружность, а отношения между ними отображаются в виде сплетений (узелков) в центре (рис. 3).

Полученные виды отображения оцениваются с применением критерия качества информационной визуализации, основанного на весь-

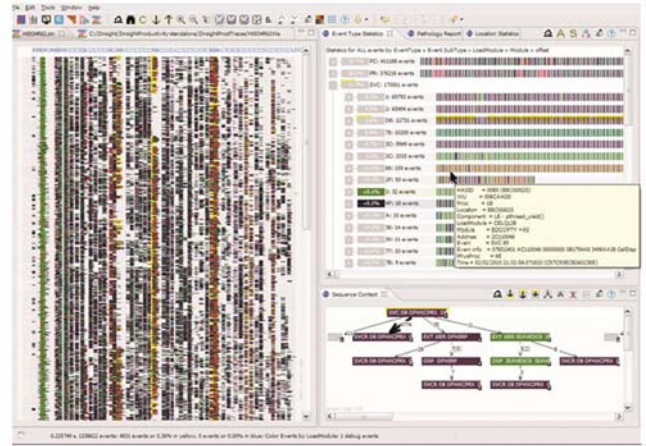


Рис. 1. Визуализация трассы в системе Zinsight [5]



Рис. 2. Основное окно системы SYNCTRACE [8]

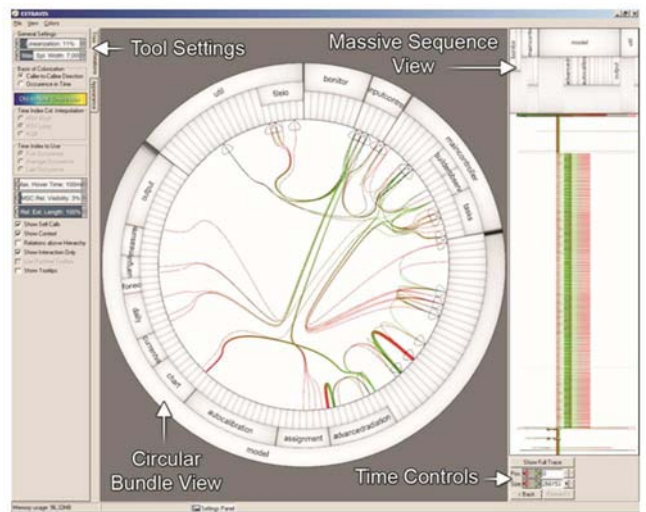


Рис. 3. Визуализации трассы в виде узелков [9, 10]

ма популярной схеме анализа визуальных данных, предложенной известным ученым Б. Шнейдерманом. Так называемая *мантра Шнейдер-*

мана — последовательное повторение действий по обзору, изменению масштаба, фильтрации и детализации ("Overview first, zoom and filter, then details-on-demand"), позволяющих проанализировать большие объемы визуализированных данных [11]. Критерий качества предусматривает проверку системы визуализации на возможность выполнения мантры Шнейдермана. (При создании критерия в набор действий включены также возможности вывода зависимостей, получения истории поиска и извлечения подмножества из рассматриваемых данных [12].)

Рассмотрим примеры естественных и физических метафор визуализации, использованных в отладочных системах для описания динамики выполнения программ. Неформально под метафорой визуализации понимается главная идея при отображении прикладной области на визуальный мир. Метафоры используются для определения деятельности пользователя программной системы и его восприятия объектов и операций над ними. В принципе любая визуализация является метафоричной [13, 14], но в литературе часто противопоставляются традиционные методы отображения данных и новые (метафорические) идеи, помогающие уяснить сложные и абстрактные понятия и лучше увидеть отношения между объектами.

При удачном выборе естественная или физическая метафора может значительно повлиять на удобство использования визуализации, но может и породить сложные и плохо интерпретируемые виды отображения. Также представляют интерес возможные подходы к оценке метафор на этапе проектирования систем и выбора методов визуального представления сущностей параллельного программирования.

Существуют примеры использования метафор для представления трасс и графов вызовов программ. В частности, при создании систем визуализации ПО параллельных вычислений используются метафора притяжения/отталкивания (в качестве ее модификаций можно рассматривать метафоры молекулы и физической частицы), метафоры комнаты, здания, города (их модификации — метафоры ландшафта и фабрики).

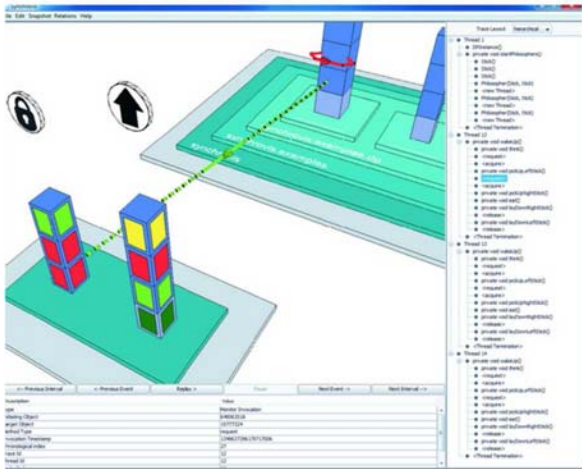
В системе Капоко [15] был реализован метод анимации, отображающий значения состояния программы, взятые из ее трассы, в набор состояний динамической модели системы. Затем воспроизводилось выполнение параллельной программы (моделировалась динамическая система), а результаты моделирования визуализи-

ровались (а также сонифицировались). Анимация представляла изменения в балансе между вычислениями и обменами как обычные движения некоторой динамической системы. Таким образом, имело место использование понятной для пользователя *метафоры притяжения/отталкивания*. В частности, определялись используемая динамическая система и отображение элементов и состояний параллельного вычислителя на тела и силы динамической системы. Моделирование вычислителя велось на основе топологии его физической сети. Так, для параллельного компьютера вычислительные модули и производимые на них вычисления, коммуникационная сеть и количество обменов могли соответственно отображаться на тела и их массу, пружины, связывающие тела, и силы притяжения между телами.

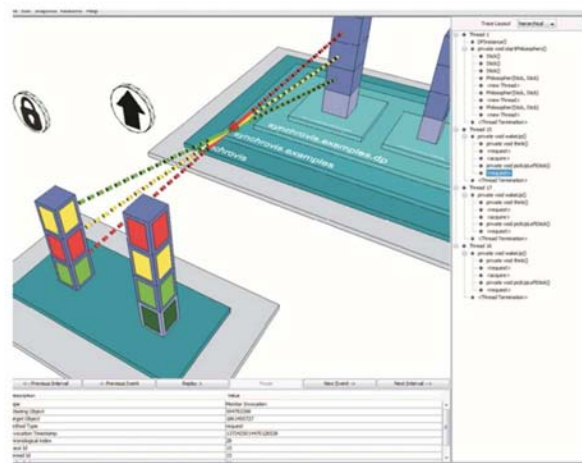
В ряде публикаций последнего времени рассматривается использование *метафор города и ландшафта* для представления трасс программ. Так, в [16] описывается представление трассы для случая параллелизма на основе нитей (рис. 4). Здания отображают статичные части программного комплекса. Трасса представляется в виде лучей-нитей, протянутых между зданиями. Визуализация ошибки deadlock, естественно, выглядит как окрашенное пересечение этих лучей. В работе [17] используются аналогичные идеи визуального представления. Сущности программной системы (например приложения) отображаются в виде зданий, а потокам управления и потокам данных, связывающим эти сущности, соответствуют улицы. Возможно включение/выключение режима проигрывания трассы. Метафора города может также применяться для представления структуры программных комплексов, как, например, в [18].

Отметим оригинальную *метафору мозга* ("Brain" Metaphor), использованную для анимационного представления выполнения программы в работе [19]. Идея визуализации работы мозга при предъявлении ему каких-либо стимулов перенесена на визуализацию активности программы или приложения (вызов процедур и функций, ввод/вывод и пр.) (рис. 5).

Визуализация графов вызовов должна обеспечить выявление причинных связей, порядка вызовов модулей, повторов, принадлежности данных к тому или иному типу, а также других отношений, необходимых разработчикам при от-



а



б

Рис. 4. Метафора города. Визуализация выполнения программы [16]: а — нормального; б — ошибочного (deadlock)

ладке правильности и эффективности параллельной программы [20].

Традиционно для представления графов вызовов используются двумерные виды отображения, построенные с помощью диаграмм, связанных стрелками. Однако при двумерном представлении графа вызовов значительной по объему и сложной по структуре программы с большой глубиной вложенности вызовов функций и большим количеством пользовательских функций возникают сложности в отображении на экране монитора и анализе пользователем конечного изображения.

В рамках двумерного представления можно справиться с данными проблемами за счет до-

полнительного инструментария, например дополнительного диалога с системой при навигации по графу [20]. Нехватку места на экране дисплея можно преодолеть, добавив к разрабатываемой модели еще одно измерение. В [21, 22] используется "дву-с-половиной-мерная" графика для представления графа вызовов. В этом случае узлы графа отображаются в виде примитивных изображений зданий, а связи между ними проводятся как бы по воздуху. Полученные графические выходы в какой-то мере напоминают отображения на базе *метафоры фабрики* (рис. 6).

В авторской работе [23] описаны трехмерные представления графа вызовов на базе *метафоры здания*, когда изображаются связанные между



Рис. 5. Использование метафоры мозга для представления выполнения программы (скриншот анимации) [19]

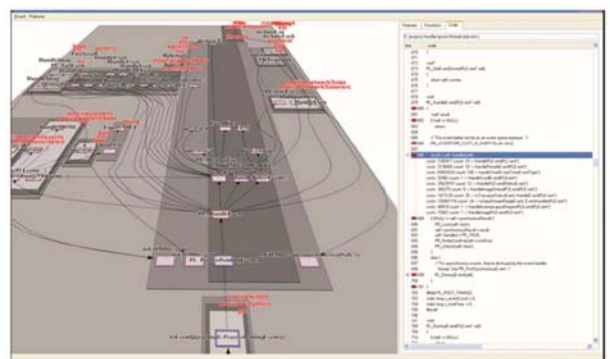


Рис. 6. Граф вызовов и текстовое описание кода [22]

собой комнаты некоего здания сложной архитектуры (рис. 7, см. также цветную вкладку). Расположение комнат трехуровневое. Все функции программы разбиваются на три части: 1) функции пользователя, имеющие в качестве наследников пользовательские функции; 2) функции пользователя, не имеющие таковых; 3) системные функции. Каждой такой части соответствует свой уровень в результирующем изображении. Каждая комната — визуальное представление функции. Кроме того, о функции свидетельствует пиктограмма на стене комнаты функционера в графе вызовов. Наибольшую реалистичность изображения дает вид отображения изнутри комнаты в сочетании с возможностью путешествия внутри здания между комнатами. Но в этом случае пользователь лишен структурного, объемного видения графа. Сочетание этих двух видов отображения графа может дать более приемлемый результат.

В [23] также описано использование *метафоры молекулы*. Эта метафора аналогична метафоре притяжения/отталкивания. Вершины графа естественно отображать сферами, а связи между вершинами — стрелками. Все вершины отталкиваются друг от друга; притягиваются они только в том случае, если между ними есть связь. Введенный коэффициент упругости влияет на близость вершин друг к другу, а за-

ряд — на степень удаленности остальных вершин от данной. Эти параметры необходимо учитывать в качестве статических/структурных характеристик, например заряд задавать равным числу связей с данной вершиной, а коэффициент упругого взаимодействия — мощности связи. Но одной только установкой заряда в зависимости от времени выполнения определенной функции при визуализации графа вызовов существенно изменить картину не получится. Для визуализации количественных показателей правильное воспользоваться традиционными методами. Время выполнения функции следует представлять как размер вершины. Возможно использование цвета для выделения/подсветки интересных особенностей визуализируемого графа. Анимация (вращение молекулы) позволяет изучить структуру графа. Алгоритм визуализации графа дает возможность отобразить (и, главное, интерпретировать) графы с сотнями вершин (рис. 8).

В рассмотренных выше системах, как правило, используются комплексные виды отображения, в которых вместе с графическими объектами, построенными на базе той или иной метафоры, отображается текст программы и/или ее структура. В некоторых системах виды отображения строятся с учетом конкретного типа распараллеливания. Например, в системе SYNCTRACE [8] метафора визуализации специально построена для отображения выполнения многонитевой параллельной программы. В других случаях имеет место адаптация и дополнение существующих метафор к задачам анали-

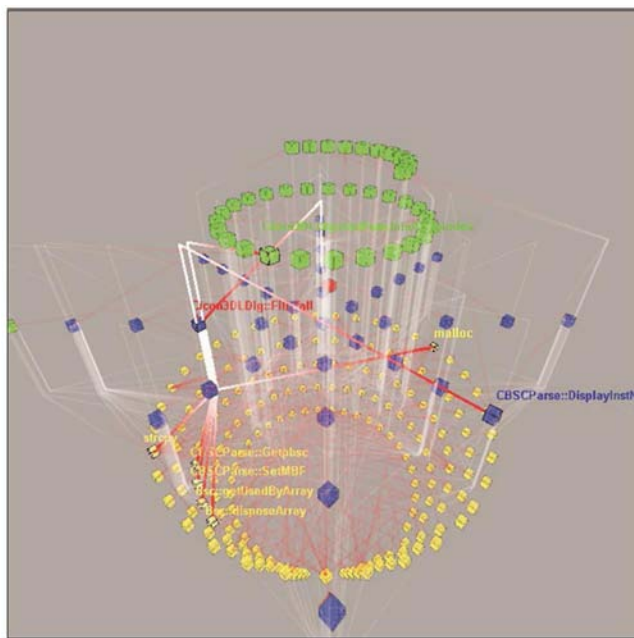


Рис. 7. Граф вызовов системы рисования графа вызовов на базе метафоры здания [23]

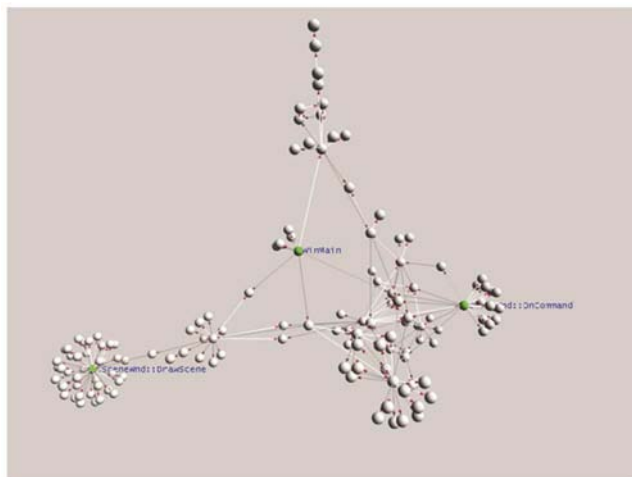


Рис. 8. Граф вызовов системы рисования графа вызовов на базе метафоры молекулы [23]

за программ без существенной привязки методик визуализации к типу параллелизма. Так, в [16] для представления выполнения многонитевых параллельных программ используется слегка адаптированная метафора города.

В большинстве рассмотренных работ нет подробных данных о реализации средств визуализации. Однако их анализ позволяет сделать некоторые заключения.

При отображении данных о многонитевых задачах на общей памяти рассматриваются развернутые по времени стеки вызовов (т. е. графы вызовов с учетом того, в какой последовательности они происходят). Применяются некоторые эвристики, по которым можно судить о связи нитей. Инструмент профилирования стандартно должен собирать информацию о том, из какой функции/процедуры произошла передача управления, в какую функцию управление пришло и когда произошли эти события. Именно такой набор событий на базе работы профилировщика отображается системами визуализации.

Для случая модели передачи сообщений (MPI-решений) очевидно использование стандартной идеи отображения событий типа Send/Receive. Было бы полезным совмещение в одном виде отображения трассы MPI с информацией от профилировщика. Однако в этом случае визуальное изучение связей между процессами при большом числе процессов затруднительно. Здесь проявляется одна из серьезных проблем визуализации ПО — проблема масштабирования видов отображения.

Сами по себе метафоры визуализации, как правило, не имеют привязки к конкретным языкам или средам программирования. На основе метафоры проектируется вид отображения, который включает в себя описание набора возможных объектов визуализации, их взаиморасположение на экране, а также возможное взаимодействие с ними. Именно при разработке видов отображения необходим учет конкретной задачи отладки и анализа данных.

Анализ применимости метафор визуализации

Проектировщику необходимо получить ответы на вопросы о том, как данная метафора может помочь в представлении данных и взаимодействиях с ними, каковы свойства визуальных объектов, созданных на базе данной метафоры,

к каким результатам приводит пользователя взаимодействие с метафорическими объектами [24]. Следует проанализировать возможности метафор по представлению больших и очень больших объемов данных и деталей, необходимых для понимания процесса выполнения программ. Важно понять, какие объекты могут быть представлены с помощью данной метафоры. Интересны возможности применения метафор в рамках систем, использующих современные среды компьютерной графики, в частности виртуальной реальности. Для всего этого необходимо описать способы проверки пригодности метафор при решении конкретных задач.

Рассмотрим сходные метафоры города и ландшафта. Среди их свойств можно выделить следующие:

- неограниченный контекст. При визуализации большого количества данных позволяет бегло окинуть взглядом всю "картинку" и выделить ключевые места;
- естественность. Имеет место как в пространственной ориентации, так и в навигации;
- наличие организованной внутренней структуры. В случае метафоры города эта структура задается достаточно жестко — есть дома, кварталы, улицы, районы. Метафора ландшафта не накладывает ограничений на выбор структуры. В этом случае можно говорить о вложенности ландшафтов;
- наличие ключевых элементов. Допускается представление достаточно большого объема однородной в визуальном смысле информации. При этом возможно использование ключевых элементов, которые являются "отправными точками" для интерпретации всех объектов. Например, некие особенные (например ошибочные) элементы должны выделяться среди множества других цветом, размером, формой и т. п.;
- устойчивость к масштабированию. Данные метафоры не только устойчивы к увеличению объема предоставляемой информации, но и предполагают изначально наличие ее большого объема (чтобы применение метафор было оправданным).

В случае реализации метафор города и ландшафта в системах визуализации ПО транспортные артерии могут использоваться для представления потоков управления, потоков данных и

иных связей между программными конструкциями или частями программного комплекса.

Таким образом, метафоры города и ландшафта могут служить базой при представлении значительных объемов структурированной информации с выделением случаев особого интереса, что необходимо при отладке правильности и эффективности параллельных программ. Возможность реализации пролета над городом/ландшафтом позволяет осуществлять навигацию, полета с изменением высоты — масштабирование и зуминг. Таким образом, с помощью метафор города и ландшафта можно создавать системы визуализации, удовлетворяющие критериям, основанным на схеме Шнейдермана. При этом интерпретация полученных на их основе графических выводов представляется простой.

Аналогично рассматриваются свойства метафоры молекулы (частицы), которая также может использоваться для задач визуализации трасс выполнения и графов вызовов параллельных программ.

Данная метафора предполагает представление большого объема *структурированной* информации. Интерпретация физической метафоры молекулы (частицы) и ее модификаций в целом проста и *естественна*, хотя и требует от пользователя некоторых (элементарных) знаний по физике. Связи между объектами визуализируемой модели также *естественно* представляются как связи между атомами/частицами. Виды отображения, построенные на базе метафоры молекулы (частицы), *устойчивы к масштабированию*. Метафора предполагает возможность выделения *ключевых элементов*, например за счет цвета или размера элементов молекулы и толщины связей между ними. Перемещение и навигация в полученных графических выводах могут выполняться за счет облета молекулы (совокупности частиц). Имеется опыт реализации "входа" в отдельный атом (частицу) и изучения визуальной информации, помещенной внутри отдельной частицы [25].

Таким образом, на базе метафор молекулы и частицы (как и в случае метафор города и ландшафта) возможно построение систем, которые удовлетворяют критериям, основанным на схеме Шнейдермана. Кроме того, возможности метафор города/ландшафта и молекулы/частицы позволяют использовать их при проектировании систем визуализации на базе сред виртуальной и расширенной реальности.

В то же время существует ряд ограничений по применению критериев качества визуализации. Если система им удовлетворяет, то это не означает, что она полностью лишена недостатков и пригодна для внедрения в практику разработки ПО. Например, система, использующая при визуализации методику круговых узелков, вполне соответствует критерию Шнейдермана, но при ее применении, по мнению авторов, получаются запутанные графические выводы. Отметим, что критерий Шнейдермана основывается на проверке только лишь необходимых, но не достаточных условий качества информационной визуализации. Использование схемы, построенной на базе мантры Шнейдермана, предполагает наличие структурированных данных большого, но все же обозримого объема. Кроме того, предполагается, что пользователь либо знает, что ищет, либо сможет это опознать. В случае узелков (как и других диаграмм), при создании которых применена по сути абстрактная и достаточно сложная методика визуализации, интерпретировать графические выводы, как представляется, непросто: пользователь должен все время соотносить картинку с неочевидными методами представления интересующих его данных.

Для высокопроизводительных вычислений многие методы визуализации трассы могут оказаться неэффективными как из-за сложности анализа выполняемого кода, так и из-за чрезвычайно больших объемов трасс выполнения параллельных программ. Подобные доводы можно выдвинуть во многих случаях использования новых абстрактных методов (метафор) визуализации для представления сложных данных. Виды отображения, использующие модификации статистических диаграмм, мало масштабируемы и не позволяют визуализировать выполнение сотен и тысяч процессов современных вычислений. Также можно сделать замечания по использованию естественных метафор. Интерпретация графических выводов, полученных в рамках естественных метафор, например интересной анимационной метафоры мозга, зачастую не представляется очевидной. Естественность образности метафор города и ландшафта в каких-то случаях может отвлекать пользователей систем визуализации. Также остаются проблемы восприятия больших и очень больших объемов информации. Не всегда приемлемо и само наблюдение за мерцающими и мигающими анимационными выводами. У пользователей систем на базе сред виртуаль-

ной реальности могут возникать неприятные последствия в виде головокружения и пр.

Другой подход к оценке визуализации заключается в анализе наличия инсайта (insight — озарение, понимание), т. е. установления в результате использования системы визуализации релевантных отношений между данными и существующей предметной областью (целевой областью) [26]. Визуализация должна создавать или способствовать созданию целостной ментальной модели и, как следствие, инсайта. Можно сказать, что цель метафорических визуализаций заключается в его получении. Однако наличие или отсутствие инсайта весьма субъективно. Поэтому и оценка по этому критерию остается субъективной.

Визуальное обеспечение процесса разработки ПО

Как уже отмечалось, попытки создать универсальные системы визуализации в целом не увенчались успехом. Опыт разработки, прежде всего систем научной визуализации, показывает, что их успех связан с наличием формальной модели визуализируемой области, с представлением о том, как пользователь видит и понимает объекты данной области знаний, а также пониманием (хотя бы в общих чертах), как он будет пользоваться проектируемой системой. Судя по имеющейся в распоряжении авторов литературе, разработчики систем визуального представления трасс исполнения и графов потока данных не учитывают особенностей их использования. В то же время в общем случае визуализации ПО параллельных систем нет ни универсальной формальной модели, ни всеобщей ментальной модели данной области. Также не существует общепризнанных методик работы программистов при отладке правильности или производительности параллельных систем. Поэтому на данном этапе представляются эффективными лишь специализированные системы визуализации ПО с четко поставленными, хотя и ограниченными задачами. Вместо поиска эффективных метафор и разработки универсальных средств визуализации следует перейти к созданию средств визуального сопровождения процессов разработки, отладки и анализа ПО, основываясь на изучении деятельности программистов, работающих в рамках конкретной программно-аппаратной среды.

Опыт в области специализированных средств визуального сопровождения процесса разработки ПО для отечественных процессоров семейства *Мультиклет*. Архитектура процессоров семейства *Мультиклет* обеспечивает простой способ внеочередного выполнения команд, явный контроль программиста за упорядочением памяти, прозрачную для приложений реконфигурацию во время выполнения, отказоустойчивость, в том числе благодаря оригинальному способу кодирования машинных команд. Процессоры семейства *Мультиклет* не задают явной модели упорядочения памяти. Элементарные вычислительные процессы запускаются параллельно [27].

Для упрощения анализа исходных текстов программ на ассемблере для процессоров семейства *Мультиклет* было предложено визуализировать графы различных участков программы. В данном случае нужно было перевести естественным образом код программы в описание графа, например на языке Dot (система GraphViz [28]). Первые результаты оказались недостаточно выразительными, так как перевод осуществлялся без учета особенностей алгоритмов размещения вершин, используемых в GraphViz для визуализации. Постепенно многие из этих особенностей удалось учесть и получить приемлемые для визуализации участки кода, на которых можно проследить интересующий программистов поток данных. Дополнительным результатом оказалась возможность узнавать некоторые алгоритмы по их графическому изображению. Важным для практики является то, что такая визуализация позволяет быстро проследивать степень параллелизма анализируемого участка кода, к которой процессоры семейства *Мультиклет* "чувствительны". Код с небольшой степенью параллелизма естественным образом отображается как вытянутая нить операций. Такое проследивание необходимо при отладке производительности [29] (рис. 9).

Другой пример использования визуализации связан с разработкой компилятора C99 для процессоров семейства *Мультиклет*. Разработка трансляторов остается одной из самых сложных задач в программировании. В значительной степени это связано с трудоемкостью отладки корректности формируемых в процессе трансляции нетривиальных структур данных, насыщенных перекрестными ссылками. Число ссылок таково, что использование традиционных пошаговых локальных отладчиков не позволяет

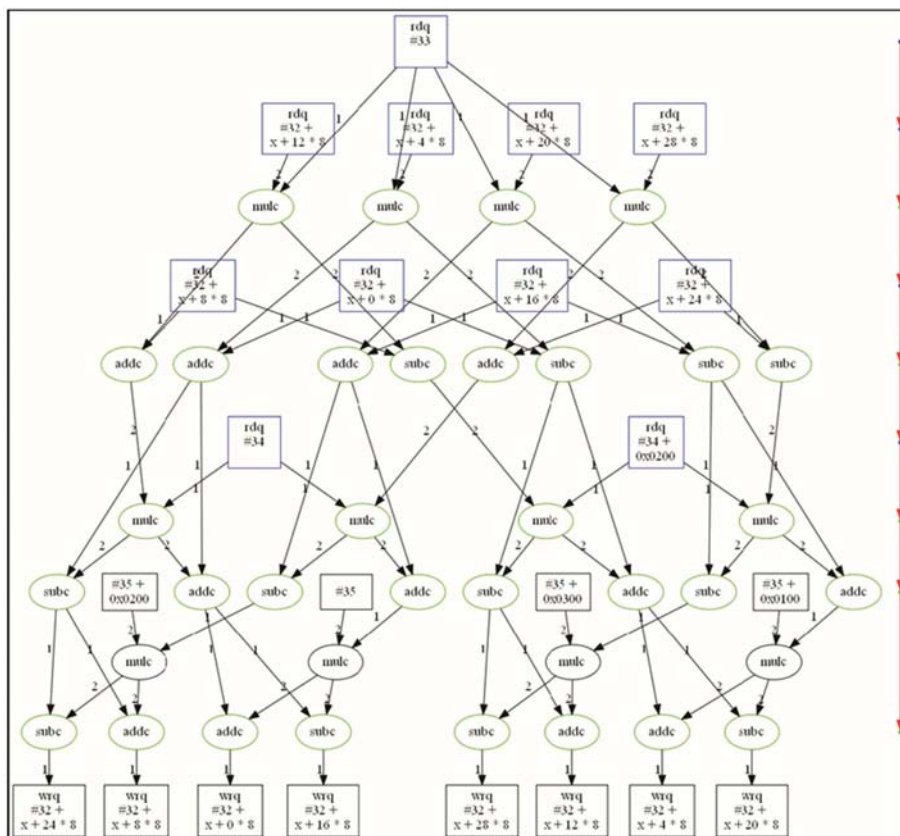


Рис. 9. Визуализация графа участка программы на ассемблере процессора семейства *Мультиклет* [29]

сколь угодно эффективно получать информацию о процессе выполнения программы, потому что возможность изучить значения нескольких переменных не дает никакого представления о состоянии программы. Более приемлемой в такой ситуации можно считать отладку по трассе программы. Однако трассы процессов трансляции на C99 даже небольших программ оказываются слишком длинными для непосредственного восприятия человеком. При представлении отладочного дампа в интерактивном виде рассматривались такие подходы, как трансляция в гипертекст и генерация графической анимации. Применение веб-браузеров для анализа структур данных и отладки программ обеспечивает простоту динамической генерации и дает возможность использования интерактивных и навигационных средств. В то же время гипертекст не способен отразить некоторых особенностей исследуемой динамической структуры. Чтобы отследить структурные изменения, отражающиеся на глобальной структуре графа, необходимы трехмерные анимационные отображения. Для построения анимации графов используется графическая библиотека динамической визуализации

графов Ubigraph [30]. При визуализации применяется реализованная в данной системе метафора физической частицы. Вершина представляется точечной частицей пространства, координаты рассчитываются по физическим формулам (рис. 10).

Отметим, что в рассмотренных случаях визуализация опирается на формальные описания изучаемых явлений, которые хорошо известны

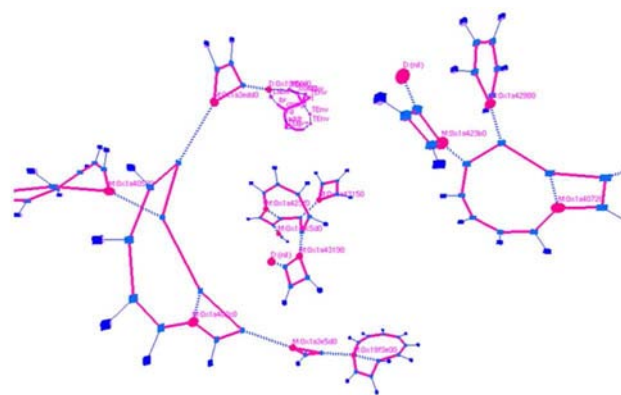


Рис. 10. Визуализация структуры графа трансляции

проектировщикам (они же пользователи системы). Можно говорить о существовании достаточно четкой ментальной модели динамики выполнения программы. Имеет место понимание того, правильно или неправильно работает программа. Программист получает возможность уяснить, в каком месте возникает ошибка и каков ее тип. Так как проектирование системы визуализации выполняли сами разработчики системного обеспечения процессоров семейства *Multimedia*, то так или иначе были учтены особенности процесса программирования и отладки. В данном случае реализации специализированных средств визуального обеспечения процесса разработки системного ПО присутствуют элементы формальной и ментальной модели параллельного выполнения процессов. Средства визуализации учитывают особенности реальной деятельности программиста по анализу и отладке сложного кода. В каком-то смысле можно говорить о том, что разработанные средства визуализации обеспечивают инсайт. Таким образом, полученная система удовлетворяет критериям оценки визуализации, предлагаемым авторами данной статьи.

Верификация и валидация визуализации

Визуализация ПО является подобластью общей дисциплины — компьютерной визуализации. Визуализация, представляя результаты вычислений, обеспечивает интерпретацию и анализ полученных данных. В связи с развитием компьютерной визуализации ставится вопрос о ее теоретической базе. Теоретические исследования нужны, во-первых, для анализа и оценки существующих систем, во-вторых, для обучения новых специалистов, в-третьих, для обоснования решений при проектировании новых систем. Важной задачей теории визуализации является создание научных основ для качественного и надежного проектирования, разработки и оценки визуальных интерактивных систем. При оценке визуализации можно рассматривать задачи валидации (оценка общей применимости и адекватности применения) и верификации (оценка правильности).

Верификация визуализации подразумевает наличие формальной модели, которая только предметной областью отличается от подобных моделей других областей. Востребована верификация таких слабо формализуемых и связанных с когнитивными аспектами подзадач, как

визуализация данных большого объема, интерпретация результатов визуализации. Верификация как сравнение с эталоном широко применяется в научной визуализации, например при разработке инженерных пакетов. Трудно представить, что, решая одни и те же уравнения одними и теми же методами, применяя одинаковые виды отображения, будут получены разные изображения. Однако это возможно в результате накопления вычислительной погрешности. В [31] вводится понятие верифицируемой визуализации, которая отслеживает, как распространяется погрешность (неопределенность) на всех этапах вычислительного конвейера, включая визуализацию. Подобный подход в общем случае принято называть моделью с неопределенностью, в частном случае — визуализацией с неопределенностью. Он может рассматриваться как пример некорректной по начальным данным задачи. Можно выделить качественные и количественные характеристики верификации. Качественную характеристику — степень формализации (наивная, метафорическая, формальная) — и количественную, связанную с распространением неопределенности, уместно трактовать как полноту и точность верификации.

Одновременно с верификацией визуализации необходимо рассматривать валидацию визуализации как меру адекватности. В математическом моделировании адекватность определяется как соответствие формальной модели и реализующего ее ПО тому, что наблюдается на практике. Формально правильная модель может быть неадекватной. Частая путаница в определении верификации и валидации объясняется тем, что наивная верификация эквивалентна валидации.

Заключение

Системы визуализации ПО параллельных вычислений могут выполнять задачи сопровождения процесса разработки ПО на различных этапах. Наиболее перспективным является использование визуализации в системах отладки правильности и производительности параллельных программ. В начале статьи отмечен определенный застой, проявившийся в развитии визуализации ПО параллельных вычислений. Чтобы вернуть интерес к этому направлению, следует решить ряд задач.

Прежде всего, это проблема выбора объектов, подлежащих визуализации в рамках про-

цесса отладки. В случае параллельных вычислений само определение объектов программы, связанных с ее ошибочным состоянием, является сложной задачей. Трасса выполнения программы — лишь одна из возможных сущностей, подлежащих анализу и, как следствие, визуализации. При различных парадигмах параллелизма резко меняется набор и суть анализируемых программных объектов. В случае отладки (настройки) производительности также нет ясности с выбором тех сущностей, изучение которых способно помочь в улучшении производительности.

С самого начала развития средств визуализации программирования встал вопрос о способах графического представления программных объектов. Проектировщики опирались на стандартные ("бумажные") подходы к визуализации ПО либо перекладывали эту задачу на пользователей-программистов, предоставляя им инструментарий рисования. Использование оригинальных метафор оказалось не всегда оправданным, так как нужны простые, но четко интерпретируемые методы представления. Привязка метафор визуализации к конкретным средам программирования требует отдельного рассмотрения. Существует также проблема масштабирования видов отображения, основанных на тех или иных метафорах. "Графовые" метафоры, как и диаграммы различного вида, имеют в данном контексте значительные ограничения. Необходим учет ментальных моделей разработчика [32] и характера его деятельности в процессе реализации ПО. Оправдан переход к созданию специализированных средств обеспечения процесса разработки и отладки программ, учитывающих особенности аппаратуры и языков разработки, а также запросы самих разработчиков.

В связи с этим интересно применение методов, хорошо зарекомендовавших себя в смежных областях визуализации. Метод параллельных координат, используемый в информационной визуализации для описания эффективности экономических моделей [33], может быть применен и при представлении данных об эффективности вычислений, так как непринципиально, анализируется ли мощность двигателя или количество попаданий в кэш. При достаточно мелком разбиении по длине программы или времени для вывода данных о производительности оправдано использование видов отображения, построенных на базе *информационной фрески* (Information Mural) [34]. В [35] представлен

интересный пример использования циклограмм для "визуальной верификации" управляющих программ реального времени. В [36] предлагается формализация понятий, связанных с производительностью программ и рассматриваемых как функции многих переменных. Это позволяет использовать методики представления трехмерных объектов, характерных для научной визуализации.

Для создания эффективных и достаточно универсальных систем визуализации ПО параллельных вычислений требуются комплексные усилия исследователей и разработчиков.

Список литературы

1. *Авербух В. Л., Байдалин А. Ю.* Разработка средств визуализации программного обеспечения параллельных вычислений. Оптимизация параллельных программ // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004. Вып. 1. С. 70—79.
2. *Авербух В. Л., Байдалин А. Ю., Исмаилов Д. Р., Казанцев А. Ю.* Состояние дел в визуализации программного обеспечения параллельных вычислений // ГРАФИКОН-2005. Труды конференции. Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2005. С. 179—186.
3. *Посыпкин М. А., Соколов А. А.* Обзор методов автоматизации мониторинга, анализа и визуализации поведения параллельных процессов, взаимодействующих с помощью передачи сообщений: Препринт № 7. М.: ИСП РАН, 2005.
4. *Mohr B.* Scalable parallel performance measurement and analysis tools — state-of-the-art and future challenges // Supercomputing Frontiers and Innovations. 2014. Vol. 1, No 2. P. 108—123.
5. *De Pauw W., Heisig S.* Zinsight: a visual and analytic environment for exploring large event traces // Proc. of 5th Int. Symposium on Software Visualization. October 25—26, 2010. Salt Lake City, UT, USA: ACM, 2010. P. 143—152.
6. *Trumper J., Bohnet J., Dollner J.* Understanding complex multithreaded software systems by using trace visualization // Ibid. P. 133—142.
7. *Trumper J., Telea A., Dollner J.* Viewfusion: Correlating structure and activity views for

- execution traces // Proc. of 10th Theory and Practice of Comp. Graph. Conf. Euro. Asso. for Comp. Graph. University of Rutherford, UK, 2012. P. 45–52.
8. *Karran B., Trumper J., Dollner J.* SYNCTRACE: Visual thread-interplay analysis // Proc. of 1st Working Conf. on Software Visualization. Eindhoven, NL: IEEE Computer Society, 2013.
 9. *Cornelissen B., Holten D., Zaidman A. et al.* Understanding execution traces using massive sequence and circular bundle views // Proc. of 15th IEEE Int. Conf. on Program Comprehension. Banff, Alberta, Canada: IEEE, 2007. P. 49–58.
 10. *Cornelissen B., Zaidman A., Holten D. et al.* Execution trace analysis through massive sequence and circular bundle views // J. Systems and Software. 2008. Vol. 81, Issue 12. P. 2252–2268.
 11. *Shneiderman B.* The eyes have it: A task by data type taxonomy for information visualizations // Proc. of IEEE Conf. on Visual Languages. September 3–6, 1996. Boulder, CO: IEEE, 1996. P. 336–343.
 12. *Maletic J. I., Marcus A., Collard M. L.* A task oriented view of software visualization // Int. Workshop on Visualizing Software for Understanding and Analysis. Paris, France, 2002. P. 32–40.
 13. *Averbukh V. L., Bakhterev M. O., Baydalin A. Yu. et al.* Searching and analysis of interface and visualization metaphors // Human-Computer Interaction, New Developments / Ed. by K. Asai. Chapter 3. Vienna: In-teh, 2008. P. 49–84.
 14. *Knight C., Munro M.* Software Visualisation Conundrums. University of Durham, Computer Science. Technical Report 05/01. July 2001. <http://vrg.dur.ac.uk/papers/getpaper.php?id=27>.
 15. *Osawa N.* An enhanced 3-D animation tool for performance tuning of parallel programs based on dynamic models // Proc. of SIGMETRICS Symp. on Parallel and Distributed Tools "SPDP 98". Welches Or, USA, 1998. P. 72–80.
 16. *Waller J., Wulf Ch., Fittkau F. et al.* SynchroVis: 3D visualization of monitoring traces in the city metaphor for analyzing concurrency // Proc. of 1st IEEE Working Conf. on Software Visualization. Eindhoven, NL: IEEE Computer Society, 2013.
 17. *Fittkau F., Waller J., Wulf Ch., Hasselbring W.* Live trace visualization for comprehending large software landscapes: The ExplorViz approach // Ibid.
 18. *Kobayashi K., Kamimura M., Yano K. et al.* SARF map: Visualizing software architecture from feature and layer viewpoints // Proc. of 21st IEEE Int. Conf. on Program Comprehension (ICPC). San Francisco, CA, USA: IEEE, 2013. P. 43–52.
 19. *Palepu V. K., Jones J. A.* Visualizing constituent behaviors within executions // Proc. of 1st Working Conf. on Software Visualization. Eindhoven, NL: IEEE Computer Society, 2013.
 20. *LaToza T., Myers B.* Visualizing call graphs // Proc. of IEEE Symp. on Visual Languages and Human-Centric Computing. Pittsburgh, PA, USA: IEEE, 2011. P. 117–124.
 21. *Bohnet J., Dollner J.* Visual exploration of function call graphs for feature location in complex software systems // Proc. of ACM Symp. on Software Visualization. Brighton, UK: ACM, 2006. P. 95–104.
 22. *Bohnet J., Dollner J.* Facilitating exploration of unfamiliar source code by providing 2D/2D visualizations of dynamic call graphs // Proc. of 4th IEEE Int. Workshop on Visualizing Software for Understanding and Analysis. Banff, Alberta, Canada: IEEE, 2007. P. 63–66.
 23. *Авербух В. Л., Байдалин А. Ю., Исмагилов Д. Р., Казанцев А. Ю.* Трехмерные методики визуализации программного обеспечения параллельных и распределенных вычислений // Труды ПаВТ'2008. Челябинск: ЮУрГУ, 2008. С. 283–288.
 24. *Авербух В.* Семиотический подход к формированию теории компьютерной визуализации // Научная визуализация. 2013. Т. 5, № 1. С. 1–25.
 25. *Авербух В. Л., Байдалин А. Ю., Исмагилов Д. Р. и др.* Использование трехмерных метафор визуализации // Тр. 14-й Межд. конф. по компьютерной графике и зрению "ГрафиКон'2004". Москва, 6–10 сентября 2004 г. М.: МГУ им. М. В. Ломоносова, 2004. С. 295–298.

26. *North Ch.* Toward measuring visualization insight // IEEE Computer Graphics and Applications. 2006. Vol. 26, No 3. P. 20–23.
27. *Стрельцов Н. В.* Архитектура и реализация мультиклеточных процессоров // Тр. V Межд. науч. конф. "Параллельные вычисления и задачи управления". Москва, 26–28 октября 2010 г. М.: Институт проблем управления им. В. А. Трапезникова РАН, 2010. С. 1087–1104.
28. Graphviz — Graph Visualization Software. <http://www.graphviz.org/>.
29. *Авербух В. Л., Анненкова О. Г., Бахтерев М. О., Манаков Д. В.* Задачи визуализации программного обеспечения параллельных и распределенных вычислений // Тр. Межд. науч. конф. ПАВТ'2014. Ростов-на-Дону, 2014. Челябинск: ЮФУ, 2014. С. 7–18.
30. Графическая библиотека динамической визуализации графов Ubigraph. <http://ubietylab.net/ubigraph/>.
31. *Kirby R., Silva C.* The need for verifiable visualization // IEEE Computer Graphics and Applications. 2008. Vol. 28, No 5. P. 78–83.
32. *Petre M.* Mental imagery and software visualization in high-performance software development teams // J. of Visual Languages and Computing. 2010. Vol. 21(3). P. 171–183.
33. *Dasgupta A., Chen M., Kosara R.* Conceptualizing visual uncertainty in parallel coordinates // Comput. Graph. Forum. 2012. Vol. 31(3). P. 1015–1024.
34. *D. F. Jerding, Stasko J. T.* The information mural: A technique for displaying and navigating large information spaces // IEEE Trans. Vis. Comput. Graph. 1998. Vol. 4(3). P. 257–271.
35. *Тюгашев А. А., Богатов А. Ю., Шульдин А. В.* Визуальный подход к верификации управляющих программ реального времени // Вестник Самарского гос. аэрокосмического ун-та. 2012. № 1(32) С. 219–225.
36. *Теплов А. М.* Об одном подходе к сравнению масштабируемости параллельных программ // Вычислительные методы и программирование. 2014. Т. 15. Вып. 4. С. 697–711.

Статья поступила в редакцию 18.11.14.

ANALYSIS AND ASSESSMENT OF VISUALIZATION SYSTEMS USED IN SOFTWARE FOR PARALLEL COMPUTATIONS / V. L. Averbukh, O. G. Annenkova, M. O. Bakhterev, D. V. Manakov (IMM of the RAS UrB, UrFU, Ekaterinburg).

Approaches to visualizing routs and graphs of parallel program calls using a number of software visualization metaphors are considered. The applicability of metaphors on the basis of visualization criteria has been analyzed. Examples of using tools for visualizing the process of developing system software of a lower level for modern parallel-architecture processors are given.

The authors state the problem of formally describing and/or verifying the visualization results.

Keywords: software visualization, execution route, call graph, visualization metaphor.

УДК 621.383:004.721

ЗАЩИЩЕННАЯ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ПЕРЕДАЧИ ИНФОРМАЦИИ ОГРАНИЧЕННОГО ДОСТУПА ДЛЯ МНОГОКОНТУРНЫХ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ АВТОМАТИЗИРОВАННЫХ СИСТЕМ С РАЗГРАНИЧЕНИЕМ ПРАВ ДОСТУПА ПОЛЬЗОВАТЕЛЕЙ

В. В. Шубин

(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Представлено описание защищенной волоконно-оптической системы передачи информации ограниченного доступа на основе контроллеров защиты серии FOBOS с использованием спектрального разделения информационного и контрольного каналов. Показано, что с помощью технологии грубого волнового уплотнения можно создать многоконтурную (до 10 контуров) распределенную автоматизированную систему предприятия с защитой информации от утечки при передаче по оптическому каналу за пределами контролируемой зоны. При этом обеспечивается дальность передачи информации до 20–30 км на скорости 10,31 Гбит/с и 37,5 км на скорости 1,25 Гбит/с.

Ключевые слова: защищенная волоконно-оптическая система передачи информации ограниченного доступа, контроллер защиты информации, различные права доступа.

Введение

При создании распределенных автоматизированных систем (АС) на предприятиях атомной отрасли возникает проблема защиты информации ограниченного доступа от утечки при ее передаче за пределами контролируемой зоны (КЗ). При этом в АС предприятия, как правило, циркулирует информация с различной степенью секретности, а группы сотрудников имеют различные права доступа. Поэтому, кроме защиты информации за пределами КЗ, возникает задача надежного разграничения доступа различных групп абонентов, иными словами, создания в пределах одной распределенной АС нескольких изолированных друг от друга контуров. Топология распределенных АС, а также входящих в нее контуров может быть самой различной. Возможны разнообразные сочетания первичных структур типа *звезда*, *дерево*, *кольцо*. При этом количество используемых каналов связи вне зависимости от количества контуров должно быть минимальным.

В современных АС масштаба предприятия сегодня, как правило, используются технологии Ethernet, причем для передачи информа-

ции за пределами КЗ применяются высокоскоростные стандарты Gigabit Ethernet (GbE) или 10Gigabit Ethernet (10GbE) (в перспективе 40Gigabit Ethernet и 100Gigabit Ethernet). Таким образом, скорости передачи информации в каналах связи составят 1,25 Гбит/с (стандарт физического уровня 1000Base-LX (H)) и 10,31 Гбит/с (стандарт 10GBase-LR (LW)).

Передача информации на таких скоростях за пределы КЗ осуществляется только по волоконно-оптическим линиям передачи (ВОЛП) на основе одномодовых оптических волокон. Для защиты информации при передаче по ВОЛП возможны два варианта: использование криптографических средств защиты информации (КСЗИ) или защищенных волоконно-оптических систем передачи (ВОСП).

КСЗИ отечественного производства не обеспечивают передачу информации на вышеуказанных скоростях, дороги в эксплуатации и требуют целого ряда дополнительных мер по безопасности. Защищенные ВОСП имеют в своем составе программно-технические средства защиты информации (ПТСЗИ), например серии FOBOS [1], которые не снижают скорости передачи инфор-

мации, легко стыкуются с любыми стандартами передачи данных и не требуют дополнительных мер по безопасности. Основные параметры контроллеров защиты серии FOBOS для одномодовых ВОЛП приведены в табл. 1.

Спектральное разделение информационных и контрольных каналов

Для разграничения доступа в АС предприятия целесообразно воспользоваться технологией грубого волнового уплотнения (Coarse Wavelength Division Multiplexing — CWDM) в диапазоне длин волн от 1270 до 1610 нм с шагом между каналами 20 нм [2]. Для каждого контура в пределах распределенной АС используется одна или две длины волны. Изоляция смежных каналов в ВОСП, построенных по технологии CWDM, составляет не менее 30 дБ [3]. Для получения требуемого коэффициента ошибок при передаче информации BER = $10^{-10} \div 10^{-12}$ с учетом эксплуатационного запаса в 3 дБ отношение сигнал/шум в приемнике ВОСП должно составлять 14–15 дБ. Таким образом, мощность помехи от соседнего канала более чем на 15 дБ (в 30 раз) меньше мощности шума. Восстановление сигнала от соседнего канала при отношении сигнал/шум 0,033 практически невозможно, т. е. обеспечивается полная развязка даже для соседних каналов в CWDM ВОСП.

Для передачи информации ограниченного доступа целесообразно применять до 10 каналов с длинами волн от 1270 до 1450 нм, а для контроля с помощью ПТСЗИ использовать длины волн 1610 (FOBOS-100GE) или 1550 нм (FOBOS-

100GL). Таким образом, применение спектрального разделения каналов повышает чувствительность системы защиты, причем неодинаково для сигналов на разных длинах волн [4].

Как известно, в одномодовом (SMF) волокне распространяется одна основная мода HE₁₁, имеющая гауссово распределение интенсивности, которое задается известной зависимостью [5]

$$\frac{I(r)}{I_0} = \exp\left(-\frac{r^2}{2w_0^2}\right). \quad (1)$$

Здесь $I(r)$ — интенсивность излучения основной моды на расстоянии r от оси волокна в поперечном сечении; I_0 — интенсивность излучения основной моды на оси волокна. w_0 — радиус пятна моды на уровне $1/e^2$ — вычисляется по формуле [5]

$$\frac{w_0}{\rho} = 0,65 + \frac{1,619}{V^{1,5}} + \frac{2,879}{V^6}. \quad (2)$$

Здесь ρ — радиус сердцевины оптического волокна; V — волноводный параметр, который определяется по известной формуле [5]

$$V = \frac{2\pi\rho}{\lambda} (n_c^2 - n_0^2)^{0,5}, \quad (3)$$

где λ — длина волны излучения; n_c и n_0 — соответственно показатели преломления сердцевины и оболочки волокна на длине волны λ .

Таким образом, волноводный параметр, а следовательно, радиус пятна моды зависят от длины волны. Соответственно от длины волны зависит и распределение интенсивности излучения в поперечном направлении волокна. На рис. 1 представлены зависимости относитель-

Таблица 1

Основные параметры контроллеров защиты для одномодовых волокон

Параметр	FOBOS-100GL	FOBOS-100GE
Тип ВОЛП (стандарт ITU-T**)	SMF* (G.652, G.657)	SMF (G.652—G.656)
Тип оптических соединителей (T,R/TERM/LINE)	FC/SPC	FC/APC
Рабочие длины волн ВОСП, мкм	1,260—1,490	1,260—1,625
Средняя мощность на входном полюсе T-TERM, дБм	от -14,0 до 0	от -4,0 до 16,0
Рабочая длина волны контроллера, мкм	1,470—1,570	1,607—1,612
Потери между оптическими полюсами:		
A_{TT} , дБ	не более 3,5	не более 3,5
A_{RR} , дБ	не более 0,5	не более 0,5
$A_{TR \text{ LINE}}$, дБ	0—20,0	0—29,0

* SMF — одномодовое оптическое волокно.

** ITU-T — Международный союз электросвязи, сектор телекоммуникаций.

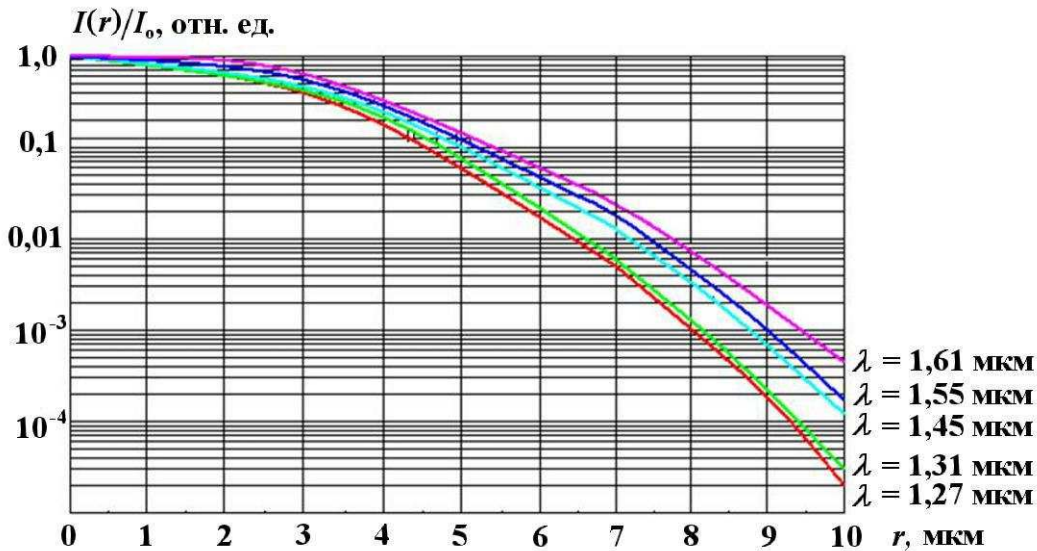


Рис. 1. Зависимости относительной интенсивности излучения от расстояния от оси волокна SMF-28

ной интенсивности от расстояния от оси волокна SMF-28 для выбранных длин волн, рассчитанные по формулам (1)–(3).

При локальном выводе из SMF-волокна интенсивнее будет выходить излучение с большими длинами волн. Соответственно, если информация передается на коротких длинах волн, а контроль ведется на большей длине волны, появляется выигрыш в чувствительности по обнаружению попытки вывода излучения. Например, при потерях в волокне 0,03 дБ, которые обнаруживают контроллеры защиты серии FOBOS, относительная интенсивность излучения на длине волны $\lambda = 1610$ нм составит

$$\frac{I(r)}{I_0} = 1 - 10^{-0,1A_d} = 1 - 10^{-0,003} = 0,007$$

(A_d — изменение коэффициента передачи между оптическими полюсами), что соответствует координате в поперечном сечении волокна

$$\begin{aligned} r &= \left(-0,5w_0^2 \ln \frac{I(r)}{I_0} \right)^{0,5} = \\ &= \left(-0,5 \cdot 5,11^2 \ln 0,007 \right)^{0,5} = 8 \text{ мкм}. \end{aligned}$$

Это означает, что при локальном дефекте излучение на расстоянии более 8 мкм от оси волокна переходит в вытекающие моды и будет определять внесенные дополнительные потери. На рис. 2 представлен механизм образования потерь на изгибе волокна из работы [6].

В табл. 2 приведены результаты расчета относительной интенсивности потерянного излучения

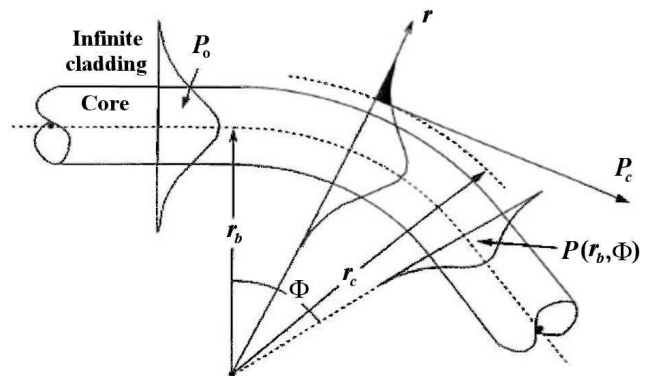


Рис. 2. Механизм образования потерь на изгибе волокна

по формулам (1)–(3) для расстояния от оси $r = 8$ мкм в волокне SMF-28.

Из табл. 2 следует, что интенсивность потерянного излучения на длине волны $\lambda = 1270$ нм меньше, чем на рабочей длине волны контроллера 1610 нм, в 7,4 раза (на 8,7 дБ), а на длине волны $\lambda = 1450$ нм — в 2,5 раза (на 3,9 дБ). Это свидетельствует о том, что во столько же раз повысилась чувствительность обнаружения вывода излучения. Таким образом, при использовании контроля на длине волны 1610 нм предельно допустимое изменение коэффициента передачи между оптическими полюсами уменьшилось в 7,4 раза, с 0,03 до 0,004 дБ ($\lambda = 1270$ нм), и в 5,7 раза, до 0,005 дБ ($\lambda = 1290; 1310$ нм). При использовании контроля на длине волны 1550 нм изменение коэффициента передачи уменьшится

Результаты расчета относительной интенсивности излучения на расстоянии $r = 8$ мкм от оси волокна SMF-28

λ , нм	V	w_o/ρ , отн. ед.	w_o , мкм	$I_\lambda = I(r)/I_o$, отн. ед.	$-10 \lg(I_{1610}/I_\lambda)$, дБ	$-10 \lg(I_{1550}/I_\lambda)$, дБ
1 270	2,63	1,038	4,31	0,0010	-8,7	-7,3
1 290	2,59	1,048	4,35	0,0012	-7,9	-6,5
1 310	2,55	1,058	4,39	0,0013	-7,6	-6,2
1 330	2,51	1,069	4,44	0,0015	-6,9	-5,6
1 350	2,47	1,080	4,48	0,0017	-6,4	-5,0
1 370	2,44	1,088	4,52	0,0019	-5,9	-4,5
1 390	2,40	1,101	4,57	0,0022	-5,3	-3,9
1 410	2,37	1,110	4,61	0,0024	-4,9	-3,5
1 430	2,33	1,123	4,66	0,0028	-4,2	-2,9
1 450	2,30	1,134	4,70	0,0030	-3,9	-2,6
1 550	2,15	1,193	4,95	0,0054	-1,4	0,0
1 610	2,07	1,230	5,11	0,0074	0,0	+1,4

соответственно в 5,4 раза, до 0,006 ($\lambda = 1270$ нм), и в 4,2 раза, до 0,007 дБ ($\lambda = 1290$; 1310 нм).

Для экспериментальной проверки результатов расчета интенсивности излучения были сняты спектрограммы интенсивности излучения (рис. 3) в выбранном диапазоне длин волн 1270—1450 нм на входном полюсе оптического волокна и на выходе ответвителя — прищепки FOD-5503, подключенной к боковой поверхности того же волокна.

Из рис. 3 видно, что интенсивность излучения при $\lambda = 1270$ нм на 10 дБ меньше, чем при $\lambda = 1370$ нм, и на 8 дБ меньше, чем при $\lambda = 1390$ нм. Отклонения от расчетных значений, вероятно, обусловлены нестабильностью и спектральной зависимостью коэффициента передачи излучения через боковую поверхность волокна.

В табл. 3 приведены рассчитанные значения изменения коэффициента передачи между оптическими полюсами $A_d(\lambda)$, эквивалентные внесению потерь 0,03 дБ на длине волны $\lambda = 1610$ нм.

Таким образом, чувствительность системы защиты ВОСП на основе контроллеров серии FOBOS повышается. Точные значения увеличения чувствительности могут быть получены только экспериментально.

Структурная схема ВОСП

На рис. 4 приведена структурная схема защищенной ВОСП, которая состоит из приемопередающих модулей SFP (SFP+, XFP), работающих на различных длинах волн в соответствии

с заданной сеткой CWDM [2]. Для обеспечения максимальной дальности передачи информации необходимо использовать модули с минимальным порогом чувствительности от -30 до 31 дБм для скорости 1,25 Гбит/с и от -23 до 24 дБм для скорости 10,31 Гбит/с, например, отечественного производства [3]. Мощность излучения модулей должна быть около нуля.

Приемопередающий модуль входит в состав сетевой аппаратуры контура и должен быть вставлен в сетевой коммутатор (маршрутизатор или другое сетевое устройство), имеющий стандартное гнездо для установки оптических модулей SFP (SFP+, XFP) [7]. Допускается использование любых других стандартных приемопередающих модулей (GBIC, XENPAK, X2, SFP). Каждый из модулей с помощью двух одномодовых оптических волокон соединяется с мультиплексором/демультиплексором MUX/DEM. Поскольку модуль и MUX/DEM расположены в пределах одной КЗ, защиты информации от утечки при передаче по ВОЛП в этом случае не требуется [8]. Тем не менее, если учитывать специфику предприятий атомной отрасли, длина ВОЛП в пределах КЗ может быть достаточно протяженной и достигать 2—3 км, что необходимо учитывать при расчетах параметров ВОСП.

На входе MUX/DEM групповой информационный поток по двум оптическим шнурам поступает на оптические порты term контроллера защиты F (FOBOS-100GE (GL)). Целесообразно, чтобы MUX/DEM и контроллер защиты были расположены в пределах одной стойки или поме-

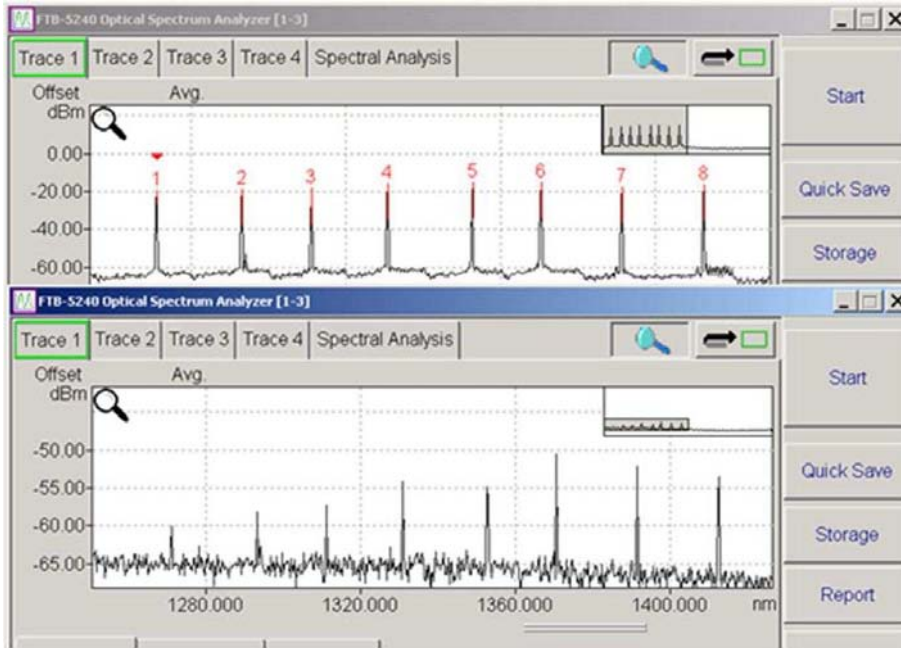


Рис. 3. Спектрограммы интенсивности излучения на входном полюсе и через боковую поверхность волокна SMF-28

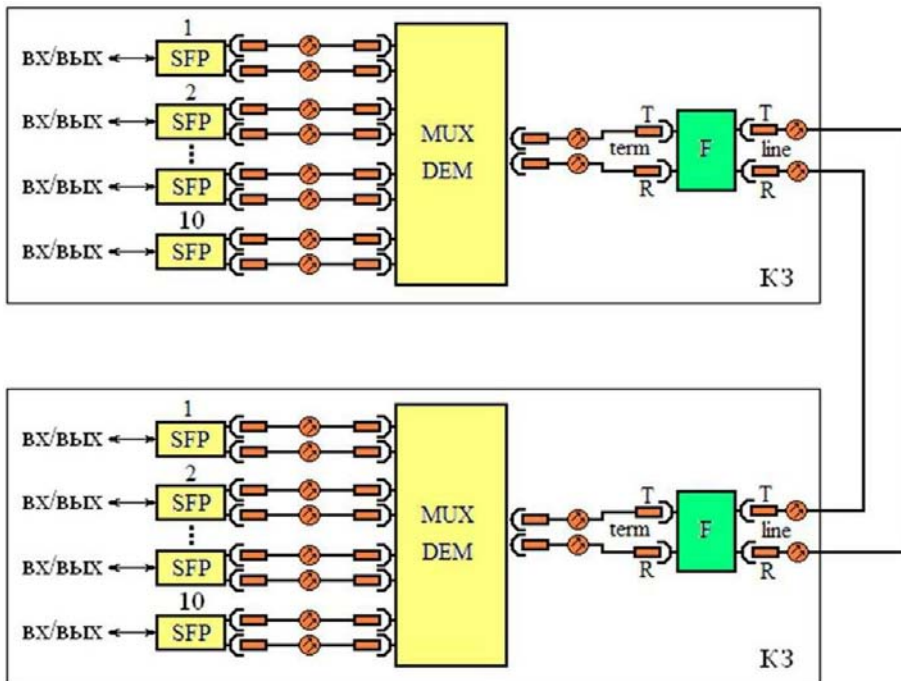


Рис. 4. Структурная схема ВОСП

Таблица 3

Значения изменения коэффициента передачи между оптическими полюсами

λ , нм	1 270	1 290	1 310	1 330	1 350	1 370	1 390	1 410	1 430	1 450
$A_d(\lambda)$, дБ	0,004	0,005	0,006	0,007	0,008	0,009	0,010	0,011	0,012	0,013

щения. В этом случае длина соединения не будет превышать 10 м. Допускается расположение устройств в разных помещениях, но в пределах одной КЗ. В расчетах будем принимать длину соединения 10 м.

Оптические порты FOBOS-100GE (GL) line соединены с двумя оптическими волокнами SMF в оптическом кабеле. В соответствии со схемами, представленными на рис. 5, может быть задействовано одно или четыре волокна при использовании резервирования. В случае аварийной ситуации произойдет автоматическое переключение на резервные линии.

На противоположной стороне ВОСП установлено аналогичное средство защиты информации серии FOBOS. Оптические полюса T и R первого контроллера защиты соединены соответственно с оптическими полюсами R и T второго контроллера защиты, расположенного на противоположной стороне. Остальные устройства и их соединения со вторым контроллером точно такие же, как на уже рассмотренной стороне ВОСП.

Защищенная ВОСП обеспечивает соединение *точка—точка* и позволяет создавать сети любой конфигурации, наращивать количество абонентов, изменять топологию, вводить резервирование

особо важных каналов связи в процессе эксплуатации.

Дальности передачи информации за пределами КЗ

Максимальная дальность передачи ВОСП определяется по формуле

$$L = \frac{B}{\alpha} [\text{км}], \quad (4)$$

где B [дБ] — бюджет ВОСП за пределами КЗ; α [дБ/км] — коэффициент затухания в волокне на рабочей длине волны.

Бюджет защищенной ВОСП (см. рис. 4) за пределами КЗ составит

$$B = W_o - 2A_{kz} - 2A_{md} - 2A_s - A_{TT} - A_{RR} - W_p [\text{дБ}], \quad (5)$$

где W_o [дБм] — мощность передатчика модуля; A_{kz} [дБ] — оптические потери в ВОЛП в пределах КЗ (модуль—мультиплексор; демультиплексор—модуль); A_{md} [дБ] — оптические потери в

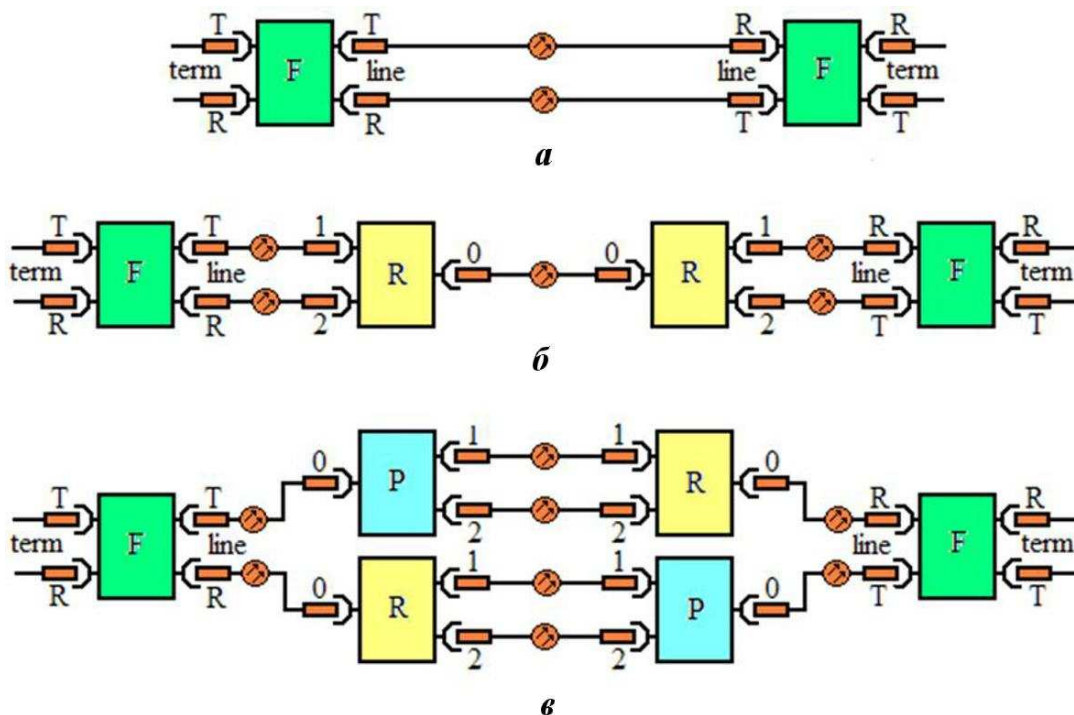


Рис. 5. Типовые схемы включения контроллеров в ВОСП (F — контроллер защиты; P — переключатель 1×2 ; R — разветвитель 1×2 (50:50)): а — дуплексное соединение *точка—точка*; б — дуплексное соединение *точка—точка* по одному волокну; в — дуплексное соединение *точка—точка* с резервированием линий

мультиплекторе/демультиплекторе; A_s [дБ] — оптические потери в оптических шнурах (мультиплексор — контроллер защиты); A_{TT} , A_{RR} [дБ] — оптические потери в контроллере защиты между портами TT и RR соответственно; W_p [дБм] — порог чувствительности приемника модуля.

В табл. 4 приведены результаты расчета максимальной дальности передачи за пределами КЗ для защищенной ВОСП: на скорости 1,25 Гбит/с она составляет не менее 37,5 км, а на скорости 10,31 Гбит/с — не менее 20 км. Полученные значения соответствуют классу межобъектовых ВОСП по дальности передачи и вполне достаточны для создания распределенных АС предприятий отрасли.

Максимальная и минимальная мощности информационного сигнала на границе КЗ

С использованием уже введенных обозначений максимально возможную мощность информационного сигнала на границе КЗ можно определить по формуле

$$W_{kz\max} = W_o - A_{kz} - A_{md} - A_s - A_{TT} \text{ [дБм]}.$$

Результаты расчета максимальной мощности в ВОСП на границе КЗ приведены в табл. 5.

Для того чтобы обеспечить максимальную защищенность информации, необходимо определить минимальную мощность на границе КЗ, при которой в каждом канале будет обеспечиваться заданный коэффициент ошибок BER. Расчет минимальной допустимой мощности информационного сигнала на границе КЗ при максимально допустимых потерях в ВОЛП, равных бюджету, можно осуществить по формуле

$$W_{kzm} = W_p + A_{RR} + A_s + A_m + B \text{ [дБм]},$$

где A_m [дБ] — оптические потери в мультиплекторе.

Результаты расчета минимально допустимой мощности на границе КЗ при максимально допустимых потерях в ВОЛП приведены в табл. 6.

Таким образом, диапазон изменения мощности информационного сигнала в каждом канале при максимально допустимых потерях в ВОЛП (равных бюджету) может составлять от $-11,5$ до $-5,5$ дБм.

Расчет минимально допустимой мощности информационного сигнала на границе КЗ при минимальных потерях в ВОЛП можно осуществить по формуле

$$W_{kzmm} = W_p + A_{RR} + A_s + A_m \text{ [дБм]}.$$

Таблица 4

Расчет максимальной дальности передачи за пределами КЗ

Величина, единица измерения	Обозначение	Скорость передачи, Гбит/с		Примечание
		1,25	10,31	
Мощность передатчика модуля, дБм	W_o	0,0	0,0	[3]
Оптические потери в ВОЛП в пределах КЗ, дБ	A_{kz}	2,0	2,0	Длина ВОЛП в КЗ 2,5 км
Максимальные оптические потери в мультиплекторе/демультиплекторе, дБ	A_{md}	3,0	3,0	
Оптические потери в оптических шнурах, дБ	A_s	1,0	1,0	Длина шнура 1–10 м
Максимальные оптические потери в контроллере защиты между портами TT, дБ	A_{TT}	3,5	3,5	Табл. 1
Максимальные оптические потери в контроллере защиты между портами RR, дБ	A_{RR}	0,5	0,5	Табл. 1
Порог чувствительности приемника модуля, дБм	W_p	-23*	-23*	[3]
Бюджет ВОЛП за пределами КЗ, дБ	B	-31**	-24**	Формула (5)
		7*	7*	
Максимальная дальность передачи за пределами КЗ, км	L	15**	8**	Формула (4)
		17,5*	17,5*	
		37,5**	20,0**	

* Значение при использовании в приемном модуле PIN-фотодиода.

** Значение при использовании в приемном модуле лавинного фотодиода.

Расчет максимальной мощности на границе КЗ

Величина, единица измерения	Обозначение	Значение	Примечание
Мощность передатчика модуля, дБм	W_o	0,0	[3]
Оптические потери в ВОЛП в пределах КЗ, дБ	A_{kz}	1,0	Длина ВОЛП 1 м
Максимальные оптические потери в мультиплексоре, дБ	A_{md}	1,0	
Оптические потери в оптических шнурах, дБ	A_s	1,0	Длина шнура 1 м
Максимальные оптические потери в контроллере защиты между портами ТТ, дБ	A_{TT}	1,75 + 0,25 + 0,5 = 2,5	Суммарные потери на ответвителе, переключателе и двух соединителях
Максимальная мощность на границе КЗ, дБм	$W_{kz \max}$	-5,5	

Расчет минимально допустимой мощности на границе КЗ при максимально допустимых потерях

Величина, единица измерения	Обозначение	Скорость передачи, Гбит/с		Примечание
		1,25	10,31	
Порог чувствительности приемника модуля, дБм	W_p	-23,0*	-23,0*	[3]
Максимальные оптические потери в контроллере защиты между портами RR, дБ	A_{RR}	-31,0**	-24,0**	Табл. 1
Оптические потери в оптических шнурах, дБ	A_s	0,5	0,5	Длина шнура 1–10 м
Максимальные оптические потери в демультимплексоре, дБ	A_{md}	1,0	1,0	[3]
Бюджет ВОЛП за пределами КЗ, дБ	B	3,0	3,0	
Минимальная мощность на границе КЗ, дБм	W_{kzm}	7*	7*	
		15**	8**	
		-11,5	-11,5	

* Значение при использовании в приемном модуле PIN-фотодиода.

** Значение при использовании в приемном модуле лавинного фотодиода.

Результаты расчета минимально допустимой мощности на границе КЗ при минимально возможных потерях в ВОЛП приведены в табл. 7.

Таким образом, из табл. 5–7 следует, что для обеспечения передачи информации на предельные расстояния 37,5 км со скоростью 1,25 Гбит/с и 20 км со скоростью 10,31 Гбит/с максимальная мощность на границе КЗ может составить -5,5 дБм, а минимально допустимая (при заданном BER) -11,5 дБм. При минимальных потерях в ВОЛП (около 0) минимальная мощность на границе КЗ может составить -26,5 дБм при

скорости 1,25 Гбит/с и -19,5 дБм при скорости 10,31 Гбит/с.

В зависимости от количества каналов общая мощность в оптическом волокне будет увеличиваться в соответствии с табл. 8. Для установки и выравнивания мощностей по каждому контуру на границе КЗ могут быть использованы оптические FM-аттенуаторы с шагом 1 дБ [9]. В случае необходимости увеличения дальности передачи на скорости 10,31 Гбит/с до 30 км могут быть использованы XFP-модули с лавинными фотодиодами, имеющие порог чувствительности -28 дБм.

Таблица 7

Расчет минимально допустимой мощности на границе КЗ при минимально возможных потерях

Величина, единица измерения	Обозначение	Скорость передачи, Гбит/с		Примечание
		1,25	10,31	
Порог чувствительности приемника модуля, дБм	W_p	-23,0*	-23,0*	[3]
Максимальные оптические потери в контроллере защиты между портами RR, дБ	A_{RR}	0,5	0,5	Табл. 1
Оптические потери в оптических шнурах, дБ	A_s	1,0	1,0	Длина шнура 1–10 м
Максимальные оптические потери в демультиплексоре, дБ	A_{md}	3,0	3,0	[3]
Минимальная мощность на границе КЗ, дБм	W_{kzmm}	-18,5*	-18,5*	
		-26,5**	-19,5**	

* Значение при использовании в приемном модуле PIN-фотодиода.

** Значение при использовании в приемном модуле лавинного фотодиода.

Таблица 8

Увеличение мощности в зависимости от количества каналов

Количество каналов	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Увеличение мощности в волокне, дБ	0,0	3,0	4,8	6,0	7,0	7,8	8,5	9,0	9,6	10,0

Структурная схема распределенной АС

Защищенная ВОСП, представленная на рис. 4, позволяет создавать многоконтурные распределенные АС с разграничением прав доступа пользователей. На рис. 6 приведен пример схемы распределенной АС.

Схема АС состоит из трех фрагментов, расположенных в пределах КЗ, и трех контуров (1, 2, 3), каждый из которых изолирован от других с помощью спектрального разделения каналов. Оптические сигналы, несущие информацию с разной степенью секретности, объединяются в один поток мультиплексором М и передаются по оптическим волокнам ОВ, расположенным за пределами КЗ. Защита информации от утечки при передаче по оптическому каналу обеспечивается контроллерами защиты F. Кроме того, защищенность информации повышается за счет параллельной передачи в одном волокне нескольких каналов одновременно на нескольких длинах волн.

Заключение

Предлагаемая защищенная ВОСП позволяет создавать многоконтурные распределенные

АС с разграничением прав доступа пользователей (до 10 независимых контуров) с защитой информации от утечки при передаче

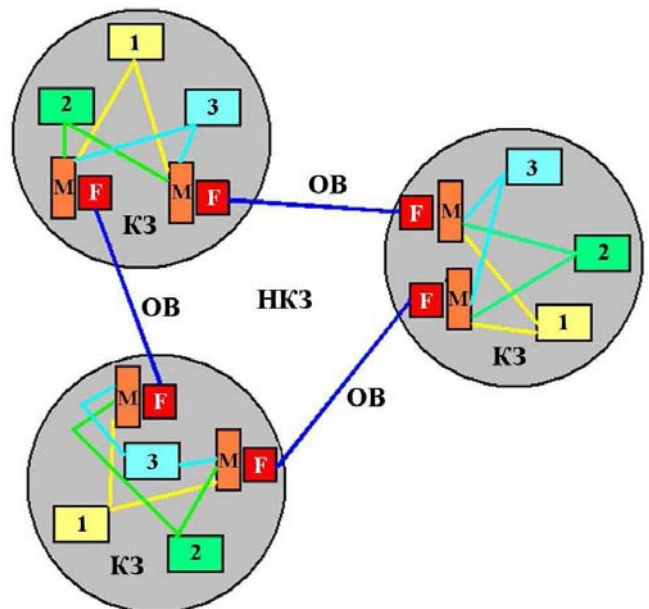


Рис. 6. Пример схемы многоконтурной распределенной АС с разграничением прав доступа пользователей (НКЗ — неконтролируемая зона)

че по оптическому каналу за пределами КЗ. При этом обеспечивается дальность передачи информации до 20–30 км на скорости 10,31 Гбит/с и 37,5 км на скорости 1,25 Гбит/с. Чувствительность системы защиты за счет использования CWDM-технологии при контроле на длине волны 1610 нм увеличивается с 0,03 дБ до 0,004–0,013 дБ в зависимости от длины волны в диапазоне 1270–1450 нм. Защищенная ВОСП обеспечивает связь *точка–точка* и позволяет создавать распределенные многоконтурные АС любой топологии при использовании одного или двух оптических волокон. Для линий связи с повышенными требованиями может быть использовано резервирование.

Список литературы

1. *Ивченко С. Н., Нарышкина О. Н., Овечкин С. И. и др.* Защищенные волоконно-оптические системы для распределенных вычислительных сетей // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2014. Вып. 3. С. 85–96.
2. G 694.2. Spectral grids for WDM applications CWDM wavelength grid. ITU-T, 12/2003. www.optiwave.com.
3. Каталог продукции компании TELCON. www.telcon.ru.
4. US Patent № 4973169. Method and apparatus for securing information communicated through optical fibers. 1990. www.google.com.
5. *Снайдер А., Лав Дж.* Теория оптических волноводов: Пер. с англ / Под ред. Е. М. Дианов, В. В. Шевченко. М.: Радио и связь, 1987.
6. *Lemlem M.* Investigation of the Effects of Macro Bending Loss on Step Index Single Mode Fiber. Ethiopia: Addis Ababa University, 2012.
7. Краткий справочник по стандартам IEEE 802.3. www.habrahabr.ru.
8. Сборник методических документов по технической защите информации ограниченного доступа, не содержащей сведений, составляющих государственную тайну, в волоконно-оптических системах передачи. (МД по ТЗИ ВОСП-К). М.: ФСТЭК России, 2012.
9. Каталог продукции компании ОПТЕЛ. www.optel.ru.

Статья поступила в редакцию 23.12.14.

A PROTECTED FIBER-OPTIC SYSTEM FOR TRANSMISSION OF CONFIDENTIAL DATA FOR MULTILoop DISTRIBUTED COMPUTER-AIDED SYSTEMS WITH DISCRIMINATION OF THE USER ACCESS RIGHTS V. V. Shubin (FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, Nizhny Novgorod region).

The paper describes a protected fiber-optic system for confidential data transmission on the basis of data protection controllers FOBOS with the use of WDM for communication and supervisory channels. It is demonstrated that the coarse wave division multiplexing (CWDM) technology allows creating a multiloop (up to 10 loops) distributed computer-aided system of an enterprise with protection against leakage of information via an optical channel during the transmission of data outside the supervised zone. The transmission at a distance of 20–30 km with the transmission rate 10,31 Gbit/s and at a distance of 37,5 km with the transmission rate 1,25 Gbit/s is provided.

Keywords: protected fiber-optic system for confidential data transmission, data protection controller, different access rights.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Авербух Владимир Лазаревич — ИММ УрО РАН, г. Екатеринбург, заведующий сектором компьютерной визуализации, *e-mail*: averbukh@imm.uran.ru

Анненкова Ольга Геннадьевна — ИМКН УрФУ, г. Екатеринбург, магистрант

Бахтерев Михаил Олегович — ИММ УрО РАН, г. Екатеринбург, младший научный сотрудник

Вожаков Иван Сергеевич — Новосибирский филиал ИБРАЭ РАН, г. Новосибирск, инженер,
e-mail: vozhakov@gmail.com

Жданов Владимир Семенович — Новосибирский филиал ИБРАЭ РАН, г. Новосибирск, заведующий лабораторией, *e-mail*: vzhdv@rambler.ru

Карлыханов Николай Григорьевич — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИТФ", г. Снежинск, начальник лаборатории, *e-mail*: n.g.karlykhanov@vniitf.ru

Киселев Аркадий Евгеньевич — ИБРАЭ РАН, г. Москва, заведующий отделением,
e-mail: ksv@ibrae.ac.ru

Кузнецова Марина Евгеньевна — Новосибирский филиал ИБРАЭ РАН, г. Новосибирск, инженер, *e-mail*: kuznetsovamarina89@gmail.com

Манаков Дмитрий Валерьянович — ИММ УрО РАН, г. Екатеринбург, главный программист

Митенкова Елена Федоровна — ИБРАЭ РАН, г. Москва, заведующая лабораторией,
e-mail: mit@ibrae.ac.ru

Раткевич Ирина Сергеевна — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, младший научный сотрудник, *e-mail*: ratkevichis@gmail.com

Семенова Татьяна Викторовна — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник научно-исследовательского сектора, *e-mail*: tvsem@md08.vniief.ru

Усов Эдуард Викторович — Новосибирский филиал ИБРАЭ РАН, г. Новосибирск, научный сотрудник, *e-mail*: usovev@ngs.ru

Хлебников Владимир Александрович — ВНИИА им. Духова, г. Москва, научный сотрудник,
e-mail: breadoff@gmail.com

Чалый Руслан Васильевич — ИБРАЭ РАН, г. Москва, заведующий лабораторией,
e-mail: chalyu@ibrae.ac.ru

Чиндяев Игорь Вячеславович — СФТИ НИЯУ МИФИ, г. Снежинск, студент

Шубин Владимир Владимирович — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник отдела, *e-mail*: V.V.Shubin@vniief.ru

Янилкин Алексей Витальевич — ВНИИА им. Духова, г. Москва, начальник подразделения,
e-mail: yanilkin@vniia.ru

ПЕРЕЧЕНЬ

статей, опубликованных в 2015 г. в научно-техническом сборнике "Вопросы атомной науки и техники". Сер. "Математическое моделирование физических процессов"

Хищенко К. В., Чарахчян А. А. Квазиодномерная модель термоядерного зажигания плотной DT-смеси под действием протонных пучков. Вып. 1. С. 3–15.

Яцевич С. В., Курулин В. В., Рубцова Д. П. О применении алгоритма PISO в задачах динамики молекулярно несмешивающихся жидкостей. Вып. 1. С. 16–29.

Зацепин О. В., Кандиев Я. З. Методика моделирования по ценности для решения по программе ПРИЗМА задач глубокого прохождения и детектирования реакторной физики. Вып. 1. С. 30–36.

Епишков И. М., Егоров П. В. Распараллеливание методики Д для решения двумерных задач газовой динамики с динамической балансировкой арифметической нагрузки процессоров. Вып. 1. С. 37–46.

Сидоров М. Л., Пронин В. А. Неструктурированная призматическая дискретизация сложных геологических структур в параллельном режиме. Вып. 1. С. 47–55.

Панов А. И., Шурыгин А. В. Некоторые алгоритмы построения неструктурированных многоугольных сеток для методики ТИМ-2D. Вып. 1. С. 56–65.

Гагарин С. В., Галицкая Н. В., Беломестных О. В., Кузьмина С. И., Могиленских Д. В., Приб Е. А., Ушкова А. А. Технология проведения интерполяции данных двумерных расчетов в программном комплексе БАЗИС. Вып. 1. С. 66–77.

Нарышкина О. Н., Светиков А. В., Шубин В. В. Распознавание цифровых сигналов при малых отношениях сигнал/шум. Вып. 1. С. 78–87.

Родионов А. В., Тагирова И. Ю. Искусственная вязкость в схемах типа Годунова как метод подавления "карбункул"-неустойчивости. Вып. 2. С. 3–11.

Бондаренко Ю. А., Софронов В. Н. Взаимодействие звука с границей разных веществ в разностных схемах одномерной лагранжевой газовой динамики. Зависимость точности от способа согласования сетки. Вып. 2. С. 12–27.

Андреевских Л. А., Епишков И. М., Корепова Н. В., Линник Д. М., Муругова О. О., Титова В. Б., Чернышёв Ю. Д. Численное моделирование процесса детонации в трехмерном пространстве на адаптивно-встраиваемой лагранжевой сетке в методике "Д". Вып. 2. С. 28–39.

Тюпанова О. А. Модифицированная кинетическая модель хрупкого откольного разрушения. Вып. 2. С. 40–48.

Олесницкая К. К., Потехин А. Л., Потехина Е. В., Тарасов В. И. Методы ускорения расчета начальных данных по комплексу программ 3D-РНД при численном моделировании задач математической физики в параллельном режиме. Вып. 2. С. 49—58.

Беломестных О. В., Гагарин С. В., Могиленских Д. В., Приб Е. А., Ушкова А. А. Унифицированная система GeomGrid2 для обеспечения препроцессинга двумерных задач математического моделирования. Вып. 2. С. 59—68.

Ерёмин Е. В., Залялов Н. Н. ОЗУ-резидентная операционная система на базе ядра Linux, оптимизированная для высокопроизводительных вычислений. Вып. 2. С. 69—77.

Панов А. И., Шурыгин А. В. Использование различных преобразований счетной сетки в методике ТИМ-2D. Вып. 2. С. 78—87.

Бондаренко Ю. А. Влияние способа учета теплопроводности на устойчивость счета двухэтапной газодинамической разностной схемы. Вып. 3. С. 3—19.

Тарасова Н. В., Козелков А. С., Мелешкина Д. П., Лашкин С. В., Денисова О. В., Сизова М. А. Особенности применения алгоритма SIMPLE для расчета сжимаемых течений. Вып. 3. С. 20—34.

Соболев И. В., Шурыгин А. В. Сшивание многогранных неструктурированных сеток в методике ТИМ-3D. Вып. 3. С. 35—45.

Шемарулин В. Е., Львова С. С., Янилкин Ю. В. Об одном режиме разлета в вакуум плоского слоя идеального газа. Вып. 3. С. 46—63.

Ромашка М. Ю., Янилкин А. В. Моделирование накопления радиационных дефектов в чистом молибдене методами кинетической теории и кластерной динамики. Вып. 3. С. 64—75.

Басалов В. Г., Козлов Д. О., Холостов А. А. Топология "мультиплектор" для высокопроизводительной и устойчивой к неисправностям коммуникационной сети с архитектурой СМПО-10G. Вып. 3. С. 76—84.

СОДЕРЖАНИЕ

CONTENTS

<i>Митенкова Е. Ф., Семенова Т. В.</i> Использование программы TDMCC для решения задач с доминантным отношением, близким к единице	3
<i>Возжаков И. С., Усов Э. В., Жданов В. С., Кузнецова М. Е., Киселёв А. Е., Чалый Р. В.</i> Моделирование плавления оболочки твэла и перемещения расплава в ТВС реакторов типа БН кодом СОКРАТ-БН	15
<i>Хлебников В. А., Янилкин А. В.</i> Моделирование радиационно-индуцированного накопления точечных дефектов в гидриде титана методом кинетического Монте-Карло	22
<i>Карлыханов Н. Г., Чиндяев И. В.</i> Применение алгоритма выделения равновесной части спектра при расчете задач переноса излучения в спектральной диффузионной постановке	34
<i>Раткевич И. С.</i> Языковой сервис FRIS для эффективной разработки Fortran-приложений. Обзор возможностей	48
<i>Авербух В. Л., Анненкова О. Г., Бакhtерев М. О., Манаков Д. В.</i> Анализ и оценка систем визуализации программного обеспечения параллельных вычислений	58
<i>Шубин В. В.</i> Защищенная волоконно-оптическая система передачи информации ограниченного доступа для многоконтурных распределенных автоматизированных систем с разграничением прав доступа пользователей	71
Сведения об авторах	81
Перечень статей, опубликованных в 2015 г. в научно-техническом сборнике "Вопросы атомной науки и техники". Сер. "Математическое моделирование физических процессов"	82

<i>Mitenkova E. F., Semenova T. V.</i> TDMCC code application to solve problems with a dominant ratio close to one	3
<i>Vozhakov I. S., Usov E. V., Zhdanov V. S., Kuznetsova M. E., Kiselev A. E., Chalyi R. V.</i> Simulation of the fuel element cladding melting and the melt transport in a fuel assembly of the BN-type reactor using the SOKRAT-BN code	15
<i>Khlebnikov V. A., Yanilkin A. V.</i> Simulation of the radiation-induced accumulation of point defects in titanium hydride using the kinetic Monte Carlo method	22
<i>Karlykhanov N. G., Chindyayev I. V.</i> Application of the algorithm identifying an equilibrium part of spectrum during the simulation of the radiation transport problems with spectral diffusion	34
<i>Ratkevich I. S.</i> FRIS language service for the effective development of Fortran applications: A review of capabilities	48
<i>Averbukh V. L., Annenkova O. G., Bakhterev M. O., Manakov D. V.</i> Analysis and assessment of visualization systems used in software for parallel computations	58
<i>Shubin V. V.</i> A protected fiber-optic system for transmission of confidential data for multiloop distributed computer-aided systems with discrimination of the user access rights	71
Information about authors	81
The list of papers published in the sci-tech collected edition "Voprosy atomnoi nauki i tekhniki". Ser. "Matem. Model. Fiz. Proc." during 2015	82

Ответственный за выпуск Е. В. Соколовская

Редакторы Н. Ю. Зимакова,
Е. Н. Старченко

Корректор А. В. Федоренко

Подписано в печать 10.11.15
Офсетн. печ. Усл. печ. л. ~ 11 Формат 60×84/8
Тираж 1000 экз. Зак. тип. 2182-2012 Уч.-изд. л. ~ 13
7 статей

Учредитель: ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ"
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-29789 от 04 октября 2007 г.

Оригинал-макет подготовлен
в Математическом отделении ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ"

Отпечатано в ИПК ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ"
607188, г. Саров Нижегородской обл., ул. Силкина, 23

ВНИМАНИЮ АВТОРОВ

Редакция н/т сборника "Вопросы атомной науки и техники" серии "Математическое моделирование физических процессов" просит авторов, направляющих статьи в журнал, придерживаться следующих правил.

1. Автор представляет редакции 2 экземпляра рукописи основного текста статьи на русском языке, а также аннотацию и реферат с обязательным указанием ключевых слов. Текст набирается на компьютере (шрифт не менее 12 пунктов) на одной стороне листа формата А4 через два интервала. Рекомендуемый объем статьи — не более 25 страниц указанного формата, включая рисунки. Все страницы должны быть пронумерованы. Рукопись должна быть подписана всеми авторами.

Редакции также передается (по электронной почте) соответствующий текстовый файл в формате .doc (WinWord).

2. Статью обязательно должны сопровождать следующие документы:

1) направление от организации, в которой выполнена работа, с указанием информации о первичном или повторном опубликовании материала статьи (отдельных ее страниц);

2) разрешение на открытое опубликование от организации, в которой выполнена работа.

Название статьи и список авторов, указанные в документах, должны соответствовать указанным в представленной рукописи.

Необходимо также сообщить полные имена и отчества, должности и электронные адреса авторов и обязательно указать номер телефона и/или e-mail для обратной связи.

3. Название статьи должно быть конкретным и лаконичным. Перед названием необходимо указать УДК. Разделы и подразделы статьи должны иметь заголовки.

4. Необходимо соблюдать единство терминологии, соответствующее стандартам по теме статьи.

5. Для нумерации формул, на которые имеются ссылки в тексте, используются последовательные натуральные числа. Формулы, на которые нет ссылок, не нумеруются.

6. Все обозначения должны расшифровываться. Не рекомендуется использовать одинаковые обозначения для разных величин и разные обозначения для одной и той же величины.

Для различия букв с одинаковым или сходным начертанием (например, a и α ("альфа"), v и ν ("ню"), s и S) желательны делать соответствующие пометки.

Векторные величины необходимо выделять жирным шрифтом или отмечать стрелкой.

7. Рисунки должны быть четкими и обязательно иметь подрисовочные подписи. Текстовые надписи на самих рисунках не рекомендуются, их заменяют символьными (цифровыми) обозначениями, которые объясняются в тексте или подрисовочной подписи.

Таблицы должны иметь заголовки.

На все таблицы и рисунки в тексте статьи должны быть ссылки.

8. Список литературы должен быть составлен по порядку ссылок в тексте. Ссылки на неопубликованные работы (отчеты) не допускаются.

В библиографическое описание источника обязательно включаются фамилии и инициалы авторов, название книги или статьи. Для книг указывается город, издательство и год издания, для статей — название журнала, год издания, том, выпуск (номер), страницы начала и конца статьи. Описания иностранных источников должны быть напечатаны латинским шрифтом. Если источник размещен в Интернете, указывается адрес сайта.

9. Все материалы по статьям должны направляться по адресу:

607188 г. Саров Нижегородской обл., пр. Мира, 37, РФЯЦ-ВНИИЭФ, отделение 08.

В редакцию журнала ВАНТ, сер. "Математическое моделирование физических процессов".

Тел. (83130)2-84-06; e-mail: sokol@vniief.ru

В случае несоблюдения указанных правил редакция журнала оставляет за собой право задержать публикацию или отклонить ее без рассмотрения.

Плата за публикацию с авторов не взимается.

При принятии статьи к публикации права на ее использование переходят к издателю.

УДК 519.642:621.039.5

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРОГРАММЫ TDMSS ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ С ДОМИНАНТНЫМ ОТНОШЕНИЕМ, БЛИЗКИМ К ЕДИНИЦЕ / Е. Ф. Митенкова, Т. В. Семенова // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2015. Вып. 4. С. 3—14.

Представлены новые возможности программы TDMSS для анализа распределений скорости деления в слабосвязанных системах. Рассмотрены методы вычисления доминантного отношения и энтропии Шеннона, реализованные в программе TDMSS. Для систем с доминантным отношением, близким к единице, продемонстрирована связь между сходимостью вычисляемых функционалов и энтропией Шеннона. Приведен пример, в котором недооценка погрешностей вычисляемых функционалов и специфика алгоритмов, используемых в задачах на критичность, приводят к несогласованным результатам вариантных расчетов, связанных с малыми изменениями исходных параметров системы (рис. 15, табл. 3, список лит. — 15 назв.).

Ключевые слова: метод Монте-Карло, метод поколений, слабосвязанная система, доминантное отношение, энтропия Шеннона.

УДК 629.039.58

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАВЛЕНИЯ ОБОЛОЧКИ ТВЭЛА И ПЕРЕМЕЩЕНИЯ РАСПЛАВА В ТВС РЕАКТОРОВ ТИПА "БН" КОДОМ "СОКРАТ-БН" / И. С. Вожаков, Э. В. Усов, В. С. Жданов, М. Е. Кузнецова, А. Е. Киселёв, Р. В. Чалый // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2015. Вып. 4. С. 15—21.

Статья посвящена разработке и внедрению модели плавления и перемещения оболочки твэла в код СОКРАТ-БН, который предназначен для анализа и обоснования безопасности АЭС с реакторами типа БН. Расчетный код позволяет проводить численное моделирование динамики реакторов на быстрых нейтронах с натриевым теплоносителем в условиях нарушения нормальной эксплуатации, проектных и запроектных аварий. Численное моделирование штатных и аварийных режимов работы является одним из основных методов обоснования безопасной эксплуатации проектируемых реакторных установок. Особенности быстрых реакторов являются высокие удельные энерговыделения и низкие рабочие давления, которые приводят к тому, что при закипании теплоносителя в ходе аварии с потерей расхода скорость течения паров может достигать сотен метров в секунду, что оказывает значительное влияние на динамику течения расплава материалов твэлов. Перемещение расплава твэлов и элементов конструкций влечет за собой изменение реактивности реактора, а также может привести к формированию как нижних, так и верхних блокировок в отдельных тепловыделяющих сборках и, как следствие, перераспределению потоков теплоносителя в первом контуре активной зоны.

Для расчета перемещения расплавленной оболочки предлагается учитывать основные особенности процесса стекания оболочки в быстром реакторе. В частности, в модели предполагается, что расплав перемещается вдоль твэла в виде пленки, которая изменяет свою толщину в зависимости от количества расплава, а основными влияющими на динамику расплава силами являются сила тяжести, трение с газовым потоком и сила трения с твердой стенкой. Особенностью модели является четкое выделение границ расплава, что позволяет избежать численной диффузии, т. е. расплав не размазывается по всей расчетной области, а находится в четко очерченных границах, которые перемещаются в соответствии с физикой происходящих процессов.

В целях демонстрации применимости описанной модели представлены результаты расчета задач, как имеющих аналитическое решение, так и моделирующих реальные реакторные установки. Показано, что численное моделирование с использованием модели плавления и перемещения оболочки твэла корректно описывает происходящие процессы в таких задачах, как плавление цилиндра, стекание расплава под действием гравитационных сил и сил трения с потоком теплоносителя (рис. 3, список лит. — 20 назв.).

Ключевые слова: быстрый реактор, твэл, оболочка, плавление, моделирование, СОКРАТ-БН.

УДК 519.245

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАДИАЦИОННО-ИНДУЦИРОВАННОГО НАКОПЛЕНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В ГИДРИДЕ ТИТАНА МЕТОДОМ КИНЕТИЧЕСКОГО МОНТЕ-КАРЛО / В. А. Хлебников, А. В. Янилкин // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2015. Вып. 4. С. 22—33.

Представлены результаты моделирования процессов образования и эволюции дефектов, возникающих в титановых мишенях импульсных нейтронных источников при их эксплуатации. Сопоставляются два подхода: явное описание атомарной диффузии на жесткой решетке и решение системы кинетических уравнений кластерной динамики. В обоих случаях используется метод *кинетического Монте-Карло*. Получены временные зависимости концентраций точечных дефектов и их комплексов, построены распределения по размерам комплексов (рис. 13, список лит. — 10 назв.).

Ключевые слова: радиационная поврежденность, метод кинетического Монте-Карло (kinetic Monte Carlo method), кластерная динамика, программный пакет SPPARKS.

УДК 533.951

ПРИМЕНЕНИЕ АЛГОРИТМА ВЫДЕЛЕНИЯ РАВНОВЕСНОЙ ЧАСТИ СПЕКТРА ПРИ РАСЧЕТЕ ЗАДАЧ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ В СПЕКТРАЛЬНОЙ ДИФФУЗИОННОЙ ПОСТАНОВКЕ / Н. Г. Карлыханов, И. В. Чиндяев // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2015. Вып. 4. С. 34—47.

Рассматриваются вопросы построения алгоритма выделения равновесной части спектра, который использовался при расчете задач переноса излучения в спектральной диффузионной постановке. Реализация алгоритма включает в себя автоматический выбор равновесных групп, а также разрешение возникающих при этом внутренних граничных условий. Применимость рассматриваемого метода иллюстрируется на примере решения ряда задач (рис. 12, табл. 3, список лит. — 8 назв.).

Ключевые слова: перенос излучения, спектральная диффузия, выделение равновесной части спектра.

УДК 004.4'2

ЯЗЫКОВОЙ СЕРВИС FRIS ДЛЯ ЭФФЕКТИВНОЙ РАЗРАБОТКИ FORTRAN-ПРИЛОЖЕНИЙ. ОБЗОР ВОЗМОЖНОСТЕЙ / И. С. Раткевич // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2015. Вып. 4. С. 48—57.

Рассматриваются возможности языкового сервиса FRIS по расширенной поддержке эффективной разработки приложений на языке программирования Fortran в Microsoft Visual Studio. Проводится сравнение возможностей FRIS с имеющимися в наиболее распространенных аналогах от Intel и PGI (рис. 16, табл. 1, список лит. — 8 назв.).

Ключевые слова: FRIS, Fortran Intelligent Solutions, расширение Visual Studio, языковой сервис, Fortran-2003.

УДК 519.6

АНАЛИЗ И ОЦЕНКА СИСТЕМ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ / В. Л. Авербух, О. Г. Анненкова, М. О. Бахтерев, Д. В. Манаков // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2015. Вып. 4. С. 58—70.

Рассмотрены подходы к визуализации трасс и графов вызовов *параллельных* программ на основе использования ряда метафор визуализации программного обеспечения. Проведен анализ применимости метафор на основе критериев оценки визуализации. Приведены примеры использования средств визуального сопровождения разработки системного программного обеспечения нижнего уровня для современных процессоров с параллельной архитектурой.

Авторы ставят проблему формального описания и/или верификации визуализации (рис. 10, список лит. — 36 назв.).

Ключевые слова: визуализация программного обеспечения, трасса исполнения, граф вызовов, метафора визуализации.

УДК 621.383:004.721

ЗАЩИЩЕННАЯ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ПЕРЕДАЧИ ИНФОРМАЦИИ ОГРАНИЧЕННОГО ДОСТУПА ДЛЯ МНОГОКОНТУРНЫХ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ АВТОМАТИЗИРОВАННЫХ СИСТЕМ С РАЗГРАНИЧЕНИЕМ ПРАВ ДОСТУПА ПОЛЬЗОВАТЕЛЕЙ / В. В. Шубин // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2015. Вып. 4. С. 71—80.

Представлено описание защищенной волоконно-оптической системы передачи информации ограниченного доступа на основе контроллеров защиты серии FOVOS с использованием спектрального разделения информационного и контрольного каналов. На основе волоконно-оптической системы передачи можно создавать многоконтурные распределенные автоматизированные системы с разграничением прав доступа пользователей. Показано, что с помощью технологии грубого волнового уплотнения можно создать многоконтурную (до 10 контуров) распределенную автоматизированную систему предприятия с защитой информации от утечки при передаче по оптическому каналу за пределами контролируемой зоны. При этом обеспечивается дальность передачи информации до 20—30 км на скорости 10,31 Гбит/с и 37,5 км на скорости 1,25 Гбит/с. Чувствительность системы контроля на длине волны 1610 нм увеличивается с 0,03 до 0,004—0,013 дБ в диапазоне длин волн 1270—1450 нм. Защищенная волоконно-оптическая система передачи обеспечивает связь *точка—точка* и позволяет создавать распределенные многоконтурные автоматизированные системы любой топологии при использовании минимального количества оптических волокон (рис. 6, табл. 8, список лит. — 9 назв.).

Ключевые слова: защищенная волоконно-оптическая система передачи информации ограниченного доступа, контроллер защиты информации, различные права доступа.

TDMCC CODE APPLICATION TO SOLVE PROBLEMS WITH A DOMINANT RATIO CLOSE TO ONE / E. F. Mitenkova, T. V. Semenova // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2015. No 4. P. 3–14.

New capabilities of the TDMCC code for the analysis of the fission rate distribution in weakly coupled systems are presented. The methods implemented in the TDMCC code to calculate the dominant ratio and Shannon's entropy are considered. For systems with the dominant ratio value close to 1, the relation between the convergence rate of functionals and Shannon's entropy is demonstrated. An example is given, in which underestimation of errors in the calculated functionals and the specifics of the algorithms used to solve the criticality problems lead to inconsistent results in various options of computations with small variations of the original system parameters.

Key words: Monte Carlo method, method of generations, a weakly coupled system, dominant ratio, Shannon entropy.

SIMULATION OF THE FUEL ELEMENT CLADDING MELTING AND THE MELT TRANSPORT IN A FUEL ASSEMBLY OF THE BN-TYPE REACTOR USING THE SOKRAT-BN CODE / I. S. Vozhakov, E. V. Usov, V. S. Zhdanov, M. E. Kuznetsova, A. E. Kiselev, R. V. Chalyi // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2015. No 4. P. 15–21.

The paper subject is the development of the model of melting and transport of a fuel element cladding and its implementation in the SOKRAT-BM code used for the analysis and safety justification of NPPs with the BN-type reactors. The code allows numerically simulating the dynamics of fast neutron reactors with sodium coolants under abnormal operation conditions, in cases of the design basis and beyond the design basis accidents. The numerical simulation of the normal operation and emergency operation conditions is one of the major approaches to the safety justification of reactor operation. The specifics of fast neutron reactors is in high values of the specific energy release and low working pressures and, as a result, with the coolant boiling under the emergency conditions with flow loss the vapor flow rate may reach several hundred meters per second thereby significantly affecting the flow dynamics of the molten materials of fuel elements. The motion of the molten fuel elements and structural elements is followed by the reactivity changes in reactor and may cause the generation of both the lower and upper locks in some fuel assemblies and, hence, to the redistribution of the coolant flows in the first loop of the reactor core.

For the simulation of the molten cladding motion it is suggested to take into account the main specific features of the cladding flow process in fast reactor. In particular, it is assumed that the molten material moves along the given fuel element as a film of a varying thickness depending on the amount of melt and the molten material dynamics is governed by the force of gravity, friction between the melt and gas flow, and friction between the melt and solid wall. The specific feature of the model is in strict identification of the molten material boundaries and this allows circumventing numerical diffusion, i.e. the melt is not spread over the entire computational domain, but have clearly defined boundaries moving in accordance with the physics of these processes.

To demonstrate the described model applicability, results of simulations are presented both for the problems having analytical solutions and those modeling the real reactor plants. It is shown that the numerical simulation with the model of melting and transport of a fuel element cladding adequately describes the processes in a number of problems, such as the problem of a melting cylinder and the problem of a melt flowing under gravitational forces and friction between the molten material and coolant flow.

Key words: fast reactor, fuel element, cladding, melting, simulation, SOKRAT-BN.

SIMULATION OF THE RADIATION-INDUCED ACCUMULATION OF POINT DEFECTS IN TITANIUM HYDRIDE USING THE KINETIC MONTE CARLO METHOD / V. A. Khlebnikov, A. V. Yanilkin // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2015. No 4. P. 22–33.

The paper presents simulation results for the generation and evolution of defects in titanium targets of pulse neutron sources during their operation. Two approaches are compared: the explicit description of atomic diffusion on a rigid lattice and solution of a system of kinetic equations of the cluster dynamics. The kinetic Monte Carlo method is used in the both approaches. The time dependencies have been obtained for the concentrations of point defects and their aggregates, the size distribution of aggregates has been constructed.

Key words: radiation damage, the kinetic Monte Carlo method, cluster dynamics, SPPARKS program package.

APPLICATION OF THE ALGORITHM IDENTIFYING AN EQUILIBRIUM PART OF SPECTRUM DURING THE SIMULATION OF THE RADIATION TRANSPORT PROBLEMS WITH SPECTRAL DIFFUSION / N. G. Karlykhanov, I. V. Chindyaev // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2015. No 4. P. 34–47.

The issues of constructing an algorithm identifying an equilibrium part of spectrum, which has been used to solve the radiation transport problems with spectral diffusion, are discussed. The algorithm implementation includes the automatic selection of equilibrium groups, as well as the account of the resulting internal boundary conditions. The method applicability is illustrated by the example of solving a number of problems.

Key words: radiation transport, spectral diffusion, identification of an equilibrium part of spectrum.

FRIS LANGUAGE SERVICE FOR THE EFFECTIVE DEVELOPMENT OF FORTRAN APPLICATIONS: A REVIEW OF CAPABILITIES / I. S. Ratkevich // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2015. No 4. P. 48–57.

The FRIS language service capabilities providing an extended support for the effective development of Fortran applications in Microsoft Visual Studio are discussed. The FRIS capabilities are compared with those of the most commonly used analogs by Intel and PGI.

Key words: FRIS, Fortran Intelligent Solutions, Visual Studio extension, language service, Fortran-2003.

ANALYSIS AND ASSESSMENT OF VISUALIZATION SYSTEMS USED IN SOFTWARE FOR PARALLEL COMPUTATIONS / V. L. Averbukh, O. G. Annenkova, M. O. Bakhterev, D. V. Manakov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2015. No 4. P. 58–70.

Approaches to visualizing routs and graphs of parallel program calls using a number of software visualization metaphors are considered. The applicability of metaphors on the basis of visualization criteria has been analyzed. Examples of using tools for visualizing the process of developing system software of a lower level for modern parallel-architecture processors are given.

The authors state the problem of formally describing and/or verifying the visualization results.

Key words: software visualization, execution route, call graph, visualization metaphor.

A PROTECTED FIBER-OPTIC SYSTEM FOR TRANSMISSION OF CONFIDENTIAL DATA FOR MULTILoop DISTRIBUTED COMPUTER-AIDED SYSTEMS WITH DISCRIMINATION OF THE USER ACCESS RIGHTS / V. V. Shubin // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2015. No 4. P. 71–80.

The paper describes a protected fiber-optic system for confidential data transmission on the basis of data protection controllers FOBOS with the use of WDM for communication and supervisory channels. It is demonstrated that the coarse wave division multiplexing (CWDM) technology allows creating a multiloop (up to 10 loops) distributed computer-aided system of an enterprise with protection against leakage of information during the transmission of data via an optical channel outside the supervised zone. The transmission at a distance of 20–30 km with the transmission rate 10,31 Gbit/s and at a distance of 37,5 km with the transmission rate 1,25 Gbit/s is provided. The control system's sensitivity with the wavelength 1610 nm improves from 0,03 dB to 0,004–0,013 dB within the range of wavelengths 1270–1450 nm. The protected fiber-optic transmission system provides the *point-to-point* communication and allows constructing distributed multiloop computer-aided systems of any topology using a minimum number of optic fibers.

Key words: protected fiber-optic system for confidential data transmission, data protection controller, different access rights.