

ИНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ (ИТМФ)

Основное направление деятельности теоретических и математического подразделений ИТМФ – создание современной расчетно-теоретической базы моделирования сложных физических процессов прежде всего в задачах механики сплошных сред и физики высоких плотностей энергий, а также задачах по основной тематике деятельности РФЯЦ-ВНИИЭФ.

В 2018 г. усилия специалистов математического отделения были сосредоточены на разработке, создании и совершенствовании математических методик и программных комплексов для эффективного компьютерного моделирования задач в многомерной постановке на вычислительных системах нового поколения, развитии технологий высокопроизводительных вычислений и их внедрении в практику научных исследований и высокотехнологичные отрасли российской промышленности.

МЕТОДИЧЕСКИЕ РАБОТЫ

В 2018 г. специалисты математического отделения выполнили ряд методических работ в рамках совершенствования физико-математических моделей и внедрения их в комплексы программ, созданных в РФЯЦ-ВНИИЭФ, а также работ, связанных с развитием суперкомпьютерной инфраструктуры.

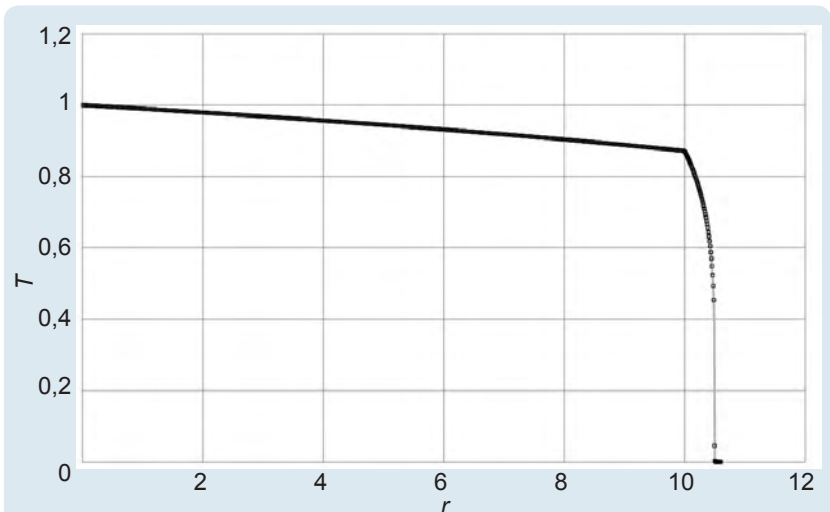
В последнее время среди численных алгоритмов для описания двумерных газодинамических процессов большой популярностью пользуются так называемые бессточные методы. К подобным методам относится, в частности, метод сглаженных частиц

Smooth Particle Hydrodynamics (SPH), основанный на свободно-лагранжевом подходе, согласно которому элементы среды представляются как «размазанные» по пространству области вещества, центры масс которых двигаются по законам динамики сплошной среды. Использование модели частиц позволяет в безавтоматическом режиме численно моделировать течение жидкости и газа с сильными деформациями и большими относительными перемещениями при столкновениях поверхностей раздела веществ.

В математическом отделении ИТМФ активно ведутся работы по созданию и развитию комплексов программ на базе методов сглаженных частиц. В рамках этих работ в 2018 г. была исследована возможность использования метода SPH при расчете процесса переноса энергии излучением, протекающим при тяжёлоионном инерциальном термоядерном синтезе. Исследование проводилось для системы, в которой длина свободного

пробега фотонов много меньше ее характерного размера. Хорошим приближением для этого случая служит модель лучистой теплопроводности. В ходе исследования была разработана и реализована численная методика расчета уравнения лучистой теплопроводности как в двумерной плоской, так и в осесимметричной постановках. Методика апробирована на примере решения задач о распространении тепла в однородных и слоистых системах. Получено хорошее согласие численных и известных аналитических решений.

В ходе исследования также была показана сходимость решения по числу частиц и установлено, что хаотичное расположение частиц не оказывает существенного влияния на точность численного решения. Это позволяет в дальнейшем использовать разработанную и реализованную численную методику в расчетах лучистой теплопроводности в однородных и слоистых системах совместно с процессами газовой динамики.



Распределение температуры, полученное в результате расчета слоистой системы по реализованной численной методике:

● – аналитическое решение, сплошная линия – численное решение

Необходимость точного предсказания поведения взрывчатых веществ (ВВ) при различных воздействиях делает чрезвычайно актуальной задачу численного моделирования процессов инициирования, распространения и затухания детонации. Для ее решения используют различные модели кинетики детонации, и в частности модель Морозова – Карпенко, разработанную в РФЯЦ-ВНИИЭФ.

Численные исследования, выполненные в 2018 г., показали, что классический метод SPH может применяться для моделирования процесса детонации ВВ как с контролем скорости детонационной волны, так и с кинетикой по модели Морозова – Карпенко. Примером служит расчет глубины преддетонационного участка в исследуемом ВВ при заданном давлении на границе ВВ в плоской инициирующей ударной волне прямоугольного профиля. График зависимости глубины возбуждения детонации от нагружающего давления (диаграмма Пополато) – это результат серии расчетов по методу SPH, в которых инициирование ВВ на основе ТАТБ осуществлялось нагружением ударной волной через экраны из алюминия. Видно хорошее согласие расчетных результатов с экспериментальными данными.

Специалисты математического отделения ИТМФ продолжили работу по совершенствованию методов типа Годунова применительно к расчетам двумерных и трехмерных задач на гладких структурированных сетках. Большое внимание уделялось решению проблемы карбункул-неустойчивости – одной из основных проблем современных методов сквозного счета.

Еще в 2015 г. специалистами ИТМФ был предложен

новый подход к ее решению. Суть подхода заключалась в следующем: на фронте ударной волны в базовый метод решения уравнений Эйлера добавляется некоторое количество диссипации в форме правых частей уравнений Навье – Стокса, но с заменой коэффициента молекулярной вязкости на коэффициент искусственной вязкости. Такой подход (метод искусственной вязкости) является внешним по отношению к конкретной схеме и не меняет алгоритм расчета невязких потоков. В последующие годы он был успешно опробован и протестирован на схемах первого порядка точности. В 2018 г. метод искусственной вязкости был адаптирован к схемам типа Годунова повышенной точности. Для исследования проблемы было выбрано несколько реализаций хорошо известных схем. Они включали в себя алгоритмы реконструкции данных по пространству, применяемые в схемах типа MUSCL и WENO, а также алгоритмы интегрирования по времени, такие как методы Рунге – Кутты и процедура *предиктор – корректор* схемы Годунова – Колгана – Родионова (ГКР).

Многочисленные расчеты задач типа задачи Кёрка позволили протестировать и настроить новый метод на отобранных схемах. В результате

для схем повышенного порядка точности был подобран базовый коэффициент в модели искусственной вязкости и сформулированы несколько рекомендаций для решения проблемы карбункул-неустойчивости и существенного снижения уровня осцилляций за фронтом ударной волны.

На примере расчета задачи о двойном маховском отражении по схеме ГКР (второго порядка аппроксимации) в базовом варианте хорошо заметно ухудшающееся качество данных (показано стрелками). Вариант с добавлением искусственной вязкости демонстрирует подавление всех паразитных возмущений.

В методике ТИМ разработан подход к построению трехмерной неструктурированной сетки на основе диаграммы Вороного со специальной расстановкой центров вблизи исходной поверхностной сетки с последующим удалением внешнего слоя ячеек. Специальная расстановка центров позволяет строить сетки в невыпуклых областях, в том числе и полученных в расчетах.

В алгоритме построения сетки выделяются следующие этапы:

– анализ и улучшение качества исходной поверхностной сетки путем дробления боль-

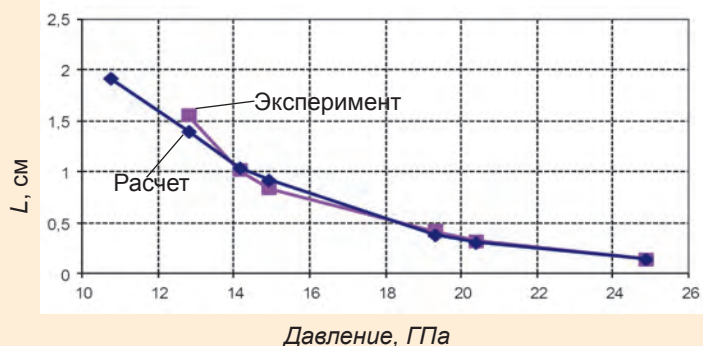
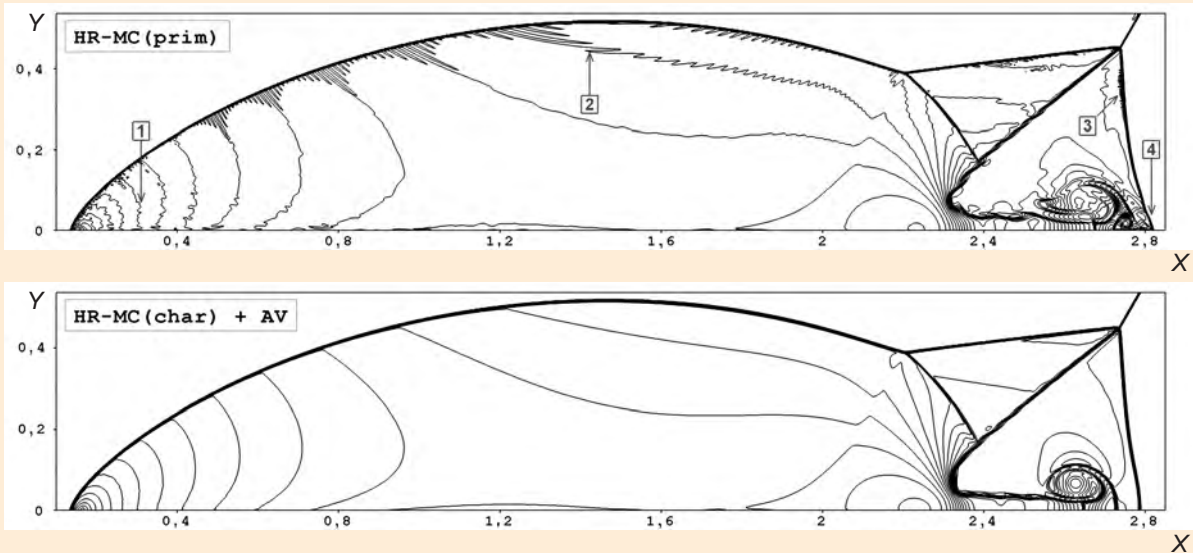


Диаграмма Пополато для ВВ на основе ТАТБ с начальной плотностью 1,91, полученная в расчете по методу SPH



Задача о двойном маховом отражении: а – данные, полученные по схеме ГКР; б – то же с добавлением искусственной вязкости

ших и вытянутых граней и триангуляции неплоских граней;

– расстановка центров ячеек с учетом поверхностной сетки. Для качественного описания границы области центры расставляются парами на одинаковом расстоянии от центров граней поверхностной сетки вдоль направлений внешней и внутренней нормалей. Для построения сетки внутри области построения дополнительные центры расставляются таким образом, чтобы избежать влияния на построение сетки у границы. На данном этапе обрабатываются особенности начальной геометрии (например, «щели» – изломы исходной поверхностной сетки, образующие узкие пустоты);

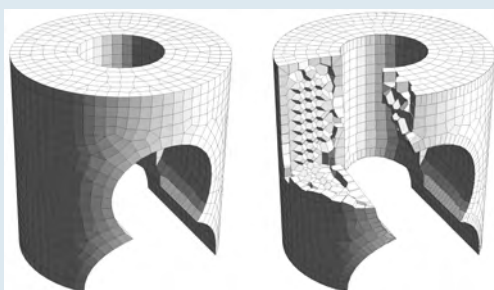
– по набору основных и дополнительных центров строится сетка на основе диаграммы Вороного в габаритном параллелепипеде. При построении не допускается появление малых и вырожденных граней и ребер. На данном этапе особым образом обрабатываются ячейки вблизи изломов исходной поверхности, в том числе у «щелей»;

– удаление внешнего слоя ячеек;

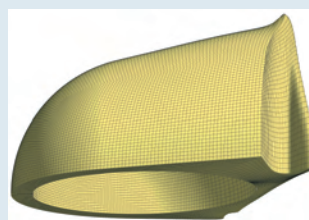
– устранение ступенчатости – дефекта сетки в виде чередования относительно крупных и мелких граней на поверхности с углом между векторами нормалей, близким к 90° , путем коррекции границы сетки с помощью транс-

формации малых граней в узел, ребро или совокупность ребер в зависимости от формы грани.

Дальнейшее развитие получила методика С-007, предназначенная для решения методом Монте-Карло линейных задач переноса нейтронов, гамма-квантов и заряженных частиц. В методике особое внимание уделяется способам описания геометрии, и в 2018 г. поступило предложение использовать для описания геометрии задачи принцип конструктора: сначала геометрия задачи разбивается на самостоятельные фрагменты, называемые блоками, а затем из них формируется требуемая



а



б

Пример сетки диаграммы Вороного для поршня (а) и в деформированной области (б)

конфигурация. Такой подход имеет ряд достоинств: блок, входящий в геометрию многократно, описывается только один раз; для блока, обладающего определенной симметрией, используется упрощенный способ описания; для моделирования траекторий частиц в пределах такого блока применяется ускоренный алгоритм.

Конструирование конечной геометрии задачи осуществляется путем процедуры вложения блоков друг в друга (при необходимости произвольное число раз). Исходный блок – пустое пространство (0-й уровень вложенности), где размещаются блоки 1-го уровня, в которых, в свою очередь, могут размещаться блоки 2-го уровня и т. д. Такой способ задания особенно подходит для задач, геометрия которых содержит много одинаковых структурных фрагментов (например, тепловыделяющие сборки в активной зоне реактора).

На схеме, демонстрирующей геометрию, полученную из трех различных блоков, в варианте *а* квадрат изображает блок 1 (внутренняя структура блоков для данного примера не важна), круг – блок 2, треугольник – блок 3. В варианте *б* представлен результат вложения двух экземпляров блока 3 в блок 2, причем каждое вложение имеет свою ориентацию. Наконец, вариант *в* показывает геометрию после

двукратного вложения блока 2 в блок 1. Отметим, что оба экземпляра блока 2 содержат всё, что в него было вложено.

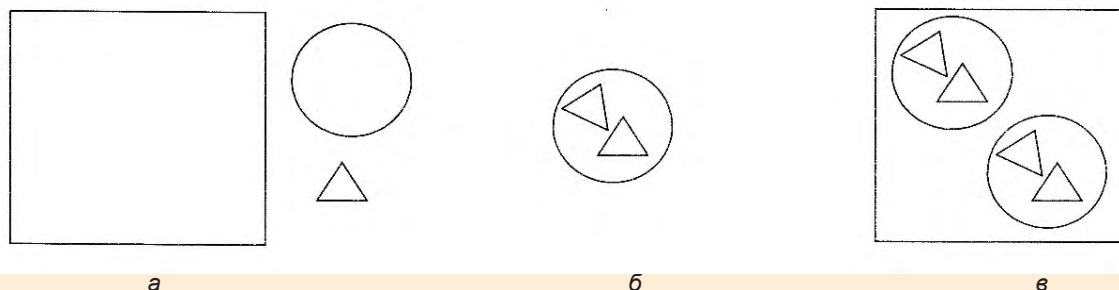
Когда фрагмент геометрии задачи обладает определенной симметрией (осевой, сферической), то для его описания используют соответствующий тип блока: плоский, где поверхности – это набор параллельных плоскостей, а области – слои между плоскостями; сферический, где поверхность – концентрические сферы, а области – сферические слои между ними; осесимметричный, где поверхность и области – это поверхности вращения и тела вращения вокруг некоторой оси; цилиндрический, где поверхности – прямые цилиндры. Как отмечалось выше, для обладающих симметрией блоков применяется упрощенный способ описания, а для моделирования траекторий частиц в пределах такого блока – ускоренный алгоритм. Но есть тип блока, который не обладает никаким видом пространственной симметрии, – трехмерный. В этом случае описание геометрии и алгоритмы вычислений траектории частиц, естественно, более сложные. Тем не менее способ задания геометрии в методике С-007 неплохо зарекомендовал себя на практике. Его достоинства отчетливо проявляются при расчетах серии задач, геометрия которых отличается расположением какого-либо фрагмен-

та, описанного в виде блока. В таком случае изменения в исходных данных задач будут минимальными.

Интересен результат проведенной в 2018 г. специалистами математического отделения работы по модификации полуэмпирической модели уравнений состояния РОСА-МИ, в соотношениях которой учитываются общие закономерности, характерные для веществ, имеющих несколько изотопных составов и существующих в нескольких структурных формах.

С помощью модифицированной модели, экспериментальных и расчетных данных, описывающих термодинамические свойства веществ, были разработаны уравнения состояния, характеризующие термодинамические свойства изотопных модификаций бора и различных полиморфных модификаций диоксида кремния (SiO_2): стишовита, козсита, кварца и плавленого кварца. Уравнения состояния описывают как область сравнительно невысоких давлений и температур, доступную для экспериментальных исследований, так и область сверхвысоких давлений и температур, в настоящее время доступную только для расчетов по теоретическим моделям.

В 2018 г. в математическом отделении продолжались исследования по поиску методов интегрирования уравнений га-

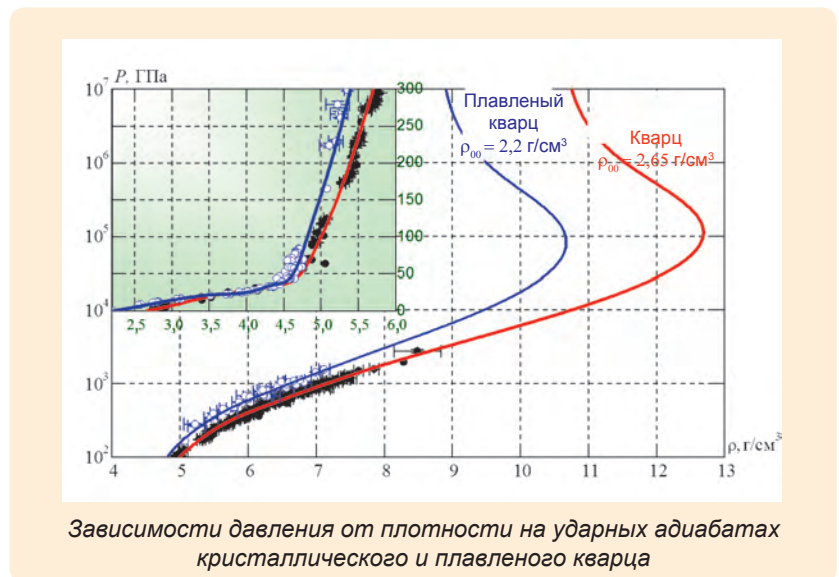
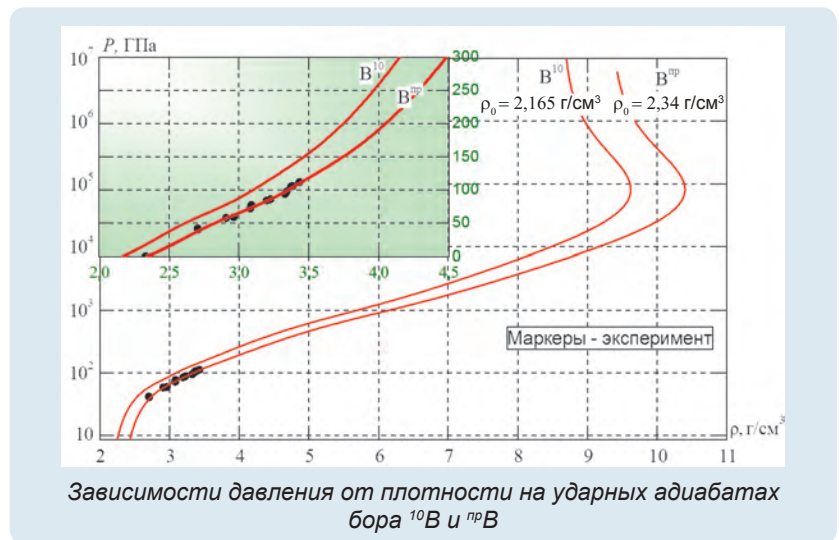


Схематическое изображение трех различных блоков для описания геометрии задачи

зовой динамики и гидромеханики. Актуальность исследований обусловлена необходимостью разработки новых эффективных аналитических и численно-аналитических методов решения краевых задач для уравнений математической физики. В связи с этим вызвал интерес предложенный метод, основанный на использовании полных систем законов сохранения. В общем случае нахождение полных систем законов сохранения, особенно для нелинейных уравнений, весьма проблематично, поэтому пример решения краевой задачи газовой динамики, выполненный в 2018 г., имеет важное теоретическое и прикладное значение. Предложенный метод интегрирования уравнений газовой динамики и гидромеханики в дальнейшем предполагается реализовать в пакете программ ЛОГОС-Аэро-Гидро.

В математическом отделении в 2018 г. разрабатывались новые программные модули для решения актуальных задач при проектировании и эксплуатации конструкций и аппаратов новой техники, к числу которых относится задача оценки их общего, выработанного и прогнозируемого остаточного эксплуатационного ресурса.

Для оценки усталостной долговечности опасных зон конструкций разработан автономный программный модуль расчета ресурса долговечности при малоцикловой усталости «Resource_v1». Модуль позволяет по заданной истории изменения компонент тензора полных деформаций и температуры в исследуемой точке проводить важные расчеты, в том числе расчеты параметров процесса монотонного и циклического деформирования, накопления повреждений при малоцикловой усталости.



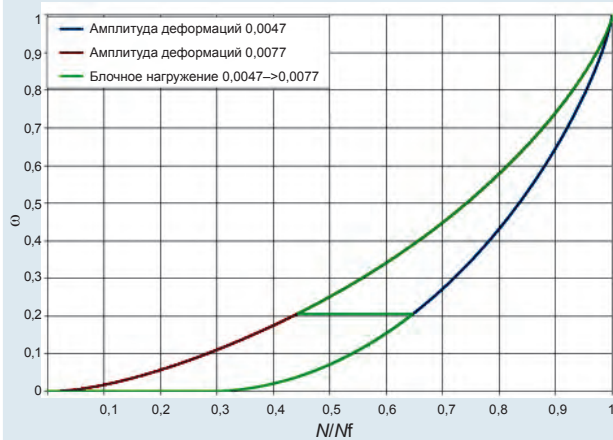
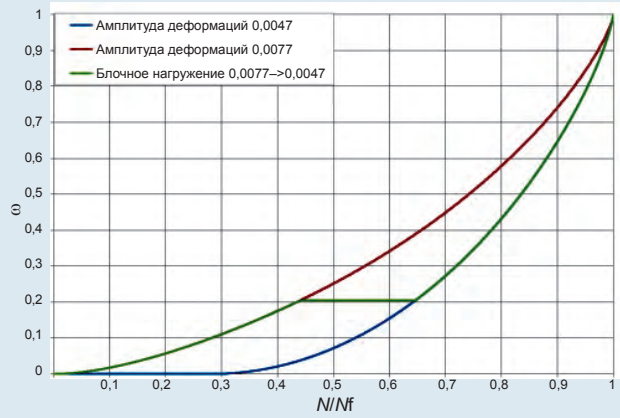
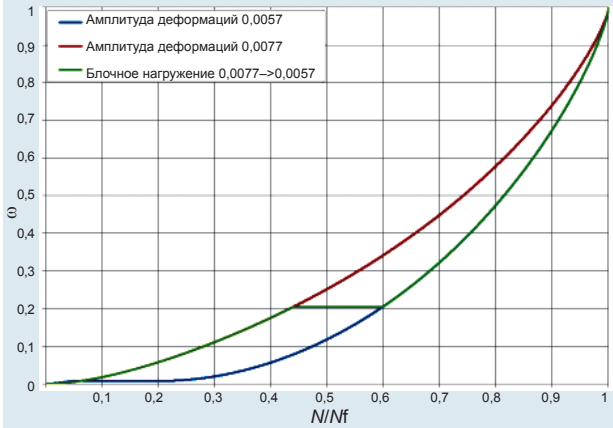
Для описания параметров упругопластического деформирования и процесса накопления повреждений используется модель Ю. Г. Коротких.

С помощью «Resource_v1» смоделирован процесс накопления усталостных повреждений для ряда конструктивных стальных элементов при блочном малоцикловом нагружении с контролируемой амплитудой полной осевой деформации. Сравнение численных и экспериментальных результатов подтверждает достоверность модели поврежденной среды Ю. Г. Коротких, а также показывает, что нормативный подход, основанный на правиле линейного суммирования по-

вреждений, в расчетах на долговечность может приводить как к консервативной, так и неконсервативной оценке.

Программный модуль оценки ресурса «Resource_v1» предполагается реализовать в пакете программ ЛОГОС-Прочность.

С 2009 г. в ИТМФ ведутся работы по созданию методики моделирования протонных изображений различных объектов (статических и динамических), полученных в результате газодинамических расчетов. В 2014 г. на программную реализацию методики получено свидетельство о государственной регистрации программ



Зависимость развития поврежденности от приведенного количества циклов нагружения в условиях двухблочного циклического нагружения: ε – относительная объемная доля дефектов в элементарном объеме вещества, N – номер цикла нагружения, N_f – количество циклов до разрушения

Число циклов до разрушения

Амплитуда полной деформации	Экспериментальное число циклов	Расчетное число циклов
0,0047	4337	4326
0,0057	1972	1960
0,0077	499	571

Расчетные и экспериментальные значения числа циклов до разрушения при блочных режимах нагружения

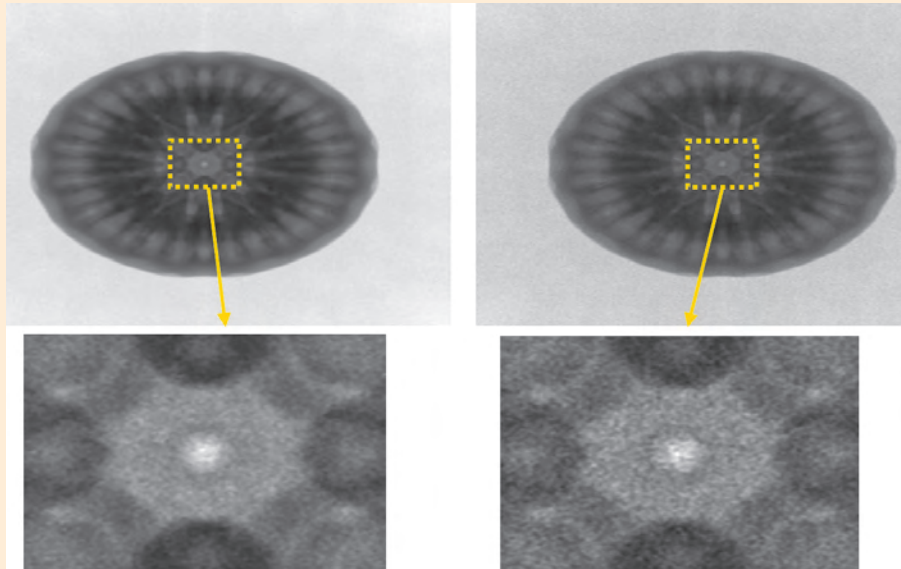
Блок № 1		Блок № 2		Расчетное число циклов до разрушения (общее по двум блокам)	Правило линейного суммирования повреждений, $\sum \frac{N_i}{N_{fi}}$
Амплитуда полной деформации	Число циклов	Амплитуда полной деформации	Число циклов до разрушения (общее по двум блокам), эксперимент		
0,00770	250	0,0057	930–1245	1038	0,8398
0,0077	250	0,0047	1640–2270	1784	0,7924
0,0047	2800	0,0077	2875–3210	3119	1,2059

для ЭВМ «Программный комплекс "Протонные изображения"» (ПИ).

Методика ПИ предназначена для математического обеспечения и сопровождения протонных радиографических установок и активно используется при планировании еже-

годных серий динамических экспериментов на установке ПРГК-100 (г. Протвино). Моделирование протонных изображений с различными настройками магнитооптической системы обеспечивает выбор оптимальных значений коллиматоров, устанавливаемых

в фурье-плоскости, и токов в магнитных квадрупольных линзах для получения наиболее информативных экспериментальных снимков. Методика позволяет априори оценить результаты опыта и спрогнозировать качество экспериментальной инфор-



Смоделированные протонные изображения сборок

мации и, по возможности, уточнить постановку эксперимента.

В настоящее время методика продолжает совершенствоваться. В текущей версии программная реализация методики состоит из трех расчетных модулей, включает подсистему автоматической подготовки и запуска расчетов (АПИ) с использованием веб-интерфейса, базу данных хранения пакетов заданий и архивов результатов успешно и аварийно завершенных расчетов. Архив позволяет в автоматическом режиме загрузить в систему запуска АПИ выбранный расчет с последующей корректировкой параметров и перезапуском.

Для предварительного анализа расчетных изображений в методику ПИ интегрирована программа анализа радиографических изображений (ПАРИ) с улучшенным математическим аппаратом и реализацией новых функциональных модулей пакетной обработки изображений и расчета границ раздела двух сред на изображении. В целом работа по совершенствованию методики ПИ позволила улучшить

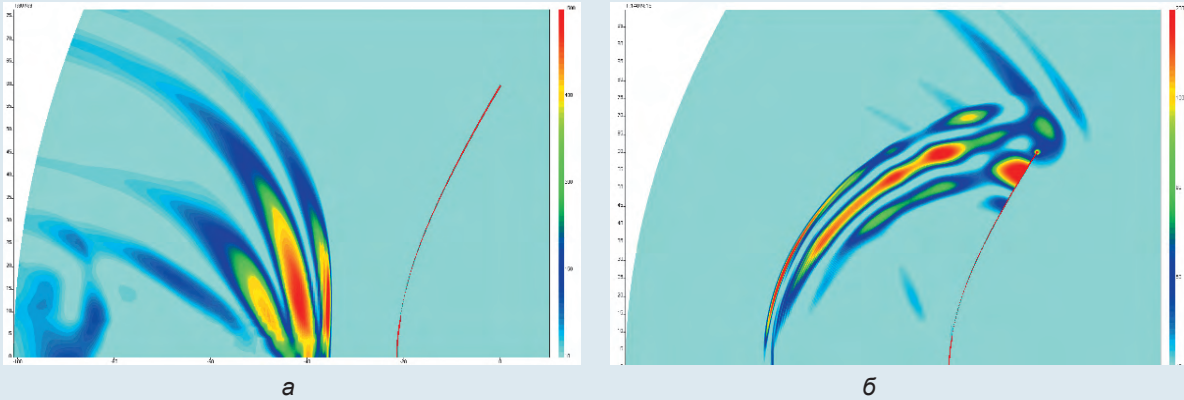
качество получаемых протонных изображений.

В 2018 г. завершена работа, связанная с созданием трехмерной методики численного моделирования генерации и фокусировки сверхширокополосного электромагнитного излучения (СШП ЭМИ) в двухзеркальной фокусирующей антенной системе (ФАС), которая состоит из пассивного параболического рефлектора большого диаметра и контррефлектора (внутреннего рефлектора).

Возможности разработанной методики расчета такой конструкции позволяют моделировать системы, в которых поверхность контррефлектора может отличаться от параболической, а источник излучения СШП ЭМИ может располагаться либо снаружи пассивного рефлектора, либо внутри ФАС. Для обоих вариантов конструкции используется поэтапная технология расчета: на первом этапе моделируется работа излучающего элемента СШП ЭМИ, на втором – работа ФАС. В первом варианте конструкции источник излучения находится снаружи пас-

сивного рефлектора, вблизи его вершины, и имеет общую с ФАС ось симметрии. Связь между этапами расчета в этом случае осуществляется через граничные условия, сформированные на участке пассивного рефлектора вблизи его вершины. Во втором варианте конструкции источник излучения располагается внутри ФАС и может иметь ось симметрии, отличную от оси других элементов ФАС. В данном случае значения полей, вычисленные на первом этапе, с помощью разработанных алгоритмов интерполяции пересчитываются на новую сетку и формируют на ней начальные данные для расчета второго этапа.

Завершены интересные работы в рамках развития системного программного обеспечения (СПО), в том числе создание отладчика параллельных программ Parallel Debugger (PD). Его появление было обусловлено высокой сложностью алгоритмов создаваемых в математическом отделении программных комплексов моделирования физических процессов на



Распространение электромагнитного импульса в двухзеркальной ФАС:
 а – внутри ФАС, б – отражение от гиперболического контррефлектора диаметром 120 см

многопроцессорных вычислительных системах. Этот инструмент, разработанный для математиков ИТМФ, в опытный режим внедряется в Вычислительном центре (ВЦ) ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» с 2016 г. В настоящее время отладчик уверенно занял место в ряду отечественных средств отладки, разрабатываемых для российских многопроцессорных вычислительных систем. Он обеспечивает отладку программ, написанных на Си/Си++ и фортране. Графический интерфейс PD подобен интерфейсу зарубежного отладчика Allinea DDT, его можно настроить на сочетание «горячих клавиш» и цветовое оформление исходного текста отладчиков MS Visual Studio, Eclipse, IDEA и Allinea DDT. Отладчик PD поддерживает системы пакетной обработки заданий Open PBS/Torque, SLURM и СПО JAM, но может быть настроен и на другие системы. С отладчиком PD интегрированы свободно распространяемые профилировщики Google Performance Tools и mpiP. Кроме того, он позволяет отлаживать процессы и потоки программы, управлять точками прерывания и наблюдения, логически делить процессы программы на подмножества, управлять ими, а также изменять и просматри-

вать переменные.

Отладчик PD создан на языке программирования Java, предназначен для отладки программ в ОС Unix/Linux.

Важно отметить, что графический интерфейс параллельного отладчика позволяет создавать сессию отладки программы на вычислительных узлах вычислительной системы, а также рабочем (локальном) компьютере пользователя. По своим возможностям отладчик PD очень близок к коммерческим отладчикам TotalView и Allinea DDT, но у него нет лицензионных ограничений: он позволяет одновременно отлаживать и профилировать любое количество параллельных программ без учета числа используемых ими процессоров.

Сегодня PD успешно применяется на всех многопроцессорных вычислительных системах ВЦ РФЯЦ-ВНИИЭФ для отладки создаваемых в ИТМФ программных комплексов. Он включен в дистрибутив системного программного обеспечения супер-ЭВМ со встроенными средствами защиты информации от несанкционированного доступа.

В области создания системного программного обеспечения завершена еще одна интересная работа – программная система диагности-

ки многопроцессорных узлов вычислительной системы (СДУ), созданная для решения проблемы оперативной локализации сбоев/отказов в системе пакетной обработки заданий JAM (СПО JAM).

В автоматическом режиме СДУ проверяет неработоспособные узлы, а затем вводит их в работу, если дефекты были устранены. Одновременно система может проверять 100 и более вычислительных узлов. В задачи, решаемые СДУ, входят:

- автоматическое тестирование узлов с обнаруженными СПО JAM дефектами;
- ввод в работу проверенных узлов;
- формирование истории функционирования узлов многопроцессорной вычислительной системы (хранится в базе данных СПО JAM).

В настоящее время СДУ внедрена на всех вычислительных системах ИТМФ, находящихся под управлением СПО JAM. Положительный эффект применения СДУ проявился в улучшении эксплуатационных показателей мощной вычислительной системы ИТМФ сразу после внедрения.

Еще одна важная характеристика СДУ – круглосуточный режим работы. На разных вычислительных системах показатель срабатывания сис-

Эксплуатации характеристики вычислительной системы

Характеристика	Без СДУ, %	С СДУ, %
Коэффициент работоспособности	82,54	97,26
Коэффициент потерь из-за ремонта	2,93	0,83

темы в интервале от 17 до 8 часов находится в пределах 20–69 %.

СДУ является важным программным компонентом Вычислительного центра ИТМФ, способствующим повышению готовности, эксплуатационной надежности, пропускной способности вычислительной системы и уменьшению времени её технического обслуживания.

Новизна технического решения СДУ по восстановлению работоспособности вычислительных систем подтверждена свидетельством ФИПС.

РАЗВИТИЕ ТЕХНОЛОГИЙ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ И МЕТОДОВ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В рамках работ по созданию, развитию и внедрению технологий высокопроизводительных вычислений и методов суперкомпьютерного моделирования в научные исследования, проектирование и создание высокотехнологичной продукции РФЯЦ-ВНИИЭФ в 2010 г. начаты и активно развиваются следующие направления:

– разработка отечественного прикладного программного обеспечения для высокопроизводительных вычислений (создание многофункционального пользовательского комплекса программ ЛОГОС для многодисциплинарного комплексного моделирования на основе современных физических моделей и эффективных численных методов);

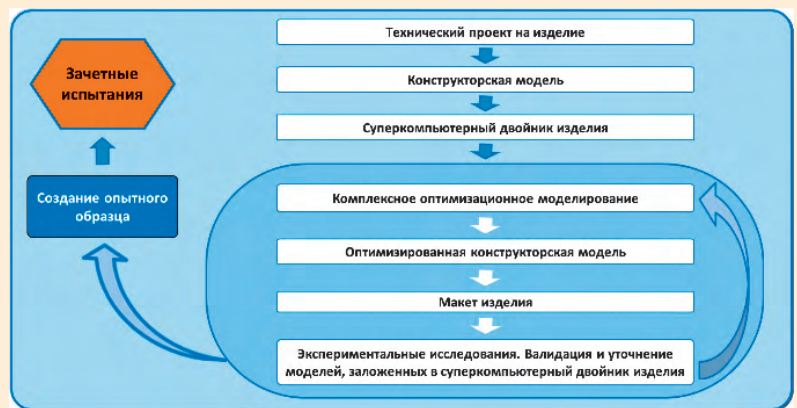
– разработка и создание суперкомпьютерной инфраструктуры (высокопроизводительные супер-ЭВМ, вычислительные сети, системное программное обеспечение);

– формирование (совместно с соисполнителями) базы данных по свойствам материалов и базы данных для верификации и валидации, необходимых для создания и внедрения технологии суперкомпьютерных виртуальных испытаний с применением суперкомпьютерных двойников изделий.

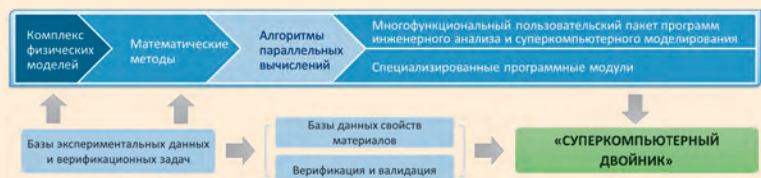
Суперкомпьютерный двойник изделий – это система взаимосвязанных моделей, обеспечивающая моделирование значимых процессов и явлений, происходящих при

эксплуатации изделия, с целью прогнозирования и оптимизации тактико-технических характеристик и режимов работы изделия на основе сквозного суперкомпьютерного моделирования, выполняемого как на этапе проектирования, так и на этапе эксплуатации изделия. Суперкомпьютерный двойник может быть создан как для существующего, так и для перспективного изделия. Цифровой двойник разрабатывается для уже готового изделия и включает в себя схемы, чертежи и другую документацию в электронном виде.

Создание и внедрение суперкомпьютерных виртуальных испытаний с применением суперкомпьютерных двойников не только сокращает сроки изготовления, но и снижает стоимость жизненного цикла изделия, а также способствует расширению возможностей в области повышения тактико-технических и эксплуатационных характеристик создаваемых продуктов.



Технология проектирования и создания наукоемких изделий на основе суперкомпьютерных двойников изделий



Суперкомпьютерный двойник изделия: состав работ

ЛОГОС

ЛОГОС ПЛАТФОРМА

МОДУЛЬНАЯ ИНТЕГРАЦИОННАЯ ПЛАТФОРМА ДЛЯ ОБЕСПЕЧЕНИЯ ВОЗМОЖНОСТИ ПРОВЕДЕНИЯ СВЯЗНЫХ И СОПРЯЖЕННЫХ РАСЧЕТОВ

ЛОГОС АЭРО-ГИДРО

АЭРОДИНАМИКА ЛЕТАТЕЛЬНЫХ АППАРАТОВ, ТУРБУЛЕНТНОЕ ПЕРЕМЕШИВАНИЕ

ЛОГОС ТЕПЛО

ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОС, ИЗЛУЧЕНИЕ

ЛОГОС ПРОЧНОСТЬ

СТАТИЧЕСКАЯ И ДИНАМИЧЕСКАЯ ПРОЧНОСТЬ, РАЗРУШЕНИЕ И ДЕФОРМАЦИЯ

ЛОГОС ПРЕПОСТ

ПОДГОТОВКА НАЧАЛЬНЫХ ДАННЫХ, ОБРАБОТКА РЕЗУЛЬТАТОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Основные составляющие многофункционального пользовательского комплекса программ ЛОГОС

В 2018 г. получили дальнейшее развитие все основные пакеты программ, входящие в состав многофункционального пользовательского комплекса программ ЛОГОС. В частности, для пакета программ ЛОГОС-Тепло (трехмерное моделирование теплопереноса на произвольных сетках) были реализованы следующие функциональные блоки:

- моделирование ламинарно-турбулентного перехода на неструктурированных расчетных сетках;

- моделирование перфорированной стенки в рамках доработки модели пористого тела;

- моделирование распространения ударных волн от взрыва ВВ;

- подготовка данных для перестроения расчетной сетки средствами ЛОГОС-ПП в зависимости от особенностей решения;

- моделирование образования инея;

- моделирование эрозии и абляции;

- моделирование течений в турбовинтовых установках;

- расчет влажности с учетом испарения и конденсации;

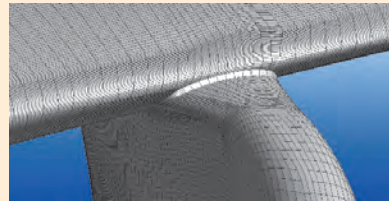
- моделирование кавитирующих течений на основе гомогенного приближения;

- моделирование течения частиц к-фазы в газовой струе и эрозионного воздействия при попадании струи на поверхность;

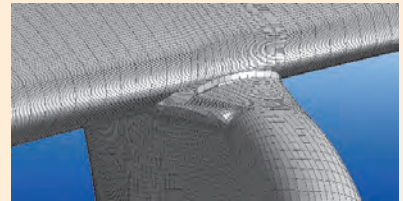
- моделирование впрыска жидкости в сверхзвуковой поток;

- расчет локальных источников массы, импульса и энергии, задаваемых пользователем;

- расчет фазового перехода

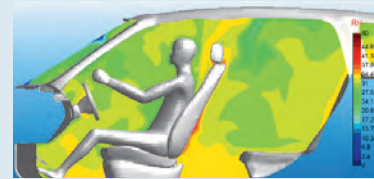


Начальная форма поверхности

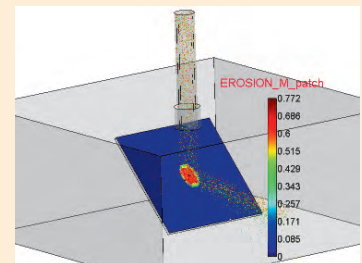


Форма поверхности через 20 с

Образование инея в месте сочленения крыла и пилона



Распределение относительной влажности воздуха в салоне автомобиля



Эрозия графитовой пластины под узконаправленным потоком частиц (масса унесенного с графитовой пластины материала)

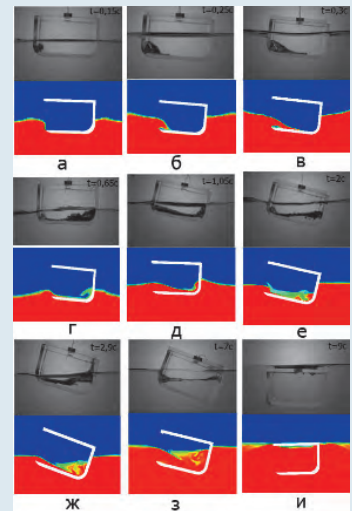
методом подвижного фронта;

- расчет сопряженного теплообмена системы подвижных тел;

- моделирование гидродинамических течений со свободной поверхностью на подвижных сетках.

В пакете программ ЛОГОС-Прочность, предназначенном для решения задач напряженно-деформированного состояния на конечно-элементных сетках, в 2018 г. выполнен большой объем работ по расширению и совершенствованию функциональных возможностей всех его основных составляющих модулей (статическое деформирование, вибрационное воздействие, динамическое деформирование) в целях расширения классов решаемых задач в интересах предприятий авиационной, ракетно-космической, судостроительной отраслей.

Для решателя статических



Затопление модели судна: сравнение экспериментальных фотографий и численных результатов для модели с боковым отверстием

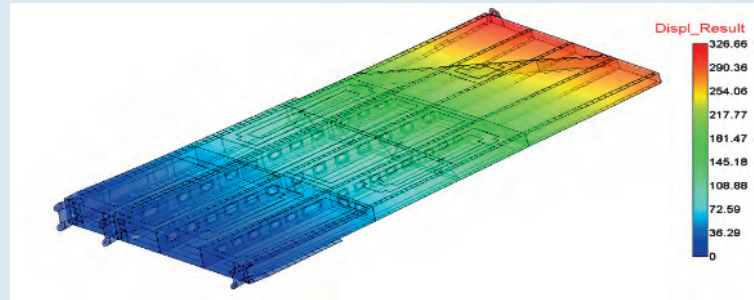
задач прочности в 2018 г. были характерны следующие направления развития:

- реализация модели слоистого композиционного материала;
- учет контактного взаимодействия для оболочечных поверхностей;
- реализация шарнирных соединений; возможности по заданию пользовательских моделей материалов и критериев разрушения.

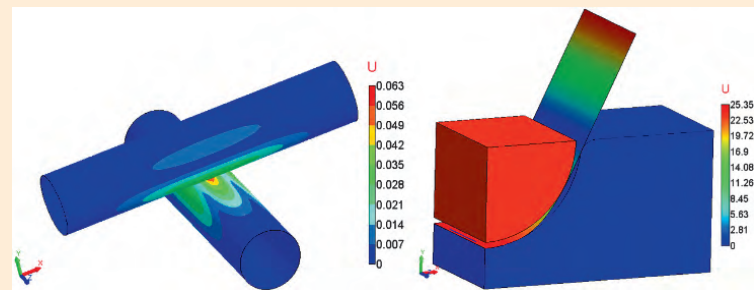
Реализация перечисленных функциональных возможностей потребовала развития методического и сервисного программных блоков модуля ЛОГОС-Прочность и модуля автоматизированной подготовки и обработки расчетных моделей ЛОГОС-ПреПост.

В области решения вибрационных задач прочности отмечены следующие достижения:

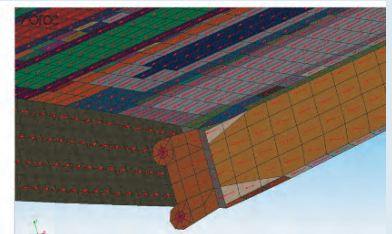
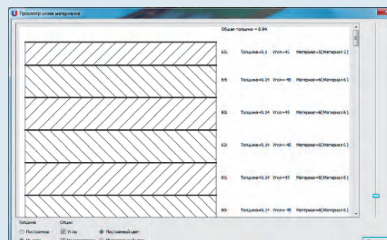
- расширение гармонического анализа для поддержки балочных и оболочечных конечных элементов;
- значительное ускорение анализа широкополосных случайных вибраций для решения задач большой размерности и добавление поддержки нагрузок, заданных на креплениях.



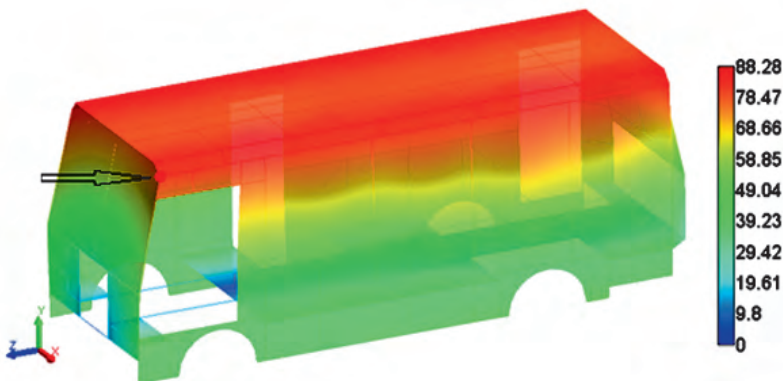
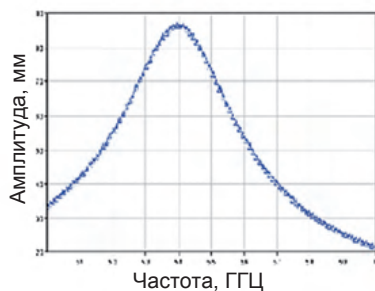
Расчет напряженно-деформированного состояния панели летательного аппарата из композитного материала



Учет контактного взаимодействия для поверхностей из оболочечных элементов



Возможности препроцессора по заданию и визуализации свойств слоистых композиционных материалов



Получение отклика кузова автобуса под действием гармонической вибрации, идущей от передней оси

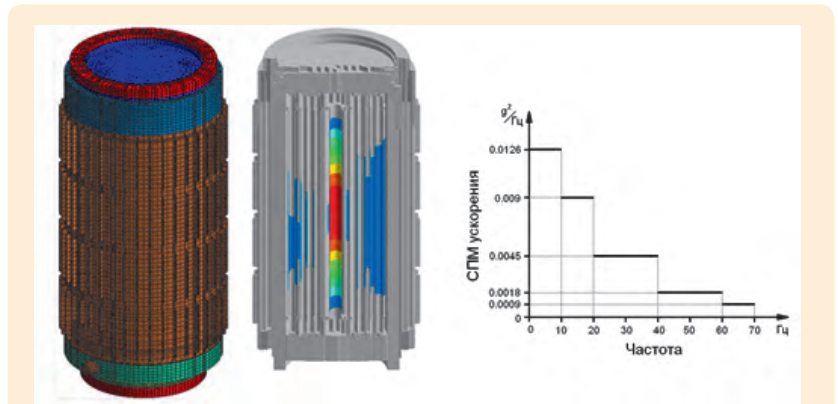
В сфере решения динамических задач прочности по итогам 2018 г. выделяются следующие направления развития:

- расширение библиотеки конечных элементов;
- ведение новых моделей материалов и уравнений состояния (в том числе композитных материалов, бетона, железобетона, льда и др.), а также критериев их разрушения;
- возможность счета задач с большими деформациями в эйлеровой постановке; моделирование контактного взаимодействия с использованием подходов, учитывающих особенности геометрической формы балочных и оболочечных элементов; моделирование сварных соединений;
- моделирование процессов пробития и др.

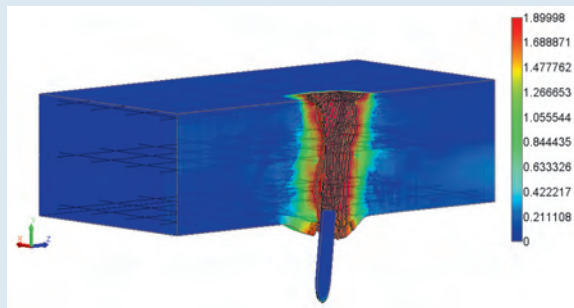
Кроме того, по модулю ЛОГОС-Прочность в 2018 г. выполнен большой объем работ по верификации и обоснованию возможности использования пакета программ для численного моделирования напряженно-деформированного состояния и обоснования прочности оборудования объектов использования атомной энергии.

Значимые работы были выполнены по развитию пакета программ ЛОГОС-ПреПост. Так, в области генерации расчетных сеток для решения задач аэрогидродинамики к имеющимся ранее средствам добавлен ряд новшеств:

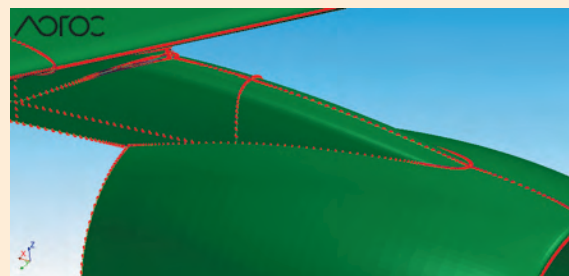
- в рамках генератора поверхностных сеток на аналитических моделях реализованы новые возможности построения на заданных границах разбиений ребер и поверхностных сеток, позволяющие выполнить предварительное построение сеток для выбора параметров генерации;
- в рамках работ по автоматическому построению объем-



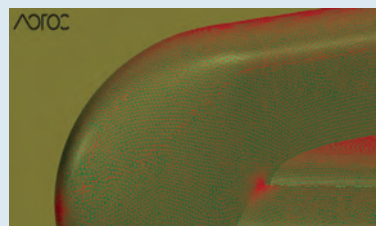
Получение отклика транспортно-упаковочного контейнера под действием широкополосной случайной вибрации, приложенной на закреплении



Пробитие железобетонной преграды стальным ударником



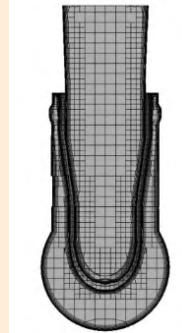
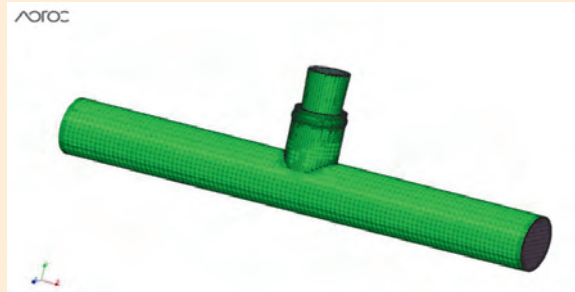
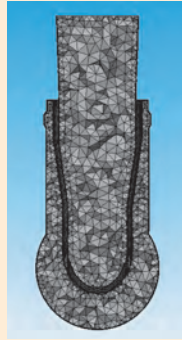
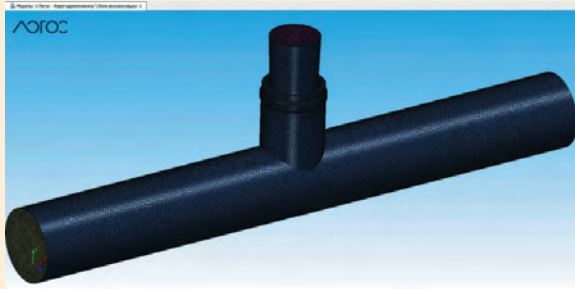
Разбиение ребер модели на выделенной границе



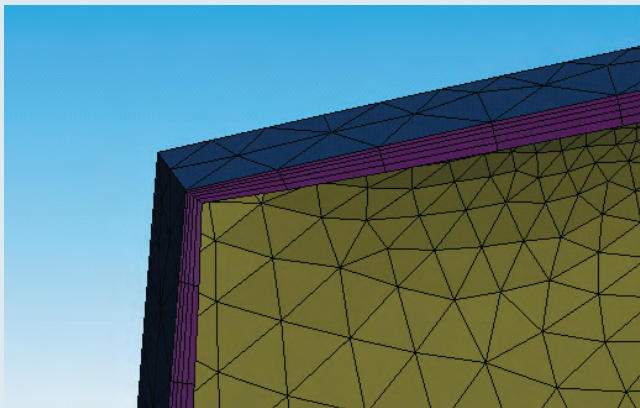
Построение поверхностной сетки на выделенных границах

ных сеток с призматическими слоями реализована возможность генерации расчетных сеток с выбором типа элемен-

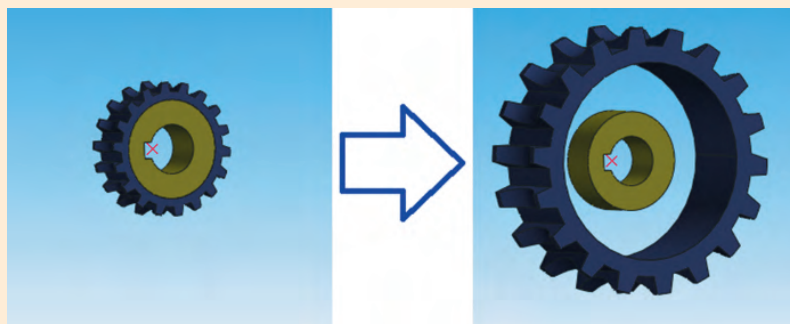
тов в ядре сетки (тетраэдры, адаптивные и отсеченные ячейки);



Генерация объемных сеток с выбором типа элементов в ядре сетки



Построение сеток из призматических ячеек с треугольным основанием



Масштабирование геометрических тел

– для решения тепловых задач в совокупности с задачами аэродинамики реализована возможность автоматического построения сеток из призматических ячеек с треугольным основанием.

К имевшимся ранее средствам работы с геометрией и сеткой при решении задач аэрогидродинамики и прочности добавлен целый ряд новых возможностей, в том числе:

- операция «создание грани – продлением грани»;
- операция формирования твердого тела из набора граней;
- операция преобразования твердого тела в листовое тело;
- операция удаления вершины с объединением сходящихся в ней двух ребер;
- операция создания дуги;
- операция создания вершины в центре дуги;
- операция создания «офсетных» кривых для цепочки ребер;

– операция масштабирования геометрических тел и др.

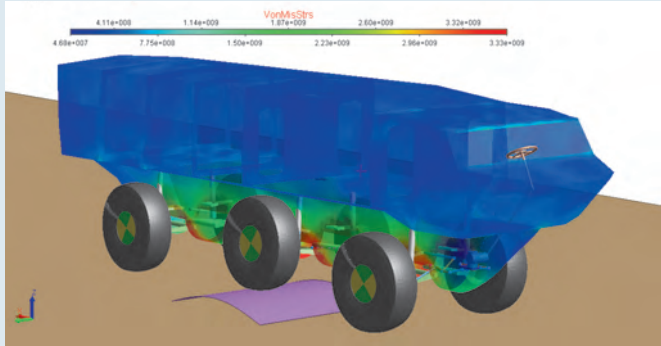
Расширен перечень операций прямого редактирования, в него добавлены:

– операции ассоциации/деассоциации узлов/ячеек сетки с геометрическими элементами;

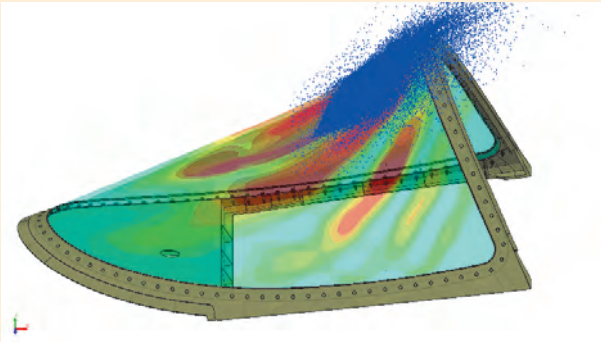
– операция проецирования узлов сетки на грань/ребро, по направлению, а также проецирование набора узлов на набор граней;

– операция перемещения ячеек сетки между компонентами; операция интерактивного перемещения узлов.

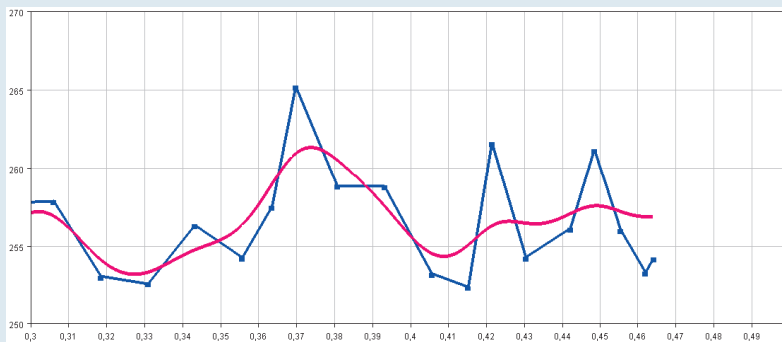
В пакете программ ЛОГОС-ПреПост проведена оптимизация скорости работы генераторов относительно предыдущей версии. Распараллелены алгоритмы локального перестроения поверхностной сетки и алгоритмы построения смещенной поверхности в генераторах объемных сеток (для задач повышенной слож-



Отображение результатов совместного моделирования прочности и кинематики



Результаты работы порядко-независимого алгоритма при отображении объектов в полупрозрачном режиме



Пример использования частотной фильтрации временных диаграмм: — исходный график, — результат применения фильтра Баттерворта низких частот 4-го порядка



Отображение компонента векторной величины в исходной декартовой системе координат (слева) и в глобальной цилиндрической (справа)

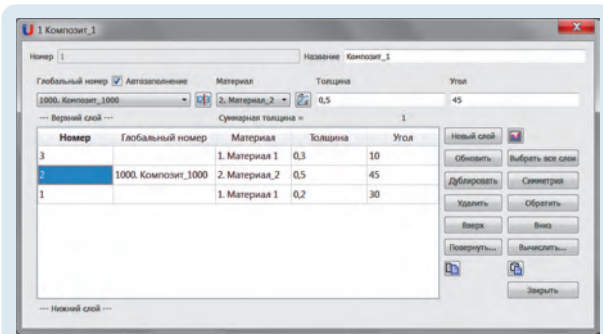
ности получено ускорение до 20 раз).

В части постпроцессинга пакета программ ЛОГОС-Пре-Пост к имевшимся ранее средствам (параллельный режим, более 45 алгоритмов числовой и графической обработки, макроязык, кроссплатформенность и т. д.) добавлены новые возможности, основные из которых:

- отображение результатов совместного моделирования прочности и кинематики;
- отображение результатов моделирования с использованием порядко-независимой прозрачности в параллельном режиме;
- постобработка граничных массивов, полученных при моделировании задач теплопереноса;
- расчет дополнительных сеточных и интегральных величин при постобработке результатов моделирования прочности.

Основные функциональные возможности, реализованные в рамках работ 2018 г. по открытой части основной тематики предприятия:

- вывод графиков с независимыми шкалами в области 3D-сцены;
- алгоритм автоматического масштабирования перемещений;
- выделение линиями каркаса границ счетных регионов задач теплопереноса в трехмерном случае;
- отображение и фильтрация «фиктивных» элементов для задач прочности;
- новый алгоритм сохранения результатов постобработки в виде сеточных данных;
- анимирование деформаций;
- частотная фильтрация временных диаграмм;
- алгоритм перевода векторных и тензорных величин в глобальную цилиндрическую



Диалоговое окно редактора композитного материала



Презентация пакета программ ЛОГОС в НТЦ ЯРБ

и сферическую системы координат.

Наконец, ключевыми результатами 2018 г. в развитии пакета программ ЛОГОС-ПреПост (в части задания математической модели для проведения моделирования) относятся:

- реализация возможности «отката» выполненных операций редактирования сеточных моделей;

- разработка набора инструментов для задания и редактирования параметров композитных материалов, а также создание средств визуализации данных для упрощения подготовки входных данных для нелинейных задач механики композитных материалов, реализующих новые физические модели для последующего расчета задач статической прочности;

- реализация интерфейса пользователя для задания параметров моделирования шарнирных соединений, при-

меняемых при решении статических задач прочности;

- внедрение возможности импорта табличных данных из текстовых файлов формата CSV и их последующего использования при моделировании задач прочности;

- разработка возможности конфигурирования системы запуска задач на удаленном компьютере для снижения расходов на адаптацию ЛОГОС-ПреПост к счетным кластерам с различными настройками на разных предприятиях.

В 2018 г. специалисты математического отделения приступили к созданию отечественной программной платформы суперкомпьютерного моделирования, цифровых испытаний и прогнозирования сложных технических систем ЛОГОС-Интеллект, которая будет положена в основу развития как новых прикладных приложений пакетов программ (ЛОГОС-Машиностроение,

ЛОГОС-Экономика, ЛОГОС-Строительство и др.), так и уже активно развивающихся (ЛОГОС-АТОМ и ЛОГОС-НИМФА).

Для внедрения пакета программ ЛОГОС на предприятиях атомной промышленности необходима его аттестация в Ростехнадзоре России (ФБУ «НТЦ ЯРБ»). По решению секции № 2 НТС ФБУ «НТЦ ЯРБ» пакет программ ЛОГОС принят к аттестации в интересах моделирования теплогидравлических процессов в оборудовании транспортных ядерных энергетических установок и процессов теплопроводности и излучения в твердотельных конструкциях объектов использования атомной энергии.

Как отмечалось выше, в 2018 г. проведена масштабная верификация пакета программ ЛОГОС-Прочность с целью обоснования его применимости для моделирования напряженно-деформированного состояния и анализа прочнос-

ЛОГОС-ИНТЕЛЛЕКТ

Головной исполнитель: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

МАШИНОСТРОЕНИЕ (ЛОГОС-М)

Проектирование и создание высокотехнологичных изделий ОПК

АТОМНАЯ ЭНЕРГЕТИКА (ЛОГОС-АТОМ)

Обеспечение конкурентоспособности объектов АЭС на внутреннем и внешнем рынках

ЭКОНОМИКА (ЛОГОС-ИСТРА)

Прогнозирование и оптимизация бюджетных процессов

НЕФТЕГАЗОДОБЫЧА (ЛОГОС-НИМФА)

Моделирование газовых нефтяных месторождений. Оптимизация нефтегазодобычи

ЭКОЛОГИЯ (ЛОГОС-НИМФА)

Обеспечение экологической безопасности промышленных объектов

СТРОИТЕЛЬСТВО (ЛОГОС-С)

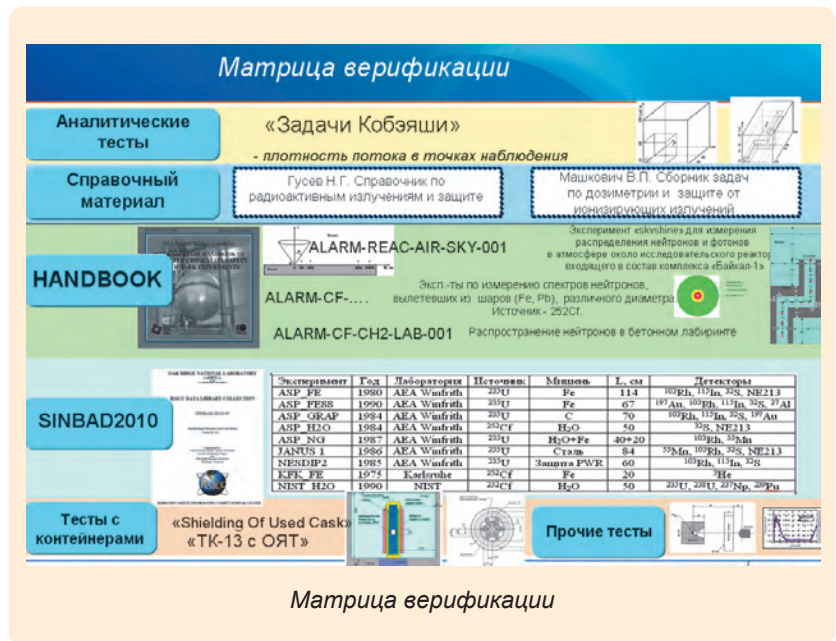
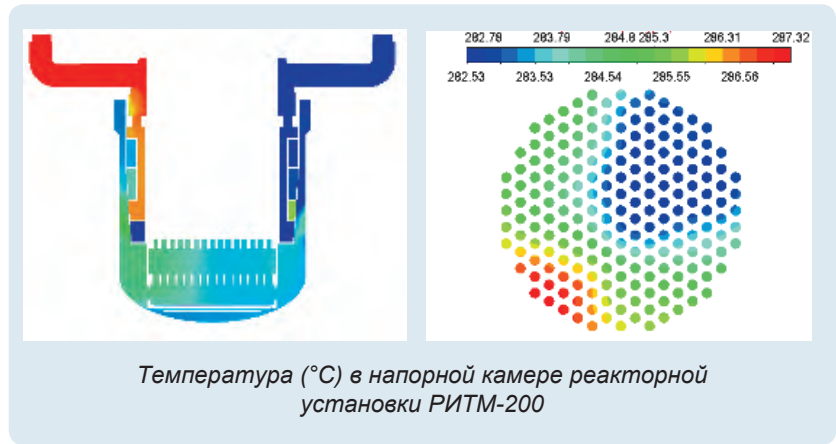
Проектирование и эксплуатация сложных инженерных объектов

Отечественная программная платформа суперкомпьютерного моделирования, цифровых испытаний и прогнозирования сложных технических систем ЛОГОС-Интеллект

ти оборудования объектов использования атомной энергии, в том числе элементов конструкции ядерных энергетических установок различного назначения, защитных контейнеров для наземной и воздушной транспортировки делящихся и радиоактивных материалов. Верификационный базис содержал широкий класс прочностных задач (динамический, статический, модальный, гармонический анализ, анализ устойчивости) в условиях сложного термо-механического нагружения. Пакет программ показал хорошее согласие полученных результатов с аналитическими и экспериментальными данными. По итогам работ выпущен верификационный отчет для подачи пакета программ ЛОГОС на аттестацию для моделирования указанных физических процессов.

Подготовлен и передан в ФБУ «НТЦ ЯРБ» для прохождения процедуры аттестации доработанный верификационный отчет по обоснованию применимости пакета программ ЛОГОС для моделирования течений жидкометаллических теплоносителей в оборудовании реакторных установок на быстрых нейтронах.

Также с целью внедрения пакета программ ЛОГОС в атомную отрасль в 2018 г. проведены работы в интересах разработки технологий моделирования актуальных классов промышленных задач для двух предприятий: АО «ОКБМ Африкантов» (по оптимизации проектных решений и для обоснования долговечности оборудования при термоциклическом нагружении транспортных реакторных установок) и АО ОКБ «Гидропресс» (по расчетному обоснованию оборудования реакторных установок водо-водяных энергетических реакторов). По пакету программ ЛОГОС была рассчитана акту-

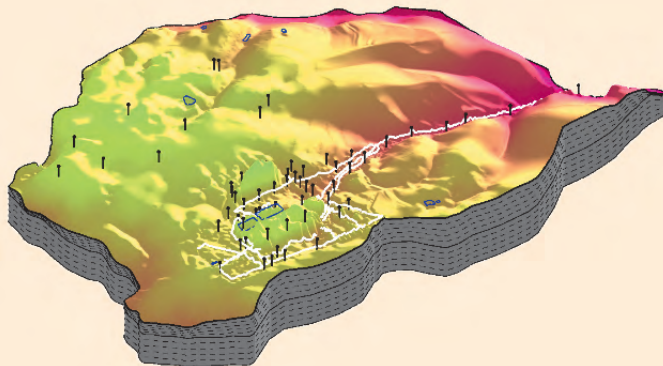


альная практическая задача для АО «ОКБМ Африкантов» – моделирование смешения неизотермических потоков в напорной камере перспективной транспортной реакторной установки РИТМ-200 в парциальном режиме работы при отключении секции парогенератора. Сравнительный анализ результатов моделирования, полученных по пакету программ ЛОГОС и коммерческому коду ANSYS CFX (предоставлены АО «ОКБМ Африкантов»), продемонстрировал их удовлетворительное согласие по всем оцениваемым параметрам (в том числе перепаду температуры на входе в активную зону, температурным полям в различных сечениях напор-

ной камеры, статистическим характеристикам изменения температуры в контрольных точках).

В ИТМФ продолжались работы по развитию и внедрению программного комплекса Time Dependent Monte-Carlo Code (TDMCC) решения задач совместного переноса нейтронов и гамма-квантов методом Монте-Карло. В рамках этого направления в 2018 г. завершена верификация программного комплекса TDMCC для решения задач радиационной защиты от заданных источников нейтронного и фотонного излучений.

24 октября 2018 г. экспертный совет по аттестации программных средств при Ростех-



Трехмерная модель объекта ПАО «МСЗ»

надзоре принял решение об утверждении аттестационного паспорта программного комплекса TDMCC. Результаты расчетов по аттестованной программе теперь возможно использовать в проектных работах.

В 2018 г. активно продолжалась работа по развитию пакета ЛОГОС-НИМФА. Успешно выполнен договор между Госкорпорацией «Росатом» и ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» на проведение НИР по теме «Обеспечение высокой достоверности прогнозов распространения радионуклидов в грунтах и грунтовых водах при обосновании безопасности ЯРОО и вывода из эксплуатации пунктов хранения ЯМ и хранилищ РАО путем адаптации и внедрения в работы Госкорпорации «Росатом» отечественного программного комплекса ЛОГОС-НИМФА».

Параллельно велась работа по лицензионной поставке программного комплекса (ПК) ЛОГОС-НИМФА на российские предприятия: выполнена лицензионная поставка ПК НИМФА в АО «СХК», ФГУП «ГХК» и ООО «Деймос ЛТД». Успешно выполнен договор техподдержки между ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» и ООО «Деймос ЛТД».

В 2018 г. ПК ЛОГОС-НИМФА (версия 5.0) для трехмерных расчетов процессов фильтра-

ции и миграции в насыщенно-ненасыщенных водоносных горизонтах прошел верификацию на моделях реальных территорий объектов. В настоящий момент идет процесс аттестации ПК в ФБУ «НТЦ ЯРБ».

В прошедшем году в состав ПК ЛОГОС-НИМФА включена программа разработки геологических моделей. Она позволяет построить геологическую модель на основе набора осадочных тел в автоматическом режиме. Появление такого блока в составе ПК выводит его на лидирующие мировые позиции по функциональным возможностям среди программ гидрогеологического моделирования.

Кроме того, в составе ПК ЛОГОС-НИМФА создан модуль автоматической калибровки геофильтрационных моделей. Он позволяет автоматически проводить калибровку данных в параллельном режиме на мультипроцессорных комплексах с распределенной памятью, чем выгодно отличается от широко используемой на практике системы PEST, разработанной в США, в которой такая функция отсутствует.

Средствами ПК ЛОГОС-НИМФА разработаны геомиграционные модели ПАО «МСЗ» и АО «ГНЦ НИИАР».

Геомиграционная модель ПАО «МСЗ» внедрена на данном предприятии.

РАЗВИТИЕ ПРОДУКТОВОЙ ЛИНЕЙКИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ ИТМФ

В декабре 2017 г. по итогам федерального этапа Всероссийского конкурса «100 лучших товаров России» контроллер защиты FOBOS-100GL разработки специалистов математического отделения ИТМФ (сертификат ФСТЭК России № 3329), обеспечивающий техническую защиту информации, передаваемой по волоконно-оптическим линиям без ограничения скорости передачи и количества каналов, за пределами контролируемой зоны, был признан лауреатом конкурса и получил право в течение двух лет (2018–2019 гг.) сопровождаться официальным логотипом. Декларация обеспечения стабильного качества контроллера защиты FOBOS-100GL на этот период была подписана руководством ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ».

Современная модель контроллера защиты FOBOS-100GL (GE, GS) имеет следующие характеристики:

- скорость передачи информации – от 100 Мбит/с до 100 Гбит/с и более на один канал;
- количество каналов в одном оптическом волокне по технологиям WDM – до 96;



Контроллер FOBOS-100GL



Модель АПК-5

- стандарты передачи информации – любые, дальность передачи – от 0 до 100 км;
- порог обнаружения – от 0,003 до 0,02 дБ при среднем времени наработки на ложную тревогу не менее 10000 ч и вероятности обнаружения не менее 0,99999.

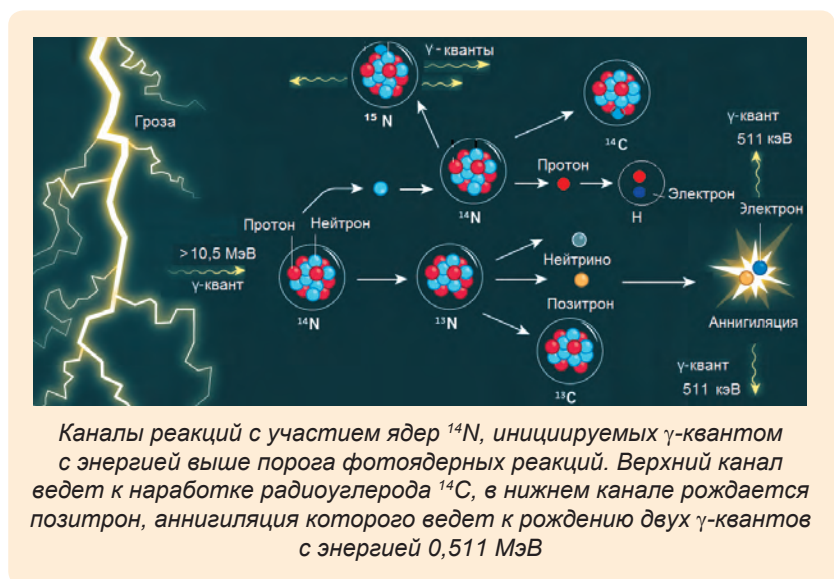
В 2018 г. заказчикам поставлено восемь аппаратно-программных комплексов (АПК) различных модификаций, созданных на базе компактных супер-ЭВМ, в том числе по одному АПК передано «Атомтехэнерго» (производительностью 10,0 Тфлопс),

НПО «Прибор» (производительностью 1,0 Тфлопс) и ОИВТ РАН (производительностью 1,0 Тфлопс). Два АПК производительностью 2,56 и 6,14 Тфлопс переданы в подразделения ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»; три АПК производительностью 4,3 Тфлопс каждый поставлены АО «СПМБМ «Малахит»», (г. С.-Петербург). Таким образом, с момента развертывания серийных работ по разработке и созданию образцов компактных супер-ЭВМ и до конца 2018 г. российским организациям и на предприятия поставлено 145 экземпляров компактных супер-ЭВМ различных моделей и модификаций с суммарной вычислительной мощностью 291,6 флопс.

ИНСТИТУТ ЛАЗЕРНО-ФИЗИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ (ИЛФИ)

ГРОВОЫЕ НЕЙТРОНЫ, НАРАБОТКА РАДИОУГЛЕРОДА ГРОЗАМИ

Проанализировано современное состояние исследований грозовых ядерных реакций. На основе наблюдений усиления потока нейтронов в грозовых облаках и во время гроз сделан вывод о том, что усиление связано с фотоядерными реакциями за счет тормозного излучения лавин убегающих электронов высоких энергий, развивающихся в грозовом электрическом поле. Отмечена сложность селекции грозовых нейтронов, обусловленная наличием детекторов в смешанном поле различных



излучений, включающем не только нейтроны, но и первичные электроны высоких энер-

гий, и их тормозное излучение. Особое внимание уделено открытию в грозовой атмосфере