ИНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ (ИТМФ)

Одно из основных направлений производственной деятельности подразделений ИТМФ, определенных в момент формирования института, – это создание современной расчетно-теоретической базы моделирования сложных физических процессов прежде всего в задачах механики сплошных сред и физики высоких плотностей энергии, а также в других задачах, входящих в основную тематику деятельности РФЯЦ-ВНИИЭФ.

В рамках этого направления деятельности усилия специалистов математического отделения ИТМФ в 2019 г. были сосредоточены на разработке, создании и совершенствовании математических методик и программных комплексов для эффективного компьютерного моделирования широкого спектра прикладных задач в многомерной постановке на вычислительных системах нового поколения. Активно развивались технологии высокопроизводительных вычислений с целью их внедрения в высокотехнологичные отрасли российской промышленности.

МЕТОДИЧЕСКИЕ РАБОТЫ ПО СОВЕРШЕНСТВОВАНИЮ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ И ИХ ВНЕДРЕНИЮ В КОМПЛЕКСЫ ПРОГРАММ

В пакет программ молекулярной динамки MoDyS внедрен новый бессеточный дискретный метод гамильтоновой механики.

В бессеточных методах (SPH, перидинамика, кластерная динамика) сплошная среда заменяется системой взаимодействующих мезочастиц. Для методов этого класса не всегда удается сконструировать микроскопические взаимодействия так, чтобы получить заданные макроскопические свойства. Уравнения движения мезочастиц обычно записаны в интегро-дифференциальной форме, и не всегда устанавливается их связь с уравнениями гамильтоновой динамики.

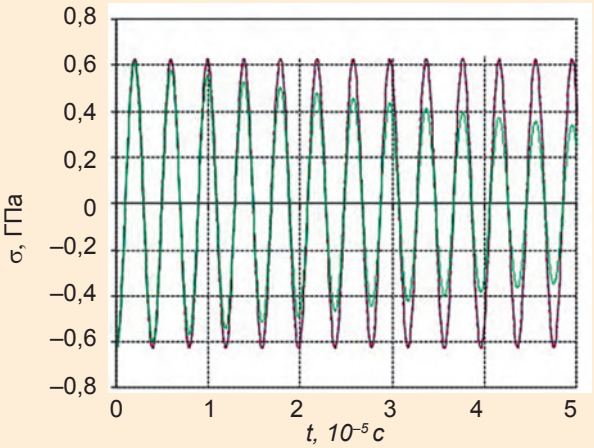
В предложенном методе построение дискретной модели начинается с задания упругого потенциала (упругой энергии деформирования) системы частиц. Для изотропной среды эта энергия зависит от двух модулей упругости, т. е. получаем гамильтониан системы с разделяющимися переменными (координатами частиц и их импульсами). При построении дискретной модели используется процедура вычисления тензора дисторсии для системы частиц. В исходном виде модель не предполагает наличия диссипативных процессов и может использоваться только для решения ограниченного круга задач (акустики, сейсмики, динамики гипоупругих сред). Учет диссипации возможен в рамках диссипативной динамики частиц. При моделировании упругопластических течений система уравнений дискретной модели должна быть дополнена соотношениями для вычисления тензора пластической дисторсии.

Программная реализация дискретной модели в рамках пакета молекулярной динамки MoDyS свелась к замене процедуры вычисления сил, основные счетные модули, программы пре- и постобработки практически не изменились. Применение дискретного метода (как и любого разностного метода) в практически важных расчетах невозможно без распараллеливания вычислительных процессов. Несомненным преимуществом реализации нового метода на базе комплекса программ MoDyS является возможность проведения расчетов на современных многопроцессорных супер-ЭВМ с использованием интерфейсов MPI, OpenMP и технологии CUDA с высокой (более 80 %) эффективностью распараллеливания.

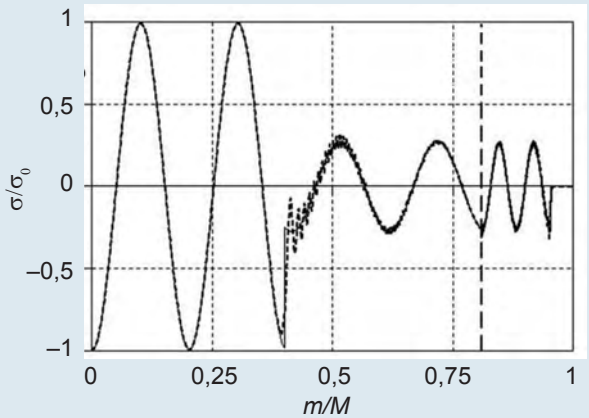
Для оценки точности дискретного метода гамильтоновой механики использовались достаточно простые, но показательные четыре задачи, имеющие эталонное решение.

Задача 1. Прохождение гармонических волн вдоль тонкого стержня. Расчеты тестовых задач проведены с использованием стандартной разностной схемы *крест* и метода, основанного на дискретной гамильтоновой механике, для которого амплитуда звуковых возмущений сохраняется на значительных пространственных (либо временных) интервалах. В расчетах с использованием разностных схем механики сплошных сред звуковые возмущения (гладкие и негладкие) быстро затухают, и это обстоятельство не позволяет проводить расчеты на больших пространственных (или временных) интервалах.

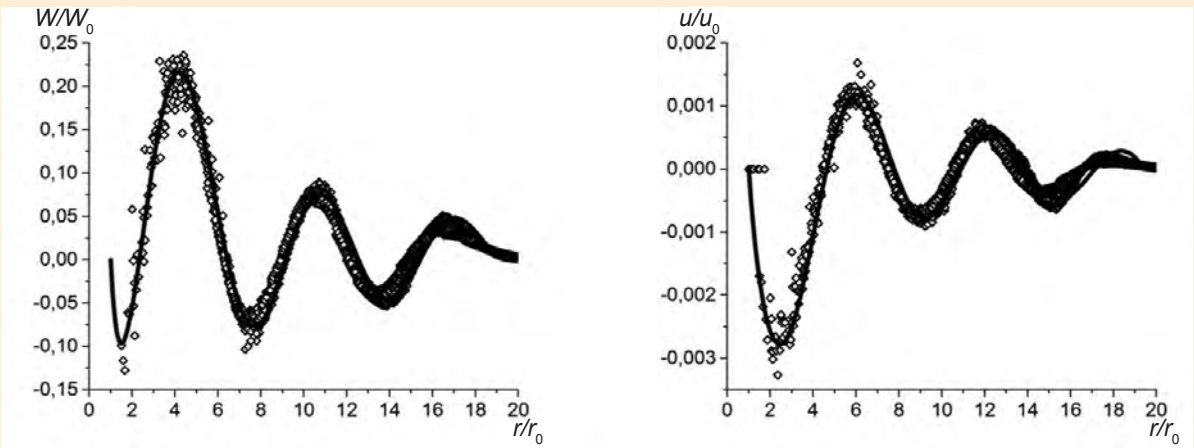
Задача 2. Взаимодействие гармонической волны с контактной границей Fe–Be. Расчеты, проведенные в рамках гамильтоновой механики, с хорошей точностью воспроизводят амплитуды и длины отраженной и преломленной волн. Однако



Задача 1. Зависимость нормального напряжения от времени в сечении x = L для гладких начальных данных: —— – эталонное решение; – – – – дискретный метод гамильтоновой механики; —— – метод сплошной среды (схема «крест»)



Задача 2. Профиль нормального напряжения. Расчет в рамках гамильтоновой механики с числом частиц N = 2000, момент времени t = 0,1·10⁻⁵ с: —— – эталонное решение, ------ – дискретный метод, – – – – внутреняя граница



Задача 3. Профили смещения (а) и скорости (б) в момент времени t = 3·1⁻⁵ с; $u_0 = W_0\omega$, W_0 – амплитуда гармонического источника; ω – частота гармонического источника; —— – эталонное решение, ◊ – дискретный метод

в расчетах отсутствует счетная диссипация, что приводит к появлению слабой немонотонности вблизи разрывов.

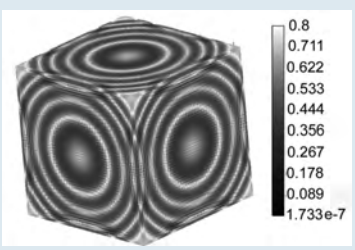
Задача 2. Профиль нормального напряжения. Расчет в рамках гамильтоновой механики с числом частиц N = 2000, момент времени $t = 0{,}1\cdot10^{-5}$ с.

Задача 3. Сферически-симметричная расходящаяся упругая волна. В силу сферической симметрии все параметры течения зависят от одной пространственной координаты $r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$, поэтому на графиках нанесены значения сеточных функций для всех частиц.

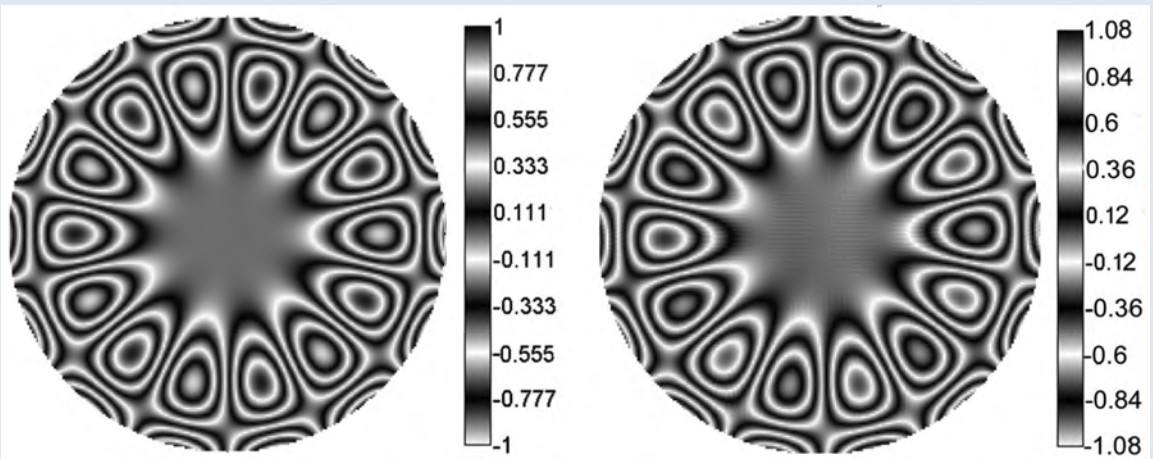
Растровая картина в естественном масштабе и шлирен-визуализация (в нелинейной шкале) показаны на рисунке. Оттенки цветов в шлирен-визуализации соответствуют величине

$$S=0{,}8\exp\left(-5\left(\frac{\left|\frac{\partial W}{\partial r}+2\frac{W}{r}\right|}{\left|\frac{\partial W}{\partial r}+2\frac{W}{r}\right|_{\max}}\right)\right).$$

Отметим хорошее сохранение сферической симметрии в представленных расчетах.



Задача 3. Растровая картина модуля скорости (шлирен-визуализация на внешней поверхности куба). Расчет в рамках гамильтоновой механики на момент времени t = 7·10⁻⁵ с



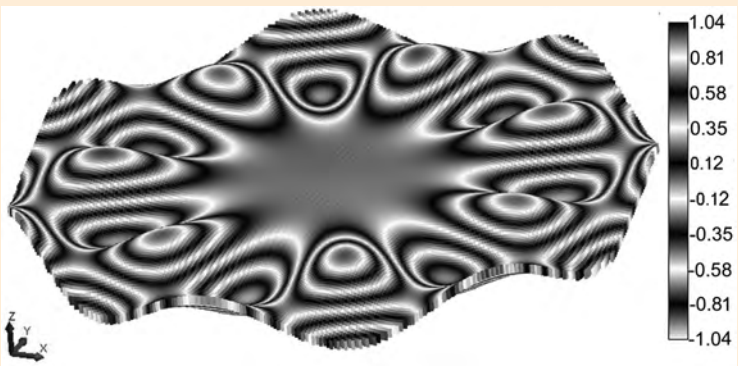
а б

Задача 4. Растровая картина вертикальных смещений (W_z/W_0) для гармонической волны (n = 7) в момент времени t = 5T/4: а – эталонное решение, б – расчет в рамках гамильтоновой механики

Задача 4. Изгибные волны на круглой пластине. В теории изгиба полубесконечных пластин хорошо изучено распространение вдоль прямолинейных границ локализованных волн Коненкова (аналога волн Рэлея). Обобщение этих результатов на пластины с криволинейными границами позволило исследовать другой тип поверхностных волн – волн с эффектом «шепчущей галереи», возникающим при движении звуковых волн вдоль изогнутых границ.

Рассматривались изгибные колебания круглой пластины радиуса *R*. В соответствии с теорией Кирхгофа вертикальные компоненты скорости и смещения не зависят от координаты *z*, а поперечные компоненты являются линейными функциями *z*.

Растровые картины вертикальных смещений в линейной шкале (фигуры Хладни) показаны на рисунках. Фигуры Хладни вращаются вокруг оси *z* с постоянной угловой скоростью ω. Результаты расчетов соответствуют эталонному решению.



Задача 4. Форма пластины для гармонической волны (n = 7) при t = T. Вертикальные размеры увеличены в 80 раз. Расчет в рамках гамильтоновой механики

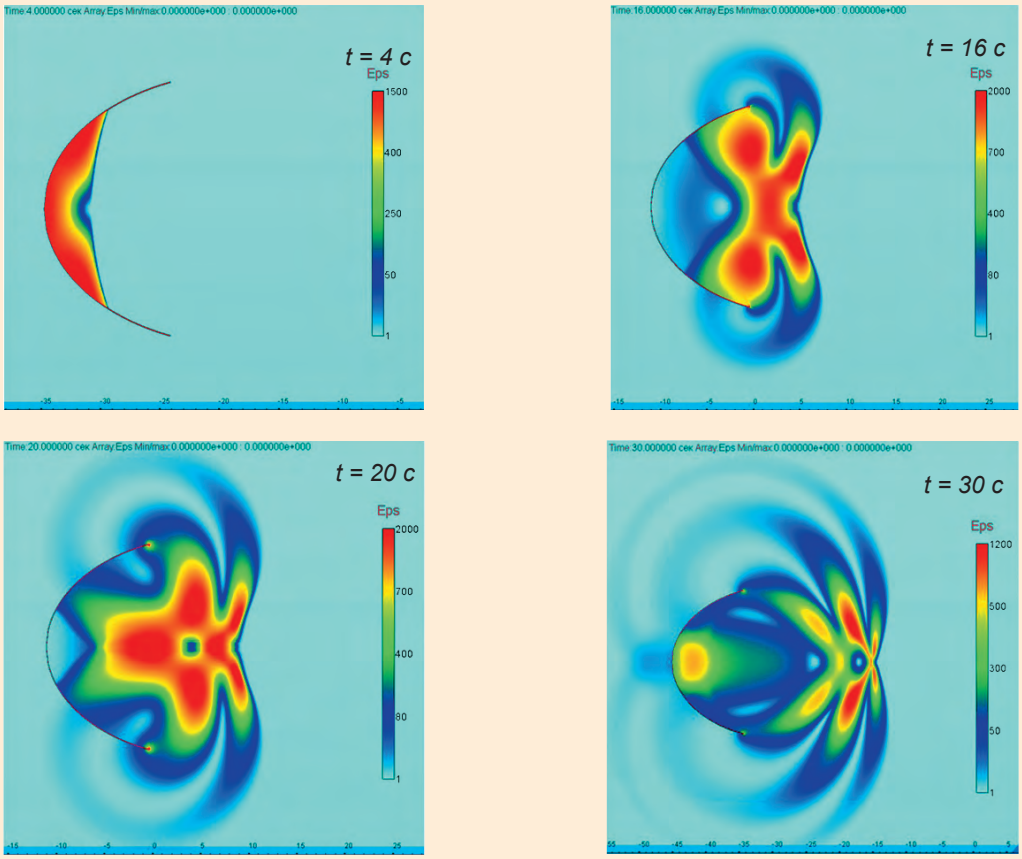
Разработана новая трехмерная численная методика ELGEN для расчетов характеристик электромагнитного излучения (ЭМИ) от эллиптического источника. Методика основана на численном интегрировании однородных уравнений Максвелла с поверхностными источниками в эллиптических координатах во временном представлении. При получении разностной аппроксимации уравнений Максвелла по пространственным переменным использовались интегральные следствия этих уравнений, записанные для ячеек разностной сетки; разностная аппроксимация по времени получена на основе схемы покоординатного расщепления.

В рассчитываемой конструкции, представляющей собой эллиптический источник излучения сверхширокополосного ЭМИ, реализуются следующие особенности и возможности, характерные для такого типа излучателей:

а) фокусировка сверхширокополосного ЭМИ в локальной области вблизи фокуса, что необходимо в ряде применений генераторов, прежде всего в медицинских целях;

б) пространственная конфигурация излучения на выходе, соответствующая точечному источнику, оптимальная для получения направленного излучения при использовании фокусирующей антенной системы;

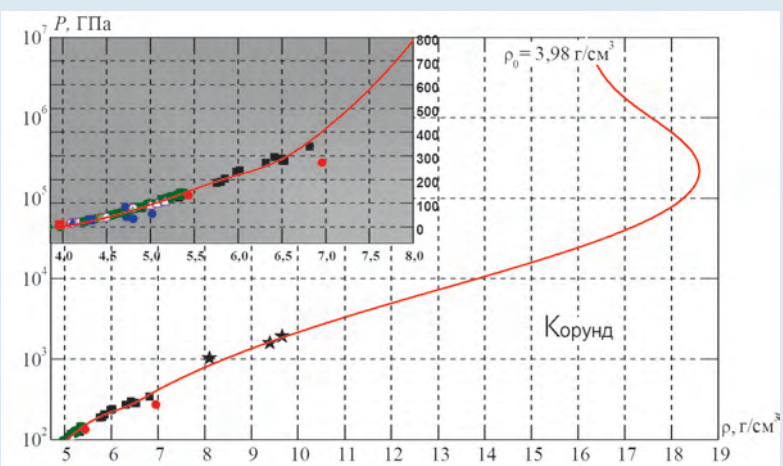
в) возможность каналирования сверхширокополосного ЭМИ для использования



Распределение плотности электромагнитной энергии

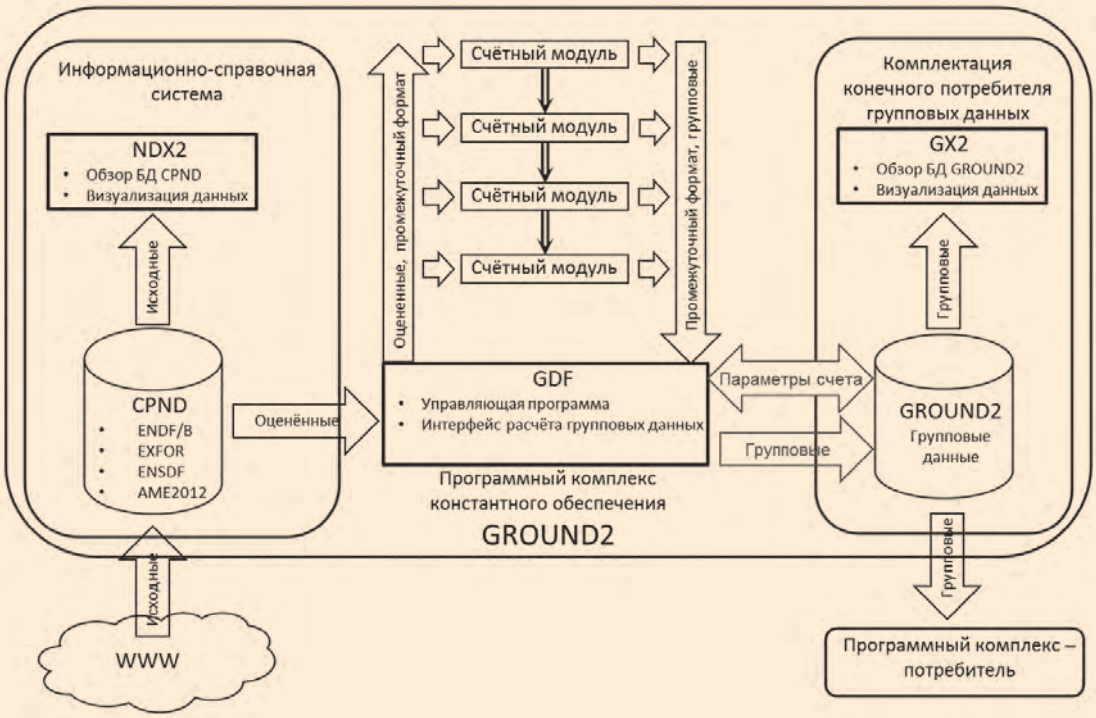
в конструкциях с большой площадью поверхности (большой электрической ёмкостью) и сравнительно небольшой выходной апертурой, что важно для решения технологических проблем создания образцов.

С использованием полуэмпирической модели для описания термодинамических свойств веществ в широкой области изменения плотности, температуры и давления (РОСА-МИ) разработаны новые широкодиапазонные уравнения состояния двух минералов – корунда (Al_2O_3) и периклаза (MgO). При построении этих уравнений учитывались имеющиеся в настоящее время экспериментальные и расчетные данные, характеризующие термодинамические свойства этих минералов. Разработанные уравнения состояния описывают как экспериментально исследованные области, так и области высоких давлений и температур, в настоящее время доступные только для расчетов по теоретическим моделям.



Зависимость давления от плотности на ударной адиабате Al_2O_3

Для обработки оцененных ядерных данных и расчета систем групповых констант во ВНИИЭФ широко используется комплекс программ GROUND, созданный в 2011 г.; в 2019 г. разработана его вторая версия. Вторая версия комплекса программ GROUND построена по модульному принципу: она разделяется на информационно-справочную систему ядер-



Структура комплекса константного обеспечения GROUND2

но-физических данных NDX2 и программную платформу GDF. Программная платформа является оболочкой управления расчетом единых согласованных систем групповых констант, объединяющих данные о взаимодействии частиц (нейтронов, гамма-квантов, быстрых заряженных частиц) с ядрами выбранного множества изотопов. Групповые данные для каждого типа взаимодействия (па́ры налетающая частица – ядро) согласованы между собой посредством групповых разбиений как по энергии налетающих, так и рождающихся в реакциях частиц рассматриваемых типов.

База данных (БД) GROUND также разделена на два логических блока: БД CPND – исходные данные (оцененные, экспериментальные, справочные и др.) и БД GROUND2 – результирующие групповые константы.

База данных CPND (Collection of Preprocessed Nuclear Data) служит источником оцененных данных при подготовке систем групповых констант для задач моделирования переноса частиц, а также содержит полный набор данных для визуализации их в информационно-справочной системе NDX2:

– скалярные интегральные характеристики ядер (массы и энергии реакций);

– данные по уровням возбуждения и переходам ядер ENSDF;

– оцененные данные из библиотек в формате ENDF/B;

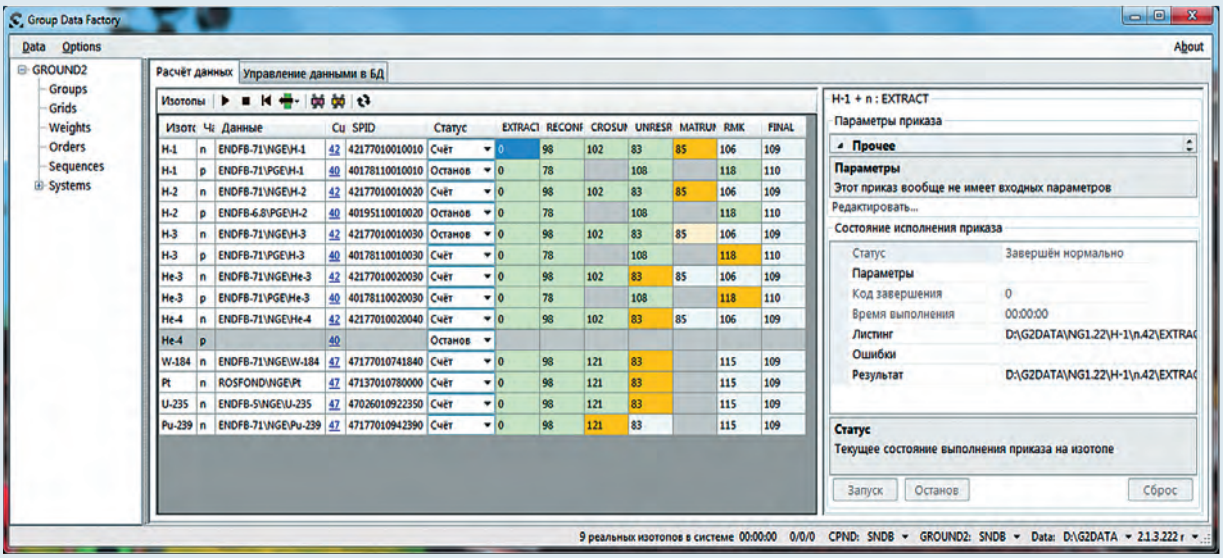
– экспериментальные данные EXFOR.

Ввод данных всех классов в БД CPND из источников в сети Интернет осуществляется посредством специализированных утилит – конверторов данных.

База данных GROUND2 предназначена для хранения рассчитанных групповых микроконстант взаимодействия частиц с ядрами изотопов совместно с параметрами их расчетов, что продиктовано потребностями технологии их подготовки и необходимостью отслеживания и возможного воспроизводства всех этапов обработки оцененных ядерных данных и расчета групповых констант. БД GROUND2 является источником групповых данных для программных комплексов – потребителей многогрупповых констант, а также программы визуализации групповых ядерных данных GX2.

Обработка оцененных ядерных данных и расчет согласованных единых систем групповых констант взаимодействия нейтронов, гамма-квантов и быстрых заряженных частиц осуществляется в программной оболочке GDF.

Программу GDF можно классифицировать как клиентское приложение БД CPND и БД GROUND2, одновременно являющееся управляющей оболочкой для внешних счетных программ. Оно обладает модульной архитектурой для формирования входных дан-



Программная оболочка GDF в режиме управления расчетом групповых констант

ных и передачи их счетным программам комплекса.

Принципиальным новшеством комплекса GROUND2 является гибкое задание последовательности выполняемых программ для каждого типа взаимодействия (пáры частица – изотоп), включенного в систему групповых констант, а также возможность гибкого задания входных параметров расчета для каждого счетного модуля этой последовательности.

При численном моделировании в эйлеровых переменных движения малодеформируемых тел (ударников) в упругопластических средах (преградах) возникает ряд проблем, связанных с точностью описания контактных границ между различными веществами. Одним из способов решения этих проблем является использование для описания ударника приближения абсолютно твердого тела. Ранее в методике ЭГАК был предложен и реализован соответствующий метод BODY-3D. В 2019 г. выполнена валидация метода BODY-3D на модельной задаче и в двух сериях экспериментов по пространственному движению малодеформируемых (жестких) ударников в упругопластических средах. Метод BODY-3D основан на использовании для описания ударника приближения абсолютно твердого тела и расчете течения окружающей среды в неинерциальной системе отсчета, связанной с неподвижным ударником. Численное моделирование процесса проникания проводилось по методике ЭГАК на неподвижной счетной сетке.

В расчетах модельной задачи о внедрении по нормали стальных ударников в алюминиевую полубесконечную преграду получены следующие результаты:

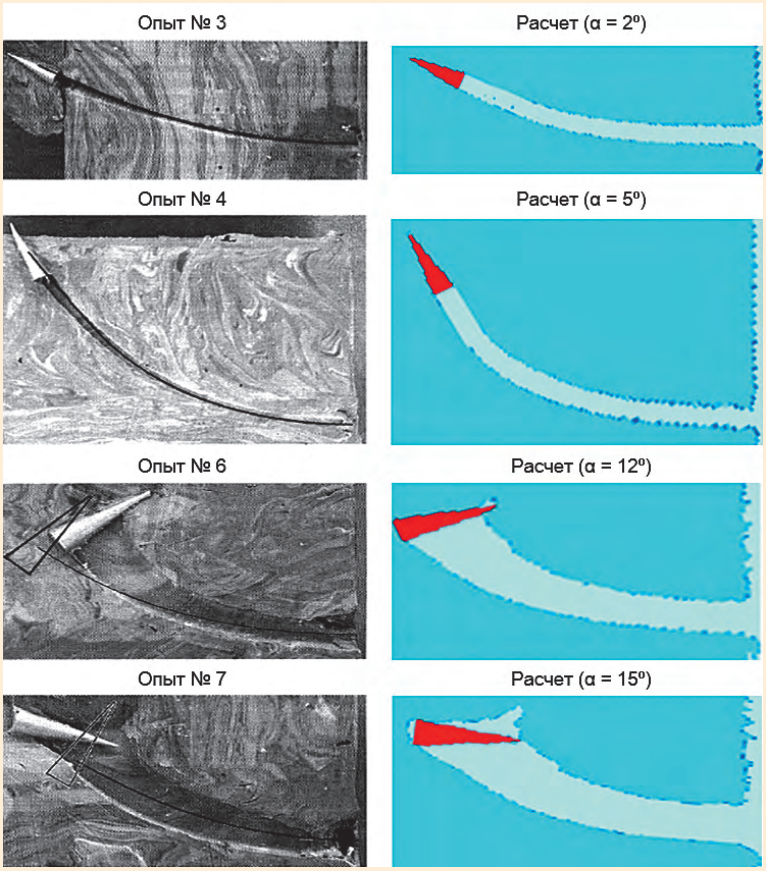
- использование для описания малодеформируемого ударника приближения сплошной деформируемой среды приводит к росту ускорения торможения ударника на всем протяжении внедрения, что противоречит теоретическим представлениям и результатам расчетов в лагранжевых переменных. Это связано с эффектом «прилипания» контактирующих материалов, возникающим в расчетах на неподвижной счетной сетке;
- эффект «прилипания» отсутствует в случае использования для описания ударника приближения абсолютно твердого тела. Это позволяет в расчетах на неподвижной счетной сетке получать результаты, хорошо согласующиеся с данными численного моделирования этого процесса в лагранжевых переменных.

В расчетах опытов по движению конических ударников в пластилине получены следующие результаты:

- численно воспроизведены различные типы траекторий движения проникателей в преграде в зависимости от величины угла атаки α, наблюдавшиеся в опытах;
- количественное сравнение результатов опытов и расчетов по форме каверны, положению в ней проникателя, а также по траектории движения центра масс ударника показало их хорошее согласие.

Таким образом, продемонстрирована адекватность результатов численного моделирования пространственного движения малодеформируемых ударников в упругопластических средах, полученных по эйлеровой методике ЭГАК с использованием метода BODY-3D.

Как и в опытах, при численном моделировании процесса внедрения при небольших углах атаки α = 2° и 5° проникатель двигается по окружностям большого радиуса, а к моменту его остановки траектория постепенно выпрямляется. При больших значениях угла атаки α = 12° и 15° проникание завершается «кувырком» ударника. После остановки углы разворота ударника относительно оси стрельбы в опытах и расчетах оказались близки. Например, в опыте № 6 проникатель совершил «кувырок», но его вершина осталась заглубленной в стенке каверны. А в опыте № 7 вершина располагалась в самой каверне, без контакта с ее стенками. Причем в стенке каверны от нее осталась вмятина.



Результаты опытов (слева) и расчетов по методике ЭГАК с использованием метода BODY-3D

Многие классы прикладных задач численно решаются с помощью уравнения переноса частиц, учитывающего взаимодействие частиц со средой в кинетической постановке. Некоторые задачи существенно отличаются по оптическим свойствам подобластей в исходной области решения.

Как известно, в задачах с резко меняющимися градиентами решения схемы аппроксимации существенно повышаются требования к качеству сеточных методов решения задач переноса. Осцилляции, нарушающие физические представления о гладкости и монотонности решения, являются характерными для линейных сеточных методов второго и более высоких порядков аппроксимации, в том числе для схем типа DSn-метода. Кроме того, подобные ситуации могут приводить к появлению отрицательных потоков. Поэтому особенно актуальна задача построения новых классов разностных схем, которые обеспечивали бы одновременно положительность и монотонность решения исходной задачи, второй или более высокий порядок аппроксимации, логически и арифметически простые алгоритмы расчета ячейки, возможность построения эффективных итерационных методов ускорения.

Специалистами ИТМФ предложен подход к построению таких схем под названием «нелинейная реберная схема». Основные особенности подхода: введение расширенного сеточного шаблона для искомых функций скалярного потока и потока в фазовом пространстве, включающего значения как в центрах ячеек разностной сетки, так и на ее сторонах; применение в качестве замыкающих соотношений дифференциальных нелинейных уравнений с коэффициентами и правыми частями, полученными с помощью специального алгоритма.

Рассматривалось применение нелинейной реберной схемы к одномерному и двумерному случаям стационарного уравнения переноса частиц в декартовой системе координат. В одномерном случае численные исследования показывают, что HP-схема при сохранении второго порядка точности обеспечивает монотонное и положительное решение. В случае решения двумерного уравнения переноса HP-схема также продемонстрировала монотонность и положительность. Установлено, что при измельчении сетки результаты, полученные с использованием DD- и HP-схем, сводятся к одному решению. Во всех рассмотренных задачах отличие численных результатов HP- и DD-схем в интегральной норме составляет не более 2 %.

Таким образом, можно сделать вывод о перспективности

применения нелинейной реберной схемы аппроксимации уравнения переноса в расчетах. В дальнейшем планируется обобщение и численное обоснование HP-схемы применительно к случаям записи двумерного уравнения переноса в цилиндрической системе координат и трехмерного уравнения переноса в декартовой системе координат.

С целью повышения точности моделирования численных методик, использующих лагранжево-эйлеров подход к решению задач механики сплошных сред, создан консервативный по полной энергии глобальный алгоритм пересчета величин на эйлеровом этапе счета шага по времени в разностных схемах газовой динамики на регулярной четырехугольной лагранжево-эйлеровой пространственной сетке. Значения газодинамических величин на новой сетке в данном алгоритме вычисляются из условия сохранения соответствующих интегральных величин. Вычисление новых значений удельной внутренней энергии осуществляется на основе сохранения интегральной внутренней энергии с учетом поправок, обеспечивающих сохранение полной энергии. Доказаны следующие утверждения:

- добавки к интегральной внутренней энергии каждой ячейки сетки неотрицательны;
- удельная внутренняя энергия, вычисленная по интегральным вкладам внутренней энергии, и удельная внутренняя энергия, вычисленная по интегральным энергиям с учетом поправок, отличаются на величину второго порядка малости по некоторому линейному размеру ячейки новой сетки;
- на постоянном по пространству поле скоростей добавки к интегральной внутренней энергии равны нулю.

Представленный алгоритм консервативного пересчета величин можно использовать в паре с любой консервативной по полной энергии разностной схемой лагранжева этапа счета шага по времени. В совокупности получается полностью консервативная разностная схема газодинамики на лагранжево-эйлеровой сетке.

Глобальный характер алгоритма пересчета, во-первых, не ограничивает величину смещения узлов сетки при ее перестроениях и, во-вторых, позволяет подключать программу пересчета величин не на каждом шаге по времени, а через заданное число шагов или автоматически по некоторым критериям. Это позволит сэкономить затраты времени на расчет. Кроме того, обеспечивается возможность единовременного консервативного пересчета величин со «старой» сетки на «новую» даже при несовпадении количества ячеек.

В настоящее время в ряде программных комплексов, применяемых в РФЯЦ-ВНИИЭФ для решения задач математической физики, широко используется библиотека PMLP/Parsol. Она предназначена для решения больших разреженных линейных систем (СЛАУ) в последовательном и параллельном режимах итерационными методами. В состав библиотеки входят предобусловленные итерационные решатели и предобуславливатели.

Распараллеливание решения СЛАУ осуществляется как на распределенной памяти (MPI-интерфейс), так и на общей (OpenMP-интерфейс).

Наличие большого числа параметров решателей и предобуславливателей (в дальнейшем – просто решателей), входящих в состав библиотеки, с одной стороны, вызывает у пользователя затруднение при выборе наиболее подходящего решателя. С другой стороны, сделанный однажды выбор решателя, эффективного в каких-то задачах, может оказаться неэффективным в других задачах или даже в одной задаче на разных участках счета. Поэтому должна существовать возможность смены решателя в процессе счета. Для этого необходимо освободить пользователя, во-первых, от первоначального выбора оптимального решателя под задачу и, во-вторых, от замены решателя на более подходящий к изменившимся свойствам СЛАУ. То есть необходим механизм автоматического подбора решателя под задачу, а также под конкретный этап развития моделируемого физического процесса. Это позволит добиться уменьшения времени счета задач, повысит надежность решения СЛАУ и облегчит использование библиотеки.

Можно выделить несколько этапов работы адаптивного выбора метода решения СЛАУ: чтение параметров и подготовка к работе, испытание назначенных к работе методов, выбор оптимального метода для дальнейшего счета, обработка особой ситуации, т. е. реакция на решение очередной СЛАУ с недостаточной точностью.

Для задания параметров метода решения потока СЛАУ используется структура **parsol**, в которой перечислены набор испытуемых предобуславливателей и их параметры, передаваемая в библиотеку PMLP/Parsol для решения потока СЛАУ одним из заданных в ней методом. Программа адаптивного выбора метода решения после оценки результатов решения СЛАУ текущим методом на предыдущем шаге по времени может испытать

другой метод решения и продолжить счет наискорейшим из двух.

Проведение испытаний – это замеры времени полного и/или частичного (на основе ранее выполненного полного) построения предобуславливателя и времени решения СЛАУ, запись числа итераций и количество решенных СЛАУ на шаге по времени. После решения каждой СЛАУ в ходе испытаний вычисляются времена построения в зависимости от признака неизменности «портрета» матрицы и времени, затраченного на одну итерацию (цены́ итерации). После решения всех СЛАУ испытываемым методом на последнем шаге по времени выбирается метод для следующего шага по времени. Испытания заканчиваются, когда собрана информация обо всех допущенных к испытаниям методах (предобуславливателях), пока текущий оптимальный метод не дал сбой или резко не изменились его затраты на решение СЛАУ.

Механизм адаптивного выбора решателя был опробован в расчетах теплопроводности по двумерной методике МЕДУЗА и трехмерным методикам МИМОЗА, МРС, ЛОГОС-Тепло. Расчеты проводились в последовательном и параллельном режимах и показали, что применение механизма адаптивного выбора решателя уменьшает время решения СЛАУ по сравнению с вариантом задания конкретного решателя, и в ряде случаев существенно.

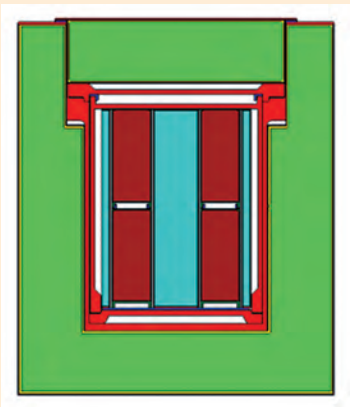
Разработанная в ИТМФ программа TDMCC в 2018 г. была аттестована Ростехнадзором и принята для расчетов ядерной и радиационной безопасности. С помощью этой программы специалисты РФЯЦ-ВНИИЭФ провели исследование по обеспечению ядерной и радиационной безопасности при перевозке уранодержащих материалов (с обогащением до 20 % по ^{235}U) в созданном в РФЯЦ-ВНИИЭФ конкретном образце транспортного упаковочного контейнера ТУК-159. Исследовалась возможность безопасной перевозки загруженного ТУК-159 всеми видами транспорта, включая воздушный.

Конструктивно ТУК-159 состоит из пяти основных элементов: деревянного демпфера, силового корпуса, внутреннего корпуса, чехла и 10 ёмкостей для размещения радиоактивного содержимого. Согласно требованиям МАГАТЭ по обеспечению безопасности упаковок с ядерными делящимися материалами при воздушных перевозках ядерная безопасность ТУК-159 должна подтверждаться как для исходного состояния упаковки, так и для двух серий усиленных аварийных воздействий.

По нормам МАГАТЭ предельно допустимым значением $K_{эф}$ для одиночного ТУК считается 0,95. По итогам исследования оказалось, что с учетом погрешностей максимальные значения $K_{эф}$ для одиночной и группы упаковок ТУК-159 составили:

– в нормальных условиях эксплуатации $K_{эф}$ = 0,421,

– в аварийных ситуациях $K_{эф}$ = 0,912.



Продольное сечение ТУК-159

Таким образом, по результатам численных исследований ТУК-159 соответствует требованиями МАГАТЭ и пригоден для транспортировки уранодержащих материалов. Количество упаковок на одном транспортном средстве ограничено 50 штуками. Как показали результаты расчетов, даже при более чем пятикратном превышении допустимого количества упаковок в нормальных условиях и более чем двукратном превышении – в аварийных система остается подкритичной и, следовательно, ТУК-159 удовлетворяет всем требованиям по обеспечению ядерной безопасности.

МЕТОДИЧЕСКИЕ РАБОТЫ В ИНТЕРЕСАХ РАЗВИТИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ БАЗЫ РФЯЦ-ВНИИЭФ

Одной из основных целей экспериментов на лазерных установках РФЯЦ-ВНИИЭФ является исследование процессов переноса рентгеновского излучения в полостях мишеней различного типа, включая мишени с термоядерными капсулами. Численный анализ результатов экспериментов – необходимый этап на стадии выбора сценария постановки экспериментов, прогнозирования их результатов и оценки полученной информации. Численный анализ осуществляется с помощью двумерных и трехмерных математических комплексов, основанных на различных физических моделях и математических методах, что объясняет тесное сотрудничество между физиками-экспериментаторами и специалистами математического отделения РФЯЦ-ВНИИЭФ.

Примером такого сотрудничества могут служить результаты расчетов тестовой двумерной осесимметричной

задачи переноса излучения в вакуумной области, моделирующей внутреннюю полость мишеней лазерного и тяжелоионного термоядерного синтеза. В этом исследовании использовались различные методики: «вакуумное» приближение с использованием угловых коэффициентов видимости, диффузионное приближение, многогрупповое кинетическое приближение, метод Монте-Карло. Все методики обеспечивают хорошую точность численного решения задачи (отличие не более 0,1 %).

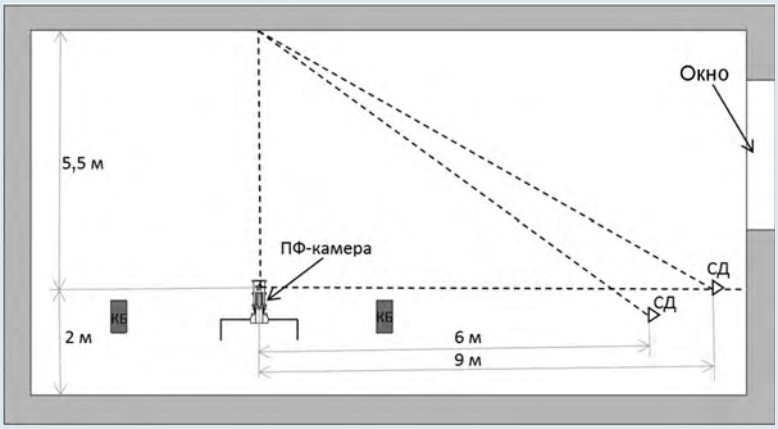


Схема расположения ПФ-камеры и сцинтилляционных детекторов в экспериментальном зале

В рамках исследования особенностей формирования сигнала времяпролетного детектора при измерении излучения плазменного фокуса в замкнутом пространстве проанализированы результаты измерений выхода ДД-нейтронов в экспериментах с плазмофокусной (ПФ) камерой мейзеровского типа. Проведены расчеты формирования сигнала применительно к регистрации излучения ПФ-камеры сцинтилляционными детекторами (СД) методом времени пролета для конкретных условий измерений в экспериментальном зале, а именно трехмерной геометрии среды, окружающей источник излучения и детектор, заметного вклада в регистрируемый сигнал нейтронного и гамма-излучения, обусловленного взаимодействием нейтронов с окружающей источник средой.

Для объяснения особенностей, наблюдаемых на экспериментальных осциллограммах, была предложена гипотеза о влиянии анизотропии выхода нейтронов из источника на форму сигнала СД. Для обоснования этого предположения были проведены модельные расчеты по методике на основе метода Монте-Карло, в которых угловое распределение источника нейтронов задавалось изотропным и мононаправленным по оси камеры (крайняя степень анизотропии). Для более наглядной интерпретации процессов генерации рассеянного излучения источник нейтронов задавался мгновенным, с энергией 2,5 МэВ. Как общая картина, так и временное положение характерных пиков на экспериментальных осциллограммах в целом соответствуют расчетной картине и подверждают гипотезу заметного влияния на формирование сигнала детектора рассеянного излучения вкупе с анизотропией потока нейтронов из источника.

Результаты расчетов такого типа могут в дальнейшем применяться для анализа экспериментов, в том числе для оценки анизотропии выхода нейтронов в конкретном разряде.

В настоящее время в РФЯЦ-ВНИИЭФ эксплуатируется и постоянно совершенствуется многомерный программный код ЛАСМ, предназначенный для численного моделирования физических процессов, происходящих в высокоэнергетичной плазме, создаваемой в условиях экспериментов на современных лазерно-физических установках. Основное предназначение кода – проверка предсказательных теорий, прогнозирование экспериментов, отработка конструкций сферических и цилиндрических боксов и мишеней с варьированием их геометрических размеров, толщины, составов и физических свойств.

На текущий момент существует возможность моделирования по комплексу ЛАСМ следующих физических процессов:

- лазерного энерговыделения;
- распространения излучения в многогрупповом кинетическом приближении;
- электронной (с коэффициентом ограничения по потоку) и ионной теплопроводности с электронно-ионной релаксацией;
- неравновесной газовой динамики;
- термоядерной кинетики и энерговыделения;
- переноса нейтронов в многогрупповом кинетическом приближении;
- переноса быстрых заряженных частиц;
- учета неравновесной кинетики ионизации вещества в приближении «среднего» иона.

В рамках численной оценки возможности зажигания ДТ-капсулы в сквозных расчетах распространения излучения в цилиндрическом боксе-конверторе в условиях работы лазерно-физических

установок по многомерному программному коду ЛАСМ было выполнено имитационное моделирование сжатия и энерговыделения ДТ-капсулы, находящейся в боксе установки NIF.

Итоги исследования:

- получена оценка влияния полиамидной мембраны на характеристики обжатия криогенной мишени;
- по результатам двумерных расчетов констатировано отсутствие зажигания, однако были замечены и получены оценки энерговыделения и нейтронного выхода;
- на основе термодинамических данных рассчитаны сжатие и энерговыделение сферически-симметричной ДТ-капсулы. Получено полномасштабное термоядерное горение мишени.

В целом по итогам численного исследования можно с уверенностью констатировать, что в РФЯЦ-ВНИИЭФ создан и реально существует предсказательный программный инструмент, позволяющий моделировать процессы лазерного термоядерного синтеза – многомерный программный код ЛАСМ.

РАЗВИТИЕ ТЕХНОЛОГИЙ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ, СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ, ИХ ПРОМЫШЛЕННОЕ ВНЕДРЕНИЕ

В 2019 г. продолжалось развитие отечественного прикладного программного обеспечения.

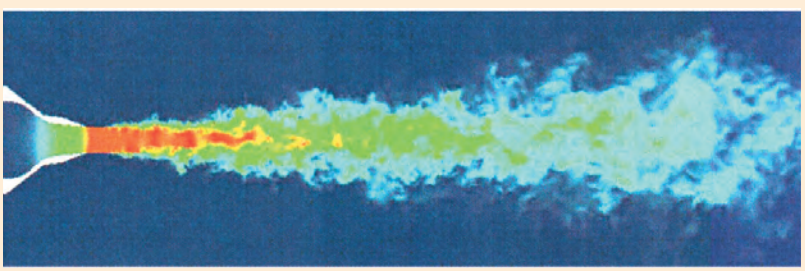
В Москве состоялась презентация тиражируемого коммерческого цифрового программного продукта ЛОГОС-Аэро-Гидро, предназначенного для решения инженерных задач в области течения жидкости и газа, а также многофазных реагирующих потоков и акустики.

Фактически ЛОГОС-Аэро-Гидро стал первым коммерческим решением, входящим в число модулей пакета программных продуктов ЛОГОС. Его расширенный функционал в настоящий момент позволяет решать различные прикладные и исследовательские задачи в области течения жидкостей и газов с использованием широкого набора математических моделей и алгоритмов. Основные физические процессы, моделируемые сегодня при помощи ЛОГОС-Аэро-Гидро: ламинарные и турбулентные течения; многокомпонентные и многофазные течения; течения дисперсных сред; течения со свободной поверхностью; кинематика и динамика твердого тела в потоке; горение и химическая кинетика; акустика дальнего поля; теплокомфорт; обледенение.

Для вывода на рынок первого тиражируемого коммерческого цифрового программного продукта необходимо было предварительно создать коммерческую версию пакета программных продуктов ЛОГОС для массового потребителя; совместно со специалистами Госкорпорации «Росатом» усилить коммерческую привлекательность продукта; создать многоуровневую систему технической поддержки, центры обучения работе с данным пакетом программ и т. д. Одновременно продолжалась работа по передаче коммерческой версии пакета программных продуктов ЛОГОС в опытную эксплуатацию на предприятия ОПК и высокотехнологичных отраслей промышленности.

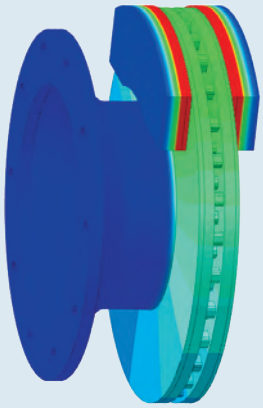
С этими задачами специалисты математического отделения ИТМФ успешно справились. На VI Международном технологическом форуме «Инновации. Технологии. Производство», проходившем в апреле 2019 г. в Рыбинске, Объединенная двигателестроительная корпорация подписала дорожную карту по верификации и внедрению пакета программных продуктов ЛОГОС в российском двигателестроении в сотрудничестве с Госкорпорацией «Росатом» и РФЯЦ-ВНИИЭФ. Экспертный совет общероссийской премии «Проектный лидер-2019», направленной на поддержку лучших инициатив в области национальных проектов, экспорта и импортозамещения, присудил коммерческому цифровому программному продукту ЛОГОС-Аэро-Гидро звание лауреата в номинации «Интеграция цифровых технологий». Церемония награждения прошла 12 сентября в Москве в рамках 5-й выставки «Импортозамещение-2019».

Новые функциональные возможности в 2019 г. получил модуль пакета программ ЛОГОС-Тепло, ориентированный на решение задач ста-



Возможности ЛОГОС-Аэро-Гидро: моделирование нестационарного истечения струи вихреразрешающими методами

Диплом лауреата общероссийской премии «Проектный лидер-2019»



Моделирование теплопроводности в конструкции с наличием подвижных элементов с учетом термического контакта

ционарной и нестационарной теплопроводности в твердых телах и неподвижных средах с возможностью учета процессов излучения, терморазложения и фазовых переходов. В нем был реализован ряд новых физико-математических моделей и методов, позволяющих решать задачи моделирования теплопроводности конструкций:

- с наличием подвижных элементов с учетом термического контакта. Здесь также реализованы алгоритмы быстрого поиска контактирующих граней в параллельном режиме;
- с теплообменом излучением в симметричных конструкциях.

Данные методы позволяют существенно снизить требования к вычислительным ресурсам.

В 2019 г. в модуль пакета программ ЛОГОС-Тепло была введена пользовательская библиотека теплофизических характеристик материалов, наиболее часто используемых при проектировании изделий и систем на предприятиях ОПК и стратегических отраслей промышленности.

Завершается аттестация модуля пакета программ ЛОГОС-Тепло для моделирования теплопроводности на объектах использования атомной энергии и транспортных упаковочных контейнеров с учетом нелинейности различной природы и теплообмена излучением.

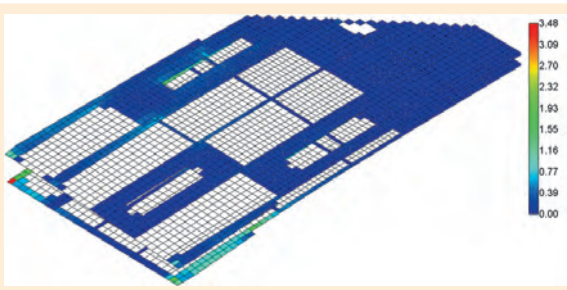
В целом существующий функционал модуля пакета программ ЛОГОС-Тепло позволяет ему получить статус тиражируемого коммерческого цифрового программного продукта. В случае успешного прохождения необходимых для этого процедур он станет вторым коммерческим цифровым программным продуктом сводного пакета программных продуктов ЛОГОС. Выход третьего продукта запланирован на 2020 г. Ожидается, что им станет модуль пакета программ ЛОГОС-Прочность. В 2019 г. велись активные работы по развитию всех основных составляющих этого модуля, в том числе моделирования процессов статического, квазистатического и динамического деформирования конструкций, а также процессов вибрационной стойкости.

Отметим следующие направления функционального развития модуля ЛОГОС-Прочность для решения квазистатических задач деформирования конструкций в 2019 г.:

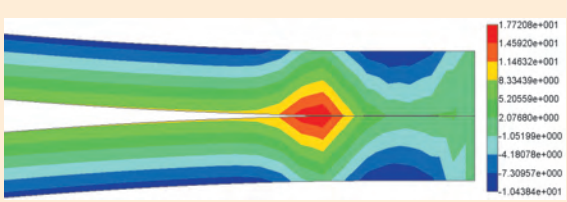
– моделирование разрушения элементов конструкций из композиционных материалов;

– метод когезионных зон для моделирования процесса трещинообразования;

– технология субмоделирования – двухэтапная схема проведения расчета, обеспечивающая уточнение решения в выделенном регионе расчетной модели без увеличения вычислительной нагрузки.



Распределение индекса разрушения по критерию Хилла в расчете напряженно-деформированного состояния панели летательного аппарата из композитного материала



Распределение интенсивности напряжений в задаче о раскрытии трещины в консольной балке (DCB-тест)

Для решения задач динамического деформирования конструкций развивались такие направления развития, как:

– расширение библиотеки конечных элементов и граничных условий (дискретные элементы, шарнирные соединения, новые типы жестких преград);

– введение новых типов сглаживания эффекта «песочных часов»;

– ведение новых моделей материалов и уравнений состояния (усовершенствованные модели композитных материалов, пенопласта и бетона);

– специализированный функционал для моделирования крэш-теста автомобиля (модели газонаполненных объемов для моделирования подушек безопасности, элементы для моделирования ремней безопасности).

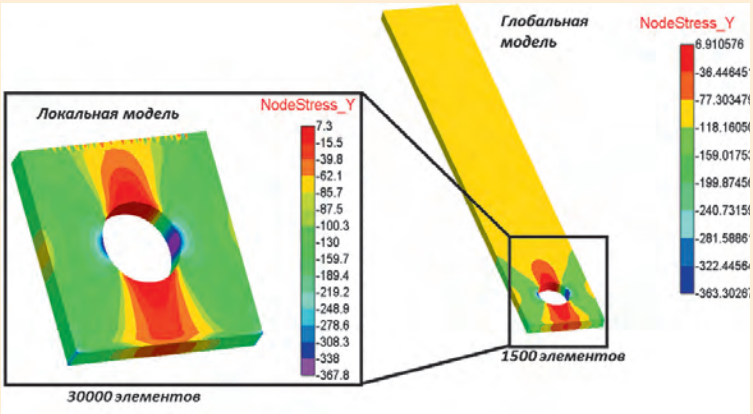
В области решения задач вибрационного анализа по итогам 2019 г. следует указать следующие новые направления:

– адаптация учета контактного взаимодействия при проведении различных типов вибрационного анализа;

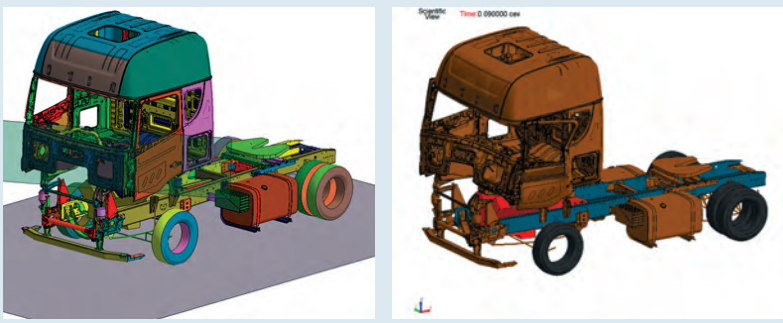
– существенное расширение функциональных возможностей модального анализа, предназначенного для поиска собственных частот и форм колебаний конструкций (модальный анализ с учетом демпфирования, поиск частот в заданном диапазоне, расчет факторов вовлеченности для мод, расчет векторов невязки);

– значительное усовершенствование реализации гармонического анализа (библиотека демпфирований, заданных для материалов; поддержка всех основных видов демпфирования; нагрузки, зависящие от частоты; комплексно заданные нагрузки с учетом фазы);

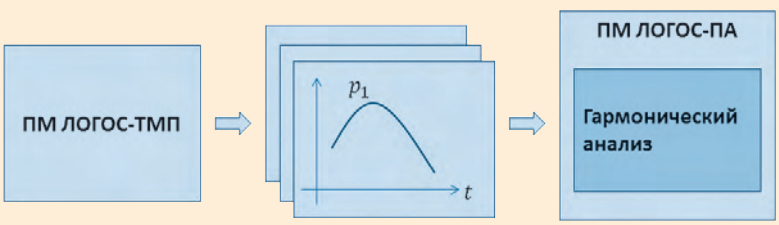
– развитие возможностей по описанию модели (амортизаторы, гибкие вставки);



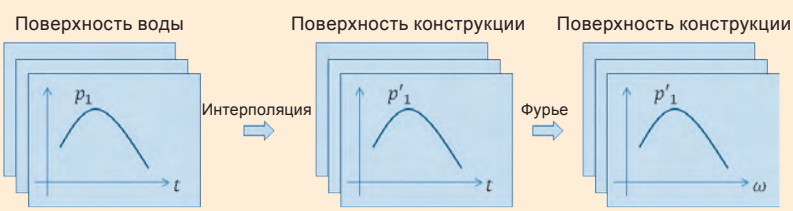
Уточнение решения в зоне концентратора напряжений по технологии субмоделирования



Моделирование крэш-теста прототипа автомобиля-тягача, двигающегося со скоростью 30 км/ч



Процесс передачи нагрузок после гидродинамического расчета в прочностную часть для расчета вибропрочностных характеристик



Преобразование нагрузок в процессе передачи после гидродинамического расчета

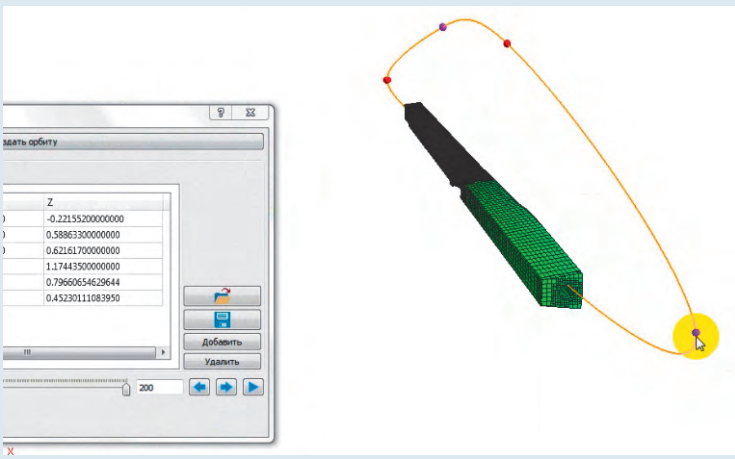
– импорт гидродинамических нагрузок для проведения вибрационного анализа.

К имевшимся ранее возможностям Постпроцессора, входящего в сводный пакет программных продуктов ЛОГОС, в 2019 г. добавлены новые:

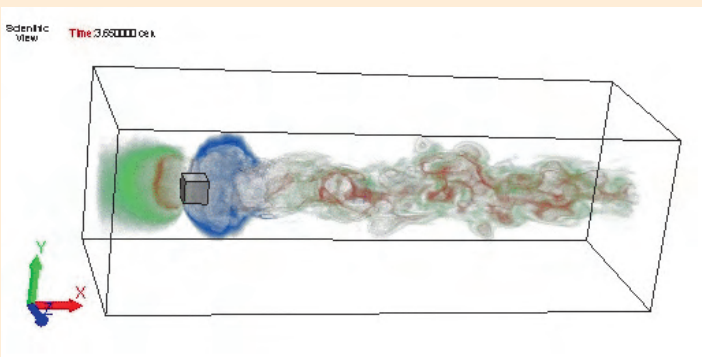
– экспорт 3D-сцен с результатами постобработки. Экспортированные сцены занимают гораздо меньший объем дискового пространства по сравнению с изначальными данными для постобработки. Кроме того, в отличие от готовых изображений, также являющихся результатом постобработки, экспортированные сцены допускают редактирование (смена ракурса просмотра отображаемых объектов, цветовая заливка и др.), т. е. являются более функциональным объектом представления результатов постобработки по сравнению с традиционными изображениями;

– постобработка результатов моделирования с возможностью задания ракурса просмотра с помощью виртуальной камеры для упрощения настройки необходимого пользователю вида. Камера позволяет оперировать непосредственно пространственными координатами для установления позиции наблюдателя (камеры) и целевой (фокальной) точки, а также задавать сложные траектории «облета» при формировании презентационных материалов;

– постобработка с помощью воксельной (объемной) и стереографики в режиме клиент – сервер для обеспечения эффекта погружения пользователя в сцену. Воксельная графика обеспечивает комбинацию цветовой интерпретации расчетных величин и уровней полупрозрачности не только для поверхностных полигонов, но и для всего моделируемого пространства. Эффекта полного погружения в сцену позволяет добиться технология стереоизображения, которая подразумевает построение двух изображений с разных ракурсов просмотра, соответствующих взгляду наблюдателя.



Формирование траектории «облета» для движения интерактивной камеры



Результаты применения объемного рендеринга с использованием API OpenGL к моделированию процесса обтекания куба

В 2019 г. в рамках соответствующего постановления Правительства Российской Федерации велись работы по внедрению пакета программ ЛОГОС в деятельность ряда ведущих предприятий ОПК. Техническими заказчиками указанных работ выступали АО «НПК «Техмаш», АО «Корпорация «ТРВ», филиал ПАО «Компания «Сухой» «ОКБ Сухого», ПАО «ОАК», ПАО «Ил», АО «СПМБМ «Малахит».

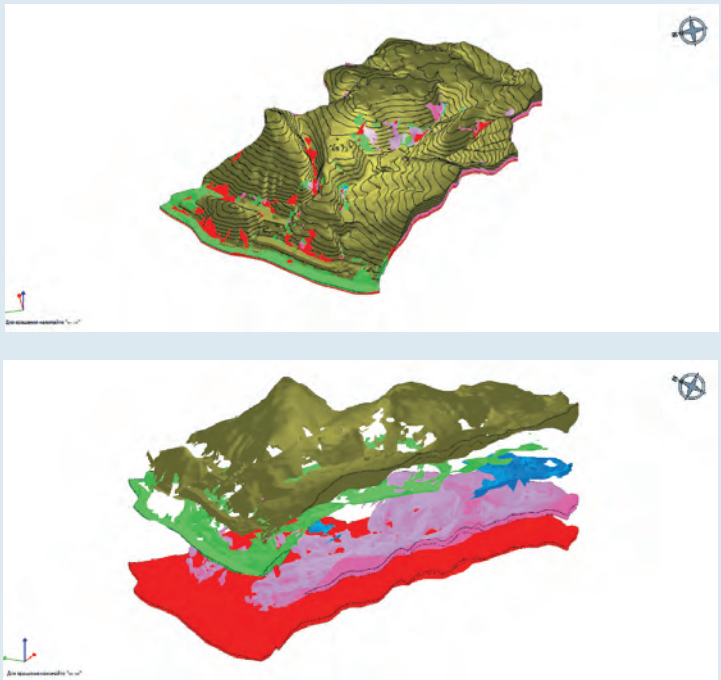
Пакет программ НИМФА – это инновационный программный продукт, развиваемый специалистами ИТМФ совместно со специалистами ФБГУ «Гидроспецгеология». Программа НИМФА предназначена для количественной оценки воздействия ядерно- и радиационно опасных объектов (ЯРОО), а также объектов использования атомной энергии на грунты, грунтовые и поверхностные воды на основе построения сеточных геофильтрационных, геомиграционных и геологических моделей.

Взаимодействуя с предприятиями Росатома в области охраны окружающей среды,

в частности подземных вод, совместными усилиями специалисты РФЯЦ-ВНИИЭФ и ФБГУ «Гидроспецгеология» верифицировали программный комплекс НИМФА. Это позволило в 2019 г. успешно выполнить договор между Госкорпорацией «Росатом» и РФЯЦ-ВНИИЭФ на проведение научно-исследовательских работ по теме «Обеспечение высокой достоверности прогнозов распространения радионуклидов в грунтах и грунтовых водах при обосновании безопасности ЯРОО и вывода из эксплуатации пунктов хранения путем адаптации и внедрения в работы Госкорпорации “Росатом” отечественного программного комплекса НИМФА». В рамках работ по договору пакет НИМФА и разработанные средства пакета геомиграционных и геологических моделей были внедрены на предприятиях АО «ГНЦ НИИАР» и ФГУП ФЯО «ГХК».

Параллельно была осуществлена поставка лицензии на пакет НИМФА (в рамках отдельного лицензионного договора) в Институт геоэкологии им. Е. М. Сергеева РАН (ИГЭ РАН).

В 2019 г. в составе пакета НИМФА создан программный модуль двухфазной фильтрации для численного моделирования течения подземных вод в условиях полного и неполного водонасыщения. Такие задачи возникают при рассмотрении довольно большого класса течений подземных вод, например образования депрессионных воронок вблизи карьеров и откачивающих скважин, сезонных изменений уровня грунтовых вод и т. д. Модуль двухфазной фильтрации в составе пакета НИМФА распараллелен, позволяет проводить расчеты задач с переменной влагонасыщенностью на супер-ЭВМ и расширяет класс решаемых с помощью пакета программ НИМФА задач.



Цифровая трехмерная геологическая модель западной части территории ФГУП ФЯО «ГХК»

Также в прошедшем году в составе пакета программ НИМФА разработана программа учета многоступенчатого радиоактивного распада при получении решения по изменению содержания отдельных изотопов во времени для системы произвольного изотопного состава. Это позволит точнее рассчитывать состав и концентрации радиоактивных загрязнений, переносимых подземными фильтрационными потоками, и тем самым повысит достоверность прогноза по ареалу радиоактивного загрязнения.

Таким образом, в рамках развития прикладного программного обеспечения в РФЯЦ-ВНИИЭФ при поддержке Госкорпорации «Росатом» активно развивается направление цифровизации геолого-гидрогеологических условий как в части эксплуатации ЯРОО, так и в части вывода из эксплуатации. Это позволяет смело говорить о том, что Госкорпорация «Росатом», не являясь недропользователем, ответственно относится к обеспечению безопасности окружающей среды.

Еще одним важным компонентом суперкомпьютерных технологий является системное программное обеспечение. В этом направлении в 2019 г. в РФЯЦ-ВНИИЭФ выполнена уникальная разработка – создана отечественная защищенная операционная система, предназначенная для супер-ЭВМ различного класса.

К 2019 г. на предприятия и в организации РФ поставлено 14 высокопроизводительных вычислительных систем среднего класса производительности и более 150 компактных супер-ЭВМ, спроектированных и созданных специалистами ИТМФ. На международном военно-техническом форуме «Армия-2019» научной и инженерной общественности была представлена новая модель компактной супер-ЭВМ на отечественных процессорах, разработанной в РФЯЦ-ВНИИЭФ, – «Эльбрус-8С».