

ИНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ (ИТМФ)

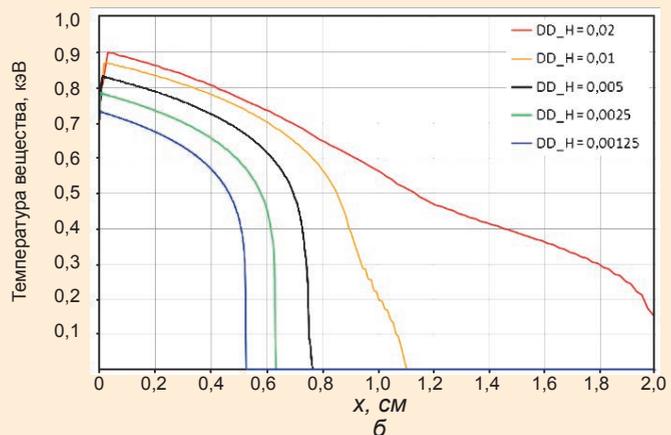
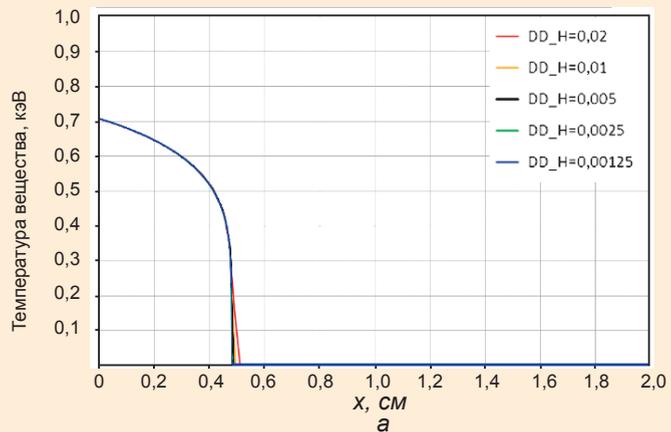
Как и в предыдущие годы, в числе основных направлений деятельности ИТМФ в 2021 г. оставались работы по созданию современной расчетно-теоретической базы моделирования сложных физических процессов, а также работы в области разработки, создания и совершенствования математических методик и программных комплексов для эффективного компьютерного моделирования широкого спектра прикладных задач в многомерной постановке на вычислительных системах нового поколения.

Также активно развивались технологии высокопроизводительных вычислений в интересах их внедрения в высокотехнологичные отрасли промышленности и осуществлялись работы по развитию осваиваемой продуктовой линейки.

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

В 2021 г. специалисты ИТМФ продолжали разработку новых и совершенствование существующих разностных схем типа DS_n , которые лежат в основе многих методик численного решения уравнения переноса частиц в многомерной постановке.

При решении задач переноса излучения в двумерной постановке на ортогональных пространственных сетках был обнаружен эффект ускоренного прогрева вещества, не соответствующий физике исследуемого процесса. Численные исследования на модельной задаче по распространению излучения в плоском слое из оптически плотного вещества



Профиль температуры вещества в расчетах по DD-схеме: а – с изотропным входящим потоком; б – с анизотропным входящим потоком

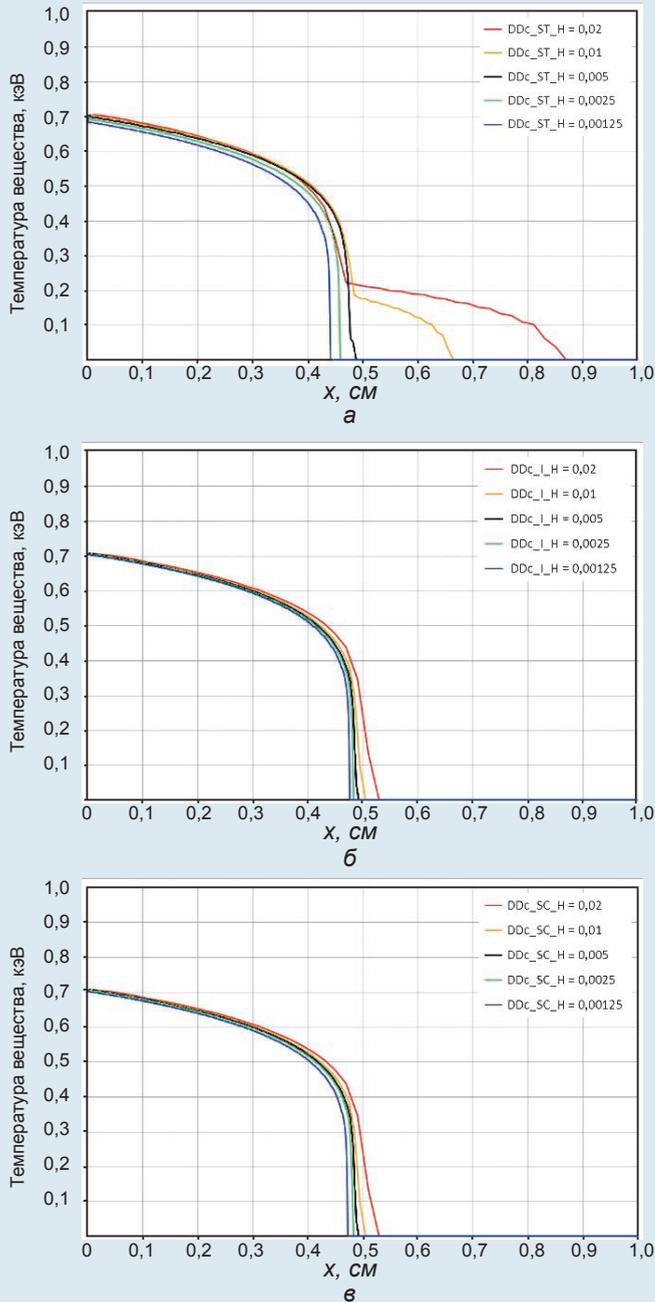
на сгущающихся равномерных пространственных сетках показали, что эффект нефизического прогрева вещества вызван сочетанием двух факторов: сильной анизотропии входящего потока излучения по направлениям полета частиц и особенностью разностных схем 2-го порядка точности, использующих дополнительные аппроксимационные соотношения (например, DD-схемы).

Для борьбы с обнаруженным счетным эффектом были предложены и опробованы три модификации расчетной схемы, направленные на «изотропизацию» выходящего потока излучения из первой приграничной ячейки для соответствующих направлений полета частиц:

- 1) ST-схема 1-го порядка точности (DDc_ST-схема);
- 2) схема, получаемая в предельном случае при разбиении ячейки на бесконечное число подъячеек, решаемых по DD-схеме, и эквивалентная SC-схеме для стационарного уравнения (DDc_I-схема);

3) схема, в которой для замыкания системы сеточных уравнений совместно с уравнением баланса использовалось дополнительное соотношение на основе SC-схемы (DDc_SC).

Все модифицированные схемы используются только в первой приграничной ячейке и обеспечивают положительность решения; во всех остальных случаях применяется DD-схема.



Профиль температуры вещества в расчетах с анизотропным входящим потоком по схемам DDc_ST (а), DDc_I (б) и DDc_SC (в)

Результаты численных исследований продемонстрировали, что переход на DDc_ST -схему позволил уменьшить счетный эффект нефизичного прогрева вещества анизотропным потоком излучения; при использовании DDc_I - и DDc_SC -схем результаты расчетов на всей совокупности рассмотренных пространственных сеток очень близки между собой и физически корректному результату.

Таким образом, предложенные модифицированные схемы являются эффективным средством борьбы со счетным эффектом нефизичного прогрева вещества анизотропным потоком излучения.

В направлении развития методик расчетного моделирования процессов турбулентного перемешивания в 2021 г. было проведено расчетно-теорети-

ческое исследование взаимодействия ударной волны (УВ) с зоной турбулентного перемешивания (ЗТП) на плоской границе воздух – аргон в опыте на ударной трубе. В исследовании предполагалось, что ЗТП развивается на плоской в начальный момент времени контактной границе, разделяющей воздух и аргон.

Отметим, что в опытах Невмержицкого и др. (Невмержицкий Н. В., Разин А. Н., Сотсков Е. А. и др. Экспериментальное исследование взаимодействия ударных волн с контактной границей и зоной турбулентного перемешивания различных газов // Приклад. механика и техн. физика. 2017. Т. 58, № 2. С. 16–25) наблюдался эффект уширения и «расслоения» УВ при ее распространении после прохождения ЗТП.

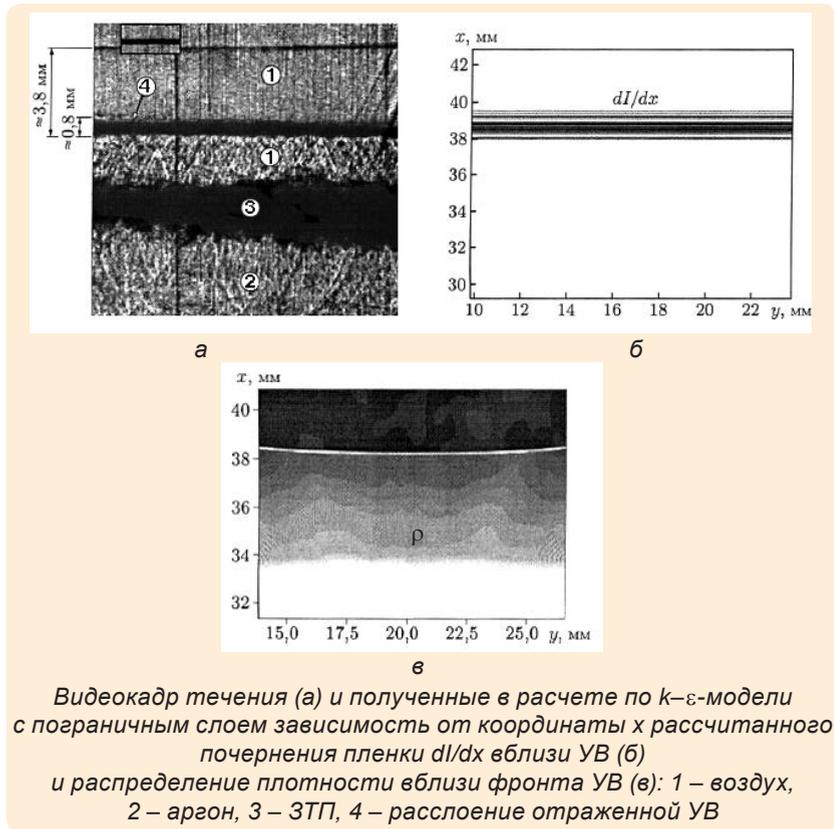
Однако численное моделирование, проведенное без учета пограничного слоя (как на основе прямого трехмерного численного моделирования, так и с использованием двумерной k - ε -модели турбулентности), не выявило уширения и расслоения ударной волны при распространении по невозмущенной среде после прохождения ЗТП, наблюдаемых в опытах Невмержицкого.

В то же время в двумерных расчетах с k - ε -моделью турбулентности с учетом пограничного слоя получены согласующиеся с наблюдаемыми в эксперименте результаты. Расчет градиента от интеграла показателя преломления по ширине канала позволил получить согласующуюся с опытом увеличенную ширину фронта УВ. Так называемое расслоение, отмеченное в статье Невмержицкого и др., представляется оптическим эффектом, связанным с искривлением плоскости УВ вследствие взаимодействия с пограничным слоем. Косвенным аргументом

в пользу такого объяснения служит то, что в опытах расслоение наблюдается только для отраженной ударной волны, которая проходит по уже имеющемуся пограничному слою, и не наблюдается для прямой волны, перед которой пограничного слоя нет.

Таким образом, на основе численных расчетов дано объяснение экспериментально наблюдаемого эффекта уширения и расслоения УВ после прохождения ЗТП.

В 2021 г. было выполнено расчетно-теоретическое исследование по развитию неустойчивости Рихтмайера – Мешкова с использованием неявного метода крупных вихрей (ILES) по методике МИМОЗА (комплекс МИД). При моделировании рассматривалось развитие турбулентного перемешивания на контактных границах трехслойных газовых систем после прохождения ударной волны. После прохождения УВ через шероховатую контактную границу (КГ) разноплотных веществ на ней развивается неустойчивость Рихтмайера – Мешкова, а на наклонной границе – и неустойчивость Кельвина – Гельмгольца. В результате роста шероховатости тяжелое вещество проникает в легкое в виде струй, а легкое в тяжелое – в виде пузырей. С течением времени струи разрушаются и в окрестности контактной границы образуется область, в которой контактирующие вещества перемешаны либо на молекулярном, либо на гетерогенном уровне. Подобные задачи часто возникают в физике высоких плотностей энергии, в частности в задачах по управляемому термоядерному синтезу. Если движение слоистых систем происходит под действием ударных волн, то в исследуемой области поле течения может иметь довольно сложную структуру, а характеристики исследуемого



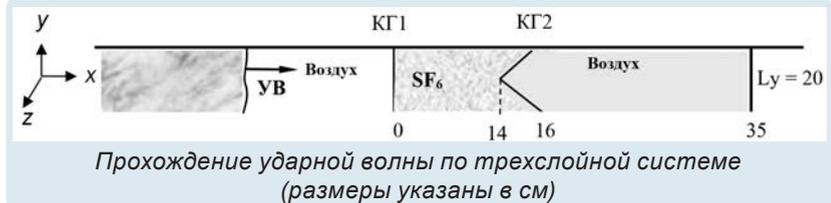
Видеокадр течения (а) и полученные в расчете по k - ε -модели с пограничным слоем зависимость от координаты x рассчитанного почернения пленки dI/dx вблизи УВ (б) и распределение плотности вблизи фронта УВ (в): 1 – воздух, 2 – аргон, 3 – ЗТП, 4 – расслоение отраженной УВ

течения зависят от процесса турбулентного перемешивания.

В исследовании численно изучалось влияние начальной шероховатости КГ на структуру газодинамического течения, возникающего в трехслойных газовых системах после прохождения ударной волны. Моделирование проводилось с опорой на эксперименты со слойками воздух – SF_6 – воздух и воздух – He – воздух, которые ранее были выполнены в одном из научных центров Великобритании (Holder D., Barton C. Shock-tube Richtmyer-Meshkov experiments: inverse chevron and half height // Proc. of the 9th int. Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing. – UK: University of Cambridge, 2004).

В трубе устанавливались две мембраны – контактные границы

КГ1 и КГ2, которые поддерживались тонкими проволочными сетками. Между мембранами закачивался тяжелый газ (SF_6), а слева и справа от мембран – воздух. До начала опытов все газы находились под давлением 1 бар. На левом конце трубы формировалась УВ с числом Маха $M = 1,26$, которая двигалась по трехслойной газовой системе в сторону правого торца трубы, отражалась от торца и взаимодействовала с контактными границами, вследствие чего на КГ развивалась неустойчивость Рихтмайера – Мешкова (на наклонных КГ присутствовала и неустойчивость Кельвина – Гельмгольца) с последующим переходом в турбулентное перемешивание. На стенках и правом торце трубы ставились граничные условия «жесткая стенка».



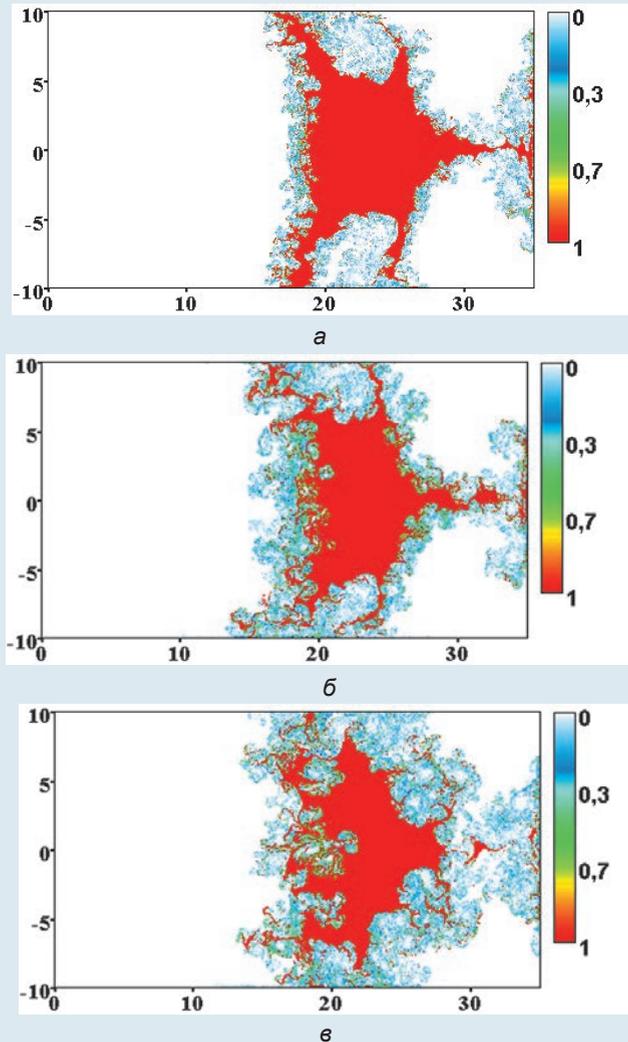
Прохождение ударной волны по трехслойной системе (размеры указаны в см)

Математическое моделирование лабораторных опытов выполнялось в двумерной постановке по методике МИМОЗА с использованием уравнений Эйлера без привлечения каких-либо моделей учета турбулентного перемешивания (ILES моделирование). Для изучения влияния начальной шероховатости КГ на развитие неустойчивости и турбулентного перемешивания проводились три серии расчетов, отличающихся начальной шероховатостью КГ и подробностью разностной сетки по пространству. Расчеты проводились на сетках с квадратными ячейками со сторонами $h = 1/16$ см, $1/32$ см, $1/64$ см.

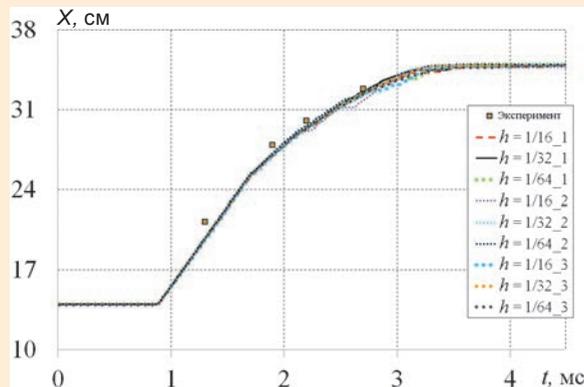
В первой серии расчетов для слойки воздух – SF_6 – воздух контактные границы не возмущались. Неустойчивость на контактных границах развивалась вследствие несовпадения направлений граней ячеек сетки с направлениями КГ. Во второй серии на КГ задавались одномодовые синусоидальные возмущения, в третьей серии – двухмодовые. Шероховатость КГ формировалась путем возмущения концентраций газов в ячейках, через которые проходит синусоида. В таких ячейках объемные концентрации рассчитывались в соответствии с долями площадей ячейки, на которые синусоида (кривая) делит данную ячейку.

Сравнивая $X-t$ диаграммы движения вершины струи в расчетах и опыте (см. рисунки), можно отметить удовлетворительное согласие результатов расчетов и экспериментов.

В расчетно-теоретическом исследовании установлено, что при использовании ILES стратегии моделирования масса перемешанных газов и энтропия заметно зависят от начальной шероховатости границ и размера счетной ячейки разностной сетки. Следует отметить, что $X-t$ диаграмма вершины струи и форма центральной области



Поле концентрации SF_6 в расчетах 1-й (а), 2-й (б) и 3-й (в) серий экспериментов, $t = 4,4$ мс, $h = 1/64$ см



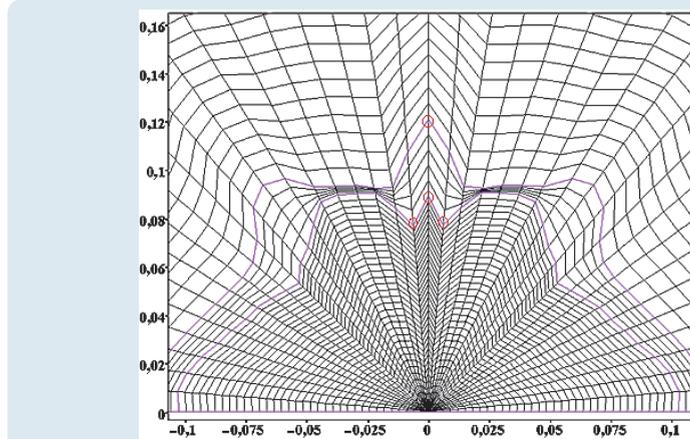
$X-t$ -диаграмма вершины струи в расчете и эксперименте: h – линейный размер стороны ячейки сетки (в см), конечная цифра – номер серии расчета

удовлетворительно согласуются с опытными данными, полученными в Великобритании.

В 2021 г. продолжались работы по внедрению новых подходов для оптимизации расчетных исследований, в том числе

с использованием технологий искусственного интеллекта и машинного обучения. Например, сегодня средствами технологии машинного обучения решается проблема коррекции движения сферической разностной сетки в процессе счета по лагранжево-эйлеровой методике МИМОЗА. Данная проблема в значительной степени влияет на сроки проведения расчета, поскольку возникают потери времени на вынужденное ручное вмешательство расчетчика в счет задачи для исправления дефектных зон пространственной сетки в ходе возникшего аварийного останова. Преимуществом системы коррекции узлов на основе искусственных нейронных сетей (ИНС) перед традиционными алгоритмами с многочисленными логическими ветвлениями, условными переходами и недостаточно обоснованным определением пороговых критериев является простота механизма принятия решения, когда фактически изначальная проблема становится близка к проблеме распознавания образов (сбор обучающих данных, обучение ИНС).

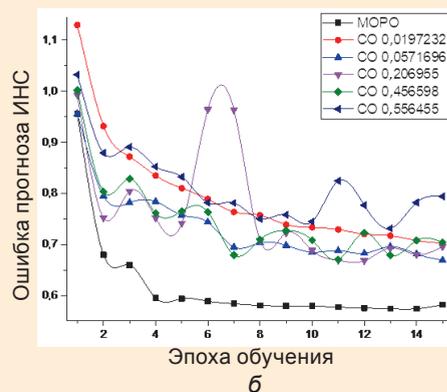
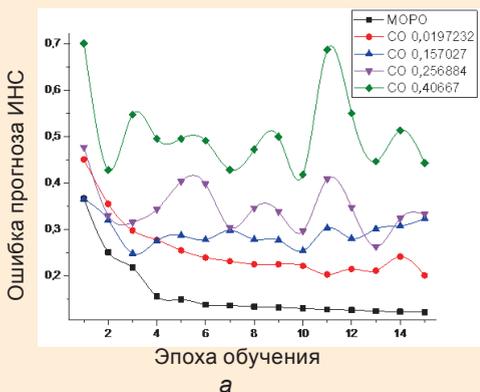
Проведена существенная работа по реализации и апробации различных архитектур ИНС. Определен шаблон-набор входных данных для обучения всех ИНС, участвующих



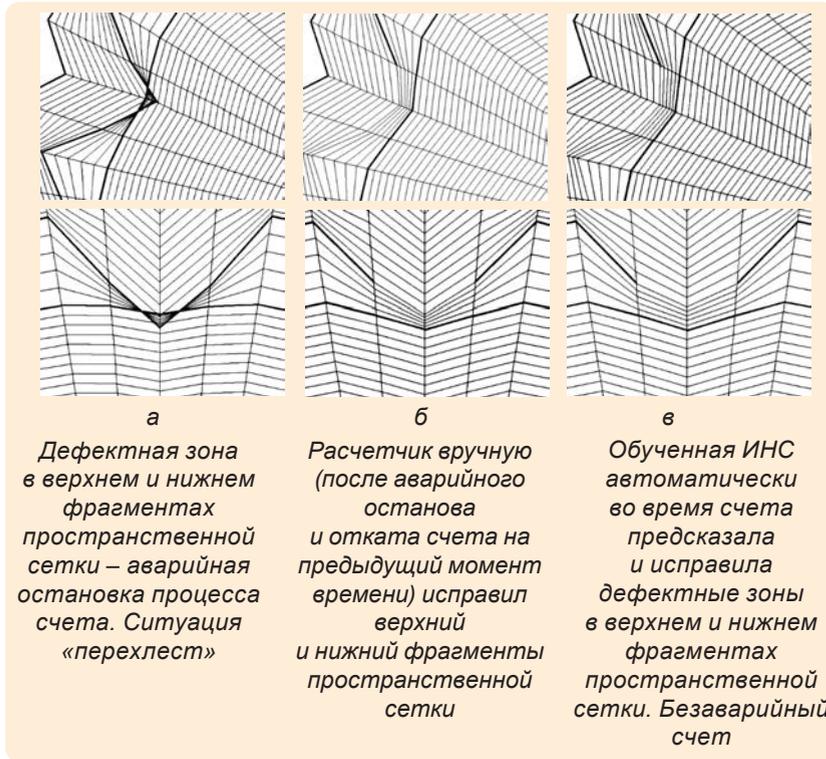
Пример деформации линий пространственной сетки. Окружности – дефектные точки, которые могут привести к аварийной остановке процесса счета

в коррекции узлов пространственной сетки – коррекция граничных точек, внутренних узлов и узлов «лагранжевых» линий (запрет на перетекание массы через линии пространственной сетки). Реализованы различные алгоритмы ускорения обучения ИНС, в том числе и многосетевой алгоритм обучения МОРО собственной разработки, основанный на программном интерфейсе MPI и методе оптимизации «рой частиц». Метод МОРО позволил в разы ускорить процесс поиска минимума на поверхности функции ошибки и избавил от ряда проблем обучения ИНС: попадание в локальные минимумы, эмпирический подбор оптимального коэффициента ско-

рости обучения (шаг коррекции весовых коэффициентов ИНС), длительность процесса обучения, «паралич» весовых связей ИНС (экстремальные значения некоторых весовых коэффициентов). Для демонстрации эффективности применения метода МОРО как алгоритма обучения ИНС на рисунке показаны результаты обучения ИНС по стандартному алгоритму обучения – «обратное распространение ошибки» (ОРО) с различными коэффициентами скорости обучения (для наглядности приведены графики с наименьшей ошибкой) – и результаты обучения ИНС по методу МОРО для задачи распознавания визуальных образов библиотеки MNIST.



Сравнение графиков функции ошибки прогноза ИНС при обучении ИНС по методу МОРО и обучении множества ИНС с различными коэффициентами скорости обучения (CO) по стандартному алгоритму обучения ОРО на данных задачи распознавания рукописных цифр (а) и предметов одежды (б) пакета визуальных образов библиотеки MNIST



В итоге для двумерных сферических разностных сеток выбран шаблонный набор индикаторов, служащих входными данными для ИНС. Разработана методика формирования и расширения базы обучающей выборки для обучения ИНС. Для сеток описанного типа сконфигурированы и обучены ИНС различной топологии, по-

зволяющие с высокой вероятностью предупреждать и устранять дефектные узлы, которые могут создавать потенциально опасные области разностной сетки и приводить к преждевременной остановке процесса счета задачи. При этом результаты расчетов, выполненных с использованием ИНС, хорошо согласуются с результатами

расчетов, выполненных специалистами. Имеет место и сокращение числа временных шагов до 25 %, что является следствием увеличения шага по времени.

Описанная технология позволила сократить календарное время счета (устранение аварийных остановок) и нивелировать влияние человеческого фактора (стратегия счета расчетчика) на результаты расчетов для установленного класса задач. На сегодняшний день ведутся работы по расширению списка установленного класса задач путем увеличения уже существующей обучающей выборки.

В интересах повышения эффективности вычислений на супер-ЭВМ и сокращения времени расчетов задач газовой динамики в 2021 г. в производственную эксплуатацию была введена версия библиотеки УРС-ОФ (Уравнения Состояния Общего Фонда) для вычисления теплофизических свойств веществ, ориентированная на параллельные вычисления с использованием автовекторизации и стандарта OpenMP. Библиотека включает: специально разработанные обменные

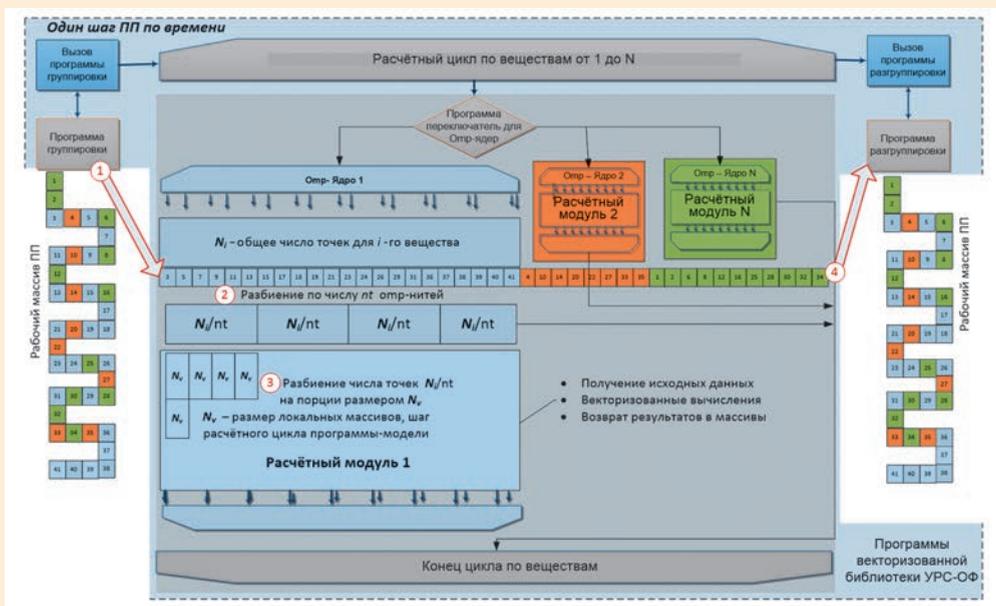


Схема организации вычислений в векторизованной версии библиотеки УРС-ОФ

структуры, содержащие адреса массивов исходных данных и результатов, размещенных в прикладной программе; программы, организующие распределение вычислений по отрядам; набор векторизованных расчетных модулей, реализующих компьютерные модели.

По результатам тестирования при расчете на вычислителе с шириной векторного регистра, равной четырем числам двойной точности, получено сокращение времени счета от 2,8 до 4 раз. При расчете на вычислителе с шириной векторного регистра, равной восьми числам двойной точности, получено сокращение времени от 4 до 7 раз по сравнению с не векторизованной версией в зависимости от сложности компьютерных моделей. То есть в настоящий момент новая версия библиотеки УРС-ОФ обеспечивает эффективность распараллеливания более 70 %.

РАЗВИТИЕ ТЕХНОЛОГИЙ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ И СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ, ИХ ПРОМЫШЛЕННОЕ ВНЕДРЕНИЕ

Важной составляющей технологий суперкомпьютерного моделирования является развитие отечественного прикладного программного обеспечения. В связи с этим в 2021 г. в ИТМФ продолжалась работа по дальнейшему расширению функциональных возможностей пакетов программ, разрабатываемых в рамках продуктовой линейки ИТМФ, и расширению классов прикладных задач, решаемых с использованием развиваемых пакетов программ в интересах предприятий высокотехнологичных отраслей промышленности и ВПК.

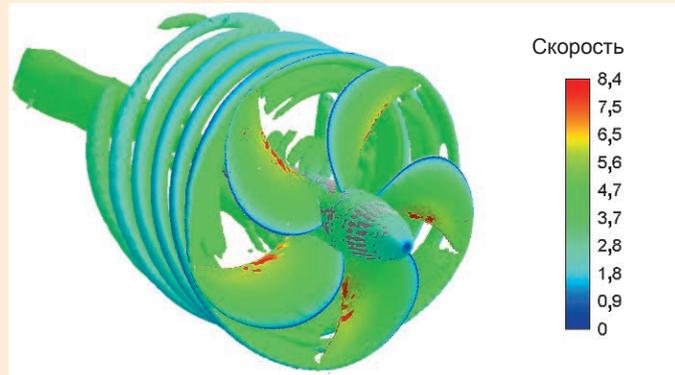
Так, для развития аэрогидродинамического модуля

пакета программ инженерного анализа и суперкомпьютерного моделирования ЛОГОС (ПП ЛОГОС) сделан шаг к расширению возможности использования этого модуля при решении новых классов задач судостроения. Для моделирования комплексных задач судостроения по расчету характеристик надводных объектов с учетом различных режимов эксплуатации и ветроволновых нагрузок требуется проведение расчетов динамики движения одиночного судна и связанной группы судов на поверхности раздела вода – воздух. Решение подобных задач требует применения современных физико-математических моделей и численных алгоритмов, специализированных сеточных генераторов, а также современных средств распараллеливания и постобработки. В мировой практике

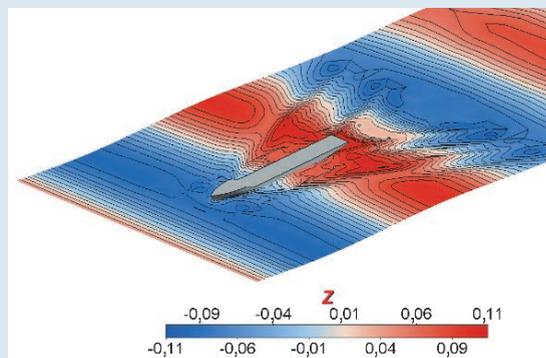
существуют решения подобного уровня, широко применяемые на практике.

Аэрогидродинамический модуль ПП ЛОГОС позволяет проводить численные расчеты следующих основных классов задач судостроительной промышленности:

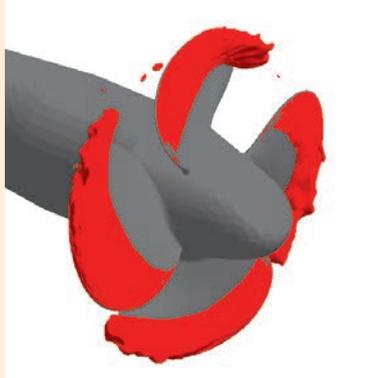
- моделирование внешнего обтекания тел;
- моделирование вращения винтов и движителей;
- моделирования течений со свободной поверхностью и их воздействие на объекты морской техники;
- моделирование процессов кавитации;
- моделирование движения моделей судов с учетом вращения движителей;
- моделирование движения одиночного объекта и связанной группы объектов вблизи поверхности водной среды с учетом ветроволновых нагрузок.



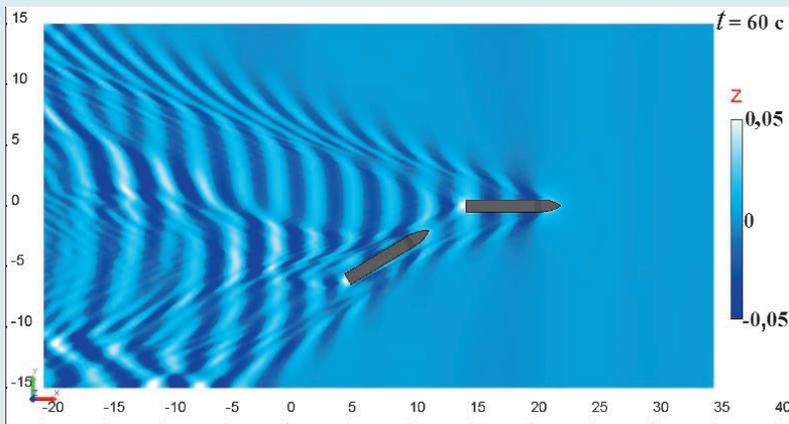
Моделирование вращения гребного винта с учетом ламинарно-турбулентного перехода



Моделирование качки судна на встречном волнении



Моделирование работы гребного винта в условиях кавитации



Моделирование движения модели корпуса судна в сцепке за моделью судна

Решение задач из указанных классов основано на заложенном в данном модуле ПП ЛОГОС численном решении трехмерных уравнений Навье – Стокса, где ядром численного алгоритма является итеративный SIMPLE-подобный метод с конечно-объемной дискретизацией уравнений. Учет движения твердых тел осуществляется путем использования заложенной в ПП ЛОГОС технологии деформирующихся и перекрывающихся сеток, а также динамической сшивки сеток на скользящих интерфейсах. Эти методы дополнены и адаптированы для внедрения в технологический цикл проектирования объектов морской техники виртуальной лаборатории по проведению автоматизированного численного моделирования в области теории корабля.

Достигнутые в 2021 г. результаты показали, что в настоящий момент аэрогидродинамический модуль ПП ЛОГОС позволяет с достаточной точностью прогнозировать динамику процессов, характерных для корабельной гидродинамики.

Значительное развитие в 2021 г. получил также модуль прочности ПП ЛОГОС.

Так, в интересах решения динамических задач прочности в ПП ЛОГОС произошло расширение библиотеки операторов сглаживания для устранения деформаций типа «песочные часы»; введены новые модели материалов (модифицированная модель Джонсона – Кука, модель мягких грунтовых сред Григоряна, модель бетона Уинфрита, модель композитного материала с прогрессирующим разрушением и учетом влияния скорости деформации).

В интересах решения квазистатических задач деформирования конструкций в 2021 г. выполнено: развитие контактных алгоритмов; введение моделей гиперупругого деформирования Нео – Гука и Муни – Ривлина; развитие модели неявной ползучести за счет учета температурного вклада в расчет скорости деформации ползучести; реализация элемента гибкой связи для моделирования канатов/швартовочных соединений; реализация объемного шестигранного слоистого конечного элемента для моделирования слоистых композиционных материалов. В интересах развития модели термопластичности Ю. Г. Коротких и моделирования ресурса проведена модификация базовых соотношений деформирования и накопления усталостных повреждений при различных режимах мало- и многоциклового нагружения.

Наконец, в области решения задач вибрационного анализа конструкций основными достижениями прошедшего года являются: появление возможности проведения модального анализа для конструкций с учетом циклической симметрии; добавление элементов роторной динамики как во вращающейся системе координат, так и в инерциальной; разработка модуля для проведения спектрального анализа конструкций.

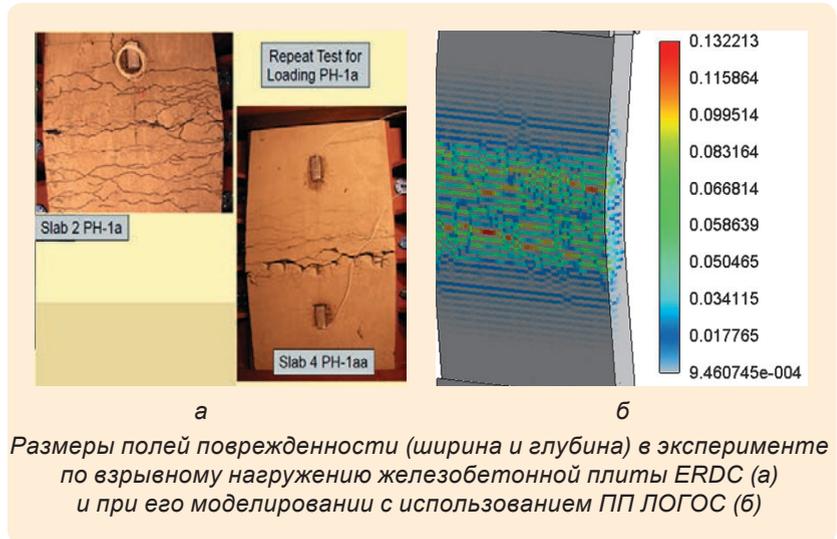
Кроме того, для расширения возможностей внедрения ПП ЛОГОС в атомную энергетику в модуле прочности был разработан верификационный базис для решения задач моделирования импульсного воздействия на железобетонные конструкции, включающий как тестовые задачи, так и задачи с экспериментальными данными, в том числе задачи:

- растяжения бетонной плиты;
- сжатия цилиндрического образца бетона;

- ударного нагружения железобетонной плиты SUGANO;
- четырехточечного изгиба железобетонной балки Леонарда;
- четырехточечного изгиба преднапряженной бетонной балки с натяжением арматуры на упоры;
- испытания падающим грузом преднапряженной бетонной балки с натяжением армоканата на бетон;
- преднапряженной защитной оболочки под внутренним давлением;
- взрывного нагружения железобетонной плиты ERDC.

Комплексные работы по развитию аэрогидродинамического модуля и модуля прочности ПП ЛОГОС в интересах судостроения в 2021 г. заложили возможность дальнейшего развития специализированных версий ПП ЛОГОС, ориентированных на разработку и внедрение технологий суперкомпьютерных двойников при проектировании отдельных элементов, процессов и систем новых судов. Это обеспечит:

- дальнейшее совершенствование ядерных энергетических установок;
- улучшение гидродинамических характеристик на основе суперкомпьютерной оптимизации облика корабля;
- расчет характеристик движителей;



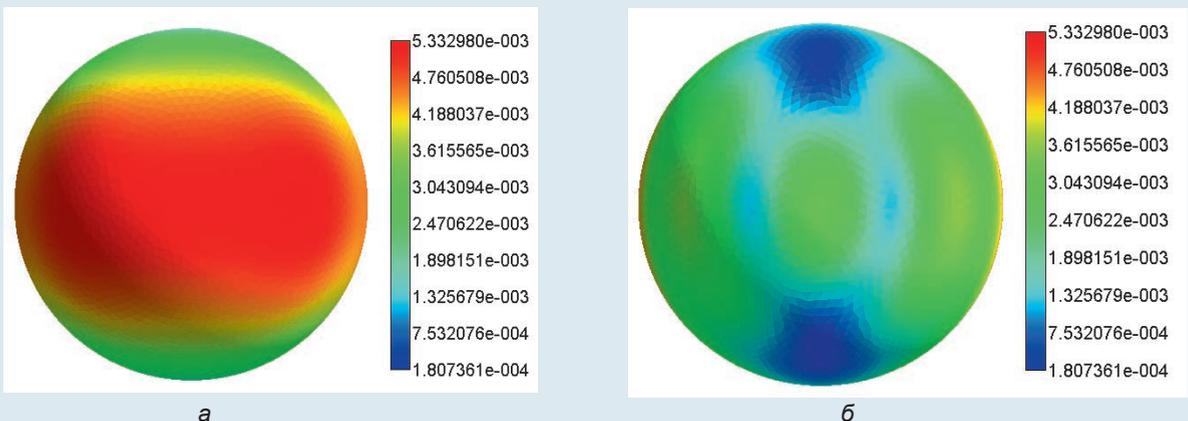
Размеры полей поврежденности (ширина и глубина) в эксперименте по взрывному нагружению железобетонной плиты ERDC (а) и при его моделировании с использованием ПП ЛОГОС (б)

- расчет теплового состояния при пожарах и микроклимат;
- обоснование повышения ресурса оборудования, подверженного циклическим нагрузкам;
- учет кавитации при проведении расчетов;
- расчет прочности элементов конструкции при внешних воздействиях;
- совершенствование общекорабельных систем гидравлики и сжатого воздуха;
- оптимизацию конструктивных элементов;
- развитие модулей систем вооружений (пусковые установки).

Согласно утвержденному техническому заданию (ТЗ) в математическом отделении ИТМФ до 2023 г. в интересах

улучшения работы антенно-фидерных устройств (АФУ) должны быть созданы базовые версии пакета программ ЛОГОС-ЭМИ для расчета эффективной поверхности рассеяния (ЭПР) электромагнитного излучения объектами различной геометрической формы. В 2021 г. в рамках ТЗ выполнен первый этап работ по созданию программного модуля ЛОГОС-ЭМИ расчета воздействия и распространения электромагнитного излучения. На данном этапе:

- созданы базовые версии программ, реализующих метод моментов с одноуровневым мультипольным приближением и метод конечных элементов для решения задач ЭПР на идеально проводящих объек-



Распределение поверхностных токов (в амперах) на заданной сфере ($r = 0,6$ м) на частоте 300 МГц при облучении плотной электромагнитной волной: а – вид с освещенной стороны; б – вид с теневой стороны

тах в частотном представлении;

- разработан верификационный базис для верификации программных средств расчета ЭПР;

- реализован базовый функционал для задания параметров расчета с использованием графического интерфейса препроцессора ЛОГОС;

- расширен функционал постпроцессора ЛОГОС для возможности обработки и визуализации результатов расчета задач взаимодействия и распространения электромагнитного излучения ЛОГОС-ЭМИ.

В 2021 г., в рамках проекта «Создание цифрового продукта ЛОГОС» продолжалось развитие единой системы препостпроцессинга для продукта ЛОГОС-Прочность на базе ЛОГОС-Препост:

- постобработка расширена набором алгоритмов «изоповерхность», «сечение плоскостью», «фигура», «история», «профиль»;

- обеспечена калькуляция сеточных величин, поиск экстремумов и интегралов;

- поддержаны отбор сеточных элементов и отображение экстремальных значений отображаемых полей;

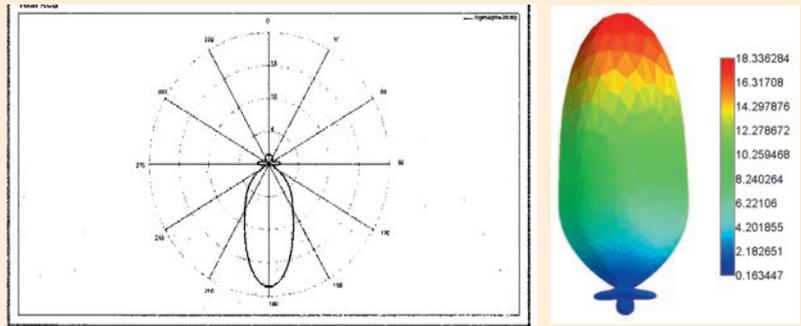
- реализована возможность интерактивной обработки прямоугольных объектов.

В 2021 г. в ЛОГОС-Препост осуществлялось развитие алгоритмов обработки данных, заданных на регулярных сетках с дробными ячейками:

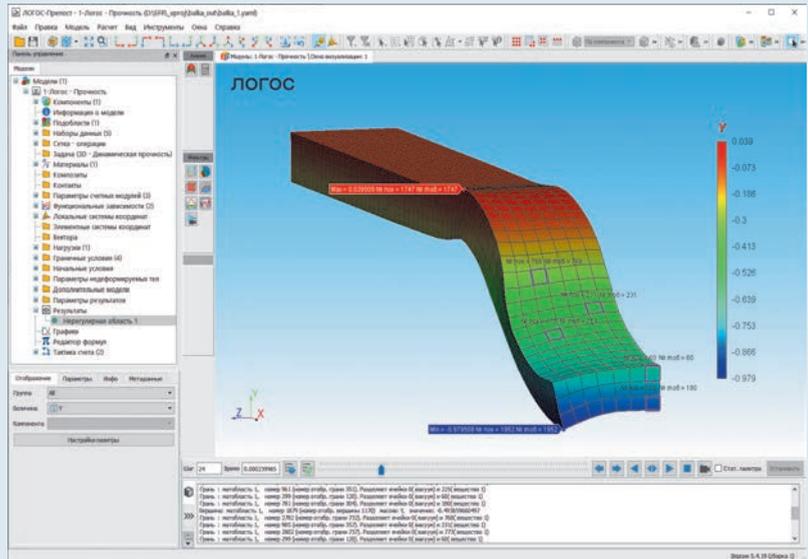
- реализовано отображение сеток с заданным уровнем дробления;

- алгоритмы фильтрации «интервал» и «регулярная под-область» модернизированы для учета дробных ячеек;

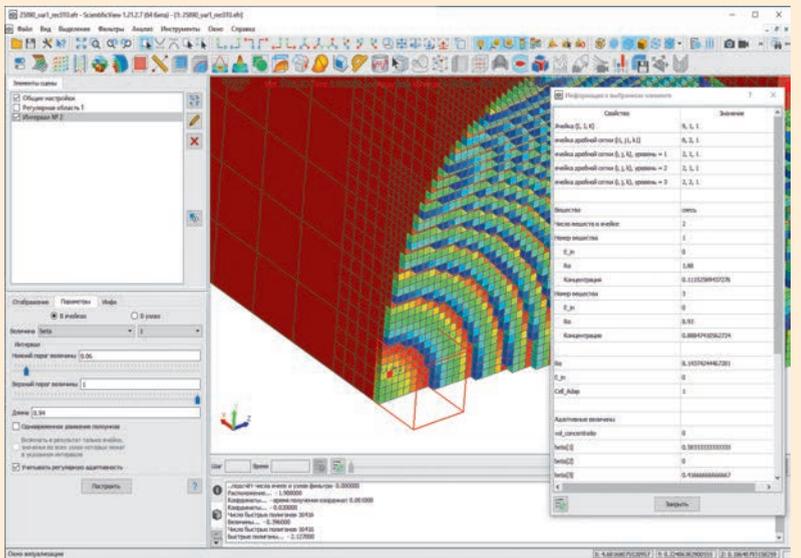
- реализованы алгоритмы интерактивного выбора и получения информации о значениях величин в дробных ячейках и узлах сетки.



Зависимость ЭПР от угла наблюдения (вывод графических результатов в декартовой или полярной системе координат)



Интерфейс и некоторые новые возможности постобработки результатов моделирования в ЛОГОС-Прочность



Визуализация результата работы алгоритма фильтрации «интервал» с выбором дробной ячейки и выводом информации о ней

В 2021 г. продолжалось развитие и внедрение пакета программ НИМФА в рамках реализации утвержденной генеральным директором Госкорпорации «Росатом» А. Е. Лихачевым программы «Внедрение инновационного отечественного программного продукта "Программный комплекс НИМФА" в практику работ по оценке воздействия ЯРОО Госкорпорации "Росатом" на подземные, поверхностные воды и грунты в качестве отраслевого стандартного программного продукта в период с 2018 по 2021 г.». В соответствии с данной программой успешно выполнен договор между Госкорпорацией «Росатом» и ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ». В ходе работ по договору совместно с ФГБУ «Гидроспецгеология» выполнены следующие пункты:

- подготовлена матрица верификации ПК НИМФА 6.0, проведены верификационные расчеты, проанализированы результаты;
- аттестационный отчет и проект аттестационного паспорта ПК НИМФА 6.0 направлены в ФБУ «НТЦ ЯРБ» на аттестацию;
- разработан пакет документов по ПК НИМФА 6.0, включая руководство пользователя, тьюториалы и большой объем обучающих материалов;
- на базе ФГБУ «Гидроспецгеология» проведен обучающий семинар для пользователей ПК НИМФА 6.0, актуализирован сайт ПК НИМФА 6.0.

В соответствии с решением управляющего совета стратегической программы «Цифровой Росатом» Госкорпорации «Росатом» в 2021 г. стартовал проект «Создание цифрового продукта ЛОГОС-Гидрогеология». Целью работы является создание цифрового продукта на основе программного пакета НИМФА 5.0. В рамках данного проекта

в 2021 г. выполнены следующие работы.

- Разработан программный модуль «Поверхностный сток» для расчета задач поверхностного стока, содержащий реализацию следующих программных средств:
 - модель «мелкой воды»;
 - модель переноса загрязнителя в поверхностных водах;
 - модель инфильтрации по Хортону и Грину – Ампу;
 - интерфейс для введения начальных данных расчетов, обработки и анализа результатов в задачах поверхностного стока.
- Проведено аналитическое и маркетинговое исследование мирового и российского рынков программного обеспечения для математического моделирования в гидрогеологии.
- Разработана база верификационных тестов для модуля «Поверхностный сток», подготовлена программная документация и руководство пользователя по данному модулю.
- Сервер системы лицензирования цифрового продукта ЛОГОС адаптирован для продукта ЛОГОС-Гидрогеология.
- Создана система сборки, подготовки и выпуска дистрибутива для задач поверхностного стока.
- Разработан регламент технической поддержки продукта.
- Выпущена первая версия дистрибутива цифрового продукта ЛОГОС-Гидрогеология для задач поверхностного стока.

В направлении развития точного генератора ПК НИМФА в 2021 г. выполнены:

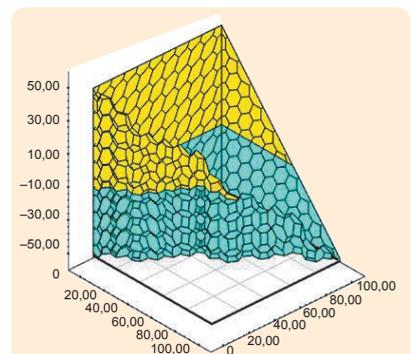
- разработка и реализация алгоритмов построения сетки с учетом выклинивания областей;
- разработка и реализация алгоритмов поиска несвязных областей модельной области;
- реализация учета внутренних граничных условий (береговые линии, абсолютная отметка рельефа, фильтраци-

онный барьер) при построении сетки;

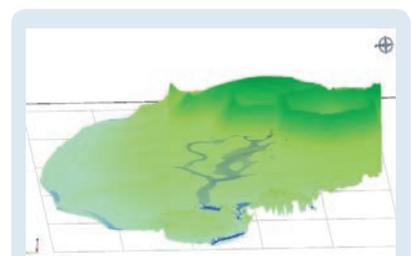
- реализация построения сетки совместно с зонами дробления.

В 2021 г. в ИТМФ продолжались работы по развитию и внедрению программного комплекса Time Dependent Monte-Carlo Code (TDMCC) для решения задач совместного переноса нейтронов и гамма-квантов методом Монте-Карло.

Так как процессы обоснования и получения аттестационных паспортов, разрешающих РФЯЦ-ВНИИЭФ проведение работ по оценке ядерной безопасности и радиационной защиты от заданных источников нейтронного и фотонного излучения, к 2021 г. были завершены, основные усилия в прошедшем году сосредоточились на наполнении верификационной базы задач. В результате на текущий момент верификационная база в обоснование ядерной безопасности содержит более 1000 задач различного уровня сложности, поэтому



Пример отображения области с выклиниванием



Пример отображения дневной поверхности рельефа с рекой

программный комплекс TDMCC получает статус полноправного коммерческого элемента продуктовой линейки ИТМФ и может быть широко представлен заказчиком.

В 2021 г. в ИТМФ продолжались активные работы по разработке программного комплекса «Виртуальный 3D-принтер» для моделирования процессов лазерных аддитивных технологий. Программный комплекс ориентирован на решение следующих задач:

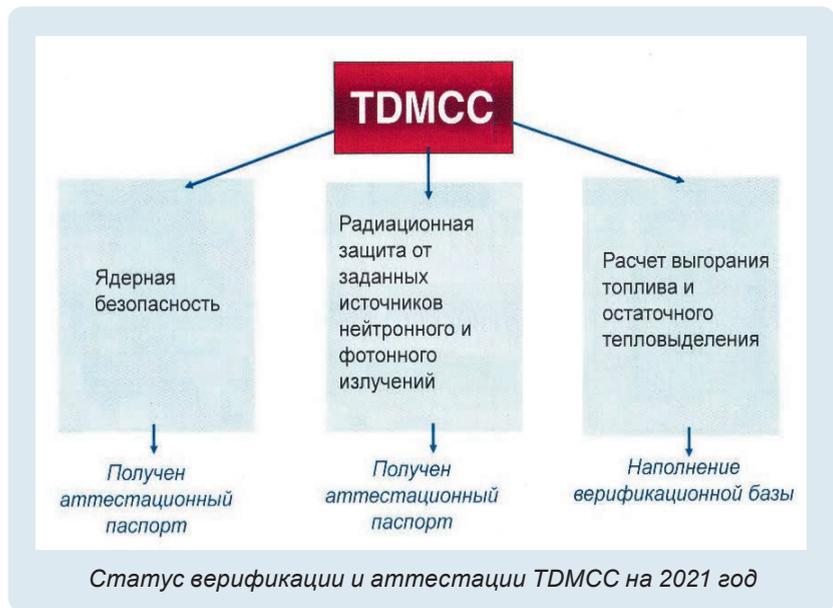
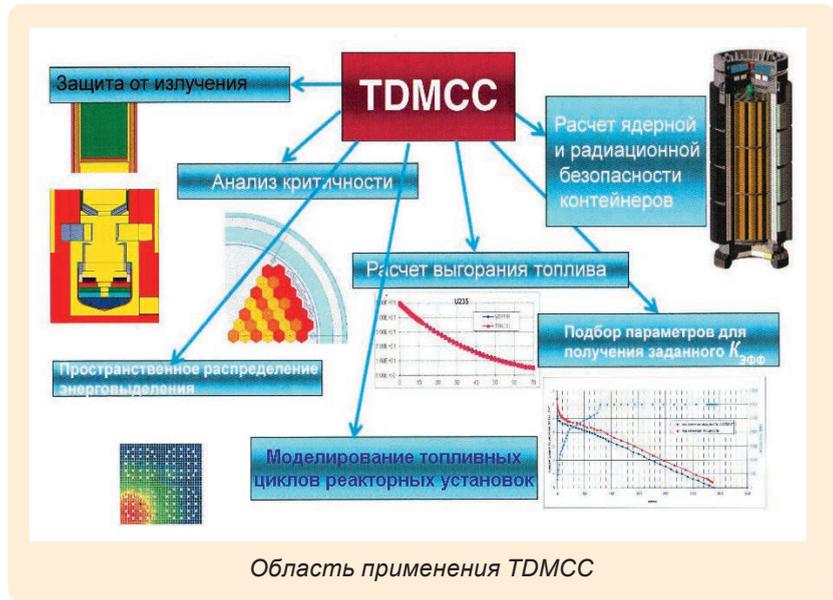
- проектирование деталей сложных форм посредством генеративного дизайна с использованием топологической оптимизации и решетчатых структур;

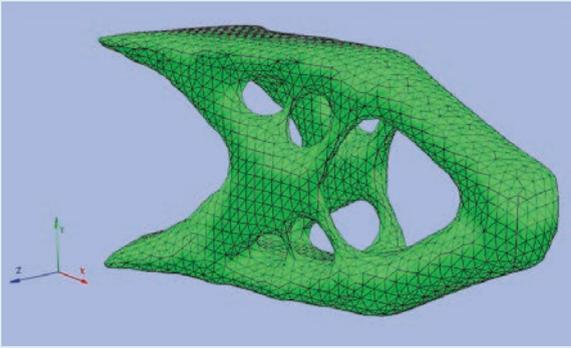
- предсказание свойств изготавливаемых деталей, минимизация остаточных напряжений, короблений и деформаций посредством моделирования физических процессов на мезо- и макроуровне;

- выбор оптимальных режимов работы оборудования с целью обеспечения качества синтезируемых деталей, повышения скорости, снижения количества использованного порошка, минимизации брака при производстве;

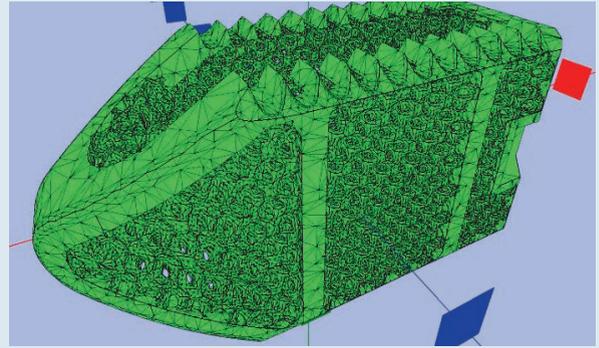
- полный цикл предпечатной подготовки деталей: размещение на платформе, выбор настроек оборудования и режимов его работы, разрезание на слои и задание штриховок, генерация управляющего кода.

На текущий момент разрабатываемый комплекс состоит из трех блоков программных модулей, отражающих этапы жизненного цикла разработки деталей: «Проектирование» (с элементами CAD), «Моделирование» (CAE), «Производство» (CAM). Все программные модули интегрированы в единую оболочку с графическим интерфейсом пользователя.

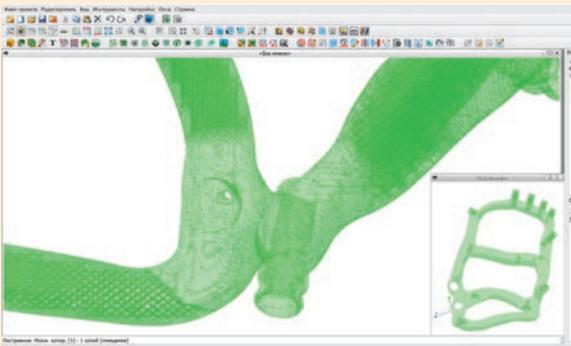




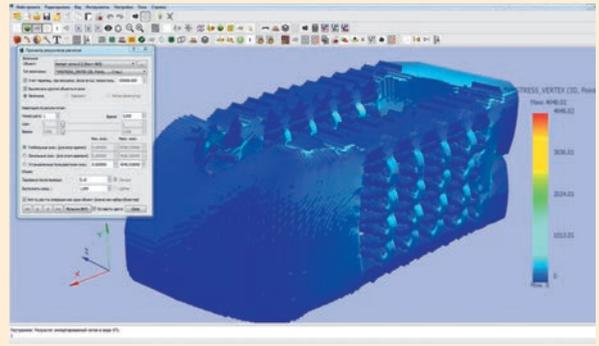
Деталь «Кронштейн», полученная в результате топологической оптимизации



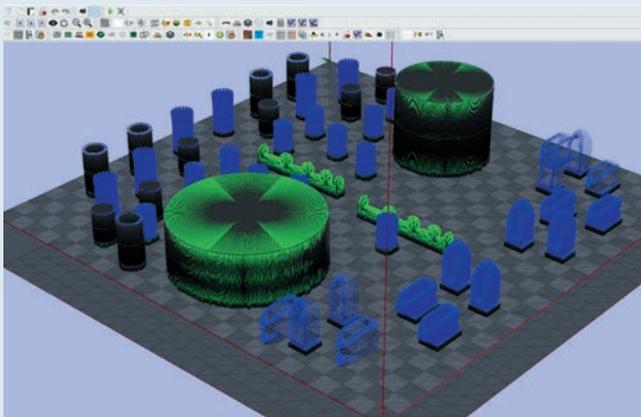
Деталь «Спинай кейдж» с вписанными решетчатыми структурами



Деталь «Челюстной имплант» с вписанными решетчатыми структурами



Поле напряжений в детали «Спинай кейдж», полученное в результате теплового и прочностного расчета на макроуровне



а



б

Платформа с множеством деталей: а – вид в «Виртуальном 3D-принтере», б – фотография после выпекания

Еще с 2016 г. специалисты ИТМФ занимаются разработкой сертификацией защищенной операционной системы (ЗОС) «Арамид» под разные архитектуры супер-ЭВМ. ЗОС «Арамид» является единственным в России дистрибутивом защищен-

ной операционной системы типа А (ОС общего назначения) 2-го класса защиты (по классификации ФСТЭК России), обеспечивающим возможность создания информационных систем в защищенном исполнении для проведения распределенных высо-

копроизводительных вычислений на супер-ЭВМ с разделением прав доступа в многопользовательском режиме. В состав дистрибутива ЗОС «Арамид» входят уникальные компоненты общесистемного программного обеспечения, благодаря кото-

рым ЗОС «Арамид» является незаменимым и эффективным решением при создании супер-ЭВМ различной производительности и может успешно использоваться при создании супер-ЭВМ как в защищенном исполнении, так и для обработки несекретной информации.

В 2021 г. продолжались работы по модернизации ЗОС «Арамид» в интересах предприятий высокотехнологичных отраслей промышленности и ВПК. Так, в этом направлении были решены следующие важные задачи:

– осуществлен переход на современную кодовую базу Linux-дистрибутива ОС с характеристиками: бесплатный; свободно распространяемый; RHEL-совместимый; стабильный с периодическими обновлениями пакетов с устранением ошибок и проблем без-

опасности. При переходе были приняты меры по обеспечению автономности и независимости сборки программных пакетов и дистрибутива ОС в целом от применяемой кодовой базы;

– обеспечено централизованное управление базовыми конфигурациями комплекса средств защиты информации и служебных сервисов, функционирующих на компонентах супер-ЭВМ.

Решение указанных задач позволило на базе ЗОС «Арамид» в ИТМФ создать ряд высокопроизводительных супер-ЭВМ на современной аппаратной компонентной базе в защищенном исполнении.

Кроме того, в 2021 г. осуществлены поставки ЗОС «Арамид» на предприятия Госкорпорации «Росатом» и оборонно-промышленного комплекса: ФГУП «НИТИ им. А. П. Алек-

сандрова», АО «Корпорация «Тактическое ракетное вооружение», АО «ЦСМ». Ожидается завершение работ по включению ЗОС «Арамид» в Единый реестр российского программного обеспечения.

В ходе работ по развитию продуктовой линейки в ИТМФ на базе ЦКО продолжалось мелкосерийное производство программно-аппаратных комплексов терафлопсного класса на основе компактных супер-ЭВМ. По заказам сторонних организаций (ИПФ РАН, ГСПИ, СарФТИ, Гидропресс и др.) в 2021 г. были собраны и сданы заказчиком вычислительные системы с суммарной пиковой производительностью 29 Тфлопс. По итогам их реализации от заказчиков поступило 26,7 млн рублей.

ИНСТИТУТ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ГАЗОДИНАМИКИ И ФИЗИКИ ВЗРЫВА (ИФВ)

КВАЗИИЗОЭНТРОПИЧЕСКОЕ СЖАТИЕ ГАЗООБРАЗНЫХ ГЕЛИЯ И ДЕЙТЕРИЯ В СФЕРИЧЕСКИХ КОНСТРУКЦИЯХ ПРИ ТЕРАПАСКАЛЬНЫХ ДАВЛЕНИЯХ

В прошедшем году в ИФВ проведена серия экспериментов по исследованию предварительно статически сжатых газообразных гелия и дейтерия при их последующем обжатии во взрывных сферических каскадных конструкциях, обеспечивающих квазиизоэнтропическое сжатие исследуемых газов. Цель исследований – уточнить экспериментальные данные о сжимаемости гелия и дейтерия в терапаскальной области давлений.

Средняя плотность газов определялась рентгенографическим методом по положению

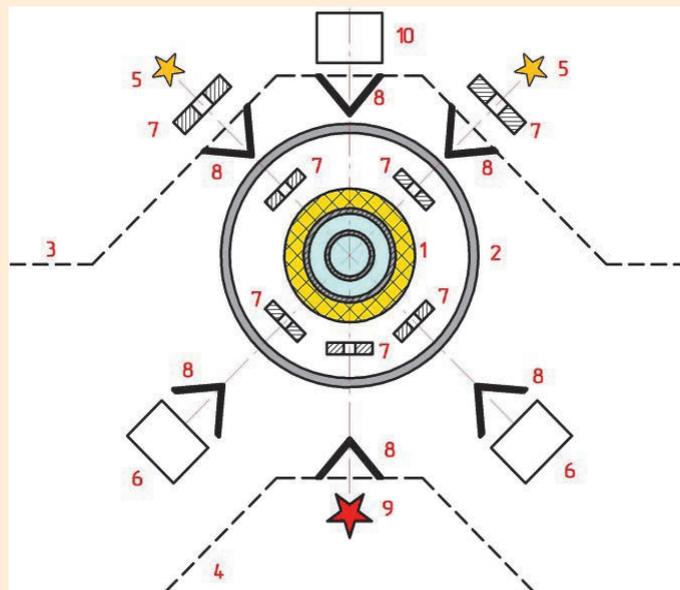


Схема проведения взрывных экспериментов с использованием многокадровой рентгеновской установки: 1 – экспериментальное устройство в сборе; 2 – локализующее устройство; 3, 4 – защитные сооружения; 5 – бета-троны БИМ234.3000; 6 – регистраторы; 7 – коллиматоры; 8 – защитные конусы; 9 – ЛИУ-Р-Т; 10 – пакет ADC-экранов