

ИНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ (ИТМФ)

Основным направлением деятельности теоретических и математического подразделений ИТМФ РФЯЦ-ВНИИЭФ является создание современной расчетно-теоретической базы моделирования сложных физических процессов в задачах механики сплошной среды, физики высоких плотностей энергии и других задачах, входящих в тематику деятельности нашего федерального ядерного центра. Накопленный многолетний опыт, бурное развитие методов математического моделирования и стремительный прогресс вычислительной техники уже сейчас дают возможность ученым и специалистам РФЯЦ-ВНИИЭФ приступить к решению тех задач, которые ранее не поддавались полномасштабному численному моделированию, и поэтому приходилось ограничиваться лишь приближенными оценками или использовать постановку задач с упрощенным описанием физических процессов.

Основные усилия математиков ИТМФ сосредоточены на разработке и создании математических методик и программных комплексов для эффективного компьютерного моделирования задач в многомерной постановке на многопроцессорных ЭВМ с массовым параллелизмом, использованием усовершенствованных физико-математических моделей и гарантированной «математической» точностью результата. Создавались единые для математических методик и программ интерактивная подготовка входных данных, сопровождение расчетов, обработка и хранение результатов расчетов, оценка эффективности численных расчетов и надежности работы неоднородного вычислительного комплекса (НВК) ИТМФ.

В 2006 году получены первые результаты в создании методики, предназначенной для проведения многомерных расчетов задач газовой динамики и теплопроводности, как на регулярных структурированных, так и на неструктурированных пространственных сетках для разных физических областей рассчитываемой системы. В частности:

- разработана и программно реализована новая методика КОРОНА численного решения двумерных уравнений газовой динамики с теплопроводностью, основанная на использовании переменного по размеру разностного шаблона. Результаты тестирования методики показали, что она позволила повысить точность расчетов и дала возможность существенно расширить класс решаемых задач;

- созданы основные счетные модули усовершенствованной методики ДМК-2005, предназначенной для расчета двумерных задач механики сплошной среды на неструктурированных многоугольных лагранжевых сетках с произвольным количеством связей в узлах. В результате была существенно повышена точность и безаварность расчетов;

- разработана методика расчета двумерных задач на симметризованном шаблоне, позволившая существенно повысить симметрию решений по методике МЕДУЗА-П для основных классов задач;

- создан единый интерфейс для проведения двумерных расчетов по вышеперечисленным регулярным и нерегулярным методикам в параллельном режиме на высокопроизводительных многопроцессорных ЭВМ;

- создан связанный программный комплекс для расчета двумерных газодинамических процессов по методике ЛЭГАК

одновременно с расчетом методом Монте-Карло переноса нейтронов и гамма-квантов, изменения энергии системы с использованием спектральных ядерно-физических данных.

- Вошла в строй вторая очередь программного комплекса ЛЭГАК-3D, предназначенного для моделирования в параллельном режиме сложных нестационарных газодинамических течений в двумерной и трехмерной геометриях. При распараллеливании используется двумерная и трехмерная пространственная декомпозиция данных.

- Математическая методика решения трехмерного многогруппового кинетического уравнения переноса нейтронов, программно реализованная в комплексе САТУРН, обобщена на решение трехмерных задач переноса излучения в многогрупповом кинетическом приближении. Программа позволит численно моделировать задачи лазерного инерциального синтеза в 3D геометрии.

- В целях повышения эффективности расчетов в параллельном режиме трехмерных задач, требующих использования огромного количества пространственных точек, в методике САТУРН разработан и программно реализован алгоритм распараллеливания решения многомерного кинетического уравнения переноса частиц с использованием трехмерной матричной декомпозиции. Это позволит эффективно решать многомерное кинетическое уравнение переноса с использованием большого ресурса многопроцессорных вычислительных систем.

- В газодинамической методике РАМЗЕС-КП реализован метод сквозных прогонок, позволивший значительно улучшить безаварность и сократить

календарные сроки проведения расчетов многообластных двумерных и трехмерных задач на многопроцессорных ЭВМ.

- С использованием опыта отечественных и зарубежных научных коллективов успешно ведется разработка параллельного кода расчета процессов гидродинамики, тепломассопереноса и напряженно-деформированного состояния материалов. При создании комплекса применяется объектно-ориентированная технология. К настоящему моменту реализованы следующие трехмерные параллельные программы:

- расчета стационарных и нестационарных ламинарных течений вязкого газа. В основу метода положены широко известные алгоритмы SIMPLE и PISO для численного интегрирования системы уравнений Навье – Стокса. Программа способна вести расчеты на произвольных неортогональных неструктурированных сетках;

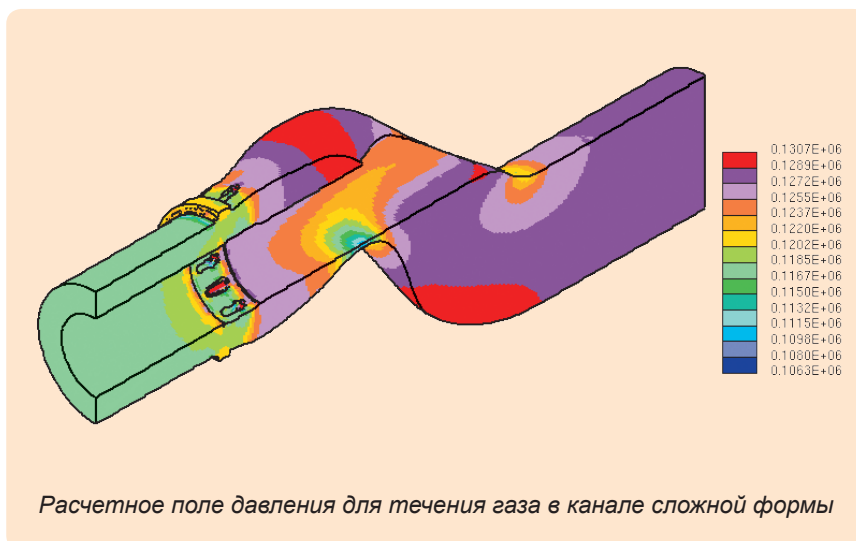
- расчета процессов переноса тепла в твердых телах методом конечного объема;

- решения задач анализа напряженно-деформированного состояния в квазилинейном приближении методом конечных элементов;

- моделирования течения газа в изотропной пористой среде.

В комплексе предусмотрена возможность обмена счетными разрезами с рядом зарубежных программ и инженерных пакетов. Область применения нового комплекса: расчет течений газа, теплообмена и напряженно-деформированного состояния конструкций, применяемых в машиностроении, авиационной и ракетной технике, ядерных энергетических установках. Работоспособность комплекса продемонстрирована на ряде производственных и методических расчетов.

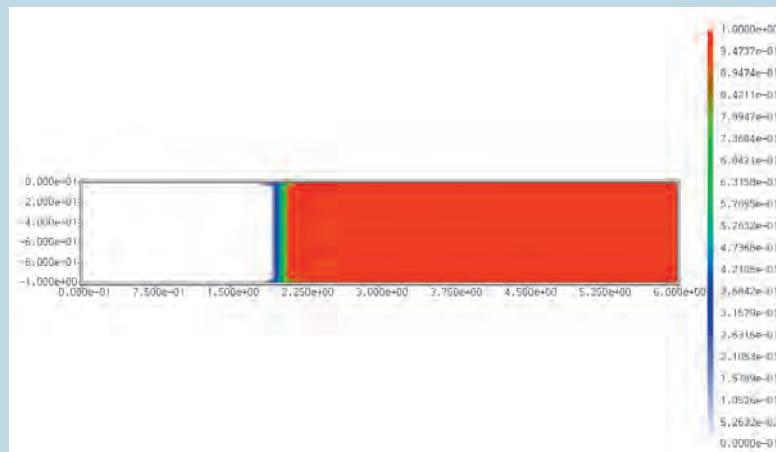
- В пакете программ НИМФА для численного моделирования течений в пористых средах реализована модель двухфазного течения разноплотностных жидкостей в поле силы тяжести. Двухфазные течения без учета капиллярных сил описываются на основе обобщенного закона Дарси. Модель реализована для случая трехмерной анизотропной пористой среды. Для решения нелинейного уравнения переноса построена разностная схема на основе аналитического решения задачи о распаде произвольного разрыва. Введение в пакет программ НИМФА двухфазной модели существенно расширяет класс



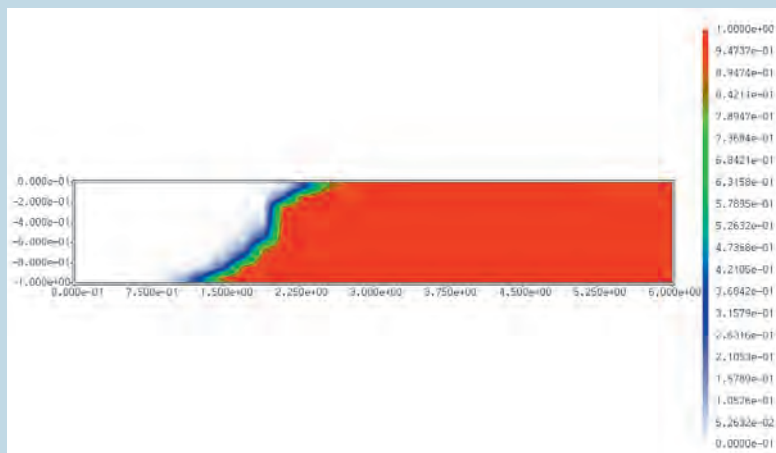
решаемых задач. Появилась возможность численного моделирования аварийных ситуаций при хранении радиоактивных отходов в соляных и вечномёрзлых пластах. С использованием реализованной в пакете модели возможно численное моделирование просачивания морской воды в пресные горизонты приморских городов при откачке питьевой воды, загрязнения пресных вод глубинными соляными рассолами при нефтедобыче и т. д.

- Серьезное развитие получил программный комплекс ГЕПАРД, позволяющий проводить двух- и трехмерное численное моделирование связанных задач гидродинамики и упругопластики. Комплекс основан на организации связи между комплексами ЭГАК и ДРАКОН (для двумерных расчетов), ТРЭК и ДРАКОН (для трехмерных расчетов). Комплексы ЭГАК и ТРЭК позволяют проводить численное моделирование газодинамических течений многокомпонентной среды с учетом сопутствующих процессов: упругопластики, детонации ВВ и др., а ДРАКОН предназначен для расчета характеристик напряженно-деформированного состояния оболочек. Объединенный программный комплекс позволяет проводить расчеты течений с учетом указанных выше физических процессов с одновременным моделированием процессов деформирования оболочек. В настоящее время по комплексу ГЕПАРД проведено несколько серий расчетов, в том числе 3-мерное моделирование по воздействию подводного взрыва на корпус трубопровода, надводного корабля и подводной лодки.

- Разработана математическая модель для определения электромагнитных полей, генерируемых при низковысотных ядерных взрывах (высота взрыва $H < 5$ км). Область, в которой вычисляются поля, состоит из трех подобластей – воздух, грунт, ионосфера. Уравнения модели записаны в специальной орто-



а



б

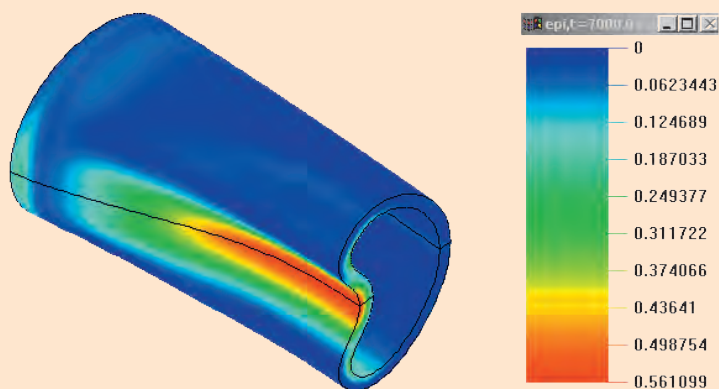
Поле насыщенности на границе между рассолом и водой на различные моменты времени: а — начальный (вертикальная граница); б — 50 суток

гональной системе координат, позволяющей при численном моделировании учитывать характерные особенности решения этих уравнений. Построена разностная схема для численного решения уравнений модели, завершается работа над ее программной реализацией.

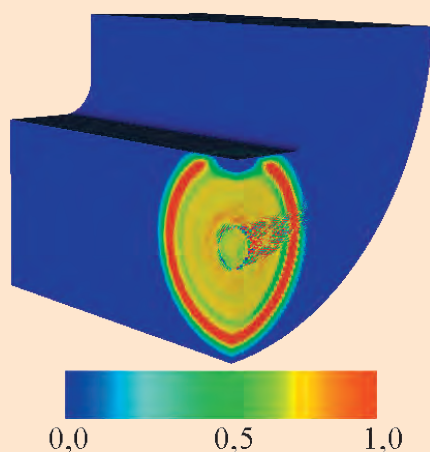
- Завершена разработка 2d3v-программы расчета взаимодействия лазерного излучения с бесстолкновительной плазмой (в кинетических уравнениях для компонент плазмы оставлены две пространственные и три скоростные координаты). Выполнены расчеты по ее тестированию. На основе методических расчетов получены рекомендации для выбора счетных параметров (числа модельных частиц в ячейке,

шага пространственной сетки) для задач моделирования взаимодействия мощного лазерного излучения фемтосекундной длительности с плазмой. Выполнено распараллеливание 2d3v-программы. Проведен ряд методических расчетов, позволивших оценить необходимое число модельных частиц, приходящихся на один процессор, для достижения высокой эффективности параллельных вычислений.

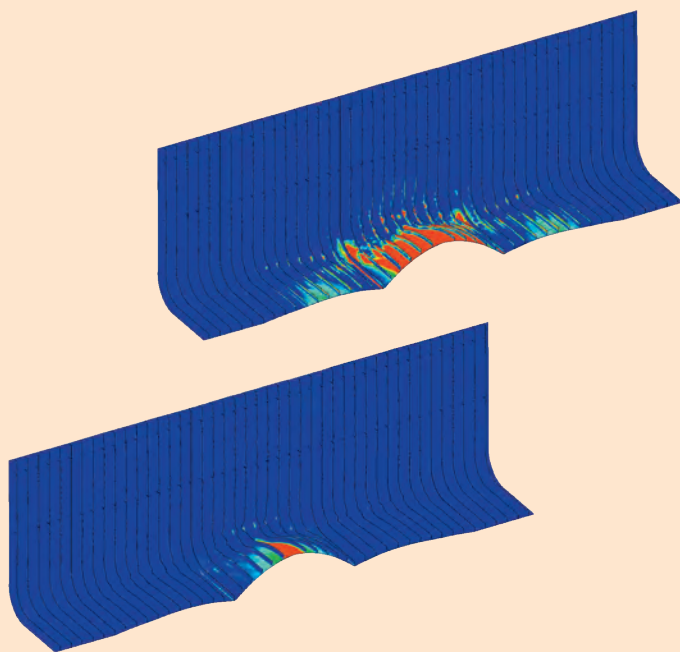
- Разработана трехмерная методика и написана программа расчета распространения широкополосного ЭМИ в параболическом излучателе с металлической пластиной на оси симметрии. Проведены тестовые и методические расчеты, показавшие пригодность программы



Поле пластических деформаций стальной трубы



Поле давления (атм) в воде вокруг корпуса корабля

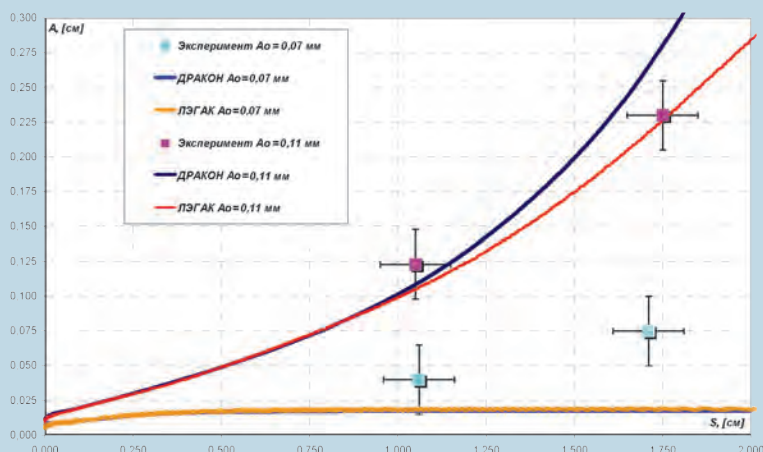


Распределение интенсивности деформаций элементов корпуса корабля

для численного решения задач данного класса.

- Разработана математическая методика и создана программа для проведения расчетного анализа в интересах конструирования микромишеней для установки ионно-тяжелоионного синтеза (ИТИС). Эти работы ведутся в интересах исследования возможности создания управляемого термоядерного синтеза. Работа базируется на объединении двух факторов (безударного сжатия и кумуляции энергии в слоистых системах) применительно к разработке термоядерных мишеней. Получены аналитические выражения для определения кумулируемой энергии в слоистой системе оболочек. В результате численных исследований выведен закон энерговложения в один из внутренних слоев слоистой системы — центральный слой этой системы сжимается безударным образом. Показано, как использовать идею безударного сжатия для конструирования микромишеней. Построенные аналитические модели для оценки работоспособности мишени играют важную роль на стадии предварительного проектирования, позволяют выявить диапазон допустимых параметров и проводить последующие, детальные расчеты для поиска оптимальных решений только в этом диапазоне.

Значительное внимание уделяется совершенствованию и разработке новых физико-математических моделей, их адаптации и внедрению в существующие математические методики, а также сравнению расчетных результатов по тем или иным физико-математическим моделям с экспериментальными данными, т. е. их валидации. Так, разработаны и реализованы в ряде математических методик феноменологическая модель высокоскоростного пластического деформирования металлов (ФМП, разрабатываемая в течение ряда лет в ИФВ) и ее модификации, которые успешно при-



Сравнительный анализ расчетных и экспериментальных данных свидетельствует о корректном описании моделью сдвиговой прочности опытных данных как для устойчивого ($A_0 = 0,07$ мм), так и для неустойчивого ($A_0 = 0,11$ мм) режима развития возмущений

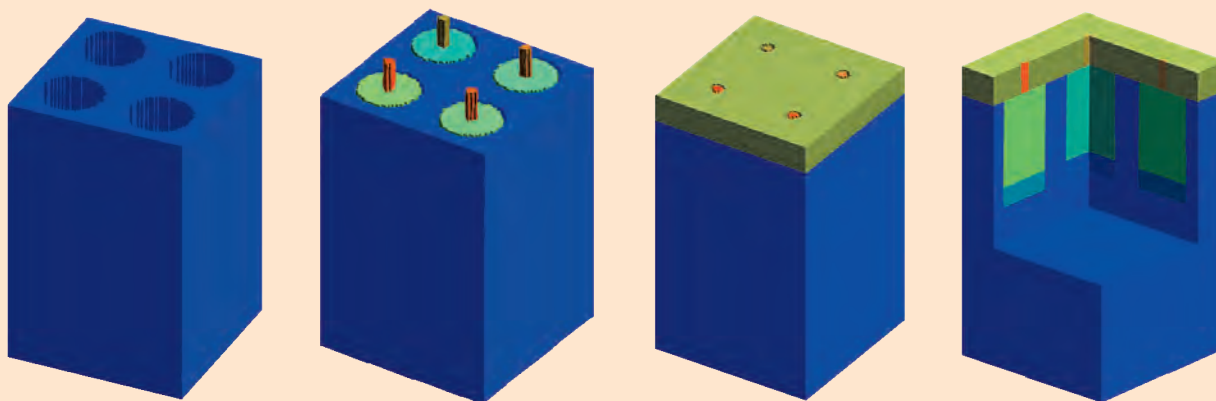
меняются для описания свойств Al и его сплавов, Cu, Fe и других металлов, подвергнутых воздействию ударных волн. По программам комплексов ЛЭГАК и ДРАКОН с использованием феноменологической модели выполнены расчеты по исследованию роста возмущения на поверхности уранового лайнера, ускоряемого продуктами взрыва химического ВВ в безударном режиме.

Большое внимание в ИТМФ уделяется проблеме инициирования взрывчатых превращений в твердом ВВ при низкоскорост-

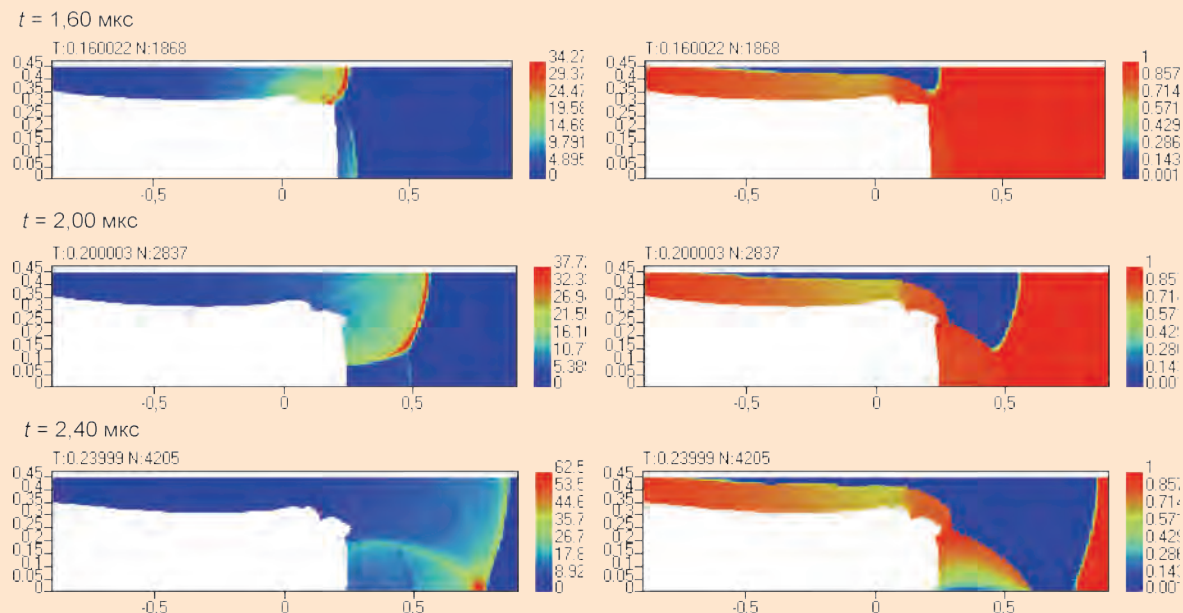
ных воздействиях. Данная проблема тесно связана с вопросами обеспечения безопасности при обращении с ВВ и надежности работы систем, имеющих в своем составе ВВ. Поэтому существует большая потребность в модели, описывающей инициирование взрывчатых превращений при низкоскоростных воздействиях. Разработана модель инициирования детонации ВВ при низкоскоростных нагружениях. При создании модели были рассмотрены процессы, происходящие на микроскопическом уровне при деформиро-

вании твердого гетерогенного вещества. Модель внедрена в математическую методику ЛЭГАК. С использованием модели кинетики низкоскоростного нагружения описаны серии экспериментов по низкоскоростному нагружению ВВ, в том числе «Steven test». Численное моделирование показало, что полученный инструмент может использоваться для описания низкоскоростного воздействия на ВВ и дальнейшего исследования таких процессов.

В программном комплексе нового поколения МИД, объединяющем возможности двух газодинамических методик МИМОЗА и Д для расчета широкого класса двух- и трехмерных задач механики сплошной среды, реализована физико-математическая модель описания кинетики горения ВВ (модель МК), что дало возможность проведения численного моделирования существенно-трехмерных задач, в которых исследуются вопросы возбуждения и развития детонации в различных ВВ. Данные расчеты требуют значительных вычислительных ресурсов (так как масштаб расчетной сетки исчисляется миллионами точек, а в особых случаях и миллиардами), и проведение их возможно только на многопроцессорных ЭВМ, имеющих



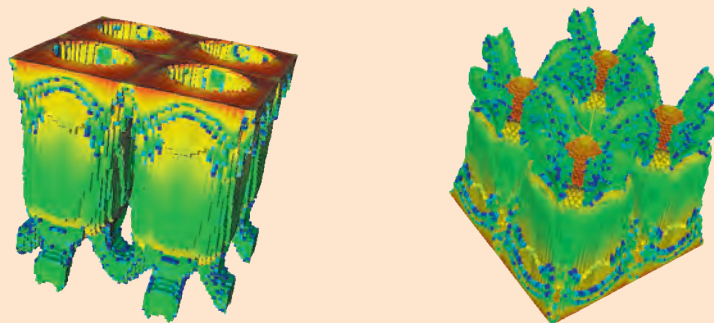
Начальная геометрия трехмерного расчета фрагмента для численного моделирования процесса инициирования флегматизированного ВВ элементами (шашками) из чувствительного ВВ



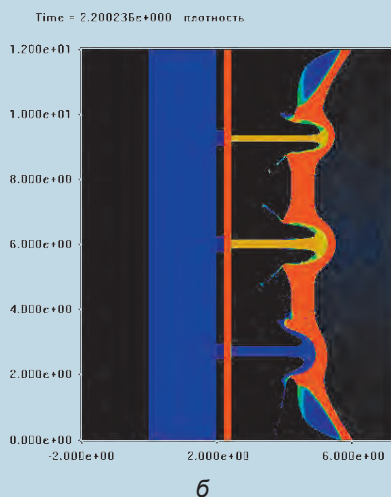
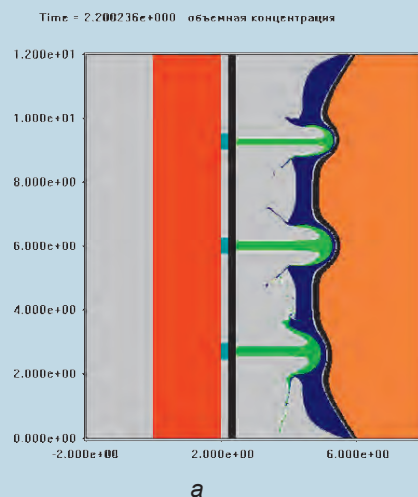
Поле давлений (слева) и поле концентраций ВВ (справа) при возникновении детонации в флегматизированном ВВ в окрестности одного из четырех инициирующих элементов в плоскости сечения, проходящей через середину шашки

достаточные вычислительные мощности.

В Институте физики взрыва (ИФВ) были проведены газодинамические эксперименты по исследованию передачи малых возмущений по металлическим элементам крепления в сложных системах, которые в традиционных расчетных моделях обычно не учитываются. Наличие в конструкции рассчитываемой системы металлических элементов требует привлечения в



Невыгоревшее флегматизированное ВВ ($t = 3 \text{ мкс}$, 17,7 % невыгоревшего ВВ)

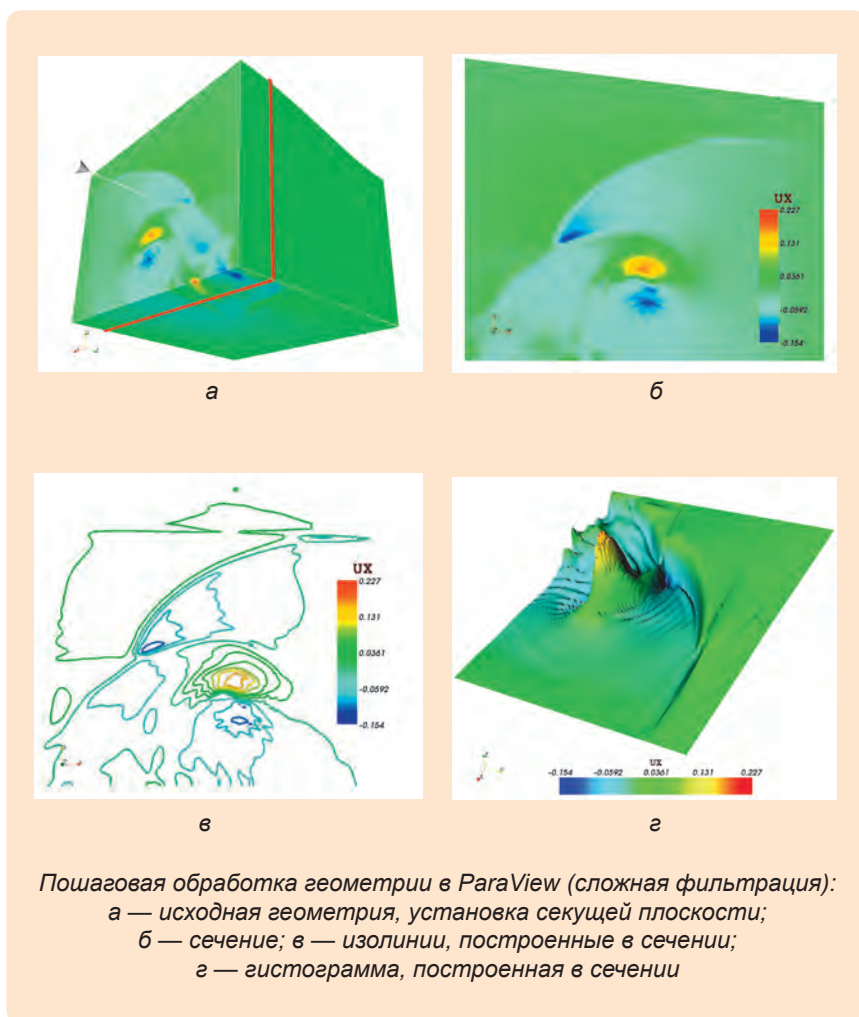


Расчетные поле веществ (а), распределение плотности (б) и рентгенограмма опыта (в)

численных расчетах упругопластических моделей. По комплексу программ ЛЭГАК-2D с использованием феноменологической модели прочности Глушака была описана серия опытов ИФВ с различными элементами крепления.

Совершенствовалось программное обеспечение всех баз данных ИТМФ. Так, завершена работа по вводу в интерактивную справочную систему пакета УРС-ОФ (единый пакет уравнений состояния веществ и пробегов фотонов) информации по наиболее широко используемым в прикладных программах уравнениям состояния веществ. Для пакета УРС-ОФ создан комплекс тестирующих программ с визуализацией результатов расчетов. В программе-тестере реализована проверка выполнения условия термодинамического равновесия; правильности расчета производных; непрерывности термодинамических функций (ТДФ); расчетов ТДФ при смене системы единиц; согласованности результатов расчетов, полученных с использованием разных входных переменных.

Значительные успехи за прошедший год достигнуты в разработке и создании программ общего сервиса, позволяющих единым образом задавать геометрию многомерных задач, рассчитывать начальные данные для всех методик и программных комплексов, представлять результаты расчета, а также обрабатывать и визуализировать эти данные. Большинство программ общего сервиса базируются на универсальном формате представления двумерных и трехмерных сеточных данных, ориентированном на схему раздельного счета по математическим областям. Данные могут быть определены как на регулярной, так и на нерегулярной топологии расчетной сетки. Многообразие структур и типов расчетных данных максимально формализовано



и систематизировано, разработаны методы прямого доступа, позволяющие обращаться к произвольному фрагменту данных на диске без накладных расходов на буферную прокладку промежуточных данных. Разработаны алгоритмы и методы распределенного хранения данных для работы на многопроцессорных комплексах. Все эти методы интегрированы в единую кроссплатформенную библиотеку ЕФР (единый файловый разрез), которая пополнена единым для языков C++ и Фортран90 интерфейсом, облегчающим пользование. В 2006 году библиотека ЕФР была сдана в опытную эксплуатацию и внедрена в большинство программных комплексов.

На основе библиотеки ЕФР разработаны графические приложения, позволяющие пред-

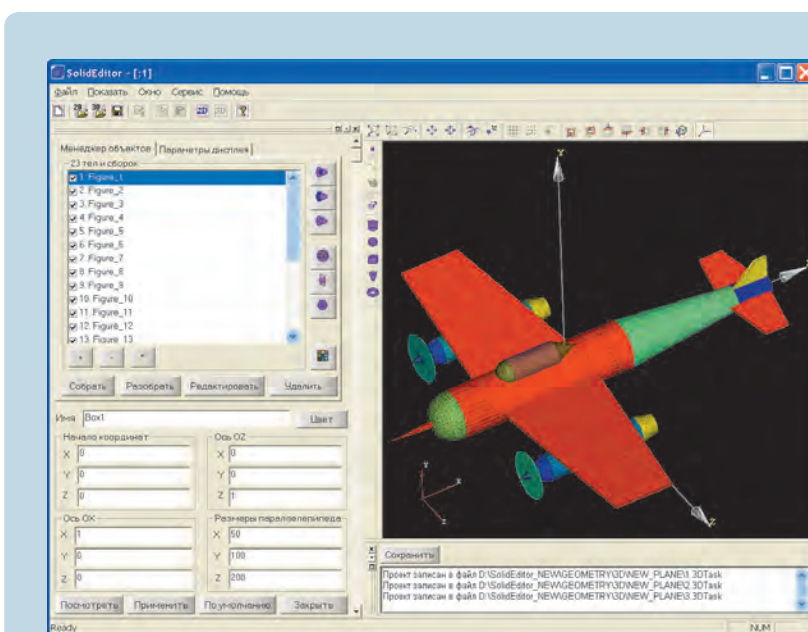
ставлять расчетные данные как в табличном виде с возможностью редактирования, прореживания и выделения практически любых интересующих особенностей вплоть до построения графиков зависимостей, так и в виде растровой двумерной и трехмерной визуализации с большими возможностями по фильтрации данных на регулярных и нерегулярных сетках.

Для визуализации данных ЕФР сверхбольшого объема проведена работа по адаптации под потребности методики программ ИТМФ системы параллельной визуализации ParaView, являющейся открытой зарубежной разработкой. На данный момент система ParaView с поддержкой формата ЕФР функционирует как на персональных ЭВМ, так и на специализированном графическом кластере.

Для моделирования геометрии двумерных и трехмерных задач разработан графический редактор SolidEditor, базирующийся на открытой библиотеке OpenCascade. На данный момент программа SolidEditor помимо средств моделирования геометрии включает в себя модуль задания двумерных начальных данных SE-RND. Интерфейс с пользователем SE-RND максимально унифицирован с уже существующим интерфейсом комплекса программ 3D-РНД, предназначенным для задания и расчета трехмерных начальных данных.

В целях повышения качества разрабатываемого программного обеспечения, скорости его разработки, снижения затрат ручного труда, повышения контроля за состоянием проекта и улучшения взаимодействия разработчиков и тестировщиков разработана технология документированной подготовки к независимому (внешнему) тестированию программных продуктов с помощью автоматизированной системы управления программами. Цель внедрения данной технологии — на примере программы 3D-РНД обеспечить возможность отчуждения программы от разработчиков и в перспективе — сертификация программных продуктов общего назначения. Такая технология документирования работ на всех стадиях разработки программных проектов является общепринятой по международным стандартам серии ISO-9000 для коммерческих программных продуктов и систем. Технология рекомендована для применения к разрабатываемым программным средствам общего назначения, а также для использования в процессе разработки других программ и программных комплексов ИТМФ.

Еще одним направлением работ по созданию средств общего сервиса для всех математических методик является разработка единой библиотеки решателей систем линейных алгебраических уравнений PMLP/



Пример задания трехмерной геометрии в редакторе SolidEditor

Parsol в параллельном режиме на многопроцессорных ЭВМ. Разработаны и реализованы новые параллельные решатели разреженных линейных систем, ориентированные на распараллеливание на общей памяти (open MP), для расчета диффузии магнитного поля. Продолжалось внедрение параллельных решателей в различные методики для использования в расчетах уравнений теплопроводности. Реализованы и внедрены параллельные решатели для использования на трехмерной декомпозиции расчетной сетки, ориентированные для работы на большом числе процессоров.

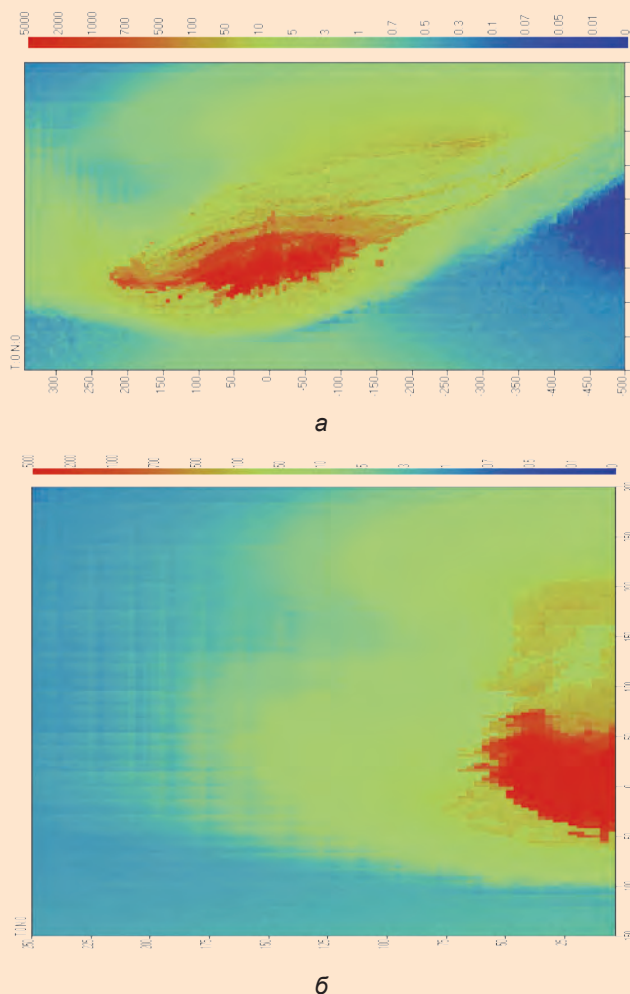
Для неоднородного вычислительного комплекса (НВК) ИТМФ разработаны и внедрены инструментальные средства исследования эффективности выполнения параллельных задач — statistics tool kit (STK). Средства STK предназначены для использования как разработчиками программных комплексов с целью улучшения эффективности распараллеливания задач, так и администрацией ИТМФ для анализа эффективности

использования вычислительных ресурсов многопроцессорных ЭВМ для решения параллельных задач, а также службами управления производственным счетом для более рационального использования компонентов НВК.

Закончены работы по развитию средств STK для расширенного анализа влияния функций MPI (протокол передачи сообщений) и ввода-вывода на эффективность счета параллельных задач и внедрению STK в автоматизированную систему управления счетом задач ИТМФ.

Применение STK позволило оптимизировать эффективность всех математических программных комплексов ИТМФ. Были выявлены достоинства и недостатки методов распараллеливания программных комплексов на различных вычислительных системах. Такая оптимизация позволила более экономично использовать дорогостоящее оборудование, применяемое в расчетах задач.

В 1962 году в операции «Морская звезда» на высоте 400 км над островом Джонстон



Расчетное изображение светящейся области взрыва операции «Морская звезда» на момент 10 с в плоскости магнитного меридиана, проходящей через точку взрыва, находящуюся в начале координат (а) и в плоскости магнитной широты (б) (расстояния на осях — в км; уровень светимости — в MBt/cm^2)

(в Тихом океане) был произведен ядерный взрыв мощностью 1400 кт. Этот взрыв вызвал ряд сильных эффектов в верхних слоях атмосферы, ионосфере и геомагнитном поле. Он рассматривается как крупномасштабная демонстрация многих явлений геофизики и физики плазмы. В развитии этого взрыва отчетливо проявились такие эффекты, как кинетический характер образования и движения плазмы, а также ее взаимодействие с геомагнитным полем. Для изучения этих эффектов потребовалась разработка соответствующей физической модели и трехмерной численной методики.

В 2006 году на лазерной установке ЛУЧ — модуле полномасштабной установки «Искра-6» — начаты эксперименты по генерации рентгеновского излучения (РИ) при воздействии лазерного излучения установки. В настоящее время поток лазерного излучения одного канала установки ЛУЧ составляет примерно 1 кДж при длительности импульса до 2 нс. Первый этап — разработка источника РИ — аналога мишени «Иллюминатор», в течение многих лет применявшейся в различных экспериментах на установке «Искра-5». В «Иллюминаторе» установки «Искра-5» лазерные лучи вводятся через специальные отверстия на боковой поверхности диаметром 0,3 мм. На

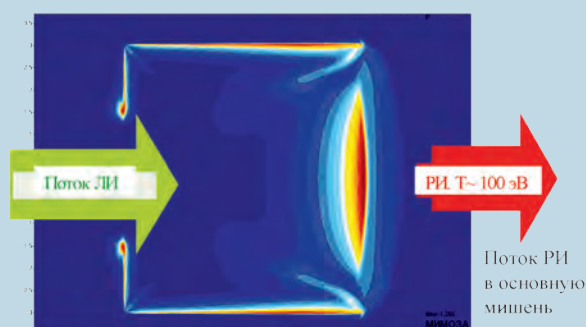
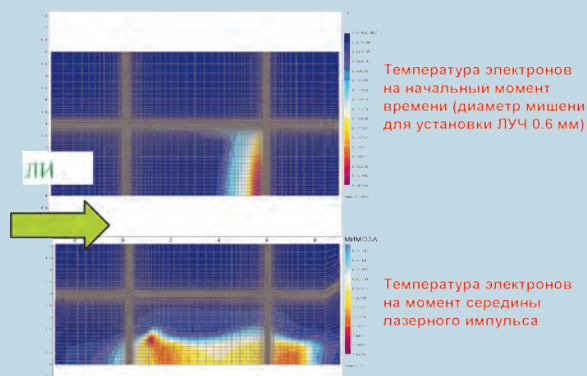


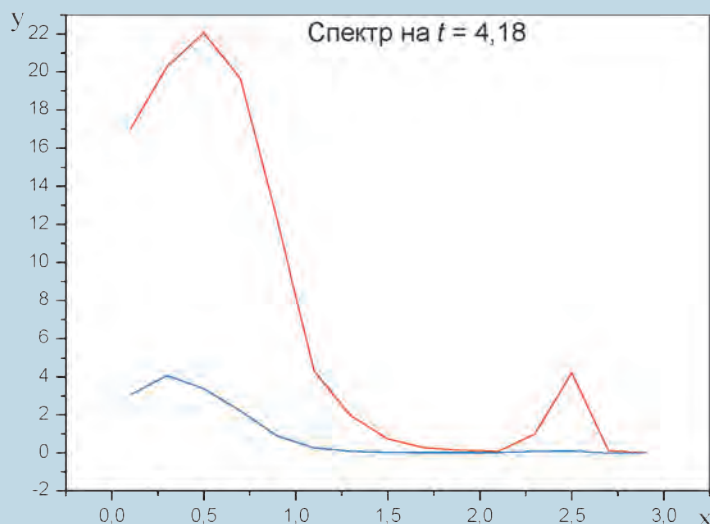
Схема источника РИ для одноканального варианта экспериментов на установке ЛУЧ



Распределение температуры электронов внутри мишени «Иллюминатор» диаметром 0,6 мм

установке ЛУЧ один лазерный луч вводится через отверстие на торце мишени и облучает пленку из Au+СН на другом торце.

Для проведения сквозных безавостных расчетов мишеней в комплексе МИМОЗА НД отработывалась методика расчетов на неподвижной сетке. Время расчетов при этом существенно увеличивается по сравнению с расчетами в лагранжевой постановке, что компенсируется сокращением «ручных» вмешательств в проведение счета. Для расчетов лазерных мишеней с двумерным (трехмерным) характером течений это может оказаться существенным преимуществом. Проведены первые расчеты динамики мишени и генерации РИ в конвертере при вариации параметров мишени.

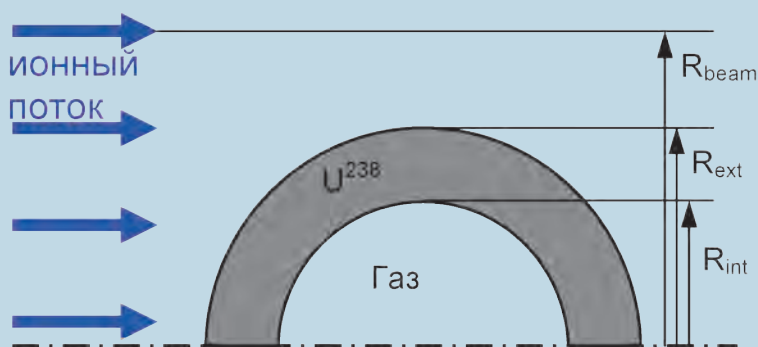


Спектр генерируемого потока РИ (красная линия — спектр потока РИ в сторону основной мишени, синяя — спектр потока РИ через входное отверстие)

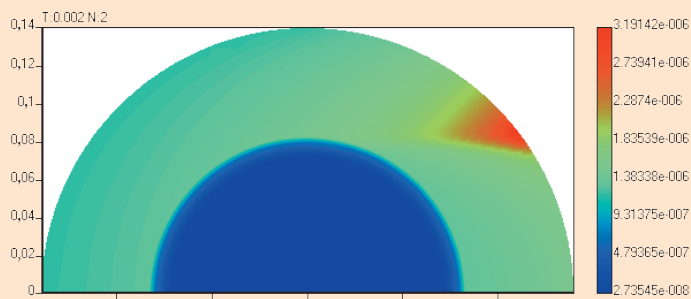
Параметры сжатия мишени с внешним радиусом 1,4 мм

Интенсивность ионного источника, ионов/с	Максимальная плотность ^{238}U , г/см ³	Максимальная температура, кэВ	Плотность газа, г/см ³	Полная энергия пучка, кДж
10^{18}	26,7	0,0041	1,8	0,658
10^{19}	30,5	0,0092	1,5	3,49
10^{19} (равномерный разогрев)	36,02	0,0094	4,0	3,49
10^{20}	32,8	0,025	1,1	18,74

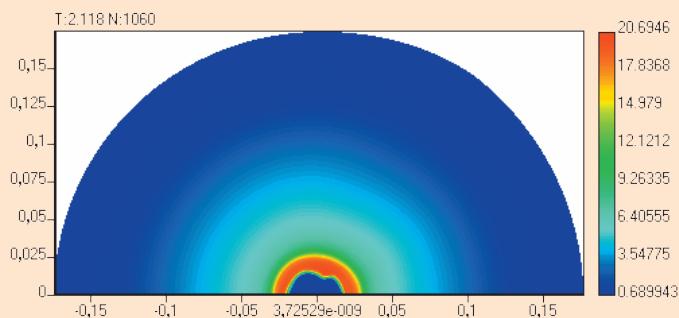
Во ВНИИЭФ проводятся исследования процессов взаимодействия ионных потоков с веществом. Конечная цель работы — выполнить замкнутый комплекс исследований систем инерциального термоядерного синтеза с тяжелоионным драйвером. Ближайшая конкретная задача — подготовиться к предстоящим работам на мощных тяжелоионных ускорителях, сооружаемых в ИТЭФ (ТВН) и в GSI (FAIR, Дармштадт, Германия). ВНИИЭФ участвует в проведении экспериментальных и теоретических работ по взаимодействию ионных пучков с веществом на



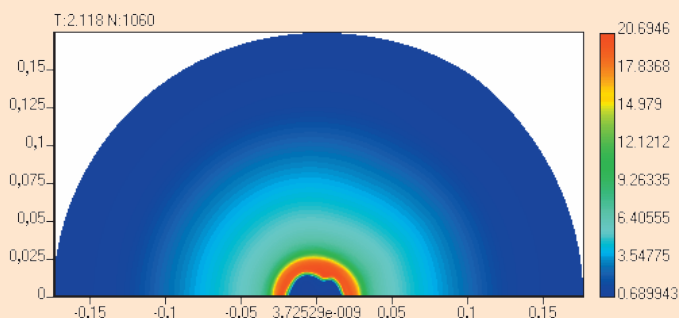
Геометрия расчетной задачи: R_{beam} — радиус пучка ионов (1,5 мм); R_{int} — радиус полости, наполненной газом (0,8 мм); R_{ext} — внешний радиус сферы (варьировался 1, 1,2, 1,4 мм)



Распределение энерговыведения в оболочке мишени от потока ионов



Распределение плотности вещества в мишени на момент максимума сжатия



Распределение температуры вещества в момент максимума сжатия

основе метода «толстых мишеней». Расчеты воздействия ионных потоков на цилиндрические мишени показали, что сферическое сжатие более эффективно, но при одностороннем облучении ионным потоком возникает неоднородность в выделении энергии по углу. Специалистами ВНИИЭФ было рассмотрено сжатие сферической оболочки при воздействии ионного потока с параметрами, прогнозируемыми для ускорителя ТВН (ионы Co , энергия ионов 200–400 МэВ/А, энергия пучка 50–100 кДж при длительности до

100 нс). Исследования показывают, что, оптимизируя параметры пучка и мишени, можно получить высокую степень сжатия как вещества оболочки, так и внутренней газовой области при реальных параметрах ионного пучка.

Во ВНИИЭФ предложена схема мишени и постановка экспериментов по исследованию взаимодействия ионных потоков с горячей плотной плазмой. Мишень состоит из конвертера, в котором генерируется поток мягкого РИ, и основного объема. Основной объем заполняется

малоплотным веществом, которое разогревается потоком РИ из конвертера до температуры 50–100 эВ. Через образующуюся плазму пропускается пучок ионов ускорителя *Unilac* и измеряется их энергия до и после прохождения мишени. Цель исследований — получить надежные экспериментальные данные и разработать методику расчета потерь энергии тяжелых ионов в плазме для расчета конвертеров в мишенях тяжелоионного инерциального синтеза. Эти исследования начаты в сотрудничестве с европейскими (прежде всего, немецкими) научными центрами и специалистами ИТЭФ в рамках работ в области физики высоких плотностей энергии и тяжелоионного инерциального термоядерного синтеза. Эксперименты по взаимодействию ионных потоков с плазмой будут проводиться на базе лазерно-ускорительного комплекса *Phelix(nhelix)-Unilac* (GSI, Германия) с участием специалистов ИТЭФ. При энергии лазерного потока *Phelix* 0,5–1 кДж за время ~ 2 нс вещество внутри мишени разогревается до температуры 50–70 эВ при плотности $\sim 10^{21}$ 1/см³. Динамика процессов внутри мишени рассчитывается в двух- и трехмерных постановках.

Одним из важных направлений экспериментальных и расчетно-теоретических исследований, проводимых на лазерных установках «Искра-5» и ЛУЧ, является моделирование газодинамических и термодинамических процессов в плотной высокотемпературной плазме.

Результаты, получаемые в экспериментах на лазерных установках, используются как для тестирования производственных математических программ, так и непосредственно для расчетного исследования фундаментальных свойств плазмы. С этой целью в соответствующие программные комплексы вводятся блоки расчета процессов взаимодействия лазерного излучения с плазмой. В 2006 году завершен важный этап

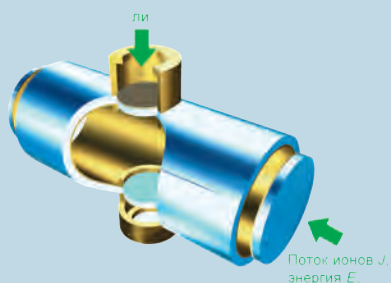


Схема мишени для опытов по исследованию взаимодействия ионов с плазмой на установке Phelix-Unilac

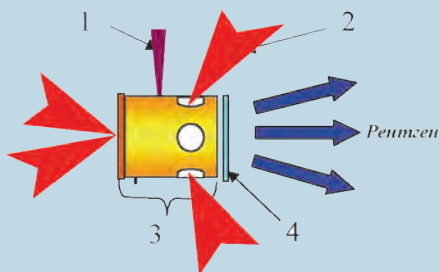
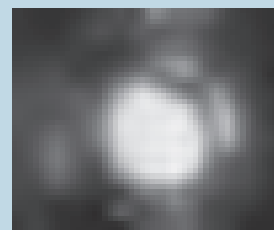
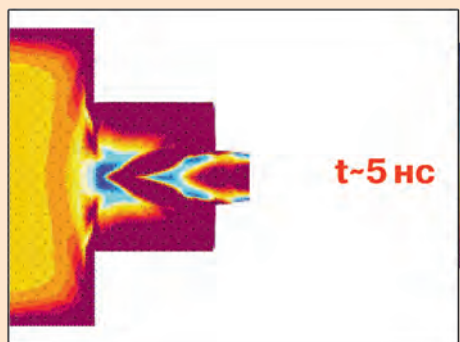
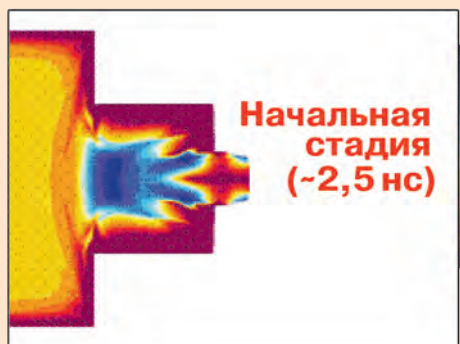


Схема мишени, в которой реализуется конверсия лазерного излучения в рентгеновское



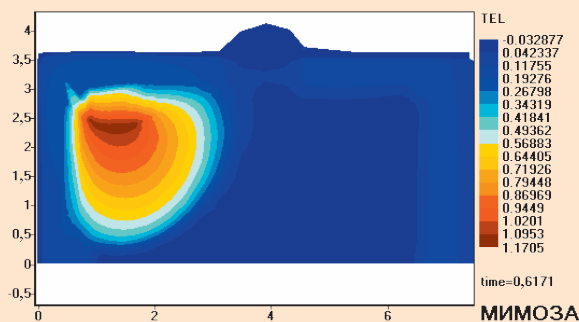
Экспериментальная форма «пятна» лазерного потока

Ионы

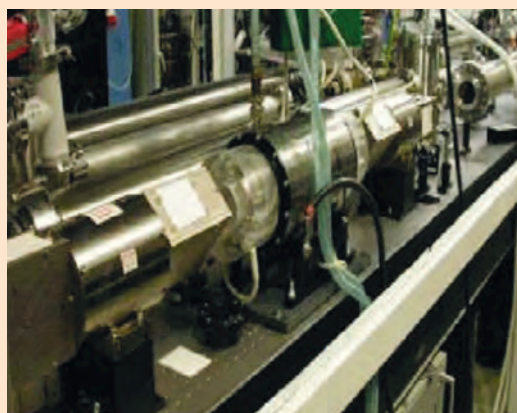


Динамика процессов генерации потока РИ и формирования плазмы в канале мишени (распределение плотности плазмы по объему мишени)

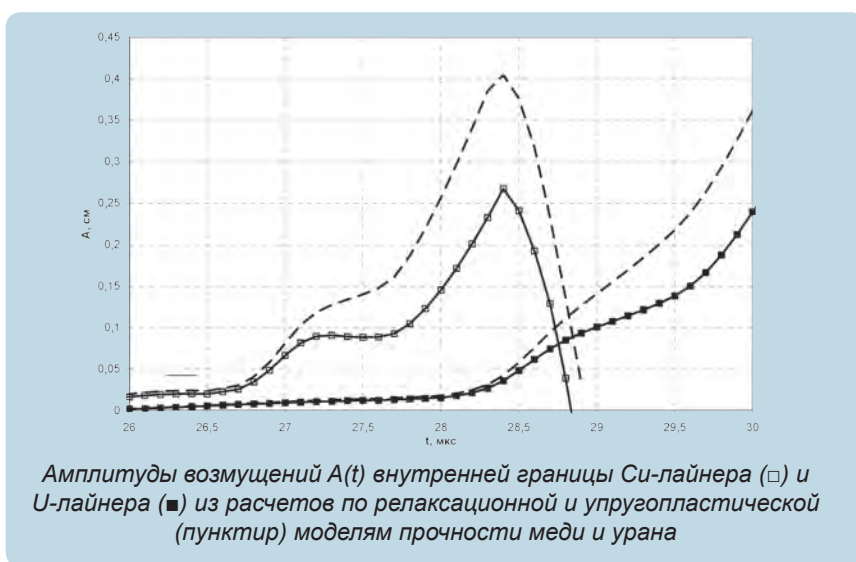
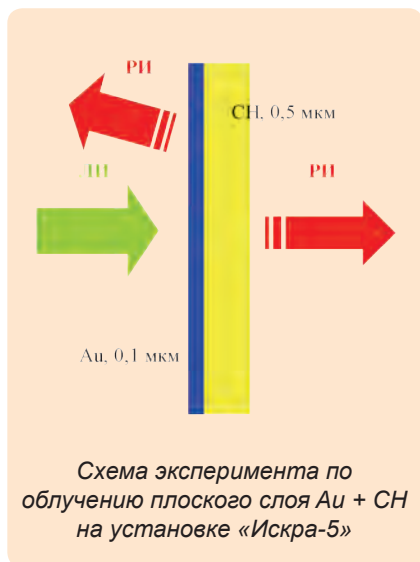
этой работы: в производственные программы ФОМИМ и МИМ МК введены блоки поглощения и рассеяния лазерного излучения, параметры плазмы для условий воздействия лазерного излучения, обменные члены, степень ионизации плазмы и т. д. Для тестирования был выбран эксперимент с облучением лазерным излучением установки «Искра-5» плоской золотой фольги.



Распределение температуры РИ внутри мишени



Лазерная установка Phelix (GSI)



Прямой расчет методом Монте-Карло (МИМ МК) поглощения лазерного излучения, генерации РИ и его переноса в спектральной постановке и газодинамических течений в двумерном комплексе МИМОЗА выполнен с использованием 3000 спектральных интервалов в диапазоне энергий квантов 30 эВ – 20 кэВ. Расчет по программе ФОМИМ выполнен со 120 спектральными интервалами.

Проведены первые двумерные расчеты роста возмущений медных (или урановых) лайнеров в цилиндрической газодинамической системе Al-H₂-Cu(U)-H₂ с размерами $R = 5,2-4,6-2,6-2,4$ см при давлении $P_{\text{газ}} = 25$ МПа(H₂). Эта система в устройстве с ДВМГ обеспечивает при торможении лайнеров вблизи оси их квази-энтропическое нагружение до

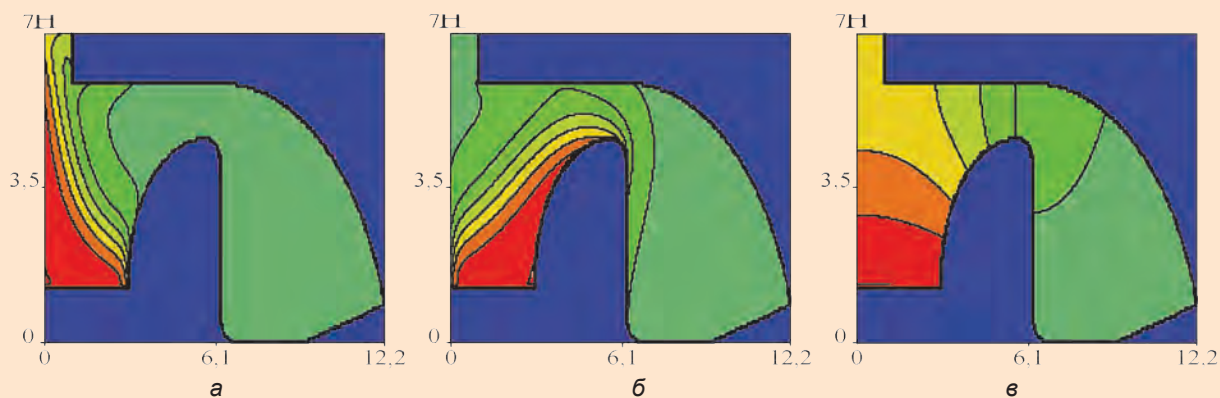
~2000 ГПа. Но оказалось, что возможные неточности уравнения состояния исследуемых материалов могут существенно влиять на кривую зависимости $A(t)$. Показано, например, что принятое в УРС программного комплекса ОСА пренебрежение начальной энергией необходимо корректировать в расчетах динамической прочности материалов, чтобы не было существенного завышения прочности и соответственно занижения амплитуды $A(t)$ возмущений (по оценкам, для меди — в 1,5–2 раза).

В 2006 году продолжалось исследование формирования и динамики плазменных токовых оболочек в камерах МАГО и плазменного фокуса. Моделирование этих процессов производится в рамках двумерного МГД-приближения для двух типов геометрии

(r, z) и (r, φ) . В моделях рассчитываются:

- стандартные газодинамические величины с учетом одной компоненты магнитного поля (H_φ): ионная скорость, плотность, ионная и электронная энергии, степень ионизации;
- электронная и ионная теплопроводность;
- проводимость плазмы, распределение магнитного и электрического полей;
- потери энергии на излучение при наличии в плазме примесей;
- интенсивность нейтронного выхода.

Для исследования процесса образования и развития азимутальной структуры токовых оболочек в камерах МАГО и плазменного фокуса проведены двумерные МГД-расчеты в



Распределение магнитного поля в расчете без учета эффекта Холла (а), с эффектом Холла, когда центральный электрод является анодом (б), с эффектом Холла с обратной полярностью электродов (в)

(r, φ) геометрии. Оказалось, что при некоторых режимах работы источника тока для образования волокнистой структуры токовой оболочки достаточно неоднородности начальной степени ионизации газа в камере.

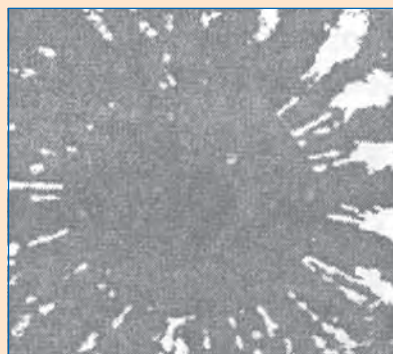
В расчетах показано, что предварительно введенное в камеру МАГО магнитное поле в значительной степени стабилизирует развитие азимутальных неоднородностей при формировании разряда.

Для разрядов в камере плазменного фокуса с начальным давлением газа больше 1 мм рт. ст. расчетная динамика плазменной оболочки находится в хорошем согласии с экспериментальными данными. Для расчетного моделирования экспериментальных результатов с меньшими давлениями приходится учитывать в расчетах эффект Холла.

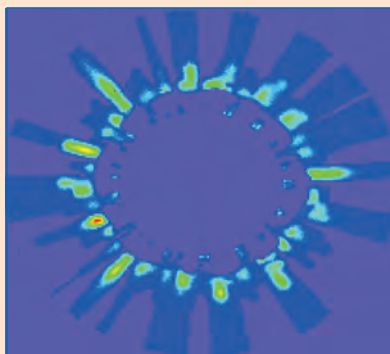
Для оценки вклада ускорительного механизма в общий нейтронный выход в расчетах плазменного фокуса применена модель «ускоренных ионов», расчетный нейтронный выход с учетом этой модели отличается от экспериментального не более чем в два раза.

В одной из таких камер при давлении ДД-газа 18 мм рт. ст. и зарядном напряжении батареи 25 кВ (максимальный ток в контуре 0,5 МА) нейтронный выход, полученный в разряде, составил $2 \cdot 10^9$.

В расчете нейтронный выход $1,7 \cdot 10^9$, по времени нейтронного выхода получено удовлетворительное согласие с экспериментом. Максимум ускорительных нейтронов в 7,5 раза выше термоядерных. В целом в расчете термоядерные нейтроны составляют 1/15 от общего выхода. Таким образом, впервые разработана модель «ускорительного механизма» генерации нейтронов, позволяющая описывать в численных расчетах нейтронный выход в плазменном фокусе.

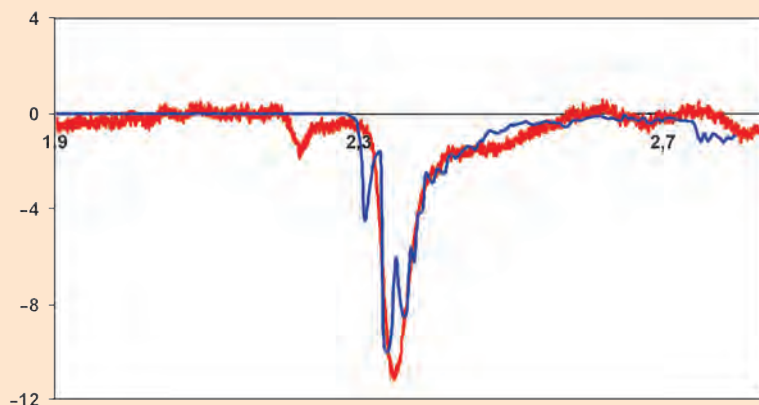


а

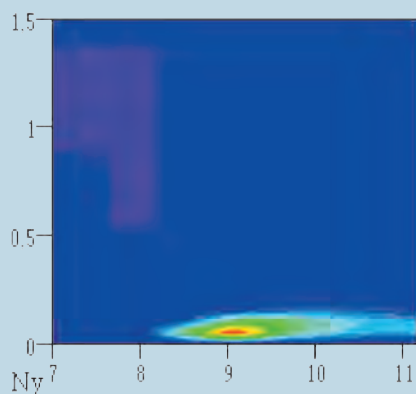


б

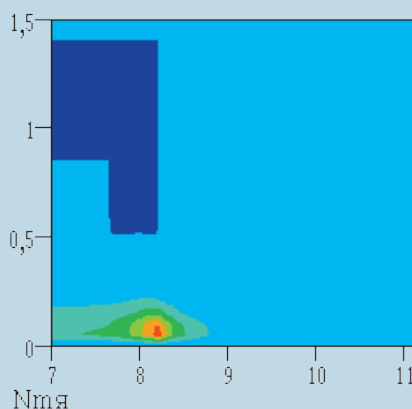
Полученная в эксперименте фотография плазменной оболочки во время ее движения вдоль оси камеры в межэлектродном зазоре (а) и расчетное распределение электронной температуры (б)



Интенсивность нейтронного выхода в относительных единицах, красный цвет — эксперимент, синий — расчет

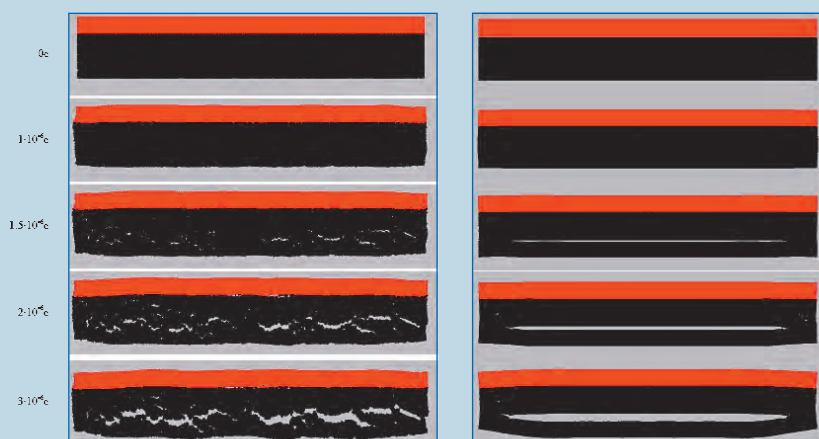


а

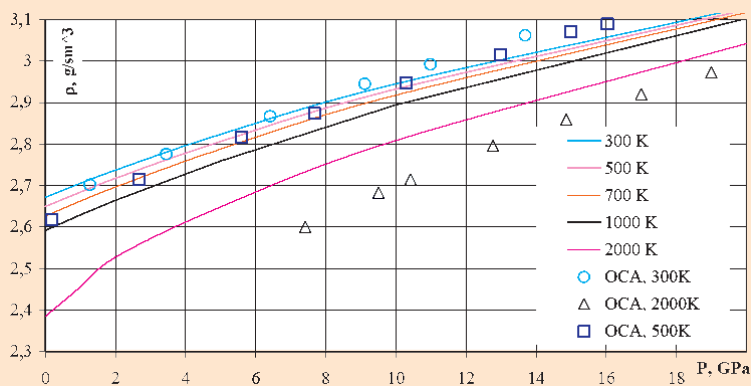


б

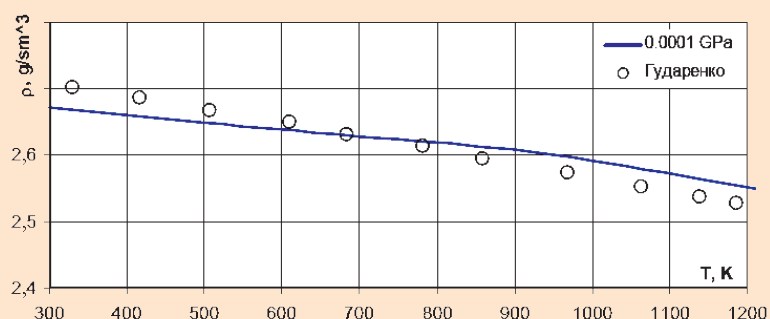
Пространственное распределение нейтронного выхода:
а — ускорительные нейтроны;
б — термоядерные



Расчетная картина отколов в монокристаллическом и поликристаллическом образцах



а



б

Подбор потенциала взаимодействия по УРС материала:
 а — зависимость плотности алюминия от температуры и давления (сплошные линии — результаты расчетов с выбранным потенциалом; символы — значения для УРС ОСА);
 б — зависимость плотности алюминия от температуры при нормальном давлении (сравнение результатов расчетов с выбранным потенциалом и справочных данных)

Разработан метод расчета коэффициента диффузии водорода в металлах. Он позволяет производить квантово-химический расчет потенциалов взаимодействия атомов; аппроксимацию рассчитанных потенциалов; молекулярно-динамическое моделирование колебаний собственных и примесных атомов в структуре металла; анализ частот колебаний атомов в решетке; квантово-химические расчеты энергии активации диффузии; расчет коэффициента диффузии. Кроме того, названный метод может найти применение для моделирования поведения водорода и его изотопов в конструкционных материалах; процессов хранения водорода в решетке металлов или аморфных сплавов; процессов очистки водорода и его изотопов от радиогенных примесей; диффузии в сложных системах — аморфных сплавах и нанокристаллических веществах.

Для моделирования процессов разрушения материалов получил развитие метод кластерной динамики. Метод позволяет производить замену уравнений механики сплошной среды на уравнения движения выделенных структурных элементов (кластеров); описывать движение взаимодействующих кластеров; выбирать потенциалы взаимодействия, исходя из уравнений состояния моделируемого материала. Метод может найти применение для:

- моделирования динамики разрушения, описания кумулятивных эффектов, процессов пробития преград, пыления и диспергирования;

- моделирования анизотропных свойств твердых тел и пластических явлений при нагружении; описания динамики фазовых переходов;

- описания механических свойств металлов с наноструктурой, моделирования, механосинтеза и прессования;

- решения прикладных задач механики дисперсных деформируемых сред.