

ИНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ (ИТМФ)

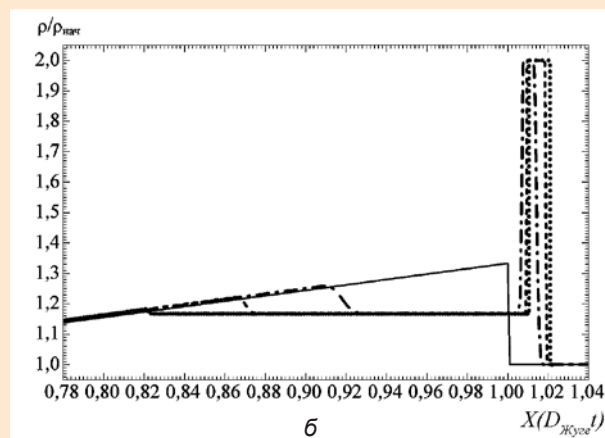
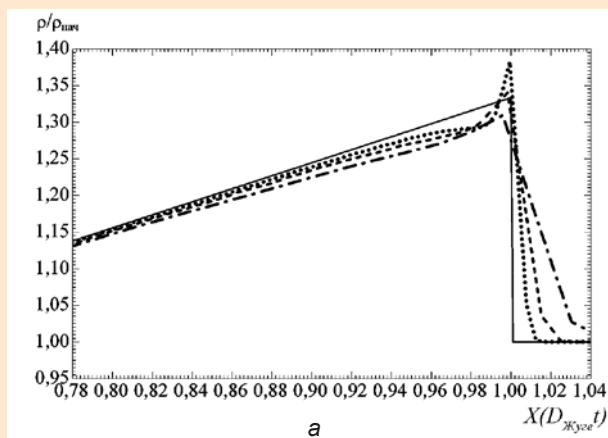
Основным направлением деятельности теоретических и математического подразделений ИТМФ является создание современной расчетно-теоретической базы моделирования сложных физических процессов в задачах механики сплошной среды, физики высоких плотностей энергии и других задачах, входящих в тематику деятельности РФЯЦ-ВНИИЭФ. Последние годы одним из главных направлений деятельности специалистов ИТМФ является разработка методов и программного обеспечения имитационного моделирования на многопроцессорных ЭВМ практических задач наукоемких отраслей промышленности, таких как атомная энергетика, авиастроение, автомобилестроение. Накопленный специалистами 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 приходилось ограничиваться лишь

приближенными оценками или использовать постановку задач с упрощенным описанием физических процессов.

Значительные 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. Кроме того, серьезное внимание было уделено созданию единых для математических методик и программ средств интерактивной подготовки входных данных, проведения и сопровождения расчетов, обработки и хранения результатов расчетов, оценки эффективности численных расчетов и надежности работы неоднородного вычислительного комплекса (НВК) ИТМФ.

В 2009 году активно развивались математические методики и алгоритмы для более точного и эффективного численного моделирования сложных физических процессов в задачах механики сплошных сред.

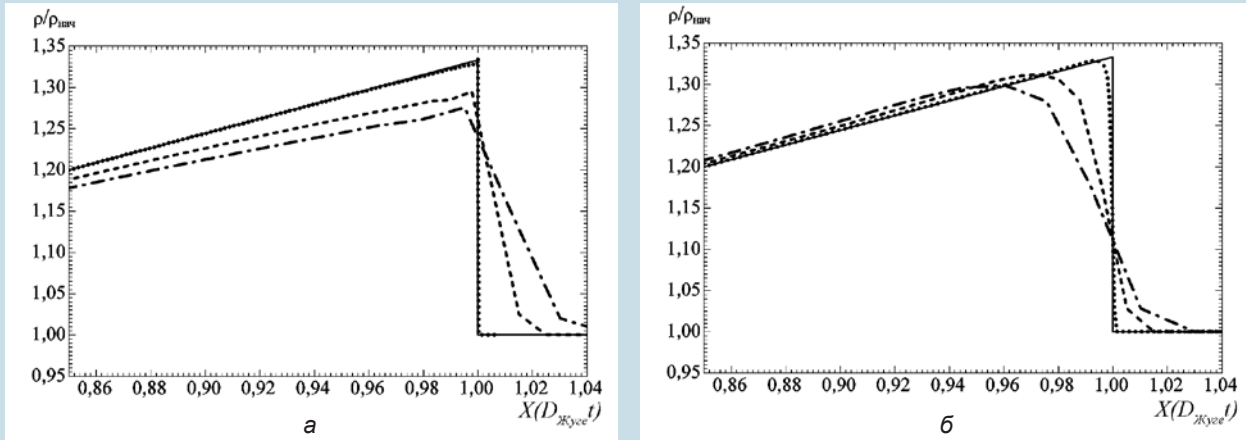
Проведен анализ некоторых особенностей, возникающих при моделировании движения детонационной волны в веществе. При этом рассмотрен популярный метод счета нормальной детонации Чепмена – Жуге с помощью навязанного фронта мгновенного энерговыделения, бегущего с заданной массовой скоростью. Обнаружено, что в расчетах при сильном измельчении сетки происходит перескок численного решения с решения типа Чепмена – Жуге на аномальное автомодельное решение с отошедшей вперед ударной волной сжатия и скачком разрежения в точке навязанного энерговыделения, когда искусственная вязкость используется, как обычно, только на сжатии и не используется на разрежении. Неожиданным оказалось весьма точное описание решения типа Чепмена – Жуге при полном отключении искусственных вязкостей как на разрежении, так и на сжатии. Проведен полный анализ этого явления с помощью теории допустимости разрывных решений, учитывающей диссипативные и дисперсионные свойства разностных схем.



Плотность в окрестности фронта детонационной волны, расчет с вязкостью только на сжатии,

M_D – число ячеек, пройденное детонационной волной в точном решении (—):

а – — — — — $M_D = 50$; - - - - - $M_D = 100$; $M_D = 200$; б – — — — — $M_D = 1000$; - - - - - $M_D = 3000$; $M_D = 4000$



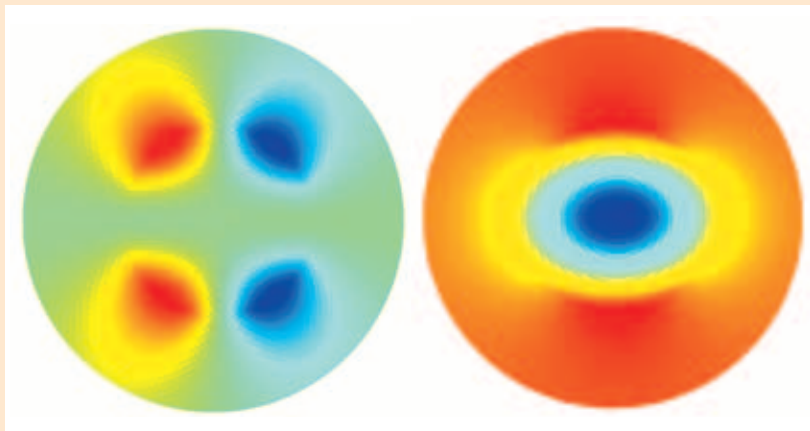
Плотность в окрестности фронта детонационной волны. а – расчет с вязкостью на сжатии и на разрежении: — — — — — $M_D = 50$; - - - - - $M_D = 100$; — $M_D = 8000$; б – расчет без вязкости: — — — — — $M_D = 50$; - - - - - $M_D = 100$; — $M_D = 1000$ (— — — — — точное решение)

Активно развивались методики численного моделирования электромагнитного излучения (ЭМИ). Завершена работа по повышению точности численного моделирования распространения отраженного от ионосферы электромагнитного импульса. Для уменьшения влияния численной диффузии на результаты вычислений в базовой разностной схеме изменена аппроксимация производных от азимутальной компоненты напряженности магнитного поля в некоторых уравнениях для компонент напряженности электрического поля. Новая аппроксимация содержит свободный параметр, меняя который, можно получать схемы разного порядка точности. Очень важным для приложений является то обстоятельство, что внесенные изменения фактически не влияют на точность вычисления параметров ЭМИ, падающего на ионосферу, при этом сохраняются все хорошие свойства базовой схемы. Результаты численного моделирования отраженного от высокопроводящей ионосферы ЭМИ низковысотного ядерного взрыва с использованием модифицированной разностной схемы для уравнений Максвелла подтвердили приемлемую для при-

ложений точность определения его параметров. Разработана методика прогнозирования параметров ЭМИ высотного ядерного взрыва на основе трехмерного высокочастотного приближения для уравнений Максвелла. При вычислении источников ЭМИ используется гибридная модель для численного решения уравнения Больцмана, а именно, решение кинетического уравнения проводится для двух групп электронов: «медленные» электроны описываются с использованием двухполиномиального разложения функции распределения электронов; поведение «быстрых» электронов моделируется с использованием модифицированного метода крупных частиц. Предложена схема расщепления уравнений модели, позволяющая при вычислениях выделить одномерное высокочастотное приближение в качестве отдельного блока. Это обстоятельство упрощает создание программы, использующей трехмерное высокочастотное приближение для уравнений Максвелла. Получена разностная схема для решения уравнений Максвелла на этапе учета влияния на пространственное распределение полей производных по угловым перемен-

ным. Для расчета эффектов космических сильных взрывов разработана трехмерная методика, которая реализует двухпотокую МГД модель движения разреженной плазмы. В рамках данной физической модели первый поток содержит подвижные заряженные частицы, а второй состоит из нейтральных неподвижных частиц атмосферы. Между потоками происходит обмен массой и энергией. Также учитываются процессы неравновесной кинетики. Существенной особенностью созданной методики является решение уравнений диффузии магнитного поля и учет эффекта Холла. Таким образом, данная методика позволяет проводить сквозные расчеты генерации и распространения возмущений геомагнитного поля, возникающих в результате взрыва на большой высоте над Землей. Методика реализована в комплексе программ ТИМ-3D, предназначенном для расчета задач механики сплошной среды на неструктурированных многогранных лагранжевых сетках.

Для решения задач физики высоких плотностей энергии в методике ТИМ-2D создан модуль магнитной газодинамики, который позволил проводить МГД расчеты с учетом диффу-



Распределение компонент магнитного поля, полученное в результате решения задачи о диффузии магнитного поля внутри шара в момент времени $t = 0,1$

зии магнитного поля, джоулевых разогревов, сил магнитного поля. При МГД расчете движения многокаскадных лайнерных систем необходимо моделирование процесса диффузии в вакуумных областях между лайнерами для передачи магнитного поля от одного лайнера к другому, а также для описания процессов, происходящих при сжатии накопленного в межлайнерных областях магнитного поля. Для решения таких задач разработан метод расчета вакуумных областей в задачах с азимутальным магнитным полем. С его разработкой стал возможным расчет многокаскадных лайнерных систем. Кроме того, использование вакуумных областей эффективно при возникновении неустойчивостей в расчетах длительной имплозии, сопровождающейся сильным разогревом лайнеров. При расчете различных задач магнитной гидродинамики граничное условие задается в виде значения магнитного поля, которое ранее определялось по таблично заданному экспериментальному току. На самом деле имеет место и обратное влияние магнитного поля на работу электрической цепи, что приводит к необходимости получения значения тока на каждом счетном шаге за-

дачи из расчета системы обыкновенных дифференциальных уравнений электрической цепи. Для расчета таких связанных прикладных задач создана библиотека расчета магнитных цепей, что позволило решать данный класс задач на качественно новом уровне. Например, расчет динамики плазмы в камерах плазменного фокуса. В таких камерах высоковольтный разряд происходит вдоль поверхности изолятора, там формируется токовая плазменная оболочка, которая затем ускоряется нарастающим магнитным полем. При схождении оболочки к оси происходит ее радиальное сжатие и на оси формируется высокотемпературная плотная плазма (плазменный фокус). Вторая область применения электрических цепей связана с осуществлением зажигания в мишенях инерциального термоядерного синтеза (ИТС), при котором необходимо получение мощных потоков рентгеновского излучения (РИ). Источником РИ являются лайнерные системы в геометрии Z-пинча. Разгон лайнера осуществляется под действием токового импульса реальной электрической цепи, в которую входит и сам лайнер.

Завершена методическая работа, направленная на создание

двумерной методики PLASMA-2 для численного моделирования динамики разреженной плазмы методом «частица в ячейке». В ходе ее накоплен опыт по численному решению задач, опробованы различные способы распараллеливания вычислений при численном моделировании поведения плазмы, дополнительно исследованы отдельные методические вопросы, связанные с введением в расчетную область поглощающих слоев и со сглаживанием и коррекцией в ходе расчета компонент поляризационных полей.

Одно из достаточно новых направлений научных исследований нашего института – это молекулярно-динамическое моделирование. Разрабатываемые методы молекулярной динамики предназначены, в первую очередь, для решения задач развития радиационных каскадов, моделирования отклика радиационно состаренного материала на внешние нагрузки, моделирования процессов взаимодействия наночастиц с поверхностями и других процессов. Созданная методика и высокопараллельный комплекс программ MoDyS предназначены для решения системы уравнений движения ансамбля частиц методом классической молекулярной динамики. В общем случае это уравнения движения классической динамики системы Гамильтона материальных точек, находящихся в потенциальном поле сил межчастичного взаимодействия. Адекватность молекулярно-динамического моделирования в значительной степени зависит от потенциалов межчастичного взаимодействия, особенно в задачах радиационного старения конструкционных материалов. В комплексе MoDyS имеется широкий набор потенциалов, а именно: парные потенциалы Леннарда – Джонсона или Морзе, а также многочастичные потенциалы «погруженного» атома (EAM,

МЕАМ). В настоящее время существует возможность проведения расчетов по различным конечно-разностным схемам от явной двухслойной схемы до явной трехслойной схемы. Предполагается, что по мере накопления опыта счета различных задач будут выработаны рекомендации по использованию для конкретных классов задач наиболее предпочтительной (по какому-либо параметру) конечно-разностной схемы.

Большая работа проведена по усовершенствованию моделей уравнений состояния (УРС) веществ и пробегов излучения в веществах с целью расширения их области применимости и повышения точности описания физики происходящих процессов. По данному направлению:

- Созданы программы построения термодинамически согласованных сплайн-УРС с помощью эрмитовых полиномиальных бисплайнов и сглаживающих гиперболических сплайнов. Реализовано два метода построения сплайн-УРС с помощью эрмитова бисплайна пятой степени: на основе аппроксимации приведенного давления и его

первых производных (этот бисплайн используется для расчета приведенной энергии интегрированием условия термодинамической согласованности) и аппроксимации приведенного потенциала (свободная энергия, деленная на температуру). Использование данных подходов позволяет уменьшить время расчета по разработанным сплайн-УРС, сократить объем хранимой информации и трудозатраты на создание сплайн-УРС конкретных веществ.

- Завершены основные методические исследования, направленные на создание новой версии программы THERMOS для расчета спектральных коэффициентов поглощения фотонов с последовательным учетом релятивистских эффектов в одноэлектронном приближении. Сформулирована методика для новой версии программы THERMOS, начата ее программная реализация.

- Разработана новая версия пакета УРС-ОФ, предназначенного для прикладных программ, рассчитывающих теплотехнические свойства веществ (УРС, функций пробегов фото-

нов и т. д.). Основные отличия новой версии пакета:

- разработана текстуально единая для всех прикладных программ версия библиотеки программ пакета УРС-ОФ; это снижает трудозатраты на подготовку, тестирование и поддержание актуальности обновлений библиотеки;

- разработана новая структура данных библиотеки УРС-ОФ и проведена соответствующая модернизация сервисных программ, что позволит упростить работу с библиотекой и увеличить уровень безаварийности при выполнении расчетов в параллельном режиме;

- расширены функциональные возможности пакета (по сравнению с предыдущей версией в библиотеку включены новые функции для вычисления упругопластических свойств веществ, средней степени ионизации, спектральных пробегов фотонов);

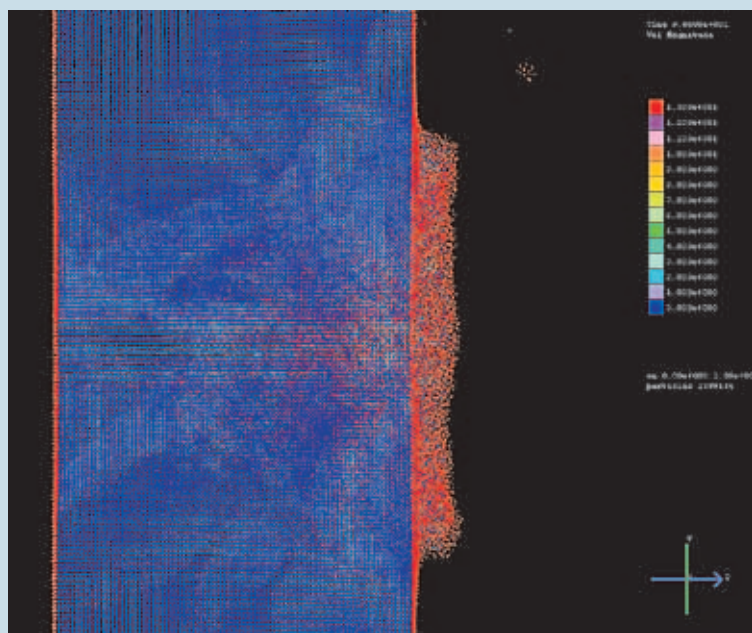
- разработаны дополнительные тестирующие программы, включающие средства для проверки целостности пакета на различных ресурсах НВК;

- модернизирована технология сопровождения пакета УРС-ОФ на ЭВМ НВК, разработана автоматизированная технология создания новых версий библиотеки УРС-ОФ на всех ЭВМ НВК, позволяющая существенно сократить трудозатраты на обновление библиотеки.

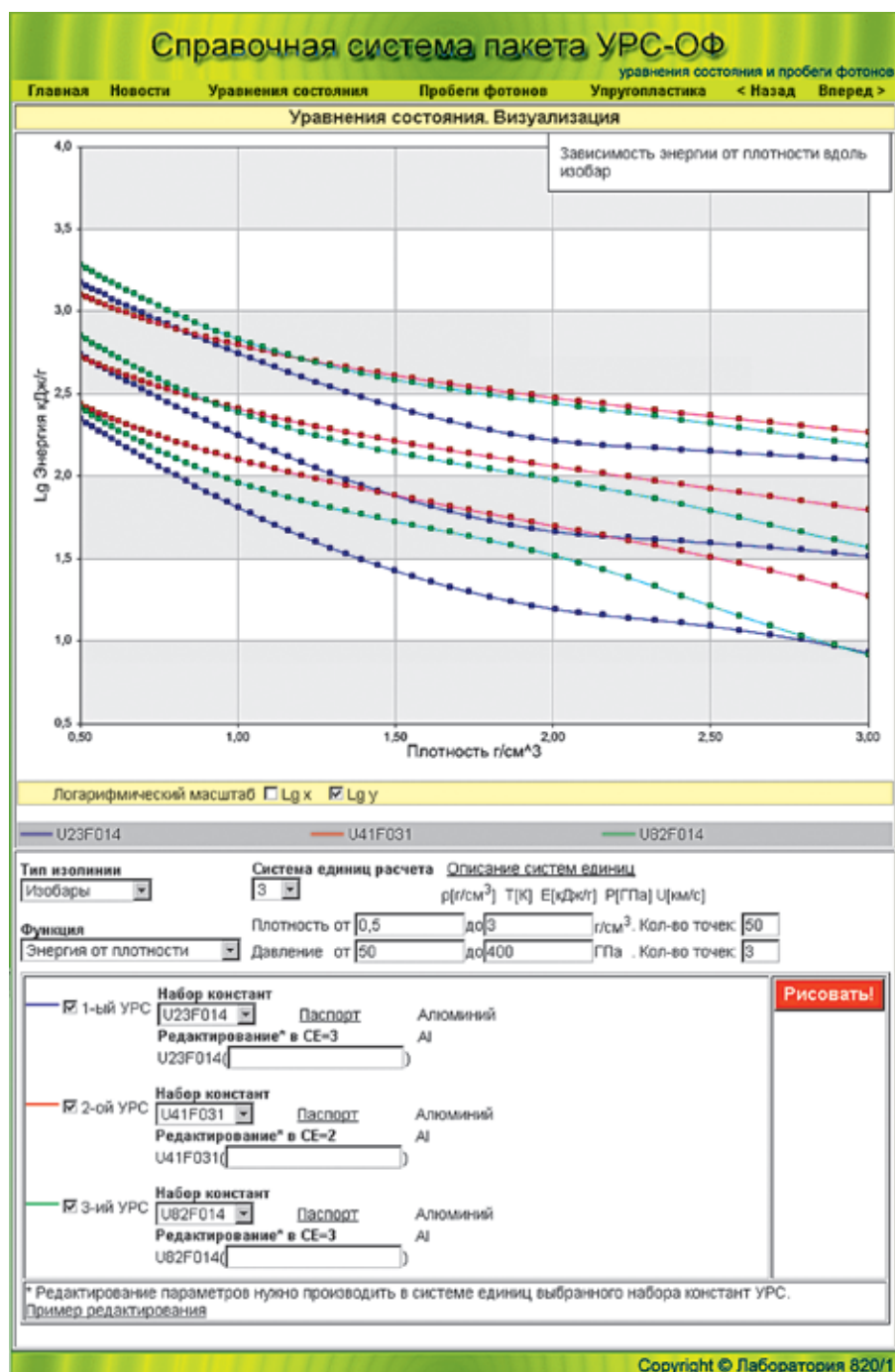
- Усовершенствован раздел «Уравнения состояния» интерактивной справочной системы пакета УРС-ОФ – раздел дополнен web-страницей для визуального анализа УРС, предоставляющей следующие возможности:

- построение семейства изолиний (изохор, изобар, изотерм, изоэнергет) для любого уравнения состояния пакета УРС-ОФ в заданной области состояний;

- построение изолиний одно- временно для трех выбранных пользователем УРС и их сравнение между собой.



Взаимодействие расплавленных капель меди с объемно-центрированной кубической решеткой поверхности тантала

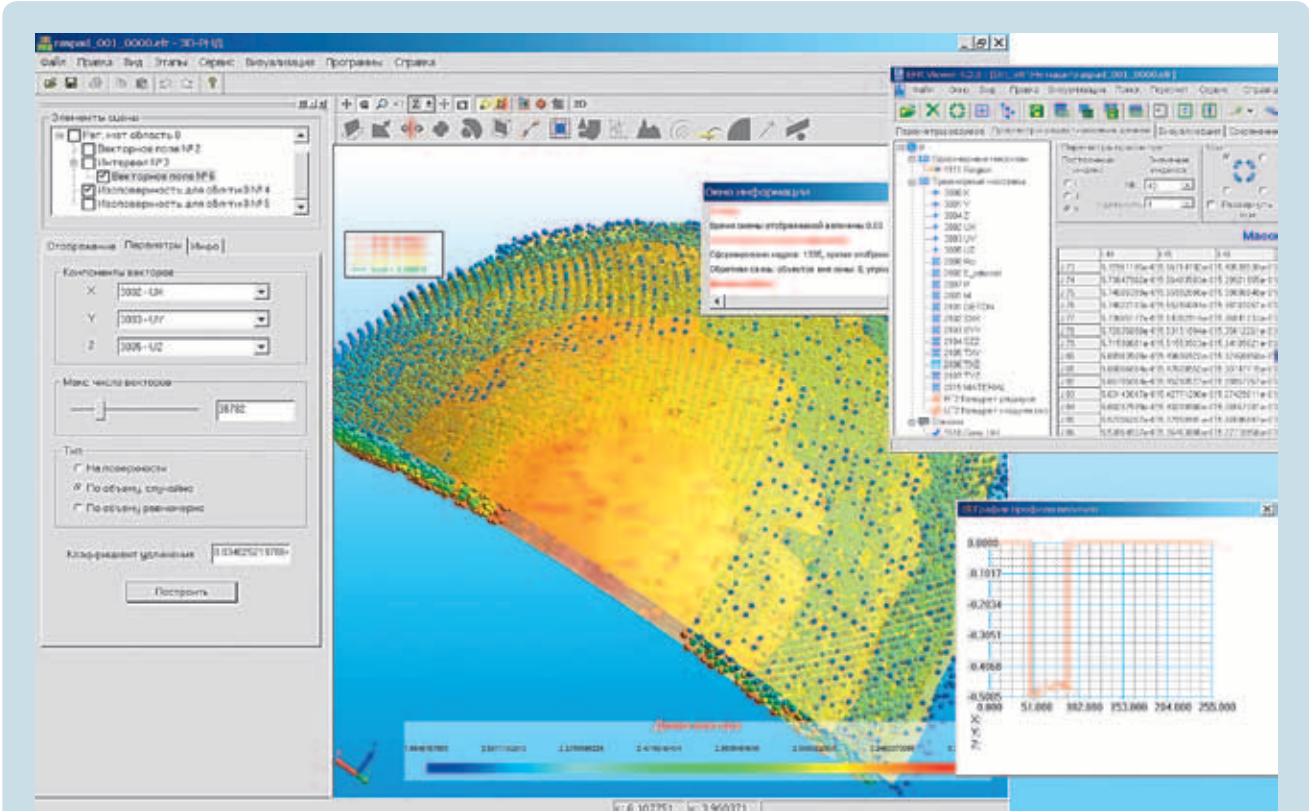


Пример визуализации термодинамических характеристик вещества
в интерактивной справочной системе пакета УРС-ОФ

Продолжалось развитие программ единого для математического отделения ИТМФ интерфейса для обеспечения производственных расчетов: подготовка начальной расчет-

ной модели, обеспечение проведения расчета, обработка и визуализация результатов расчетов на многопроцессорных ЭВМ. Так, сдана в опытную эксплуатацию первая очередь па-

раллельной системы постобработки ScientificView, позволяющей проводить графический и численный анализ данных на регулярных сетках с числом ячеек до 1–2 млрд.

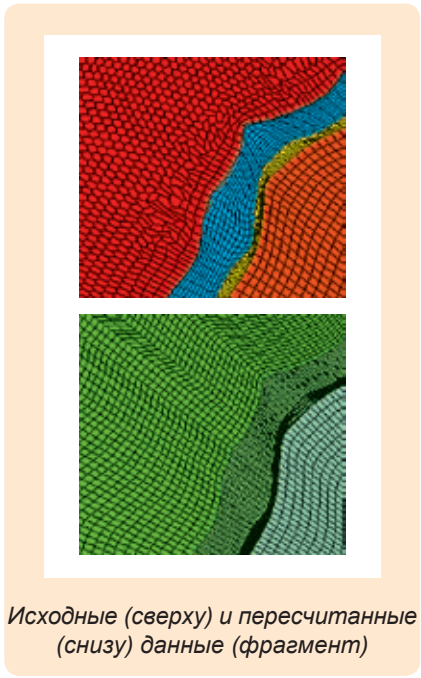


Пример обработки данных системой ScientificView

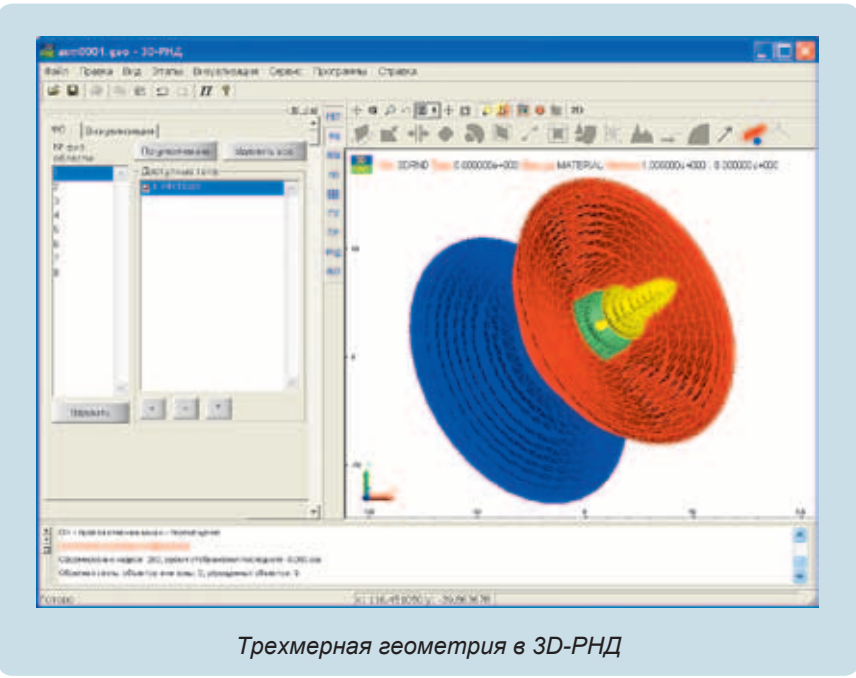
Разработан программный пакет InterVal для передачи сеточных данных из одной методики в другую при поэтапном проведении двумерных численных расчетов. Программа работает в параллельном режиме на многопроцессорных ЭВМ, при

этом эффективность загрузки процессоров в среднем составляет 60 %. Дальнейшее развитие получил программный пакет 3D-РНД, предназначенный для построения расчетной сеточной модели для трехмерных расчетов.

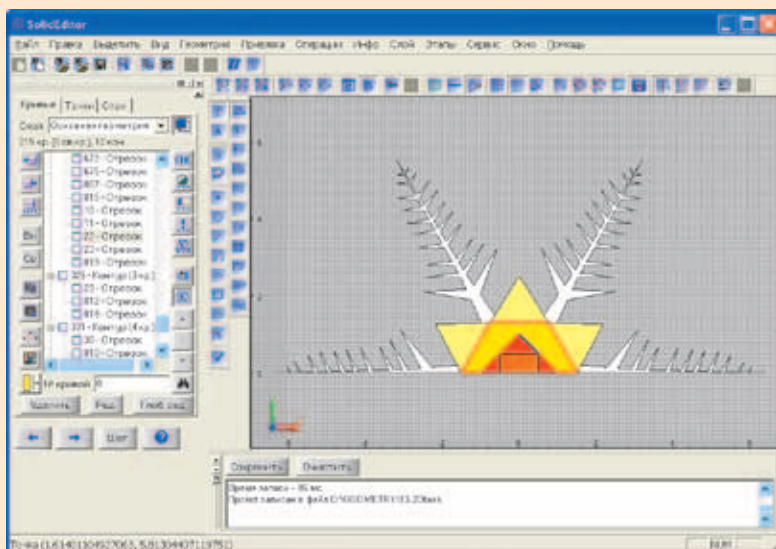
В программе отработаны процедуры построения двумерных сечений трехмерных геометрий. Обработка построенных сечений через программы SolidEditor и 2D-РНД позволяет быстро получить соответствующие двумерные начальные данные.



Исходные (сверху) и пересчитанные (снизу) данные (фрагмент)



Трехмерная геометрия в 3D-РНД



Плоское сечение в SolidEditor

В 2009 году в ИТМФ завершена разработка первой версии пакета базового системного и прикладного программного обеспечения (БСППО), который состоит из компонентов программного обеспечения разработки ВНИИЭФ для параллельных вычислений в рамках ОС Linux. Данное программное обеспечение установлено на всех высокопроизводительных вычислительных комплексах ВЦ РФЯЦ-ВНИИЭФ, предоставляя эффективную полнофункциональную унифицированную среду параллельных вычислений. БСППО ВНИИЭФ установлено и функционирует на высокопроизводительных ЭВМ ПГТУ (г. Пермь), ОКБМ (г. Нижний Новгород), ЦНИИ МО (г. Сергиев Посад).

БСППО ВНИИЭФ обеспечивает возможность эффективного использования вычислительных ресурсов как отдельных вычислительных систем, так и многомашинных вычислительных комплексов с неоднородной аппаратно-программной архитектурой.

Пакет БСППО позволяет:

- унифицировать создание, выполнение, контроль и планирование счета потока параллельных задач на многома-

шинных вычислительных комплексах;

- управлять иерархическим хранением данных, обеспечивая параллельный высокоскоростной доступ;

- контролировать эффективность распараллеливания программных комплексов и степень использования вычислительных ресурсов в целом;

- визуализировать данные большого объема в параллельном режиме;

- оптимизировать состав оборудования создаваемых ЭВМ, упростить наладку и тестирование.

В состав пакета входят:

- **Система инсталляции и настройки системного программного обеспечения параллельных вычислительных систем Octorus.** Получив описание новой вычислительной машины, Octorus автоматически строит и установит необходимое системное ПО (ОС, компиляторы, реализации библиотеки MPI, удаленный доступ, специфичные программные продукты, разработанные специалистами ИТМФ и т. д.).

- **Система сетевой загрузки ОС.** Система сетевой загрузки операционной системы позволя-

ет отказаться от использования дисков на узлах вычислительного поля и загружать операционную систему по сети Ethernet или высокоскоростной коммуникационной сети InfiniBand. Для минимизации объема занимаемой ОС оперативной памяти реализована технология создания специализированной компактной ОЗУ-резидентной ОС вычислительных узлов, оптимизированной для высокопроизводительных вычислений.

- **Единая система управления заданиями неоднородного вычислительного комплекса многопроцессорных систем ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» (ЕСУЗ).** ЕСУЗ предназначена для унификации процессов ввода, выполнения и управления пользовательскими приложениями. ЕСУЗ функционирует совместно с такими системами пакетного запуска заданий, как Open PBS, Torque и JAM.

- **Система пакетного запуска параллельных приложений (JAM).** JAM – это система пакетного запуска заданий, интегрированная с ЕСУЗ, в которой реализованы наиболее полезные функции ее аналогов (PBS, LoadLeveler, SLURM, Condor и т. д.), и ориентированная на полноценный учет специфики ЭВМ и счета задач на них. JAM поддерживает последовательные, MPI и OpenMP задания. В системе реализован эффективный алгоритм планирования – метод фоновоего заполнения Backfill.

- **Инструментальное средство сбора и анализа статистической информации счета программ пользователей (STK).** Программное обеспечение STK предназначено для выявления достоинств и недостатков методов распараллеливания математических программных комплексов, контроля эффективности их выполнения на различных параллельных ЭВМ.

- **Параллельная иерархическая файловая система (PIFS).** Основными компонентами PIFS

являются параллельная масштабируемая файловая система на базе открытого кода и средства автоматической миграции данных между дисковыми и ленточными уровнями хранения данных.

• **Библиотека единого файлового разреза (ЕФР).** ЕФР обеспечивает обмен данными между различными пакетами прикладных программ на основе стандартизированного представления сеточных данных, единый интерфейс взаимодействия с сервисными программами для постобработки и визуализации сеточных данных.

• **Библиотека последовательных и параллельных решателей PMLP.** Библиотека PMLP предназначена для решения больших разреженных линейных систем на регулярных и нерегулярных сетках. Она представляет собой объектно-ориентированную, переносимую библиотеку высокоэффективных, лучших в мире итерационных решателей в комбинации с предобуславливателями на большом числе процессоров (>100000).

• **Инструментальные средства исследования неустойчивости мультипроцессорных систем Noise Measurement Suite (NoM).** NoM обеспечивает автоматизированный процесс измерения, сбора, представления, обработки и анализа результатов измерения неустойчивости (шумов) функционирования компонентов вычислительной системы. NoM позволяет предсказать возможное влияние шума на конкретное приложение, выявить источники наиболее сильно влияющего шума в ПО узлов, чтобы далее сосредоточиться на его оптимизации.

• **Автоматическая система тестирования (АСТ).** АСТ обеспечивает автоматический запуск тестов, сбор полученных результатов и размещение их в базе данных, визуальное представление. Кроме международных тестов в состав АСТ входят методические прикладные тесты ВНИИЭФ, разработанные для

оценки эффективности мультипроцессорных систем.

• **Пакет Multi Cluster Subnet Manager (MCSM).** Данный сервис разработан на базе менеджера сети InfiniBand OpenSM с возможностью объединения или разделения на независимые подсети InfiniBand без использования аппаратуры *IB-to-IB routers* – так называемая логическая кластеризация.

• **Реализация библиотеки sMAD-MPI.** sMAD-MPI позволяет выполнять высокоскоростную загрузку приложений, рассчитанных для работы на кластерах больших размеров. Библиотека разработана с использованием сервисной подсистемы sMAD разработки ИТМФ. В данной версии MPI также реализовано перенаправление стандартного ввода/вывода с функциями объединения/разделения выводимых потоков данных.

• **Инструментальные средства отладки параллельных MPI приложений ParallelDB.** В состав ParallelDB входят отладчик параллельных приложений PAD с графическим интерфейсом и средства обработки исключительных прерываний в процессе выполнения параллельного приложения LibFault. Поддерживается отладка приложений, написанных на языках C/C++ и FORTRAN, использующих библиотеку MPI высокопроизводительной коммуникационной среды.

• **Интеллектуальная автоматизированная система интеграции программных пакетов в единый расчетный комплекс PSS.** В PSS реализована технология объединения независимых программных продуктов при проведении совместных вычис-

лений на гетерогенной вычислительной платформе.

Базовое системное ПО, включающее ОС, очередь управления заданиями, коммуникационные библиотеки, реализовано на базе собственных разработанных компонентов или с использованием компонентов с открытым исходным кодом, что обеспечивает возможность переноса его на вычислительные системы и функциональное расширение и модернизацию.

Помимо разработки пакета базового ПО в ИТМФ в рамках работ по внедрению многопроцессорных технологий РФЯЦ-ВНИИЭФ на предприятиях высокотехнологических отраслей промышленности разработаны и изготовлены опытные экземпляры высокопроизводительных компактных многопроцессорных ЭВМ двух типов. Оба типа ЭВМ не требуют специальных рабочих помещений и специальных инженерных систем (охлаждения, электропитания и пр.) и могут эксплуатироваться в обычных офисных помещениях.

Первый тип ЭВМ базируется на использовании арифметических ускорителей и предназначен для решения специальных классов задач наукоемких отраслей промышленности. Вместе с ПО разработка РФЯЦ-ВНИИЭФ представляет собой программно-аппаратный комплекс для решения задач молекулярной (наноуровень) и кластерной (микроуровень) динамики (программный пакет MoDys), расчета нейтронно-физических характеристик ядерных энергетических установок методом Монте-Карло (программные пакеты).

Основные характеристики многопроцессорной ЭВМ первого типа

Производительность.....	0,7 Тфлопс (на определенных задачах соответствует 40–50 персональным ЭВМ)
Потребляемая электрическая мощность.....	1,5 кВт



Специализированная компактная ЭВМ
на гибридной архитектуре процессоров



Универсальная компактная
многопроцессорная КС-ЭВМ

Второй тип – КС-ЭВМ – производительностью 1 Тфлопс предназначен для оснащения выделенных вычислительных центров и отраслевых предприятий РФ в составе программно-аппаратных комплексов, не требующих для эксплуатации специальных инженерных систем. КС-ЭВМ обеспечивает разработку, отладку и исполнение приложений, созданных на языках С, С++, Fortran-90, использующих средства MPI, Open MP (OMP) в последовательном и параллель-

ном одно- и многопользовательском режимах. КС-ЭВМ оснащена базовым системным и прикладным ПО (в том числе разработанным в РФЯЦ-ВНИИЭФ), ориентированным на решение конкретных задач трехмерного имитационного моделирования по согласованию с заказчиком. Возможно как персональное, так и коллективное использование ЭВМ. Конструкцией предусмотрено объединение нескольких КС-ЭВМ по коммуникационным сетям InfiniBand и Gigabit Ethernet в единую систему.

Существенное развитие в 2009 году получили работы по созданию методик и пакетов программ для имитационного моделирования на многопроцессорной ЭВМ в интересах решения задач высокотехнологичных отраслей промышленности Российской Федерации таких, как атомная энергетика, авиационное и автомобилестроение. Работы велись по двум основным направлениям:

1. Разработка отечественного многофункционального ПО трехмерного инженерного анализа на многопроцессорных компьютерах. Пакеты программ и физические процессы, на моделирование которых они ориентированы:

- Методика и комплекс программ ЛОГОС – моделирование стационарных и нестационарных ламинарных и турбулентных течений жидкости или газа, моделирование течения в пористой среде, конвективного теплообмена и распространения тепла в твердом теле.

- Методика и комплекс программ ЛЭГАК-ДК – моделирова-

Основные характеристики КС-ЭВМ

Процессорные ядра	96
Оперативная память	192 Гбайт
Монитор	ЖК 30"
Пиковая производительность	1,024 Тфлопс
Потребляемая мощность	не более 4 кВт
Охлаждение	воздушное
Габариты	55 x 70 x 95 см

ние динамического, статического и вибрационного деформирования конструкций с учетом разрушения и других сопутствующих процессов: теплопроводности, аэродинамики, гидродинамики, газодинамики, акустики, кинематики, а также междисциплинарный связанный анализ вышеуказанных процессов.

- Комплекс программ ДАНКО + ГЕПАРД – поведение конструкций при статических, динамических, сейсмических и ветровых нагрузках, разрушение конструкций, модельный анализ, усталостная прочность и долговечность конструкций, стационарная и нестационарная теплопроводность, коррозия материалов.

- Методика и комплекс программ НИМФА – многофазная, многокомпонентная фильтрация, конвективный перенос потока жидкости многокомпонентной примеси, гидродинамическая дисперсия, адсорбция, химическая кинетика.

2. Разработка специализированных пакетов программ для моделирования некоторых специфических задач, прежде всего, в атомной энергетике.

В 2009 году созданы версии программных пакетов моделирования нейтронно-физических характеристик в активной зоне (АЗ) ядерных энергетических установок. Так, программный комплекс CONCORD предназначен для расчета нейтронно-физических характеристик ячеек АЗ реакторов с учетом выгорания топлива и теплового расширения ТВЭЛов. С использованием данного комплекса проводятся расчеты кампаний выгорания топливных элементов, топливных кассет, тепловыделяющих сборок (ТВС), а также подготавливаются наборы гомогенных мало групповых нейтронных констант, описывающих состояние ячеек АЗ в различные моменты времени (глубина выгорания) и в различных теплофизических состояниях. Существенно модернизированы

основные блоки программ и создан ряд новых. Комплекс включает в себя следующие блоки:

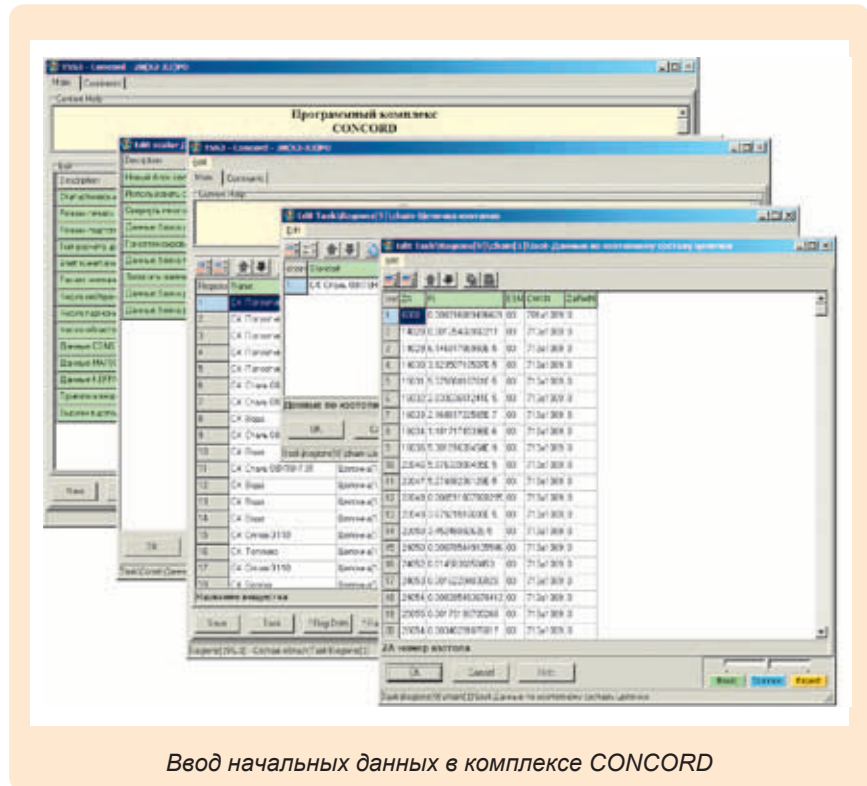
- ввода входных данных в графическом интерактивном режиме;
- расчета начальных данных задачи и записи их в файл-разрез;
- расчета многогрупповых макроконстант для отдельных областей ячеек с учетом теплового движения ядер, химических связей атомов в веществе, резонансной экранировки сечений;
- расчета нейтронно-физических характеристик ячеек в многогрупповом кинетическом приближении с учетом анизотропии рассеяния для одномерной сферической и цилиндрической геометрий;
- расчета нейтронно-физических характеристик в двумерной геометрии на произвольных регулярных и нерегулярных сетках в многогрупповом анизотропном приближении с использованием S_n -метода;
- расчета кинетики выгорания ядер делящихся материалов с учетом наработки выделенных осколков деления, их

выгорания в нейтронных потоках и процессов радиоактивных распадов;

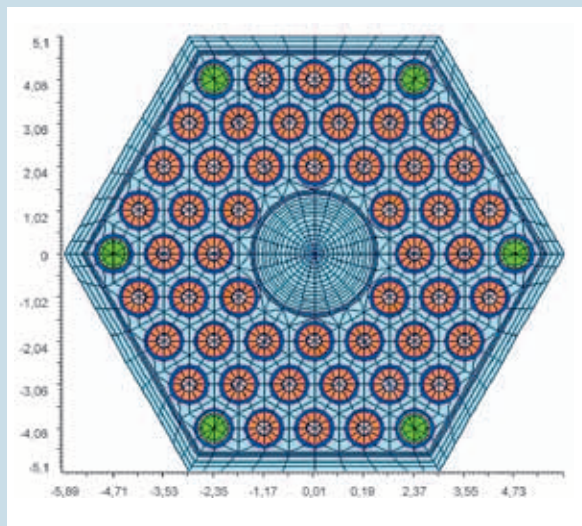
- свертки многогрупповых нейтронных констант в мало групповые макроконстанты с учетом нейтронных спектров в различных областях ячейки и гомогенизации констант в пределах определенных гомогенных зон ячейки (или всей ячейки);
- итерационного уточнения ячейечных констант для трехмерных диффузионных расчетов АЗ по нейтронному спектру с использованием процедуры изотропизации или коррекции числа мгновенных вторичных нейтронов деления;
- записи мало групповых ячейечных констант в двоичные файлы прямого доступа.

В комплексе CONCORD проведены двумерные расчеты эффективного коэффициента размножения $K_{\text{эф}}$ и расчеты ячейечных констант для 15 слоев восьми типов ТВС модельной реакторной сборки (по два изотопных состава на каждый тип).

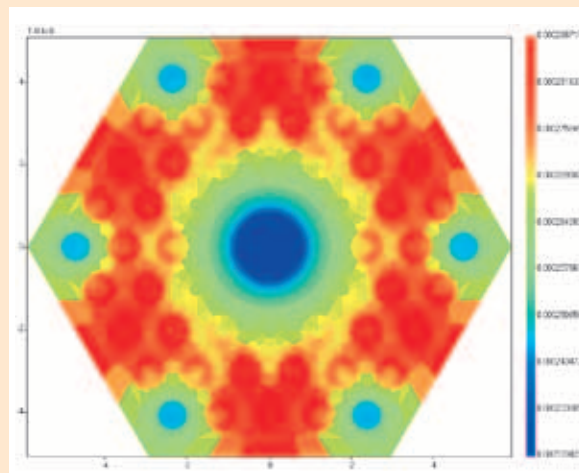
Разработана первая версия программного комплекса TDMCC, предназначенного для



Ввод начальных данных в комплексе CONCORD



Расчетная сетка одной из ТВС модельной сборки



Распределение плотности нейтронов по ячейкам ТВС при решении в комплексе CONCORD (195 веществ, 69 групп)

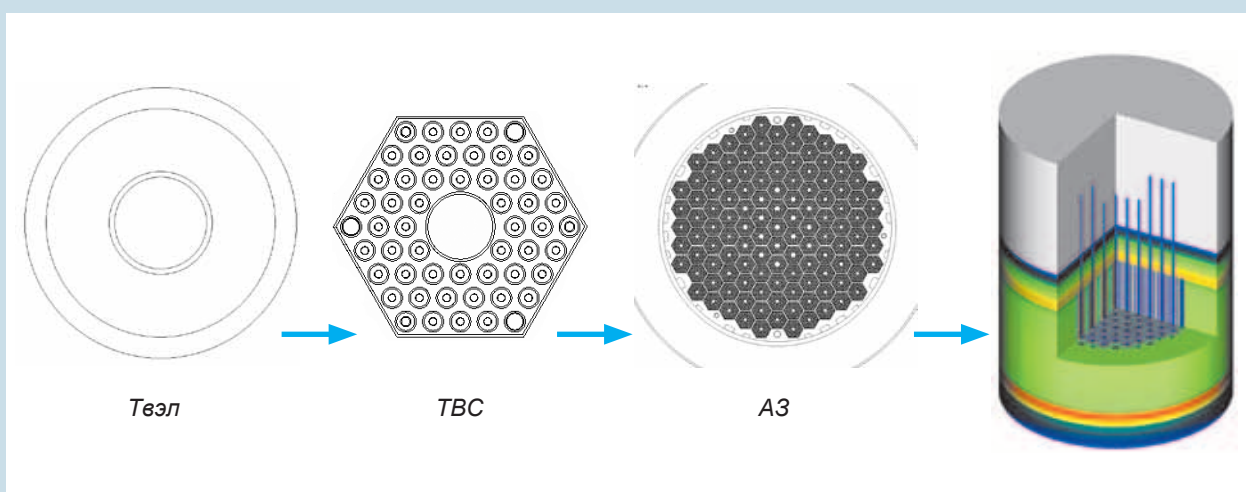
решения задач атомной энергетики. Разработка велась на основе многолетнего опыта использования метода Монте-Карло для решения задач переноса нейтронов и расчета критичности систем. При описании геометрии рассчитываемых систем используется блочный принцип с заданием системы вложений, что идеально подходит именно для задач расчета АЗ. Блок описывается набором поверхностей, а система вложений определяет совместное размещение блоков друг относительно друга. Создание модулей расчета центров вложений на основе чтения

картограмм на порядок сокращает время, затрачиваемое на подготовку задач.

Наличие в программе возможности описания специального блока для выделения части системы и задание на нем граничных условий типа «отражения» позволяет воспользоваться симметрией, характерной для геометрической структуры тепловых реакторов, и сократить вычислительные затраты. Учет теплового движения ядер среды, необходимый для корректного решения реакторных задач, осуществляется двумя способами: учетом химиче-

ских связей – так называемая модель $S(\alpha, \beta)$ или в приближении свободного максвелловского газа. В последнем случае моделирование распространения нейтронов ведется на холодных сечениях вещества. Учет температурного движения ядер заложен в сам алгоритм моделирования, что очень удобно, так как не требуется расчета констант для заданной температуры. В программе реализованы три режима счета:

- режим «К» – расчет критичности реакторов, пространственно-энергетического распределения нейтронов в АЗ и интен-



Блочная система вложений для расчета АЗ

сивности реакций на каждом элементе и в каждой зоне реактора в стационарном режиме. Верификация проведена с использованием задач VVER1000, C5G7MOX и др. Получено хорошее согласие с результатами расчетов по программе MCNP;

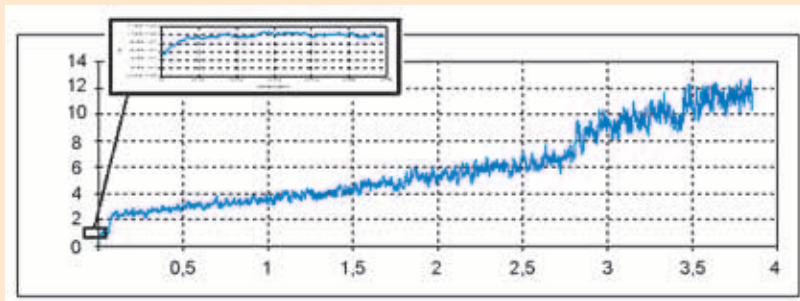
- режим «D» – расчет процессов нейтронной динамики АЗ атомных электростанций с реакторами типа ВВЭР и PWR как для аварийных ситуаций, так и для рабочих переходных режимов. Основной особенностью моделирования в этом случае является использование пошагового временного счета и учет времени запаздывания нейтронов, испускаемых осколками

ядер на реакциях деления. Методика расчета пространственной нейтронной динамики методом Монте-Карло является новаторской в области моделирования АЗ АЭС. Ее внедрению предшествовала разработка различных подходов к моделированию и апробация их на модельных задачах;

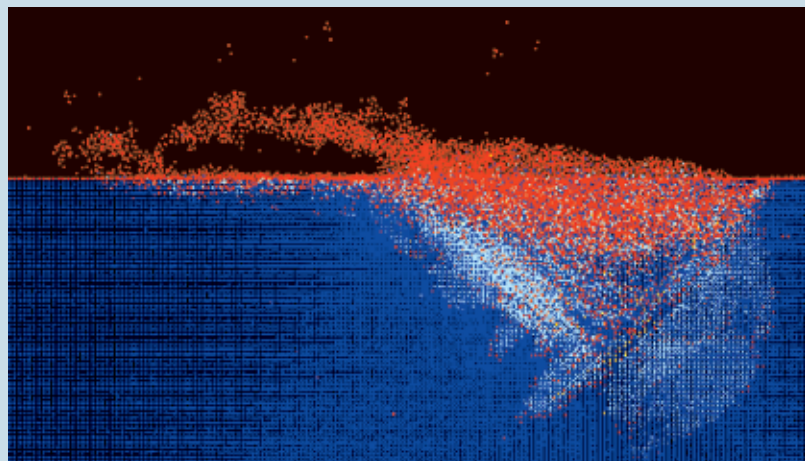
- режим «V» – расчет выгорания топливных элементов. Применяется циклическая двухэтапная процедура – расчет пространственно-энергетического распределения потоков нейтронов методом Монте-Карло и расчет изменения изотопного состава в топливных зонах программной библиотекой KING.

Кроме основного результата, для каждого режима выдаются значения токов и потоки частиц через поверхности систем, потоки частиц и количество реакций в областях системы, а также свертки этих результатов с произвольными функциями энергии и фазовых координат частицы. Графические модули позволяют наглядно представлять результаты расчетов, например, энерговыделение в АЗ на стационарном режиме. В расчетах используются нейтронно-ядерные константы различных версий библиотек ENDL и ENDF/B. Расчеты можно проводить на ПК и машинах с параллельной архитектурой.

Одно из интересных прикладных направлений связано с созданием различных по своим физическим свойствам покрытий. Изучается взаимодействие частиц, капель (наночастиц, нанокapель) с поверхностями. На основе метода молекулярной динамики, развиваемого в ИТМФ, проводится исследование особенностей взаимодействия расплавленных нанокapель металлов с металлическими поверхностями, имеющими различные кристаллические структуры.



Пример модельной задачи по установлению стационарного режима и разгона реактора при мгновенном повышении реактивности на $0,5 \beta$



Мгновенное изображение взаимодействия расплавленной (~ 1400 K) капли Си с поверхностью кристалла Си (300 K). Скорость капли 5 км/с, угол падения 60° . Красным цветом помечены атомы, не принадлежащие к кристаллическим структурам, в том числе атомы капли и внешние атомы поверхности, синим – атомы Си, светло-голубым – возникающие дефектные плоскости