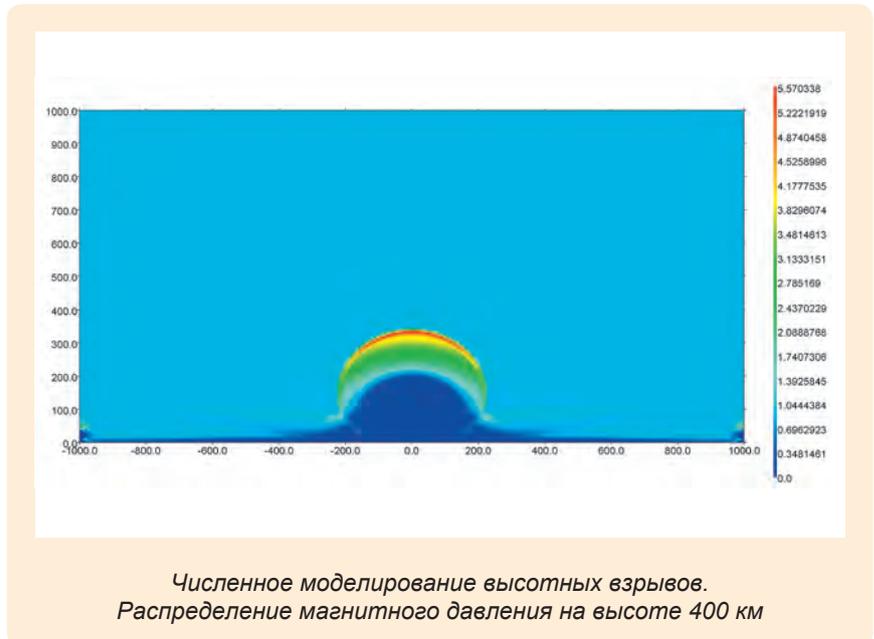


ИНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ (ИТМФ)

Основным направлением деятельности ИТМФ является создание современной расчетно-теоретической базы моделирования сложных физических процессов в задачах механики сплошной среды и физики высоких плотностей энергии, входящих в основную тематику деятельности ВНИИЭФ. Ключевым моментом развития расчетно-теоретической базы является разработка новых физико-математических моделей, внедрение их в ранее созданные комплексы программ, их верификация и валидация.

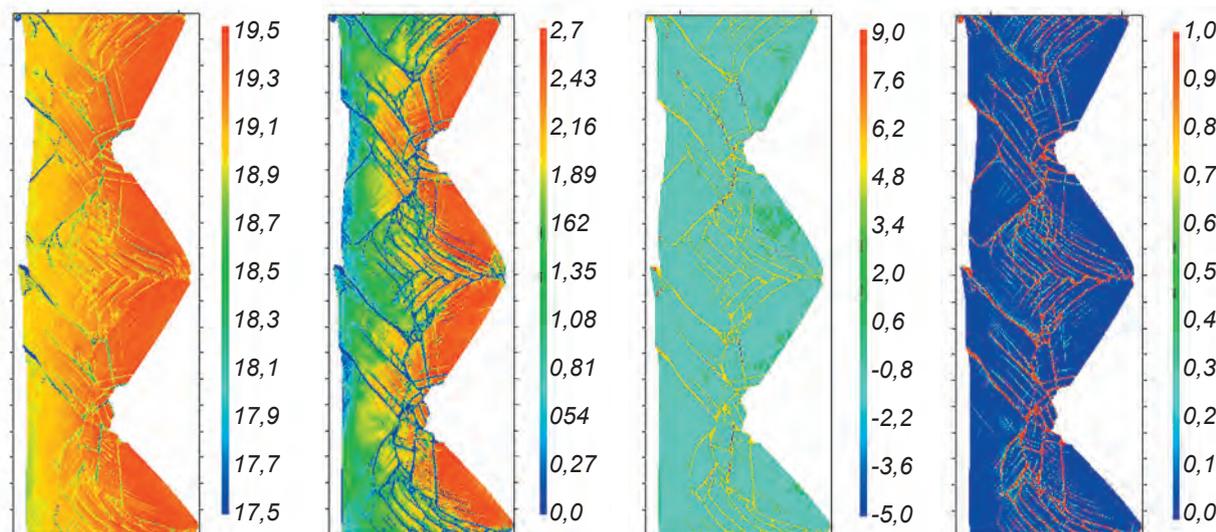
Для численного моделирования сильных взрывов на больших высотах разработана методика, основанная на приближении многопоточковой магнитной газодинамики. В рамках данного подхода все частицы разделяются на несколько сортов («потоков»), и движение каждого потока описывается газодинамическим приближением, причем потоки могут обмениваться массой, импульсом и энергией. Многопоточковая модель содержит шесть потоков частиц. В разные потоки выделяются продукты взрыва и вещество атмосферы, а также нейтральные и заряженные, быстрые и медленные частицы. Дополнительно вводится безмассовый поток электронов, движение которого определяется условием электронейтральности. Важной особенностью модели является учет взаимодействия потоков плазмы, связанного с ларморовским вращением ионов в магнитном поле. Шестипотоковая методика реализована в комплексе программ ТИМ и предназначена для расчета нестационарных задач механики сплошной среды на неструктурированных лагранжевых сетках в двумерном и трехмерном приближении.



Численное моделирование высотных взрывов.
Распределение магнитного давления на высоте 400 км

При работе конструкций, подвергающихся в процессе эксплуатации воздействию интенсивных импульсных нагрузок, актуальным является вопрос разрушения. При динамическом деформировании упругопластических материалов может образовываться большое число микродефектов различного типа. Численное описание каждого микродефекта в отдельности при рассмотрении импульсных воздействий на реальные полномасштабные конструкции является достаточно сложной задачей. Для учета поврежденности материалов в условиях импульсных воздействий разработана феноменологическая модель кинетики динамического разрушения материалов. В рамках этой модели учитывается кинетика образования, развития и слияния пор при действии растягивающих напряжений, поврежденность материала на сдвиговых пластических деформациях, а также уменьшение меры поврежденности материалов при действии сжимающих напряжений (вплоть до их аннигиляции). В рассматриваемой модели по-

лагается, что рост и взаимодействие различных микроповрежденностей материала в конечном итоге могут приводить в локальной области к макроразрушению твердого материала. Кинетическая модель также включает в себя возможность компактирования разрушенного материала под действием сжимающих напряжений. На развитие процессов разрушения и компактирования влияет температура материалов, которая также учтена в рассматриваемой кинетике. Модель реализована в рамках методики ТИМ, предназначенной для расчета нестационарных задач механики сплошной среды на неструктурированных лагранжевых сетках, и широко используется при моделировании работы конструкций в условиях ударно-волновых воздействий. Валидация модели проведена на целом ряде экспериментальных данных. Результаты расчетов показывают, что кинетическая модель разрушения качественно верно передает картину зарождения и развития откольных разрушений в экспериментах.



Распределение плотности в образце

Распределение интенсивности сдвиговых напряжений

Индикация критериев поврежденности в образце

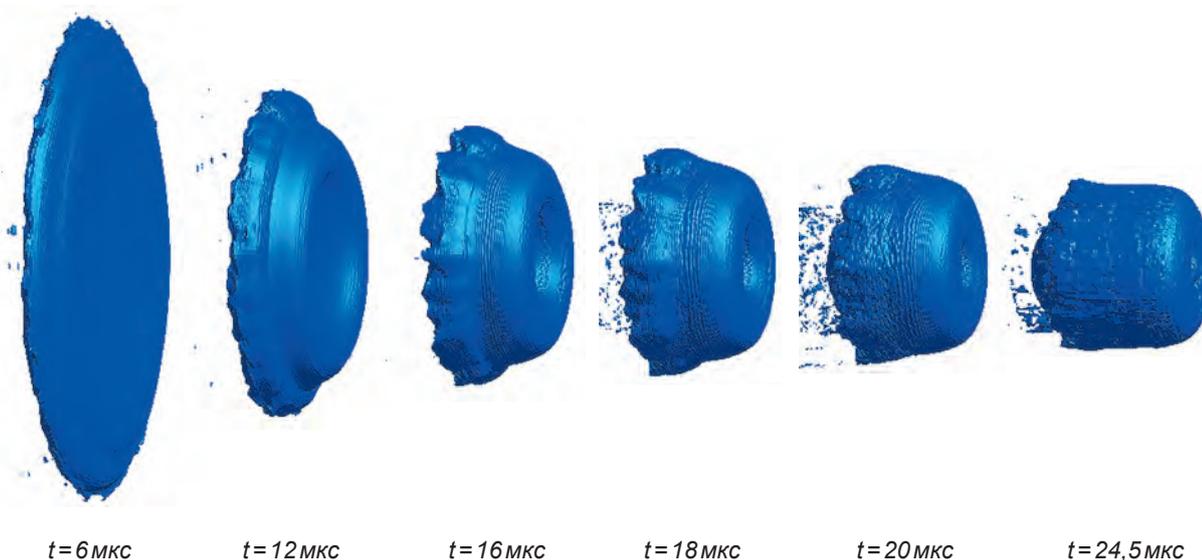
Распределение меры поврежденности на сдвиговых деформациях

Численное моделирование поврежденности материала при интенсивном ударно-волновом нагружении. Методика ТИМ-2D

В рамках программного комплекса ЛЭГАК-3D проведено численное моделирование процесса формирования компактного поражающего элемента (ПЭ) сна-

рядоформирующего заряда для ракетной системы залпового огня «Ураган». В расчетах исследовалось влияние составной шашки из двух различных взрывчатых

веществ на форму ПЭ из тантала. Получено хорошее качественное совпадение численных результатов с результатами проведенных в ИФВ испытаний.



$t=6 \text{ мкс}$

$t=12 \text{ мкс}$

$t=16 \text{ мкс}$

$t=18 \text{ мкс}$

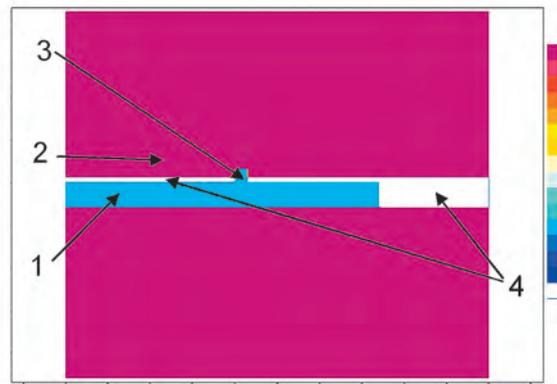
$t=20 \text{ мкс}$

$t=24,5 \text{ мкс}$

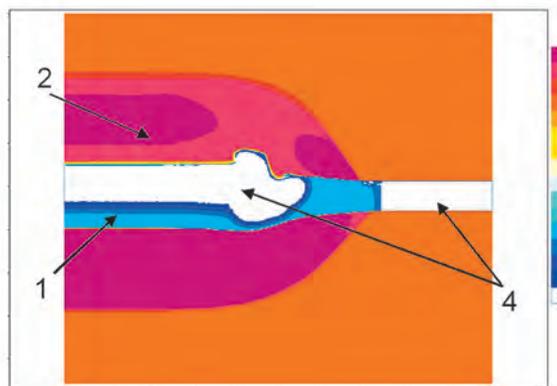
Динамика формирования ПЭ из тантала, полученная в расчете по программам ЛЭГАК-3D

Проведено двумерное МГД-моделирование контактных соединений лайнера во взрывомагнитном эксперименте «Мегабар-1», где планируется разогнать Al-лайнера массой ~ 20 г/см током 60–70 МА (магнитное поле 4–5 МГс) до скорости ~ 20 км/с и получить ударно-волновое давление ~ 1 ТПа. Надежность электроконтактного соединения лайнера с прилегающими материалами обеспечивается ударной волной, которая расходится от такого соединения, производя «сварку» лайнера с этими материалами.

Для решения проблемы обеспечения стойкости магистральных газопроводов (МГ) к распространению трещин проводятся интенсивные исследования с целью выработки критериев оценки способности металла трубы останавливать протяженное разрушение. В последние годы, наряду с испытаниями стандартных образцов материала труб, проводятся натурные испытания, имитирующие реальные условия работы и отказов МГ, которые могут дать полноценную информацию о прочности трубы как конструкции. При этом обязательно учитываются характеристики прочности, вязкости и пластичности металла труб. Моделирование взрывного нагружения образцов труб проводилось с использованием двумерного программного кода ДИАДА-2D в предположении недеформируемости стенки трубы; при этом определялась газодинамическая нагрузка, реализуемая при взрыве заряда ВВ. Далее с использованием полученной газодинамической нагрузки в качестве исходных данных с помощью трехмерного программного кода ДАНКО проводились расчеты динамической реакции трубы на взрывную нагрузку. Одной из задач в ходе моделирования поведения трубы при взрывном нагружении являлось исследование влияния сварного шва на напряженно-



а



б

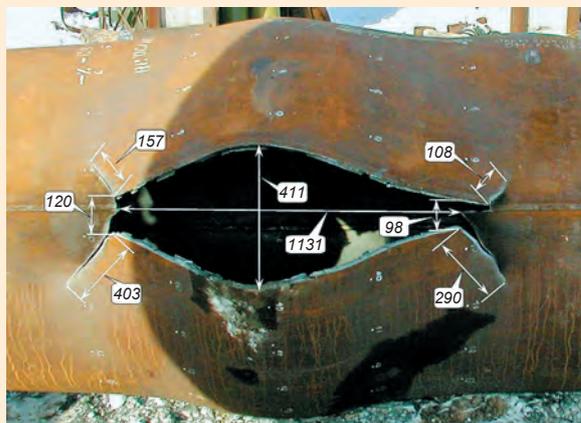
Распределение плотности в двумерном МГД-расчете контактного соединения Al-лайнера (1) с обратным Si-токопроводом (2) и торцевым Si-элементом с помощью контактного Al-кольца (3). Начальное состояние (а); через ~ 10 мкс после достижения пикового тока ~ 66 МА (б). 4 – вакуумные зазоры

деформированное состояние всей конструкции в целом. При этом в расчетах учитывалось различие в свойствах сварного шва и основного металла. Общее количество конечных элементов составило 3,5 млн. Следует отметить, что в численном

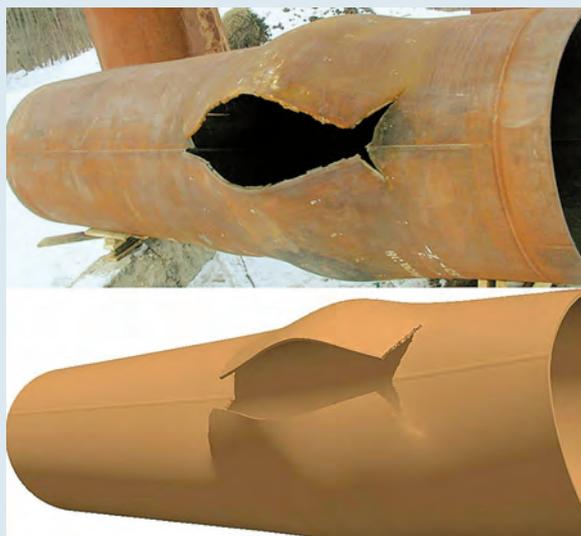
моделировании удалось описать эффект разветвления трещины, который достаточно часто наблюдается при пневматических испытаниях труб для оценки их способности противостоять распространению протяженного разрушения.



Образец трубы, подготовленный к взрывному испытанию, в двух видах

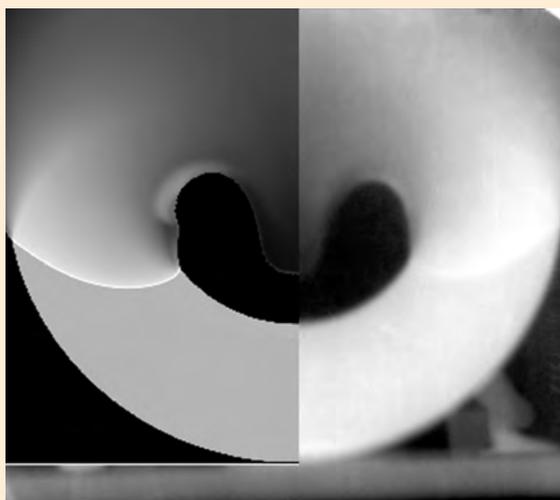


Зона разрушения (размеры указаны в мм)



Состояние трубы после опыта

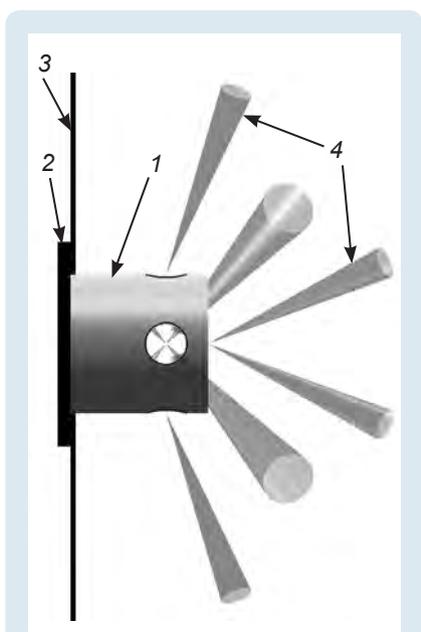
В рамках верификации и валидации модели кинетики детонации МК по программному комплексу ЛЭГАК-3D проведено численное моделирование экспериментов ИФВ по распространению детонации в кольцевых шашках для состава взрывчатого вещества ТАТБ. Результаты расчетов показали хорошее согласие с данными, полученными в ходе проведения экспериментов на импульсной рентгеновской установке «Эридан» с мягким спектром излучения и зарегистрированными с помощью цифровых осциллографов типа TDS.



Распространение детонации в кольцевой шашке. Поле плотности: эксперимент (справа); расчет по программ ЛЭГАК-3D (слева)

На лазерной установке «Искра-5» в течение многих лет проводятся эксперименты по облучению мишеней различных типов с целью экспериментального исследования свойств вещества и излучения при высоких температурах. По численной методике СНД-ЛИРА в трехмерной постановке выполнено численное исследование динамики полей излучения (лазерного и рентгеновского) в экспериментах с цилиндрическими боксами-конверторами (иллюминаторами), проведенных ранее на лазерной установке «Искра-5» на длине волны $\lambda = 0,66$ мкм (вторая гармоника йодного лазера). В этих экспериментах температура рентгеновского излучения в боксе определялась посредством измерения скорости ударной волны, генерируемой в исследуемом образце, расположенном на торце цилиндрического иллюминатора. В расчетах по программе СНД-ЛИРА проведено сквозное численное моделирование, учитывающее поглощение излучения лазерного драйвера на стенках бокса, генерацию квазитеплового излучения, а также формирование и распространение ударной волны в исследуемом образце. Рассмотрены варианты лазерной засветки иллюминатора 2, 4, 6

и 8 лазерными пучками, вводимыми во внутренний объем бокса через отверстия на его поверхности. Анализ экспериментов позволяет определить коэффициент ограничения электронной теплопроводности, при более сильном ограничении электронного теплопереноса удается согласовать данные экспериментального скейлинга для температуры рентгеновского излучения в боксе с расчетными данными. Полученные в расчетах скорости ударной волны также согласуются с результатами экспериментов.



Конструкция мишени: 1 – бокс-конвертор; 2 – нагружаемый образец; 3 – светозащитный экран; 4 – лазерные пучки (показан вариант засветки 6 лазерными пучками, вводимыми через торцевое отверстие (2 пучка) и боковые отверстия (4 пучка))

Применительно к задаче о численном моделировании взаимодействия короткоимпульсного лазерного излучения с бесстолкновительной плазмой для системы уравнений Власова – Максвелла сформулированы уравнения высокочастотного (ВЧ) приближения. Для этих уравнений выполнена математи-

ческая постановка одномерной задачи, согласованная с постановкой двумерной задачи о взаимодействии лазерного излучения с плазмой при его наклонном падении на плазменный слой. Проведены расчеты рассматриваемой одномерной задачи «на сходимость» с целью исследования влияния на получаемые результаты счетных параметров, таких как пространственно-временные шаги, начальное число модельных частиц в ячейках пространственной сетки. Кроме того, исследовано влияние на результаты способов вычисления компоненты E_x электрического поля, интерполяции при вычислении средних характеристик плазмы в узлах пространственной сетки и силы Лоренца, действующей на модельные частицы. Численные исследования показали, что наиболее существенное влияние на результаты моделирования в задачах о взаимодействии лазерного излучения с плазмой оказывает шаг по пространственным переменным. Аналитически и численно установлено, что выбор этого шага должен быть увязан с параметром $\delta = \beta^2 / \omega^2$, где β , ω – безразмерные амплитуда и частота лазерного поля. При $\delta \gg 1$ расчеты «на сходимость» становятся проблематичными.

Выполнен анализ результатов численного моделирования взаимодействия лазерного излучения с плазмой, проведенного по программе HFP, использующей уравнения ВЧ-приближения, и программе PLASMA-2 для решения полной двумерной системы уравнений Власова – Максвелла. Анализ показал, что на начальной стадии взаимодействия имеется временной интервал, на котором результаты одномерных и двумерных расчетов в середине плазменной мишени хорошо согласуются между собой. Границы этого временного интервала зависят от оптической толщины плазменной ми-

шени, размеров области однородности лазерного импульса (в сечении, перпендикулярном к направлению его распространения) и угла, под которым импульс падает на мишень. Таким образом, высокочастотное приближение может быть использовано для оценки точности двумерного моделирования начальной стадии взаимодействия лазерного излучения с плазмой и выработки рекомендаций по выбору счетных параметров при проведении двумерных расчетов. Кроме того, для лазерных импульсов с длительностью, меньшей длины характерного временного интервала, это приближение может быть использовано в качестве независимой модели для исследования взаимодействия короткоимпульсного лазерного излучения с бесстолкновительной плазмой.

Проводилась работа по усовершенствованию моделей уравнений состояния (УРС) веществ и пробегов излучения в веществах с целью расширения их области применимости. С использованием созданной ранее модели широкодиапазонного полупериодического УРС металлов, в которой эффективно учитывается влияние процессов ионизации на термодинамические функции, разработаны УРС кадмия и свинца. Эти УРС описывают как состояния в экспериментально исследованной области, так и состояния в области сверхвысоких давлений и температур, рассчитываемые по теоретическим статистическим моделям типа Томаса – Ферми. Для своей области применимости УРС содержат относительно небольшое число свободных параметров, большинство из которых имеет физический смысл.

Проведено сравнение спектров пропускания для алюминия и магния при разных температурах и плотностях, полученных в экспериментах во фран-

цузском ядерном центре, и результатов расчетов спектров поглощения по программам THERMOS 6.4y и TH_BASE (с использованием баз данных, полученных по программам атомных расчетов GRASP и FAC). Сравнение показало, что результаты расчетов в целом неплохо передают экспериментальные спектры пропускания. Наилучшее согласие результатов расчетов с экспериментальными данными получено при использовании программы TH_BASE с базой данных FAC. Замеченное отличие между расчетами по THERMOS 6.4y и TH_BASE (FAC) в положениях линий поглощения обусловлено, в первую очередь, погрешностью в определении энергии переходов по программе THERMOS.

Переработан ряд алгоритмов, на основе которых распараллелена (на MPI) программа THERMOS расчета спектральных коэффициентов поглощения. В результате эффективность расчетов значительно увеличена, в частности, проведен тестовый расчет спектров поглощения в одной точке с перебором $6,5 \cdot 10^{12}$ конфигураций. В старой версии программы расчет с перебором такого количества конфигураций потребовал бы времени на два порядка больше (на двухстах процессорах). С ростом числа процессоров выигрыш по времени увеличивается.

В 2011 году в ИТМФ продолжались работы по проекту «Развитие суперкомпьютеров и грид-технологий», принятого к реализации Комиссией при Президенте Российской Федерации по модернизации и технологическому развитию экономики.

Работы проводились по трем основным направлениям:

1. Создание отечественного конкурентоспособного программного обеспечения (ПО) для комплексного имитационно-

го 3D моделирования на суперЭВМ с массовым параллелизмом в интересах проектирования и создания наукоемкой продукции ведущих отраслей отечественной промышленности.

2. Внедрение этого ПО в высокотехнологические отрасли промышленности в целях проектирования и разработки конкурентоспособных образцов современной техники.

3. Разработка базового ряда суперЭВМ, куда входят:

- крупнейший в России высокопроизводительный вычислительный комплекс нового поколения для решения стратегических задач наукоемких отраслей;
- компактные суперЭВМ терафлопсного класса для массового применения на промышленных предприятиях, в науке и образовании.

Работа, как и в предыдущие годы, проводилась в широкой кооперации с организациями Госкорпорации «Росатом», организациями Минобрнауки, РАН и промышленными предприятиями.

Существенное развитие в 2011 году получили отечественные пакеты программ ЛОГОС (теплообмен и прочность), ДАНКО + ГЕПАРД и НИМФА имитационного 3D моделирования для высокопроизводительных вычислительных комплексов (суперЭВМ) с массовым параллелизмом, включающие в себя базовые модели и методы для имитационного моделирования широкого спектра физических процессов, характерных для практических задач промышленных предприятий. В конце 2011 года, по завершении второго этапа верификации и валидации, адаптированные и усовершенствованные пакеты программ ЛОГОС, ДАНКО + ГЕПАРД и НИМФА были сданы в опытную эксплуатацию. В настоящее время готовится их сертификация.

Сегодня пакет программ ЛОГОС (теплообмен) по-

зволяет моделировать процессы аэро-, гидро- и газодинамики, турбулентного перемешивания, распространения тепла в твердом теле, тепловой конвекции, переноса излучения, течения в пористой среде. Этот пакет программ получил четыре свидетельства Федеральной службы по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам (ФИПС). В пакете реализовано 26 физико-математических моделей для расчета указанных процессов. Масштаб распараллеливания пакета составляет 10 000 процессоров при эффективности распараллеливания 50–90%. Подобным функционалом обладают единичные коммерческие пакеты. Опытная эксплуатация проводится в 16 организациях наукоемких отраслей промышленности на 80 рабочих местах. С применением пакета в 2011 году выполнено 3000 расчетов.

Пакет программ ЛЭГАК-ДК (ЛОГОС-прочность) позволяет моделировать процессы статического и динамического упругопластического деформирования, газодинамики, разрушения, контактного взаимодействия, теплопроводности, кинематики, анализа частот и форм колебаний. Этот пакет программ получил три свидетельства ФИПС. В пакете реализовано 30 физико-математических моделей для расчета указанных процессов. Масштаб распараллеливания пакета составляет 10 000 процессоров при эффективности распараллеливания 50–60%. Опытная эксплуатация проводится в 13 организациях наукоемких отраслей промышленности на 105 рабочих местах. С применением пакета в 2011 году выполнено 1600 расчетов.

Пакет программ НИМФА позволяет моделировать нестационарную насыщенно-ненасыщенную фильтрацию жидкости и газа, нестационарную двух-

фазную фильтрацию без учета капиллярных эффектов, многокомпонентный массоперенос примесей с учетом молекулярной диффузии и дисперсии. Пакет программ НИМФА получил три свидетельства ФИПС. В пакете НИМФА также реализовано большое количество физико-математических моделей. Достигнут высокий уровень распараллеливания вычислений при расчете задач фильтрации и массопереноса (более 10 000 процессоров с эффективностью 65%). Пакет наполняется новыми моделями, направленными на расширение круга решаемых задач.

Пакет программ ДАНКО + ГЕПАРД позволяет моделировать упругопластическое поведение материала, контактное взаимодействие объектов с учетом трения, разрушения, квазистатические и динамические нагрузки, нестационарную теплопроводность. Пакет программ получил четыре свидетельства ФИПС.

Суммарно в базовых версиях четырех разработанных в ИТМФ импортозамещающих пакетов программ имитационного 3D моделирования в настоящее время реализованы 72 физико-математические модели, получено 28 свидетельств ФИПС, на их основе в 2011 году выполнено более 4500 расчетов. Таким образом, созданные в ИТМФ базовые версии пакетов программ стали серьезным шагом на пути обеспечения конкурентоспособности отечественного прикладного ПО.

Параллельно с развитием отечественных пакетов программ имитационного 3D моделирования для суперЭВМ в ИТМФ был выполнен большой объем работы по созданию «препространства». Пакет ЛОГОС в октябре 2011 года был представлен в Москве на Всероссийской выставке «Softool-2011», в рамках которой под эгидой Российской



академии наук проводился национальный конкурс «Лучший продукт года-2011». По итогам конкурса пакет ЛОГОС занял второе место в номинации «Суперкомпьютеры».

Введенными в опытную эксплуатацию отечественными пакетами программ по итогам 2011 года оснащено 157 рабочих мест на предприятиях высокотехнологичных отраслей промышленности, в том числе в ОАО ОКБ «Сухого», ОАО «Камаз», НПО «Сатурн» и др. Помощь в освоении программ оказывали специалисты ИТМФ. По итогам 2011 года обучение прошли 209 специалистов из 14 организаций ГК «Росатом», ФКА «Роскосмос», авиационной и автомобильной промышленности.

В рамках совместных работ выполнены:

- расчет аэродинамических характеристик боевого самолета Су-30МКИ (ОАО ОКБ «Сухого»);
- моделирование течения теплоносителя в напорной камере реакторной установки РИТМ-200 (ОАО «ОКБМ Африкантов»);
- моделирование жесткой посадки (без шасси) отечественного лайнера нового поколения SSJ-100 (ОАО «Компания Сухого», ОАО «Гражданские самолеты Сухого», ООО «СИНЦ»);
- исследование прочностных свойств устройства расплава АЭС с ВВЭР-1000 при сейсмическом воздействии (ОАО «СПбАЭП»).

В 2011 году в ИТМФ успешно проводилась работа по развитию базового ряда суперЭВМ как в направлении достижения рекордной производительности, так и в направлении уменьшения размеров.

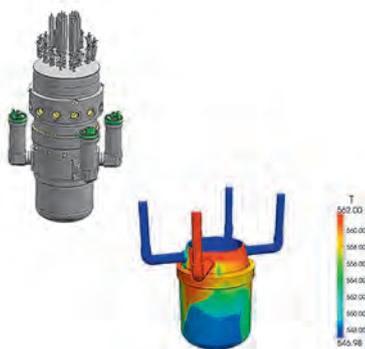


Пакет программ ЛОГОС- теплообмен

Расчетная сетка: 20 млн ячеек

Количество процессоров 500

Время расчета ~ 200 часов



Цель решения задачи: моделирование турбулентного смешения неизотермических потоков в напорной камере РУ РИТМ 200 при специфическом режиме эксплуатации оборудования РУ, обусловленном отключением секции парогенератора

Моделирование течения теплоносителя в напорной камере реакторной установки РИТМ-200

Пакет программ ЛОГОС- прочность

Расчетная сетка: 12 млн ячеек

Количество процессоров 3600

Время расчета ~ 200 часов

Расчет на ПЭВМ невозможен



Цель решения задачи: сократить количество экспериментальных работ

Моделирование жесткой посадки отечественного лайнера нового поколения SSJ-100

Пакет программ ДАНКО

Расчетная сетка: 6 млн ячеек

Количество процессоров 1000

Время расчета 2 часа
Расчет на ПЭВМ 2 месяца

Эффективность
распараллеливания:
80 %



Цель решения задачи: обоснование безопасности АЭС в условиях гипотетической тяжелой аварии

Исследование прочностных свойств устройства расплава АЭС с ВВЭР-1000 при сейсмическом воздействии

Специалистами ИТМФ решена задача государственного масштаба по созданию высокопроизводительного вычислительного комплекса (ВВК) нового поколения. С опережением на 9 месяцев, 21 февраля 2011 года, ВВК успешно прошел приемочные испытания и по решению Государственной комиссии введен в эксплуатацию. Созданный ВВК базируется на передовых технических и архитектурных решениях. Он оснащен системным ПО, основные компоненты которого разработаны или адаптированы специалистами ИТМФ. В процессе выполнения работ при оптимальных затратах достигнуты высокие показатели по производительности, эффективности и надежности вычислительных систем.

Значительная часть вычислительных ресурсов ВВК выделена предприятиям высокотехнологических отраслей промышленности для наукоемких расчетов в удаленном защищенном режиме. Практика показывает, что эта услуга очень востребована. Если в 2010 году ею воспользовались около 20 предприятий и организаций, то сегодня их уже более 30.

В 2011 году в ИТМФ развивались и расширялись возможности специализированных и универсальных компактных суперЭВМ. Так, для специализированной (гибридная архитектура, арифметические ускорители) компактной суперЭВМ и созданного на ее основе программно-аппаратного комплекса ПАК-1 в дополнение к имеющимся возможностям решения задач методом молекулярной динамики и методом Монте-Карло создана гибридная версия программного комплекса MoDyS. Проведена серия расчетов по моделированию откольных явлений и турбулентного перемешивания. Применение арифметических ускорителей повысило скорость моделирования в 8–15 раз, а парал-



ального и коллективного использования конструкторами, исследователями, математиками в рабочих комнатах и лабораториях, не оснащенных специальными инженерными системами жизнеобеспечения. АПК-1М обеспечивает проведение расчетов, требующих больших вычислительных ресурсов, оснащен базовым системным и прикладным программным обеспечением разработки ИТМФ, ориентированным на решение конкретных задач имитационного 3D моделирования с целью повышения точности и уменьшения сроков инженерных расчетов при проектировании и создании новых образцов техники на предприятиях высокотехнологичных областей.

В 2011 году в ИТМФ разработана конструкторская документация и создан опытный образец универсальной компактной суперЭВМ АПК-3 с производительностью 3 Тфлоп/с. Государственная комиссия присво-

тельная балансировка гибридной версии комплекса совместно с арифметическими ускорителями повысила скорость расчетов в 1,2–1,5 раза. Разработана программа СМК-У расчета эффективного коэффициента размножения и переноса нейтронов для обоснования ядерной безопасности активных зон реакторов, бассейнов выдержки и мест хранения свежего и отработанного топлива, транспортных упаковочных комплектов для перевозки топлива и других средств обращения с топливом на АЭС. Моделирование задач удалось ускорить в 10–14 раз относительно стандартной программы СМК, работающей на универсальном процессоре. Программа ТДМСС для расчета задач защиты ядерных установок на суперЭВМ гибридной архитектуры с использованием арифметических ускорителей передана партнерам-пользователям

в Гидропресс (г. Подольск), Санкт-Петербургский (СПБАЭП) и Московский (МосАЭП) Атом-ЭнергоПроект, Физико-энергетический институт (ФЭИ, г. Обнинск).

Развивалась линейка универсальных компактных суперЭВМ. Созданный в 2011 году АПК-1М (модернизированный вариант разработанного ранее в ИТМФ аппаратно-программного комплекса АПК-1), в основе которого лежит универсальная компактная суперЭВМ терафлопсного класса, в октябре 2011 года также был представлен в Москве на Всероссийской выставке «Softool-2011», где проводился национальный конкурс «Лучший продукт года-2011». По итогам конкурса АПК-1М занял первое место в номинации «Суперкомпьютеры». АПК-1М более надежен, технологичен и компактен, чем его предшественник. Он предназначен для индивиду-



ОСНОВНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ:

производительность – **1,1 Тфлоп/с**
 максимальная потребляемая мощность – **не более 2,0 кВт**
 габариты – **700 × 600 × 320 мм**
 количество процессорных ядер – **128**
 оперативная память – **до 1024 Гбайт**

Универсальная компактная суперЭВМ АПК-1М



Награды в номинации
«Лучший продукт года-2011»
на Всероссийской выставке
«Softool-2011»

ила РКД комплекса АПК-3 литеру «О1» и рекомендовала его к серийному производству. С сентября 2011 года в ИТМФ начато мелкосерийное производство АПК-3.



**ОСНОВНЫЕ
ХАРАКТЕРИСТИКИ:**
производительность –
3,3 Тфлоп/с
габариты – **520 × 826 × 760 мм**
количество
процессорных ядер – **284**
оперативная память –
до 3072 Гбайт

Универсальная компактная
суперЭВМ АПК-3

В соответствии с проектом развития суперкомпьютерных технологий в ИТМФ продолжалась разработка программной платформы для высокопроизводительных вычислений, основанной на созданных в РФЯЦ-ВНИИЭФ компонентах системного программного обеспечения (СПО) и свободно распространяемых программных продуктах с открытым кодом. Созданное полнофункциональное СПО должно эффективно использовать ресурсы широкого спектра высокопроизводительных вычислительных систем: компактные суперЭВМ, мощные универсальные и гибридные суперЭВМ и неоднородные многомашинные комплексы. В 2011 году велись работы по созданию системы инсталляции и настройки СПО многопроцессорных вычислительных систем (МВС) СПРУТ, а также работы по созданию дистрибутива базового СПО многопроцессорных вычислительных систем петафлопсного класса. В состав дистрибутива входят следующие компоненты:

- базовая операционная система на основе GNU Linux;
- система инсталляции и настройки СПО многопроцессорных вычислительных систем СПРУТ;
- СПО для многопроцессорных вычислительных систем, разработанное специалистами РФЯЦ-ВНИИЭФ.

При создании СПО РФЯЦ-ВНИИЭФ использовались следующие разработки:

- Единая система управления заданиями неоднородного вычислительного комплекса многопроцессорных систем ЕСУЗ.
- Система пакетного запуска параллельных приложений JAM.
- Инструментальное средство сбора и анализа статистической информации счета программ пользователей STK.
- Параллельная иерархическая файловая система.
- Библиотеки единого файлового разреза ЕФР.

- Библиотека последовательных и параллельных решателей PMLP.
- Инструментальные средства исследования неустойчивости мультипроцессорных систем Noise Measurement Suite.
- Автоматическая система тестирования АСТ.
- Сервисные коммуникационные подсистемы sMAD и MСSM.
- Система сетевой загрузки операционной системы.
- Инструментальные средства отладки параллельных MPI-приложений ParalleIDB.
- Интеллектуальная автоматизированная система интеграции программных пакетов в единый расчетный комплекс PSS.
- Универсальное средство параллельной 3D визуализации ParaViz.
- Единая система управления и мониторинга аппаратно-программных компонентов мультипроцессорных вычислительных систем.

Дистрибутив и инсталлятор СПО предназначен для использования на переносимой флэш-памяти. Получено свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ «Единый дистрибутив СПО для высокопроизводительных вычислительных систем».

Сотрудники ИТМФ приняли непосредственное участие в подготовке проекта концепции по созданию отечественных технологий высокопроизводительных вычислений на базе суперЭВМ эксафлопсного класса (2012–2020 годы), который был одобрен на заседании Межведомственной рабочей группы по развитию индустрии суперкомпьютеров в Российской Федерации и их применению в промышленности. В проекте изложены актуальные задачи из различных областей имитационного моделирования и оценки производительности, требуемой для их решения. Сформулированы направления фундаментальных исследований в обла-

сти численных методов и вычислительных средств, которые необходимо выполнить для достижения и освоения экзафлопсной производительности. Определены основные направления работ по созданию суперЭВМ экзафлопсной производительности и ее компонентов, включая сроки и граничные значения параметров. Изложены мероприятия по подготовке кадров в области вычислительного моделирования и разработки вычислительных средств. Рассматриваются экономические параметры концепции, указаны направления, задачи и мероприятия, а также сроки и трудозатраты, необходимые для их реализации. Приведено обоснование целесообразности создания специализированных сегментов суперЭВМ на отечественной элементной базе.

Выполнены исследования перспективных гибридных вычислительных архитектур, реализующих принципиально новые дисциплины вычислений. Предложен и запатентован в качестве изобретения «Способ определения структуры гибридной вычислительной системы».

Создана полнотекстовая база данных результатов интеллектуальной деятельности РФЯЦ-ВНИИЭФ (БД РИД), предназначенная для накопления, сохранения, использования и передачи знаний о научной, исследовательской и инновационной деятельности института, решения информационных и аналитических задач, оценки результативности деятельности научной организации, выполняющей научно-исследовательские, опытно-конструкторские и технологические работы. Проанализирован архив документированной информации института, получившей разрешение на информационный обмен в 2002–2010 годах. Документы, не имевшие электронных версий, оцифрованы. Каждый документ содержит пол-

ный текст, реферат и метаданные, включающие информацию об авторах, тип документа, тематическое направление и другие параметры. Для систематизации архива документов используются 30 тематических направлений деятельности института. БД РИД размещена на отдельном сервере с операционной системой ALT Linux 5.0. В качестве базы данных, хранящей информацию обо всех документах сервера, используется MySQL-сервер. Разработан веб-сайт publ.vniief.ru, предоставляющий пользователям доступ к разделам «Научные статьи», «Доклады», «Публикации», «Тематический указатель». Раздел «Поисковые запросы» позволяет проводить полнотекстовый и аналитический поиск по всем документам сервера, обеспечивать просмотр выбранных данных. В настоящее время БД РИД содержит 4300 документов почти 4000 авторов. Ведется подготовка и обработка по ранее разработанным методикам документов 2011 года для интеграции их в базу данных.

На базу данных открытых публикаций «РФЯЦ-ВНИИЭФ» получено свидетельство о государственной регистрации.

Разработаны программно-технические средства защиты информации (ТСЗИ) – контроллеры защиты для высокоскоростных волоконно-оптических систем передачи данных, работающие на скоростях передачи от 100 Мбит/с до 100 Гбит/с. Опытные образцы контроллеров защиты апробированы в составе защищенных систем на скоростях 100 Мбит/с, 1 и 10 Гбит/с. По некоторым параметрам (точность контроля, габариты, масса) разработанные ТСЗИ превосходят зарубежные аналоги.

Разработано и сдано в опытную эксплуатацию (передано в страховой фонд программ ИТМФ) ПО системы учета и кон-

троля ядерных материалов (СУИК ЯМ) для типового хранилища ЯМ с разными правами доступа пользователей к информации. На основе сертифицированного ядра ACCORD-2005 создана новая версия ПО системы для хранилища делящихся материалов ПО «Маяк».

В 2011 году продолжались совместные работы с комиссариатом по атомной энергетике CEA/DAM (Франция) в рамках Соглашения о научно-техническом сотрудничестве в области безопасности ядерного оружия, заключенного между правительствами Франции и Российской Федерации. Одним из направлений работ было изучение точности и эффективности метода концентраций в упругопластических средах. В связи с этим выполнено моделирование ряда задач по верификации численных алгоритмов:

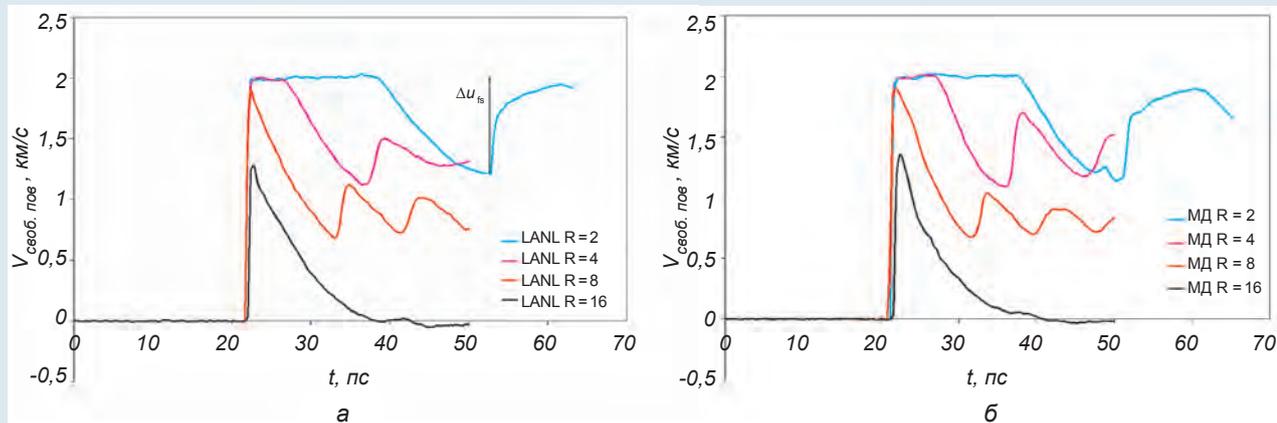
- распространение плоской ударной волны в упругопластической среде,
- распространение сдвиговых волн в упругой среде,
- сжатие тонкостенной бериллиевой оболочки,
- развитие одномодовых возмущений в упругой среде.

Постановка первых трех задач предоставлена французской стороной, последняя задача предложена ИТМФ. Другим направлением работ являлась разработка алгоритмов и программ для генерации начальных неструктурированных трехмерных сеток для инженерного анализа термонапряженно-деформированного состояния конструкций (прочность, деформация, распространение тепла, течение жидкости и т. д.). В процессе выполнения работ рассмотрены некоторые алгоритмы построения многоугольных и многогранных сеток в областях, описываемых аналитически. Даны оценки скорости построения, качества и симметрии получаемых двумерных и трехмерных пространственных сеток.

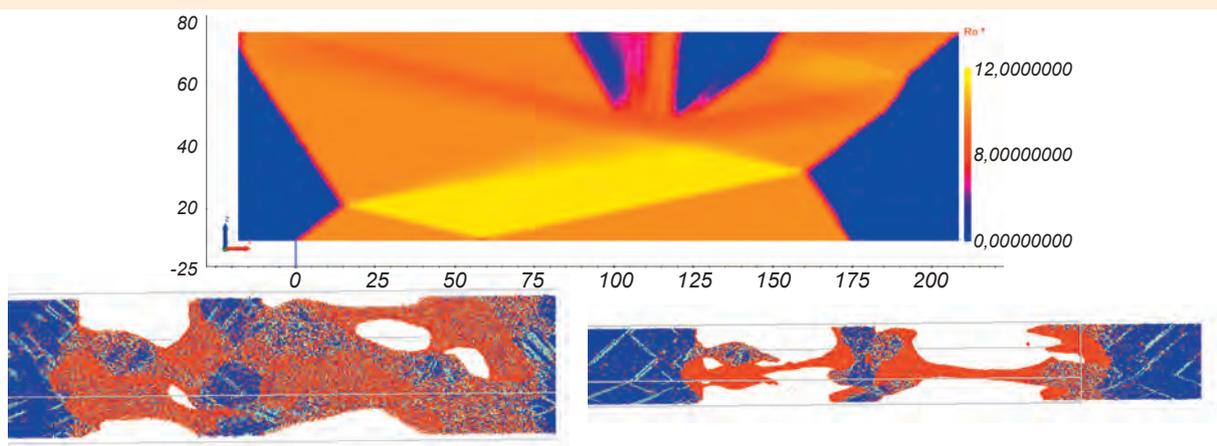
В рамках развития методов и программ молекулярно-динамического моделирования проведены расчеты откольных явлений в монокристалле меди

при различных ударно-волновых нагрузках. Результаты расчетов сравнивались с аналогичными результатами, полученными в Лос-Аламосской лаборато-

рии (США). За исключением отдельных моментов получено хорошее согласие.



Сравнительные графики поведения во времени скорости свободной поверхности:
а – результаты ЛАНЛ; б – результаты МД



Процесс развития откола и визуализация частиц

ИНСТИТУТ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ГАЗОДИНАМИКИ И ФИЗИКИ ВЗРЫВА (ИФВ)

В ИФВ в целях исследования и обеспечения безопасности ядерных реакторов разработана установка для получения и удержания кориума – расплава активной зоны ядерного реактора. Прототипный расплав образуется в результате реакции $2\text{Fe}_2\text{O}_3 + 3\text{Zr} = 3\text{ZrO}_2 + 4\text{Fe} + 2840 \text{ кДж/кг}$ в бетонной емкости объемом

$\sim 6 \cdot 10^{-2} \text{ м}^3$. В ходе эксперимента после иницирования реакции в химически активном составе (ХАС) массой 50 кг в полученный расплав с интервалом 5–10 с сбрасывали брикеты из того же ХАС массой 0,72 кг и плотностью $3,05 \text{ г/см}^3$ каждый. С использованием термопарной и пирометрической методик по-

казано, что созданный расплав массой $\sim 100 \text{ кг}$, имеющий температуру $2700\text{--}3200 \text{ К}$, обеспечивает тепловые потоки в стенки и ко дну бетонной емкости в пределах $100\text{--}150 \text{ кВт/м}^2$ на протяжении ~ 10 мин. Абляция стенок бетонной емкости составила в конце эксперимента $2,5\text{--}3 \text{ см}$.