

НАУЧНАЯ СЕССИЯ ОБЩЕГО СОБРАНИЯ ЧЛЕНОВ РАН
“75 ЛЕТ АТОМНОЙ ОТРАСЛИ. ВКЛАД АКАДЕМИИ НАУК”

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ
В АТОМНОЙ ОТРАСЛИ

© 2021 г. С. Н. Лебедев^{a,*}, Б. Н. Четверушкин^{b,**}, Р. М. Шагалиев^{c,***}

^aРоссийский федеральный ядерный центр “Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. академика Е.И. Забабахина”, Снежинск, Россия

^bФедеральный исследовательский центр “Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН”, Москва, Россия

^cРоссийский федеральный ядерный центр “Всероссийский научно-исследовательский институт ядерной физики”, Саров, Россия

*E-mail: lsn1955@mail.ru

**E-mail: office@keldysh.ru

***E-mail: r.m.shagaliev@vniief.ru

Поступила в редакцию 21.02.2021 г.

После доработки 27.02.2021 г.

Принята к публикации 27.02.2021 г.

Вычислительные и информационные технологии с самого момента своего появления играли и играют важную роль в решении проблем, стоящих перед атомной отраслью. Методы математического моделирования широко используются при проектировании ядерных реакторов, исследовании свойств материалов, в том числе их радиационной стойкости, изучении вопросов ядерной безопасности, проектировании АЭС. Информационные технологии востребованы также при моделировании процессов лазерного термоядерного синтеза. Особое внимание в статье уделяется применению вычислительных систем высокой производительности и алгоритмов высокопроизводительных вычислений в фундаментальных и прикладных исследованиях.

Ключевые слова: атомная отрасль, высокопроизводительные вычисления, искусственный интеллект.

DOI: 10.31857/S0869587321050145

Вычислительные и информационные технологии оказывали, оказывают и, несомненно, будут оказывать существенное влияние на развитие атомной отрасли. Обращаясь к истории, надо отметить, что ещё в конце 1940-х годов в Советском Союзе было сформировано несколько групп спе-

циалистов, в задачу которых входило проведение расчётов, связанных с созданием атомного и термоядерного оружия. Эти работы проводились в Математическом институте АН СССР (М.В. Келдыш, И.М. Гельфанд, А.А. Дородницын, Д.Е. Охочимский, К.А. Семендяев),



ЛЕБЕДЕВ Сергей Наркисович – член-корреспондент РАН, начальник научно-теоретического отделения РФЯЦ–ВНИИТФ им. академика Е.И. Забабахина. ЧЕТВЕРУШКИН Борис Николаевич – академик РАН, научный руководитель ФИЦ ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. ШАГАЛИЕВ Рашит Мирзагалиевич – доктор физико-математических наук, первый заместитель директора Института теоретической и математической физики РФЯЦ–ВНИИЯФ.

Геофизическом институте АН СССР (А.Н. Тихонов, А.А. Самарский), КБ-11 (Арзамас-16) (Н.Н. Боголюбов, В.С. Владимиров), в Лаборатории измерительных приборов АН СССР (в настоящее время НИЦ “Курчатовский институт” (С.Л. Соболев), Институте физических проблем АН СССР (И.М. Халатников, Н.С. Мейман), Лаборатории “В” (Обнинск) (Д.С. Блохинцев, Г.И. Марчук), Ленинградском отделении Математического института АН СССР (Л.В. Канторович).

Первоначально, до появления первых ЭВМ, расчёты велись на трофейных немецких электромеханических арифмометрах “Мерседес”. К этой трудоёмкой работе привлекались, как правило, молодые выпускники технических вузов. Результаты, полученные на одном арифмометре, передавались для продолжения на соседние. По сути, этот процесс стал прообразом современных параллельных вычислений.

Сегодня, по прошествии многих лет, трудно сказать, насколько расчёты с применением электромеханических устройств ускорили создание того или иного изделия, помогли найти наиболее оптимальное решение. Однако список математиков, удостоенных за участие в атомном проекте высокого звания Героя Социалистического Труда, позволяет судить о важности полученных результатов. Награды были удостоены академики М.В. Келдыш, А.Н. Тихонов, Н.Н. Боголюбов, Д.С. Блохинцев, С.Л. Соболев, А.А. Самарский, Г.И. Марчук, А.А. Дородницын, В.С. Владимиров, Д.Е. Охоцимский, Н.Н. Яненко.

Помимо решения конкретных задач укрепления обороноспособности страны, благодаря этим масштабным работам в кратчайшие сроки (5–7 лет) удалось создать базу современной прикладной математики и программирования как основы информационных технологий, до этого не существовавших. Следует отметить, что большинство результатов в силу закрытого характера исследований, получены учёными СССР и США независимо друг от друга. В те годы был заложен фундамент методологии математического моделирования, позволяющего получать предсказательные результаты для сложных технических систем. При этом сама модель, используемая для достижения конкретных результатов с применением доступных вычислительных средств, уточняется в процессе расчётов путём сопоставления данных вычислительного и натурального экспериментов, а также теоретических рассуждений [1].

Ещё одним результатом стало создание мощных коллективов специалистов в области прикладной математики и программирования, способных решать важные народно-хозяйственные задачи. В первую очередь, это относится к специалистам РЯЦ–ВНИИЭФ, РЯЦ–ВНИИТФ, а

также институтов, находящихся под научно-методическим руководством Академии наук. В частности, в настоящее время во РЯЦ–ВНИИЭФ создан и продолжает совершенствоваться пакет прикладных программ “Логос” для нужд машиностроения, авиационной промышленности, добычи углеводородного сырья и других промышленных секторов. “Логос” составляет успешную конкуренцию аналогичному зарубежному программному продукту, ранее доминировавшему на отечественном рынке.

Одна из фундаментальных научных и технологических проблем, стоящих перед человечеством, — овладение термоядерной энергией. Перспективным направлением этих исследований сегодня становится лазерный термоядерный синтез (ЛТС), идею которого в 1964 г. высказали советские учёные академики Н.Г. Басов и О.Н. Крохин. Суть их идеи заключается в нагреве небольшой сферической капли смеси дейтерия и трития мощным короткодействующим лазерным импульсом. При этом нагретая до высоких температур оболочка разлетается, а внутрь капли идёт ударная волна, сжимающая вещество в центре капли. В таком высокоплотном веществе создаются благоприятные условия для запуска и поддержания термоядерной реакции в масштабах, приемлемых для промышленной реализации. Проблемы, возникающие при математическом моделировании этой задачи, характерны и для ряда других направлений атомной отрасли, поэтому рассмотрим их подробнее.

На рисунке 1 показано развитие неустойчивостей в термоядерной мишени. Они в немалой степени влияют на сферичность сжатия и саму возможность осуществления термоядерной реакции. Неустойчивости бывают разных пространственных масштабов, и для их адекватного описания необходимы подробные пространственные сетки, состоящие из миллиардов и даже триллионов (10^9 – 10^{12}) пространственных узлов. Расчёты в такой постановке требуют применения вычислительных систем сверхвысокой производительности с одновременным использованием большого количества независимых вычислителей (процессоров, ядер). К сожалению, адаптация алгоритмов к архитектуре систем с экстремативным параллелизмом сталкивается с серьёзными трудностями. Нужны логически простые и в то же время эффективные алгоритмы. Это серьёзная фундаментальная проблема современной вычислительной математики. На её решение направлены усилия учёных и специалистов ведущих мировых держав.

Для увеличения эффективности расчётов используются разные приёмы. Один из возможных — сгущение пространственных сеток в областях больших градиентов интересующих параметров.

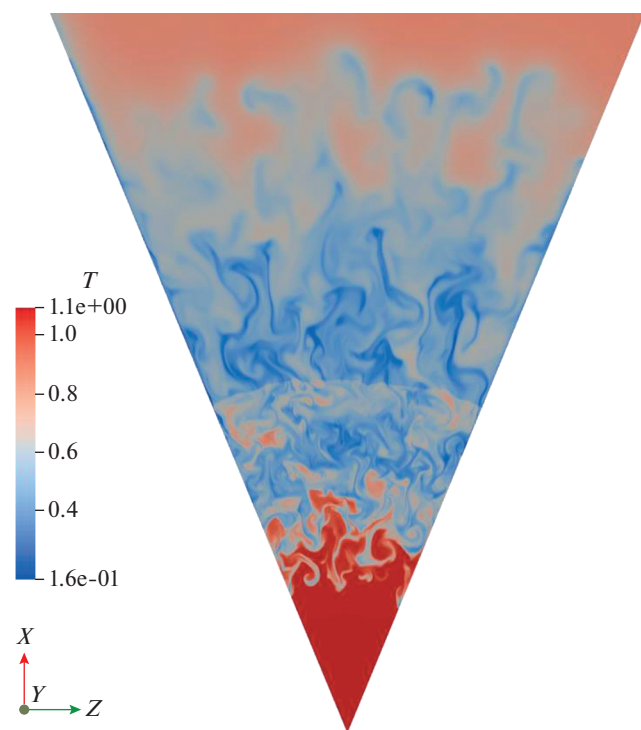


Рис. 1. Лазерный термоядерный синтез — пример моделирования в двумерной постановке, коротковолновые возмущения

На рисунке 2 отображён фрагмент полученной таким образом динамически сгущающейся сетки. Она не структурирована, поэтому перед математиками, помимо задачи создания алгоритмов, адаптируемых к архитектуре систем с массивным параллелизмом, возникает и другая трудность, характерная именно для неструктурированных сеток и связанная с необходимостью равномерной загрузки процессоров. Нужно также иметь в виду, что при построении адаптивных сеток особое внимание следует уделять соблюдению законов сохранения для основных газодинамических величин. Работы, связанные с моделированием задач ЛТС на высокопроизводительных вычислительных системах, активно ведутся коллективами ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, РФЯЦ–ВНИИЭФ, РФЯЦ–ВНИИТФ.

Перспективное направление лазерного термоядерного синтеза ассоциировано со сжатием рабочего вещества рентгеновским излучением, которое, в свою очередь, формируется при взаимодействии лазерного излучения с мишенью на основе тяжёлых металлов. Дополнительная вычислительная трудность здесь связана с чрезвычайно сложным моделированием теплового излучения. Уравнение, описывающее поле теплового излучения, помимо пространственных переменных, зависит от частоты и направления полёта фотонов. Как показывают оценки, адекватное

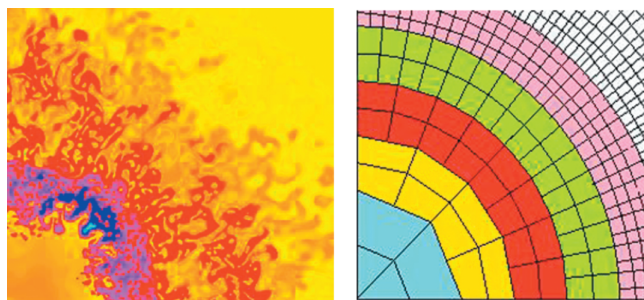


Рис. 2. Динамически адаптивная сетка

моделирование этого способа ЛТС требует применения вычислительных систем эксафлопсного класса [2, 3].

Ядерная энергетика активно использует математическое моделирование в качестве эффективного инструмента своего развития. При этом специалистам приходится решать многомерные интегро-дифференциальные уравнения переноса нейтронов с учётом сложной геометрии реактора. Кроме того, серьёзные трудности вызывает моделирование теплогидравлики реактора. В числе задач повышенной сложности — моделирование сценариев аварии на АЭС, а также распространения радиоактивных загрязнений в различных средах. Как и при моделировании ЛТС, математикам приходится сталкиваться с проблемами адаптации вычислительных алгоритмов к архитектуре систем с экстремальным параллелизмом, генерации неструктурированных сеток, к использованию динамически адаптивных сеток и других современных высокопроизводительных вычислительных технологий.

Важное направление исследований связано с изучением радиационной стойкости материалов. Основным инструментом моделирования в этой области служат методы молекулярной динамики. Для каждой частицы вещества решаются обыкновенные дифференциальные уравнения:

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = F_i,$$

где m_i и r_i — соответственно масса и координата частицы i , F_i — сила, определяемая потенциалом взаимодействия частиц.

Вычислительные проблемы здесь определяются по меньшей мере двумя факторами: во-первых, большим числом (10^9 и выше) частиц, используемых при моделировании; во-вторых, необходимостью обеспечения равномерной загрузки процессоров с учётом постоянно меняющейся концентрации частиц в той или иной области пространства.

Естественно, что алгоритмы молекулярной динамики — не единственный инструмент изуче-

ния свойств материалов. В качестве другого инструмента применимы технологии искусственного интеллекта. А входными данными, используемыми нейросетями для получения информации, интересующей исследователей, наряду с разнообразными данными натуральных экспериментов, могут служить результаты математического моделирования, полученные на основе методов молекулярной динамики.

Важная составляющая вычислительных и информационных технологий — визуализация данных моделирования. Для высокопроизводительных вычислений актуальными представляются сжатие данных при построении визуализационных картин и построение изоповерхностей при аппроксимации на неструктурированных сетках. Определённые трудности возникают при визуализации процессов в заранее не фиксированной пространственно-временной локализации.

Кратко охарактеризуем и другие области применения информационных технологий. Так, решение проблемы кибербезопасности, актуальное для атомной отрасли, имеет важное значение и для других производственных отраслей, а также сфер финансов и управления. С помощью информационных технологий эффективнее выявляются “окна уязвимости”.

Проблема оценки рисков и парирования непредвиденных ситуаций приобретает для атомной отрасли особую остроту в связи с крайне негативными последствиями техногенных катастроф [4, 5]. При выяснении влияния различных причин на возможность реализации неблагоприятного сценария перспективно использование многофакторного анализа. Нельзя преуменьшать роль и машинного обучения, позволяющего получать рекомендации при возникновении критической ситуации. При этом, так же как и в исследовании свойств материалов, важную роль играет разработка на основе математического моделирования достаточно большого числа виртуальных сценариев возможных техногенных катастроф. Следует подчеркнуть, что само такое моделирование невозможно без наличия высокопроизводительных систем и соответствующих вычислительных технологий.

Ещё одно перспективное направление исследований связано с созданием “умного реактора” (как и, например, “умной домны”, “умной скважины”) и ориентировано на применение технологий искусственного интеллекта для повышения эффективности работы сложных технических устройств. Эти технологии могут применяться и при планировании строительства АЭС. Возведение такого дорогостоящего объекта

зависит от ритмичной работы многих поставщиков. Необходимо также принимать во внимание наличие будущих потребителей электроэнергии, вырабатываемой АЭС. Большой объём анализируемых данных, необходимость учёта множества факторов требуют, как и при моделировании свойств материалов и сценариев техногенных катастроф, привлечения для решения таких задач вычислительных систем высокой производительности.

В заключение отметим, что здесь указаны далеко не все сферы атомной отрасли, в которых применение компьютерных технологий даёт существенный положительный эффект. Эта отрасль была, есть и будет самым заинтересованным и взыскательным потребителем достижений в области информационных технологий, прикладной математики и математического моделирования. Как и на заре существования атомной отрасли, сегодняшние её потребности служат мощным стимулом развития этих областей науки, но реализовать этот стимул невозможно без оснащения коллективов, ведущих такие работы, современной высокопроизводительной вычислительной техникой. Необходимо поддерживать и усиливать взаимодействие между научными институтами Госкорпорации “Росатом” и институтами, находящимися под научно-методическим руководством Российской академии наук.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Chetverushkin B.N.* Problems and Prospects of Supercomputer Technologies in the Near Future // Herald of the Russian Academy of Sciences. 2018. № 6. P. 448–453; *Четверушкин Б.Н.* Суперкомпьютерные технологии: проблемы и перспективы ближайшего будущего // Вестник РАН. 2018. № 12. С. 1083–1089.
2. *Ватулин В.В., Волкова К.А., Кибкало А.А. и др.* Численное исследование переноса рентгеновского излучения в вакуумной области // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Моделирование физических процессов. 2020. Вып. 2. С. 33–39.
3. *Рыкованов Г.Н., Лыков В.А., Лебедев С.Н. и др.* Численное моделирование мишеней с непрямым воздействием для термоядерного зажигания на мегаджоульных лазерных установках // 55th APS PPD, USA, Denver, 2013.
4. *Bagaev D., Grigoriev F., Kopyrin I. et al.* Improving parallel efficiency of a complex hydrogeological problem simulation in GeRA // Russian Supercomputing Days. 2019. Springer, Cham. P. 265–277.
5. *Большаков Л.А., Глотов В.Ю., Головизнин В.М. и др.* Валидация кода Cabaret-SC1 на экспериментах по водородной взрывобезопасности на АЭС // Атомная энергия. 2019. № 4. С. 193–204.