**Полный текст заявки**

**Основные данные проекта**

**Название Проекта**

Разработка вычислительных алгоритмов и программного обеспечения для численного решения задач диффузии нейтронов

**Научная дисциплина – основной код**

01-221 Математическое моделирование физических сред

**Научная дисциплина – дополнительные коды**

01-224 Математическое моделирование технических систем  
07-266 Суперкомпьютерное моделирование: инструментальные средства, прикладное программное обеспечение и сервисы  
07-281 Параллельное программирование: модели, языки, алгоритмы, инструментарий  
08-518 Компьютерные моделирование ядерных и термоядерных систем

**Ключевые слова**

Диффузия нейтронов, уравнение переноса нейтронов, многогрупповое диффузионное приближение, ядерный реактор, активная зона, спектральные задачи диффузии нейтронов, коэффициент размножения нейтронов, метод конечных элементов, схемы расщепления, fenics, slepc

**Аннотация, публикуемая на сайте Фонда (не более 0,5 стр.)**

Стремительное развитие атомной энергетики во второй половине прошлого века стимулировало разработку эффективных методов математического моделирования уравнения переноса нейтронов. Оценка последствий аварий на АЭС в мире поставила вопрос безопасности ядерных реакторов. В связи с этим актуальным и востребованным является разработка новых, более точных методов и алгоритмов расчета реакторов. Используемые в настоящее время инженерные программы зачастую написаны с использованием устаревающих технологий в области численных методов, вычислительных алгоритмов и программных продуктов.

При разработке программы будут учитываться последние достижения в области численных методов и алгоритмов, позволяющие обеспечить необходимую точность и быстродействие, включая применение современных технологий программирования. Использование универсальных уравнений переноса нейтронов и конечно-элементной аппроксимации позволит не ограничивать область применения, одновременно повысив точность вычислений за счет возможностей сгущения сетки, или повышением порядка конечных элементов. Используется свободное программное обеспечение и вычислительные библиотеки. Будет реализован графический интерфейс пользователя, что повысит наглядность и удобство пользования программы, снизит трудоемкость обучения. Использование параллельных технологий для расчетов на нескольких процессорах или на суперкомпьютерных вычислительных системах (кластерах).

**Сроки выполнения**

2 года.

**Название Проекта (на английском языке)**

Development of computational algorithms and software for numerical solution of neutron diffusion problems

**Ключевые слова (на английском языке)**

Neutron diffusion, neutron transport equation, multigroup diffusion approximation, nuclear reactor, active zone, spectral problems, effective multiplication factor, finite element method, splitting schemes, fenics, slepc

**Аннотация Проекта на английском языке**

The rapid development of nuclear power in the second half of the last century stimulate the development of effective methods for mathematical modeling of the neutron transport equation.

The assessment of the consequences of accidents at nuclear power plants in the world posed the question of the safety of nuclear reactors.

In connection with this, the development of new, more accurate methods and algorithms for the calculation of reactors is topical and in demand.

Currently used engineering programs are often written using old technologies in the field of numerical methods, computational algorithms and software products.

The development of the program will take into account the latest achievements in the field of numerical methods and algorithms, allowing to provide the necessary accuracy and speed, including the use of modern programming technologies.

The use of universal neutron transport equations and finite element approximation will not limit the field of application, while simultaneously increasing the accuracy of calculations due to grid thickening, or increasing the order of finite elements.

Free software and computational libraries are used.

A graphical user interface will be implemented, which will increase the visibility and user-friendliness of the program, reduce the complexity of training.

Use of parallel technologies for calculations on several processors or on supercomputer computer systems (clusters).

**Участники проекта**

**Руководитель**

Васильев Александр Олегович

**Организация**

**Краткое название:**

ФГАОУ ВО СВФУ им. М.К. Аммосова

**Полное название**

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова»

**Содержание проекта**

**Предполагает ли проект проведение экспедиций и/или полевых исследований**

нет

Содержание Проекта

**Описание фундаментальной научной задачи, на решение которой направлено исследование.**

Диффузионная теория является достаточно точной, чтобы обеспечить количественное понимание многих физических особенностей ядерных реакторов и, по сути, является рабочим вычислительным методом физики ядерных реакторов. Физические процессы, происходящие в ядерном реакторе, зависят от распределения нейтронного потока, математическое описание которого основывается на уравнении переноса нейтронов. В общем виде это уравнение имеет интегро-дифференциальную форму, а искомое распределение потока нейтронов зависит от времени, энергии, пространственных и угловых переменных.

Однако было замечено, что сложные уравнения, составляющие теорию, можно упростить до хорошо изученных диффузионных уравнений, которые достаточно точно описывают данные процессы и сохраняют приемлемую точность. Для практических расчетов ядерных реакторов, как правило, используют упрощенные формы уравнения переноса нейтронов. Наибольшее распространение для анализа реакторов получило многогрупповое диффузионное приближение, которое используется в большинстве инженерных расчетных программ.

**Актуальность исследования**

Стремительное развитие атомной энергетики во второй половине прошлого века стимулировало разработку эффективных методов математического моделирования переноса нейтронов. Математические модели играют важную роль в разработке эффективных ядерных реакторов, обеспечивают их безотказную работу и оценивают риск различных неисправностей и аварий. Ряд крупных аварий на атомных электростанциях в мире серьёзно отразились на перспективах ядерной энергетики в целом. Новые стандарты безопасности поставили перед инженерами и учеными важные цели о повышении качества моделирования физических процессов в ядерном реакторе. В связи с этим, разработка новых методов и алгоритмов расчета реакторов получила дополнительное ускорение.

Существующие инженерные программы разработаны, как правило, под один конкретный тип реакторной установки. Тенденция разработки программ применительно к конкретному типу реакторных установок сохраняется до настоящего времени. Используемые в этих программах подходы и приближения применимы для определенного типа установок и, как правило, заложены в саму структуру алгоритмов. Поэтому необходимо разрабатывать универсальные программы для расчетов реакторных установок различных типов без изменения структуры программы.

**Направление из Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации (при наличии) (выбор из справочника)**

9. Фундаментальные исследования, обусловленные внутренней логикой развития науки, обеспечивающие готовность страны к большим вызовам, еще не проявившимся и не получившим широкого общественного признания, возможность своевременной оценки рисков, обусловленных научно-технологическим развитием.

**Анализ современного состояния исследований в данной области (приводится обзор исследований в данной области со ссылками на публикации в научной литературе).**

При прикладном математическом моделировании в настоящее время используются математические модели, которые включают системы нелинейных, многомерных, нестационарных, связанных систем уравнений с частными производными. Для их численного исследования на современных компьютерах параллельной архитектуры привлекаются вычислительные алгоритмы.

Практическое применение математического моделирования проводиться на основе проблемно-ориентированных программных комплексов. Для численного моделирования процессов в ядерном реакторе существуют множество программ, например программы NURESIM, BISON и FALCON. Широкое распространение получили также универсальные программные комплексы Ansys, Abaqus, Comsol. Такие программы плохо подходят для фундаментальных научных исследований, которые связаны с использованиям новых математических моделей и алгоритмов. Стоит отметить их высокую стоимость, что является сдерживающим фактором при использовании таких программ.

В нашей стране есть попытки создания похожих систем:

1. Зизин М.Н. Концепция создания системного и прикладного программного

обеспечения реакторных расчётов. Атомная энергия, т.75, вып. 5, 1995.

1. L.Bolshov, V.Strizhov. SOCRAT – The System of Codes for Realistic Analysis of Severe Accidents, Proceedings of ICAPP ’06 Reno, NV USA, June 4-8, 2006 Paper 6439.

Планируемые работы по разработке прикладного универсального программного обеспечения с использованием современных вычислительных технологий соответствуют мировому уровню исследований в данной области.

**Цель и задачи Проекта**

Разработка вычислительных алгоритмов и программного обеспечения для численного решения задач диффузии нейтронов в многогрупповом диффузионном приближении в ядерном реакторе.

Задачи:

-Разработка вычислительных алгоритмов решения задач диффузии нейтронов;

-Создание современного, универсального программного обеспечения с поддержкой параллельных вычислений;

-Широкомасштабное тестирование вычислительных алгоритмов и про­граммного обеспечения.

**Научная новизна исследования, заявленного в Проекте (формулируется новая научная идея, обосновывается новизна предлагаемой постановки и решения заявленной проблемы)**

Научная новизна проекта состоит в построении и исследование спектральных задач, которые характеризуют динамические процессы в ядерном реакторе. Рассматривается alpha-спектральная задача, более приемлемая для характеристики динамических процессов реактора, что является относительно новым подходом в данном классе задач. Реализация оригинальной (собственной разработки) delta-спектральной задачи, решение которой позволяет получить априорную оценку для динамики нейтронного поля.

Расчеты реальных трехмерных конструкций требуют использования больших расчетных сеток, динамические процессы моделируются на больших временах. В силу сложности математической модели и применения больших расчетных сеток необходимо использовать современные многопроцессорные вычислительные системы. Успех достигается применением технологии расщепления, декомпозиции расчетной области на подобласти, итерационных методов решения систем алгебраических уравнений.

Разработка эффективного алгоритма автоматического выбора шага по времени при решении динамических задач диффузии нейтронов, который может улавливать особенности задач и уменьшить время расчетов при приемлемой погрешности.

Прикладное программное обеспечение разрабатывается на основе использования вычислительных платформ и библиотек свободного программного обеспечения научных исследований.

**Предлагаемые подходы и методы, и их обоснование для реализации цели и задачи исследований (Развернутое описание предлагаемого исследования; форма изложения должна дать возможность эксперту оценить новизну идеи Проекта, соответствие подходов и методов исследования поставленным целям и задачам, надежность получаемых результатов)**

Разрабатываются подходы к созданию современной и универсальной программы для численного решения задач диффузии нейтронов. Многие используемые инженерные программы для практических расчетов реакторов зачастую используют устаревающие технологии в области численных методов, вычислительных алгоритмов и программных продуктов.

Для ядерных реакторов пространственная сетка определяется разными материалами, составляющими активную зону, и по этой причине применяют методы, которые использует фиксированную сетку, и увеличивает ее точность без изменения этой сетки. Для повышения точности расчета нейтронного потока широкое применение нашли нодальные методы. Нодальные методы в ряде случаев можно связать со специальными вариантами конечно-элементной аппроксимации. Следует отметить, что более оправдано использование стандартных процедур повышения точности конечно-элементного приближения при численном решении краевых задач, связанное со сгущением расчетной сетки и использованием конечных элементов более высокой степени.

Процессы в ядерном реакторе существенно нестационарны. Для характеристики динамических процессов в ядерном реакторе, привлекаются решения некоторых спектральных задач. Основной характеристикой динамических процессов выступает минимальное собственное значение соответствующей спектральной задачи. Расчеты коэффициента k реактора на основе решения стандартной λ-спектральной задачи являются обязательными при разработке новой конструкции реакторной установки. Параметр k нельзя связать со стационарным решением данной задачи. Такого решения попросту не существует. Для более адекватной характеристики динамической природы реактора вместо k предлагается использовать спектральный параметр α, который напрямую не связан с k. Он определяется как фундаментальное собственное значение спектральной задачи (α-спектральная задача), которая связана с нестационарными уравнениями диффузии нейтронов. Исследование динамических процессов можно проводить на основе выделения симметричной и кососимметричной частей оператора переноса нейтронов. В этом случае возможно легко строить априорные оценки устойчивости в соответствующей норме при оценке оператора симметричной части снизу, проводить анализ используемых аппроксимаций по времени. Для этого решается частичная спектральная задача для нахождения главного собственного значения δ — δ спектральной задачи.

Для численного моделирования физических процессов, которые описываются дифференциальными уравнениями в частных производных, существует множество вычислительных пакетов (библиотек) различного уровня абстракции. Примером такой системы является вычислительная платформа на основе метода конечных элементов для научных и инженерных вычислений FEniCS. Основным достоинством FEniCS является упрощенная формулировка вариационного уравнения, близкая к математическим обозначениям. Вариационная задача получается из краевой задачи для дифференциальных уравнений в частных производных. Кроме автоматического решения линейной и нелинейной вариационной задачи, к особенностям вычислительного пакета FEniCS относятся:

-Автоматический контроль ошибок и адаптивность, возможность задания функционала, который должен минимизироваться с определенной точностью;

-Расширяемая библиотека метода конечных элементов: кроме стандартных конечных элементов, такие как лагранжевы, поддерживается разрывные методы Галеркина, векторные элементы и специальные типы, такие как Crouzeix-Raviart, Raviart-Thomas и др.;

-Высокопроизводительная линейная алгебра, несколько вариантов реализации линейной алгебры, такие как PETSc, Trilinos/Epetra, uBLAS и MTL4, а также библиотека для решения больших разреженных задач на собственные значения SLEPc, в которой параллельные вычисления поддерживаются пакетами PETSc, Trilinos/Epetra и SLEPc;

-Возможность проведения расчетов в одно-, двух- и трехмерных областях с использованием адаптивных сеток;

-Обработка результатов, возможность визуализации сетки, функций и полученных результатов, поддержка широко используемого пакета VTK;

-Возможность использования языков программирования Python и C++, подробные интерфейсы классов и функций для обоих языков.

**Ожидаемые результаты научного исследования и их научная и прикладная значимость.**

Построить и исследовать спектральные задачи, которые характеризуют динамические процессы в ядерном реакторе. Реализовать и решить новую спектральную задачу, которая связана с самосопряженной частью оператора поглощения-производства нейтронов.

Исследовать схемы аппроксимаций по времени для моделирования динамических процессов в ядерном реакторе. Разработать эффективный алгоритм автоматического выбора шага по времени при решении динамических задач диффузии нейтронов.

Разработать комплекс программ для решения задач диффузии нейтронов в ядерном реакторе.

**Общий план работ на весь срок реализации Проекта (форма представления информации должна дать возможность эксперту оценить реализуемость заявленного плана работы и риски его невыполнения; общий план реализации Проекта даётся с разбивкой по годам)**

1. Разработка новых высокоэффективных вычислительных алгоритмов для численного решения нестационарных задач для системы уравнений переноса нейтронов в многогрупповом диффузионном приближении в ядерных реакторах.

2. Разработка современного программного обеспечения для численного решения спектральных и нестационарных задач для системы уравнений переноса нейтронов в многогрупповом диффузионном приближении в ядерных реакторах.

**План работ на первый год реализации Проекта (план предоставляется с учетом содержания работ каждого из участников Проекта, предполагаемых поездок)**

Разработка новых высокоэффективных вычислительных алгоритмов для численного решения нестационарных задач для системы уравнений переноса нейтронов в многогрупповом диффузионном приближении в ядерных реакторах.

Рассматриваются спектральные задачи, которые могут характеризовать динамическое нейтронное поле ядерного реактора. В рамках многогруппового диффузионного приближения рассматривается стандартная λ-спектральная задача, которая связана с определением эффективного коэффициента размножения k. Значительно более информативной при рассмотрении динамических процессов является α-спектральная задача. Реализация и решение новой спектральной задачи (δ-спектральная задача), которая связана с самосопряженной частью оператора поглощения-производства нейтронов. Рассматривается численное решение двухмерных и трехмерных спектральных задач диффузии нейтронов в ядерном реакторе. Вычисления будут проводится на суперкомпьютере СВФУ Ариан Кузьмин.

Рассматриваются нестационарные задачи диффузии нейтронов. Исследуются различные схемы аппроксимаций по времени. Предлагается алгоритм выбора шага по времени при приближенном решении краевых задач для параболических уравнений. Рассматривается численное решение двухмерных и трехмерных нестационарных задач диффузии нейтронов в ядерном реакторе.

**Ожидаемые научные результаты за первый год реализации Проекта (форма изложения должна дать возможность провести экспертизу результатов и оценить возможную степень выполнения заявленного в Проекте плана работы)**

В результате выполнения работ по проекту планируется: участие в международных конференциях; публикация не менее 2 научных статей в рецензируемых изданиях из перечня ВАК или Web of Science/Scopus; государственная регистрация программы для ЭВМ;

**Имеющийся у коллектива научный задел по Проекту (указываются полученные результаты, разработанные программы и методы, экспериментальное оборудование, материалы и информационные ресурсы, имеющиеся в распоряжении коллектива для реализации Проекта)**

Высокая вероятность достижимости ожидаемых результатов базируется на имеющемся у исполнителя опыте численного моделирования динамики диффузии нейтронов, наличии развитой материально-технической и методической базы (суперкомпьютерный комплекс СВФУ, в том числе одна из самых мощных на Дальнем Востоке вычислительная система «Ариан Кузьмин»).

Наличием исследование процессов диффузии методом конечных элементов (С использованием программной библиотеки FEniCS). Исполнитель в конце октября представляет на защиту кандидатскую диссертацию на тему «Численное моделирование динамики диффузии нейтронов в ядерном реакторе.

Была разработана и зарегистрирована программа для компьютерного моделирования нейтронного потока, свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ №2016615005 (13 мая 2016).

**Публикации (не более 15) участников коллектива, включая Руководителя проекта, наиболее близко относящиеся к Проекту за последние 5 лет (для каждой публикации при наличии указать ссылку в сети Интернет для доступа эксперта к аннотации или полному тексту публикации)**

1. Avvakumov A. V., Strizhov V. F., Vabishchevich P. N., Vasilev A. O. Spectral properties of dynamic processes in a nuclear reactor //Annals of Nuclear Energy. — 2017. — Vol. 99. — P. 68–79. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306454916307903>

2. Avvakumov A. V., Strizhov V. F., Vabishchevich P. N., Vasilev A. O. Algorithms for Numerical Simulation of Non-stationary Neutron Diffusion Problems //International Conference on Numerical Analysis and Its Applications, Springer. — 2016. — P. 212—219. <https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-57099-0_21>

3. Avvakumov A. V., Strizhov V. F., Vabishchevich P. N., Vasilev A. O. Solution of the Neutronics Code Dynamic Benchmark by Finite Element Method //AIP Conference Proceedings / AIP Publishing. — Vol. 1773. — 2016. — P. 110003. <http://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.4965007>

4. Аввакумов А. В. Вабищевич П. Н., Васильев А. О., Стрижов В. Ф. Численное моделирование нестационарных задач диффу­зии нейтронов //Математическое моделирование. — 2017. — Т.29. — No. 7. — С. 44-62. <http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=mm&paperid=3866&option_lang=rus>

5. Вабищевич П. Н., Васильев А. О. Выбор шага при числен­ном решении краевых задач для параболических уравнений //Журнал вычислительной математики и математической фи­зики. — 2017. — Т. 57. — No. 5. — С. 842-853. <http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=zvmmf&paperid=10574&option_lang=rus>

6. Аввакумов А. В., Васильев А. О., Захаров П. Е. Программная реализация метода конечных элементов для уравнения диф­фузии нейтронов //Вестник Северо-Восточного федерального университета им. М. К. Аммосова. — 2015. — T. 4. — No. 48. —С. 35-44. <https://cyberleninka.ru/article/n/programmnaya-realizatsiya-metoda-konechnyh-elementov-dlya-uravneniya-diffuzii-neytronov>

7. Аввакумов А. В., Вабищевич П. Н., Васильев А. О. Метод ко­нечных элементов для уравнения диффузии нейтронов в гекса­гональной геометрии //Вестник Северо-Восточного федераль­ного университета им. М. К. Аммосова. — 2014. — Т. 11. — No.5. — С. 7-18. <https://cyberleninka.ru/article/n/metod-konechnyh-elementov-dlya-uravneniya-diffuzii-neytronov-v-geksagonalnoy-geometrii>

Сведения по организации экспедиции и/или полевых исследований в первый год реализации Проекта

нет