

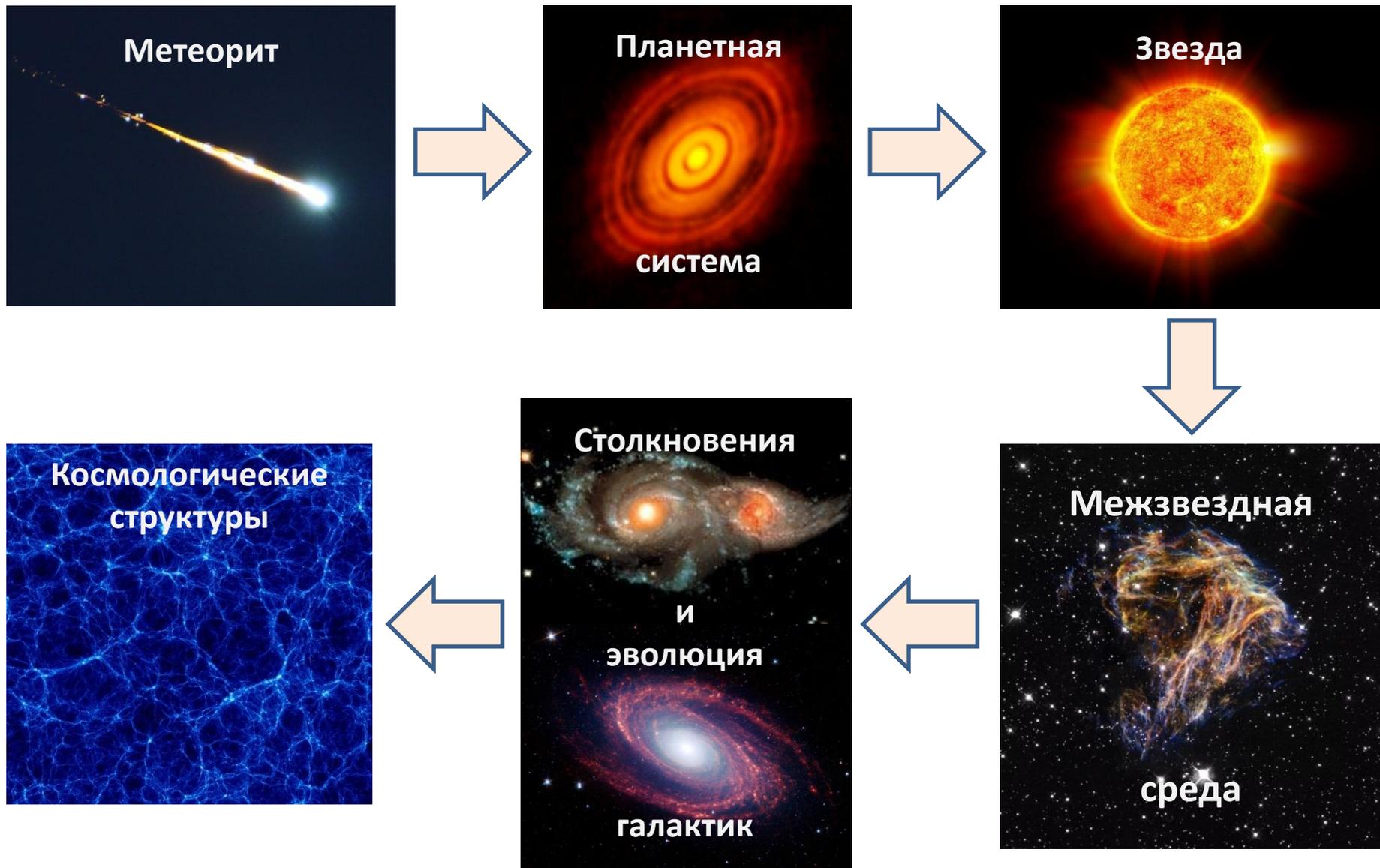
Математическое моделирование трехмерных гидродинамических процессов в самосогласованном гравитационном поле на суперЭВМ

**По материалам диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук
Специальность 05.13.18 – Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ**

**к.ф.-м.н. Куликов И.М.
ИВМиМГ СО РАН**

**1 ноября 2016 г.
Челябинск**

Актуальность



Цели работы

- Численная модель упруго-пластических деформаций с учетом фазовых переходов и определение области ее применимости
- Математическая модель гидродинамических процессов с учетом самосогласованного гравитационного поля
- Численный метод решения систем гиперболических уравнений и его эффективная программная реализация
- Объяснение механизмов протекания гидродинамических процессов на различных масштабах: крупномасштабные космологические структуры, галактики и межзвездная среда, взаимодействие метеоритов с поверхностью планет
- Численная гидродинамическая модель для описания эволюции астрономических объектов на суперЭВМ

Сильные и слабые стороны численных методов

Бессеточный SPH метод

- Точное нахождение потенциала
- Галилеева инвариантность
- Пространственная адаптация
- Постоянное разрешение
- Произвольная геометрия задачи
- Адаптация на многомерный случай

- Проблема разрывов
- Проблема радиуса сглаживания
- Искусственная вязкость
- Подавление неустойчивости
- Малый градиент плотности
- Масштабируемость

Сеточные методы (в т.ч. AMR)

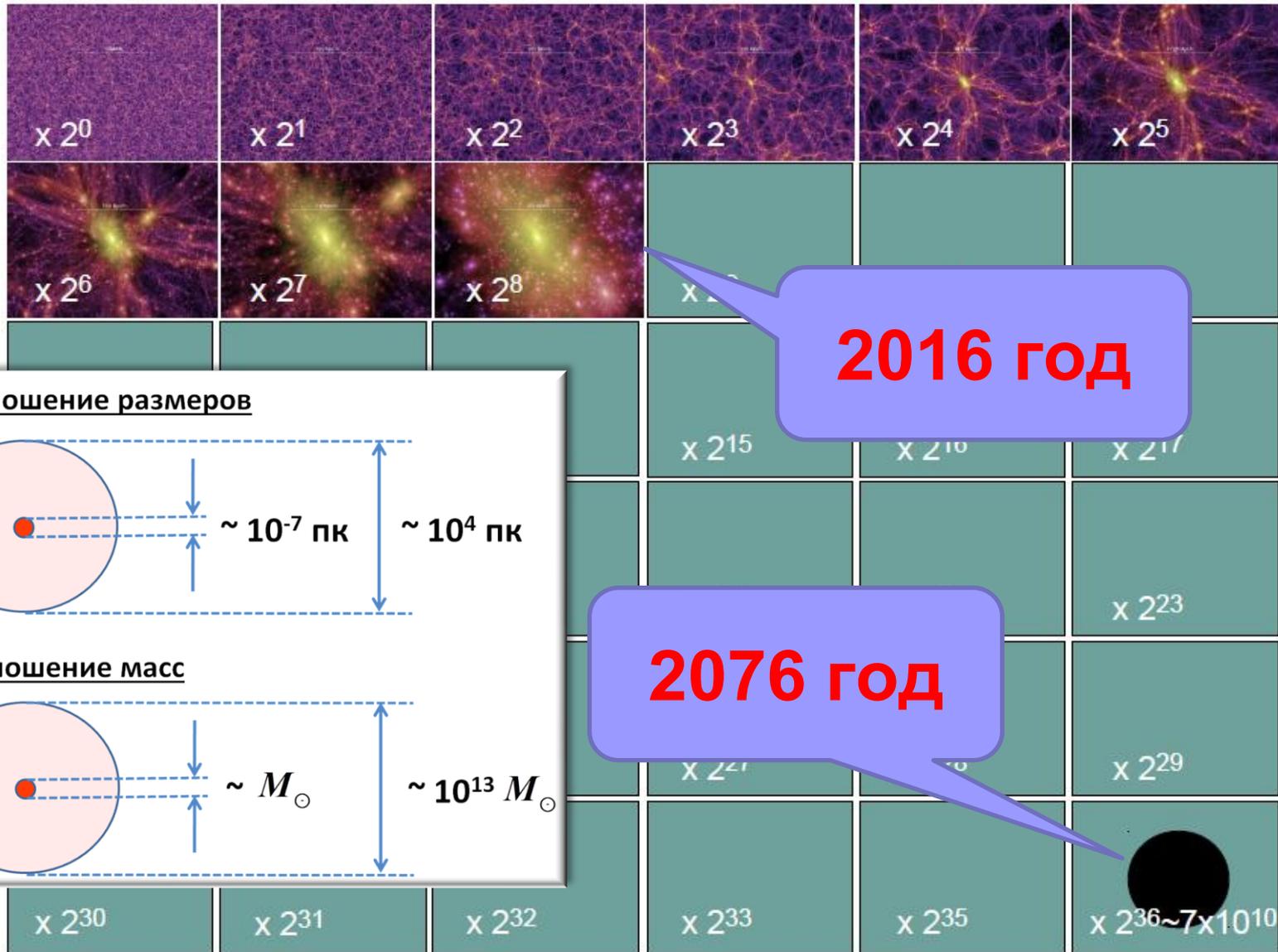
- Воспроизведение разрывов
- Произвольные градиенты плотности
- Слабая устойчивость методов
- Пространственная адаптация
- Отсутствие схемных параметров
- Воспроизведение турбулентности

- Ограничение разрешения сеткой
- Сеточные эффекты
- Проблема перехода между сетками
- Проблема инвариантности
- Ограничения по геометрии задачи
- Масштабируемость (в случае AMR)

Лагранжево-эйлеровый подход

- Классические ALE подход (BETHÉ-Hydro, Murphy & Burrows, 2008)
 - Комбинация SPH и метода Годунова (GIZMO, Hopkins, 2015)
 - Технология подвижных сеток (AREPO, Springel, 2010)
 - Вычисление на лагранжевой сетке в эйлеровых координатах в задачах теории упругости (Годунов, 2010)
 - Разделение операторов на адвективный перенос (лагранжев этап) и работу сил (эйлеров этап) на регулярной сетке (Куликов, 2004)
-
- Воспроизведение разрывов
 - Произвольные градиенты плотности
 - Слабая устойчивость методов
 - Пространственная адаптация
 - Отсутствие схемных параметров
 - Воспроизведение турбулентности
 - Ограничение разрешения сеткой
 - Сеточные эффекты
 - ~~Проблема перехода между сетками~~
 - Проблема инвариантности
 - ~~Ограничения по геометрии задачи~~
 - ~~Масштабируемость (в случае AMR)~~

Проблема разномасштабности



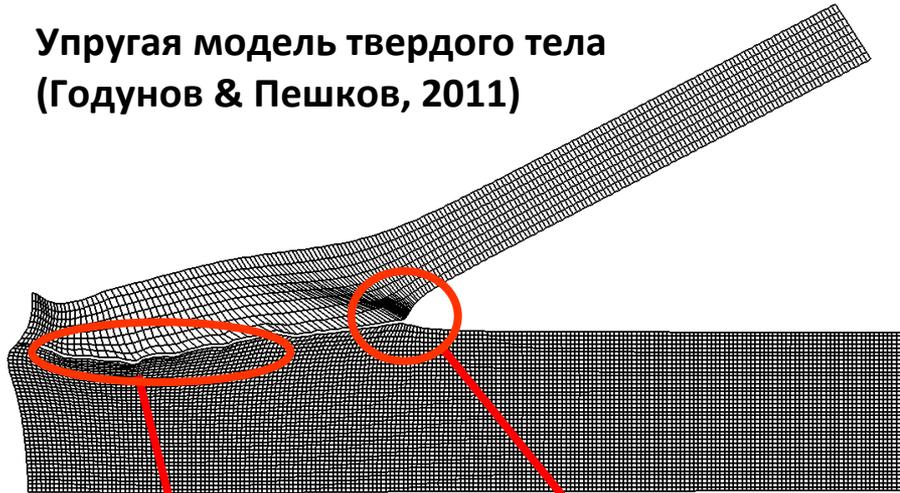
Использование гибридных суперЭВМ

Rank	Site	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	National Supercomputing Center in Wuxi China	Sunway TaihuLight - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway NRPC	10,649,600	93,014.6	125,435.9	15,371
2	National Super Computer Center in Guangzhou China	Tianhe-2 (MilkyWay-2) - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 31S1P NUDT	3,120,000	33,862.7	54,902.4	17,808
3	DOE/SC/Dark Ridge National Laboratory, United States	Titan - Cray XK7, Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini interconnect, NVIDIA K20x Cray Inc.	560,640	17,590.0	27,112.5	8,209
4	DOE/NNSA/LLNL, United States	Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C	1,572,864	17,173.2	20,132.7	7,890
5	RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS), Japan	interconnect Fujitsu				
6	DOE/SC/Argonne National Laboratory, United States	Mira - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz, Custom IBM	786,432	8,586.6	10,066.3	3,945
7	DOE/NNSA/LANL/SNL, United States	Trinity - Cray XC40, Xeon E5-2698v3 16C 2.3GHz, Aries interconnect Cray Inc.	301,056	8,100.9	11,078.9	
8	Swiss National Supercomputing Centre (CSCS), Switzerland	Piz Daint - Cray XC30, Xeon E5-2670 8C 2.600GHz, Aries interconnect, NVIDIA K20x Cray Inc.	115,984	6,271.0	7,788.9	2,325
9	HLRS - Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart, Germany	Hazel Hen - Cray XC40, Xeon E5-2680v3 12C 2.5GHz, Aries interconnect Cray Inc.	185,088	5,640.2	7,403.5	
10	King Abdullah University of Science and Technology, Saudi Arabia	Shaheen II - Cray XC40, Xeon E5-2698v3 16C 2.3GHz, Aries interconnect Cray Inc.	196,608	5,537.0	7,235.2	2,834

Гибридные суперкомпьютеры

Описание задачи «о сварке взрывом»

Упругая модель твердого тела
(Годунов & Пешков, 2011)

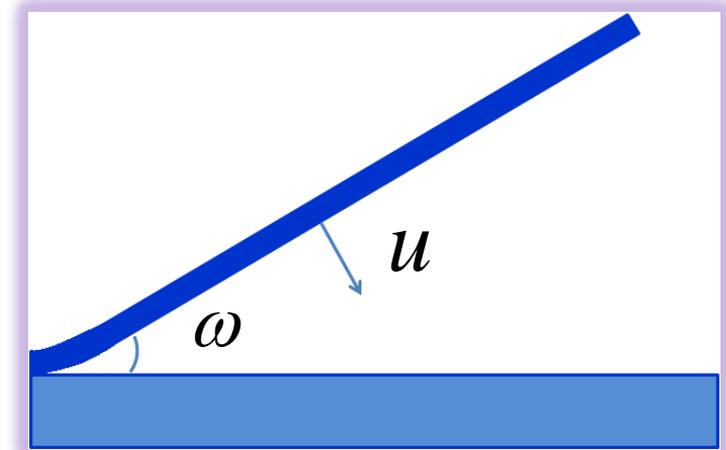


Отсутствие
волнообразования в
численной модели



Выход модели за
область
применимости

Постановка задачи



Задачи

1. Разработка модели «склейки» материалов на границе контакта, допускающей процесс волнообразования
2. Разработка модели фазовых переходов (твердое тело/жидкость/газ), позволяющей воспроизведение кумулятивной струи

Уравнения для описания упруго-пластической среды с учетом фазовых переходов (твердое тело/жидкость/газ)

$$\left. \begin{array}{l}
 u^i \times \left\{ \frac{\partial \rho_0 u_i}{\partial t} - \frac{\partial \rho_0 E_{c_j^i}}{\partial \xi^j} = 0 \right. \\
 E_{c_j^i} \times \left\{ \frac{\partial C_j^i}{\partial t} - \frac{\partial u^i}{\partial \xi^j} = 0 \right. \\
 E_S \times \left\{ \frac{\partial \rho_0 S}{\partial t} = \frac{\tau_i^{-1} c_i E_{c_i}}{E_S} \right. \\
 E_{c_i} \times \left\{ \frac{\partial c_i}{\partial t} = -\frac{c_i}{\tau_i} \right.
 \end{array} \right\}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho_0 \frac{u^i u_j}{2} + \rho_0 E \right] - \frac{\partial}{\partial \xi^j} \left[\rho_0 u^i E_{c_j^i} \right] = 0$$

$$E = E(C, S, c_i)$$

$$\begin{array}{l}
 H = \rho_0 \frac{u^i u_i}{2} + E + C_j^i E_{c_j^i} \\
 H^j = \rho_0 u^j E_{c_j^i} \\
 E_{c_j^i} = \pi_i^j
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{l}
 \frac{\partial H_{u_i}}{\partial t} - \frac{\partial H_{u_i}^j}{\partial \xi^j} = 0 \\
 \frac{\partial H_{\pi_i^k}}{\partial t} - \frac{\partial H_{\pi_i^k}^j}{\partial \xi^j} = 0
 \end{array}$$

Задача Римана

$$\begin{pmatrix} \rho_0 \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & [E_{c_i^k c_j^k}]^{-1} \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \boldsymbol{\pi}^{[k]} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ \mathbf{I} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi^j} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \boldsymbol{\pi}^{[k]} \end{pmatrix} = \mathbf{0}$$

$$[E_{c_i^k c_j^k}]^{-1} = \mathbf{Z} \begin{pmatrix} \lambda_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^2 \end{pmatrix} \mathbf{Z}^T = \Lambda^2 \quad (E_{c_i^k c_j^k} > 0)$$

$$\Lambda \frac{\partial}{\partial t} (\Lambda \boldsymbol{\pi}^{[k]} + \mathbf{u}) - \frac{\partial}{\partial \xi^j} (\Lambda \boldsymbol{\pi}^{[k]} + \mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad \Lambda \frac{\partial}{\partial t} (\Lambda \boldsymbol{\pi}^{[k]} - \mathbf{u}) + \frac{\partial}{\partial \xi^j} (\Lambda \boldsymbol{\pi}^{[k]} - \mathbf{u}) = \mathbf{0}$$

Уравнение состояния среды с учетом фазовых переходов

1. Энергия упруго-пластической среды (на единицу массы)

$$\frac{u_1^2 + u_2^2 + u_3^2}{2} + \frac{c_0^2}{\gamma(\gamma-1)} \sigma(S) \left(\det \sqrt{CC^T} \right)^{-(\gamma-1)} + \frac{c_*^2}{\gamma} \det \sqrt{CC^T} + \underbrace{c_1^2 \operatorname{tr} \left[\sqrt{CC^T} - \frac{1}{3} \operatorname{tr} \left(\sqrt{CC^T} \right) I \right]^2}_{}$$

2. Энергия жидкой среды (на единицу массы)

$$\frac{u_1^2 + u_2^2 + u_3^2}{2} + \frac{c_0^2}{\gamma(\gamma-1)} \sigma(S) \left(\frac{1}{3} \operatorname{tr} (CC^T) \det \sqrt{CC^T} \right)^{-(\gamma-1)} + \underbrace{\frac{c_*^2}{\gamma} \frac{1}{3} \operatorname{tr} (CC^T) \det \sqrt{CC^T}}_{}$$

3. Энергия газовой среды (на единицу массы)

$$\frac{u_1^2 + u_2^2 + u_3^2}{2} + \underbrace{\frac{c_0^2}{\gamma(\gamma-1)} \sigma(S) \left(\frac{1}{3} \operatorname{tr} (CC^T) \det \sqrt{CC^T} \right)^{-(\gamma-1)}}_{}$$

4. Энергия потока частиц (на единицу массы)

$$\frac{u_1^2 + u_2^2 + u_3^2}{2} + \sigma(S)$$

Условия корректности уравнения состояния $E_{c_i^j c_l^k} > 0$

$$C = U \begin{pmatrix} k_1 & 0 & 0 \\ 0 & k_2 & 0 \\ 0 & 0 & k_3 \end{pmatrix} \Omega$$

$$UU^T = \Omega\Omega^T = I$$

$$1) \left\{ E_{k_i k_j} \right\} > 0 \quad 2) \frac{E_{k_i} - E_{k_j}}{k_i - k_j} > 0 \quad 3) \frac{E_{k_i} + E_{k_j}}{k_i + k_j} > 0$$

1. Условия корректности модели упруго-пластической среды

$$\max_i \left(\frac{1 - \frac{2c_1^2 \gamma}{c_0^2 k_i}}{(k_1 k_2 k_3)^{-\gamma}} \right) < \sigma(S) < \min_i \left(\frac{1 + \frac{2c_1^2 \gamma}{3c_0^2 k_i} \left(1 - \frac{2k_i}{k_j + k_l} \right)}{(k_1 k_2 k_3)^{-\gamma}} \right)$$

2. Условия корректности модели жидкой среды

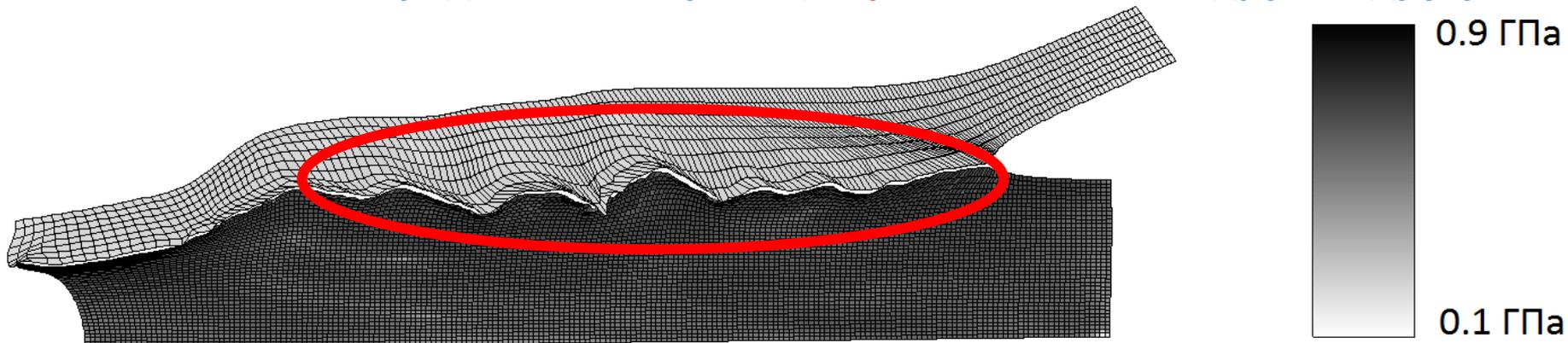
$$0 < \sigma(S) < \min_i \left(\left(k_1 k_2 k_3 \frac{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2}{3} \right)^\gamma \right)$$

3 и 4. Условия корректности моделей газа и потока частиц

$$\sigma(S) > 0$$

Моделирование процесса волнообразования

Передняя часть границ «проскальзывают» друг по другу



После малого времени τ с момента контакта границы «склеиваются»

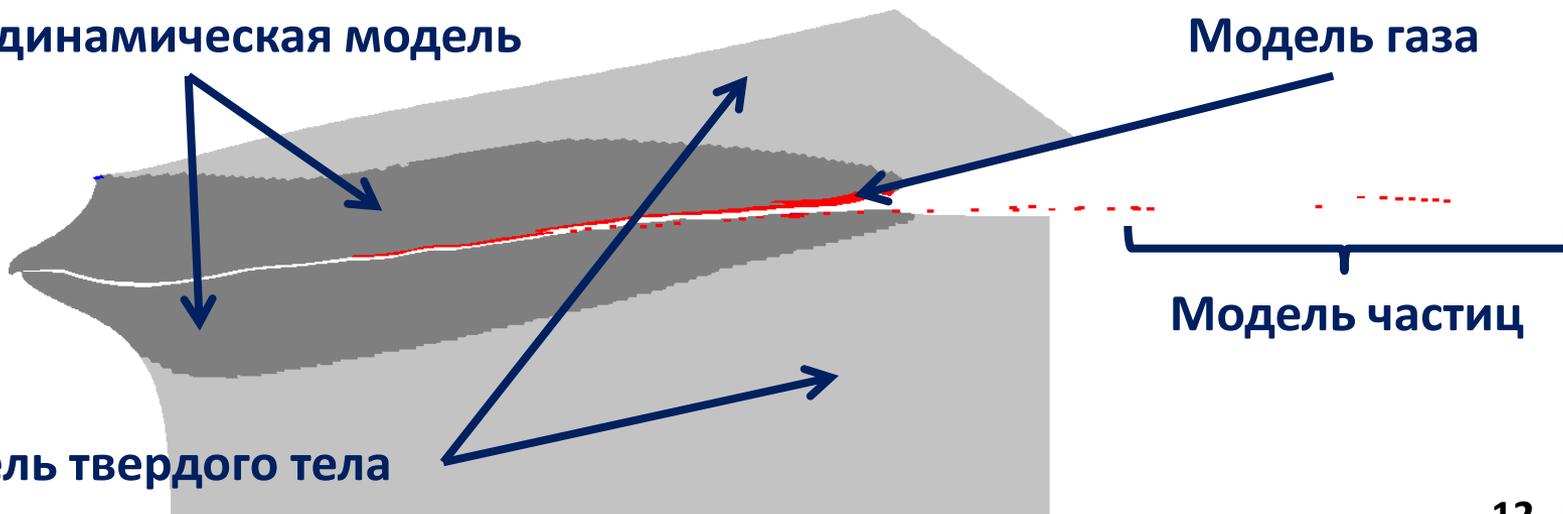
Моделирование фазовых переходов

Гидродинамическая модель

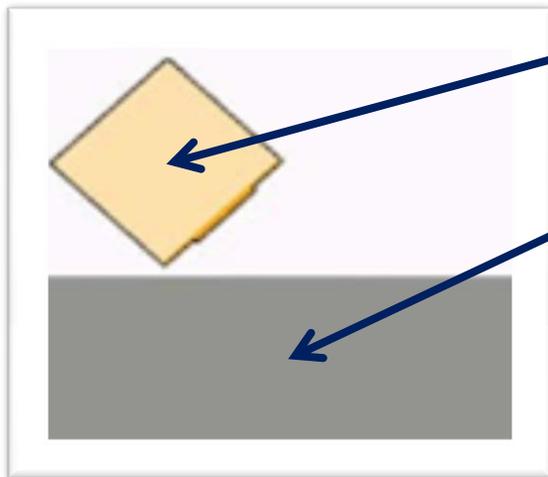
Модель газа

Модель твердого тела

Модель частиц



Ранняя стадия взаимодействия метеоритов с поверхностью планет*



Оливин

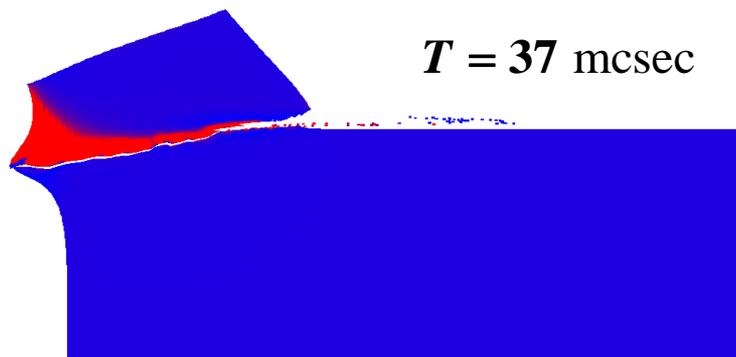
$$\rho_0 = 3.27 \text{ g}\times\text{cm}^{-3} \quad c_0 = c_* = 7.4 \text{ km}\times\text{sec}^{-1} \quad c_1 = 5.3 \text{ km}\times\text{sec}^{-1}$$

Вулканогенно-осадочный слой

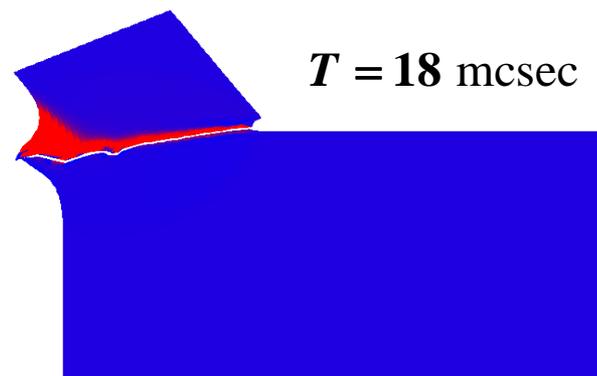
$$\rho_0 = 2.3 \text{ g}\times\text{cm}^{-3} \quad c_0 = c_* = 5 \text{ km}\times\text{sec}^{-1} \quad c_1 = 2.9 \text{ km}\times\text{sec}^{-1}$$

(*) Richardson J., Jay Melosh H., Artemeiva N., Pierazzo E. Impact Cratering Theory and Modeling for the Deep Impact Mission: From Mission Planning to Data Analysis // Space Science Reviews. 2005. V. 117, I. 1. P. 241-267.

Скорость столкновения $u = 1 \text{ км/с}$



Скорость столкновения $u = 7 \text{ км/с}$



Твердое тело

Жидкость

Газ

Результаты моделирования соответствуют работе (*)

Задача центрального столкновения галактик

«Движение галактик в плотных скоплениях превращает столкновения между ними в важный эволюционный фактор»

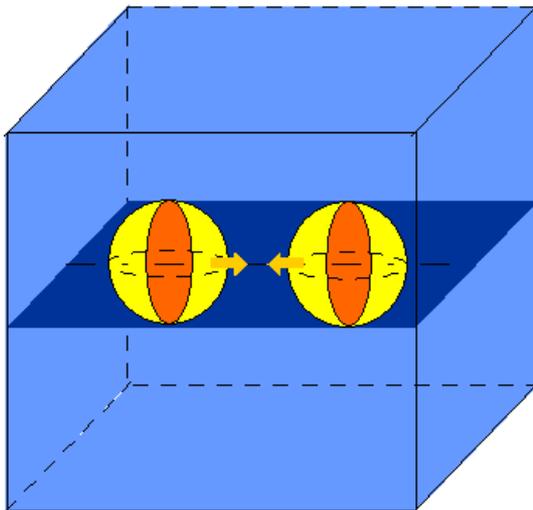
Тутуков А.В.

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho \vec{v} \\ \rho E \\ \rho \varepsilon \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \rho \vec{v} \\ \rho \vec{v} \vec{v} \\ \rho E \vec{v} \\ \rho \varepsilon \vec{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\nabla p - \rho \nabla \Phi \\ -\nabla \cdot (p \vec{v}) - (\rho \vec{v}, \nabla \Phi) - Q \\ -(\gamma - 1) \rho \varepsilon \nabla \cdot (\vec{v}) - Q \end{pmatrix}$$

$$p = (\gamma - 1) \rho \varepsilon$$

$$\Delta \Phi_{self} = 4\pi G \rho$$

$$\Phi = \Phi_{self} + \Phi_0$$



- Газ (50% массы)
- Звезды (50 % массы)

Бесстолкновительная компонента: аналитическая

Кубическая область $(64 \text{ кпк})^3$

$$|E_{grav}| \approx 0.1 E_{kin}$$

Трёхмерные декартовы координаты

Равномерная расчетная эйлерова сетка

Краевые условия для уравнений газовой динамики
free outflow

Краевые условия для уравнения Пуассона

фундаментальное решение уравнения Лапласа

Модель бесстолкновительной компоненты галактик (задача центрального столкновения галактик)

Недостатки классической модели N-тел

- Ограничение по числу частиц при прямом моделировании
- Проблема корректного выбора ядра сглаживания (PIC)
- Необходимость минимального числа частиц в ячейке (PIC)
- Необходимость балансировки загрузки
- Невозможность реализации термодинамически согласованного фазового перехода между газом и звездами

Гидродинамические альтернативы

- Газовая динамика с нулевым давлением (*проблема модели фазового перехода, столкновение волн в виде δ -функции*)
- Модель бесстолкновительной гидродинамики* (*на основе первых моментов бесстолкновительного уравнения Больцмана*)

* Mitchell, Vorobyov, Hensler, MNRAS, 2013

Модель бесстолкновительной компоненты галактик (задача центрального столкновения галактик)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + a_i \frac{\partial f}{\partial v_i} = 0$$

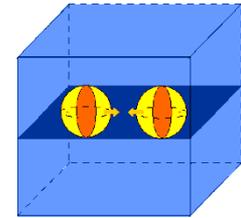
$$d^3v = dv_x dv_y dv_z$$

$$\rho = \int m f d^3v$$

$$u = \rho^{-1} \int m f v d^3v$$

$$\sigma_{ij}^2 = \rho^{-1} \int m f (v_i - u_i)(v_j - u_j) d^3v = \sigma_{ji}^2$$

1. Важно движения кластера, а не отдельной частицы
2. Отсутствуют теплопроводные эффекты (свойство почти всех астрофизических задач)
3. Дисперсия скоростей меньше квадрата скорости



$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho \vec{u} \\ \rho E_{ij} \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \rho \vec{u} \\ \rho \vec{u} \vec{u} \\ \rho E_{ij} \vec{u} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\nabla(\rho \sigma^2) - \rho \nabla \Phi \\ -\nabla \cdot (2\rho \sigma_{ij}^2 \vec{u}) - (2\rho \vec{u}, \nabla \Phi) \end{pmatrix}$$

$$\rho E_{ij} = \rho \sigma_{ij}^2 + \rho u_i u_j$$

$$\Delta \Phi_{\odot} = 4\pi G \rho$$

$$\Phi = \Phi_{\odot} + \Phi_{gas}$$

1. Mitchell, Vorobyov, Hensler, MNRAS, 2013 (диагональный тензор дисперсии скоростей)
2. Kulikov, ApJS, 2014 (полный симметричный тензор дисперсии скоростей)

Задача столкновения галактик различных типов в полной модели

Гидродинамическая компонента

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho_i \\ \rho \vec{v} \\ \rho E \\ \rho \varepsilon \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \rho \vec{v} \\ \rho_i \vec{v} \\ \rho \vec{v} \vec{v} \\ \rho E \vec{v} \\ \rho \varepsilon \vec{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S - D \\ s_i + \frac{\rho_i}{\rho} (S - D) \\ -\nabla p - \rho \nabla \Phi + S \vec{u} - D \vec{v} \\ -\nabla \cdot (p \vec{v}) - (\rho \vec{v}, \nabla \Phi) - \Lambda + \Gamma - \varepsilon \frac{D}{\rho} \\ -(\gamma - 1) \rho \varepsilon \nabla \cdot (\vec{v}) - \Lambda + \Gamma - \varepsilon \frac{D}{\rho} \end{pmatrix}$$

$$\rho E = \rho \varepsilon + \frac{\rho v^2}{2} \quad p = (\gamma - 1) \rho \varepsilon$$

Бесстолкновительная компонента

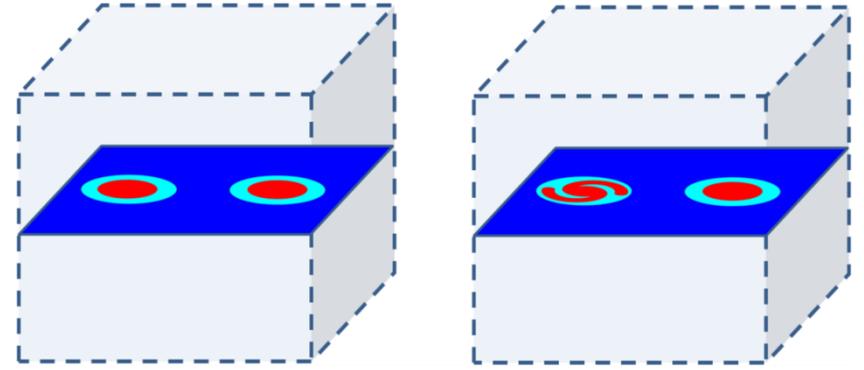
$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} n \\ n \vec{u} \\ n W \\ \sigma_{\xi\xi}^2 \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} n \vec{u} \\ n \vec{u} \vec{u} \\ n W \vec{u} \\ \sigma_{\xi\xi}^2 \vec{u} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D - S \\ -\nabla \sigma^2 - n \nabla \Phi - S \vec{u} + D \vec{v} \\ -\nabla \cdot (\sigma_{ij}^2 \vec{u}) - (n \vec{u}, \nabla \Phi) - \Gamma + \varepsilon \frac{D}{\rho} \\ -2 \sigma_{\xi\xi}^2 \nabla \cdot \vec{u} - \Gamma + \varepsilon \frac{D}{3\rho} \end{pmatrix}$$

$$nW = \frac{n u^2}{2} + \frac{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{yy}^2 + \sigma_{zz}^2}{2}$$

Уравнение Пуассона

$$\Delta \Phi = 4\pi G (\rho + n)$$

**Термодинамически
согласованная
система**



Звздообразование (Katz, 1996):

$$\left(T < 10^4 \text{ K}, \nabla \cdot \vec{v} < 0, \rho > 1.64 \frac{M_{\odot}}{pc^{-3}} \right) \Rightarrow D = C \rho^{3/2} \sqrt{\frac{32G}{3\pi}}$$

Сверхновые (Springel & Hernquist, 2003):

$$S = \beta C n^{3/2} \sqrt{\frac{32G}{3\pi}} \quad \Gamma = 10^{51} \frac{M^{SN}}{M_{\odot}} \text{ erg}$$

Охлаждение (Sutherland & Dopita, 1993):

$$\Lambda \approx 10^{-22} n_H^2 \text{ cm}^{-3} \text{ erg}$$

Образование H₂ (Khoperskov, 2013):

$$\frac{dn_{H_2}}{dt} = R_{gr}(T) n_H (n_H + 2n_{H_2}) - (\xi_H + \xi_{diss}) n_{H_2}$$

Равновесная вращающаяся конфигурация

Задача образования спиральных рукавов дисковых галактик (модель изотермической гравитационной гидродинамики*)

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho \vec{v} \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \rho \vec{v} \\ \rho \vec{v} \vec{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\nabla p - \rho \nabla \Phi \end{pmatrix} \quad p = \rho RT \quad \Delta \Phi_{self} = 4\pi G \rho$$

$$\Phi = \Phi_{self} + \Phi_0$$

Механизм образования спиралей



Гало: **аналитическая функция**

Вариация отношения массы диска к массе Гало

Кубическая область **(32 кпк)³**

Трехмерные декартовы координаты

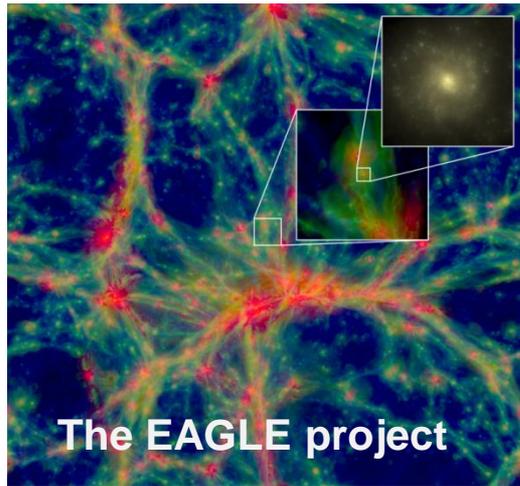
Равномерная расчетная эйлера сетка

Краевые условия для уравнений газовой динамики **free outflow**

Краевые условия для уравнения Пуассона **первые моменты мультипольного разложения**

(*) Vorobyov, Recchi, Hensler, A&A, 2012

Образование галактик в контексте космологических структур (постановка начальных условий для задач эволюции галактик)



Компоненты:

- Гидродинамическая компонента
- Бесстолкновительная компонента (звезды и темная материя)

Процессы:

- Звездообразование и эффект от сверхновых
- Химические реакции [2]
- Охлаждение/нагревание

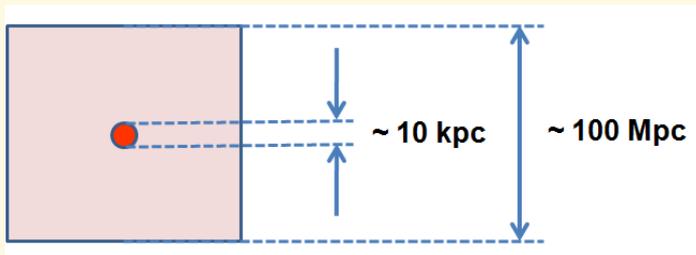
Кубическая область $(100 \text{ Mpc}/h)^3$

Трехмерные декартовы координаты

Расширяющиеся координаты

Равномерная расчетная эйлерова сетка

Периодические краевые условия

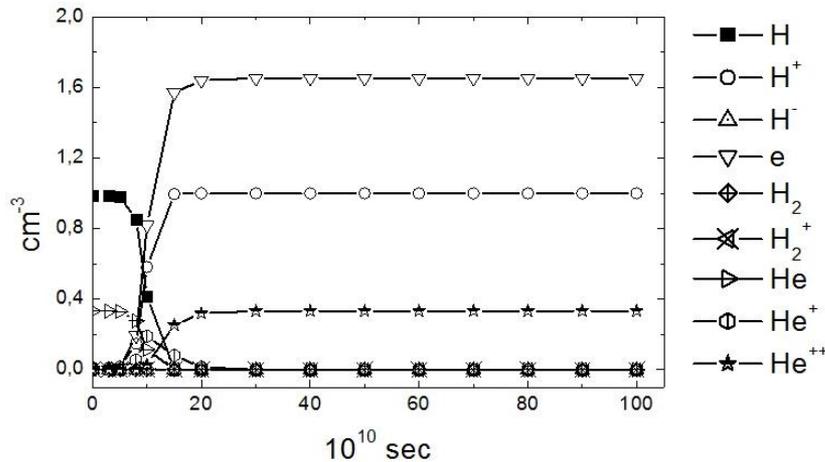
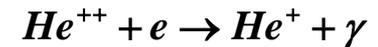
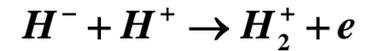
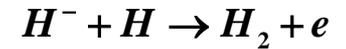
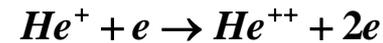
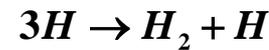
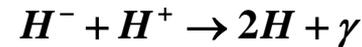
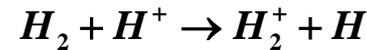
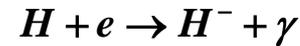
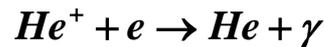
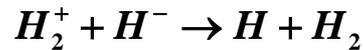
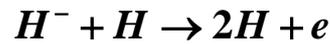
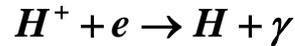
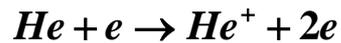
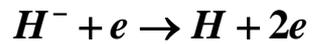
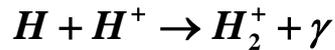
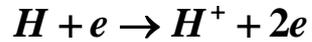


Постановка начальных условий

1. Формирование нормального распределения с амплитудой, соответствующему энергетическому спектру [3]
2. Обратное преобразование Фурье полученного распределения.
3. Возмущение равномерно распределенной плотности полученными флуктуациями

Образование галактик в контексте космологических структур (постановка начальных условий для задач эволюции галактик)

Примордиальная (первозданная) химокинетика основных форм водорода и гелия



Обоснование равновесной химокинетики

Эффективный показатель адиабаты

$$\gamma = \frac{5n_H + 5n_{He} + 5n_e + 7n_{H_2}}{3n_H + 3n_{He} + 3n_e + 5n_{H_2}}$$

[1,2] Anninos, Zhang, Abel & Norman, 1997 – математическая модель и химия

[3] Grassi et al., 2014 – скорости химических реакций и охлаждение/нагревание

[4] Chernykh, 2009 – численное решение ОДУ для концентраций (код ChemPAK) 20 / 48

Развитие МГД турбулентности в межзвездной среде (моделирование начальной стадии звездообразования)

Уравнения гравитационной магнитной газовой динамики

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho_i \\ \rho \vec{v} \\ \rho E \\ \rho \varepsilon \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \rho \vec{v} \\ \rho_i \vec{v} \\ \rho \vec{v} \vec{v} \\ \rho E \vec{v} \\ \rho \varepsilon \vec{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ s_i \\ \nabla \cdot (\vec{B} \vec{B}) - \nabla p^* - \rho \nabla \Phi \\ -\nabla \cdot (p^* \vec{v} - \vec{B} (\vec{B}, \vec{v})) - (\rho \vec{v}, \nabla \Phi) - \Lambda + \Gamma \\ -(\gamma - 1) \rho \varepsilon \nabla \cdot \vec{v} - \Lambda + \Gamma \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \nabla \times (\vec{v} \times \vec{B}) \quad \nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad \Delta \Phi = 4\pi G \rho$$

$$\rho E = \rho \varepsilon + \frac{\rho v^2}{2} + \frac{B^2}{2} \quad p = (\gamma - 1) \rho \varepsilon \quad p^* = p + \frac{B^2}{2}$$

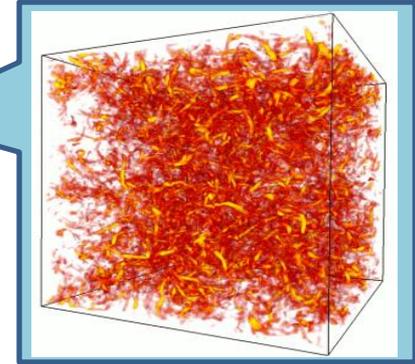
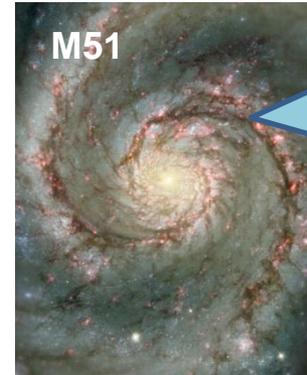
Кубическая область **(256 pc)³**

Трёхмерные декартовы координаты

Равномерная расчетная эйлера сетка

Вертикальное магнитное поле

Периодические краевые условия



Постановка начальных условий

1. Плотность $n = 5 \text{ cm}^{-3}$
2. Скорость начального возмущения
 $v = 10 \text{ km / s}$
3. Плазменный параметр
 $\beta_{th} = 8\pi p_0 / B_0^2 = 25$
4. Турбулентный параметр
 $\beta_{turb} = 8\pi \rho v_{rms}^2 / B_0^2 = 25$
5. Альфвеновское число Маха

$$\mathcal{M} = \frac{B}{v \sqrt{\mu_0 \rho}} = 3.52$$

[1] Vazquez-Semadeni, 2014 – математическая модель

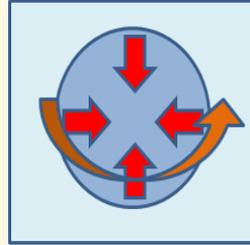
[2] Kritsuk, Ustyugov, Norman & Padoan, 2009 – постановка задачи

[3] Glover & Mac Low, 2007 – химические реакции ионизация и образование H₂

Коллапс вращающихся молекулярных облаков (моделирование поздней стадии звездообразования)

Гидродинамическая модель

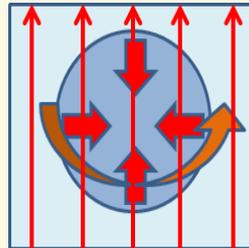
$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho \vec{v} \\ \rho E \\ \rho \varepsilon \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \rho \vec{v} \\ \rho \vec{v} \vec{v} \\ \rho E \vec{v} \\ \rho \varepsilon \vec{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\nabla p - \rho \nabla \Phi \\ -\nabla \cdot (\rho \vec{v}) - (\rho \vec{v}, \nabla \Phi) \\ -(\gamma - 1) \rho \varepsilon \nabla \cdot \vec{v} \end{pmatrix}$$



$$\Delta \Phi = 4\pi G \rho \quad \rho E = \rho \varepsilon + \frac{\rho v^2}{2} \quad p = (\gamma - 1) \rho \varepsilon$$

МГД модель

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho \vec{v} \\ \rho E \\ \rho \varepsilon \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \rho \vec{v} \\ \rho \vec{v} \vec{v} \\ \rho E \vec{v} \\ \rho \varepsilon \vec{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \nabla \cdot (\vec{B} \vec{B}) - \nabla p^* - \rho \nabla \Phi \\ -\nabla \cdot (\rho^* \vec{v} - \vec{B} (\vec{B}, \vec{v})) - (\rho \vec{v}, \nabla \Phi) \\ -(\gamma - 1) \rho \varepsilon \nabla \cdot \vec{v} \end{pmatrix}$$



$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \nabla \times (\vec{v} \times \vec{B}) \quad \nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad \Delta \Phi = 4\pi G \rho$$

$$\rho E = \rho \varepsilon + \frac{\rho v^2}{2} + \frac{B^2}{2} \quad p = (\gamma - 1) \rho \varepsilon \quad p^* = p + \frac{B^2}{2}$$

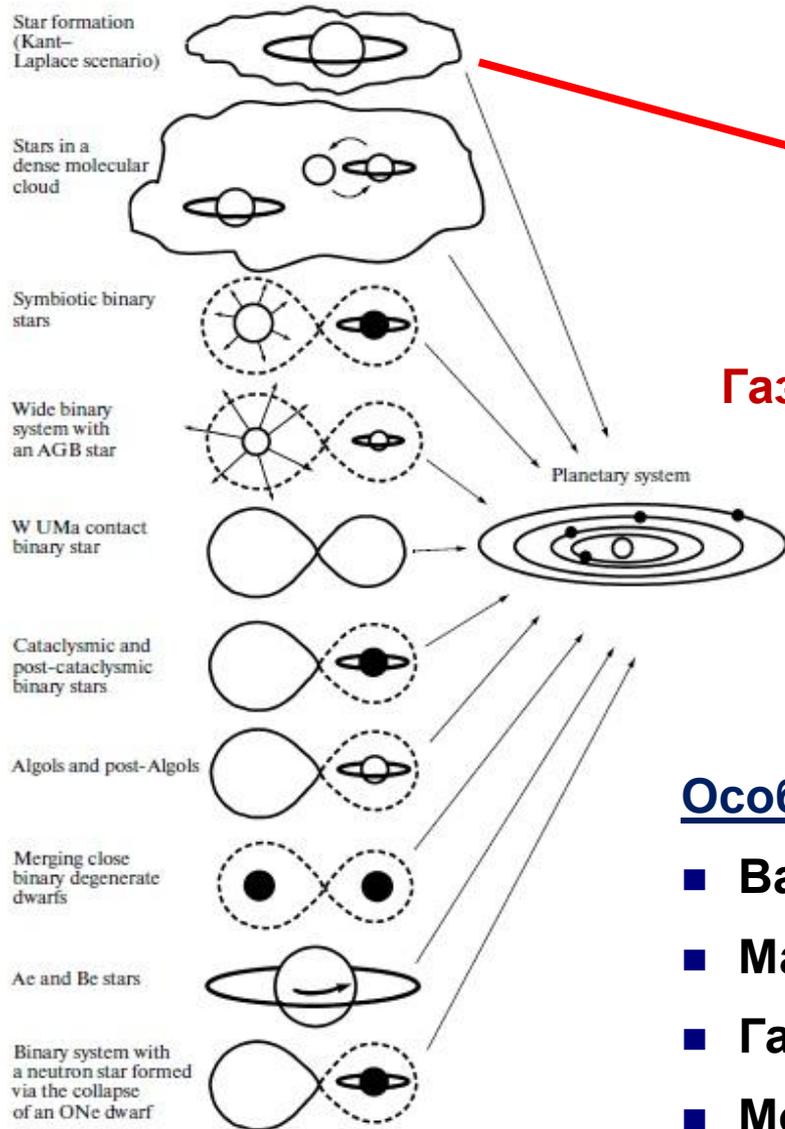
Постановка начальных условий

1. Масса облака $10^7 M_{\odot}$
2. Профиль плотности $\sim 1/r$
3. Температура 2000 K
4. Угловая скорость 21 км/с
5. Радиус облака 100 парсек
6. Скорость звука 3.8 км/с
7. Энергия магнитного поля

$$E_{mag} \sim E_{kin} + |E_{grav}| + E_{int}$$

(образование полярных течений)

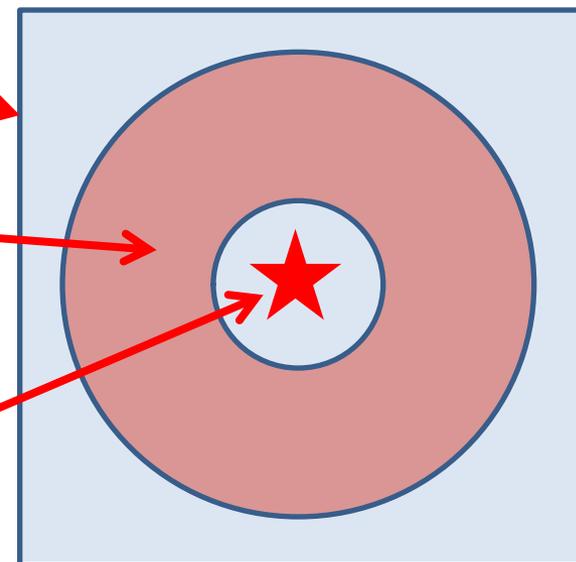
Моделирование протопланетных систем* (использование модели N-тел)



Модель газопылевого диска в 3D2V
(Вшивков, Снытников 2002)

Газ + частицы

Звезда



Особенности задачи:

- Важно движение отдельных частиц
- Малая средняя скорость движения частиц
- Газопылевая модель диска
- Модель частиц (Cloud-In-Cells)

Схема разделения операторов (метод крупных частиц или FIC-метод)

$$\begin{matrix} \swarrow (1) & & \searrow (2) \\ \frac{\partial Q}{\partial t} + \nabla \cdot (Q \cdot \vec{v}) = J(Q, \nabla Q) \end{matrix}$$

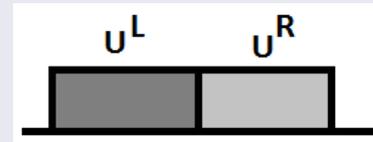
Эйлеров этап

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = J(Q, \nabla Q)$$

Лагранжев этап

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \nabla \cdot (Q \cdot \vec{v}) = 0$$

Задача Римана
(метод Годунова)



$$\frac{\partial u}{\partial t} + B \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad B = R\Lambda L \quad LR = I$$

$$L \frac{\partial u}{\partial t} + LR\Lambda L \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad w = Lu$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \Lambda \frac{\partial w}{\partial x} = 0 \quad w(x, t) = w(x - \Lambda t) \quad u = Rw$$

Кусочно-параболическая функция (PPML метод: Popov & Ustyugov, 2007, 2008, 2009)

Схема разделения операторов.

Эйлеров этап для уравнений газовой динамики.

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho \vec{v} \\ \rho E \\ \rho \varepsilon \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \rho \vec{v} \\ \rho \vec{v} \vec{v} \\ \rho E \vec{v} \\ \rho \varepsilon \vec{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\nabla p \\ -\nabla \cdot (p \vec{v}) \\ -(\gamma - 1) \rho \varepsilon \nabla \cdot (\vec{v}) \end{pmatrix}$$

$$p = (\gamma - 1) \rho \varepsilon$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ v \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} v & \rho & 0 \\ 0 & v & \rho^{-1} \\ 0 & \gamma p & v \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \rho \\ v \\ p \end{pmatrix} = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ v \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \rho & 0 \\ 0 & 0 & \rho^{-1} \\ 0 & \gamma p & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \rho \\ v \\ p \end{pmatrix} = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} v \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \rho^{-1} \\ \gamma p & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} v \\ p \end{pmatrix} = 0$$

Уравнения для инвариантов (метод Годунова)

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} \pm c \frac{\partial w_i}{\partial x} = 0$$

Схема «первого» порядка

$$w_i(x, 0) = w_i^0(x) = \begin{cases} w_i^L, & x < 0 \\ w_i^R, & x > 0 \end{cases}$$

$$V = \frac{v_L + v_R}{2} + \frac{p_L - p_R}{2} \sqrt{\frac{1}{\gamma \rho p}}$$

$$P = \frac{p_L + p_R}{2} + \frac{v_L - v_R}{2} \sqrt{\gamma \rho p}$$

Схема «высокого» порядка

$$w_i(x, 0) = w_i^0(x) = \begin{cases} w_i^L(x), & x < 0 \\ w_i^R(x), & x > 0 \end{cases}$$

$$V = \frac{v_L(-c\tau) + v_R(c\tau)}{2} + \frac{p_L(-c\tau) - p_R(c\tau)}{2} \sqrt{\frac{1}{\gamma \rho p}}$$

$$P = \frac{p_L(-c\tau) + p_R(c\tau)}{2} + \frac{v_L(-c\tau) - v_R(c\tau)}{2} \sqrt{\gamma \rho p}$$

Схема разделения операторов. Лагранжев этап схемы



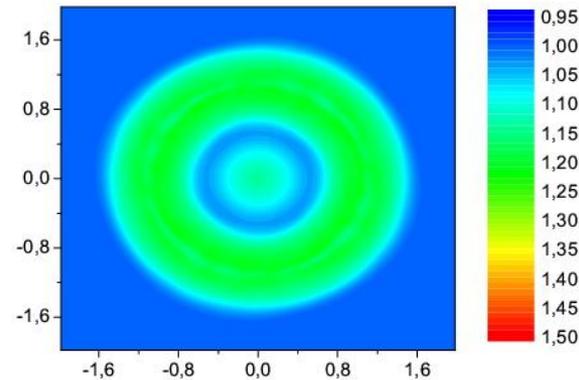
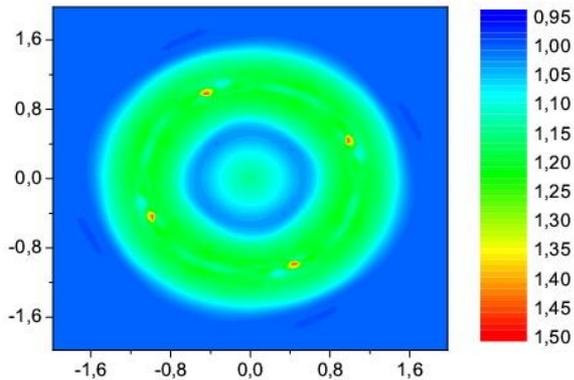
$$\frac{\partial z}{\partial t} + \text{div}(z\vec{v}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{z_{ikl}^{n+1} - z_{ikl}^n}{\tau} + \frac{F_{i+1/2,kl}^{n+1/2} - F_{i-1/2,kl}^{n+1/2}}{h} = 0$$

$$F_{i+1/2,kl}^{n+1/2} = v_{i+1/2,k,l} \times \begin{cases} z_{ikl}, & v_{i+1/2,k,l} \geq 0 \\ z_{i+1,kl}, & v_{i+1/2,k,l} < 0 \end{cases}$$

$$\mathbf{v} = \frac{\sqrt{\rho_L} \mathbf{v}_L + \sqrt{\rho_R} \mathbf{v}_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}$$

0	0	0
0	1	0
0	0	0

1/16	2/16	1/16
2/16	4/16	2/16
1/16	2/16	1/16



Такой подход позволяет построить инвариантную относительно поворота численную схему

Схема разделения операторов. Коррекция дисбаланса энергии

$$\rho E = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{\rho v^2}{2}$$
$$\|v\| = \sqrt{2 \left(E - \frac{1}{\rho} \frac{p}{\gamma - 1} \right)}$$
$$|\rho \varepsilon| = \left(\rho E - \frac{\rho v^2}{2} \right)$$

1. Происходит корректировка длины вектора скорости при неизменном направлении (*в случае малой плотности*) [1]
2. Происходит корректировка внутренней энергии (*в остальной области*) [2]

**Такая модификация метода обеспечивает справедливость
детального баланса энергий и гарантирует неубывание энтропии**

- Модификация схемы Рое для осреднения величин
- Модификация алгоритма построения локальных парабол
- Обеспечение бездивергентности магнитного поля

[1] Vshivkov V., Lazareva G., Snytnikov A., Kulikov I., Tutukov A. Computational methods for ill-posed problems of gravitational gasodynamics // J. Inv. Ill-Posed Problems, 19. 2011, 151-166

[2] Godunov S., Kulikov I. Computation of Discontinuous Solutions of Fluid Dynamics Equations with Entropy Nondecrease Guarantee // J. Comp. Math & Math. Phys., 54, 2014, 1012-1024

Схема разделения операторов. Интегрирование по времени

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \nabla \cdot (Q \cdot \vec{v}) = J(Q, \nabla Q) \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial Q}{\partial t} + \nabla \cdot (Q \cdot \vec{v}) = 0 \quad \frac{\partial Q}{\partial t} = J(Q, \nabla Q)$$

$$\frac{dQ}{dt} = R$$

$$Q^{(n+1)} = Q^{(n)} + \tau R^{(n)}$$

Классическая схема

$$Q^{(n+1/3)} = Q^{(n)} + \tau R^{(n)} \quad \text{Схема Рунге-Кутты (МГД)}$$

$$Q^{(n+2/3)} = \frac{3}{4} Q^{(n)} + \frac{1}{4} Q^{(n+1/3)} + \frac{\tau}{4} R^{(n+1/3)}$$

$$Q^{(n+1)} = \frac{1}{3} Q^{(n)} + \frac{2}{3} Q^{(n+2/3)} + \frac{2\tau}{3} R^{(n+2/3)}$$

Метод решения уравнения Пуассона

Решение уравнения Пуассона в пространстве гармоник

$$\varphi_{jmn} = - \frac{4\pi h^2 \rho_{jmn}}{6 \left(1 - \left(1 - \frac{2}{3} \sin^2 \left(\frac{\pi j}{I} \right) \right) \left(1 - \frac{2}{3} \sin^2 \left(\frac{\pi m}{K} \right) \right) \left(1 - \frac{2}{3} \sin^2 \left(\frac{\pi n}{L} \right) \right) \right)}$$

Коэффициенты преобразования вычисляются с помощью преобразования Фурье (в реализации использовано быстрое преобразование Фурье)

27-точечный шаблон

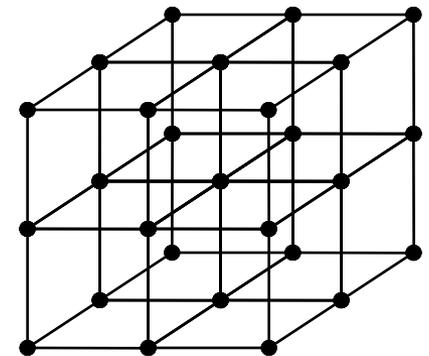


Схема «**высокого**» порядка точности

Малая диссипативность численного решения

Схема «**первого**» порядка точности (более 10 ячеек)

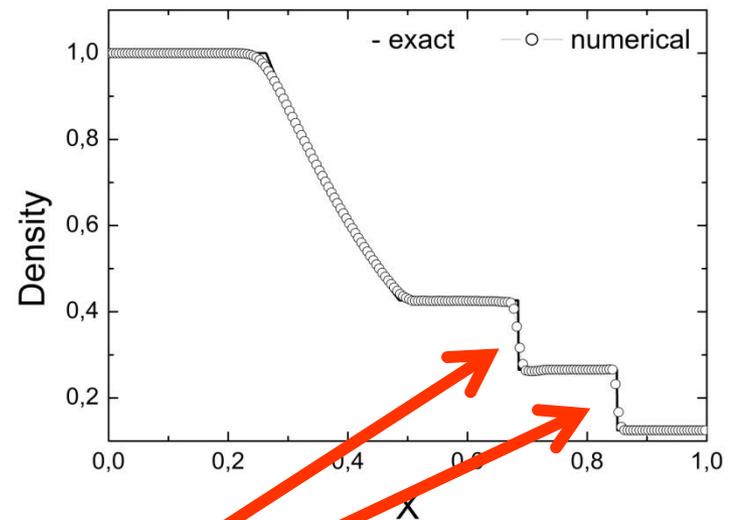
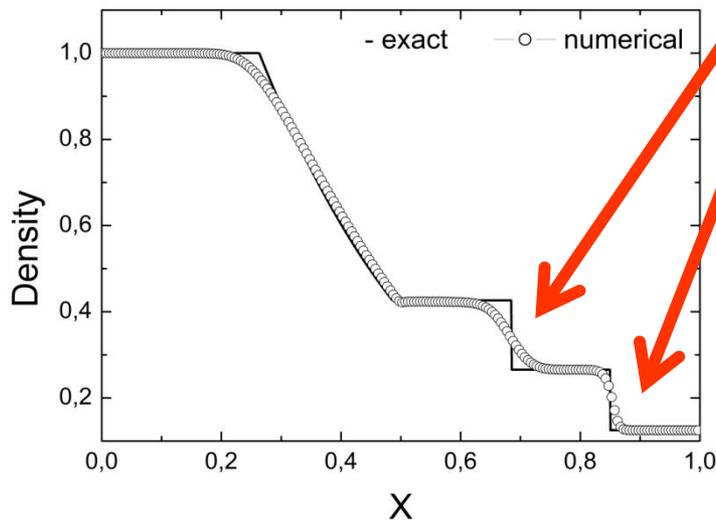


Схема «**высокого**» порядка точности (2 ячейки)

Верификация численного метода

- Одномерные тесты ударной трубы (*разрывные решения*)
- Тест Аксенова (*непрерывное решение*)
- Неустойчивость Кельвина-Гельмгольца
- Неустойчивость Релея-Тейлора
- Задача Седова о точечном взрыве
- Задача вращения облака для контроля момента импульса
- Задача разлета газа в вакуум
- Коллапс Эвхарда
- Задача о двойном Маховском отражении
- Задача о сверхзвуковом потоке в туннеле со ступенькой
- Задача о равновесной конфигурации вращающегося самогравитирующего газового облака
- Падение облака G2 на Sgr A*
- ...

Тест А.В. Аксенова (точное «гладкое» решение)

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0$$

$$\frac{p}{p_0} = \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma$$

Выберем в качестве размерных величин:

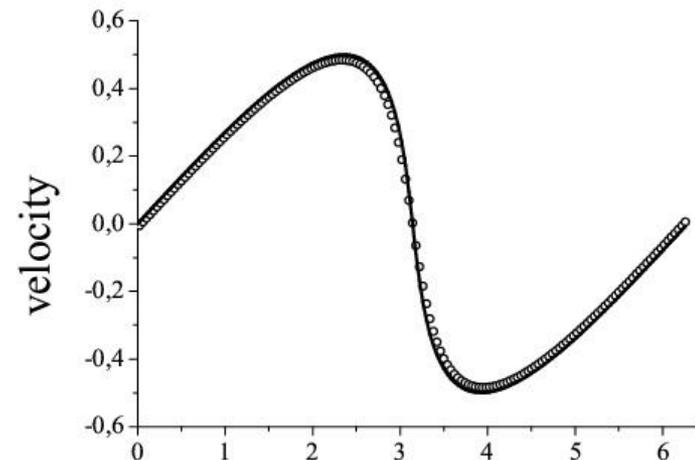
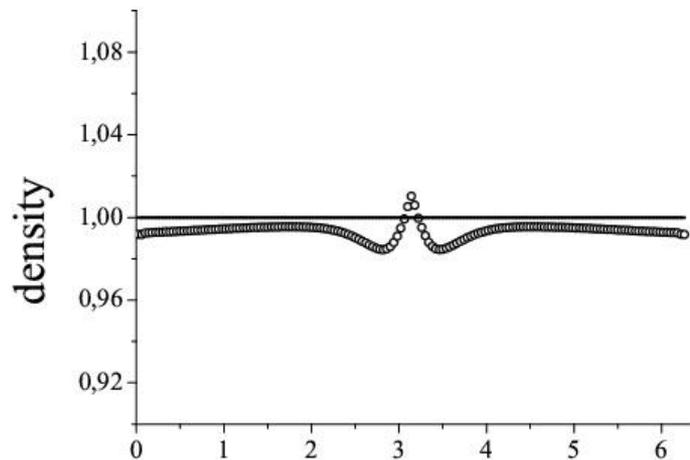
$$l = 1 \quad p_0 = 1 \quad \rho_0 = 1 \quad \gamma = 3$$

$$\lambda = 1/(\gamma - 1) \quad r = \rho^{1/2\lambda} \quad z = u / 2\lambda$$

Периодическое решение на интервале $[0; 2\pi]$ записывается в виде:

$$r = 1 + 0.5 \cos(x - zt) \cos(rt)$$

$$z = 0.5 \sin(x - zt) \sin(rt)$$



Порядок численной схемы = 1.713

Коллапс Эвварда

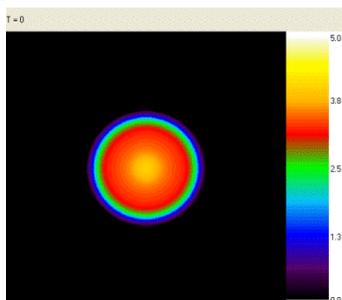
Начальные условия:

Радиус сферы = 1

Профиль плотности $\sim 1/r$

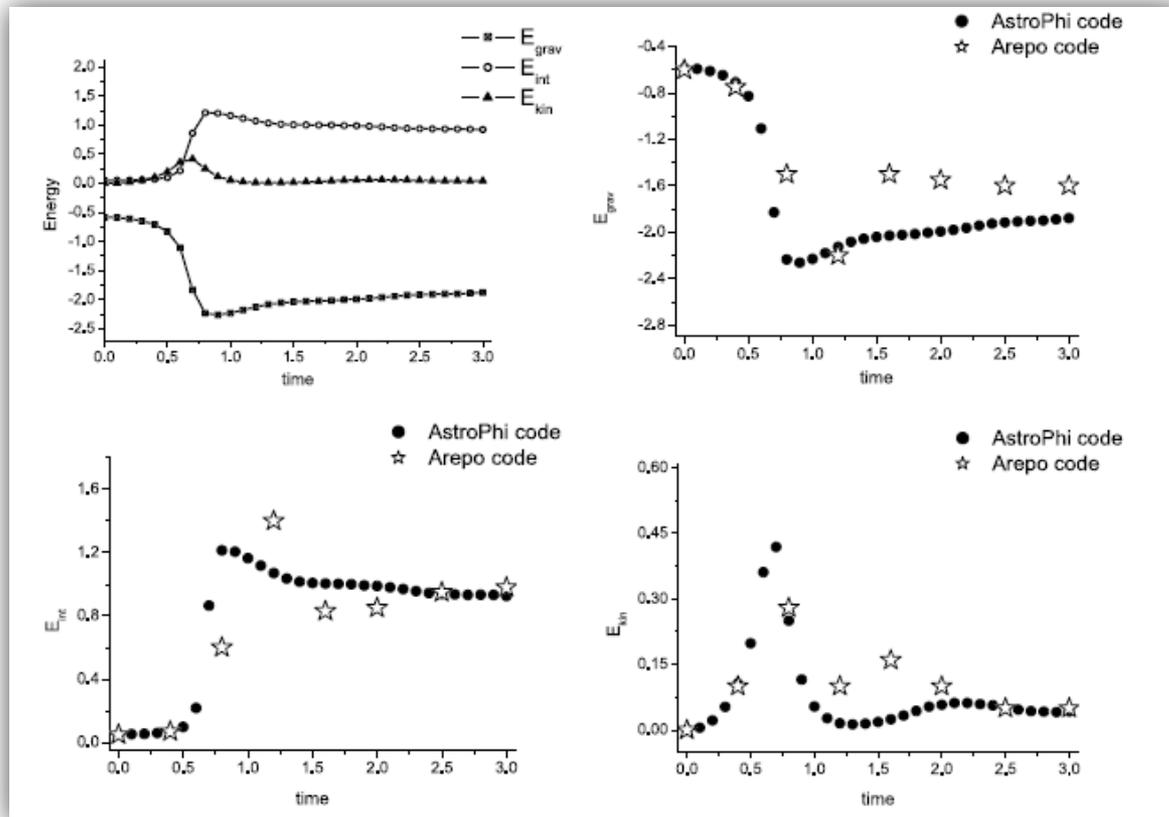
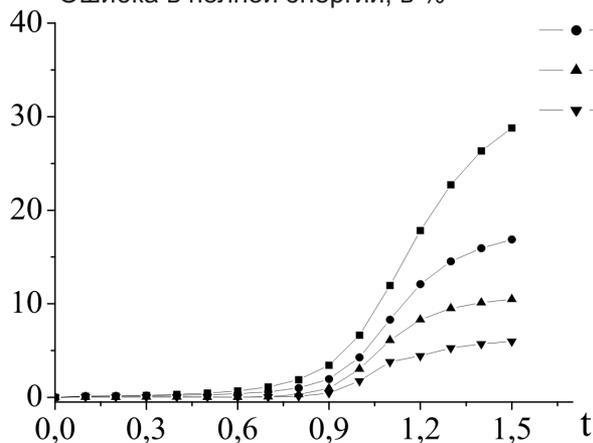
Скорость = 0

Профиль давления $\sim 1/r$



Ошибка в полной энергии, в %

—■— h
—●— h/2
—▲— h/4
—▼— h/8



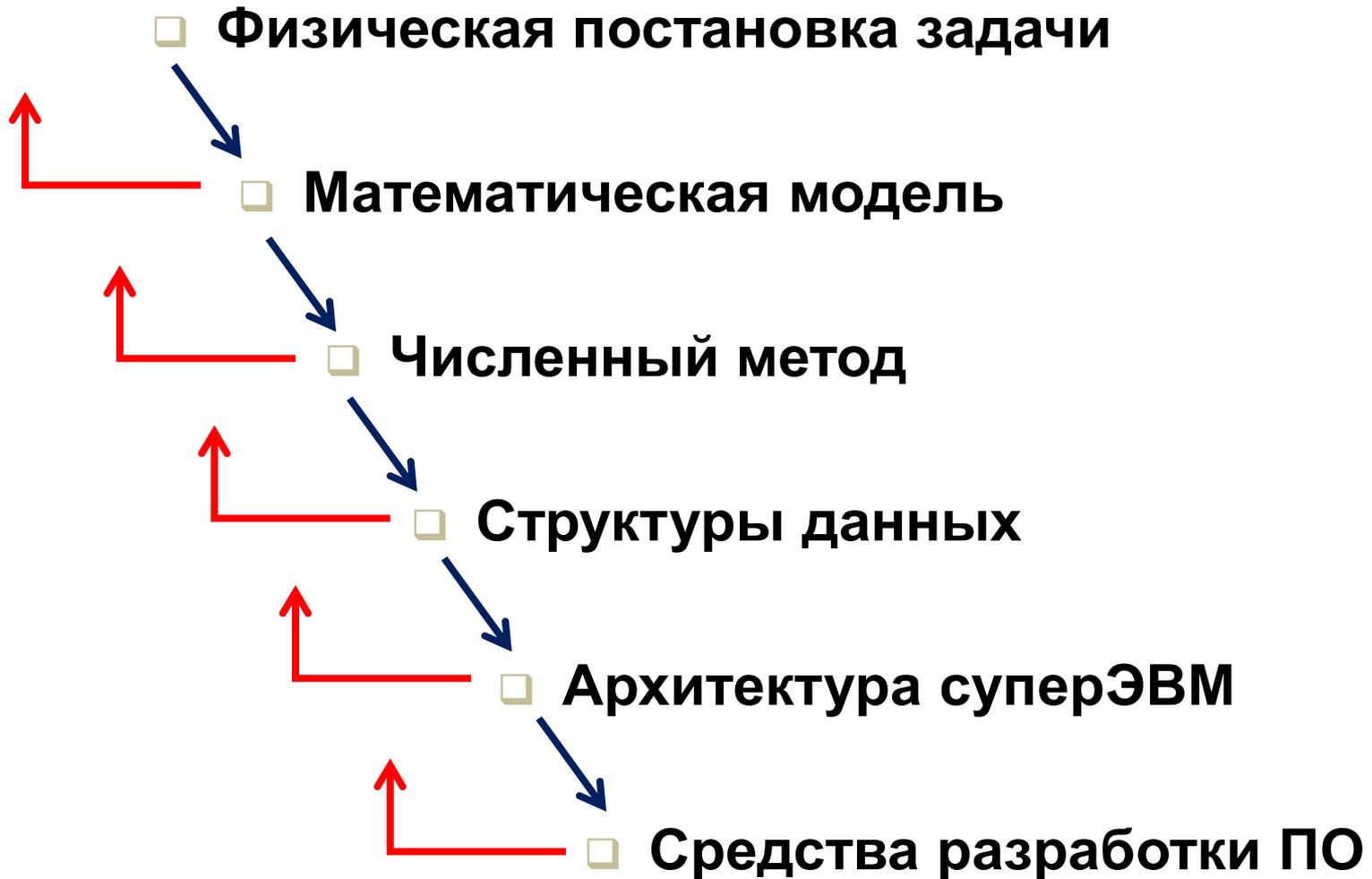
1. Коллапс был сосчитан с ошибкой в 5% в полной энергии, в то время как SPH метод не посчитал эту задачу [1]

2. Решение задачи коллапса Эвварда качественно и количественно соответствует результатам, полученным кодом AREPO на основе подвижных сеток [2]

[1] Vshivkov V., Lazareva G., Snytnikov A., Kulikov I., LNCS. 2009

[2] Kulikov I.M., Chernykh I.G., Snytnikov A.V., Glinskiy B.M., Tutukov A.V. CompPhysComm, 2015

Концепция со-дизайна вычислительной модели



Организация параллельных вычислений

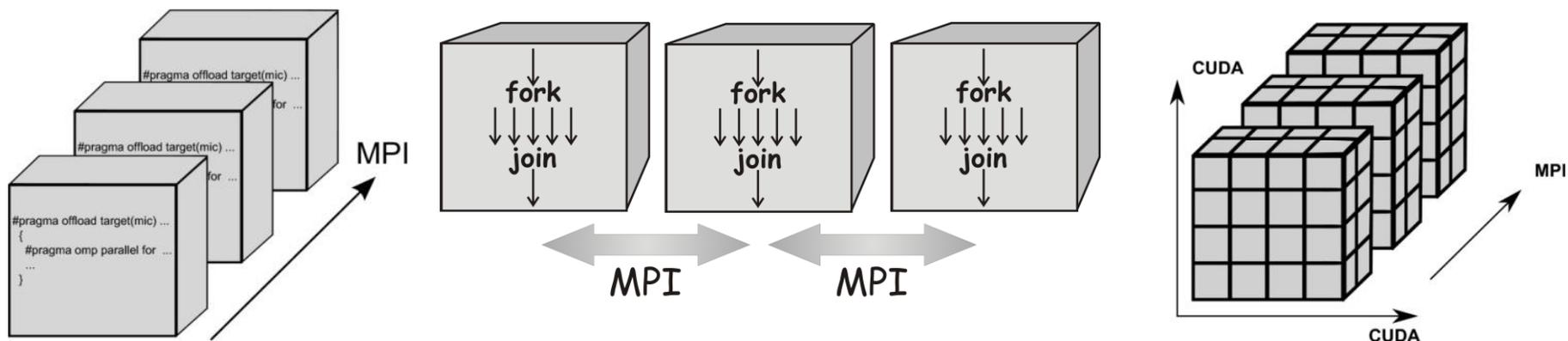
Общая схема уравнений

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \frac{\partial f_i(\vec{u})}{\partial x_i} = q(\vec{u})$$

Общая схема методов типа Годунова

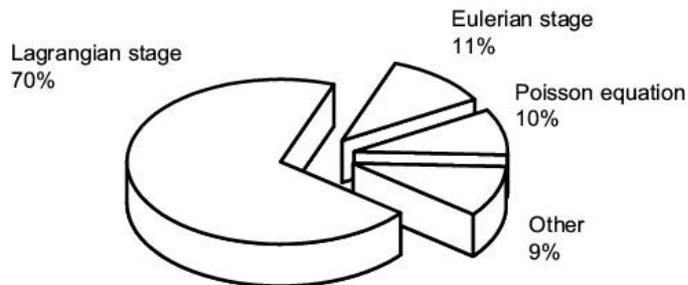
$$\frac{\vec{u}_k^{n+1} - \vec{u}_k^n}{\tau} + \frac{F_{k+1/2} - F_{k-1/2}}{h_i} = q_k$$

В силу того, что в каждой ячейке вычисления проводятся независимо и требуется только информация о соседних ячейках может быть использована любая архитектура суперЭВМ (классическая или гибридная)

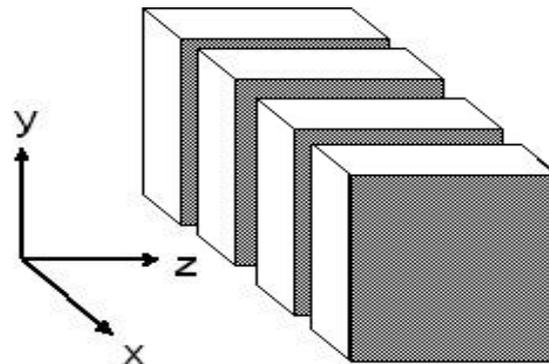


Организация параллельных вычислений. Классические архитектуры суперЭВМ и библиотека FFTW

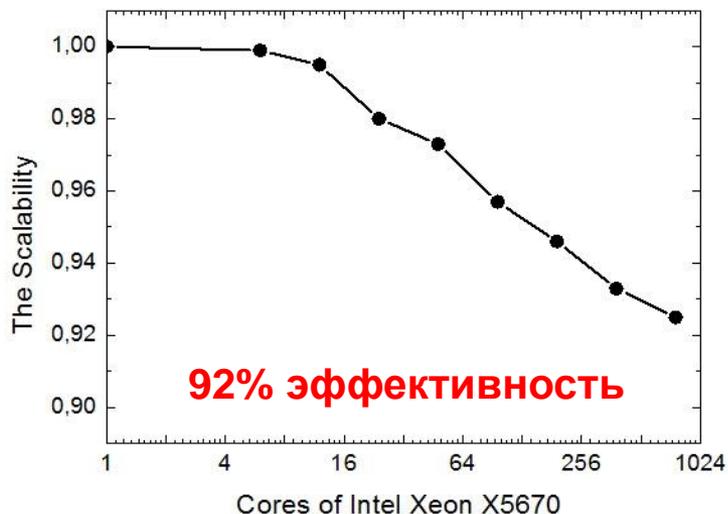
Распределение времени



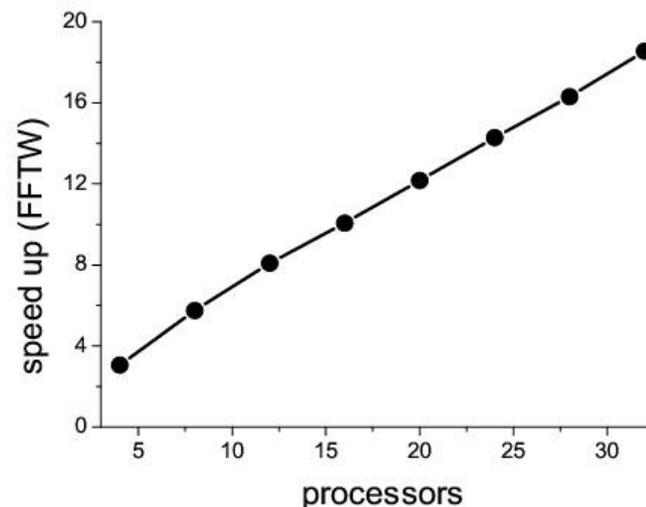
Декомпозиция расчетной области (определяется FFTW)



Масштабируемость решения уравнений гидродинамики (ССКЦ СО РАН)

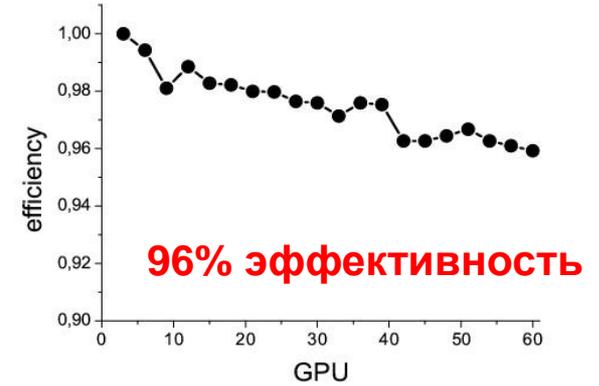
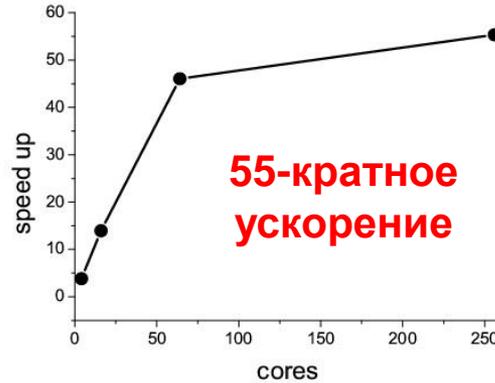
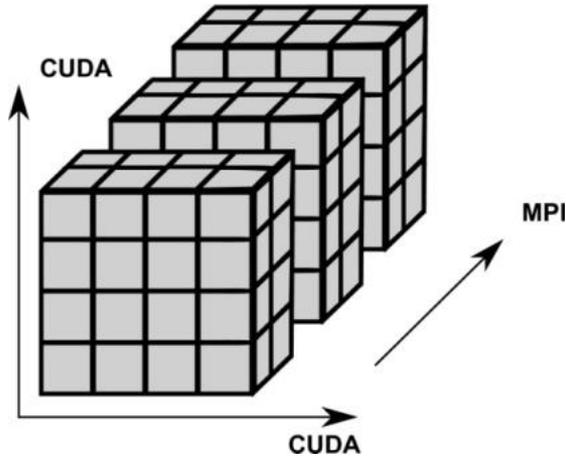


Ускорение метода решения уравнения Пуассона (ССКЦ СО РАН)

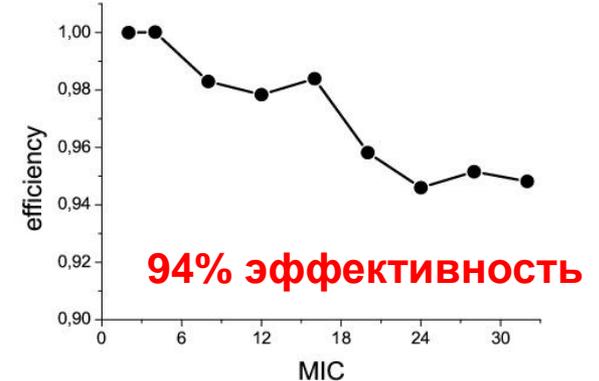
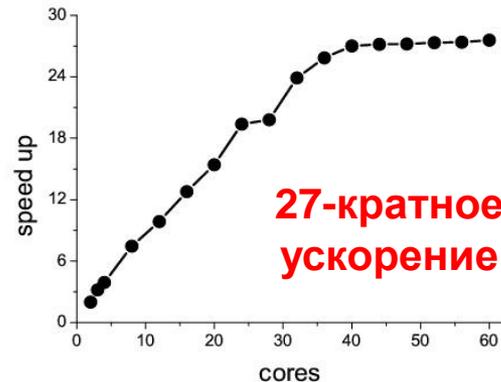
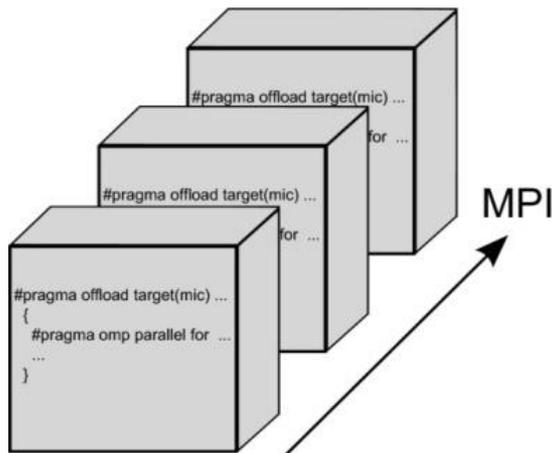


Организация параллельных вычислений. Гибридные архитектуры суперЭВМ

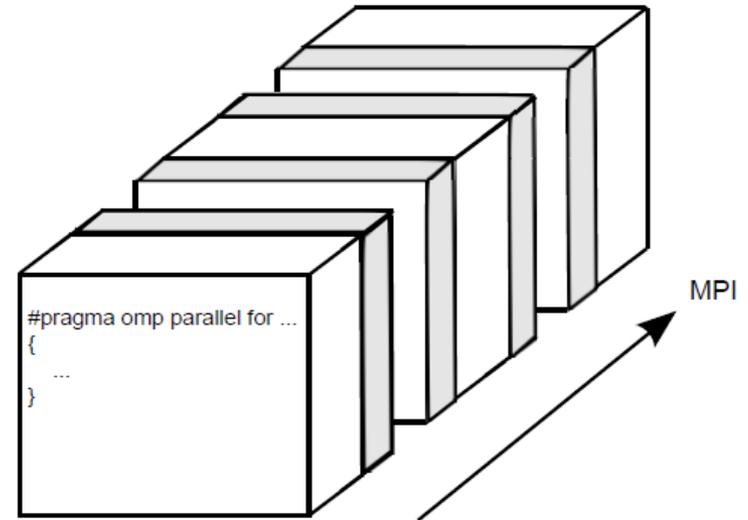
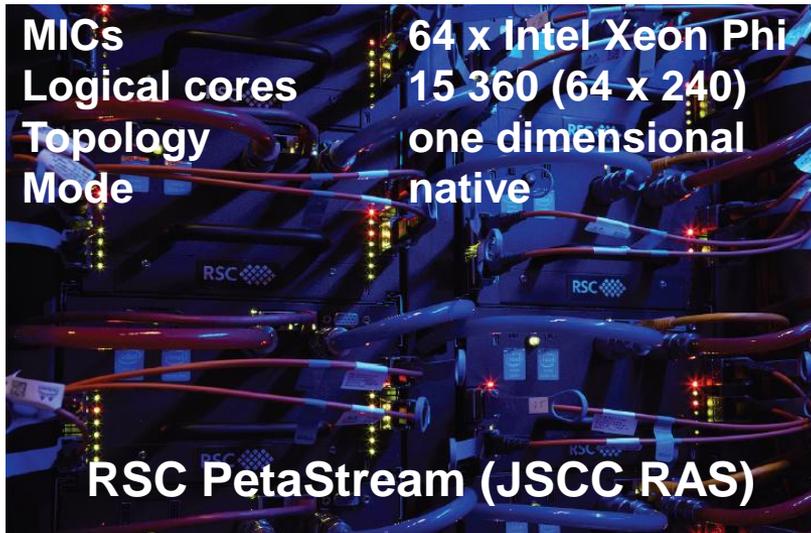
Графические ускорители (ССКЦ СО РАН, **1 GPU ~ 40 CPU cores**)



Ускорители Intel Xeon Phi (МСЦ РАН, offload режим, **1 MIC ~ 4 CPU cores**)



Организация параллельных вычислений. Ускорители Intel Xeon Phi (native режим)



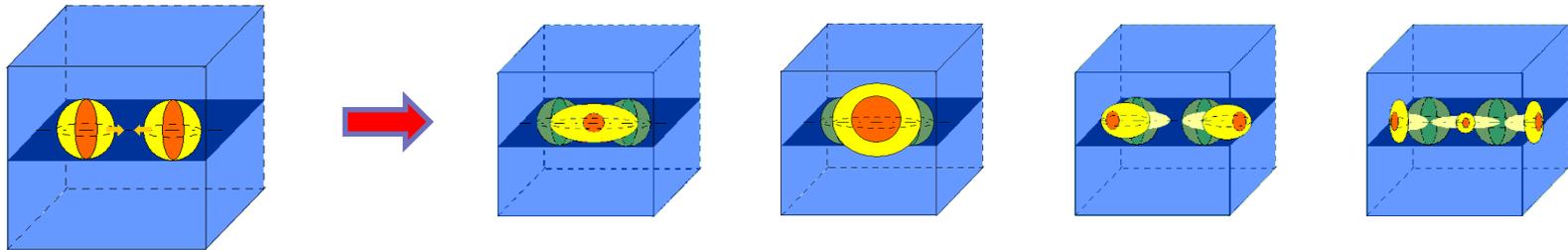
1. Ускорение в **134** раза на 240 логических ядрах
2. Эффективность **92%** на 64 MICs (или на 15 360 ядрах)
3. Достигнута **40%** эффективность от пиковой скалярной производительности (**1 MIC ~ 24 CPU cores**)
4. При использовании векторизации достигнуто **200 гфлопс**

Моделирование поведения программной реализации на **983 040** ядрах с помощью системы AGNES* **80% эффективность** была достигнута

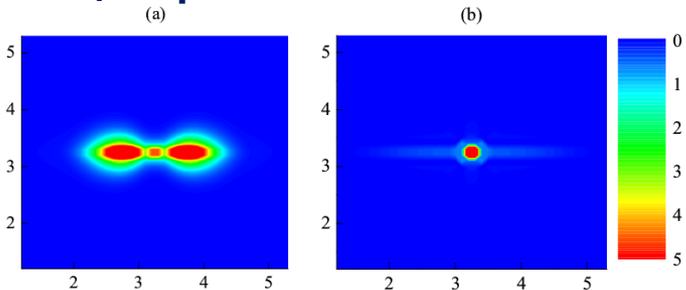
*Podkorytov et al., LNCS 2010

Задача центрального столкновения галактик

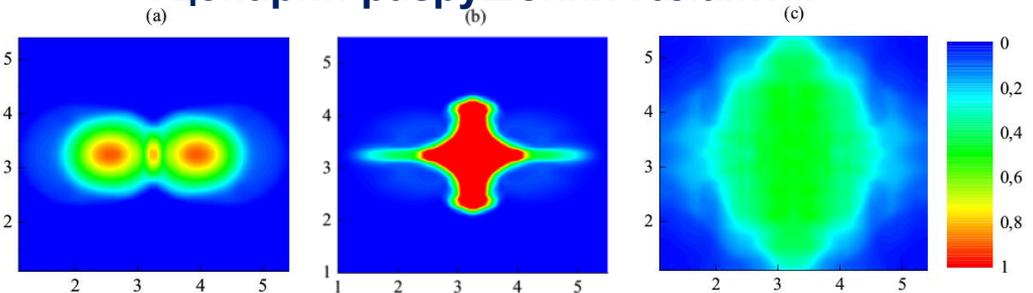
Была подтверждена гипотеза об образовании четырех сценариев центрального столкновения газовых компонент галактик: разрушение галактик, слияние галактик, свободное прохождение галактик, образование третьей галактики после разлета галактик



Сценарий слияния галактик



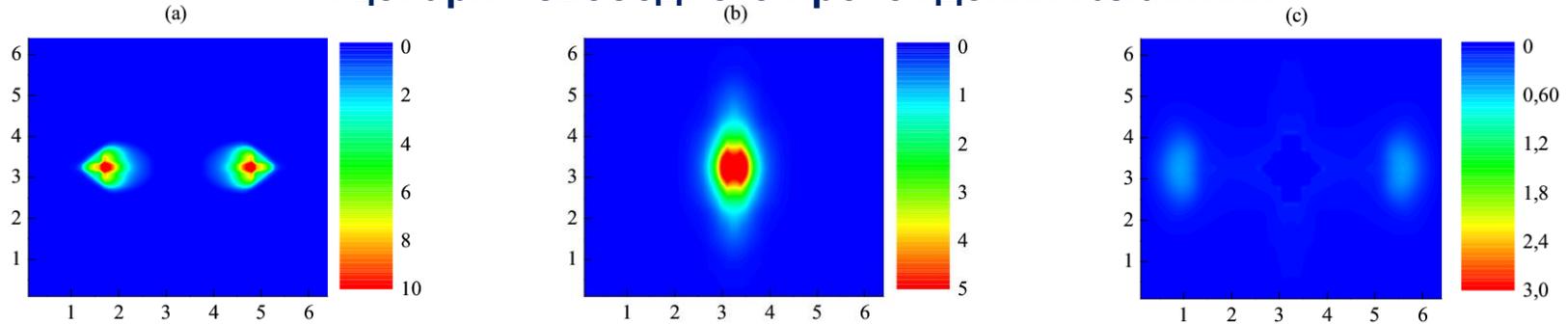
Сценарий разрушения галактик



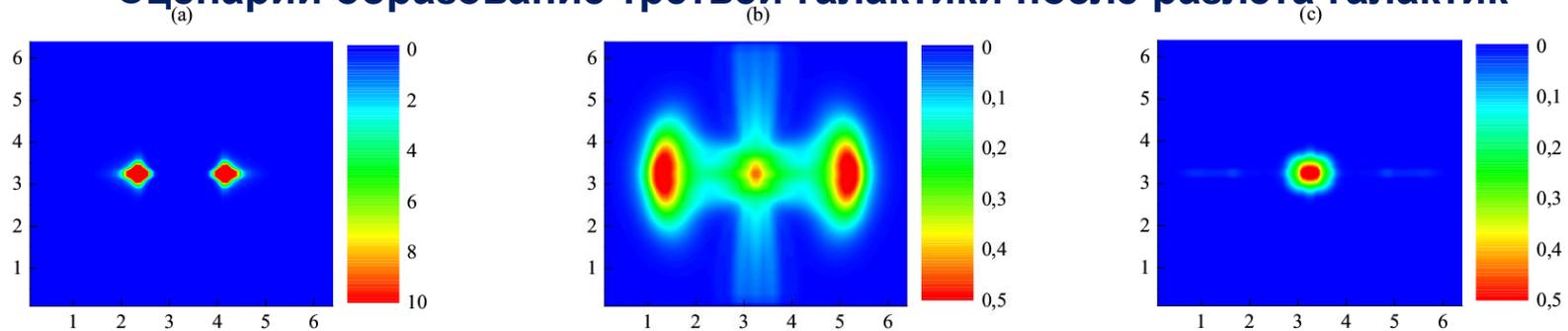
1. Vshivkov, Lazareva, Snytnikov, Kulikov, Tutukov, ApJS, 2011
2. Тутуков, Лазарева, Куликов, *Астрономический журнал*, 2011

Задача центрального столкновения галактик

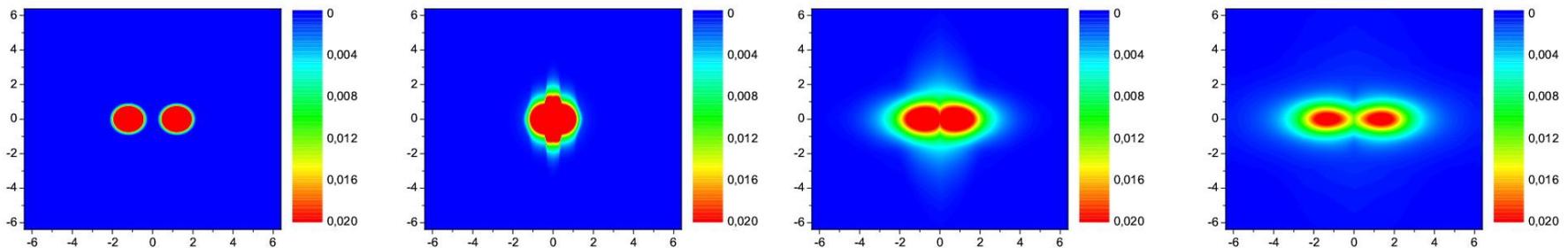
Сценарий свободного прохождения галактики



Сценарий образование третьей галактики после разлета галактик



Сценарий свободного разлета галактик в **полной двухфазной модели**

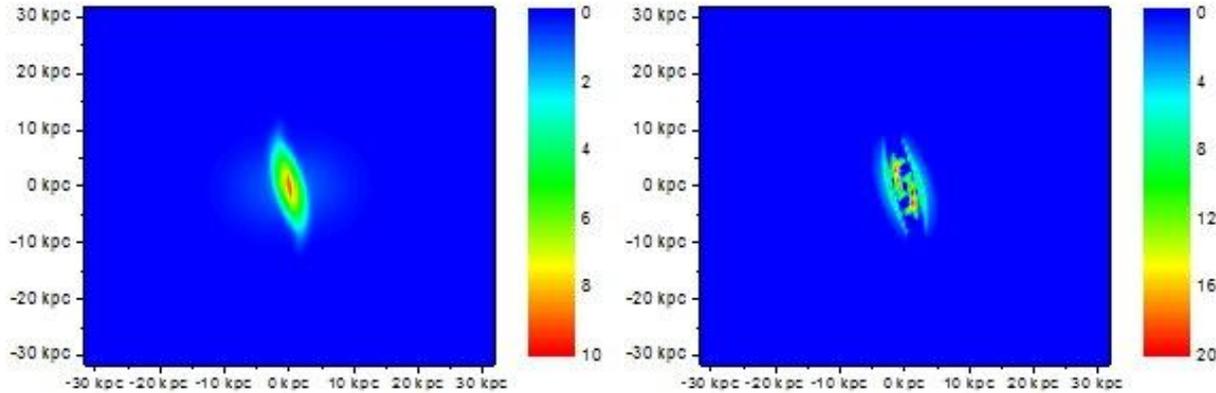


1. Kulikov, ApJS, 2014

2. Тутуков, Лазарева, Куликов, *Астрономический журнал*, 2011

Задача столкновения галактик различных типов в полной модели

Столкновение эллиптических галактик

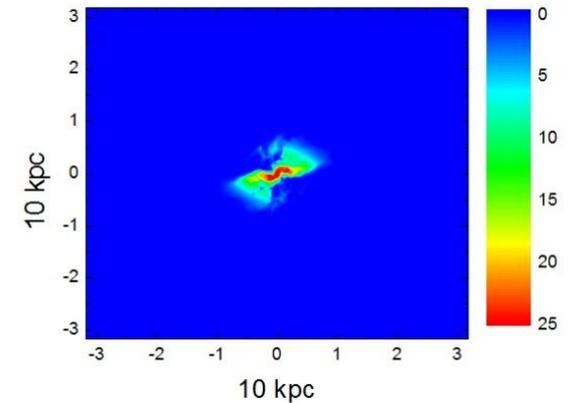


Плотность H_2

Звездообразование

Экспериментально подтверждена гипотеза о повышенной скорости звездообразования за фронтом ударных волн и гипотеза об образовании молекулярного водорода в области высокой плотности газа

Столкновение эллиптической и спиральной галактики

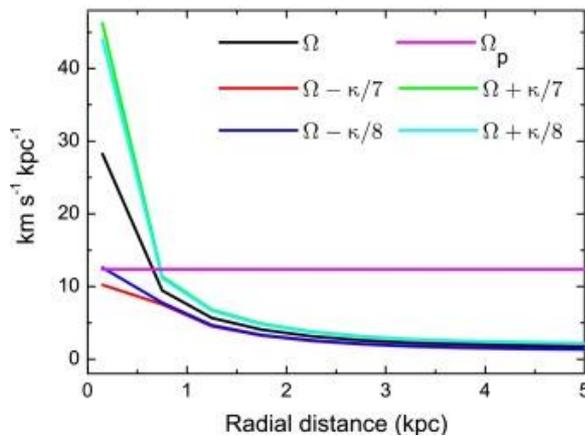
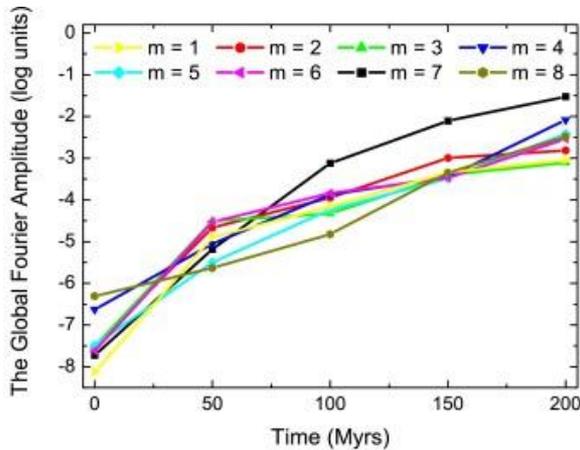
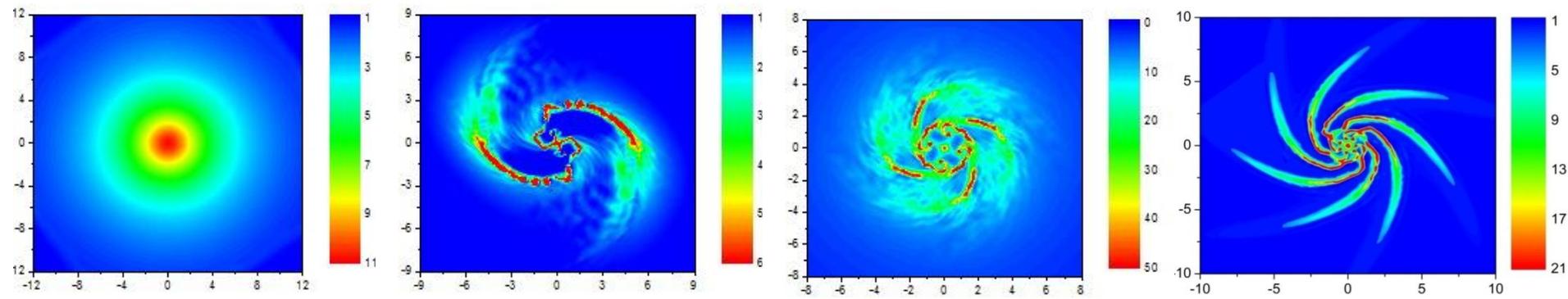


Звездообразование

Получена область активного звездообразования в форме двух спиралей

Задача образования спиральных рукавов дисковых галактик (модель изотермической гравитационной гидродинамики*)

Сценарии: устойчивая конфигурация, два рукава (диск ~ 17% Гало),
четыре рукава (диск ~ 7% Гало), семь рукавов (диск ~ 2% Гало)



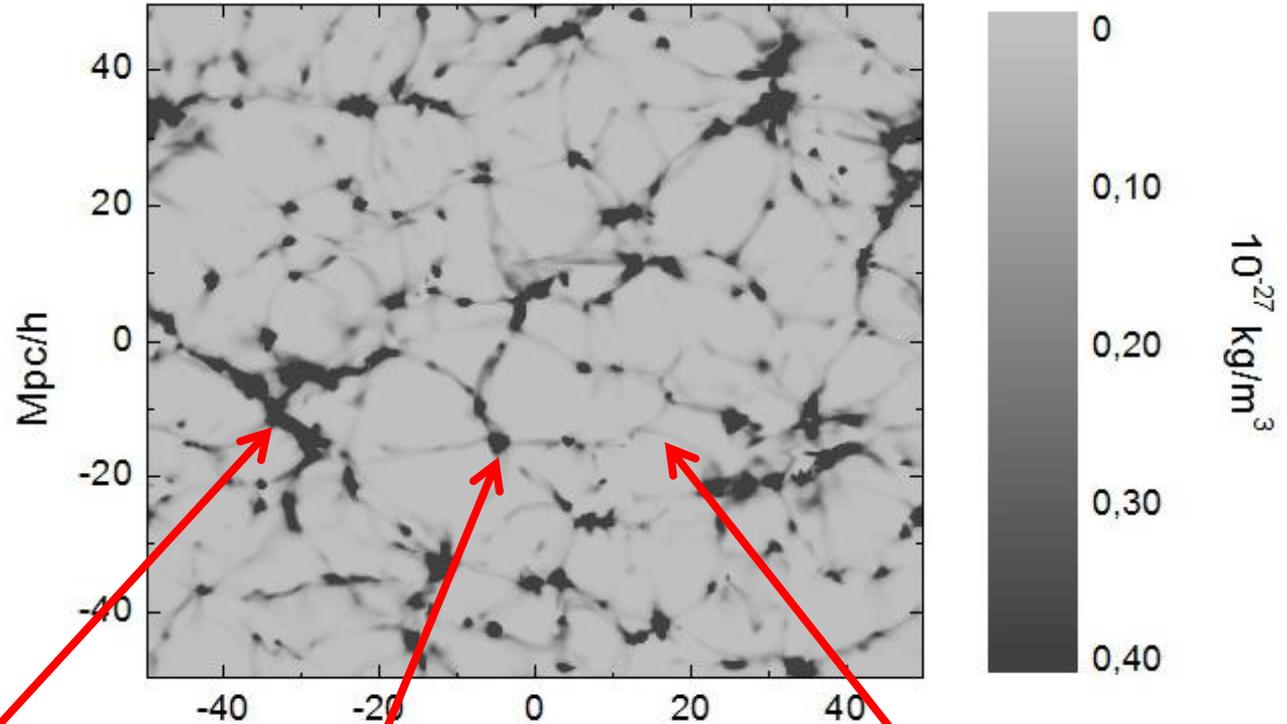
Поведение амплитуд Фурье (слева) и угловые скорости
диска/спиралей (справа) для 7-рукавной галактики

Подтверждена теория
усиления раскачки
(*the swing amplification
theory*) определенной
моды с образованием
внутреннего
Линдбладовского
резонанса

(*) Kulikov & Vorobyov, Journal of Computational Physics, 2016

Образование галактик в контексте космологических структур (постановка начальных условий для задач эволюции галактик)

Проведено
космологическое
моделирование
«космической
паутины»



Стена

$$\lambda_1 \ll \lambda_2 \sim \lambda_3$$

Кластер

$$\lambda_1 \sim \lambda_2 \sim \lambda_3$$

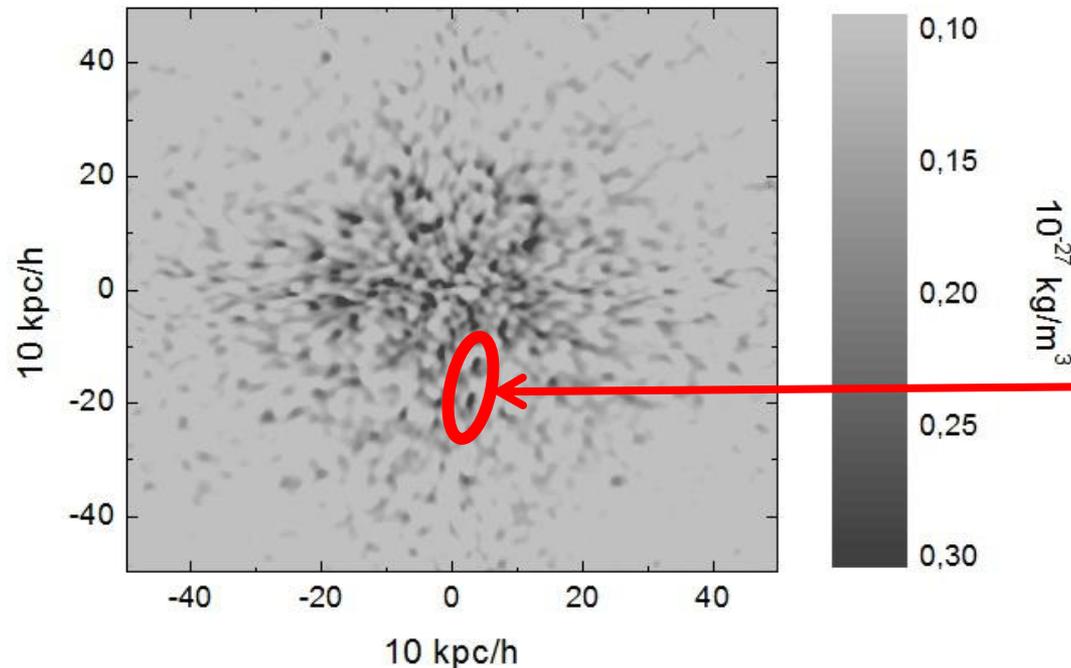
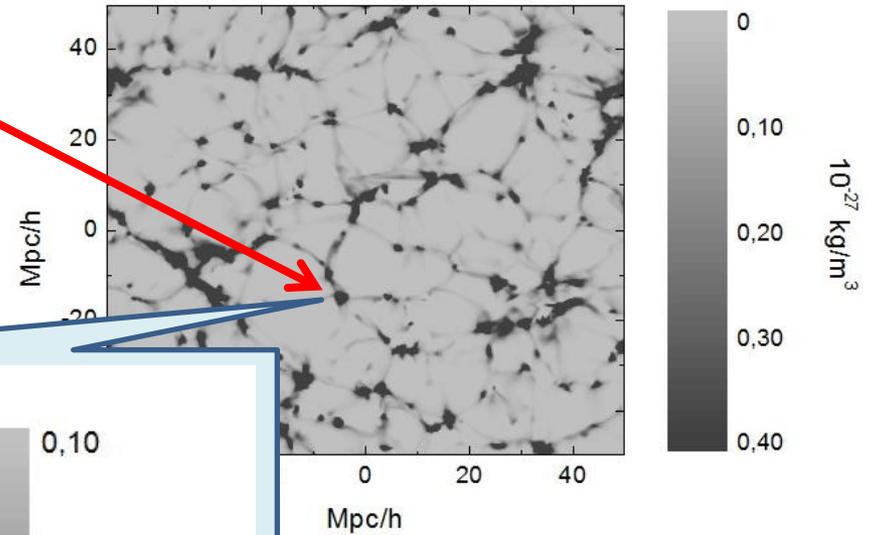
Филамент

$$\lambda_1 \sim \lambda_2 \ll \lambda_3$$

Образование галактик в контексте космологических структур (постановка начальных условий для задач эволюции галактик)

Zoom-In техника

Кластер



Взаимодействующие
галактики

$R \sim 10 \text{ kpc}$

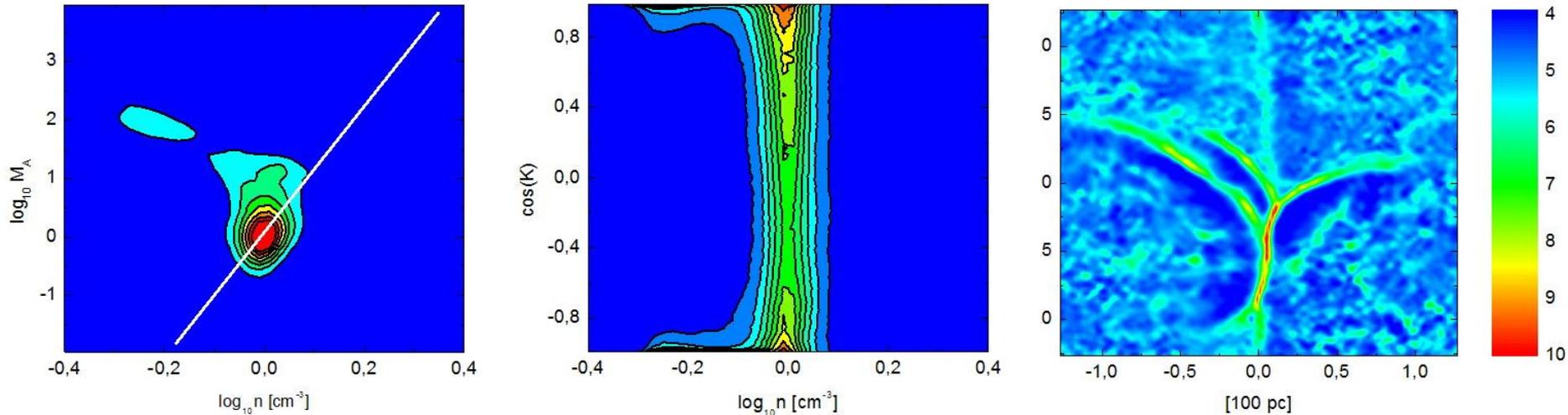
$L \sim 20 \text{ kpc}$

$M \sim 10^{13} M_{\odot}$

Развитие МГД турбулентности в межзвездной среде (моделирование начальной стадии звездообразования)

Основные характеристики течения соответствуют работе [1]:

1. Число Маха $M \sim n^2$ (белая линия)
2. Большая часть облака $n > 10 \text{ см}^{-3}$ в сверхальфвеновской области
3. Самоорганизация в трансальфвеновском режиме $M \sim 1$ при $n \sim 1$
4. Сжатие происходит вдоль силовых линий магнитного поля
5. Увеличение плотности происходит за счет самогравитации
6. Турбулентность в облаках сверхальфвеновская с числом Маха $M > 100$



Зависимость альфвеновской скорости от плотности газа (слева), косинус угла между векторами скорости и магнитного поля от плотности газа (посередине), плотность межзвездной среды в см^{-3} (справа)

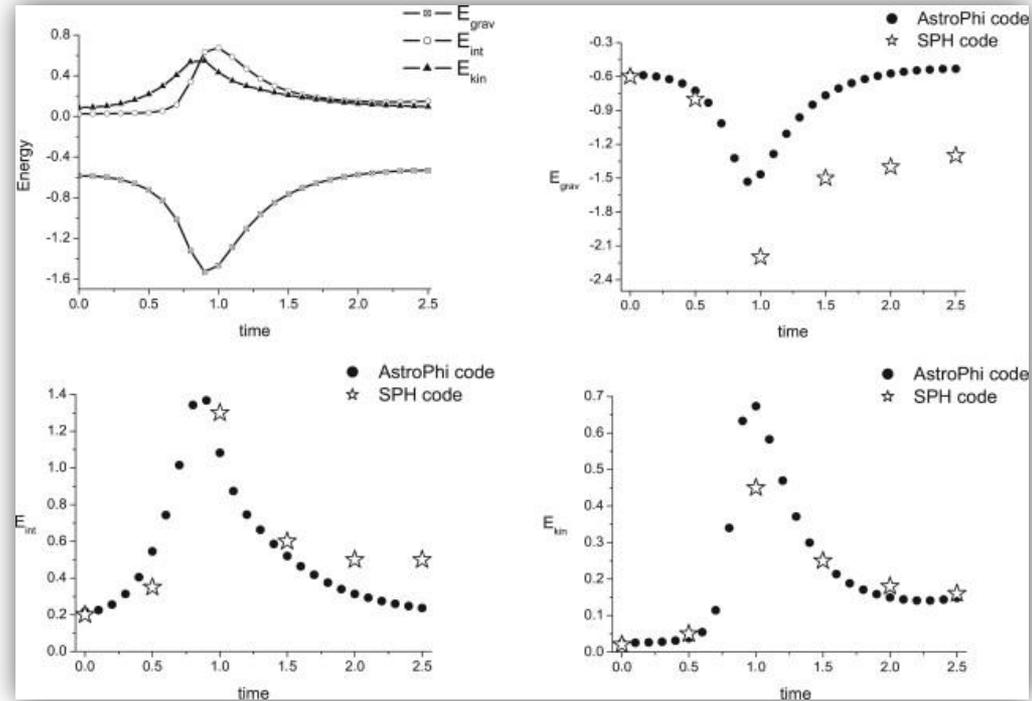
Коллапс вращающихся молекулярных облаков (моделирование поздней стадии звездообразования)

Постановка начальных условий

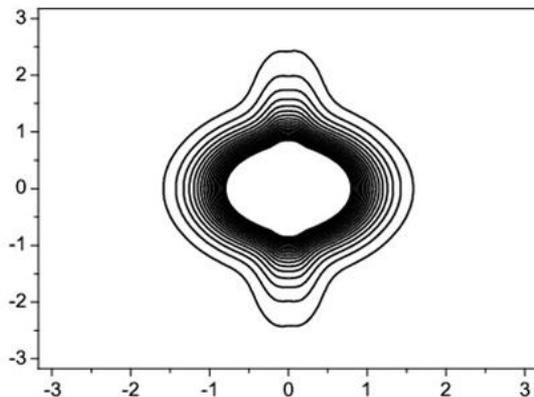
1. Масса облака $10^7 M_{\odot}$
2. Профиль плотности $\sim 1/r$
3. Температура **2000 К**
4. Угловая скорость **21 км/с**
5. Радиус облака **100 парсек**
6. Скорость звука **3.8 км/с**
7. Энергия магнитного поля

$$E_{mag} \sim E_{kin} + |E_{grav}| + E_{int}$$

(образование полярных течений)

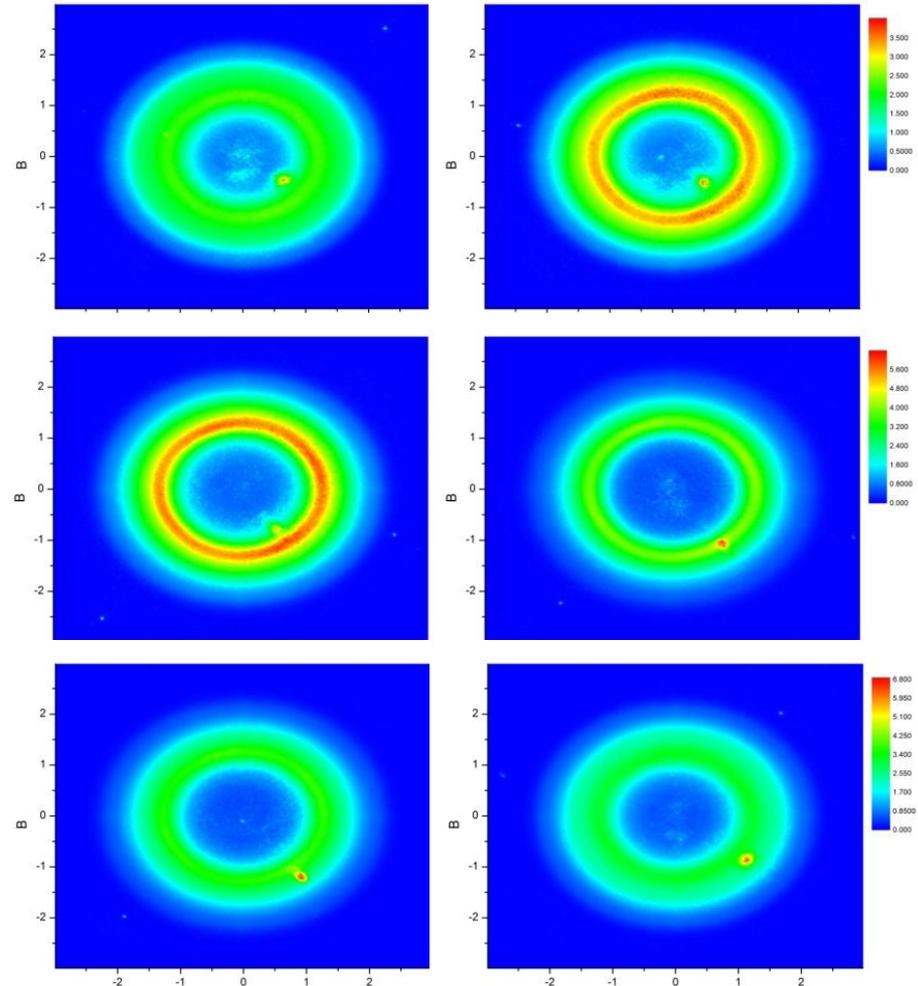
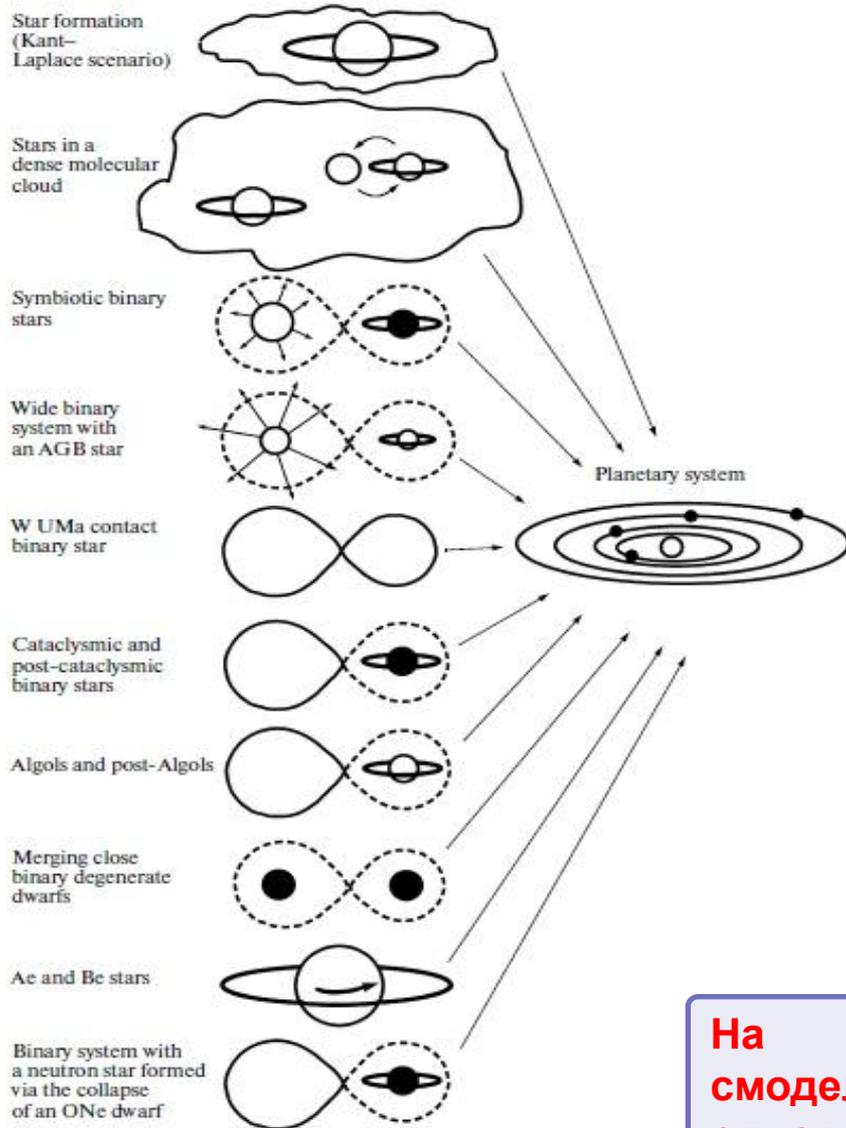


Time = 0.5



1. Решение задачи коллапса качественно и количественно соответствует результатам, полученным кодом на основе SPH метода [1]
2. При наличии сильного вертикального магнитного поля происходит образование полярных течений [2] (аналогично задаче развития МГД турбулентности вдоль силовых линий)

Моделирование протопланетных систем* (использование модели N-тел)



На ранней стадии эволюции смоделирован механизм образования однопланетной системы вследствие эволюции плотного газопылевого кольца

Заключение

В диссертации сформулированы и решены постановки новых задач математического моделирования гидродинамических процессов в самосогласованном гравитационном поле на суперЭВМ:

- ❑ Построена новая модель упруго-пластических деформаций с учетом фазовых переходов.**
- ❑ Построена новая термодинамически согласованная гидродинамическая модель астрофизических объектов.**
- ❑ Разработан новый эффективный численный метод высокого порядка точности, превосходящий по своим характеристикам метод сглаженных частиц.**
- ❑ Разработаны программные реализации численных моделей. Было достигнуто 55-кратное ускорение на GPU и 134-кратное ускорение на Intel Xeon Phi с высокой степенью масштабируемости.**
- ❑ Исследованы с помощью разработанных вычислительных моделей гидродинамические процессы в самосогласованном гравитационном поле на суперЭВМ.**

Спасибо
за
ВНИМАНИЕ