Применение высокопроизводительных вычислений для моделирования гидродинамических течений в сильно неоднородных гравитационных полях*

С.А. Хоперсков[1], А.В. Хоперсков[1], М.А. Еремин[1], А.В. Засов[2], Н.В. Тюрина[2]

Волгоградский государственный университет[1],
Государственный астрономический институт им. П.К.Штернберга, МГУ[2]

Была построена трехмерная численная схема TVD типа MUSCL для решения уравнений газовой динамики с учетом тепловых процессов и самогравитации в декартовой и цилиндрической координатных системах. Численный алгоритм был адаптирован для расчетов на компьютерах с массивно-параллельной архитектурой. Схема применялась для моделирования физических процессов, протекающих в галактических газовых дисках. Детально изучен механизм гофрировочной неустойчивости спиральной структуры в газовом диске, предложен новый, гидродинамический, механизм образования кольцеобразных галактических структур, проведено моделирование и сравнение полученных результатов с наблюдаемой облачной структурой Млечного Пути.

1. Введение

Проблема объяснения различных аспектов феномена природы спиральной структуры дисковых галактик сохраняет свою актуальность несмотря на 50-летнюю историю исследований. Для теоретического изучения широко применяются различные методики компьютерного моделирования. Однако, заметный прогресс был достигнут с привлечением высокопроизводительных суперкомпьютеров и использованием параллельных технологий.

Физические параметры, характеризующие свойства галактического газа, лежат в очень широких пределах, которые не имеют аналогов при решении типичных задач, возникающих в технике или «земной» физике. Межзвездная среда, являясь многофазной, имеет температуру от 3 до 10^5 K, огромные перепады плотности. Типичные значения скорости составляют 100–300 км/с, что дают числа Маха $\sim 10 \div 100$. Наблюдается иерархия пространственных и временных масштабов, которые существенно определяют свойства галактической системы. Например, газовый диск типичной галактики простирается до 20–40 кпк по радиусу. С другой стороны, мелкомасштабные структуры, формирующиеся в области спиральных галактических ударных волн составляют ~ 10 пк, и для их качественного разрешения необходимы масштабы до 1 пк. Характерные времена процессов, определяющих динамику газового диска в целом достигают 1 млрд лет, а необходимость одновременного моделирования быстропротекающих тепловых явлений, нелинейных этапов развития физических неустойчивостей (гравитационных и сдвиговых) требует рассмотрения динамики на временах до 10^4 лет.

Отличительной особенностью моделирования динамики межзвездной среды в пределах галактики является богатый спектр физических эффектов и процессов, существенно влияющих на динамику газа. Отметим целый ряд газодинамических и плазменных неустойчивостей различной природы: гравитационная, тепловая, конвективная, магнитная. Это вызывает необходимость дополнительного учета в уравнениях гидродинамики тепловых процессов, химических превращений, самогравитации, что делает задачу очень жесткой. Отмеченные выше временные характеристики задачи требуют большого числа временных шагов интегрирования $> 10^5$. Например, для самосогласованного описания динамики звездно-газового

*Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 10-07-97017-р_поволжье_а, гранта ВолГУ № 70-2011–а/ВолГУ, ФЦП Росбразование госконтракт П1248 (ФЦП НК)

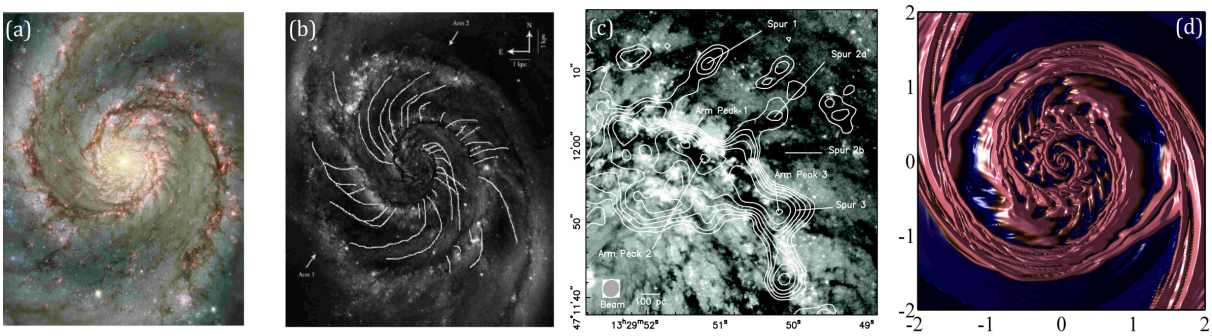

Рис. 1. a) Оптическое изображение галактики M51. b) Изображение M51 с выделением шпуров. c) Отдельные участки M51 со шпурами и оперением [2]. d) Пример результата компьютерного моделирования шпуров в галактических дисках

диска на уровне современной мировой науки необходимо для моделирования звездной подсистемы более 10^7 гравитационно взаимодействующих частиц, а число ячеек сетки для газовой компоненты должно превышать 10^8, что требует значительных ресурсов памяти и машинного времени. Вне использования параллельных технологий такого рода задачи не подлежат решению.

Выделим основные направления работы по исследованию динамики галактик с использованием параллельных технологий:

- Создание пакета программ для численного моделирования газовых течений с учетом тепловых процессов, внешних гравитационных сил и самогравитации.
- Адаптация численных алгоритмов для вычислений на компьютерах с массивно-параллельной архитектурой.
- Исследование развития гофрировочной неустойчивости ударных волн в моделях галактического газового диска с учетом спирального потенциала звезд. Моделирование кольцевых структур в дисковых галактиках.
- Изучение возможности формирования облачной структуры в модели газовой компоненты Млечного Пути. Сравнение результатов моделирования с наблюдениями.

Характерной мелкомасштабной особенностью большинства галактик с глобальным правильным спиральным узором являются шпуры (spurs), отходящие от спирального рукава почти перпендикулярно или пересекающие его. Типичная длина этих образований лежит в пределах $\sim 100 - 1000$ пк (рис. 1a,b,c). Такие структуры часто называют feathers в смысле «оперение», «выступ», «гребень» или spurs («шпора», «отросток»). Обычно под шпурами (spurs) понимают более мощные и развитые структуры, непосредственно примыкающие к основной части спирального рукава (положению ударной волны), под оперением (feathers) — более слабые и протяженные структуры, отчасти являющиеся продолжением шпуров. Наиболее важным наблюдаемым проявлением шпуров является повышенная плотность газа и интенсивные процессы звездообразования [1].

Большинство ближайших спиральных галактик демонстрирует наличие развитой системы шпуров, например, NGC 628, NGC 1232, NGC 3031, NGC 3184, NGC 4321, NGC 5194, NGC 5236, NGC 5457, NGC 4725, NGC 7424, IC0342. Изучение шпуров существенно осложняется сильной неоднородностью пыли в области спиральных рукавов, которая одновременно выступает в качестве одного из индикаторов самих шпур. Но в целом, нарушение гладкости спирального узора следует считать характерной особенностью спиральных галактик, хотя количественные различия существенны и трудно ожидать, что все они могут быть объяснены одним универсальным физическим механизмом.

2. Модель и численный метод

Динамика газового диска в общем случае описывается трехмерной системой уравнений гидродинамики:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u}) = 0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla(\rho \mathbf{u} \times \mathbf{u}) = -\nabla p - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial r}, \tag{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho\left[\frac{\mathbf{u}^2}{2} + \epsilon\right]\right) + \nabla\left(\rho\left[\frac{\mathbf{u}^2}{2} + \varepsilon\right]\right) = Q^+ - Q^- , \tag{3}$$

$\epsilon = \dfrac{p}{(\gamma - 1)\rho}$ – удельная энергия газа, $\rho-$ объемная плотность газа, $p-$ давление, $\mathbf{u}-$ вектор скорости, Q^+ и Q^- - источниковые слагаемые, например, описывают процессы излучения в газе. $\triangle\Psi = 4\pi G\rho$ - уравнение Пуассона.

Для решения системы трехмерных уравнений газодинамики с учетом самогравитации, нагрева и охлаждения (1)-(3) была реализована явная трехмерная TVD (Total Variation Diminishing) схема типа MUSCL (Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws). Этот подход удовлетворяет условию невозрастания полной вариации, сохраняет монотонность численного решения для большинства задач, нет необходимости вводить искусственную вязкость, а также характеризуются отсутствием нефизичных осцилляций на разрывных решениях [3]. Численный метод является эйлеровым и построен для декартовой и цилиндрической систем координат. Использовался метод расщепления по пространственным переменным [8].

Для дискретизации был выбран не конечно-разностный подход, а наиболее эффективный интегро-интерполяционный (метод конечных объемов), в этом случае законы сохранения выполняются на сеточном уровне. При этом значения сеточных функций заменяются средними значениями по объему ячеек, а производные вычисляются по функциям на границах ячеек. Конечно-объемная аппроксимация физически величин также позволяет избегать особенностей при $r = 0$. Использовался третий порядок аппроксимации величин по пространству. Продвижение по времени целесообразно вести с помощью быстрого явного метода, который не понижал бы точность численной схемы. Наиболее удобен метод Рунге-Кутта второго порядка точности.

Для вычисления потоков физических величин через границы ячеек будем использовать решение задачи Римана, на котором основаны так называемые методы Годунова [4]. Использование точного решения задачи Римана является крайне ресурсоемким, поскольку требует в каждой ячейке расчетной сетки решения нелинейного алгебраического уравнения. Воспользуемся приближенным подходом, основанным на методе Хартена-Лакса-ван Лиира (HLLC), который позволяет одновременное учитывать наличие ударных волны, контактных и тангенциальных разрывов [5]. Данный метод был модифицирован для сквозного расчета границы газ-вакуум, что является важной особенностью для моделирования астрофизических систем, в которых могут возникать области крайне низкой концентрации вещества.

Получение реалистичных результатов численных расчетов требует высокого пространственного разрешения (рис. 2). Увеличение числа ячеек для газодинамических расчетов приводит с одной стороны к уменьшению шага интегрирования, с другой к росту количества операций для расчета большего числа узлов сетки. Для получения приемлемых результатов необходимо применение параллельных вычислений на суперкомпьютерах.

3. Распараллеливание вычислительного процесса

Распараллеливание численного кода выполнялось с помощью совместного использования стандартов MPI и OpenMP [7], [10]. Заданная расчетная область распределялась между

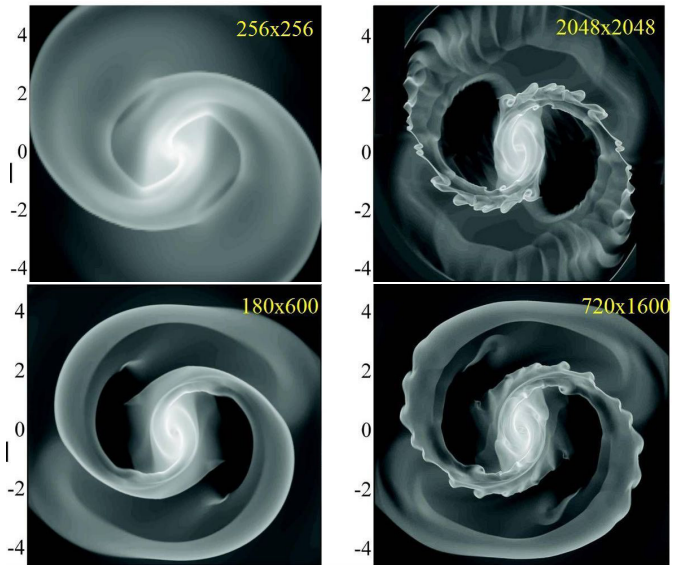

Рис. 2. Слева сравнение результатов расчетов на декартовой координатной сетке с различным пространственным разрешением. Справа тоже самое сравнение для цилиндрической системы координат. Очевидно, что результат расчетов чувствителен к параметрам расчетной сетки

процессорами [6]. Декомпозиция на подобласти проводилось вдоль всех трех координатных осей: вдоль радиуса, вдоль угла и вдоль вертикального направления (см. рис. 3).

Для получения решения во всей расчетной области необходимо обеспечивать непрерывную связь соседних процессов за счет обмена данными в фиктивных граничных ячейках. Поскольку разработанная численная TVD схема имеет третий порядок аппроксимации по пространству, то соседним процессам необходимо обмениваться всеми физическими величинами находящимися в двух приграничных слоях ячеек. В силу того, что данные граничных ячеек расположены в памяти непоследовательно, то вдоль радиуса можно пересылать границу целиком (плоскость), вдоль угла последовательность одномерных массивов и вдоль вертикальной координаты — поэлементно. Таким образом, время обмена границами на каждом гидродинамическом шаге вдоль координатных осей относится как 1:2:10. Для того, чтобы компенсировать потерю эффективности при пересылке граничных условий вдоль вертикальной координаты, по этому направлению декомпозиция должна быть наименее подробной. Дальнейшей модификацией обмена границами стало последовательное объединение данных, необходимых для отправки, и их дальнейшая пересылка. Для вычислительных кластеров, состоящих из многоядерных процессоров, эффективным оказалось использование стандарта OpenMP внутри каждого процесса. В этом случае происходит ускорение из-за отсутствия необходимости производить обмен фиктивными ячейками. Структура численного газодинамического кода позволяет распараллелить вычисления с помощью OpenMP в течение всего времени расчета на каждом процессе. В численном гидродинамическом алгоритме также проведена оптимизация распараллеливания за счет использования неблокирующей пересылки данных стандарта MPI [7].

Алгоритм расчета самогравитации является более ресурсоемким, нежели вычисление газодинамики на каждом шаге интегрирования (см рис. 4), поэтому важно адаптировать решение уравнения Пуассона под параллельные вычисления. Кратко опишем алгоритм нахождения гравитационного взаимодействия в газе. Совокупность узлов расчетной стеки могут быть организованы в иерархическую систему групп в форме древовидной структуры. Для сортировки частиц используется иерархия кубов, каждому узлу соответствует 8 потомков. В самом верхнем части дерева находятся все частицы. Деление кубов продолжа-

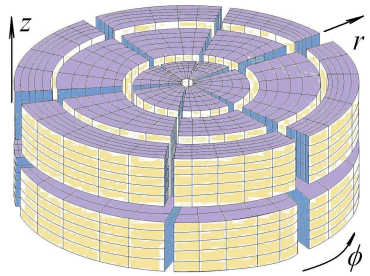

Рис. 3. Декомпозиция расчетной области вдоль трех направлений для цилиндрической системы координат

Рис. 4. Распределение времени расчета на одном газодинамическом шаге

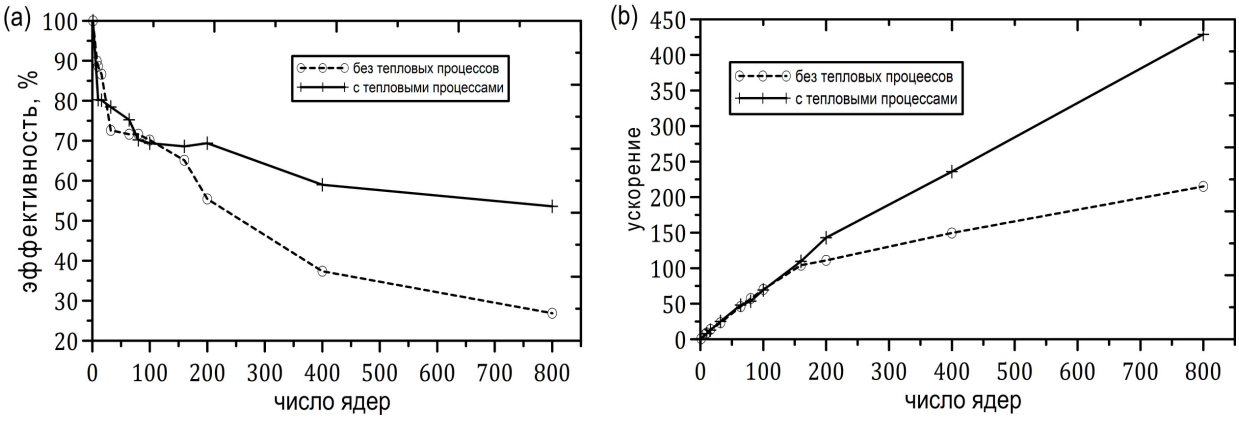

Рис. 5. (a) Графики эффективности параллелизма реализованного численного алгоритма для моделей с учетом термодинамических процессов и без них. (b) графики ускорения для тех же моделей

ется до тех пока в кубе не останется один узел, после чего для каждой ячейки или узла в дереве, необходимо найти общую массу и центр масс. Для более точного вычисления гравитации была реализована возможность учитывать квадрупольные слагаемые разложения гравитационного поля.

На рис. 4 показано, какую часть одного шага интегрирования занимают различные этапы вычислений. Эффективность распараллеливания численного алгоритма была оценена в серии экспериментов (число ядер $n_p = 8, 10, 16, 32, 64, 80, 100, 160, 200, 400, 800$) для двух моделей: с учетом термодинамических процессов и без них (см. рис 5a). На графике заметно, что наибольшая эффективность, около 70%, достигается при одновременном использовании в расчетах не более 200 ядер. Графики ускорения также построены для тех же наборов экспериментов (см. рис 5b). Ускорение значительно выше в моделях при учете тепловых процессов, чем для адиабатических моделей. Это связано с существенно большим объемом дополнительных вычислений, не влияющих на количество пересылаемых данных.

Вычисления проводились на суперкомпьютере СКИФ МГУ "ЧЕБЫШЕВ"(производитель Т-Платформы). Краткая характеристика кластера: пиковая производительность 60 TFlop/s, 1250 процессоров, 5000 ядер в системе, объём оперативной памяти 5.5 Тбайт, модель про-

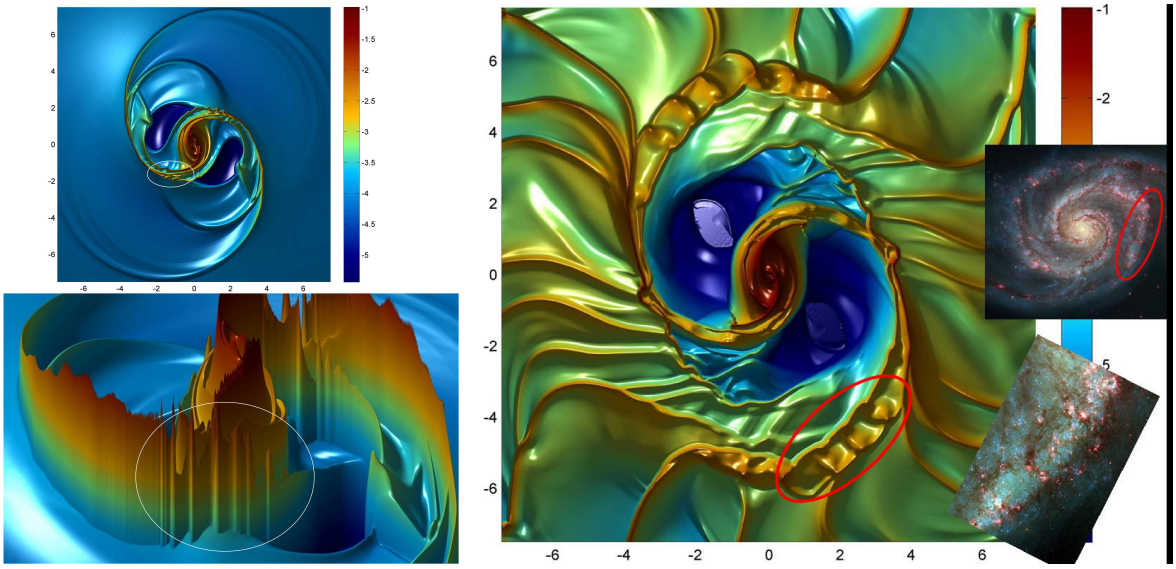

Рис. 6. Слева: начальный этап развития гофрировки фронта галактической спиральной ударной волны. Справа: нелинейный этап развития гофрировочной неустойчивости, отчетливо видны характерные протяженные шпуры (см. рис.1). На вставках изображения галактики M51.

цессора Intel Xeon E5472 3.0 ГГц.

Далее рассмотрим основные результаты численного моделирования, полученные с использованием описанного программного продукта.

4. Гофрировочная неустойчивость в газовом диске

Вначале рассмотрим возможность генерации шпуров за счет чисто гидродинамических эффектов, связанных с существенно нелинейной стадией развития гофрировочной (wiggle) неустойчивости фронта глобальной ударной волны в газовом диске при наличии спиральной волны плотности звездной компоненты [9].

В задаче имеется 8 свободных физических параметров модели, варьирование которых в широких пределах позволило рассмотреть формирование различных структур, связанных с развитием гофрировочной неустойчивости глобальной ударной волны. Значительное количество свободных параметров задачи приводит к необходимости проведения большого числа компьютерных экспериментов для исследования одной модели галактического газового диска. Так для одной модели проводилось до 10–15 расчетов с различными наборами параметров, что занимало в среднем 10000 процессор/час.

Возможность возникновения и скорость нарастания шпуров существенно зависят от их положения на спиральном рукаве. Как правило, очаг первоначального формирования нелинейной стадии гофрировки локализован на небольшом участке ударной волны (рис. 8a). По мере увеличения длины отростка газовой спирали он может достигать соседнего участка витка спирали, индуцируя возмущения на нем(рис. 8b). Такой механизм приводит к формированию наиболее интенсивных и протяженных шпуров с мощным оперением.

Рис. 7. Изображения галактик с кольцами (Hubble Space Telescope): слева Hoag's object , в центре NGC 1512, справа NGC 6782

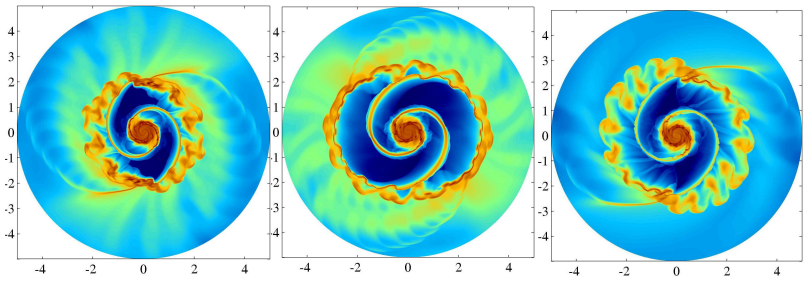

Рис. 8. Примеры колец в галактических газовых дисках в численных моделях с различными параметрами

5. Образование перьев в кольцеобразных галактических структурах

Известно значительное число галактик, у которых на некотором расстоянии от центра наблюдается кольцеобразная спиралевидная структура. Можно формально выделить три типа таких колец, не затрагивая различные механизмы их образования: ядерные кольца (NGC 1512, NGC 4314, NGC 6782), кольца на концах бара (NGC 1512, NGC 3081, NGC 4725, NGC 5905) и периферийные кольца в дисковой компоненте (M31, NGC 7742, AM 0644-741). В данной работе предложен гидродинамический механизм формирования кольцеобразных структур в галактических дисках.

На рис. 8 показаны распределения поверхностной плотности в моделях, в которых происходит образование кольцеобразных структур во внешней области диска, внутри которого имеется правильный двухрукавный узор со слабыми проявлениями нерегулярности. В то время как кольцо обнаруживает все признаки наличия шпуров и оперения различной степени интенсивности (рис. 8).

6. Моделирование облачной структуры Млечного Пути

Наблюдательные данные о газопылевых комплексах (ГПК) нашей Галактики показывают, что эти объекты концентрируются к спиральным рукавам Галактики, при этом свойства комплексов зависят от положения в Галактике [11] (рис. 9а).

Компьютерные модели, описывающие динамику газа в Галактике, должны адекватно описывать мелкомасштабную структуру и внутреннюю кинематику молекулярных облаков в галактическом диске. Это предъявляет особые требования к пространственному и временному разрешению, а также адекватный учет наиболее важных физических факторов.

Основываясь на результатах численных экспериментов проведенных на суперкомпьютере СКИФ МГУ "ЧЕБЫШЕВ"удалось продемонстрировать сценарии образования облачной структуры газа в окрестностях спиральных рукавов Галактики. Достигнутое разрешение

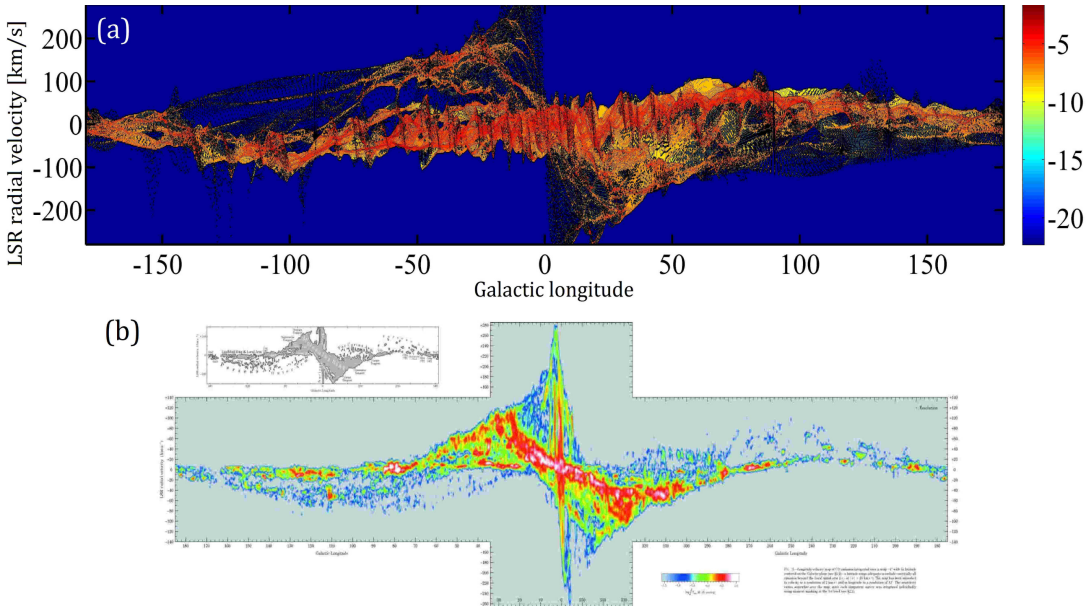

Рис. 9. Сравнение распределения молекулярного газа в численной модели с излучением газа Галактики [12]. Имеется качественное согласие результатов компьютерных симуляций и данных наблюдений. Отчетливо видны характерные морфологические особенности: молекулярное кольцо, внешний спиральный рукав и рукав Персея.

позволило изучать отдельные мелкомасштабные газовые комплексы. В моделях, учитывающих тепловые процессы (нагрев–охлаждение), хорошо выделяются газопылевые комплексы (рис. 10). В их плотных частях температура составляет $50-200$ К. При этом дисперсии турбулентных скоростей для таких образований порядка $3-5$ км/с. Параметры этих структур, полученные в численных экспериментах, соответствуют наблюдательным данным о гигантских молекулярных облаках и их окружении (рис. 9).

В рамках численных гидродинамических расчетов продемонстрирована возможность формирования ГПК, содержащих структуры типа гигантских молекулярных облаков. Структура и кинематика газа в построенных моделях качественно отражает наблюдаемые особенности распределения газопылевых комплексов.

7. Заключение

В рамках данного проекта было проведено около 200 численных экспериментов на вычислительном кластере СКИФ МГУ "ЧЕБЫШЕВ". На эти расчеты было затрачено порядка 200000 процессор/час. Благодаря использованию ресурсоемких вычислений на суперкомпьютере были промоделированы тонкие структуры в газовых дисках галактик. Результаты теоретических расчетов были сопоставлены со структурами наблюдаемыми в реальных спиральных галактиках. Сформулируем наиболее важные результаты:

1. Создание универсального программного продукта для моделирования газодинамических процессов различной геометрии с учетом самогравитации, тепловых процессов и внешних гравитационных полей. Данный пакет программ адаптирован для использования на ЭВМ с массивно-параллельной архитектурой.

2. Численные эксперименты позволили объяснить ряд наблюдаемых структур (шпуры, оперение) которые являются результатом развития гофрировочной неустойчивости ударных волн в газовом диске.

3. Предложен и численно-экспериментально изучен гидродинамический механизм образо-

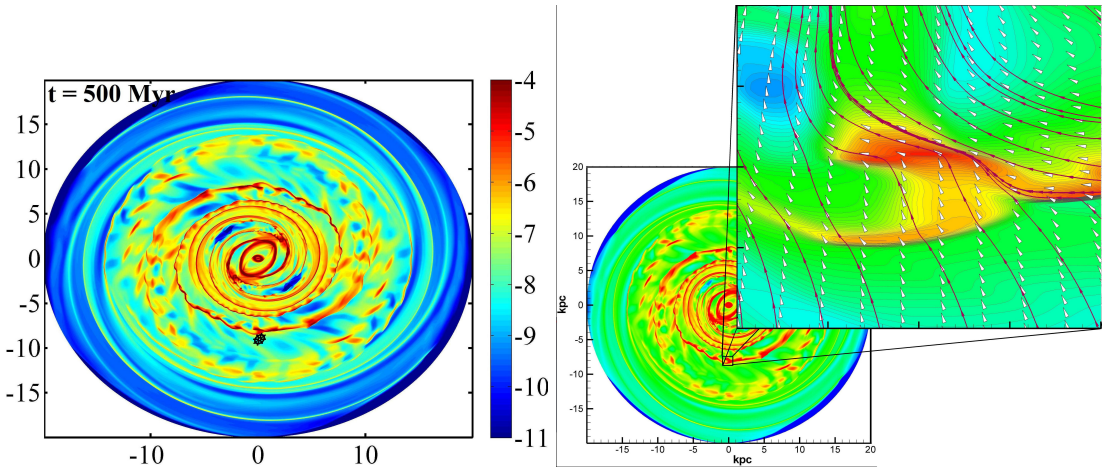

Рис. 10. Слева — пример развития облачной структуры в модели газового диске Млечного Пути, справа — поверхностная плотность и поле скоростей для отдельного облака на фоне всего галактического диска. Значком указано положения солнечной системы.

вания галактических колец в газовой компоненте галактик.
4. Продемонстрирован процесс формирования облаков в нашей Галактике под действием газодинамической и тепловой неустойчивостей.

Литература

1. Roberts W., Hausman M. 1984, Astrophysical Journal, 277, 744
2. Corder S., Sheth K., Scoville N.Z., Koda J., Vogel S.N., Ostriker E. 2008, Astrophysical Journal, 689, 148
3. Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. - М.: Физмалит, 2001.
4. van Leer B. Journal of Computational Physics, 1979, V.32, P.101-136
5. Shengtai Li. Journal of computational physics, 2004, V.203, P.344-357
6. Кузнецов П.В., Кайгородов О.А. Адаптация схемы Ошера для параллельных вычислений, М.: 2002
7. Антонов А.С. Введение в параллельные вычисления, М.: 2002
8. Современные проблемы вычислительной математики и математического моделирования / Под ред. Бахвалова Н.С., Воеводина В.В. М.: Наука, 2005
9. Wada K. 2008, Astrophysical Journal, 675, 188
10. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. С.-Пб., 2002
11. Kalberla P.M.W., Kerp J. 2009, ARAA, 47, 27
12. Dame, T., Hartmann, D., Thaddeus, P. 2001, Astrophysical Journal, 547, 729