

СИБИРСКИЙ ЖУРНАЛ ИНДУСТРИАЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Главный редактор	В. Л. Береснев
Зам. главного редактора	А. Л. Карчевский
Отв. секретарь	В. А. Дедок

Журнал основан в 1998 году
Выходит 4 раза в год
Том 25, №4(92)
Октябрь - декабрь 2022 г.

ЧЛЕНЫ РЕДКОЛЛЕГИИ

Г. В. Алексеев	С. Б. Медведев
Б. Д. Аннин	Р. Г. Новиков
В. С. Белоносов	Д. Е. Пальчунов
В. Н. Белых	П. И. Плотников
Ю. С. Волков	В. Г. Романов
В. П. Ильин	Е. М. Рудой
С. И. Кабанихин	В. М. Садовский
А. Н. Карапетянц	Д. И. Свириденко
М. В. Клибанов	А. С. Терсенов
С. С. Кутателадзе	В. С. Тимофеев
В. А. Левин	В. В. Шайдуров
Н. И. Макаренко	

СОДЕРЖАНИЕ

Аюпова Н. Б., Голубятников В. П., Минушкина Л. С. Об инвариантных поверхностях в фазовых портретах моделей кольцевых генных сетей	5
• Боронина М. А., Куликов И. М., Черных И. Г., Винс Д. В. Использование комбинации схем Рунге и Рунге-Кутты для численного решения уравнений магнитной гидродинамики в задачах космической плазмы	14
Васильев В. И., Кардашевский А. М., Попов В. В. Итерационное решение ретроспективной обратной задачи теплопроводности с неоднородными граничными условиями Дирихле	27
Демиденко Г. В. Метод решения одной биологической задачи большой размерности	42
Дудко О. В., Лаптева А. А., Рагозина В. Е. Эволюция волновой картины кусочно-линейного одноосного растяжения и сжатия разномодульного упругого стержня	54
Ермишина В. Е. Гиперболическая модель сильнонелинейных волн в двухслойных течениях неоднородной жидкости	71
Мишин А. В. Учёт обобщённой производной и коллективного влияния фаз на процесс гоменизации	86
Нещадим М. В. Уравнение Лиувилля и точно транзитивные представления алгебры $sl_2(\mathbb{R})$	99
Остросаблин Н. И. Единственность решения граничных задач статических уравнений теории упругости с несимметричной матрицей модулей упругости	107
Паламарчук Е. С. Оптимальное управление в задаче долгосрочного трекинга экспоненциального процесса Орнштейна — Уленбека	116
Перцев Н. В., Бочаров Г. А., Логинов К. К. Численное моделирование динамики популяции Т-лимфоцитов в лимфоузле	136
Петраков И. Е. Контактная задача изгиба многослойной композитной пластины с учётом различных модулей упругости при растяжении и сжатии	153
Селиверстов Е. Ю. Иерархический метод установки параметров параллельных популяционных метаэвристических алгоритмов оптимизации	164
Сказка В. В. Кососимметрические разностные аналоги четвёртого порядка аппроксимации первой производной	179
Скворцова М. А., Ыскак Т. Оценки решений дифференциальных уравнений с распределённым запаздыванием, описывающих конкуренцию нескольких видов микроорганизмов	193
Терсенов Ар. С. О существовании вязких решений анизотропных параболических уравнений с переменными показателями анизотропности	206
Чумаков Г. А., Чумакова Н. А. О локализации неустойчивого решения одной системы трёх нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений с малым параметром	221

НОВОСИБИРСК

ИЗДАТЕЛЬСТВО ИНСТИТУТА МАТЕМАТИКИ

УДК 519.6

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОМБИНАЦИИ СХЕМ РОУ И РУСАНОВА
ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МАГНИТНОЙ
ГИДРОДИНАМИКИ В ЗАДАЧАХ КОСМИЧЕСКОЙ ПЛАЗМЫ**© 2022 М. А. Боронина^a, И. М. Куликов^b, И. Г. Черных^c, Д. В. Винс^d

*Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН,
просп. Лаврентьева, 6, г. Новосибирск 630090, Россия*

E-mails: ^aboronina@ssd.sccc.ru, ^bkulikov@ssd.sccc.ru, ^cchernykh@ssd.sccc.ru,
^dvins@sscc.ru

Поступила в редакцию 05.05.2022 г.; после доработки 27.05.2022 г.;
принята к публикации 22.06.2022 г.

Описан новый численный метод решения уравнений идеальной магнитной гидродинамики (МГД) на основе метода Годунова, комбинации схем Роу и Русанова и кусочно-параболического представления решения. Гибридная схема решения задачи Римана связана с возможностью воспроизводить численное решение без особенностей вдоль направлений, что особенно важно, когда восстанавливаются компоненты скорости и магнитного поля в поперечном направлении. Численный метод реализован в виде программного комплекса для массивно-параллельных суперЭВМ. На кластере НКС-1П Сибирского суперкомпьютерного центра ИВМиМГ СО РАН проведены исследования параллельной реализации и вычислительные эксперименты. В качестве тестовой для верификации метода использована задача с аналитическим решением. Рассмотрено численное решение задачи взаимодействия облака молекулярного водорода с набегающей межзвёздной средой.

Ключевые слова: математическое моделирование, суперкомпьютерные вычисления, вычислительная астрофизика.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2022.25.402

ВВЕДЕНИЕ

Магнитное поле значительным образом влияет на эволюцию и взаимодействие астрофизических объектов от космологических масштабов [1, 2] до звёзд [3]. Для изучения влияния магнитного поля на такие объекты необходим аппарат математического моделирования с использованием новейших суперкомпьютеров, вычислительных методов и параллельных вычислительных технологий [4]. Среди множества кодов для моделирования магнитно-гидродинамических течений особо отметим следующие три кода:

1) код ATHENA [5], ориентированный на моделирование замагниченной космической плазмы без учёта гравитации. В коде используется достаточно большое число схем для решения задачи Римана и различные способы кусочно-полиномиальной реконструкции. Также используется теорема Стокса для обеспечения бездивергентности магнитного поля.

2) код PENCIL CODE [6] на основе кусочно-разностной схемы высокого порядка точности с искусственной вязкостью. Для обеспечения бездивергентности магнитного поля используется метод на основе восстановления электростатического потенциала с помощью решения уравнения Пуассона.

3) код ZEUS [7], который построен на основе метода разделения операторов, где конечно-разностная схема используется для аппроксимации работы сил, а адвективный перенос происходит с использованием кусочно-параболического представления решения.

Разумеется, данный список далеко не исчерпывающий, но эти три кода являются наиболее значимыми для трёхмерного моделирования замагниченной космической плазмы.

При моделировании магнитно-гидродинамических течений по направлению ударной волны имеет место образование особенностей типа карбункул-эффектов. Наличие магнитного поля усложняет задачу, так как в общем случае вектор магнитного поля не сонаправлен с вектором скорости. Именно этот критерий мы будем использовать при конструкции нашей гибридной схемы на основе комбинации схем типа РоЕ [8] и схемы типа Русанова [9] с использованием кусочно-параболического представления решения [10] с подходом, изложенным в работе [11]. Конструкция численного метода позволила сохранить все шаблоны параллельной реализации, которые были нами использованы ранее. В работе мы рассмотрим модельную задачу взаимодействия молекулярного облака с межзвёздной средой. На ней покажем возможность метода воспроизводить сферическую ударную волну без искажений вдоль линии координат.

В первом разделе подробно описана вычислительная модель и конструкция численного метода. Второй раздел посвящён исследованию масштабируемости в слабом и сильном смысле на кластере НКС-1П. Третий раздел содержит вычислительные эксперименты на задаче с аналитическим решением и задаче взаимодействия молекулярного облака с межзвёздной средой.

1. ОПИСАНИЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МОДЕЛИ

Запишем переопределённую систему уравнений магнитной гидродинамики в операторной форме в трёхмерных декартовых координатах:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v} - \mathbf{B} \mathbf{B} + p^*) = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho E + p^*) \mathbf{v} - \mathbf{B}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{v})) = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho S}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho S \mathbf{v}) = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}), \quad (5)$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{B}) = 0, \quad (6)$$

где ρ — плотность, \mathbf{v} — вектор скорости, \mathbf{B} — вектор магнитного поля, $p = \rho \varepsilon (\gamma - 1)$ — газовое давление, $p^* = p + \mathbf{B}^2/2$ — полное давление, γ — показатель адиабаты, $\rho E = p/(\gamma - 1) + \rho \mathbf{v}^2/2 + \mathbf{B}^2/2$ — полная механическая энергия, γ — показатель адиабаты.

Для определения временного шага τ в каждой ячейке расчётной области определяются скорость звука $c = \sqrt{\gamma p/\rho}$, альфвеновская скорость звука $c_a = |B_x/\sqrt{\rho}|$, быстрые c_f и медленные c_s магнитные скорости:

$$c_f = \sqrt{\frac{(c^2 + b^2) + \sqrt{(c^2 + b^2)^2 - 4c^2c_a^2}}{2}}, \quad c_s = \sqrt{\frac{(c^2 + b^2) - \sqrt{(c^2 + b^2)^2 - 4c^2c_a^2}}{2}},$$

где $b = \sqrt{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}$. После чего шаг по времени выбирается по уравнению

$$\tau = \min \left(\frac{CFL \times h}{v + b + c + c_a + c_s + c_f} \right),$$

где $v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$ — модуль вектора скорости, h — шаг по пространству, $\text{CFL} = 0.2$ — число Куранта. Заметим, что данные скорости используются в части схем Роу и Русанова.

Перед переходом к описанию необходимых уравнений для конструкции схем Роу и Русанова для МГД уравнений опишем подробно механизм построения локальных парабол. Будем конструировать кусочно-параболическую функцию для произвольного гидродинамического параметра $q(x)$ на регулярной сетке с шагом h , на интервале $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$. Общий вид параболы имеет следующую форму: $q(x) = q_i^L + \xi(\Delta q_i + q_i^{(6)}(1 - \xi))$, где q_i — значение в ячейке,

$$\xi = (x - x_{i-1/2})h^{-1}, \quad \Delta q_i = q_i^L - q_i^R, \quad q_i^{(6)} = 6(q_i - 1/2(q_i^L + q_i^R))$$

при условии сохранения консервативности, т. е.

$$q_i = h^{-1} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} q(x) dx.$$

Для конструирования значений $q_i^R = q_{i+1}^L = q_{i+1/2}$ будем использовать интерполяционную функцию четвёртого порядка точности:

$$q_{i+1/2} = 1/2(q_i + q_{i+1}) - 1/6(\delta q_{i+1} - \delta q_i),$$

где $\delta q_i = 1/2(q_{i+1} - q_{i-1})$. Опишем алгоритм построения параболы в пять шагов.

Шаг 1. Сконструировать значения $\delta q_i = 1/2(q_{i+1} - q_{i-1})$. Для этого нам необходимо значение соседних ячеек q_{i+1} , q_{i-1} . Для избежания экстремумов используем модификацию последней формулы для δq_i в виде

$$\delta_m q_i = \begin{cases} \min\{|\delta q_i|, 2|q_{i+1} - q_i|, 2|q_i - q_{i-1}|\} \text{sgn}(\delta q_i), & (q_{i+1} - q_i)(q_i - q_{i-1}) > 0, \\ 0, & (q_{i+1} - q_i)(q_i - q_{i-1}) \leq 0. \end{cases}$$

В случае параллельной реализации на архитектурах с распределённой памятью мы должны сделать обмены одного слоя перекрытия расчётной области средствами MPI. Далее пересчитываются значения на границе с помощью интерполянта четвёртого порядка точности:

$$q_i^R = q_{i+1}^L = q_{i+1/2} = 1/2(q_i + q_{i+1}) - 1/6(\delta_m q_{i+1} - \delta_m q_i).$$

Шаг 2. Для конструирования параболы используем уравнение

$$\Delta q_i = q_i^L - q_i^R, \quad q_i^{(6)} = 6(q_i - 1/2(q_i^L + q_i^R)).$$

В случае немонотонности локальной параболы перестроим значения на границах q_i^L , q_i^R по формулам

$$\begin{aligned} q_i^L &= q_i, \quad q_i^R = q_i, \quad (q_i^L - q_i)(q_i - q_i^R) \leq 0, \\ q_i^L &= 3q_i - 2q_i^R, \quad \Delta q_i q_i^{(6)} > (\Delta q_i)^2, \\ q_i^R &= 3q_i - 2q_i^L, \quad \Delta q_i q_i^{(6)} < -(\Delta q_i)^2. \end{aligned}$$

Таким образом, граничные значения удовлетворяют условиям монотонности.

Шаг 3. Перестроим параметры параболы с учётом новых значений на границах ячеек:

$$\begin{aligned} \Delta q_i &= q_i^L - q_i^R, \\ q_i^{(6)} &= 6(q_i - 1/2(q_i^L + q_i^R)). \end{aligned}$$

Стоит отметить, что параболы могут иметь разрыв на границах ячеек, однако в нашем случае локальные параболы используются как составная часть задачи Римана и этот факт не должен нас смущать.

Шаг 4. Далее происходит дополнительная монотонизация параболы. Если мы находимся в области разрыва рассматриваемой функции, тогда введятся дополнительные подправки в параболу:

$$q_i^{L,+} = q_i - \frac{1}{4}\delta_m q_i \quad q_i^{R,+} = q_i + \frac{1}{4}\delta_m q_i.$$

Вводим дополнительный критерий $\eta = -h^2 \frac{\delta_m^2 q_{i+1} - \delta_m^2 q_{i-1}}{q_{i+1} - q_{i-1}}$. В случае, если выполнено одно из условий

$$|q_{i+1} - q_{i-1}| - \frac{\min(|q_{i+1}|, |q_{i-1}|, |q_{i+1}| + |q_{i-1}|)}{100} \leq 0, \\ q_{i+1}q_{i-1} > 0,$$

значение критерия η становится равным нулю. Вес, с которым будут браться в расчётную схему значения $q_i^{L,+}$ и $q_i^{R,+}$, определяется по формуле $\hbar = \max(\min(20(\eta - 0.05), 1), 0)$. Финальные значения потоков на границе вычисляются по формулам

$$q_i^L = (1 - \hbar)q_i^{L,+} + \hbar q_i^L, \\ q_i^R = (1 - \hbar)q_i^{R,+} + \hbar q_i^R.$$

Последние два значения используются для определения величин q_i^L и q_i^R .

Шаг 5. На пятом шаге происходит финальная перестройка параболы с учётом новых значений на границах ячеек:

$$\Delta q_i = q_i^L - q_i^R, \\ q_i^{(6)} = 6(q_i - 1/2(q_i^L + q_i^R)).$$

В результате локальная парабола в каждой ячейке $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ получена.

Для конструирования схемы Роу и Русанова нам необходимо сформулировать уравнения магнитной гидродинамики в виде квазилинейной гиперболической системы уравнений, записанных для физических переменных $\frac{\partial u}{\partial t} + A \frac{\partial u}{\partial x} = 0$, где вектор u и матрица A имеют вид

$$u = \begin{pmatrix} \rho \\ v_x \\ v_y \\ v_z \\ p \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} v_x & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v_x & 0 & 0 & \rho^{-1} & B_y/\rho & B_z/\rho \\ 0 & 0 & v_x & 0 & 0 & -B_x/\rho & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v_x & 0 & 0 & -B_x/\rho \\ 0 & \rho c^2 & 0 & 0 & v_x & 0 & 0 \\ 0 & B_y & -B_x & 0 & 0 & v_x & 0 \\ 0 & B_z & 0 & -B_x & 0 & 0 & v_x \end{pmatrix}.$$

Вектор собственных значений Λ и матрицы правых R и левых L собственных векторов имеют

ВИД

$$\Lambda = (v_x - c_f, v_x - c_a, v_x - c_s, v_x, v_x + c_s, v_x + c_a, v_x + c_f)^T,$$

$$R = \begin{pmatrix} \rho\alpha_f & 0 & \rho\alpha_s & 1 & \rho\alpha_s & 0 & \rho\alpha_f \\ -c_{ff} & 0 & -c_{ss} & 0 & c_{ss} & 0 & c_{ff} \\ Q_s\beta_y & -\beta_z & -Q_f\beta_y & 0 & Q_f\beta_y & \beta_z & -Q_s\beta_y \\ Q_s\beta_z & \beta_y & -Q_f\beta_z & 0 & Q_f\beta_z & -\beta_y & -Q_s\beta_z \\ \rho c^2\alpha_f & 0 & \rho c^2\alpha_s & 0 & \rho c^2\alpha_s & 0 & \rho c^2\alpha_f \\ A_s\beta_y & -\operatorname{sgn}(B_x)\sqrt{\rho}\beta_z & -A_f\beta_y & 0 & -A_f\beta_y & -\operatorname{sgn}(B_x)\sqrt{\rho}\beta_z & A_s\beta_y \\ A_s\beta_z & \operatorname{sgn}(B_x)\sqrt{\rho}\beta_y & -A_f\beta_z & 0 & -A_f\beta_z & \operatorname{sgn}(B_x)\sqrt{\rho}\beta_y & A_f\beta_z \end{pmatrix},$$

$$L = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{c_{ff}}{2c^2} & \frac{Q_s\beta_y}{2c^2} & \frac{Q_s\beta_z}{2c^2} & \frac{\alpha_f}{2c^2\rho} & \frac{A_s\beta_y}{2c^2\rho} & \frac{A_s\beta_z}{2c^2\rho} \\ 0 & 0 & -\beta_z/2 & \beta_y/2 & 0 & -\frac{\operatorname{sgn}(B_x)\beta_z}{2\sqrt{\rho}} & \frac{\operatorname{sgn}(B_x)\beta_y}{2\sqrt{\rho}} \\ 0 & -\frac{c_{ss}}{2c^2} & -\frac{Q_f\beta_y}{2c^2} & -\frac{Q_f\beta_z}{2c^2} & \frac{\alpha_s}{2c^2\rho} & -\frac{A_f\beta_y}{2c^2\rho} & -\frac{A_f\beta_z}{2c^2\rho} \\ 1 & 0 & 0 & 0 & -1/c^2 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{c_{ss}}{2c^2} & \frac{Q_f\beta_y}{2c^2} & \frac{Q_f\beta_z}{2c^2} & \frac{\alpha_s}{2c^2\rho} & -\frac{A_f\beta_y}{2c^2\rho} & -\frac{A_f\beta_z}{2c^2\rho} \\ 0 & 0 & \beta_z/2 & -\beta_y/2 & 0 & -\frac{\operatorname{sgn}(B_x)\beta_z}{2\sqrt{\rho}} & \frac{\operatorname{sgn}(B_x)\beta_y}{2\sqrt{\rho}} \\ 0 & \frac{c_{ff}}{2c^2} & -\frac{Q_s\beta_y}{2c^2} & -\frac{Q_s\beta_z}{2c^2} & \frac{\alpha_f}{2c^2\rho} & \frac{A_s\beta_y}{2c^2\rho} & \frac{A_s\beta_z}{2c^2\rho} \end{pmatrix},$$

где $c_{ff} = c_f\alpha_f$, $c_{ss} = c_s\alpha_s$, $Q_f = \operatorname{sgn}(B_x)c_f\alpha_f$, $Q_s = \operatorname{sgn}(B_x)c_s\alpha_s$, $A_f = \alpha_f c\sqrt{\rho}$, $A_s = \alpha_s c\sqrt{\rho}$. Нам необходимо доопределить параметры:

$$(\alpha_f, \alpha_s) = \begin{cases} \frac{(\sqrt{c^2 - c_s^2}, \sqrt{c_f^2 - c^2})}{\sqrt{c_f^2 - c_s^2}}, & B_y^2 + B_z^2 > 0, \\ (1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}), & B_y^2 + B_z^2 = 0, \end{cases}$$

$$(\beta_f, \beta_s) = \begin{cases} \frac{(B_y, B_z)}{\sqrt{B_y^2 + B_z^2}}, & B_y^2 + B_z^2 > 0, \\ (1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}), & B_y^2 + B_z^2 = 0. \end{cases}$$

Данное разложение достаточно для конструирования потоков Ro_u , где мы используем классический подход, аналогичный работе [8], и потока Русанова из работы [9]. Обозначим соответствующие потоки F_{Roe} и F_{Rus} , итоговый поток будем находить из уравнения

$$F = k^2 \times F_{Roe} + (1 - k^2) \times F_{Rus},$$

где k вычисляется как косинус угла между вектором скорости и вектором магнитного поля:

$$k = \frac{(\vec{v}, \vec{B})}{|\vec{v}| \times |\vec{B}|}.$$

Для выполнения условия $\nabla \cdot (\mathbf{B}) = 0$ мы используем схему, основанную на теореме Стокса: $\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B})$. Для этого по решению задачи Римана определяются значения вектора электрического поля $\mathbf{E} = \mathbf{v} \times \mathbf{B}$ в узлах расчётной сетки $E_{i\pm 1/2, k\pm 1/2, l\pm 1/2}^{x,y,z}$. Происходит пересчёт значений магнитного поля с предыдущего шага по времени, расположенных в центре ячеек, с помощью конечно-разностной схемы уравнения $\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{E}$. Таким образом, мы получаем соответствующие значения вектора магнитного поля на гранях ячеек $B_{i\pm 1/2, k, l}^x$, $B_{i, k\pm 1/2, l}^y$ и $B_{i, k, l\pm 1/2}^z$, которые и обеспечивают условие бидивергентности магнитного поля. Для перехода к значениям вектора \mathbf{B} в ячейке осредняем значения по каждому направлению соответствующих компонент магнитного поля с граней ячейки.

На этапе регуляризации решения происходит корректировка скорости в случае границы газ-вакуум, где выполняется условие $(E - \bar{v}^2/2 - \mathbf{B}^2/2\rho)/E \geq 10^{-3}$:

$$|\mathbf{v}| = \sqrt{2 \frac{\rho E - p(\rho, S) - \mathbf{B}^2/2}{\rho}},$$

$p(\rho, S)$ — уравнение состояния в зависимости от плотности и энтропии. В остальной области происходит корректировка, которая гарантирует неубывание энтропии: $p = (\gamma - 1)(\rho E - \rho \mathbf{v}^2/2 - \mathbf{B}^2/2)$. Такая модификация обеспечивает детальный баланс энергий и гарантирует неубывание энтропии.

2. ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ РЕАЛИЗАЦИИ

Использование равномерной расчётной сетки в декартовых координатах позволяет использовать произвольную декартову топологию для декомпозиции расчётной области. В настоящей работе используется геометрическая декомпозиция расчётной области по одной координате средствами технологии MPI. В силу линейной алгоритмической сложности алгоритма в основе кода мы проведём исследования ускорения и масштабируемости программной реализации.

Исследование ускорения кода проводилось на расчётной сетке 256^3 . Для этого замерялось время вычислений при различном числе используемых процессов. Ускорение вычислялось по формуле $Q = T_1/T_K$, где T_1 — время вычислений на одном MPI-процессе, T_K — время вычислений при использовании K процессов. Результаты исследований ускорения приведены в табл. 1.

Таблица 1

Исследование ускорения кода
(масштабируемости в сильном смысле)

MPI-процессы	Ускорение
1	1.000
2	1.917
4	3.505
8	5.801
16	7.127
32	5.715

Код достаточно быстро насыщается при использовании 16 ядер. По всей видимости, такая конфигурация узла вполне достаточна для объёма вычислений, соответствующего кусочно-параболическому методу для решения гиперболических уравнений.

Проводилось исследование масштабируемости кода на расчётной сетке $256P \times 256 \times 256$. Таким образом, на каждый MPI-процесс приходится размер подобласти 256^3 . Для этого измерялось время вычислений при различном числе используемых процессов. Аналогично ускорению масштабируемость вычислялась по величинам T_1 и T_K . Результаты исследований масштабируемости приведены в табл. 2.

Таблица 2

Исследование эффективности кода
(масштабируемости в слабом смысле)

MPI-процессы	Эффективность
1	1.000
2	0.998
4	0.991
8	0.967
16	0.927
32	0.902
64	0.876
96	0.815

Отметим, что эффективность кода достаточно высока и при использовании всех ядер узла эффективность составляет выше 80 процентов.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

3.1. Задача о распаде произвольного МГД разрыва

Для верификации разработанного численного метода рассмотрим задачу о распаде магнитно-гидродинамического разрыва в одномерной постановке. Такая задача имеет аналитическое решение и содержит все виды волн. Мы рассмотрим область $[-5; 10]$, начальный разрыв задаётся в нулевой точке, решение будем рассматривать в единичный момент времени. В качестве продольного магнитного поля выбрано значение $B_x = 1$, показатель адиабаты выбран равным $\gamma = 5/3$. Начальное распределение гидродинамических параметров приведено в табл. 3.

Таблица 3

Начальное распределение параметров

Параметр	Слева	Справа
ρ	0.5	0.1
v_x	0	0
v_y	1	0
v_z	0.1	0
B_y	2	2.5
B_z	0	0
p	1	0.1

Данный тест подробно описан в работе [12]. На рис. 1–3 приведено сравнение точного решения (тонкая линия) с численным (жирная линия) при использовании 150 ячеек на всю область моделирования.

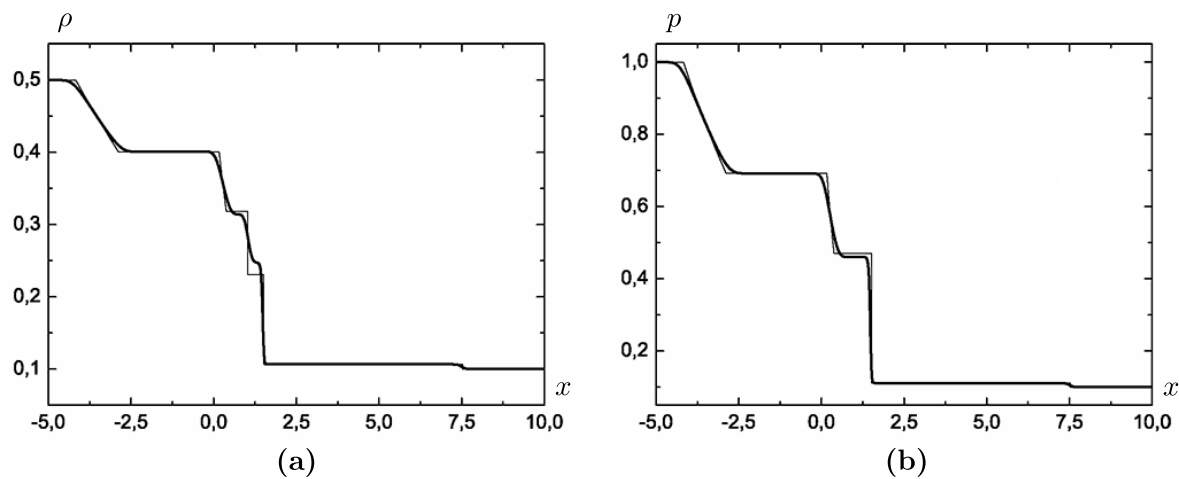


Рис. 1. Сравнение численного и аналитического решений: плотность (а), давление (б)

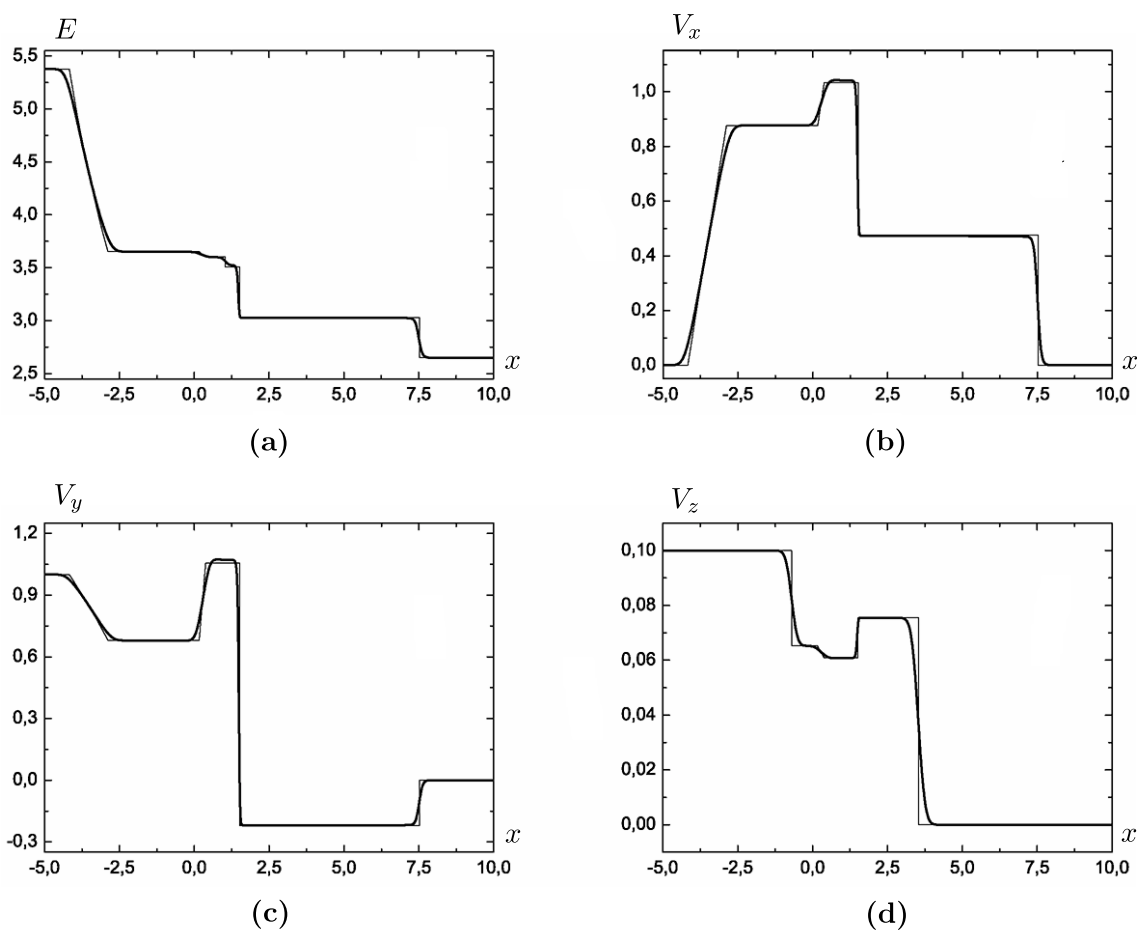


Рис. 2. Сравнение численного и аналитического решений: энергия (а), скорость (б, с, d)

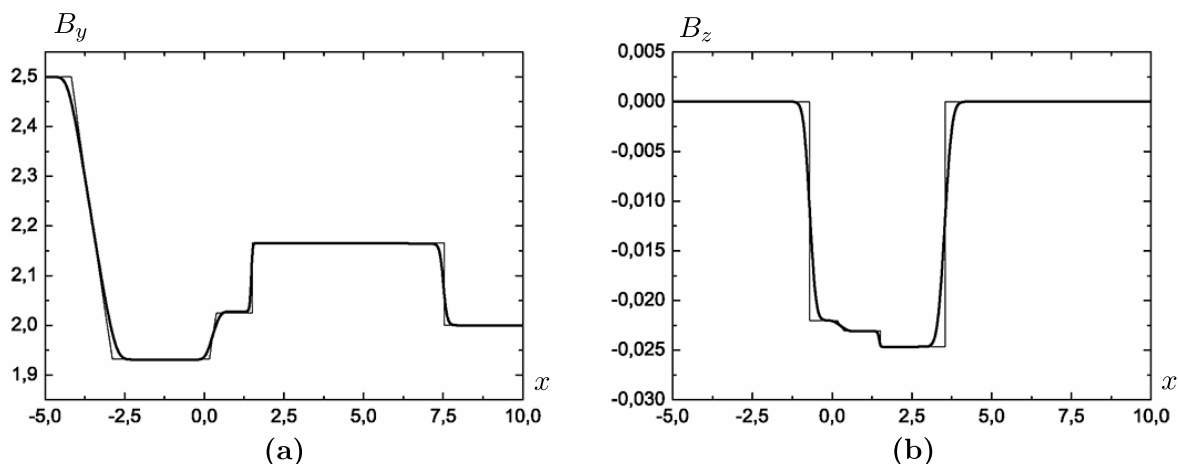


Рис. 3. Сравнение численного и аналитического решений: y -компонента магнитного поля (а), z -компонента магнитного поля (б)

Отметим, что все волны воспроизведены достаточно корректно, без особой диссипации. Диссипация ударных волн происходит на две ячейки, что соответствует качеству численных методов, основанных на кусочно-параболическом представлении решения. В то же время отметим значительную диссипацию контактного разрыва в функции плотности и чуть меньшую в графике полной энергии. При этом функция давления ведёт себя на контактном разрыве достаточно корректно. Причина такого поведения решения — энтропийный след. Он образуется из-за того, что мы снижаем качество его воспроизведения использованием схемы типа Рунге-Кутты, которая моделирует лишь крайнюю характеристику. В случае Рунге-Кутты схема не имеет таких проблем, но имеет сложности при воспроизведении энтропийного следа при его попадании на волну разрежения. Этот факт многократно подтверждён при решении уравнений гидродинамики. Тем не менее отметим, что даже при диссипации контактного разрыва в функции плотности амплитуда и местоположение воспроизведены корректно.

3.2. Задача взаимодействия молекулярного облака с межзвёздной средой

Рассмотрим задачу высокоскоростного взаимодействия молекулярного облака с разрежённой межзвёздной средой. Будем рассматривать молекулярное облако в виде статичного шара с характерными массой, размером и профилями плотности и давления. Набегающий поток межзвёздного вещества будем моделировать заданием фиксированной скорости в разрежённой области вне облака. Такая модель является достаточно простой, но тем не менее с её помощью мы сможем описать образование сферической ударной волны в начальный момент взаимодействия. Скорость набегающей среды равна $v = 450$ км/с. Размер молекулярного облака составляет $R = 100$ пк, масса $10^7 M_{\odot}$. Профиль плотности и давления выбран в соответствии с равновесным распределением. Величина вертикального магнитного поля составляет $B_0 = 0.05$ мкГс. Результаты моделирования приведены на рис. 4.

Результаты моделирования показывают, что образуются две ударные волны: первая сферическая ударная волна, которая суть отражение межзвёздной среды от молекулярного облака, и вторая внутренняя волна, распространяющаяся к центру облака. Заметим, что обе волны не имеют особенностей вдоль линий координат. Это достигается той специальной конструкцией численного метода, которая приведена в начале статьи. Здесь мы не рассматриваем дальнейшее поведение облака, его деформацию и дальнейшую фрагментацию. Этому вопросу мы посвятим отдельное исследование в зависимости от скорости набегающей межзвёздной среды.

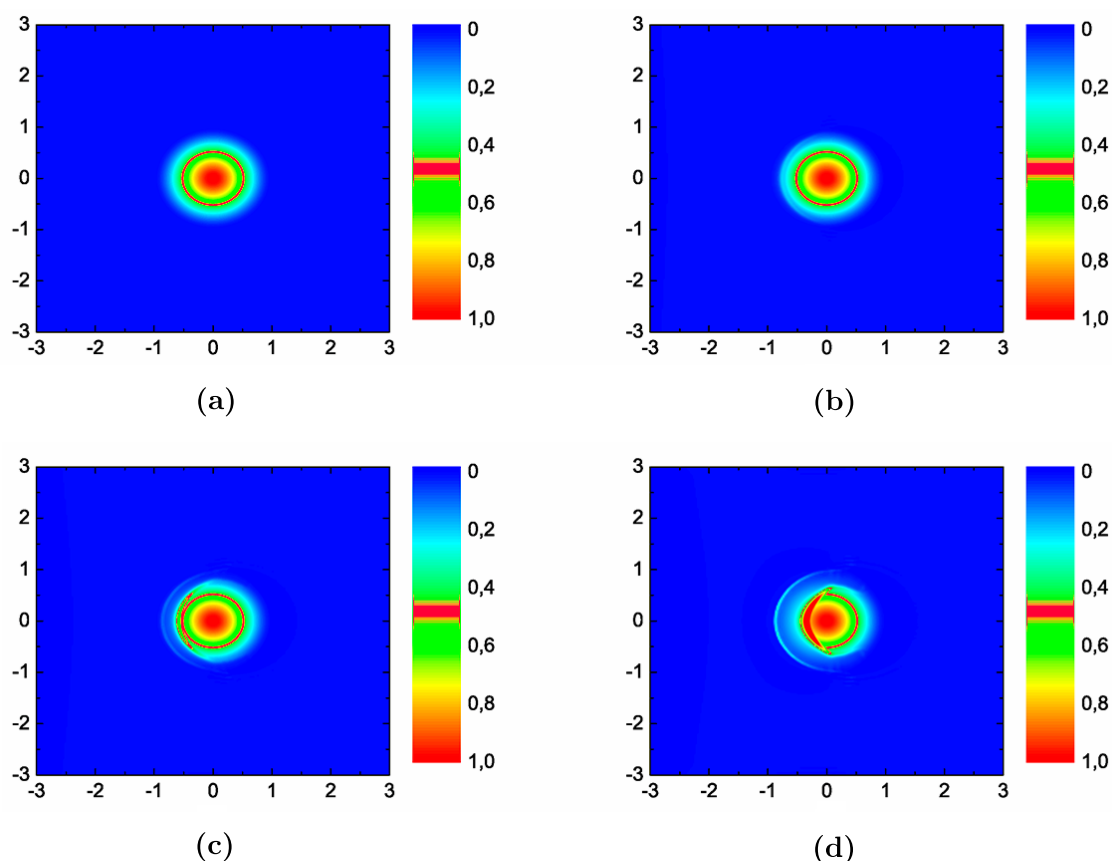


Рис. 4. Задача взаимодействия молекулярного облака с межзвёздной средой: (a) распределение плотности в 10^3 см^{-3} в начальный момент времени; (b) $t = 0.5$ миллиона лет; (c) $t = 0.8$ миллиона лет; (d) $t = 1$ миллион лет. Для вычислительного эксперимента использовалась сетка в 256^3 ячеек

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Описан новый численный метод решения уравнений магнитной гидродинамики и его параллельная реализация в виде программного кода для суперЭВМ. Метод основан на комбинации метода Годунова, схем Роу и Русанова с кусочно-параболическим представлением решения. Проведены исследования параллельной реализации и вычислительные эксперименты на кластере НКС-III. Рассмотрена задача взаимодействия облака молекулярного водорода с набегающей межзвёздной средой.

ЛИТЕРАТУРА

1. Fletcher A., Beck R., Shukurov A., Berkhuijsen E., Horellou C. Magnetic fields and spiral arms in the galaxy M51 // Monthly Notices Royal Astronom. Soc. 2011. V. 412, N 4. P. 2396–2416.
2. Pakmor R., Springel V. Simulations of magnetic fields in isolated disc galaxies // Monthly Notices Royal Astronom. Soc. 2013. V. 432, N 1. P. 176–193.
3. Villaver E., Manchado A., Garcia-Segura G. The interaction of asymptotic giant branch stars with the interstellar medium // Astrophys. J. 2012. V. 748, N 2. Article number 94.
4. Kulikov I., Chernykh I., Protasov V. The numerical modelling of MHD astrophysical flows with chemistry // J. Phys. Conf. Ser. 2017. V. 894. Article 012132.
5. Stone J., et al. Athena: A new code for astrophysical MHD // Astrophys. J. Suppl. Ser. 2008. V. 178. P. 137–177.

6. *Brandenburg A., Dobler W.* Hydromagnetic turbulence in computer simulations // *Comput. Phys. Comm.* 2002. V. 147. P. 471–475.
7. *Hayes J., et al.* Simulating radiating and magnetized flows in multiple dimensions with ZEUS-MP // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 2006. V. 165. P. 188–228.
8. *Kulikov I.* A new code for the numerical simulation of relativistic flows on supercomputers by means of a low-dissipation scheme // *Comput. Phys. Comm.* 2020. V. 257. Article 107532.
9. *Kulikov I., Chernykh I., Tutukov A.* A new hydrodynamic code with explicit vectorization instructions optimizations that is dedicated to the numerical simulation of astrophysical gas flow. I. Numerical method, tests, and model problems // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 2019. V. 243. Article 4.
10. *Kulikov I., Vorobyov E.* Using the PPML approach for constructing a low-dissipation, operator-splitting scheme for numerical simulations of hydrodynamic flows // *J. Comput. Phys.* 2016. V. 317. P. 318–346.
11. *Nishikawa H., Kitamura K.* Very simple, carbuncle-free, boundary-layer-resolving, rotated-hybrid Riemann solvers // *J. Comput. Phys.* 2008. V. 227. P. 2560–2581.
12. *Keppens R.* Nonlinear magnetohydrodynamics: numerical concepts // *Fusion Sci. Technology.* 2004. V. 45, N 2. P. 107–114.

UDC 519.6

SUPERCOMPUTER MODELLING OF MAGNETOHYDRODYNAMICAL FLOWS IN COSMIC PLASMA© 2022 M. A. Boronina^a, I. M. Kulikov^b, I. G. Chernykh^c, D. V. Wiens^d*Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS,
pr. Akad. Lavrentyeva 6, Novosibirsk 630090, Russia*E-mails: ^aboronina@ssd.sccc.ru, ^bkulikov@ssd.sccc.ru, ^cchernykh@ssd.sccc.ru,
^dviens@ssccc.ru

Received 05.05.2022, revised 27.05.2022, accepted 22.06.2022

Abstract. The paper describes a new numerical method for solving the equations of ideal magnetohydrodynamics (MHD) based on the Godunov method, a combination of the Roe and Rusanov schemes, and a piecewise parabolic representation of the solution. The hybrid scheme for solving the Riemann problem is associated with the possibility to reproduce the numerical solution without singularities along the directions, which is especially important when the velocity and magnetic field components are reconstructed in the transverse direction. The numerical method is implemented as a software package for massively parallel supercomputers. On the NKS-1P cluster of the SSCC, studies of parallel implementation and computational experiments were carried out. A problem with an analytical solution was used as a test for the method verification. A numerical solution of the problem of the interaction of a of molecular hydrogen cloud with the incoming interstellar medium is considered.

Keywords: mathematical modelling, supercomputing, computational physics.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2022.25.402

REFERENCES

1. Fletcher A., Beck R., Shukurov A., Berkhuijsen E., Horellou C. Magnetic fields and spiral arms in the galaxy M51. *Monthly Notices Royal Astronom. Soc.*, 2011, Vol. 412, No. 4, pp. 2396–2416.
2. Pakmor R., Springel V. Simulations of magnetic fields in isolated disc galaxies. *Monthly Notices Royal Astronom. Soc.*, 2013, Vol. 432, No. 1, pp. 176–193.
3. Villaver E., Manchado A., Garcia-Segura G. The interaction of asymptotic giant branch stars with the interstellar medium. *Astrophys. J.*, 2012, Vol. 748, No. 2, article 94.
4. Kulikov I., Chernykh I., Protasov V. The numerical modelling of MHD astrophysical flows with chemistry. *J. Phys: Conf. Ser.*, 2017, Vol. 894, article 012132.
5. Stone J., et al. Athena: A new code for astrophysical MHD. *Astrophys. J. Suppl. Ser.*, 2008, Vol. 178, pp. 137–177.
6. Brandenburg A., Dobler W. Hydromagnetic turbulence in computer simulations. *Comput. Phys. Comm.*, 2002, Vol. 147, pp. 471–475.
7. Hayes J., et al. Simulating radiating and magnetized flows in multiple dimensions with ZEUS-MP. *Astrophys. J. Suppl. Ser.*, 2006, Vol. 165, pp. 188–228.
8. Kulikov I. A new code for the numerical simulation of relativistic flows on supercomputers by means of a low-dissipation scheme. *Comput. Phys. Comm.*, 2020, Vol. 257, article 107532.
9. Kulikov I., Chernykh I., Tutukov A. A new hydrodynamic code with explicit vectorization instructions optimizations that is dedicated to the numerical simulation of astrophysical gas flow. I. Numerical method, tests, and model problems. *Astrophys. J. Suppl. Ser.*, 2019, Vol. 243, article 4.

10. Kulikov I., Vorobyov E. Using the PPML approach for constructing a low-dissipation, operator-splitting scheme for numerical simulations of hydrodynamic flows. *J. Comput. Phys.*, 2016, Vol. 317, pp. 318–346.
11. Nishikawa H., Kitamura K. Very simple, carbuncle-free, boundary-layer-resolving, rotated-hybrid Riemann solvers. *J. Comput. Phys.*, 2008, Vol. 227, pp. 2560-2581.
12. Keppens R. Nonlinear magnetohydrodynamics: numerical concepts. *Fusion Sci. Technology*, 2004, Vol. 45, No. 2, pp. 107–114.