9. Масич А.Г., Масич Г.Ф. GIGA UrB RAS-подход к LambdaGrid парадигмам вычислений // Научный сервис в сети Интернет: суперкомпьютерные центры и задачи: тр. Междунар. суперкомпьютерной конф. – М.: Изд-во МГУ, 2010. С. 4–11.

10. Скоростной I/O канал супервычислителя и протокол для обмена интенсивным потоком экспериментальных данных / А.Г. Масич [и др.] // Высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах (HPC–2010) (1–3 ноября 2010 г., г. Пермь): материалы X Междунар. конф. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2010.

[1,3]В.Н. Снытников, [1]Э.А. Кукшева, [1,3]Т.В. Маркелова, [2]Н.В. Снытников, [1]О.А. Стадниченко, [1]О.П. Стояновская

[1]Институт катализа им. Г.К. Борескова, г. Новосибирск
[2]Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, г. Новосибирск
[3]Новосибирский государственный университет

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ С ЭКЗАФЛОПНОЙ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬЮ В АСТРОФИЗИКЕ И АСТРОКАТАЛИЗЕ

Сегодня особый интерес в естественных науках вызывает образование околозвездных дисков при гравитационном коллапсе среды в газопылевых туманностях. В этих дисках формируются планеты, которые обнаружены у сотен звезд помимо нашего Солнца. С начальными этапами зарождения звезд и планет связана химическая эволюция. Она обеспечила в Солнечной системе синтез предбиологических соединений, зарождение жизни и возникновение на Земле биосферы.

Целью наших исследований в астрофизике и астрокатализе с использованием суперкомпьютеров стало создание численных моделей околозвездных дисков для сравнения с наблюдательными данными. Нас интересуют условия в среде, при которых шла химическая и предбиологическая эволюция, с тем чтобы воспроизвести в лабораторных экспериментах отдельные этапы этой эволюции. Необходим научный ответ на вопросы, где, как и когда, в каких условиях произошел абиогенный синтез необходимых для зарождения жизни сложных органических соединений [1].

Диапазон изменения временных, пространственных и других масштабов при образовании околозвездных дисков с гравитационным коллапсом составляет много порядков. Численное решение пространственно трехмерных, нестационарных и неустойчивых задач о коллапсе даже однофазной газовой среды с самосогласованной гравитацией является предельно сложным для существующих суперкомпьютеров. При учете таких важных физических факторов, как магнитное поле, излучение, наличие пылевого компонента, а также химических реакций, постановка этих задач будет еще долго опережать возможности суперкомпьютеров, быстро наращивающих свою вычислительную мощь, и стимулировать их развитие к уровню экзафлопной производительности.

Алгоритмы и численные методы. В подобных задачах свое развитие получают и численные методы решения систем уравнений математической физики в частных производных. Такие системы находят применение в самых широких областях науки и техники. Для их решения часто используются методы расщепления по физическим процессам. Создание основы решения базовой системы уравнений, без которой невозможно обойтись, позволяет продолжать наращивать математическую и численную модель с включением в нее новых физико-химических процессов. В нашем случае минимально необходимой математической моделью служит пространственно трехмерная нестационарная система уравнений Эйлера для газа с гравитацией, дополненная уравнением Пуассона для гравитационного поля. Это система уравнений общего вида, а наличие эллиптического уравнения Пуассона, для которого характерна бесконечная скорость передачи возмущений, вызывает к жизни физические неустойчивости, включая неустойчивость Джинса с коллапсом газа. Состояние межзвездного газа из смеси водорода и гелия, в диапазоне температур от нескольких десятков до десятков тысяч градусов по шкале Кельвина и при концентрациях 10^4–10^{19} частиц/см^3, меняется так, что эффективный показатель адиабаты лежит в пределах от 1 до 5/3. Течение вращающегося газа при коллапсе имеет области сверх- ,транс- и дозвуковой динамики с набором ударных волн и других разрывов, а также затопленные струи газа.

Для моделирования трехмерной динамики облака газа был использован численный код [2], созданный авторами доклада. В основе кода лежит метод FLIC (метод крупных частиц, метод Белоцерковского-Давыдова). Метод использует расщепление по физическим процессам. На первом этапе учитываются изменения скорости за счет градиентов давления и гравитационного потенциала. В качестве начального условия берется значение функций с предыдущего шага по времени. Специальный оператор аппроксимации градиентов давления и потенциала на 27-точечном шаблоне позволяет уменьшить влияние эффекта выделенных направлений. Первый этап имеет второй порядок аппроксимации по пространству и первый порядок по времени. На втором этапе рассчитываются потоки масс через границы эйлеровой сетки с начальным условием из результата первого этапа. Этот алгоритм обеспечивает первый порядок аппроксимации по пространству и по времени. На третьем этапе решается уравнение Пуассона для СЛАУ на 7-точечном шаблоне методом быстрого преобразования Фурье. Общий порядок аппроксимации метода по пространству и по времени – первый. В коде использована равномерная сетка в декартовой системе координат.

На этапе потери газа из ближней к протозвезде зоны околозвездного диска необходимо учесть динамику первичных тел, которые двигаются с редкими столкновениями друг с другом на временах нескольких оборотов вокруг протозвезды. Математическая модель для динамики самогравитирующих тел представляет собой кинетическое уравнение Власова (иные термины, уравнение Лиувилля, бесстолкновительное уравнение Больцмана – аналоги нестационарного уравнения Шредингера). Для решения уравнения Власова используется метод частиц в ячейках.

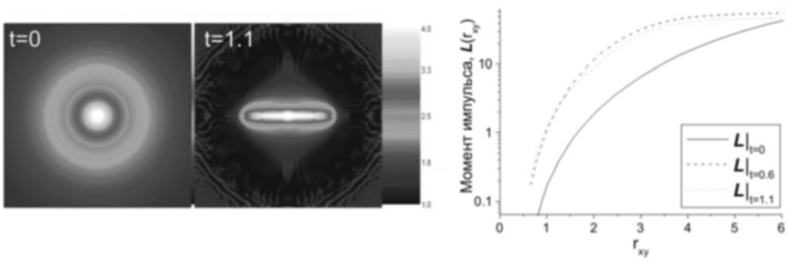
Однако система из уравнения Власова и уравнения Пуассона без газодинамических уравнений представляет самостоятельный интерес в большом числе приложений, в частности, как основа метода молекулярной динамики. В нашем случае это уравнение для функции 6 переменных в фазовом пространстве решается методом частиц в ячейках для самосогласованного поля. Точность метода зависит от используемого в расчетах числа частиц и требует свыше 400–1000 частиц в ячейке для удовлетворительного воспроизведения возможных неустойчивостей. Для сетки 1000^3 это примерно 10^{11}–10^{12} частиц. Нестационарные задачи с такими параметрами вычислений требуют от суперкомпьютеров экзафлопную производительность.

Результаты вычислительных экспериментов и обсуждение. Для проведения численных экспериментов использовались: 8-процессорная (XeonQC, 2 узла) HP-машина с общей памятью 40 Гбайт в ИК СО РАН, машина SMP16x256 с 4 четырехъядерными процессорами XeonX7350 с общей памятью 256 Гб (ССКЦ, Новосибирск); машина с распределенной памятью NKS-160 с 84 вычислительными узлами HP и процессорами Intel Itanium2/1.6 GHz с памятью 4 Гб на узел (ССКЦ, Новосибирск), а также MVS-100K (МСЦ, Москва). Доступ на ССКЦ и МСЦ осуществлялся по интернет-каналу СО РАН. Визуализация проводится с помощью собственной разработки Gala Э.А. Кукшевой.

На SMP проведено численное моделирование динамики гравитирующего газа, описывающее в изотермическом газе режимы формирования протозвезд и протозвезд вместе с околозвездными дисками. Используемые размеры сеток – 128^3 и 256^3. Расчеты по программе, созданной без тщательной оптимизации, занимают на SMP несколько суток на сетке 256^3 при числе временных шагов свыше 10^4 для физически интересных результатов. Более подробные сетки 512^3 уже требуют организационных мер на SMP для заказа необходимой общей памяти. Поскольку при этом требуется более чем в 2 раза уменьшать шаг по времени, то это в целом более чем в 20 раз увеличивает время счета – свыше месяца. Физически интересные задачи на сетках 1000^3 и более для выявления деталей формирования Солнечной системы от орбиты Меркурия до сотни астрономических единиц

(AU), на которых находятся кометы и другие объекты Кипера–Белта, будут рассчитываться годы. Такие затраты очевидно неприемлемы, что требует кардинального увеличения скорости вычислений к экзафлопному уровню.

Результаты вычислительных экспериментов, полученные на SMP, приведены на рис. 1. Рассчитывается динамика изотермического газа с развитием сильной гравитационной неустойчивости, которая приводит к коллапсу газа. Показано, что во вращающемся и сжимающемся изотермическом газе существуют режимы формирования протозвезд вместе с околозвездными дисками. Масса центрального тела примерно в 10 раз превосходит массу диска, что хорошо соотносится с наблюдениями среднемассивных околозвездных дисков на поздних стадиях их формирования. Момент импульса в зависимости от радиуса в цилиндрической системе координат сформированной структуры (рис. 1, *б*) из протозвезды с околозвездным диском распределяется неравномерно. Внутренним областям, сосредоточившим в себе до 90 % массы облака, передается около 1 % начального момента импульса, и они сжимаются в протозвезду. Внешним областям передается до 98–99 % момента импульса, и они формируют плотный диск, вращающийся вокруг центрального тела. Такое распределение наблюдается в Солнечной системе, где большая часть массы системы сосредоточена в Солнце, а подавляющая часть момента импульса – во внешних планетах.



а *б*

Рис. 1. Распределение $\lg \rho(x, 0, z)$ логарифма плотности при $t = 0$, 1,1 (*а*); Распределение момента импульса $L(r_{xy})$ при $t = 0$ (сплошная линия), $t = 0{,}6$ (штриховая линия), $t = 1{,}1$ (пунктирная линия) (*б*)

В работе [3] приведены наши результаты решения на кластерных суперкомпьютерах ССКЦ и МСЦ системы из уравнений Власова и Пуассона. На практике в первую очередь мы сталкиваемся с проблемой увеличения размера вычислительного массива для решения уравнения Пуассона, которое в нашем случае решается методом Фурье по трем координатам. На кластерных системах при увеличении массива приходится увеличивать число процессоров, участвующих в вычислениях. Как показано в [3], даже при фиксированном размере массива при увеличении числа процессоров растет время решения уравнения Пуассона. Другими словами, эффективность распараллеливания падает. При более подробном исследовании этой ситуации было выяснено, что время в основном тратится на пересылки между процессорами. Таким образом, при работе на кластерах мы упираемся в ограничение на используемое число процессоров для нашей задачи. Вероятно, коммуникационные сети кластеров слишком медленные для нашей задачи.

С другой стороны, у нас алгоритм состоит из сильносвязанной подзадачи из решения уравнения Пуассона с большим массивом для потенциала и слабосвязанной подзадачи из решения уравнения Власова, которое интегрируется через большое число ОДУ, связанных с потенциалом. Теоретически в целом задача органичнее укладывается на архитектуру вычислительных систем с общей памятью, нежели на архитектуру систем с распределенной памятью. Для проверки этого предположения была написана соответствующая версия программы, использующая OpenMP. На машине с общей памятью Института катализа СО РАН эффективность распараллеливания этой программы составила около 70 % на 8 процессорах для сетки 256×256×64. Эффективность распределенной версии программы с MPI для данной задачи на числе процессоров 256 близка к нулю. Но 8 процессоров слишком мало, чтобы делать общий вывод о том, что данную задачу нужно решать на машине с общей памятью. Необходимы проверки на практике этого предположения на машине с увеличением числа процессоров.

По параллельному коду для нестационарных пространственно трехмерных задач на кластерах ССКЦ и МСЦ были проведены вычислительные эксперименты по изучению устойчивости бесстолкновительных гравитирующих систем. На рис. 2 приведены результаты моделирования динамики формирования сгустков в плоском диске из тел в их самосогласованном гравитационном поле при развитии неустойчивости Джинса. Исследовалось поведение численного решения при сгущении вычислительной сетки и увеличении числа частиц. Обезразмеривание проведено в единицах общей массы, гравитационной постоянной и линейного масштаба в системе. Начальный радиус диска был равен 3, его масса – 1, центрального тела и внешних потенциалов не было, начальные дисперсии скоростей $dvr = 0{,}02$, $dv\varphi = 0{,}01$, $dvz = 0{,}1$. Расчетная область задавалась как $10\times10\times10$. Для выбранных параметров характерное значение длины Джинса было около 0,1. Интерес представляют расчеты с шагом вычислительной сетки много меньшим, чем 0,1.

Из приведенных рисунков следует, что макроскопическая динамика тел для всех вариантов близка друг к другу. Частицы разлетаются в самосогласованном гравитационном поле, толщина диска увеличилась, плотность и температура (дисперсии) функции распределений по скоростям упали. В центральной области диска возникли условия для развития неустойчивости Джинса в бесстолкновительной системе. Однако на сетке 128^3, где шаг сетки примерно равен длине Джинса (рис. 2, *а*) и средним числом модельных частиц в ячейке порядка 10^3 обнаруживается только тенденция к формированию сгустков. Уменьшение шага сетки в 2 раза на сетке 256^3 позволило выявить формирование сгустков, хотя число частиц в ячейке уменьшилось в 2–4 раза. Дальнейшее уменьшение шага сетки в 4 раза по двум направлениям с заданием сетки $1024\times1024\times256$ узлов и увеличение общего числа частиц в 10 раз для приближенного сохранения числа частиц в ячейке приблизительно 10^3 позволило надежно рассчитать структуру сгустков, возникающую при развитии неустойчивости Джинса на ее нелинейных стадиях (рис. 2, *в*).

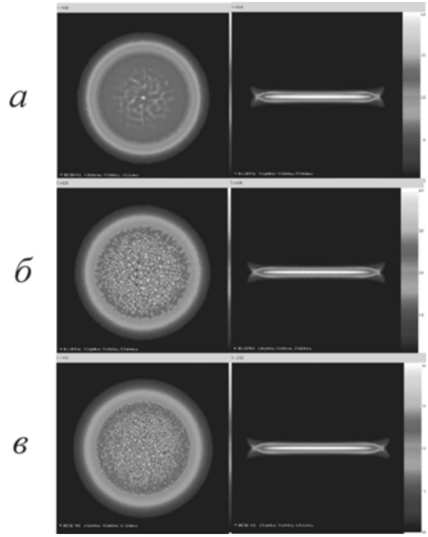
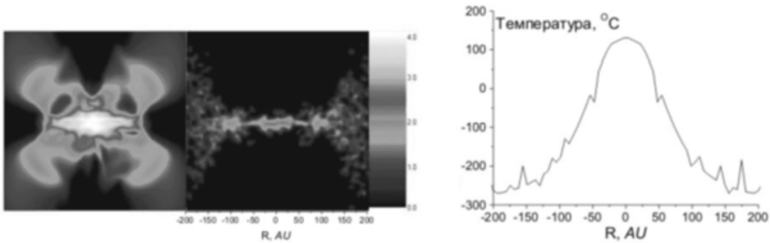


Рис. 2. Распределение логарифма поверхностной плотности вещества в экваториальной и меридианальной плоскостях диска в момент времени $T = 6{,}08$ для трех расчетов: *а* – сетка 128^3 узлов и 10^8 модельных частиц, *б* – сетка 256^3 узлов, число частиц 10^8, *в* – сетка 1024^2·256, число частиц – 10^9

В ССКЦ на SMP проведены расчеты по двухфазной модели с включением твердой фазы с прогнозом условий для синтеза сложных молекул в околозвездных дисках. В качестве начальных условий были заданы адиабатический газ и диск из частиц. Известно, что дисковые структуры более стабильны, чем чисто газовые при учете твердого компонента из первичных тел (рис. 3).

В ходе вычислительных экспериментов для двухфазной модели получены результаты исследования кинетики реакции Бутлерова и определения зоны химической эволюции в формирующемся газопылевом диске. В частности, проведены расчеты динамики двухфазной среды с первичными телами при размере расчетной области 800AU. Рис. 3 иллюстрирует появление плотного диска радиусом $\approx 40AU$. Газовый диск включает в себя около 10 % начальной массы газа. Наличие твердой фазы, начальная доля которой 0,1 от массы газа, приводит к стабилизации системы – диск не разрушается под воздействием гравитационноконвективной неустойчивости в течение полутора оборотов по внешнему радиусу. Основная масса газа в «бабочкообразной» структуре тянет за собой частицы, которые в результате разлетаются вдоль оси OZ. Структура, которую образуют частицы твердой фазы, не противоречит структуре Солнечной системы. На рис. 3 показано, что в сформированном диске из газа и первичных тел диапазон температур составляет от $-35^{O}\,C$ на периферии до $130^{O}\,C$ в центре. Область плотного диска, температура в которой лежит в диапазоне жидкой воды, является возможной зоной химической эволюции и синтеза сложных органических молекул.



а *б*

Рис. 3. Распределение $\lg F_{g,p}(x,0,z)$ – логарифма плотности газа и частиц при t = 1280 лет (*а*); температура газа $T(x,0,0)$ при t = 1280 лет (*б*)

Для моделирования квазитрехмерной динамики двухфазного гравитирующего диска создан параллельный код с учетом химических реакций и их тепловых эффектов, основанный на методе частиц-в-ячейках для решения уравнения Власова, методе SPH для решения уравнений газовой динамики и методе последовательной верхней релаксации и быстрого преобразования Фурье для решения уравнения Лапласа [4]. Проведено моделирование двух режимов динамики двухфазного диска и показано, что как кольцевые, так и спиральные волны плотности (рис. 4), возникающие в двухфазной среде, могут считаться характерными для самой системы, а не привнесенными в нее особенностями алгоритмов. На характерное время существования волн может повлиять минимальный размер возмущения, воспроизводимый при решении уравнений газовой динамики, в случае кольцевых волн или аналогичный масштаб при решении уравнения Пуассона и Власова в случае спиральных волн. Показано, что даже при соотношении массы частиц к массе газа $1/50$ имеет место взаимное влияние газового и пылевого компонентов системы.

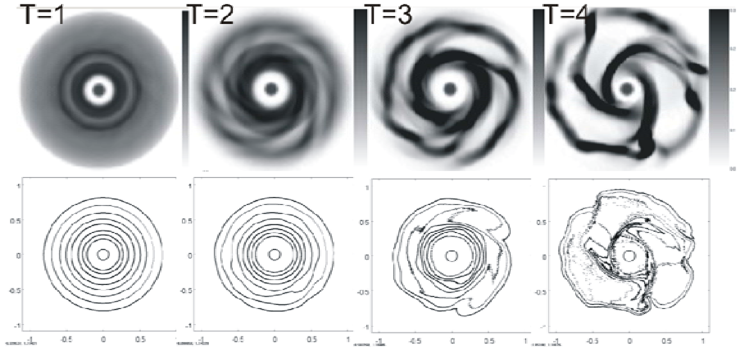


Рис. 4. Динамика спиральных волн плотности (логарифм поверхностной плотности пылевой (сверху) и газового (снизу) компонента диска для моментов времени $T = 1; 2; 4; 6$

По результатам вычислительных экспериментов получено, что к числу процессов, влияющих на устойчивость диска и ведущих к образованию сгущений, относится гравитационное взаимодействие газа и первичных тел. Процессы в субдиске первичных тел, где имеет место небольшой разброс частиц по скоростям, могут инициировать и ускорять формирование сгущений в массивном газовом диске. Присутствие массивного газового диска делает возможным гравитационный рост возмущений плотности в системе, возникших в субдиске первичных тел.

Таким образом, вычислительные эксперименты на суперкомпьютерах в астрофизике и в астрокатализе показывают, что химическая эволюция с синтезом первичных органических соединений для земной биосферы в Солнечной системе действительно могла идти на этапе околосолнечного диска. Разработаны численные коды для решения задач гравитационной газодинамики, которые позволяют моделировать условия в околозвездных дисках, как в химических реакторах для реагентов и продуктов. С помощью этих программ выполнены прогнозы условий для синтеза сложных молекул в околозвездных дисках.

Список литературы

1. Снытников В.Н. Абиогенный допланетный синтез пребиотического вещества // Вестник РАН. – 2007. – Т. 77, № 3. – С. 218–226.

2. Стадниченко О.А., Снытников В.Н. Явный многошаговый алгоритм для моделирования динамики самогравитирующего газа // Вычислительные методы и программирование. – 2010. – Т. 11, № 1. – С. 53–67.

3. Кукшева Э.А., Снытников В.Н. Параллельный алгоритм решения задач гравитационной физики, основанный на декомпозиции области // Вычислительные методы и программирование. – 2010. – Т. 11, № 1. – С. 168–175 (http://num-meth.srcc.msu.ru/).

4. Стояновская О.П., Снытников В.Н. Особенности SPH-метода решения газодинамических уравнений при моделировании нелинейных волн в двухфазной гравитирующей среде // Математическое моделирование. – 2010. – Т. 22, № 5. – С. 29–44.