

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 79 за 2015 г.</u>



ISSN 2071-2898 (Print) ISSN 2071-2901 (Online)

#### <u>Четверушкин Б.Н.</u>, Савельев В.И.

Кинетические модели и высокопроизводительные вычисления

*Рекомендуемая форма библиографической ссылки:* Четверушкин Б.Н., Савельев В.И. Кинетические модели и высокопроизводительные вычисления // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2015. № 79. 31 с. URL: <u>http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-79</u>

Ордена Ленина ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ имени М.В.Келдыша Российской академии наук

Б.Н. Четверушкин, В.И. Савельев

# Кинетические модели и высокопроизводительные вычисления

Москва — 2015

#### Четверушкин Б.Н., Савельев В.И.

#### Кинетические модели и высокопроизводительные вычисления

высокопроизводительных Адаптация алгоритмов на архитектуру вычислительных систем с экстрамассивным параллелизмом вызывает большие трудности. Для решения этих проблем при моделировании задач механики сплошных сред предлагается использовать алгоритмы, основанные на кинетических моделях. Этот прием позволяет строить простые и в то же время для эффективные алгоритмы высокопроизводительных достаточно Рассматривается обобшение вычислений. кинетических моделей лля моделирования задач магнитной газовой динамики (МГД). Приводятся примеры решения трехмерных задач МГД, использующих для своей аппроксимации расчетные сетки, состоящие из более чем миллиарда узлов.

*Ключевые слова:* высокопроизводительные вычисления, кинетические модели, вычислительные алгоритмы, задачи магнитной газовой динамики (МГД)

### Boris Nikolaevich Chetverushkin, Valeri Ivanovich Saveliev Kinetic Models and High Performance Computing

The adaptation of the algorithms to the architect of the high performance computing systems with extramassive parallelism is quite difficult problem. For the solution of such problems in particular for the modeling of the continuous media dynamics is proposed to use the algorithms, based on the kinetic models. Such approach allowed to construct simply and, in the same time, high efficient algorithms for the high performance computing. In this publication the generalization of the kinetic models for the problems of the magneto gas dynamics (MGD) is considered and shown the examples of the solutions of the tree dimensional problems of MGD on the computational domain with more than one milliard cells.

*Key words:* kinetic schemas, gas dynamics, magneto gas dynamics, numerical methods and algorithms, high performance computing

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект 14-11-00170.

### 1. Введение

В настоящее время наблюдается быстрый рост производительности вычислительных систем, которая, как ожидается, к 2019 году достигнет производительности 1 EXAFLOPS (1 EXAFLOPS = 10<sup>18</sup> операций с плавающей запятой в секунду). Однако наиболее впечатляющим фактом является то, что системы с производительностью порядка 10 PETAFLOPS (1 EXAFLOPS = 1000 PETAFLOPS) перестанут быть уникальными И станут достаточно распространенными вычислительными устройствами лля многих университетов и промышленных корпораций.

Существуют впечатляющие, хотя и относительно немногочисленные примеры использования возможностей систем петафлопного диапазона при решении научных и промышленных задач. К таковым можно отнести задачи, связанные с моделированием проблем астрофизики, прямого моделирования турбулентности, квантовой химии, моделирования процессов добычи и разведки углеводородного сырья, авиакосмических исследований, ядерной и термоядерной энергетики и др. Научная и технологическая ценность этих расчетов многократно превосходит аналогичные показатели, характерные для расчетов, использующих относительно умеренную производительность в несколько десятков терафлопс (1 PETAFLOPS = 1000 TFLOPS) и ниже. Авторы препринта могли неоднократно убедиться в этом на собственном опыте.

Однако несмотря на уже существующие возможности вычислительной техники, а еще более с учетом ее ближайших перспектив, важности применения высокопроизводительных вычислений для решения актуальных проблем настоящего времени, число задач, использующих для своего решения производительность свыше 10 TFLOPS на вариант, невелико. Причина кроется в трудностях адаптации алгоритмов на архитектуру высокопроизводительных вычислительных систем с экстрамассивным параллелизмом. Эта проблема носит фундаментальный характер. Ее преодоление зачастую требует создания принципиально новых вычислительных алгоритмов. Сам алгоритм при этом может требовать достаточно большого объема вычислений. При этом количество логических операторов должно быть невелико.

Идеально подходят для этой цели логически простые алгоритмы. К сожалению, такие алгоритмы обладают, как правило, низкой эффективностью. Типичным примером здесь являются явные схемы, которые идеально адаптируются к архитектуре многопроцессорных вычислительных систем. Однако эти схемы обладают жесткими ограничением на допустимый из условия устойчивости шаг по времени. Это, в свою очередь, ставит ограничение на использование для аппроксимации подробных пространственных сеток и тем самым делает бессмысленным использование для расчетов вычислительных систем с экстрамассивным параллелизмом.

Один из эффективных приемов, используемых авторами для создания логически простых и в то же время эффективных алгоритмов, опирается на использование хорошо известной со времен Л.Больцмана связи между кинетическими и газодинамическим описанием сплошной среды [1]. Кинетическое описание связано с одночастичной функцией распределения  $f(t, \vec{x}, \vec{\xi})$ , где t - время,  $\vec{x}$  – пространственная координата,  $\vec{\xi}$  – вектор скорости молекулы. Для газов основной кинетической моделью является уравнение Больцмана или его упрощенные аналоги, из которых в предположении близости функции распределения к локально-максвелловской  $f_0$ 

$$f_0 = \frac{\rho(\vec{x})}{(2\pi RT)^{3/2}} \exp\left\{-\frac{\left(\bar{\xi} - \vec{u}(\vec{x})\right)^2}{2RT}\right\}$$
(1.1)

где  $\rho$  – плотность,

 $\vec{u}$  – макроскопическая скорость,

T – температура,

*R* – газовая постоянная,

i = 1, 2, 3,

может быть получены газодинамические приближения и аналоги систем уравнений Эйлера и Навье-Стокса (квазодинамическая система уравнений) [2].

Переход от кинетического к газодинамическому описанию, там, где это оправдано с точки зрения физических условий, обусловлен тем, что газодинамические параметры  $\vec{Q}(t,\vec{x})$  являющиеся моментами одночастичной функции распределения  $f(t,\vec{x},\vec{\xi})$ , зависят от меньшего числа переменных. Вместе с тем следует заметить, что алгоритмы решения кинетических уравнений, которые описывают движение частиц вдоль траектории их полета, относительно легко поддаются адаптации к архитектуре многопроцессорных вычислительных систем высокой производительности.

В настоящей работе, основываясь на квазигазодинамической системе уравнений – Quasi Gasdynamic System of equations (QGS) [2] и алгоритмах ее решения, которые непосредственно вытекают из связи кинетического и газодинамического описания, строятся явные схемы для решения задач газовой и гидродинамики [2,3]. Эти схемы хорошо адаптируются к архитектуре многопроцессорных вычислительных систем высокой производительности и в то же время обладают лучшей устойчивостью, чем традиционные явные схемы для параболических уравнений [4].

В работе рассматривается оригинальный вывод уравнений магнитной индукции с учетом магнитной вязкости, непосредственно из кинетической модели [5]. Этот вывод позволяет легко обобщить алгоритмы QGS системы,

ранее используемые для решения задач газовой динамики, для расчета задач магнитной газовой динамики (МГД) с учетом вязких эффектов.

Данный подход позволяет легко адаптировать алгоритмы для расчета задач МГД на архитектуру вычислительных систем с экстрамассивным параллелизмом. В статье приводятся примеры численного моделирования трехмерных пространственных задач МГД, использующие для аппроксимации пространственные сетки, состоящие из более чем миллиарда расчетных узлов.

Для логической связности изложения рассмотрение начнем с вывода QGS системы.

### 2. Квазигазодинамическая система уравнений

Первая работа по кинетическим схемам, в которой разностная схема для параметров строилась на основе непосредственного газодинамических использования математических моделей для одночастичной функции распределения, появилась в 1983 году [6]. В дальнейшем (см. например [7,8]) эти схемы применялись для расчета сложных газодинамических течений вязкого теплопроводного газа, включая прямое моделирование процессов турбулентности, неустановившихся течений, задачи аэроакустики И аэроупругости, моделирования процессов горения [9]. Основные результаты здесь были получены с помощью использования QGS системы, вывод которой опишем согласно [9].

Рассмотрим здесь для простоты пространственно одномерный случай. Предположим, что в момент времени  $t^{j}$ , функция распределения является локально-максвелловской

$$f\left(t^{j}, \vec{x}, \vec{\xi}\right) = f_{0}\left(t^{j}, \vec{x}, \vec{\xi}\right), \qquad (2.1)$$

где  $f_0$  определяется выражением (1.1).

Кроме того, предположим, что функция  $f_0$  слабо меняется на расстояниях порядка длины пробега l. Заметим, что слабая вариация функции распределения  $f_0$  на расстояниях l является условием ее близости к  $f_0$  и тем самым возможности описания течения с помощью газодинамического приближения.

Вторым предположением является то, что в течение времени  $\tau = t^{j+1} - t^j$ , частицы газа осуществляют безстолкновительный разлет.

И наконец в момент времени  $\tau = t^{j+1}$ осуществляется мгновенная максвелизация и функция *f* вновь становится локально-максвелловской.

В дальнейшем, при переходе к последующим шагам по времени вся процедура повторяется вновь.

В рассматриваемой модели процесс разлета и столкновений частиц газа заменяется двухступенчатой моделью разлет – максвеллизация. В данном

случае *т* естественно придать смысл характерного времени между столкновениями молекул.

Вследствие безстолкновительного разлета функция распределения  $f(t^{j+1}, \vec{x}, \vec{\xi})$  на новом моменте времени  $t^{j+1}$  до максвеллизации и локальномаксвелловская функция  $f_0$  на момент времени  $t^j$  связаны соотношением

$$f\left(t^{j+1}, \vec{x}, \vec{\xi}\right) = f_0\left(t^j, \vec{x} - \tau \vec{\xi}, \vec{\xi}\right), \qquad (2.2)$$

здесь для простоты предполагается отсутствие внешних сил.

Выражение (2.2) иллюстрируется на Рис. 1, показывающем связь между функцией распределения  $f^{j+1}$  и  $f_0^j$ .



Рис. 1. Эволюция функции распределения для вывода балансного уравнения

Учитывая, что

$$l/L <<1 \tag{2.3}$$

где *L* – характерный размер задачи,

разложим выражение (2.2) в ряд Тейлора. При этом с точностью до членов третьего порядка малости получим следующее выражение, которое назовем балансным уравнением:

$$f\left(t^{j+1}, \vec{x}, \vec{\xi}\right) - f_0\left(t^j, \vec{x}, \vec{\xi}\right) + \tau \vec{\xi} \frac{\partial f_0}{\partial \vec{x}} = \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \tau^2 \frac{\xi^2}{2} \frac{\partial f_0}{\partial \vec{x}}.$$
 (2.4)

Так же, как в процедуре получения уравнений газовой динамики из уравнения Больцмана, умножим балансное уравнение (2.4) на сумматорные инварианты  $\varphi(\vec{\xi}) = m, m\vec{\xi}, m\xi^2/2$  – массу, импульс и энергию молекул. Затем

проинтегрируем по всем скоростям  $\vec{\xi}$ . При интегрировании используем основные предположения процедуры Чепмена-Энского [1]

$$\int f\varphi(\vec{\xi})d\vec{\xi} = \int f_0\varphi(\vec{\xi})d\vec{\xi} .$$
(2.5)

При таком интегрировании в левой части уравнений появляются конечные разности по времени для газодинамических переменных  $\vec{Q}$ , которые удобно представить в виде

$$\vec{Q}^{j+1} - Q^j = \tau \frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\tau^2}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial t^2}.$$
(2.6)

Таким образом, в результате всех процедур приходим к системе QGS уравнений, которую приведем на примере одномерного случая:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial \vec{x}} = \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left( \rho u^2 + p \right); \qquad (2.7)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 \rho \vec{u}}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left( \rho u^2 + p \right) = \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left( \rho u^3 + 3p \vec{u} \right); \tag{2.8}$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left[ \vec{u} \left( E + p \right) \right] = \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left[ u^2 \left( E + 2p \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left[ \frac{p}{\rho} \left( E + p \right) \right]. \quad (2.9)$$

Здесь дополнительно к ранее введенным обозначениям использовались следующие: *p* – газокинетическое давление,

E – полная энергия  $E = \rho \varepsilon + \rho u^2$ , где  $\varepsilon$  – внутренняя энергия.

Система QGS уравнений (2.7)–(2.9) с  $\tau$ , определяемой либо из теоретических соображений, либо с помощью экспериментальной оценки величины коэффициента вязкости  $\mu$  [10]

$$\tau = \frac{2\mu}{p},\tag{2.10}$$

использовалась для моделирования течения вязкого теплопроводного газа в течение более тридцати лет [2, 9].

Естественным образом возникает вопрос о соответствии QGS уравнений, классическим уравнениям Навье-Стокса (N-S). Анализ QGS уравнений показывает, что они отличаются от N-S уравнений на члены, имеющие второй

порядок малости по числу Кнудсена  $(Kn)^{-1}$ ). Символически этот факт может быть отображен с помощью следующего выражения

$$QGS = (N-S) + O(Kn^2). \tag{2.11}$$

Естественно, что с начала использования QGS уравнений результаты расчетов, полученные с ее помощью, тестировались с помощью аналогичных задач и расчетов на основе N-S уравнений.

Прокомментируем некоторые члены в правых частях системы (2.7) –(2.9). На первый взгляд кажется странным появление сильной диссипации в уравнении неразрывности (2.7). Однако из (2.11) следует, что диссипативные члены (2.7) на самом деле второго порядка малости по числу Кнудсена (*Kn*).

Появление данного члена связано с тем, что в рамках QGS уравнений происходит автоматическое сглаживание решения на расстояниях порядка длины свободного пробега *l* и характерного времени между столкновениями *т*. кубическую также внимание на зависимость Обратим OT скорости диссипативных членов в уравнении (2.8). Анализ структуры этих членов показывает, что они отличаются от классических вязких членов уравнений Навье-Стокса на величину второго порядка малости по числу Кнудсена [11]. Заметим, что в работе [12] показано, что для модели, описывающей движения несжимаемой жидкости с кубической зависимостью вязкости по скорости, аналогичной (2.8),возможно доказательство В 3D случае теоремы единственности существования И решения. Возможно, свойство ЧТО корректности явилось причиной тех положительных свойств численного решения на основе QGS модели (например, слабый энтропийный след), которые сразу же заставили усиленно развивать этот подход для решения задач гидро- и газовой динамики.

В работе [11] показано, что QGS может быть также получена при условии согласования уравнения баланса энтропии с уравнениями (2.7)–(2.9), описывающих балансы массы, импульса и энергии. Условием такого согласования явилось использование тождества Гиббса

$$Tds = d\varepsilon + pd(1/\rho). \tag{2.12}$$

При этом в получаемом в рамках QGS для баланса энтропии *S* показано, что ее рост в системе, наряду с традиционным влиянием теплопроводности и вязких сил, осуществляется за счет дополнительного перемешивания (сглаживания в области с характерными размерами порядка *l*).

Читатель, хорошо знакомый с больцмановскими сеточными схемами (Lattice Boltzmann Schemes – LBS), основой для развития которых послужила работа [13], обращает внимание на связь между процедурой получения

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Этот факт становится наглядным для стационарного случая при сопоставлении правой части  $\frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p)$  уравнения (2.7) и левой части  $\frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p)$  уравнения (2.8).

балансного уравнения (2.4) и процедурой определения газодинамических переменных в LBS с помощью кинетической модели Бхатнагара-Гросса-Крука (BGK) [14]. Однако в QGS уравнений газодинамические величины сразу определяются из макроскопических уравнений, применимость которых не ограничена свойством несжимаемости жидкости. В [2,9] показано, что QGS уравнения можно трактовать как дифференциальное приближение для кинетически согласованных схем [2,7]. Эти схемы получаются с помощью осреднения по скоростям молекул с сумматорными инвариантами разностных схем для одночастичной функции распределения.

Обратим внимание на то, что за счет наличия вторых производных по времени, QGS уравнений гиперболична, в отличие от параболической системы N-S уравнений [15]. Приблизительно до 2010 года гиперболичность системы учитывалась авторами и пользователями QGS уравнений лишь в теоретических рассмотрениях. В практических расчетах в виду малости

$$\tau / t_{gas} \ll 1, \tag{2.13}$$

где  $t_{gas}$  – характерное газодинамическое время,

используется ее параболическая версия без вторых производных по времени.

Расчеты на сгущающихся последовательностях пространственных сеток для параболического варианта QGS уравнений показало их хорошую сходимость при прямом моделировании турбулентности и неустановившихся течений [2, 9]. Этот факт явился важным для использования QGS уравнений в моделировании на многопроцессорных вычислительных системах предыдущего десятилетия.

Однако с ростом производительности вычислительных систем появилась возможность использования пространственных сеток с числом узлов более чем 10<sup>9</sup>. Такие подробные пространственные сетки требуют очень жесткого ограничения на допустимый шаг по времени для явных схем. Это заставило обратить внимание на члены со второй производной по времени в системе QGS уравнений.

Рассмотрим возможность использования QGS уравнений в высокопроизводительных вычислениях.

## 3. Трехслойная явная схема

Как уже отмечалось, явные схемы, хорошо адаптируемые на архитектуру многопроцессорных систем высокой производительности, обладают жестким ограничением на допустимый шаг по времени. Особенно острая ситуация складывается для параболических уравнений

$$\Delta t \le h^2 \,, \tag{3.1}$$

где *h* – характерный шаг по пространству.

Для получения более мягкого по сравнению с (3.1) условия устойчивости воспользуемся гиперболическим характером QGS уравнений (2.7)–(2.9). Алгоритм рассмотрим на примере гиперболичного уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \tau^* \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} \chi \frac{\partial T}{\partial x} + F, \qquad (3.2)$$

здесь 
$$\chi$$
 – коэффициент теплопроводности,  
*F* – источник тепла.

В качестве времени  $\tau^*$ , которое может отличаться от времени  $\tau$ , выберем величину

$$\tau^* = \frac{h}{c}, \qquad (3.3)$$

с – характерное значение скорости.

Такой выбор времени  $\tau^*$ , которое, как правило, заметно больше, чем  $\tau$ , определяется с одной стороны необходимостью получения вычислительного эффекта, а с другой стороны – необходимостью выполнения соотношения

$$\left[\tau^* \frac{\partial^2 T}{\partial t^2}\right] << \left[\frac{\partial T}{\partial t}\right]. \tag{3.4}$$

С физической точки зрения условие (3.4) означает, что наличие члена  $\tau * \frac{\partial^2 T}{\partial t^2}$  слабо влияет на решение исходного уравнения.

Заметим, во-первых, что уравнение теплопроводности является приближением для уравнения энергии в случае, когда переносом энергии за счет газодинамического движения можно пренебречь по сравнению с молекулярным переносом. Во-вторых, гиперболическое уравнение переноса уже давно применяется в физике для описания взаимодействия лазерного импульса в наносекундном диапазоне с веществом [16]. Для решения уравнения (3.2) выпишем трехслойную схему (на примере  $\chi = \text{const}$ )

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^{j-1}}{2\Delta t} + \tau * \frac{T_i^{j+1} - 2T_i^j + T_i^{j-1}}{\Delta t^2} = \chi \frac{T_{i+1}^j - 2T_i^j + T_{i-1}^j}{h^2} + F$$
(3.5)

здесь i – индекс пространственной точки, j – номер шага по времени.

Трехслойная по времени схема (3.5) явная. Значение функции  $T_i^{j+1}$  легко определяется по значениям  $T_{i+1}^j$ ,  $T_i^j$ ,  $T_{i-1}^j$  и  $T_i^{j-1}$ .

Оценка устойчивости схемы (3.5) с  $\tau^*$ , определяемым уравнением (3.4), дает следующее условие устойчивости [4]:

$$\Delta t \le h^{3/2} \tag{3.6}$$

Условие (3.6) тоже достаточно жесткое, однако оно обладает заметным преимуществом по сравнению с традиционным условием устойчивости (3.1), особенно на подробных пространственных сетках. Оценка (3.6) получена теоретически. Реальные расчеты 3D задач на сетках порядка миллиарда узлов условие устойчивости курантовского типа дают

$$\Delta t \le h \tag{3.7}$$

Заметим, что можно получить более мягкое, по сравнению с (3.6), условие устойчивости схемы (3.5), если выбрать большее, по сравнению с (3.3), значение  $\tau^*$ . Правда при этом наблюдается различие между параболическим и гиперболическим уравнением теплопроводности. По мнению авторов, наиболее оптимальным для выбора  $\tau^*$  представляется условие (3.3).

Сравнение решений параболического и гиперболического вариантов уравнения теплопроводности неоднократно проводилось экспериментально и показало на подробных пространственных сетках практически полное их совпадение.

Представим результаты теоретических оценок разности решений двух линейных уравнений, параболического

$$\frac{\partial U_p}{\partial t} = AU_p + f(t, \vec{x})$$
(3.8)

и гиперболического

$$\frac{\partial U_h}{\partial t} + \sigma \frac{\partial^2 U_h}{\partial t^2} = A U_h + f(t, \vec{x})$$
(3.9)

здесь *А* – линейный оператор эллиптического типа, *о* – малый параметр при старшей производной по времени.

Оценка разности е решений уравнений (3.5) и (3.6) [17]

$$e = U_p - U_h \tag{3.10}$$

показала, что в норме

$$\left\|\nabla e\right\|^2 = \int \nabla k e \nabla e \, d\vec{x} \tag{3.11}$$

имеет место

$$\int_{T} (2 - \gamma_2) \|\nabla e\|^2 dt + \int_{D} |e(\vec{x}, t)|^2 d\vec{x} \le \sigma^2 \cdot C_1^2 \int_{T} \int_{D} \left| \frac{\partial^2 U_2}{\partial t^2} \right|^2 d\vec{x} dt , (3.12)$$

где: D – пространственная область интегрирования, [0,T] – временной интервал,  $\gamma_2$  – положительная константа < 2,

*С* – ограниченная константа, зависящая от пространственной области *D*.

Из (3.9) следует, что при достаточно малом  $\sigma$  разность между решениями уравнений (3.7) тоже мала. Правда, этот вывод справедлив для не слишком быстро изменяющихся гармоник решения. Для высших гармоник, описывающих быстрые изменения по времени, эта разность может быть значительна. При этом необходимо вспомнить, что сильная вариация решения по времени связана с коротковолновыми вариациями по пространству. Именно эти коротковолновые изменения и не описываются при разностной аппроксимации уравнений (3.5) и (3.6).

Трехслойная явная схема использовалась для аппроксимации системы уравнений (2.7)–(2.9). При этом на равномерных прямоугольных сетках конвективные схемы аппроксимировались с помощью центральных разностей по пространству на j слое по времени. На том же слое по времени j проводилась аппроксимация правых частей QGS уравнений с помощью вторых пространственных разностей. При аппроксимации на неструктурированных сетках QGS уравнения (треугольные – для 2D геометрии и тетраэдные – для 3D) возможно использование схем повышенного порядка точности [2].

В качестве одного примера укажем на расчет течения несжимаемой жидкости вблизи 3D каверны. Для расчета по трехслойной явной схеме использовалась пространственная аппроксимация, состоящая из 4.5х10<sup>9</sup> ячеек. Расчет проводился на суперкомпьютере "Ломоносов" (МГУ, Москва). Для решения одновременно использовалось 1200 графических карт "Tesla". Эффективность параллельной обработки при этом составляла 68%.

Более подробно примеры решения задач на вычислительных системах с экстрамассивным параллелизмом приведем в последнем параграфе статьи. Здесь заметим следующее.

Использование кинетических уравнений для расчета гидро- и газодинамических задач позволяет строить эффективные алгоритмы для высокопроизводительных вычислительных систем. Эти алгоритмы используют

как гиперболический характер уравнений, так и структуру диссипативных членов QGS уравнений.

Отличительной чертой построения QGS уравнений явилось использование того факта, что существуют масштабы (в данном случае, характерное время между столкновениями  $\tau$  и длина свободного пробега l), меньше которых в задачах механики сплошных сред не имеет смысла дальнейшая детализация решения. Это положение может быть распространено не только на задачи газовой динамики. С этой целью рассмотрим моделирование задач, связанных с подземной фильтрацией.

# 4. Моделирование процессов фильтрации на высокопроизводительных вычислительных системах

Фильтрация является важным элементом математических моделей, описывающих добычу углеводородного сырья, движение подземных вод, различные технические устройства. Типичной моделью для фильтрации является следующая:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} div \,\rho \vec{u} = 0 \;; \tag{4.1}$$

$$\vec{u} = -k \operatorname{grad} p ; \tag{4.2}$$

$$\rho = \rho_0 + \beta (p - p_0); \qquad (4.3)$$

здесь k – коэффициент проницаемости,  $\beta$  - –коэффициент сжимаемости<sup>2</sup>,  $p_0$  и  $\rho_0$  – соответственно опорные значения давления и плотности.

Решение системы (4.1)-(4.3), связанное с решением параболического уравнения для плотности или давления, достаточно сложно для реализации на высокопроизводительных вычислительных системах С массивным параллелизмом. Для того чтобы построить простой параллельный алгоритм, обратим внимание на следующий факт. При рассмотрении процессов фильтрации во внимание не принимается течение вокруг отдельных зерен породы. Интерес представляет лишь осредненное на расстоянии порядка диаметра нескольких десятков зерен течение. Назовем это расстояние  $\tilde{l}$ . Для *l* порядка примеров расстояние миллиметров, характерных ЭТО что, естественно, существенно меньше разумных геологических размеров. Таким

 $<sup>^2</sup>$  Для жидкостей  $\beta$  невелико. При этом слабому изменению плотности соответствует сильное изменение давления.

образом, минимальным размером, меньше которого в этом случае не имеет смысла детализация, является  $\tilde{l}$  рис. 2.



Рис. 2. Характерная геометрия для задачи процесса фильтрации

В работе [18] было показано, что закон Дарси (4.2) вытекает непосредственно из уравнения движения Навье-Стокса в пренебрежении конвективными членами и его осреднением на характерном масштабе  $\tilde{l}$ . Чтобы усреднить уравнение неразрывности, рассмотрим функцию распределения  $f(t, \vec{x}, \vec{\xi})$ для фильтрующейся жидкости.

Для описания изменения функции распределения в плотных газах и жидкостях воспользуемся кинетическим уравнением Энскога [10]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f}{\partial \vec{x}_i} = \sum_{k=1}^6 J_k \,,$$

(4.4)

где  $J_k$  – шесть интегралов столкновения, входящих в правую часть уравнения (4.4).

Нам понадобится только закон сохранения массы. К счастью, необходимый для него момент от правой части уравнения Энскога равен нулю

$$\int \sum_{k=1}^{6} J_k d\vec{\xi} = 0 \,. \tag{4.5}$$

В результате процедур, аналогичных выводу QGS уравнений, придем к новому уравнению неразрывности [2, 19]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \tau * \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + div \,\rho \vec{u} = div \frac{\tilde{l}}{2} c \,grad \,\rho \,, \tag{4.6}$$

где с – характерная скорость звука.

Уравнение (4.6) дополним законом Дарси и уравнением, описывающим связь с плотностью и давлением жидкости:

$$u = -k \operatorname{grad} p ; \tag{4.7}$$

$$\rho = \rho_0 + \beta (p - p_0). \tag{4.8}$$

Систему (4.6)–(4.8) будем рассматривать вместо (4.1)–(4.3) для моделирования процессов фильтрации.

Заметим, что дополнительные по сравнению с (4.1) члены в уравнении (4.6) практически не влияют на результаты численного решения. Они выступают в роли регуляризаторов. Однако эти регуляризаторы получены не из математических соображений, а имеют реальный физический смысл. Учитывая, что дополнительные члены в (4.6) являются регуляризаторами, выбор коэффициентов, в них входящих,  $\tilde{l}$ , c, не обязательно осуществлять точно. Достаточно из физических соображений определить их порядок величины, что дает дополнительные удобства при численной реализации.

Данная модель позволяет использовать трехслойную явную схему, которая хорошо адаптируется к архитектуре высокопроизводительных вычислительных систем. В качестве примера укажем на расчет задачи многофазной фильтрации токсического вещества с поверхности Земли в подземные горизонты [20]. Для моделирования каждой фазы использовалось уравнение типа (4.6). Расчет производился на 3D пространственной сетке, состоящей из 1.5х10<sup>9</sup> узлов.

Расчет проводился на гибридном использующем графические процессоры, вычислительном кластере высокой производительности К-100, установленном в ИПМ им. М.В.Келдыша, РАН (Москва). Производительность, используемая при расчете конкретного примера, составляла около 100 TFLOPS. Экспериментально была продемонстрирована устойчивость счета, удовлетворяющая условию Куранта

$$\Delta t \le h \,. \tag{4.9}$$

Перейдем к рассмотрению кинетических моделей для моделирования задач магнитной газовой динамики на высокопроизводительных параллельных вычислительных системах, которыми авторы занимались в последнее время.

# 5. Кинетические модели для задач магнитной газовой динамики

Традиционная система уравнений магнитной газовой динамики (МГД) выглядит следующим образом [21]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div \,\rho \vec{u} = 0 \,; \tag{5.1a}$$

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i u_j + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( p + \frac{B^2}{8\pi} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} B_i B_j = 0$$
(5.2a)

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho u_i E + u_i p + u_i \frac{B^2}{8\pi} - B_i u_k B_k \right) = 0$$
(5.3a)

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} - rot \left( \vec{u} \times \vec{B} \right) = 0; \qquad (5.4a)$$

$$div\,\vec{B} = 0\,; \tag{5.5a}$$

или

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div \,\rho \vec{u} = 0 \; ; \tag{5.1b}$$

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i u_j + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( p + \frac{B^2}{8\pi} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} B_i B_j = \frac{\partial P_{ij}}{\partial x_i} ; \qquad (5.2b)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho u_i E + u_i p + u_i \frac{B^2}{8\pi} - B_i u_k B_k \right) = -\frac{\partial}{\partial x_i} u_j P_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_i} \chi \frac{\partial T}{\partial x_i}; \quad (5.3b)$$

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} - rot \left( \vec{u} \times \vec{B} \right) = -rot \left( v_m rot \vec{B} \right); \tag{5.4b}$$

$$div\,\vec{B}=0\,;\tag{5.5b}$$

где  $P_{ij}$  – тензор вязких напряжений,

– тензор вязких напряжений,  

$$P_{ij} = -\mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)_{i=j}, \quad \mu - \text{коэффициент вязкости.}$$

В системах уравнений (5.1а) –(5.5а) и (5.1b) –(5.5b) дополнительно к ранее введенным использовались обозначения:

$$B$$
 – вектор напряженности магнитного поля,

 $\vec{u}$  – вектор скорости,

 $\sigma$  – проводимость,

С – скорость света,

$$v_m = \frac{c^2}{4\pi\sigma},\tag{5.6}$$

*V<sub>m</sub>* – магнитная вязкость.

Система уравнений (5.1а)–(5.5а) является уравнениями идеальной МГД, полученной в пренебрежении диссипативными процессами. Система (5.1b)–(5.5b) вязкой МГД учитывает разнообразные диссипативные процессы. В отсутствие магнитного ( $\vec{B} = 0$ ) первая система является системой уравнений Эйлера, а вторая Навье-Стокса. Общее для обеих систем уравнение (5.5) характеризует отсутствие в природе магнитного заряда.

Многие задачи физики плазмы, в том числе задачи астрофизики, требуют для своего описания использования именно системы (5.1b)–(5.5b) с учетом молекулярной вязкости  $\mu$ , теплопроводной и магнитной вязкости  $v_m$  (5.6). И если для описания течения вязкого теплопроводного на основе QGS удается построить приемлемую явную схему, то ее распространение для расчетов уравнения магнитной индукции (5.4b) на первый взгляд не очевидно.

Попробуем применить кинетический подход для построения алгоритма решения уравнения (5.4б). С этой целью вспомним, что действие магнитного поля всегда ортогонально траектории движения заряженной частицы среды. Учитывая это, введем комплексную локально максвеловскую функцию распределения  $f_M$ 

$$f_{M} = \frac{\rho(\vec{x})}{(2\pi RT)^{2}} \exp\left\{\frac{-\xi_{k} - u_{k} - iv_{ak}}{2RT}\right\}^{2},$$
(5.7)

здесь *i* – мнимая единица,

 $\vec{v}_{\alpha}$  – вектор альфвеновской скорости,

$$v_a = \frac{\vec{B}}{\sqrt{4\pi\rho}}.$$
(5.8)

В этом случае входящие в уравнение магнитной газовой динамики величины могут быть определены как моменты функции распределения  $f_M$ 

$$\rho(\vec{x},t) = \int f_M \, d\vec{\xi} \,, \tag{5.9}$$

$$\vec{u}(\vec{x},t) = \frac{1}{\rho} \int \vec{\xi} f_M \, d\vec{\xi} \,, \tag{5.10}$$

$$E(\vec{x},t) = \frac{1}{2} \int \vec{\xi}^2 f_M \, d\vec{\xi} \,, \tag{5.11}$$

$$\vec{B}(\vec{x},t) = -\frac{1}{\rho} \int \vec{\xi}^* f_M \, d\vec{\xi} \,, \qquad (5.12)$$

где  $\vec{\xi}^*$  есть комплексно сопряженная величина и интеграл, вычисляется как комплексная составляющая.

Таким образом, мы используем набор сумматорных инвариантов

$$\varphi = \varphi \left( 1, \vec{\xi}, \xi^2, \vec{\xi}^* \right) . \tag{5.13}$$

В этом набор дополнительно входит  $\vec{\xi}^*$ , который также является сумматорным инвариантом, ибо для него так же, как и для  $\vec{\xi}$ , выполняется условие сохранения импульса при столкновении молекул.

Так же, как в процедуре получения моментных уравнений в газовой динамике из уравнения Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \frac{\partial f}{\partial x} = J(t, \vec{x}, \vec{\xi}), \qquad (5.14)$$

где  $J(t, \vec{x}, \vec{\xi})$  – интеграл столкновений,

умножим (5.14) последовательно на сумматорные инварианты (5.13) и проинтегрируем по всем скоростям молекул в комплексной плоскости.

При этом, удивительным образом полагая  $f = f_M$ , где  $f_M$  определяется (5.7), придем к уравнениям идеальной магнитной газовой динамики (5.1а)–(5.5а). Причем уравнение (5.5а), характеризующее отсутствие магнитного заряда, получается как комплексная часть уравнения неразрывности [5, 22].

Поясним технику такого интегрирования. Обозначим через

$$c_k = \xi_k - u_k - iv_{ak}, \qquad (5.15)$$

тогда  $\xi_k = c_k + u_k + iv_{ak} = s_k + iv_{ak}$ .

Интегрирование (5.14) с сумматорными инвариантами  $\varphi(\xi)$  можно записать в виде

$$\int \varphi(\vec{s}) \frac{\partial f_M}{\partial t} + \int \varphi(\vec{s}) \frac{\partial f_M}{\partial x_k} (\vec{s} + i\vec{v}_{ak}) d\vec{\xi} = 0$$
(5.16)

Используя возможность получения уравнений идеальной МГД (5.1a) (5.5a) из уравнения Больцмана, выпишем аналог балансного уравнения (2.4) для функции  $f_M$  (5.7)

$$f(t^{j}, \vec{x}, \vec{\xi}) - f_{M}(t^{j}, \vec{x}, \vec{\xi}) + \tau \xi_{k} \frac{\partial f_{M}^{j}}{\partial x_{k}} = \frac{\partial}{\partial x_{k}} \hat{\tau}^{2} \xi_{k} \xi_{p} \frac{\partial f_{M}}{\partial x_{p}}.$$
(5.17)

В качестве  $\hat{\tau}$  при умножении (5.17) на сумматорные инварианты  $1, \vec{\xi}$  и  $1/2\xi^2$  вновь возьмем  $\tau$  – время между столкновениями молекул. При умножении на дополнительный сумматорный инвариант  $\xi^*$  выберем другое характеристическое время  $\tau_M$ , смысл которого поясним позднее.

В результате этих процедур с уравнением (5.17) получим квазигазодинамический аналог МГД системы уравнений, учитывающей диссипативные эффекты

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \prod_{ik} \right) \qquad ; \qquad (5.18)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 \rho u_i}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial x_k} \prod_{ik} = \frac{\partial}{\partial x_i} \prod_{ik} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \prod_{ik} \right) u_k \right];$$
(5.19)

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} + \frac{\partial E}{\partial x_k} = \frac{\partial Q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \prod_{ik}^D u_k + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \frac{E+p}{\rho} + \frac{B^2}{8\pi\rho} \right) \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \prod_{ik} \right]; \quad (5.20)$$

$$\frac{\partial B_i}{\partial t} + \frac{\tau_{\mu}}{2} \frac{\partial^2 B_i}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial x_i} \mathbf{M}^B_{ik} = \frac{\partial}{\partial x_i} \prod_{ik}^{DB}; \qquad (5.21)$$

$$div\,\vec{B}=0\,.$$

В системе (5.18)–(5.22) использовались следующие дополнительные обозначения:

$$\prod_{ik} = \left(p + \frac{B^2}{8\pi}\right)\delta_{ik} + \rho u_i u_k - B_i B_k ; \qquad (5.23)$$

$$\begin{split} \Pi_{ik}^{D} &= \frac{\tau}{2} \left[ p \frac{\partial u_{i}}{\partial x_{k}} + p \frac{\partial u_{k}}{\partial x_{i}} - \frac{3}{2} p \frac{\partial u_{m}}{\partial x_{m}} \delta_{ik} \right] + \\ &+ \frac{\tau}{2} \left[ \frac{B^{2}}{8\pi} \delta_{mk} - B_{m} B_{k} \frac{\partial u_{i}}{\partial x_{m}} + \left( \frac{B^{2}}{8\pi} - B_{im} \right) \frac{\partial u_{k}}{\partial x_{m}} - \\ &- \left( \frac{B^{2}}{2} \delta_{ik} - B_{i} B_{k} \right) \frac{\partial u_{m}}{\partial x_{m}} \right] + \\ &+ \frac{\tau}{2} \left[ B_{m} \left( -B_{k} \frac{\partial u_{i}}{\partial x_{m}} - B_{i} \frac{\partial u_{k}}{\partial x_{m}} + B_{n} \frac{\partial u_{n}}{\partial x_{m}} \delta_{ik} \right) \right] + \\ &+ \frac{\tau}{2} \left[ \rho u_{i} u_{m} \frac{\partial u_{k}}{\partial x_{m}} + u_{i} \frac{\partial p}{\partial x_{k}} + u_{i} \frac{\partial}{\partial x_{k}} \frac{B^{2}}{8\pi} - u_{i} \frac{\partial}{\partial x_{m}} B_{m} B_{k} \right] + \\ &+ \frac{\tau}{2} \left[ u_{m} \frac{\partial p}{\partial x_{m}} + \gamma p \frac{\partial u_{m}}{\partial x_{m}} \right] \delta_{ik} + \\ &+ \frac{\tau}{2} \left[ B_{n}^{2} \frac{\partial u_{m}}{\partial x_{m}} - B_{n} B_{m} \frac{\partial u_{n}}{\partial x_{m}} + B_{n} u_{m} \frac{\partial B_{n}}{\partial x_{m}} \right] \delta_{ik} + \\ &+ \frac{\tau}{2} \left[ -B_{i} B_{k} \frac{\partial u_{m}}{\partial x_{m}} + B_{i} B_{m} \frac{\partial u_{m}}{\partial x_{m}} - B_{i} u_{m} \frac{\partial B_{k}}{\partial x_{m}} \right] + \\ &+ \frac{\tau}{2} \left[ -B_{k} B_{i} \frac{\partial u_{m}}{\partial x_{m}} + B_{k} B_{m} \frac{\partial u_{i}}{\partial x_{m}} - B_{k} u_{m} \frac{\partial B_{i}}{\partial x_{m}} \right] \end{split}$$

$$\begin{split} \mathcal{Q}_{i}^{D} &= \frac{\tau}{2} \left[ \frac{5}{2} p \frac{\partial}{\partial x_{i}} \frac{p}{\rho} \right] + \frac{\tau}{2} \left[ \frac{5}{2} \left( \frac{B^{2}}{2} \delta_{in} - B_{ik} \right) \frac{\partial}{\partial x_{k}} \frac{p}{\rho} \right] + \\ &+ \frac{\tau}{2} \left[ \frac{3}{2} \left( p \delta_{ik} + \frac{B^{2}}{8\pi} \delta_{ik} - B_{i} B_{k} \right) \frac{\partial}{\partial x_{k}} \frac{B^{2}}{8\pi \rho} - \\ &- \left( p + \frac{B^{2}}{8\pi} \right) \frac{\partial}{\partial x_{k}} \frac{B_{i} B_{k}}{\rho} - \frac{B_{i} B_{k}}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_{k}} \frac{B^{2}}{8\pi} \right] + \\ &+ \frac{\tau}{2} \left[ \rho u_{i} u_{k} \frac{\partial}{\partial x_{k}} \frac{3p}{\rho} \right] + \frac{\tau}{2} \left[ \rho u_{i} u_{k} \left( p + \frac{B^{2}}{8\pi} \right) \frac{\partial}{\partial x_{k}} \frac{1}{\rho} - u_{i} B^{2} \frac{\partial u_{k}}{\partial x_{k}} \right] + \\ &+ \frac{\tau}{2} \left[ u_{i} B_{m} \left( B_{m} \frac{\partial u_{k}}{\partial x_{k}} - B_{k} \frac{\partial u_{m}}{\partial x_{k}} + u_{k} \frac{\partial B_{m}}{\partial x_{k}} \right) \right] + \\ &+ \frac{\tau}{2} \left[ \frac{1}{2} 8 u_{i} u_{k} \left( \frac{B^{2}}{8\pi} \frac{\partial}{\partial x_{k}} \frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_{k}} \frac{B^{2}}{8\pi} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_{k}} B_{m} B_{k} \right) \right] + \\ &+ \frac{\tau}{2} \left[ B_{i} B_{m} \left( -u_{k} \frac{\partial}{\partial x_{k}} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_{m}} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_{m}} \frac{B^{2}}{8\pi} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_{k}} B_{m} B_{k} \right) \right] \end{split}$$

$$\begin{split} \Pi_{ik}^{DB} &= \frac{\tau_m}{2} \left[ \frac{1}{\rho} \left( p + \frac{B^2}{8\pi} \right) \left( \frac{\partial B_i}{\partial x_k} - \frac{\partial B_k}{\partial x_i} \right) \right] + \\ &+ \frac{\tau_m}{2} \left[ \left( p + \frac{B^2}{8\pi} \right) \left( B_i \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{1}{\rho} - B_k \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{\rho} \right) \right] + \\ &+ \frac{\tau_m}{2} \left[ u_k B_m \frac{\partial u_i}{\partial x_m} - u_i B_m \frac{\partial u_k}{\partial x_m} \right] + \\ &+ \frac{\tau_m}{2} \left[ \frac{1}{\rho} B_i B_m \frac{\partial B_k}{\partial x_m} - \frac{1}{\rho} B_k B_m \frac{\partial B_i}{\partial x_m} \right] + \\ &+ \frac{\tau_m}{2} \left[ u_k B_i \frac{\partial u_m}{\partial x_m} - u_k B_m \frac{\partial u_i}{\partial x_m} + u_k u_m \frac{\partial B_i}{\partial x_m} \right] + \\ &+ \frac{\tau_m}{2} \left[ B_i u_m \frac{\partial u_k}{\partial x_m} + \frac{B_i}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_k} + \frac{B_i}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{B^2}{8\pi} - \frac{B_i}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_m} B_k B_m \right] + \\ &+ \frac{\tau_m}{2} \left[ -u_i B_k \frac{\partial u_m}{\partial x_m} + u_i B_m \frac{\partial u_k}{\partial x_m} - u_i u_m \frac{\partial B_k}{\partial x_m} \right] + \\ &+ \frac{\tau_m}{2} \left[ -B_k u_m \frac{\partial u_i}{\partial x_m} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{B^2}{8\pi} + \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_m} B_i B_m \right] + \\ &+ \frac{\tau_m}{2} \left[ -B_k u_m \frac{\partial u_i}{\partial x_m} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{B^2}{8\pi} + \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_m} B_i B_m \right] + \\ &+ \frac{\tau_m}{2} \left[ -B_k u_m \frac{\partial u_i}{\partial x_m} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{B^2}{8\pi} + \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_m} B_i B_m \right] + \\ &+ \frac{\tau_m}{2} \left[ -B_k u_m \frac{\partial u_i}{\partial x_m} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} B_k B_m \right] + \\ &+ \frac{\tau_m}{2} \left[ -B_k u_m \frac{\partial u_i}{\partial x_m} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} B_k B_m \right] + \\ &+ \frac{\tau_m}{2} \left[ -B_k u_m \frac{\partial u_i}{\partial x_m} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} B_k B_m \right] + \\ &+ \frac{\tau_m}{2} \left[ -B_k u_m \frac{\partial u_i}{\partial x_m} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} B_k B_m \right] + \\ &+ \frac{\tau_m}{2} \left[ -B_k u_m \frac{\partial u_i}{\partial x_m} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} B_k B_m \right] + \\ &+ \frac{\tau_m}{2} \left[ -B_k u_m \frac{\partial u_i}{\partial x_m} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} B_k B_m \right] + \\ &+ \frac{\tau_m}{2} \left[ -B_k u_m \frac{\partial u_i}{\partial x_m} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} B_k B_m \right] + \\ &+ \frac{\tau_m}{2} \left[ -B_k u_m \frac{\partial u_i}{\partial x_m} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{B_k}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_m} B_k B_m \right]$$

Левая часть системы (5.18)–(5.22) за исключением членов со второй производной по времени совпадает с уравнениями идеальной МГД (5.1а)–(5.5а).

Обратим более подробное внимание на диссипативный член  $\prod_{ik}^{DB}$  (5.26), стоящий в правой части квазигазодинамического аналога уравнений магнитной индукции (5.21). Для исходной QGS системы удается теоретически доказать ее близость (2.11) к уравнениям Навье-Стокса. К сожалению, такую теоретическую оценку для диссипативного члена (5.28) пока провести не удалось. Однако расчеты показывают, что вклад в диссипативные процессы уравнения (5.21) в основном оказывает первое слагаемое  $\prod_{ik}^{DB}$ 

$$\prod_{ik}^{DB} = \frac{\tau_m}{2} \left[ \frac{1}{\rho} \left( p + \frac{B^2}{8\pi} \right) \left( \frac{\partial B_i}{\partial x_k} - \frac{\partial B_k}{\partial x_i} \right) \right].$$
(5.27)

Остальные члены вносят крайне незначительный вклад в результаты численного анализа и являются, по сути дела, регуляризаторами.

В классическом уравнении магнитной индукции (5.4b) вязкий диссипативный член имеет ту же форму, что и (5.27)

$$\frac{\partial B_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ u_k B_i - u_i B_k \right] = \frac{\partial}{\partial x_k} v_m \left( \frac{\partial B_i}{\partial x_k} - \frac{\partial B_k}{\partial x_i} \right).$$
(5.28)

Поэтому имеет смысл определить  $au_m$ из условия равенства

$$v_{m} = \frac{c^{2}}{4\pi\sigma} = \frac{\tau_{m}}{2} \frac{1}{\rho} \left( p + \frac{B^{2}}{8\pi} \right).$$
(5.29)

Магнитодинамическое давление  $p + \frac{B^2}{8\pi}$ , так же, как и газодинамическое давление, является моментом функции распределения

$$p + \frac{B^2}{8\pi} = \int f_m c^2 d\vec{\xi} , \qquad (5.30)$$

где  $f_M$  определяется выражением (5.7), а c - (5.15).

Тем самым магнитная вязкость (5.28), помимо классического выражения (5.6), определяющего ее зависимость от проводимости, может быть выражена по аналогии с кинетической молекулярной вязкостью *V* 

$$v = \frac{\tau}{2} \frac{p}{\rho} \tag{5.31}$$

через магнитодинамическое давление и характерное время  $au_m$ .

Возвращаясь к численному решению системы (5.18)–(5.22), отметим, что в качестве алгоритма использовалась трехслойная явная схема. Несмотря на громоздкий характер ее диссипативных членов, ее реализация на вызывает, как и для других явных схем, особых трудностей. Тем не менее в настоящее время авторы проводят вычислительные эксперименты с целью выявления диссипативных членов в выражениях (5.23)–(5.26), которые не оказывают влияния на результаты расчетов. Естественно, что эти члены могут быть впоследствии отброшены.

# 6. Результаты численных расчетов

В качестве иллюстрации предложенного кинетически согласованного алгоритма для магнитной газовой динамики нами приводятся численные эксперименты из области физики плазмы (термоядерный синтез на установке Токамак), процесс расширения ионизированного газа в пространстве с магнитным полем, а также задача из области астрофизики – аккреция межзвездной материи на компактном астрофизическом объекте (черная дыра) [23].

Первый численный эксперимент относится к области физики плазмы – моделирование процесса расширения ионизированного газа в пространстве с магнитным полем. Были использованы начальные условия, аналогичные работе [24], с адаптацией на наши условия. Задача решалась для 3D геометрии в пространстве  $L_x=1.0$ ,  $L_y=1.5$ ,  $L_z=1.0$ , численный домен представляется прямоугольной сеткой 400х400х600 (96 миллионов ячеек). Начальная плотность однородна и постоянна, величина 1, за исключением центра расчетной области где выделена сфера радиусом R=0.125 с давлением 100 и  $\beta = 2\pi/B^2$ . Магнитное поле ориентировано в плоскость *х*,*y* с параметрами  $B_x$ ,  $B_y = 10/\sqrt{2}$ ,  $B_z = 0$ . Расчетный интервал времени для 0.2. Для инициализации представлены расчеты с теми же начальными условиями без магнитного поля.

Кинетически согласованная система уравнений (5.18)–(5.22) решалась с использованием метода конечных объемов и метода эволюции переноса магнитной индукции со смещенной сеткой для электромагнитных переменных для сохранения условия соленоидальности магнитного поля [25]. Дальнейшие детали вычислительного алгоритма и методы параллельной реализации будут представлены позднее, в отдельной публикации.

Результаты моделирования представлены на рис. За,б. Стрелками представлено поле скоростей в данной области моделирования. 3D контуры представляют эквипотенциальные контуры плотности среды. На рис. За представлено решение задачи расширения газа в пространстве (с процессом формирования ударных волн) без магнитного поля для времени t = 0.2. Представленный результат показывает наличие структуры исследуемого процесса и ее сферическую симметрию. На рис. Зб представлено решение аналогичной задачи расширения газа в пространстве, но при наличии сильного магнитного поля, ориентированного диагонально в плоскости ху. Характер основного процесса имеет сильно выраженную цилиндрическую геометрию как действие приложенного распространения ВДОЛЬ магнитного поля, магнитного поля. Дополнительно видны процессы в прилежащих областях, что является следствием процесса распространения ударных волн и граничных условий, которые в данном эксперименте представляются условиями отражения.



б)

*Рис. 3*. Плазма распространение в пространстве а) без магнитного поля б) с магнитным полем

Второй численный эксперимент из области астрофизики. Задача об аккреции межзвездного газа на массивном астрофизическом объекте. Расчетная область с прямоугольными координатами  $L_r=1.0 \times 10^3$ ,  $L_r=1.0 \times 10^3$ ,  $L_r=1.0 \times 10^3$ астрономических единиц (AU) в 3D геометрии, вычислительный домен 1024х1024х1024 ячеек (1 миллиард ячеек). На рис. 4а,б представлены характерные моменты, связанные с процессом поглощения компактным астрофизическим объектом межзвёздной материи. Компактный массивный астрономический объект находится в центре расчётной области, масса ~ 10 солнечных масс, его размеры малы для отображения. Облако межзвёздной (размеры значительно превышают размеры материи компактного астрофизического объекта) движется прямолинейно равномерно, В вертикальном направлении (на рисунке) с импакт параметром 100 АU. На рис. 4а представлено начальное состояние астрономических объектов в начале аккреции межзвездного вещества и появление видимого аккреционного облака на компактном астрофизическом объекте. На активной фазе взаимодействия видны распространяющиеся ударные волны и динамичная турбулентная аккреция материи на компактный объект. Активное взаимодействие астрофизических объектов представлено на рис. 4б, где видны активная аккреция межзвёздной материи на компактном объекте, и детальные турбулентные процессы, сопровождающие данное состояние. Далее процесс заканчивается образованием космической струи.

Интересным представляется также процесс передачи (или формирования) углового момента аккреционного облака от поступательного движения первичного облака межзвёздной материи. В начальный момент компактный астрофизический объект не имеет углового момента, но в процессе взаимодействия с движущимся прямолинейно облаком межзвёздной материи астрофизический компактный объект и аккреционное облако приобретают угловой момент, являющийся важнейшим элементом динамики аккреционных процессов.



*Рис. 4.* Процесс аккреции межзвездного газа на компактном массивном астрофизическом объекте (в центре); а) облако межзвездного газа на прямолинейной траектории вблизи компактного массивного объекта, б) в процессе аккреции облака межзвездного газа

### 7. Заключение

B заключении авторы хотели бы отметить. удачные что высокопроизводительные алгоритмы могут быть найдены не только в рамках традиционных методов прикладной математики. Здесь существенную помощь может оказать активное использование фундаментальных знаний из физики и механики. Построенные таким образом алгоритмы в значительной мере опираются на использование физических закономерностей, присущих изучаемым процессам.

В частности, полезным является использование при конструировании алгоритмов расчета задач механики сплошной среды кинетических моделей, которые органично адаптируются к архитектуре высокопроизводительных вычислительных систем с экстрамассивным параллелизмом. Из кинетических моделей вытекает понимание того, что во многих задачах механики сплошных сред существуют минимальные размеры, меньше которых не имеет смысла дальнейшая детализация решения. Этот факт приводит к построению диссипативных членов, которые выступают в роли физически обоснованных регуляризаторов решения. С использованием кинетических моделей тесно связан прием гиперболизации параболических уравнений. Этот прием позволяет заметно улучшить условие устойчивости используемых явных схем.

Авторы выражают искреннюю благодарность Н.Д'Асчензо, активно подключившемуся в последнее время к данным исследованиям и внесшему заметный вклад в их успешное осуществление.

# Библиографический список

- 1. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. М., ИЛ, 1960, 510 с.
- 2. Chetverushkin B.N. Kinetic Schemes and Quasigasdynamic System of Equations, CIMNE, Barcelona, 2008.
- 3. Четверушкин Б.Н., Давыдов А.А., Шильников Е.В. Моделирование течений несжимаемой жидкости и слабосжимаемого газа на многоядерных гибридных вычислительных системах, // Ж. выч. мат. и мат. физ., 2010, т. 50, № 12, С. 2275-2284.
- 4. Четверушкин Б.Н., Гулин А.В. Явные схемы и моделирование на высокопроизводительных системах, // ДАН, 2012, т. 446, 5, С. 501-503.
- 5. Chetverushkin B.N., D'Ascenzo N., Saveliev V.I. Hyperbolic type explicit kinetic schemes of magneto gas dynamic for high performance computing systems, // Num. Anal. and Math. Mod., v. 30(1), 2015.

- 6. Волчинская М.И., Павлов А.Н., Четверушкин Б.Н. Об одной схеме интегрирования уравнений газовой динамики // Препринты ИПМ им.М.В.Келдыша. 1983. № 113. 12 с.
- 7. Елизарова Т.Г., Четверушкин Б.Н. Об одном вычислительном алгоритме для расчета газодинамических течений, // ДАН СССР, 1984, т. 279, 1, С. 80-83.
- 8. Граур И.А., Елизарова Т.Г., Четверушкин Б.Н. Моделирование сложных газодинамических течений на основе кинетических алгоритмов, // Дифференциальные уравнения, 1986, т. 22, 7, С. 1173-1180.
- 9. Четверушкин Б.Н. Кинетически согласованные схемы в газовой динамике: новая модель вязкого газа, алгоритмы, параллельная реализация приложения, М.: Изд. МГУ, 1999, с. 232.
- 10. Гиршфельдер Дж, Кертис Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей, М.: ИЛ. 1961, 916 с.
- Шеретов Ю.В. Квазигидродинамические уравнения как модель течения сжимаемой вязкой теплопроводной среды, сб. Применение функционального анализа в теории приближений, Тверь, изд. ТГУ, 1997, С. 127-155.
- 12. Ладыженская О.А. Математические вопросы динамики вязкой несжимаемой жидкости, М.: Наука, 1970, 288 с.
- 13. Frish U., Hasslacher B., Pomeau Y., Lattice gas automata for Navier-Stokes equations, // Phys. Rev. Lett. 1986, v. 56, 14, pp. 1505-1508.
- 14. Succi S. The Lattice Boltzmann equation in fluid dinamics and beyond. Claredon Press, Oxford, 2002, 304 p.
- 15. Злотник А.А., Четверушкин Б.Н. Параболичность квазигазодинамической системы уравнений, гиперболичность одной ее модификации и устойчивость малых возмущений для них, // Ж. вычисл. мат. и матем. физ., 2008, т. 49, № 3, С. 445 - 472.
- 16. Голант Б.Е., Жилинский А.П., Сахаров У.Е. Основы физики плазмы, М., Атомиздат, 1977.
- 17. Репин С.М., Четверушкин Б.Н. Оценка разности приближенных решений задач Коши для параболического уравнения и гиперболического уравнения с малым параметром, // ДАН, т. 461, 3, 2013, С. 255-258.
- 18. Бахвалов Н.С., Панасенко Г.П. Осреднение процессов в периодических средах, М., Наука, 1984, 352 с.

- 19. Белоцерковская М.С., Трапезникова М.А., Четверушкин Б.Н. Аналог кинетически согласованных схем для моделирования задачи фильтрации. // Математическое моделирование, 2002, т.14, 10, С. 69-76.
- 20. Люпа А.А., Морозов Д.Н., Трапезникова М.А., Четверушкин Б.Н., Чурбанова Н.Г. Моделирование трехфазной фильтрации явными методами на гибридных вычислительных системах, // Математическое моделирование, т. 26, № 4, 2014, С. 33-43.
- 21. Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю. Математические вопросы численного решения систем уравнений гиперболического типа, Москва, Физматгиз, 2012, 656 с.
- 22. Четверушкин Б.Н., Д'Асчензо Н., Савельев В.И. Кинетически согласованные магнитодинамические уравнения и их использование в суперкомпьютерном моделировании, // ДАН, 2014, т. 457, 5, С. 526-529.
- 23. Четверушкин Б.Н., Д'Асчензо Н., Савельев В.И. Трехслойная схема для решения параболических и эллиптических уравнений, // ДАН, 2015, т. 462, 4 С. 404-407.
- 24. J.Stone, T.A.Gardiner, P.Teuben, J.F.Hawley, J.B.Simon, Atena: A New Code for Astrophysical MHD, // Astrophys. Jj. Supp. 19878, 2008, pp. 137-177.
- 25. D.S.Balsara, D.S.Spicer, A Staggered Mesh Algorithm Using High Order Godunov Fluxes to Ensure Solenoidal Magnetic Fields in Magnetodynamic Simulation, // J. of Computational Physics, 149, 1999, pp. 270-292.

# Оглавление

1.	Введение	
2.	Квазигазодинамическая система уравнений	5
3.	Трехслойная явная схема	9
4.	Моделирование процессов фильтрации на высокопроизводительных вычислительных системах	13
5.	Кинетические модели для задач магнитной газовой динамики	16
6.	Результаты численных расчетов	
7.	Заключение	
Библиографический список		