

Накопленный специалистами компании «Т-Сервисы» опыт в области компьютерного моделирования аэродинамики высотных зданий и сооружений позволяет сделать вывод, что использование суперкомпьютеров дает возможность проводить массовые расчеты аэродинамических ветровых нагрузок для вновь строящихся и проектируемых высотных комплексов. Применение суперкомпьютеров позволяет на новом уровне решать реальные промышленные задачи высотного строительства, стоящие перед архитекторами, проектировщиками и строительными компаниями.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. СНиП 2.01.07-85*. Нагрузки и воздействия. Строительные нормы и правила. М., 2009.
2. СТО 36554501-015-2008. Стандарт организации. ФГУП «НИЦ «Строительство». М., 2008.
3. МГСН 4.19-05 Многофункциональные высотные здания и комплексы. М., 2005.

Суперкомпьютерное моделирование и допланетная химическая эволюция



4 Суперкомпьютерное моделирование и допланетная химическая эволюция

Рассмотрена задача суперкомпьютерного моделирования образования звезд и околозвездных дисков. Приведены физические основы моделирования и детали численных схем решения соответствующих уравнений математической физики. Изложены результаты моделирования формирования протозвезд, полученные авторами на суперкомпьютерах МСЦ (Москва) и ССКЦ (Новосибирск).

Вещество в космосе участвует в грандиозном круговороте — от межзвездной среды к молекулярным облакам, далее в звезды и от них снова в межзвездную среду. Сегодня внимание многих ученых приковано к образованию звезд и их околозвездных дисков при гравитационном коллапсе газа в газопылевых туманностях. В этих дисках формируются планеты, которые обнаружены у сотен звезд помимо Солнца. И число таких звезд с планетами непрерывно увеличивается. 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.

Звезды солнечной массы и их диски образуются примерно за миллион лет. Из всего жизненного цикла одной звезды мы видим только краткий момент. А для Солнечной системы мы знаем лишь итог ее эволюции за 4,56 миллиарда лет. Поэтому воссоздать картину появления Земли с ее основными геофизическими, геохимическими и биогеохимическими характеристиками можно лишь методами математического моделирования. Целями наших исследований стало создание эволюционных численных моделей околозвездных дисков для сравнения с наблюдательными данными. Нас интересуют условия среды, при которых шла химическая и предбиологическая эволюция, с тем, чтобы воспроизвести в лабораторных экспериментах отдельные этапы этой эволюции. Необходимы научные ответы на вопросы о том, 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 составляет много порядков. Численное решение пространственно трехмерных задач о коллапсе только одной газовой среды с самосогласованной гравитацией является предельно сложным для существующих суперкомпьютеров. Учет таких важных факторов, как магнитное поле, излучение, наличие пылевой компоненты, химических реакций, переводит эти задачи на уровень, который будет еще долго опережать возможности современных суперкомпьютеров и стимулировать их развитие к экзафлопной производительности.

Численные методы, алгоритмы и суперкомпьютеры

В подобных задачах свое развитие получают и численные методы решения уравнений математической физики. Самые сложные системы этих уравнений обычно расщепляют по физическим процессам. В методе расщепления в первую

АВТОРЫ:

В.Н. Снытников – канд. физ.-мат. наук, доцент, ст. науч. сотрудник, руководитель группы, Ин-т катализа им. Г.К. Борескова, Новосибирский государственный университет;
e-mail: snyt@catalysis.ru

Э.А. Кукушева – канд. техн. наук, науч. сотрудник, Ин-т катализа им. Г.К. Борескова;
e-mail: kuksheva@catalysis.ru

О.А. Стадниченко – канд. физ.-мат. наук, младш. науч. сотрудник, Ин-т катализа им. Г.К. Борескова;
e-mail: zasypoa@catalysis.ru

О.П. Стояновская – канд. физ.-мат. наук, инженер, Ин-т катализа им. Г.К. Борескова;
e-mail: stop@catalysis.ru

очередь выделяют и численно интегрируют базовую систему уравнений, имеющую физический смысл. Далее базовая система усложняется. Это позволяет наращивать математическую и численную модель путем включения 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. Такое дополнение вызывает к жизни многие физические неустойчивости, в частности неустойчивость Джинса для коллапса газа. Состояние коллапсирующего газа из смеси водорода и гелия меняется в широких пределах. Течение вращающегося газа при коллапсе имеет области сверх-, транс- и дозвуковой динамики с набором ударных волн и других разрывов, а также затопленные струи. Для моделирования трехмерной динамики облака газа был использован численный код [2]. В основе кода лежит метод FLIC (метод крупных частиц) на равномерной сетке в декартовой системе координат.

В области, ближней к протозвезде, при уходе газа остается множество тел, которые двигаются с редкими столкновениями друг с другом на временах нескольких оборотов вокруг протозвезды. Для учета эффектов от этих тел решается кинетическое уравнение Власова. В большом числе приложений система из уравнений Власова и Пуассона представляет самостоятельный интерес, в частности, как основа метода молекулярной динамики. Мы интегрируем это уравнение методом частиц в ячейках, в узлах которых ведется расчет самосогласованного поля [3]. Число используемых частиц зависит от задачи с оценкой свыше 400–1000 частиц в ячейке. Для сетки 10003 это примерно 1011–1012 частиц. Нестационарные задачи с такими параметрами вычислений предполагают наличие суперкомпьютеров с экзафлопной — производительностью.

А пока для проведения численных экспериментов мы используем кластеры МСЦ (Москва) и ССКЦ (Новосибирск). Кроме того, расчеты велись на машине SMP с общей памятью 256 Гб (ССКЦ, Новосибирск), а также на 8-процессорной (Хеон) HP-машине с общей памятью 40 Гбайт в Институте катализа СО РАН. Доступ на ССКЦ и МСЦ осуществлялся по интернет-каналу Сибирского отделения РАН.

Результаты вычислительных экспериментов

На SMP проведено моделирование формирования протозвезд вместе с околозвездными дисками в исходно изотермическом газе. Расчеты по программе, созданной без тщательной оптимизации, занимают на SMP несколько суток на сетке 2563 при числе временных шагов свыше 104 для физически ин-

тересных режимов. Более подробные сетки 5123 уже требуют организационных мер для заказа необходимой общей памяти. Поскольку при этом требуется уменьшать шаг по времени, то это в целом более чем в 20 раз увеличивает время

счета — свыше месяца. Задачи на сетках 10243 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.

Рассчитанная плотность газа при развитии коллапса приведена на рисунке 1. Масса возникающего центрального тела примерно в 10 раз превосходит массу диска, что хорошо соотносится с наблюдениями. Момент импульса в сформированной структуре из протозвезды со среднемассивным околозвездным диском распределяется неравномерно. Внутренние области, сосредоточившие в себе до 90% массы облака, получили около 1% начального момента импульса, и они сжимаются в протозвезду. Внешним областям передается до 98–99% момента импульса, и они формируют плотный диск. Такое распределение наблюдается в Солнечной системе, где большая часть массы системы сосредоточена в Солнце, а подавляющая часть момента импульса — во внешних планетах.

Система из уравнений Власова и Пуассона решалась на кластерных суперкомпьютерах МСЦ и ССКЦ [3].

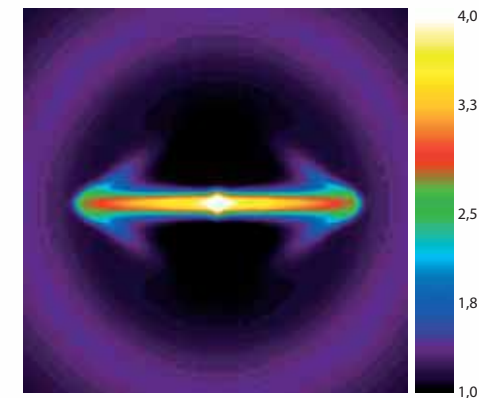


Рис. 1. Образование протозвезды и тонкого газового диска вокруг нее при коллапсе вращающегося газа. Вид "сбоку" — меридианная плоскость, проходящая через ось вращения

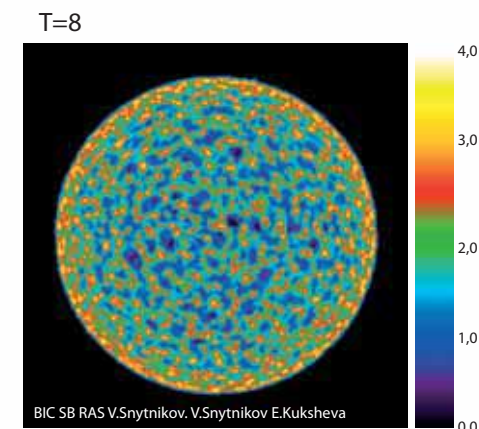


Рис. 2. Формирование сгустков при сферически изотропном начальном разлете частиц в самосогласованном гравитационном поле

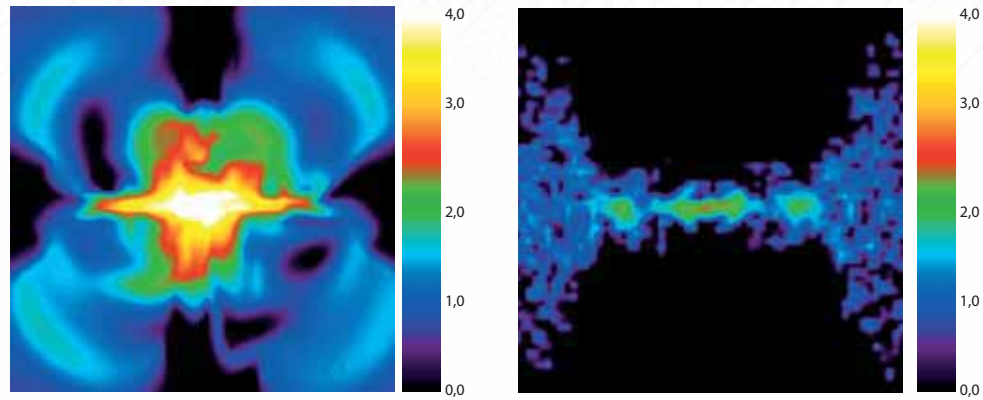


Рис. 3. Образование протопланетного диска вблизи звезды. "Бабочкообразное" распределение плотности газа (слева) и тел (справа) в меридианной плоскости, проходящей через ось вращения

На практике мы столкнулись с проблемой увеличения размера вычислительного массива свыше 5123 для решения уравнения Пуассона, для которого необходимо находить граничное значение потенциала по распределению плотности. На кластерных системах при увеличении массива приходится увеличивать число процессоров, участвующих в вычислениях. Но даже при фиксированном размере массива при увеличении числа процессоров растет время решения уравнения Пуассона, и эффективность распараллеливания падает. Оказалось, что время в основном тратится на пересылки между процессорами, и мы упираемся в ограничение на используемое число процессоров. Вероятно, коммуникационные сети кластеров слишком медленные для нашей задачи. С другой стороны, наш алгоритм состоит из сильно связанной подзадачи для уравнения Пуассона с большим массивом для потенциала и слабо связанной подзадачи для уравнения Власова. Теоретически 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 ИК СО РАН эффективность распараллеливания этой программы составила около 70% на 8 процессорах для сетки $256 \times 256 \times 64$ и 108 частиц. Эффективность распараллеливаемой версии программы с MPI для данной задачи на числе процессоров 256 близка к нулю. Но делать общий вывод, что архитектура машин с общей памятью более перспективна для подобных задач, преждевременно. Необходимы

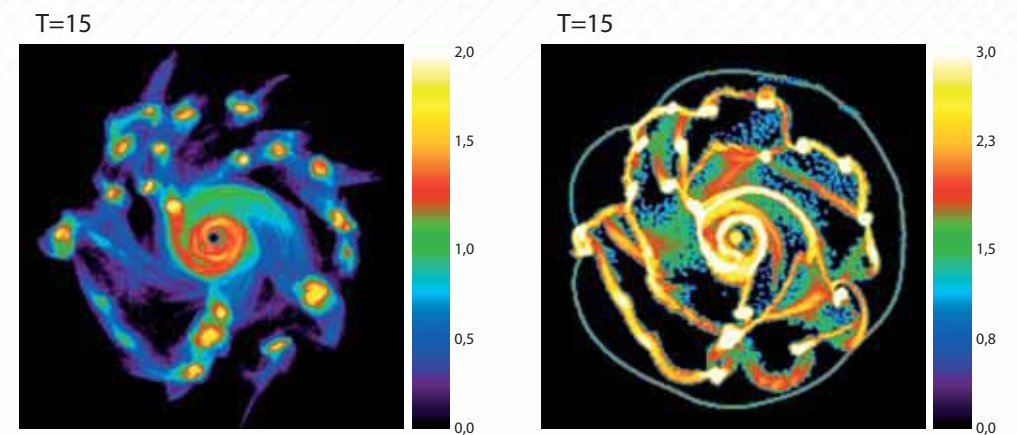


Рис. 4. Сгустки вещества из тел (слева) и газа (справа) протопланетного диска

проверки на практике этого предположения на машине с увеличением числа процессоров. Один из результатов расчетов на сетке 5123 по изучению устойчивости бесстолкновительных гравитирующих систем приведен на рисунке 2. В разлетающейся сфере вместо изначально изотропного расширения появляются сгустки при развитии неустойчивости Джинса в самосогласованном поле.

Расчеты по модели газ — первичные тела проведены на SMP с прогнозом условий для синтеза сложных молекул в околозвездных дисках. Начальное распределение тел было задано в виде диска при размере расчетной области 800AU. Рисунок 3 иллюстрирует плотный диск из тел и газа радиусом примерно 40 AU. В газовой компоненте диска заключено около 10% начальной массы газа. Наличие тел с общей массой 0,1 от массы газа приводит к стабилизации системы — диск не разрушается под воздействием неустойчивостей длительное время. Основная масса газа в «бабочкообразной» структуре тянет за собой тела, которые по периферии диска разлетаются вдоль оси вращения. Структура, которую образуют тела, не противоречит наблюдаемым газопылевым дискам и, возможно, Солнечной системе на этих временах. Стабильная область диска, температура в которой лежит в диапазоне жидкой воды, является возможной зоной химической эволюции и синтеза органических соединений.

Внутренняя часть диска устойчива относительно движений вдоль оси вращения, что позволяет изучать начальные стадии образования планет с квазитрехмерной динамикой в этой области. Для такого приближения мы используем

параллельный код с учетом химических реакций и их тепловых эффектов, основанный на методе SPH для решения уравнений газовой динамики в цилиндрической геометрии [4]. Гравитационные поля остаются трехмерными. На рисунке 4 с расчетами динамики двухфазного диска видны кольцевые, спиральные и одиночные волны плотности. Взаимное влияние газа и тел имеет место даже при соотношении массы тел к массе газа $1/50$. Из вычислительных экспериментов следует, что гравитационное взаимодействие газа и тел ведет к образованию отдельных сгущений в диске и росту в них плотности водорода. В сгустках создается восстановительная среда высокого давления газов, благоприятная для сложных органических синтезов с высокими выходами продуктов.

Таким образом, вычислительные эксперименты на суперкомпьютерах предсказывают возможность протекания в околозвездных дисках химических реакций. Часть этих реакций изучается в лабораторных реакторах с катализаторами состава первичных тел. Наши исследования в астрофизике и в астрокатализе показывают, что условия для химической эволюции с эффективным синтезом первичных органических соединений для земной биосферы в Солнечной системе действительно реализовывались на этапе околосолнечного диска.

Наши исследования поддержаны программами Президиума РАН (координаторы Заварзин Г.А., Галимов Э.М., координатор Боярчук А.А.), интеграционным проектом СО РАН (координатор Михайленко Б.Г.). Особую благодарность за поддержку и обсуждения выражаем академикам Пармону В.Н. и Розанову А.Ю.

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.

Моделирование сердечной активности

