

---

# **Моделирование задач магнитной газовой динамики на вычислительных системах сверхвысокой производительности**

*Академик Четверушкин Б.Н.*

*Федеральный исследовательский центр  
Институт прикладной математики  
им. М. В. Келдыша*

**Снежинск, март 2019**

---

---

$$(1) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \rho \mathbf{u} = 0$$

$$(2) \quad \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \text{div} \left[ \rho \mathbf{u} \times \mathbf{u} + B_k B_p \right] + \nabla \left( p + \frac{\mathbf{B}^2}{8\pi} \right) = \text{div} P_{NS}$$

$$(3) \quad \frac{\partial E}{\partial t} + \text{div} \left[ \left( E + p + \frac{\mathbf{B}^2}{8\pi} \right) \mathbf{u} \right] = \text{div} \mathbf{q} + \text{div} P_{NS} \mathbf{u}$$

$$(4) \quad \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \text{rot} \mathbf{u} \times \mathbf{B} + \text{rot} v_m \text{rot} \mathbf{B}$$

$$(5) \quad \text{div} \mathbf{B} = 0$$

$$(6) \quad \Delta \Phi = 4\pi G \rho$$

---

# НЕКОТОРЫЕ СВЕДЕНИЯ О МИРОВОМ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОМ

---

## ПАРКЕ

- **Summit** – США, Окридж 2018, 200 PFLOPS, 15 МВт
  - **Sunway** – Китай 2016, более  $10^7$  ядер, 93.0/125.4 PFLOPS, 15.4 МВт
  - В Японии планируется к 2021г. ввести в строй систему 300-500 PFLOPS
  - США - 1 EXAFLOPS к 2023г. Объявлен тендер на создание второй и третьей системы экзафлопсного класса
-

# РЕГИОНАЛЬНЫЕ КОМПЬЮТЕРНЫЕ ЦЕНТРЫ

---

**Наряду с национальными, создаются крупные региональные центры**

- **Германия:** Юлих, Штутгарт, Мюнхен, Дрезден, Гамбург, Фрайбург (5-10 PFLOPS)
  - **Штутгарт** к 2019 - 25 PFLOPS
  - **Россия:** «ЛОМОНОСОВ» МГУ - 5 PFLOPS
-

# **ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СУПЕРКОМПЬЮТЕРОВ**

---

- **Фундаментальная наука (астрофизика, турбулентность, теория горения, квантовая химия)**
  - **Аэрокосмическая индустрия**
  - **Ядерная, термоядерная, традиционная энергетика**
  - **Добыча, разведка, рациональное использование углеводородного сырья**
  - **Погода и климат, загрязнение окружающей среды**
-

# ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СУПЕРКОМПЬЮТЕРОВ

---

## (продолжение)

- Индустрия больших данных (big data)
  - Органы государственного и корпоративного управления. Прогноз, оценки рисков
  - Медицина и фармакология
  - Сельское хозяйство
  - Дистанционное зондирование Земли
  - Нано- и био- технологии
  - Оборонные исследования
-

# **ВОЗМОЖНОСТИ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ**

---

- Высокопроизводительные вычисления позволяют резко ускорить (в 2 - 2.5 раза) и соответственно удешевить создание новых образцов техники**
  - Их применение обеспечит прогресс практически во всех направлениях фундаментальной науки, областях народно-хозяйственной деятельности, социальной сфере**
  - Они являются залогом успешного развития России в следующем десятилетии**
-

# **УСЛОВИЯ УСПЕШНОГО РАЗВИТИЯ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ**

---

- Наличие высокопроизводительной вычислительной техники**
  - Поддержка со стороны властных структур**
  - Наличие квалифицированных кадров**
  - Разработка алгоритмов, математического и программного обеспечения для систем сверхвысокой производительности**
-



- 
- Задач, использующих для своего решения более 100 TFLOPS (0.1 PFLOPS) производительности мало
  - Проблема носит фундаментальный характер. Она связана с трудностями адаптации алгоритмов и математического обеспечения на архитектуру систем с экстремальным параллелизмом
  - Особенно остро эта проблема проявляется для систем с гибридной архитектурой
  - Решение проблемы адаптации возможно только средствами фундаментальной науки
  - Без ее решения вычислительные системы ближайшего будущего будут напоминать автомобиль, в баке которого отсутствует бензин
-

---

❑ **Параболические уравнения: уравнения Навье-Стокса, теплопроводности, фильтрация, диффузия**

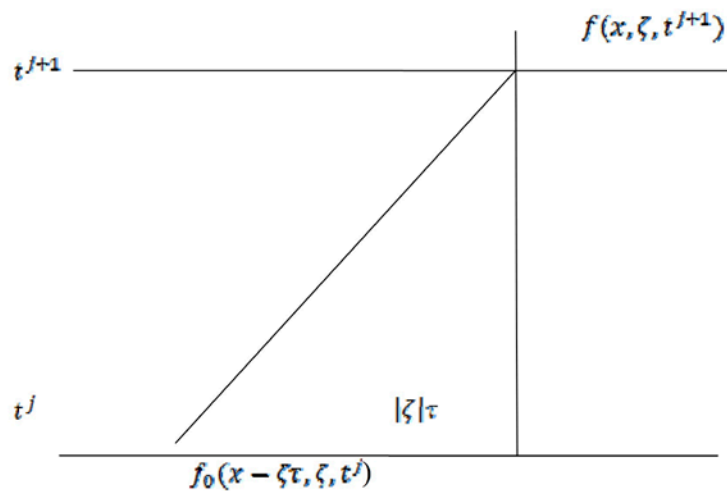
❑ **Неявные схемы – обладают хорошей устойчивостью. Однако требуют для своего решения применения итерационных методов, которые плохо адаптируются на архитектуру систем с экстремальным параллелизмом**

❑ **Явные схемы идеальны для параллельной обработки. Однако обладают жестким условием устойчивости**

$$\Delta t \leq h^2$$



# Kinetic Schemes - Quasi Gas Dynamic System 1983



$$t^{j+1} = t^j + \tau$$

$$\frac{l}{L} \ll 1$$

$$\frac{|\xi| \tau}{L} \ll 1$$

$$f^{j+1}(t^{j+1}, \mathbf{x}, \xi) = f_M^j(t^j, \mathbf{x} - \xi\tau, \xi)$$

$$f^{j+1} - f^j = -\tau \xi_i \frac{\partial f_0}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\tau^2}{2} \xi_i \xi_k \frac{\partial f_0}{\partial x_k}$$

Multiplied by summation invariants

$$1, \xi, \xi^2 / 2$$

and integrate over range of molecules velocities

# QGS - Hyperbolic System

---

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \tau \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \frac{\partial \rho U}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial x} (\rho U^2 + P)$$

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \tau \frac{\partial^2 \rho U}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho U^2 + P) = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial x} (\rho U^3 + 3PU)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \tau \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial x} (U(E + P)) = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial x} (U^2(E + 2P)) + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{P}{\rho} (E + P) \right]$$

QGS – alternative of Navier-Stokes;

QGS=N-S +O(Kn<sup>2</sup>)

QGS was used for simulation of many problems:

DNS-turbulence, unsteady flows, aero acoustic, incompressible fluid, combustion phenomena

# QGS - Hyperbolic System

---

$$p = \rho RT$$

$$\tau = \frac{\mu}{p} \quad \mu - \text{real viscosity}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} (\rho U^3 + 3pU) = \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial U}{\partial x} + O(Kn^2)$$

# QGS - Hyperbolic System

---

$$(1) \quad W = \frac{\tau}{2\rho} \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho U_i U_k + \delta_{ik} p) \rightarrow O(Kn^2)$$

$$(2) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \operatorname{div} \left( \rho (\bar{U} - \bar{W}) \right) = 0$$

$$(3) \quad \frac{\partial \rho \bar{U}}{\partial t} + \tau \frac{\partial^2 \rho \bar{U}}{\partial t^2} + \operatorname{div} \left( \rho (\bar{U} - \bar{W}) \times \bar{U} \right) + \nabla p = \operatorname{div} P_{NS}$$

$$(4) \quad \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} + \operatorname{div} \left[ (E + p) (\bar{U} - \bar{W}) \right] = \operatorname{div} q + \operatorname{div} (P_{NS} \bar{U})$$

$$q = \chi \operatorname{grad} T$$

$$\tau = \frac{\mu}{p}$$

# QGS - Hyperbolic System

---

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \tau^* \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} K \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + I$$

$$\left[ \tau^* \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} \right] \ll \left[ \frac{\partial T}{\partial t} \right]$$

$$\tau^* \sim \frac{h}{c}$$

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^{j-1}}{2\Delta t} + \frac{\tau^*}{2} \frac{T_i^{j+1} - 2T_i^j + T_i^{j-1}}{\Delta t^2} = K \frac{T_{i-1}^j - 2T_i^j + T_{i+1}^j}{\Delta x^2}$$

$$\frac{\tau^*}{2\Delta t^2} = \frac{K}{\Delta x^2} \quad \text{Dufort-Frankel Method} \quad \Delta t \sim h^{\frac{3}{2}}$$

$$\Delta t \sim h$$

# QGS - Hyperbolic System

---

$$\frac{\partial U}{\partial t} - \operatorname{div} A \nabla U = f$$

$$\delta \frac{\partial^2 U^\delta}{\partial t^2} + \frac{\partial U^\delta}{\partial t} - \operatorname{div} A \nabla U^\delta = f$$

$A$  – symmetric matrix

$$\delta \geq \varepsilon > 0$$

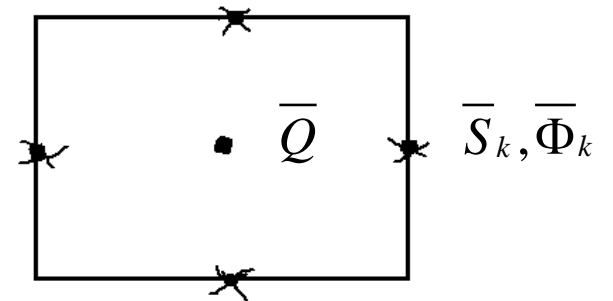
$$e = U^\delta - U, t \in [0, T]$$

$$\Delta t \sim h \int_{\Omega} \int_0^T \|\nabla e\|^2 dt dx + \int_{\Omega} |e(x, T)|^2 dx \leq \delta^2 C_1 \int_0^T \int_{\Omega} \left| \frac{\partial^2 U^\delta}{\partial t^2} \right|^2 dx dt$$



---

$$\frac{\partial \bar{Q}}{\partial t} + \tau^* \frac{\partial^2 \bar{Q}}{\partial t^2} = \text{div} \bar{S}_k$$



$$\frac{\partial \bar{Q}}{\partial t} = \text{div} \bar{\Phi}_k$$

$$\tau^* \frac{\partial \bar{\Phi}_k}{\partial t} = \bar{S}_k - \bar{\Phi}_k$$

$$\bar{\Phi}_k^{j+1} = \bar{\Phi}_k^j \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau^*}\right) + S_k^j \left(1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau^*}\right)\right)$$

---

# Conservation Law

---

$$\int_{\Omega} (U_0 - U_T) d\bar{x} = \int_0^T \int_{\Omega} f dx dt + \int_0^T \int_{\Gamma} A \nabla U d\Gamma dt$$

$$\int_{\Omega} \left[ \left( U_{\delta} + \delta \frac{\partial U_{\delta}}{\partial t} \right)_0 - \left( U_{\delta} + \delta \frac{\partial U_{\delta}}{\partial t} \right)_T \right] dx = \int_0^T \int_{\Omega} f dx dt + \int_0^T \int_{\Gamma} A \nabla U_{\delta} d\Gamma dt$$

$$\int_{\Omega} \left( U_{(0-\delta^*)} - U_{(T-\delta^*)} \right) d\bar{x} = \int_0^T \int_{\Omega} f dx dt + \int_0^T \int_{\Gamma} A \nabla U_{\delta} d\Gamma dt$$

---

# Kinetic Model for Magneto Gas Dynamics

---

Magnetic Field acting orthogonal to the velocity of charged particle, and characteristic velocity in MGD problems ([Alfven velocity](#)):

$$V_a = \frac{\vec{B}}{\sqrt{4\pi\rho}} \quad B \text{ is magnetic field}$$

Gas Dynamics Statistical Distribution Function (Maxwellian):

$$f_0 = \frac{\rho m^{\frac{1}{2}}}{(2\pi kT)^{\frac{3}{2}}} \exp\left\{-\frac{m}{2kT} |(\xi - \vec{u})|^2\right\}$$

Magneto Gas Dynamics Statistical Distribution Function (Maxwellian):

$$f_{0M} = \frac{\rho m^{\frac{1}{2}}}{(2\pi kT)^{\frac{3}{2}}} \exp\left\{-\frac{m}{2kT} \left|(\xi - \vec{u}) - i \frac{\vec{B}}{\sqrt{4\pi\rho}}\right|^2\right\}$$

# Momentums of Distribution Function

---

Macroscopic Observables of MGD can be calculated as Momentum of Distribution Function:

$$\rho(x, t) = \int m f_{0M} d^3 \xi$$

$$B = \frac{1}{\sqrt{\rho(x, t)}} \operatorname{Im} \int m \xi^* f_{0M} d^3 \xi$$

$$u(x, t) = \frac{1}{\rho(x, t)} \int m \xi f_{0M} d^3 \xi,$$

$$0 = \operatorname{Im} \int m f_{0M} d^3 \xi$$

$$E(x, t) = \int \frac{1}{2} m \xi^2 f_{0M} d^3 \xi$$

$$P + \frac{B^2}{8\pi} = \int c^2 f_{0M} d^3 \xi$$

---


$$\left(1, \bar{\xi}, \xi^2 / 2, \bar{\xi}^*\right)$$

$$f^{j+1} - f_{OM}^j = -\tau \xi_k \frac{\partial f_{OM}}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\tau^2}{2} \xi_i \xi_P \frac{\partial f_o}{\partial x_k}$$

$(1, \xi, \xi^2 / 2) \rightarrow \tau$  - time between collisions

$\xi^* \rightarrow \tau_M$  - magnetic time

$$\bar{\xi} = \bar{C} + \bar{U} + i \frac{\bar{B}}{\sqrt{4\pi\rho}}$$

$$\bar{\xi}^* = \bar{e} + \bar{u} - i \frac{\bar{B}}{\sqrt{4\pi\rho}}$$


---

# Ideal MGD

---

Derived from Boltzmann Equation at Equilibrium State

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u_i + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( p + \frac{B^2}{2} \right) \delta_{ik} + \rho u_i u_k - B_i B_k \right] = 0$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ u_i \left( E + p + \frac{B^2}{2} \right) - B_i u_k B_k \right] = 0$$

$$\frac{\partial B_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} [u_k B_i - u_i B_k] = 0$$

$$\frac{\partial B_i}{\partial x_i} = 0$$

# Kinetic Consistent MGD

---

$$\Pi_{ik}^{DB} = \text{rot} \frac{\tau_m}{2} \frac{1}{\rho} \left( p + \frac{B^2}{8\pi} \right) \text{rot} \vec{B} + \text{rot} \Pi_{ik}^{DB*} \quad \text{resistivity}$$

and

$$\left[ \Pi_{ik}^{DB*} \right] \ll \frac{\tau_m}{2} \left[ \frac{1}{\rho} \left( p + \frac{B^2}{8\pi} \right) \text{rot} \vec{B} \right]$$

$$\frac{\tau_m}{2} \frac{1}{\rho} \left( P + \frac{B^2}{8\pi} \right) = v_m = \frac{c^2}{4\pi\sigma} \quad \text{or} \quad \tau_m = \frac{2v_m\rho}{\left( P + \frac{B^2}{8\pi} \right)}$$

$$\mu = \frac{\tau P}{2\rho} \rightarrow \tau = \frac{2\mu\rho}{P}$$

# Kinetic Consistent MGD Verification

---

$$W_k = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( p + \frac{B^2}{8\pi} \right) \delta_{ik} + \rho U_{ik} - B_i B_k \right]$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \operatorname{div} \left( \rho (\bar{U} - \bar{W}) \right) = 0$$

$$\frac{\partial \rho \bar{U}}{\partial t} + \tau \frac{\partial^2 \rho \bar{U}}{\partial t^2} + \operatorname{div} \left( \rho (\bar{U} - \bar{W}) \times \bar{U} \right) + B_k B_p + \nabla \left( p + \frac{B^2}{8\pi} \right) = \operatorname{div} P_{NS}$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} + \operatorname{div} \left[ \left( E + p + \frac{B^2}{8\pi} \right) (\bar{U} - \bar{W}) \right] = \operatorname{div} q + \operatorname{div} (P_{NS} \bar{U})$$

$$\frac{\partial \bar{B}}{\partial t} + \frac{\tau_m}{2} \frac{\partial^2 \bar{B}}{\partial t^2} = \operatorname{rot} \left( (\bar{U} - \bar{W}) \times \bar{B} + v_m \operatorname{rot} \bar{B} \right)$$

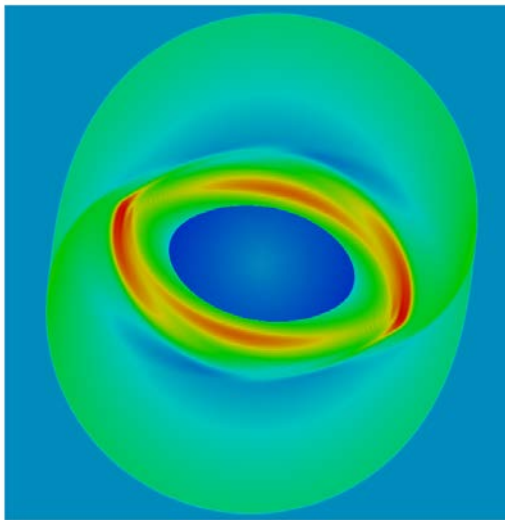
$$v_m = \frac{C^2}{4\pi\sigma} \quad , \quad \tau_m = \frac{v_m}{\left( p + \frac{B^2}{8\pi} \right)} \quad , \quad \tau = \frac{\mu}{p}$$



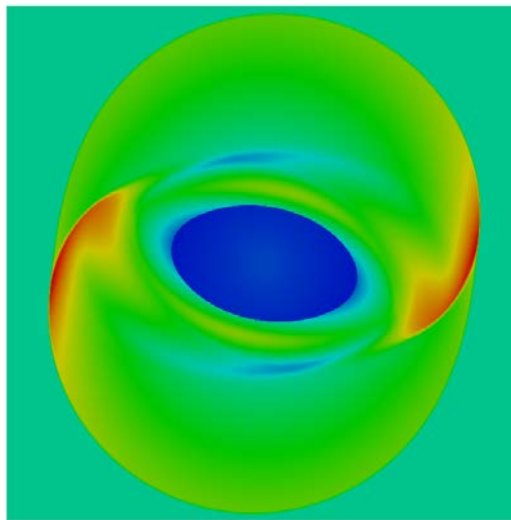
# Kinetic Consistent MGD Verification

---

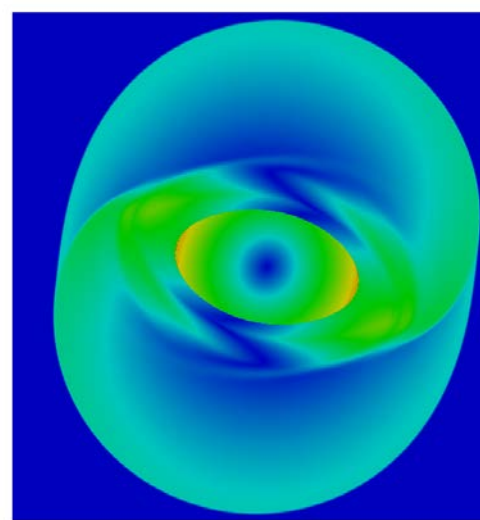
**Rotor:** the problem is set up on the two-dimensional domain  $[0;1] \times [0; 1]$ , resolved by 1500 1500 cells. Dense rotating disk of fluid with  $\rho = 10$ ,  $U_x = -2 (y-0.5)/r_0$  and  $U_y = 2 (y-0.5)/r_0$ , where  $r$  is the radius measured with respect to the central point of the computational domain and  $r_0 = 0.1$



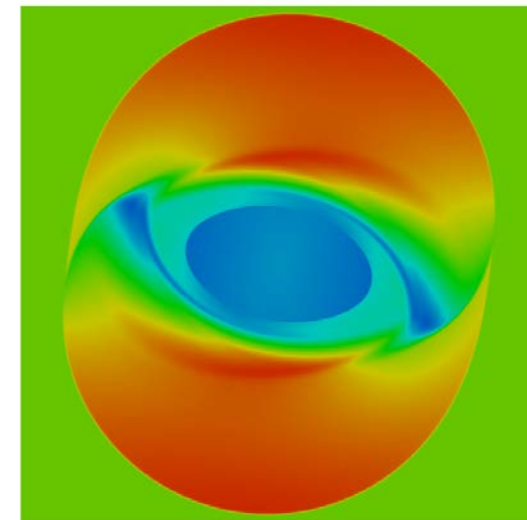
Density



pressure



Mach



magn. field

# Kinetic Consistent MGD Verification

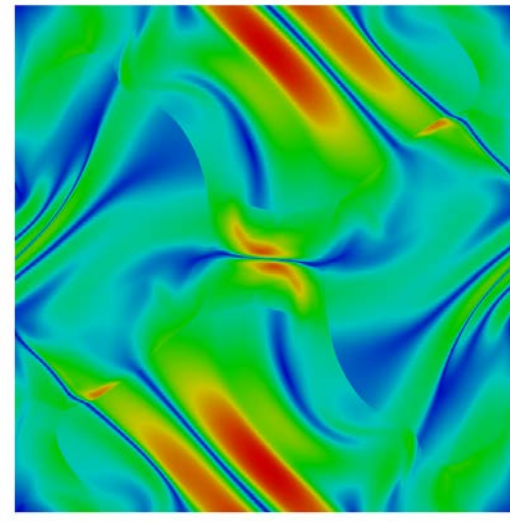
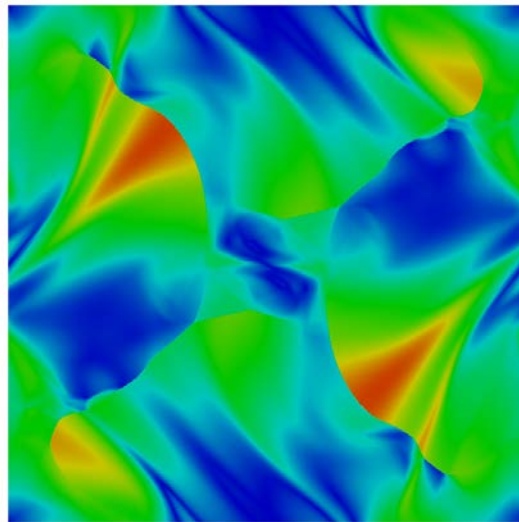
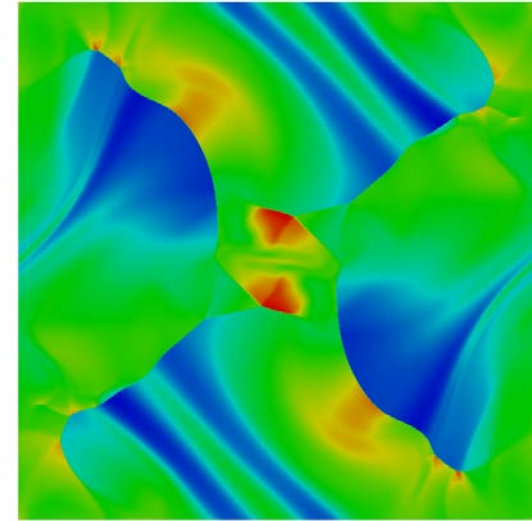
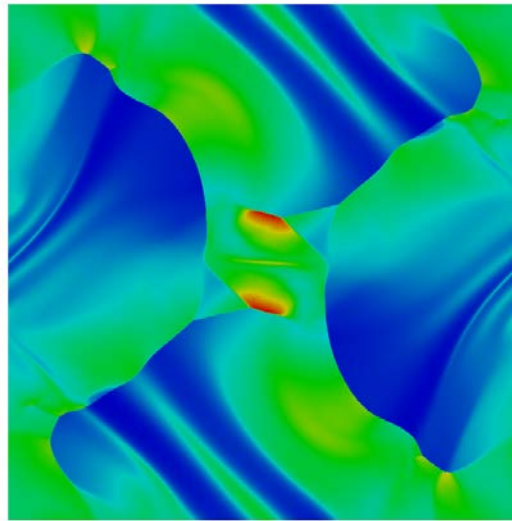
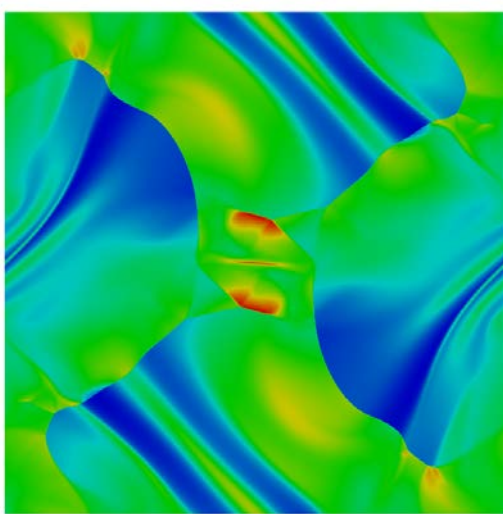
---

**Orszag-Tang vortex:** set up on the two dimensional domain  $[-1; 1]$   $[-1; 1]$  with periodic boundary conditions. Computational mesh of  $1500 \times 1500$  cells. Initial gas flow with a constant density  $\rho = 25/(36\pi)$ ,  $p = 5(12\pi)$ , initial velocity  $(U_x, U_y) = (-\sin(2\pi y); \sin(2\pi x))$ . In order to preserve the solenoidal behavior of the initial conditions, the initial magnetic field is computed from the vector potential  $A_z = (1/4\pi) \cos(4\pi x) + (1/2\pi) \cos(2\pi y)$ .

# Kinetic Consistent MGD Verification

---

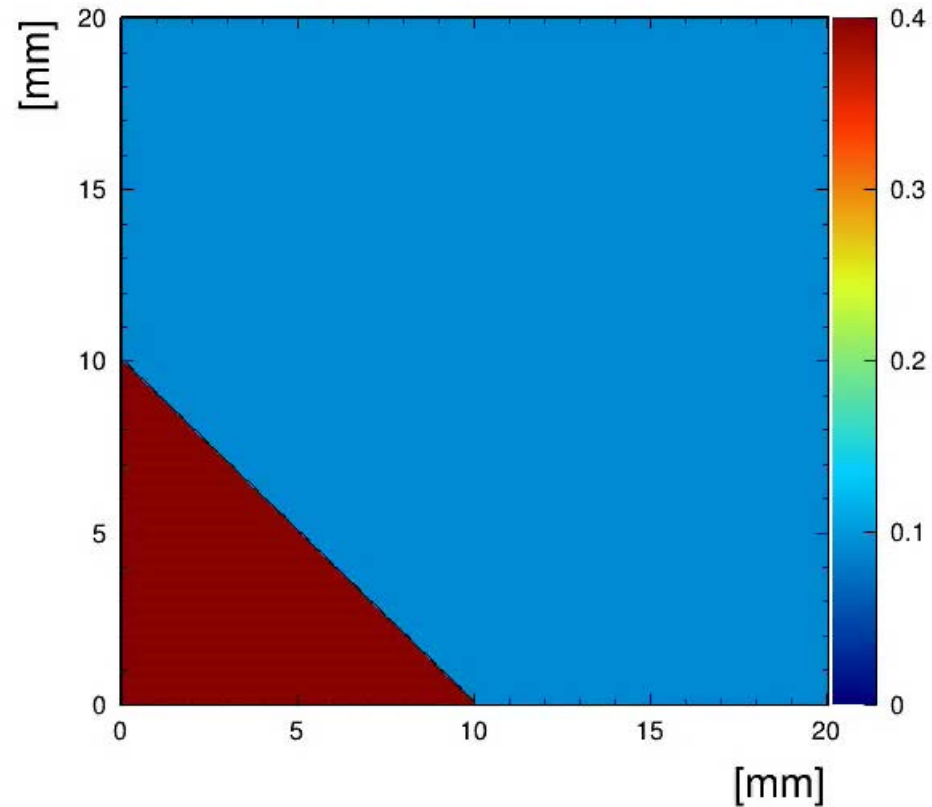
Orszag-Tang vortex: density, pressure, temperature, kin. E, B



# Kinetic Consistent MGD Verification

---

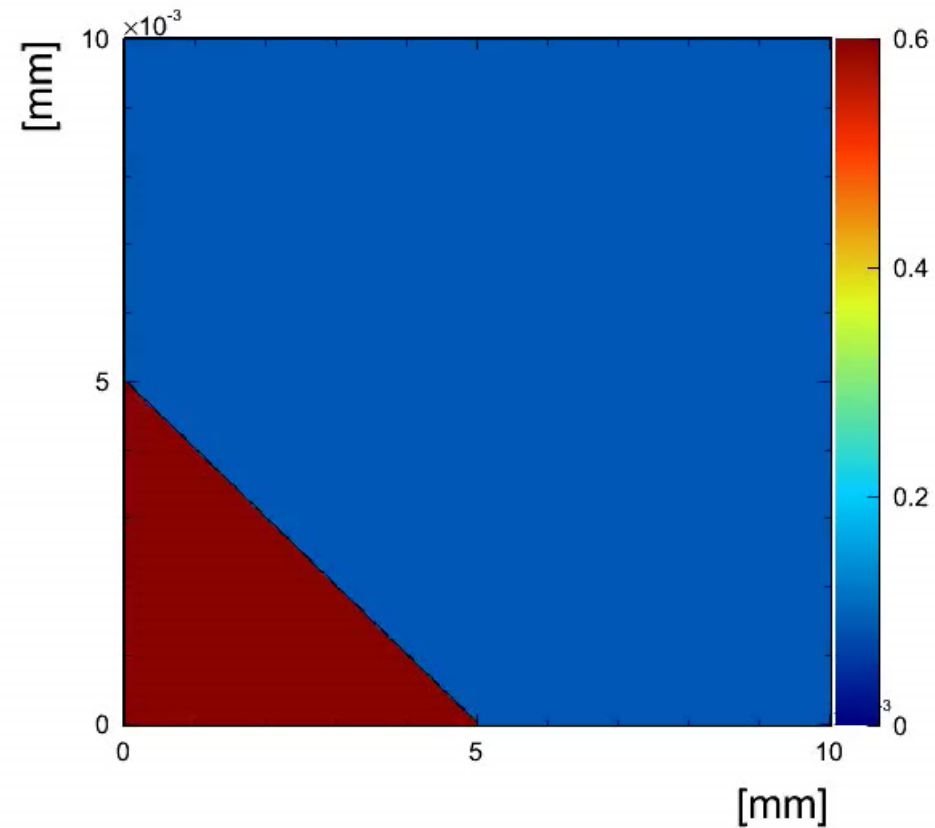
SOD Test (without magnetic field): density



# Kinetic Consistent MGD Verification

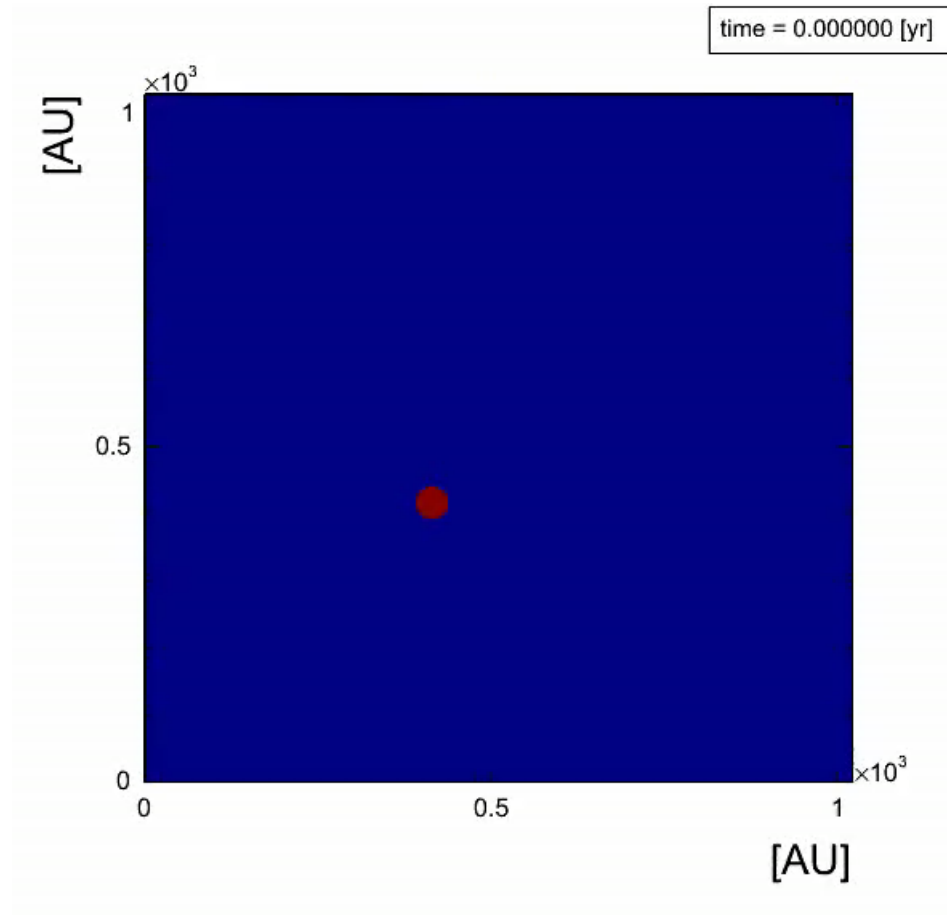
---

SOD Test (with magnetic field): density



# Numerical Experiment: Accretion

---



---

# **Программа – “Алгоритмы и прикладное математическое обеспечение для систем сверхвысокой производительности”**

- Логически простые и эффективные алгоритмы**
- Связь с кинетическим описанием**
- Генераторы неструктурированных сеток сверхбольших объемов**
- Визуализация данных высокопроизводительных вычислений**
- Квантовые вычисления**

---

**СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ**