На правах рукописи

Куликов Игорь Михайлович

Математическое моделирование трехмерных гидродинамических процессов в самосогласованном гравитационном поле на суперЭВМ

Специальность 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Автореферат
Диссертации на соискание ученой степени доктора физико-математических наук

Новосибирск – 2016

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук (ИВМиМГ СО РАН)

Официальные оппоненты:

Кудрявцев Алексей Николаевич, доктор физико-математических наук, доцент, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск, старший научный сотрудник

Соколинский Леонид Борисович, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)", г. Челябинск, проректор по информатизации

Чупахин Александр Павлович, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск, заведующий лабораторией

Ведущая организация:

Федеральное государственное учреждение "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук", г. Москва

Защита состоится 7 февраля 2017 г. в 15 часов на заседании диссертационного совета Д 003.061.02 на базе ИВМиМГ СО РАН по адресу: 630090, г. Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 6, конференц-зал ИВМиМГ СО РАН, тел. (383) 330-71-59.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИВМиМГ СО РАН, http://icmmg.nsc.ru/.

Автореферат разослан 20 октября 2016 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 003.061.02
на базе ИВМиМГ СО РАН, д.ф.-м.н. Сорокин Сергей Борисович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность исследований

Математическое моделирование играет важную роль в изучении трехмерных нелинейных гидродинамических процессов. В настоящее время разработан ряд численных методов решения гидродинамических уравнений, изучены их свойства (точность, сходимость, устойчивость) и области их применения. На основе современных гидродинамических математических моделей и численных методов решения разработаны промышленные программные пакеты. Среди наиболее известных – это иностранные пакеты Ansys, Fluent, STAR-CD, а также российские пакеты Flow Vision, Эгида. В этих пакетах реализованы модели упруго-пластических деформаций, газодинамические и магнитно-газодинамические модели, а также необходимая подсеточная физика (химические реакции, излучение, охлаждение/нагревание и т. д.). Однако, остается открытым вопрос о применимости реализованных в пакетах моделей к ряду прикладных и фундаментальных задач. Также открыт вопрос о точности численных методов и об их эффективности.

Так в задачах о "сварке взрывом" не решена проблема формулировки уравнения состояния упруго-пластической среды и не исследована область его применимости. Дополнительная сложность при формулировке уравнения состояния возникает при учете фазовых переходов, которые имеют место при взаимодействии свариваемых пластин. Задача по изучению взаимодействия метеоритов с поверхностью планет на ранней стадии является продолжением задачи о "сварке взрывом" и особенно актуальна в связи с событиями 2013 года. Как и в случае "классических задач о сварке взрывом" остается проблемой формулировка уравнения состояния упругой среды с учетом фазовых переходов и области его применимости при до- и сверхзвуковых соударениях метеорита с поверхностью планеты. При рассмотрении больших астрономических объектов (от планетной системы до крупно-масштабных космологических структур) важную роль играет гравитация, которая вместе с силами давления определяет движение газа.

Предметом современной астрофизика является исследование физических процессов во Вселенной, их влияние на самоорганизацию и эволюцию астрономических объектов, а также на дальнейшую их динамику и взаимодействие. Несмотря на успехи современной наблюдательной астрономии, большинство астрофизических процессов существуют лишь в виде статической картины. На основе наблюдаемой информации и известных физических процессов строится математическая модель (или теория) эволюции астрономического объекта до наблюдаемого момента и/или после него. Существенность учета гравитационного и магнитного полей, а также сложность воспроизведения условий космоса в лабораторных условиях накладывают значительные ограничения на экспериментальное изучение астрономических объектов. Таким образом, математическое моделирование – это основной, а часто и единственный, подход к теоретическому исследованию астрофизических процессов и астрономических объектов.

Одной из основных проблем моделирования астрономических объектов является соотношение масштабов. Так масса одной галактики составляет 10^7 – 10^{13} масс солнц и размер 10^3 – 10^5 парсек, что приводит к разрыву в 13 порядков для массы и 14 порядков для размера по сравнению со звездой. Поэтому для моделирования таких объектов в высоком пространственном разрешении необходимо использовать наиболее мощные из доступных суперкомпьютеров. Два из Top3 суперкомпьютеров в ноябрьской версии 2015 года списка Top500 оснащены графическими ускорителями и ускорителями Intel Xeon Phi. Разработка программных комплексов для гибридных суперкомпьютеров является отдельной сложной научной задачей, требующей со-дизайна вычислительных алгоритмов на всех стадиях ее решения – от физической постановки до инструментариев разработки.

Таким образом, настоящая диссертация посвящена математическому моделированию трехмерных гидродинамических процессов в самосогласованном гравитационном поле на суперЭВМ. Из всего многообразия гидродинамических течений акцент сделан на моделях упруго-пластических деформаций, газодинамических и магнитно-газодинамических течениях, а также бесстолкновительных моделях и их приложений для задач геофизики и астрофизики. **Актуальность работы** определяется необходимостью формулировки математических моделей гидродинамических процессов с учетом гравитационного поля, разработки, обоснования и верификации вычислительных методов для их разрешения, а также эффективной параллельной реализации методов на современных суперЭВМ и комплексного исследования с помощью вычислительного эксперимента научных проблем упруго-пластических деформаций, астрофизики и геофизики. **Объект исследования** настоящей работы – нестационарные гидродинамические процессы с учетом самогравитации путем построения и исследования их математических моделей, разработки вычислительных схем для их разрешения, реализованные на современных суперкомпьютерных архитектурах. **Цель исследования** – развитие вычислительных подходов для решения прикладных и фундаментальных задач упруго-пластических деформаций, астрофизики и геофизики на основе современных конечно-объемных численных схем для гидродинамических систем уравнений, создание на их основе наукоемкого программного обеспечения для суперЭВМ и его применение для проведения крупно-масштабных вычислительных экспериментов.

Цели и задачи диссертации

Главной целью настоящей работы является построение универсальной численной модели для описания трехмерных гидродинамических процессов в самосогласованном гравитационном поле на суперЭВМ. Для этого были сформулированы следующие задачи:

1. Разработка численной модели упруго-пластических деформаций с учетом фазовых переходов и определение области ее применимости при моделировании процесса "сварки взрывом" двух металлических пластин.

2. Разработка математической модели гидродинамических процессов на основе уравнений газовой динамики, магнитной газовой динамики и уравнений для первых моментов бесстолкновительного уравнения Больцмана с учетом самогравитации и подсеточных процессов.

3. Разработка, верификация и эффективная параллельная реализация единого вычислительного метода решения систем гиперболических уравнений, используемых для описания процессов гравитационной гидродинамики.

4. Исследование гидродинамических процессов на различных пространственных и временных масштабах: космологические структуры и галактики, молекулярные облака и межзвездная среда, протопланетные диски.

Научная новизна

В диссертации сформулированы новые постановки задач математического моделирования гидродинамических процессов: ”сварка взрывом” металлических пластин, взаимодействие галактик, гравитационная гидродинамика молекулярных облаков. Созданы оригинальные математические модели, вычислительные схемы с малой диссипацией решения и их эффективные параллельные реализации. Научная новизна работы состоит в следующем:

1. Построена новая математическая модель упруго-пластических деформаций с учетом фазовых переходов, с помощью которой объяснен процесс волнообразования и динамика кумулятивной струи, возникающей при ”сварке взрывом” двух пластин. Модель основана на уравнениях нелинейной теории упругости в лагранжевых координатах, замкнутых уравнением состояния общего вида для описания всех фазовых состояний материала (основные результаты приведены в монографии [1] и в работе [11]).

2. Построена не имеющая мировых аналогов гидродинамическая модель астрофизических объектов. Модель основана на уравнениях (магнитной) газовой динамики и уравнениях для первых моментов бесстолкновительного уравнения Больцмана для описания бесстолкновительной компоненты, записанных в виде гиперболической системы уравнений. Такая модель позволяет термодинамически согласовано описать процессы фазовых переходов – звездообразование и роли сверхновых звезд (основные результаты приведены в главе монографии [5] и в работах [2, 17]).

3. Для решения гиперболических систем уравнений разработан новый численный метод высокого порядка точности на гладких решениях и с малой диссипацией решения в области разрывов. Метод основан на комбинации метода разделения операторов, метода Годунова и кусочно-параболического метода на локальном шаблоне (основные результаты приведены в главе монографии [5] и в работах [2, 4, 20]).

4. Впервые в мировой практике с помощью термодинамически согласованной гидродинамической модели смоделирован процесс взаимодействия галактик, сценарий свободного прохождения галактик в результате их

центрального столкновения и коллапс молекулярного облака в ходе эволюции межзвездной среды. Экспериментально определены диапазоны гидродинамических параметров, при которых развиваются сценарии слияния, свободного прохождения и диссипации галактик. Обоснована гипотеза об области повышенной скорости звездообразования за фронтом ударных волн, возникающих при столкновении галактик. Экспериментально обоснована гипотеза об образовании большего числа спиральных рукавов галактики при меньшей массе диска по отношению к массе Гало. Определены гидродинамические параметры, при которых образуются 2, 4 и 7 спиральных рукавов галактики. Определено, что при наличии сильного магнитного поля образуются полярные течения при коллапсе молекулярного облака вдоль магнитных силовых линий (основные результаты приведены в главе монографии [5] и в работах [2, 3, 4, 6, 7, 9, 20]).

5. На основе разработанных численных моделей реализован первый в Мире программный код для моделирования самогравитирующих гидродинамических объектов на гибридных суперЭВМ с ускорителями Intel Xeon Phi. Для параллельной реализации используется двухуровневая геометрическая декомпозиция области. Такая реализация позволила получить 134-кратное ускорение и 92 % эффективность при использовании 64 ускорителей (основные результаты приведены в работах [3, 20]).

Теоретическая и практическая значимость

С помощью достижений в области дифференциальных уравнений, теории конечно-объемных схем и параллельных вычислительных методов диссертантом построена и теоретически обоснована математическая модель упруго-пластических деформаций с учетом фазовых переходов и термодинамически согласованная гидродинамическая модель астрофизических объектов, разработаны и экспериментально верифицированы оригинальные численные методы высокого порядка точности для математического моделирования самогравитирующих гидродинамических объектов на различных пространственных масштабах и на этой основе разработано наукоемкое программное обеспечение для современных суперЭВМ.

В диссертации разработаны суперкомпьютерные программные комплексы с открытым кодом: Elast2d – программа для моделирования упруго-пластических деформаций, PEGAS – программа для моделирования астрофизических течений на классических суперкомпьютерных архитектурах, GPUPEGAS – расширение последнего комплекса на гибридные архитектуры, оснащенные графическими ускорителями, AstroPhi – расширение комплекса PEGAS на гибридные архитектуры с ускорителями Intel Xeon Phi. Программные комплексы зарегистрированы в Фонде алгоритмов и программ СО РАН, РосПатенте и специализированной библиотеке журнала Computer Physics Communications. Данные программные комплексы используются в исследованиях по изучению процесса "сварки взрывом" в ИТПМ СО РАН, ИГиЛ СО РАН, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, ОИВТ РАН, анализе астрономических наблюдений в ИНАСАН, ЮФУ, Институте Астрономии университета г. Вена, анализе производительности гибридных суперЭВМ в Группе компаний РСК. Эффективность построенных моделей, численных методов и программного обеспечения экспериментально подтверждена на решении задач о "сварке взрывом" и астрофизики.

Проводимые в рамках диссертации исследования являются частью планов научно-исследовательских работ ИВМиМГ СО РАН, а их выполнение было поддержано Российским фондом фундаментальных исследований и Министерством образования и науки Российской Федерации. Так под руководством диссертанта были выполнены следующие проекты: грант Президента Российской Федерации на 2015 – 2016 годы "Разработка эффективных высокоточных параллельных алгоритмов для магнитно-газодинамического моделирования динамики галактик на гибридных суперЭВМ, оснащенных графическими ускорителями и ускорителями Intel Xeon Phi", грант Российского фонда фундаментальных исследований на 2015 – 2017 годы "Разработка эффективных параллельных вычислительных методов высокого порядка точности для моделирования динамики астрофизических объектов на гибридных высокопроизводительных вычислительных системах", грант Российского фонда фундаментальных исследований на 2015 – 2016 годы для ведущих молодежных научных групп "Разработка эффективных параллельных вычислительных методов высокого порядка точности для разномасштабного моделирования астрофизических течений на гибридных суперЭВМ", грант Президента Российской Федерации на 2013 – 2014 годы, "Разработка эффективных параллельных алгоритмов для моделирования гравитационных магнитно-газодинамических процессов на высокопроизводительных вычислительных системах, оснащенных графическими ускорителями", муниципальный грант мэрии города Новосибирска в 2013 году "Разработка математических моделей и параллельных алгоритмов для компьютерного моделирования на графических ускорителях динамики протопланетного диска", молодежный грант Российского фонда фундаментальных исследований на 2012 – 2013 годы "Разработка эффективных параллельных алгоритмов для моделирования динамики многофазных астрофизических объектов на гибридных высокопроизводительных вычислительных системах", федеральная целевая программа "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009 – 2013 годы" на 2011 – 2013 годы "Разработка высокоточных вычислительных методов и программ для моделирования на высокопроизводительных вычислительных системах астрофизических процессов". Основные результаты исследований опубликованы в ведущих рецензируемых научных изданиях из перечня ВАК и используются как в Российской Федерации, так и за рубежом.

Методы исследований

Сложность нестационарных течений, их нелинейность и разномасштабность требуют детального исследования, основанного на совместном использовании современных знаний из ряда научных дисциплин: математическое моделирование, вычислительная математика, теория и технологии параллельных вычислений, гидродинамика, астрофизика и астрономия с использованием натурных экспериментов и наблюдений. В диссертации проводится теоретическое исследование косого соударения металлических пластин при "сварке взрывом", взаимодействие и эволюция галактик, эволюция молекулярных облаков. Для исследования использовался аппарат математического моделирования, часть проблем была решена аналитическими методами. Используемые в настоящей работе математические модели характеризуются полнотой описания, что позволило учесть ряд особенностей, влияющих на поведение гидродинамических процессов в задачах упруго-пластических деформаций и астрофизических задачах. Методология исследований при решении задач состоит в совместном использовании комплексных гидродинамических моделей с эффективными параллельными вычислительными методами. Численные модели и разработанные на их основе программные комплексы прошли полную верификацию на ряде модельных задач, близких по физическим постановкам к изучаемым процессам и имеющих аналитическое решение.

Положения, выносимые на защиту

В диссертации содержатся оригинальные результаты по трем направлениям: математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. Это соответствует трем пунктам паспорта специальности 05.13.18 "Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ".

1) Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий:

- Разработка, обоснование и тестирование математической модели упруго-пластических деформаций с учетом фазовых переходов. Модель основана на обобщенной формулировке уравнения состояния деформируемой среды, описывающего упругую среду, жидкость, газ и набор частиц [1, 11].

- Разработка, обоснование и тестирование численной гидродинамической модели для описания астрофизических объектов. Модель основана на уравнениях (магнитной) газовой динамики и уравнениях для первых моментов бесстолкновительного уравнения Больцмана для описания бесстолкновительной компоненты. Такая модель формулируется в виде гиперболической системы уравнений, для которой формулируется единый вычислительный метод [2, 17].

- Разработка, обоснование и тестирование эффективного численного метода высокого порядка точности на гладких решениях и малой диссипации численного решения в области разрывов для математического моделирования гидродинамических течений на суперЭВМ. В основе метода лежит комбинация метода разделения операторов, метода Годунова и кусочно-параболического метода на локальном шаблоне [2, 4, 20].

2) Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде

комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента:

– Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплекса программ для проведения вычислительных экспериментов для исследования динамики кумулятивной струи и процесса волнообразования при "сварке взрывом" двух металлических пластин [1, 11].

– Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплекса программ для проведения вычислительных экспериментов для исследования эволюции и взаимодействия галактик [2, 4, 17, 20].

– Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплекса программ для проведения вычислительных экспериментов для исследования эволюции межзвездной среды и коллапса молекулярных облаков [3].

3) Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента:

– С помощью вычислительного эксперимента объяснен процесс волнообразования и процесс фазового перехода при эволюции кумулятивной струи, возникающей при косом соударении двух металлических пластин. Волнообразование происходит вследствие совместного использования режима "склейки" и "проскальзывания" в области контакта. Кумулятивная струя образуется при малом угле столкновения между пластинами [11].

– С помощью вычислительного эксперимента в полной гидродинамической модели объяснен процесс развития центрального столкновения галактик: разрушение, слияние, свободное прохождение, образование третьей галактики после свободного прохождения галактик. Определены гидродинамические параметры, приводящие к развитию каждого из сценариев. Показано, что области активного звездообразования находятся за фронтом сформировавшихся в результате столкновения ударных волн. Образование молекулярного водорода происходит в области высокой плотности. Показано, что образуется большее число спиральных рукавов галактики при меньшей массе диска по отношению к массе Гало. Определены гидродинамические параметры, при которых образуются 2, 4 и 7 спиральных рукавов галактики [2, 4, 7, 17, 20].

– С помощью вычислительного эксперимента объяснен процесс и образование полярных течений в молекулярных облаках при самоорганизации межзвездной среды. Показано, что полярные течения образуются вдоль силовых линий магнитного поля при коллапсе молекулярного облака. Экспериментально доказано преимущество разработанного в диссертации численного метода над лагранжевым методом сглаженных частиц при воспроизведении высоких градиентов решения [3, 5, 12].

Апробация работы

Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на семинарах в Институте вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Институте гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Институте вычислительных технологий СО РАН, Институте математики им. С.Л. Соболева СО РАН, Институте астрономии университета г. Вена, Институте астрономии и физики космоса университета г. Буэнос-Айрес, а также на следующих конференциях в России и за рубежом: Всероссийская конференция "Нелинейные волны: теория и новые приложения" (Новосибирск, 2016), Сибирский форум индустрии информационных систем (Новосибирск, 2016, 2015), Международная конференция AstroNum 2015 (Франция, 2015), Международная конференция "10th Marseille Cosmology Conference" (Франция, 2015), Международная конференция "Workshop on Non-equilibrium Flow Phenomena in Honor of Mikhail Ivanov's 70th Birthday" (Новосибирск, 2015), Международная конференция "Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики" (Новосибирск, 2015, 2014), Международная конференция "ISC High Performance" (Германия, 2015), Всероссийская конференция "Проблемы механики: теория, эксперимент и новые технологии" (Новосибирск, 2014), Международное рабочее совещание "Workshop on Numerical and Observational Astrophysics" (Аргентина, 2014, 2011), Международная конференция "Mind The Gap: from microphysics to large-scale structure in the Universe"

(Великобритания, 2013), Всероссийская конференция "Современные проблемы динамики разреженного газа" (Новосибирск, 2013), Международная конференция "Дифференциальные уравнения. Функциональные пространства. Теория Приближений" (Новосибирск, 2013), Международная конференция "Математические и информационные технологии, MIT-2013" (Черногория, 2013), Международная научная конференция "Методы создания, исследования и идентификации математических моделей" (Новосибирск, 2013), Национальный суперкомпьютерный форум (Переславль-Залесский, 2013), Международная конференция "Interacting Galaxies and Binary Quasars: A Cosmic Rendezvous" (Италия, 2012), Международная суперкомпьютерная конференция "Научный сервис в сети Интернет" (Абрау-Дюрсо, 2011, 2010), Международная конференция "Parallel Computing Technologies (PaCT-2009)" (Новосибирск, 2009), Международное рабочее совещание "Происхождение и эволюция биосферы" (Новосибирск, 2005), Молодежная научная школа-конференция "Теория и численные методы решения обратных и некорректных задач" (Новосибирск, 2015, 2013, 2009), Конференция молодых ученых ИВМиМГ СО РАН (Новосибирск, 2016, 2015, 2014, 2013, 2009, 2008, 2006), Всероссийская межвузовская конференция молодых ученых (Санкт-Петербург, 2008), Международная научная студенческая конференция "Студент и научно-технический прогресс" (Новосибирск, 2006, 2005). Всего по теме диссертации опубликовано более 30 работ, из которых 24 в ведущих рецензируемых научных изданиях из перечня ВАК. Список основных публикаций приведен в конце автореферата.

Достоверность представленных результатов

Достоверность представленных результатов основана на применении обоснованных математических моделей, проверенных на специальном наборе тестовых задач вычислительных методов, устойчивостью и сходимостью используемых конечно-объемных схем, сравнением результатов моделирования с лабораторными экспериментами и наблюдениями, наличием высокорейтинговых публикаций и докладов по теме диссертации на различных специализированных конференциях и семинарах.

Личный вклад автора

В совместных работах по моделированию упруго-пластических деформаций личный вклад диссертанта заключается в разработке и исследованию корректности уравнения состояния деформируемой среды при фазовых переходах, реализации численного метода и проведению вычислительных экспериментов. В работах по моделированию гидродинамических процессов в астрофизических приложениях личный вклад диссертанта заключается в формулировке и обоснованию гидродинамической модели астрофизических объектов, разработке нового численного метода высокого порядка точности и его программной реализации, а также в проведение вычислительных экспериментов. Вклад автора в обсуждении постановок задач и интерпретации полученных результатов бал равным вкладом других соавторов. Все выносимые на защиту результаты принадлежат лично автору. Представление изложенных в настоящей диссертации и выносимых на защиту результатов, полученных в совместных исследованиях, согласованно с соавторами.

Объем и структура диссертации

Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения. Общий объем диссертации составляет 275 страниц, включая 97 рисунков, 13 таблиц и список литературы из 281 наименования.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **Введении** изложено современное состояние математических моделей гидродинамических процессов с учетом самогравитации и численных методов, используемых для их разрешения, а также программных комплексов эти методы реализующие. Обосновывается актуальность и сформулированы цели работы, сформулированы защищаемые научные результаты, приведен обзор литературы, сведения о научной новизне, практической и научной ценности, личном вкладе автора, сведения о структуре диссертации.

В **Главе 1** (Моделирование упруго-пластических деформаций) представлена численная модель упруго-пластических деформаций с учетом фазовых переходов. Модель основана на решении уравнений нелинейной теории упругости в лагранжевых координатах. Сформулировано и исследовано уравнение состояния упруго-пластичной среды, описаны правила преобразования уравнения состояния при фазовых переходах. Изложен численный метод решения уравнений, который был верифицирован на задаче "о распаде разрыва" в упругой среде. Приведены результаты вычислительных экспериментов по численному решению задач "о сварке взрывом" и ранней стадии взаимодействия метеоритов с поверхностью планет.

В *разделе 1.1* (Упруго-пластическая модель) определены понятия тензора дисторсии C в лагранжевых координатах

$$C_j^i = \frac{\partial x^i\left(\xi^1, \xi^2, \xi^3\right)}{\partial \xi^j},$$

где x^i – эйлеровы координаты, ξ^j – лагранжевы координаты, понятие уравнения состояния $E(C, S) = E\left(\sqrt{CC^T}, S\right)$, где S – функция энтропии, и тензор напряжений $\pi = E_C$. Записаны уравнения теории упругости с учетом максвелловских релаксаций

$$\frac{\partial u^i}{\partial t} - \frac{\partial \pi_i^j}{\partial \xi^j} = 0, \qquad \frac{\partial C_j^i}{\partial t} - \frac{\partial u^i}{\partial \xi^j} = 0,$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\tau_0^{-1} c_0 E_{c_0} + \tau_*^{-1} c_* E_{c_*} + \tau_1^{-1} c_1 E_{c_1}}{E_S},$$

$$\frac{\partial c_0}{\partial t} = -\frac{c_0}{\tau_0}, \qquad \frac{\partial c_1}{\partial t} = -\frac{c_1}{\tau_1}, \qquad \frac{\partial c_*}{\partial t} = -\frac{c_*}{\tau_*}.$$

Домножив уравнения на u^i, $E_{C_i^j}$, E_S, E_{c_0}, E_{c_*}, E_{c_1} соответственно получим закон сохранения полной энергии, который записывается в следующей форме:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{u^i u_i}{2} + E\right) - \frac{\partial}{\partial \xi^j}\left(u^i \pi_i^j\right) = 0,$$

где u^i – скорость, c_0, c_*, c_1 – продольные и поперечные скорости звука, τ_0, τ_*, τ_1 – параметры релаксации. Для вычислений нам удобно рассматривать сингулярный вид матрицы дисторсии. Для этого в каждой точке деформируемой среды в рассматриваемый момент времени вычисляется сингулярное разложение для матрицы $C = UKV^T$, где U и V – ортогональные матрицы, $K = diag\left(k_1, k_2, k_3\right)$ – диагональная матрица сингулярных чисел. В этом случае уравнение состояния может быть представлено в виде:

$$E(C, S) = E\left(\sqrt{CC^T}, S\right) = E\left(k_1, k_2, k_3, S\right).$$

Для того вида сформулирована и доказана теорема о выпуклости (корректности) уравнения состояния упруго-пластической среды, в которой говорится, что для выпуклости уравнения состояния упругой среды $E = E(C, S)$ как функции от элементов матрицы необходимо и достаточно, чтобы была положительно определена матрица $E_{k_i k_j} > 0$ и выполнены условия:

$$\frac{E_{k_i} - E_{k_j}}{k_i - k_j} > 0, \qquad \frac{E_{k_i} + E_{k_j}}{k_i + k_j} > 0.$$

Приведен список инвариантов, используемых для записи уравнения состояния для каждой фазы и выписаны условия его корректности.

В *разделе 1.2* (Метод Годунова для решения уравнений в лагранжевых координатах) описан метод Годунова для решения уравнений для описания упруго-пластической среды, где помимо решения уравнений теории упругости необходимо использовать процедуру перемещения расчетной сетки. Вычислительный алгоритм можно представить в виде следующих шагов, которые выполняются для каждой ячейки расчетной области: сингулярное разложение матрицы дисторсии C, при достижении необходимых условий учет фазового перехода и формулировка уравнения состояния, контроль корректности уравнения состояния с помощью сформулированной выше теоремы, решение задачи Римана для сформулированного уравнения состояния, расчет законов сохранения, пересчет функции энтропии, движение расчетной сетки. Наиболее сложным этапом алгоритма является численное решение задачи Римана для упругой среды. Для решения задачи Римана с помощью преобразования Лежандра преобразуем уравнения теории упругости:

$$\frac{\partial u^i}{\partial t} - \frac{\partial \pi_i^j}{\partial \xi^j} = 0, \qquad \frac{\partial C_j^i}{\partial t} - \frac{\partial u^i}{\partial \xi^j} = 0, \qquad \frac{\partial S}{\partial t} = 0,$$

к виду:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} - \frac{\partial \pi_i^j}{\partial \xi^j} = 0, \qquad \left(E_{C_j^k C_l^j}\right)^{-1} \frac{\partial \pi_j^i}{\partial t} - \frac{\partial u_i}{\partial \xi^j} = 0, \qquad \frac{\partial S}{\partial t} = 0,$$

где матрица $E_{C_j^k C_l^j}$ – обратима и положительно определенная матрица. В одомерном случае первые два уравнения можно переписать в виде:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} - \frac{\partial \pi_i^j}{\partial \xi^j} = 0, \qquad \Lambda^2 \frac{\partial \pi_j^i}{\partial t} - \frac{\partial u_i}{\partial \xi^j} = 0,$$

где Λ^2 – j-й блочно-диагональный элемент матрицы $\left(E_{C_j^k C_l^j}\right)^{-1}$. В результате, перейдя к инвариантам $\Lambda\pi_i \pm u$ последняя система элементарно разрешается. После пересчета законов сохранения происходит пересчет эйлеровой сетки и матрицы дисторсии по уравнениям:

$$\frac{\partial X_i}{\partial t} = U_i, \qquad C_j^i = \frac{\partial X_i}{\partial \xi^j}.$$

Для этого используя значения скорости U_i, полученные в результате решения задачи "о распаде разрыва", мы перемещаем расчетную сетку.

В *разделе 1.3* (Задача о "распаде разрыва" в упругой среде) на решении задачи "о распаде разрыва" в упругой среде был верифицирован численный метод, используемый для решения уравнений теории упругости.

В *разделе 1.4* (Задача "о сварке взрывом" двух алюминиевых пластин) исследовано образование и динамика кумулятивной струи при косом соударении двух алюминиевых пластин, а также исследован процесс волнообразования.

В *разделе 1.5* (Моделирование взаимодействия метеоритов с поверхностью планет) рассмотрены две задачи взаимодействия метеоритов с поверхностью планет на ранней стадии: столкновение с поверхностью планет, имеющих атмосферу, что приводит к частичному разрушению метеорита и падением его скорости, в этом случае будет рассмотрен удар с дозвуковой скоростью; столкновение с поверхностью планет, не имеющих атмосферу, что приводит к удару со сверхзвуковой скоростью. Будем моделировать две пластины. Первая из которых (поверхность планеты – вулканогенно-осадочный слой) размером 120×60 сантиметров с плотностью $\rho_0 = 2.3$ г/см^3, продольной и поперечной скоростями звука $c_0 = 5.0$ км/сек и $c_1 = 2.9$ км/сек соответственно. Вторая пластина (метеор – материал оливин) размером 40×40 сантиметров с плотностью $\rho_0 = 3.27$ г/см^3, продольной и поперечной скоростями звука $c_0 = 7.4$ км/сек и $c_1 = 5.3$ км/сек соответственно. Критическое давление откола частиц $\pi_{cr} = 60$ ГПа. В результате математического моделирования было показано, что в области контакта между пластинами происходит разогрев и плавление материала, также образуется небольшая волновая структура, а затем происходит выброс частиц. Следует отметить, что частицы вылетают как из газовой фазы, так и из твердой, что связано с резким сменой уравнения состояния для последних. В целом картина течения напоминает картину сварки взрывом двух алюминиевых пластин. В то время как при сверхзвуковом ударе от области контакта между пластинами выходит волна плавления материала , которая распространяется практически на всю область метеорита. Отметим, что выброса части в виде кумулятивной струи не наблюдается, что связано с быстрым плавлением и разогревом материала без образования критических значений давления.

В *разделе 1.6* сформулированы основные выводы по первой главе.

В **Главе 2** (Физико-математические модели гидродинамических процессов в самосогласованном гравитационном поле) представлены математические модели астрономических объектов и подсеточные процессы, небходимые для учета на различных пространственных масштабах. Модель основана на совместном использовании (магнитно) газодинамической модели и уравнений для первых моментов бесстолкновительного уравнения Больцмана для описания бесстолкновительной компоненты астрономических объектов. Такой подход позволяет сформулировать термодинамически согласованную гидродинамическую модель для описания динамики астрофизических течений.

В *разделе 2.1* (Газодинамическая модель) изложена трехмерная модель гравитационной газовой динамики, основанная на использовании переопределенной системы уравнений газовой динамики, замкнутую уравнением состояния для идеального газа и дополненную уравнением Пуассона для гравитационного потенциала.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0, \qquad \frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p - \rho \nabla(\Phi),$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \vec{u}) = -\nabla \cdot (p \vec{u}) - (\rho \nabla(\Phi), \vec{u}), \qquad \frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \varepsilon \vec{u}) = -(\gamma - 1) \rho \varepsilon \nabla \cdot \vec{u},$$

$$\rho E = \frac{1}{2} \rho \vec{u}^2 + \rho \varepsilon, \qquad p = (\gamma - 1) \rho \varepsilon, \qquad \Delta \Phi = 4 \pi G \rho,$$

где p – давление газа, ρ – плотность газа, $\vec{u}$ – скорость газа, E – плотность полной механической энергии газа, Φ – гравитационный потенциал, ε – плотность внутренней энергии газа, γ – показатель адиабаты. Описана операция приведения уравнений к безразмерной форме. Сформулированы начальные и граничные условия. Сформулированы основные законы сохранения, а также коррекция численного решения, гарантирующая неубывание энтропии, состоящая в двух преобразованиях:

1. Коррекция внутренней энергии (или энтропии) в области с основной плотностью газа:

$$\rho\varepsilon = \left(\rho E - \frac{\rho\vec{u}^2}{2}\right), \frac{\rho}{\rho_{\max}} > 10^{-5}.$$

2. Коррекция длины вектора скорости в области разреженного газа (граница газ-вакуум):

$$|\vec{u}| = \sqrt{\frac{2(\rho E - \rho\varepsilon)}{\rho}}, \frac{\rho}{\rho_{\max}} \leq 10^{-5}.$$

В области малой плотности используется второй подход, так как в ней отсутствуют проблемы с падением энтропии. В основной области используется первый подход, который при выпуклости уравнения состояния для энтропии, что имеет место для идеального газа, гарантирует ее неубывание. Формулировка уравнений гравитационной газовой динамики расширены на уравнения многокомпонентной односкоростной газовой динамики для учета химической эволюции газовой компоненты астрофизических объектов, а также уравнения сформулированы с учетом космологического расширения за счет темной энергии. В этом случае координаты пересчитываются в виде $x = ar$, где r – исходные координаты, $a = 1/(1+z)$ – параметр расширения, который вычисляется из уравнения Эйнштейна:

$$\frac{da}{dt} = H\sqrt{\Omega_M\left(a^{-1} - 1\right) + \Omega_\Lambda\left(a^2 - 1\right) + 1},$$

где $\Omega_M = \Omega_B + \Omega_D$ – доля материи в общей массе, Ω_B – доля видимой барионной материи (газа и звезд), Ω_D – доля темной материи, Ω_Λ – доля темной энергии, $H = \dot{a}/a$ – постоянная Хаббла, z – параметр красного смещения. В этом случае мы рассматриваем специфичную плотность $\rho_c \equiv \rho a^3$ и скорость $\vec{u}_c = a\vec{u}$.

В *разделе 2.2* (Магнитно-газодинамическая модель) приведено расширение уравнений газовой динамики для учета магнитного поля. Сформулированы основные законы сохранения, а также коррекция численного решения, гарантирующая неубывание энтропии. Процедура коррекции решения уравнений магнитной газовой динамики является расширением такой процедуры для газодинамических уравнений. Формулировка уравнений гравитационной магнитной газовой динамики обобщена на случай космологического расширения.

В *разделе 2.3* (Бесстолкновительная модель) приведены модели для описания бесстолкновительных компонент астрономических объектов. В работе рассматривается модель N-тел, которая используется для описания бесстолкновительной компоненты в задач об эволюции протопланетных дисков, гидродинамическая модель, основанная на уравнениях газовой динамики с нулевым давлением, и модель, основанная на уравнениях для первых моментов бесстолкновительного уравнения Больцмана, дополненная уравнением Пуассона, в декартовых координатах имеют следующий вид.

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial n v_k}{\partial x_k} = 0, \qquad \frac{\partial n v_i}{\partial t} + \frac{\partial n v_i v_k}{\partial x_k} = -\frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k} - n a_i,$$

$$\frac{\partial n W_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial n E_{ij} v_k}{\partial x_k} = -\frac{\partial (\Pi_{jk} v_i + \Pi_{ik} v_j)}{\partial x_k} - n v_i a_j - n v_j a_i,$$

$$\frac{\partial \Pi_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{ij} v_k}{\partial x_k} = -\Pi_{jk}\frac{\partial v_i}{\partial x_k} - \Pi_{ik}\frac{\partial v_j}{\partial x_k},$$

$$a_i = \frac{\partial (\Phi)}{\partial x_i}, \qquad \Delta\Phi = 4\pi G n, \qquad n W_{ij} = \Pi_{ij} + n v_i v_j,$$

где n – плотность бесстолкновительной компоненты, Π_{ij} – симметричный тензор дисперсии скоростей, $\vec{v}$ – вектор скорости, nW_{ij} – тензор полной энергии, Φ – гравитационный потенциал. Сформулированы начальные и граничные условия. Сформулированы основные законы сохранения, а также коррекция численного решения, гарантирующая неубывание энтропии. Процедура коррекции решения уравнений для первых моментов бесстолкновительного уравнения Больцмана является расширением такой процедуры для газодинамических уравнений. Формулировка уравнений обобщена на случай космологического расширения. Также проведено сравнение бесстолкноительных моделей на задаче столкновения двух волн плотности. Отметим, что бесстолкновительная модель, основанная на уравнениях для первых моментов бесстолкновительного уравнения Больцмана, позволяет термодинамически согласовано описать процессы фазовых переходов (звездообразование и эффекты от взрыва сверхновых звезд).

В *разделе 2.4* (Модель подсеточной физики) описана модель подсеточных физических процессов, включающая самосогласованную химокинетическую модель, процесс звездообразования и эффект от взрыва сверхновых звезд, охлаждение и нагревание газа. Подсеточные процессы включены в виде правых частей в законы сохранения. В рамках модели химической кинетики рассмотрены три модели на разных масштабах: примордиальная химокинетика основных форм водорода и гелия на космологических масштабах, модель химокинетики водорода на пыли с учетом ионизации на масштабах межзвездной среды, и аналитическую модель образования молекулярного водорода на галактических масштабах. Сформулировано правило для вычисления эффективного показателя адиабаты.

В *разделе 2.5* сформулированы основные выводы по второй главе.

В **Главе 3** (Численные схемы для моделирования процессов гравитационной гидродинамики) описан численный метод решения уравнений гравитационной гидродинамики, его верификация на тестовых задачах и параллельная реализация на различных типах суперЭВМ. В основе численного метода лежит метод разделения операторов, в котором исходные уравнения расщепляются на эйлеров и лагранжев этап. На эйлеровом этапе происходит учет работы сил, а на лагранжевом этапе происходит адвективный перенос гидродинамических величин. В основе решения каждого этапа лежит комбинация метода Годунова со специальной модификацией осреднения Рое и кусочно-параболический метода на локальном шаблоне, обеспечивающего высокий порядок точности на гладких решениях и малую диссипацию решения в области разрывов. Геометрическая декомпозиция области используется в основе параллельной реализации.

В *разделе 3.1* (Метод разделения операторов для решения уравнений в эйлеровых координатах) описан численный метод решения уравнений гидродинамики (газовая динамика, магнитная газовая динамика, уравнения для первых моментов бесстолкновительного уравнения Больцмана). В основе метода разделения операторов лежит схема разделения решения по физическим процессам: работа сил и адвективный перенос. Формально такое разделение можно записать в виде рассмотрения общего вида системы уравнений:

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathcal{U}\vec{u}) = \mathcal{F}\left(\mathcal{U}, \nabla \mathcal{U}\right),$$

где $\mathcal{U}$ – вектор гидродинамических консервативных переменных, $\mathcal{F}$ – работа поля сил, $\vec{u}$ – вектор скорости. Такое уравнение является гиперболическим и расщепляется на два гиперболических уравнения:

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} = \mathcal{F}\left(\mathcal{U}, \nabla \mathcal{U}\right), \qquad \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathcal{U}\vec{u}) = 0.$$

Для уравнений на каждом этапе используется численные схемы вида:

$$\frac{\mathcal{U}_i^{n+1/2} - \mathcal{U}_i^n}{\tau} = \frac{F_{i+1/2} - F_{i-1/2}}{h}, \qquad \frac{\mathcal{U}_i^{n+1} - \mathcal{U}_i^{n+1/2}}{\tau} + \frac{G_{i+1/2} - G_{i-1/2}}{h} = 0,$$

где F – поток вектора гидродинамических величин $\mathcal{U}$ на эйлеровом этапе, G – поток вектора гидродинамических величин $\mathcal{U}$ со скоростью $\vec{u}$. Для определения потоков будет использоваться метод Годуновского типа. Для определения потоков будем рассматривать линеаризованный одномерный вариант уравнений на каждом этапе:

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \mathcal{B}\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x} = 0,$$

где $\mathcal{B} = -\partial F/\partial \mathcal{U}$ или $\mathcal{B} = -\partial G/\partial \mathcal{U}$ в зависимости от этапа численного метода. Далее рассмотрим интерфейс между левой L и правой R ячейками, в которых построены кусочно-параболические функции. Используя эти значения определим матрицу $\mathcal{B}$ с помощью модификации осреднения Рое, где вместо среднегеометрического осреднения плотности используется среднеарифметическое значение. Так как система гиперболическая, то матрицу $\mathcal{B}$ можно представить в виде разложения по левым $\mathcal{L}$ и правым $\mathcal{R}$ собственным векторам, где $\mathcal{L}\mathcal{R} = \mathcal{R}\mathcal{L} = I$ и $\mathcal{B} = \mathcal{R}\Lambda\mathcal{L}$. С учетом такого разложения линеаризованное уравнение можно переписать в виде:

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \mathcal{R}\Lambda\mathcal{L}\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x} = 0.$$

Домножим последнее уравнение слева на матрицу $\mathcal{L}$ и произведя замену $\mathcal{W} = \mathcal{L}\mathcal{U}$, получим набор уравнений переноса вида:

$$\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial t} + \Lambda\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial x} = 0.$$

Нас интересует решение только на интерфейсе между ячейками на некотором шаге τ, которое записывается как:

$$\mathcal{W}^k(\tau) = \mathcal{W}_0^k(-\tau\lambda_k) = \begin{cases} \mathcal{W}_0^{k,L}(-\tau\lambda_k), \lambda_k < 0 \\ \mathcal{W}_0^{k,R}(-\tau\lambda_k), \lambda_k > 0 \end{cases},$$

где λ_k – собственное число матрицы $\mathcal{B}$, нулевым индексом обозначено начальное условие, которое представляется в виде кусочно-параболической функции в каждой ячейке по каждому направлению. Произведя обратную замену $\mathcal{U} = \mathcal{R}\mathcal{W}$ получим решение задачи Римана для определения потоков $F_{i\pm1/2}$ и $G_{i\pm1/2}$ через границы. Для интегрирования по времени используется схема первого порядка или схема Рунге-Кутта 4-го порядка точности. После эйлерова и лагранжева этапов осуществляется коррекция численного решения.

В *разделе 3.2* (Метод решения уравнения Пуассона) описан метод решения уравнения Пуассона. Метод основан на представлении правой части в виде суперпозиции по собственным функциям оператора Лапласа, для этого используется процедура прямого быстрого преобразования Фурье, затем происходит решение уравнения Пуассона в пространстве гармоник, после чего осуществляется обратное быстрое преобразование Фурье решения. Для постановки краевых условий используются первые моменты мультипольного разложения.

В *разделе 3.3* (Верификация численных методов) приведено тестирование численных методов. На одномерных задачах об ударной трубе показана возможность численного метода решения газодинамических уравнений корректно воспроизводить все виды волн, в том числе сильные ударные волны. Показано, что в стандартном тесте Сода ударная волна при использовании кусочно-параболического представления решения размазывается на две ячейки, в то время как при использовании кусочно-постоянного решения на десять ячеек. На задаче Аксенова, имеющей бесконечно дифференцируемое гладкое решение, исследован порядок точности численного метода при использовании кусочно-параболического представления решения. На этой задаче был достигнут **1.713** порядок точности. Таким образом, экспериментально доказано, что численный метод имеет высокий порядок точности на гладких решениях и малую диссипацию решения в области разрывов. На одномерной задаче Погорелова о распаде МГД разрыва, в которой существуют все виды волн, верифицирован метод решения уравнений магнитной газовой динамики. Для верификации метода решения уравнений для первых моментов бесстолкновительного уравнения Больцмана была также использована задача о распаде разрыва. На двумерных задачах развития неустойчивостей Кельвина-Гельмгольца и Релея-Тейлора показана возможность численного метода воспроизводить подобные виды неустойчивостей без их подавления. На задачах о сверхзвуковом потоке в туннеле со ступенью и о двойном маховском отражении сильной ударной волны продемонстрирована возможность метода моделировать течения с большим числом Маха. На задаче Орзага-Танга экспериментально подтверждена возможность метода решения МГД уравнений моделировать переход к сверхзвуковым турбулентным течениям. В трехмерной и постановке была решена задача Седова о точечном взрыве, которая является стандартным тестом, проверяющим способность метода воспроизводить сильные ударные волны с очень большими числами Маха. Для тестирования решения уравнений гравитационной газовой динамики была решена задача о получении равновесных вращающихся конфигураций. С увеличением угловой скорости самогравитирующий газовый шар принимает форму эллипсоида с длинами полуосей, аппроксимируемыми следующими выражениями:

$$r_x(\omega) = 2.3510^{-3} e^{\frac{\omega}{0.15736}} + 1.18171, \qquad r_z(\omega) = 2.5210^{-3} e^{\frac{\omega}{0.17686}} + 1.03146,$$

где ω – угловая скорость вращения. Решены задачи столкновения самогравитирующих газовых сфер в различных конфигурациях. На аналитическом решении был верифицирован метод решения уравнения Пуассона.

В *разделе 3.4* (Параллельная реализация численного метода) изложена схема параллельной реализации метода и исследование ее производительности. В силу описания всех компонент астрофизических объектов с помощью гиперболических систем уравнений и построения единого численного метода для их разрешения в основе параллельной реализации может быть использована схема произвольной геометрической декомпозиции области. Для классических архитектур суперкомпьютеров использовалась декомпозиция области по одному направлению. Необходимо отметить, что при использовании кусочно-параболического метода на локальном шаблоне для перекрытия используется только один слой ячеек. В случае использования гибридных суперЭВМ с графическими ускорителями использовалась одномерная декомпозиция области по процессорным элементам и двумерная декомпозиция в рамках графического ускорителя. При использовании гибридных суперЭВМ с ускорителями Intel Xeon Phi использовалась также одномерная декомпозиция области по процессорным элементам и многопоточное распределение задач между ядрами ускорителя. В случае использования классической архитектуры суперкомпьютера ССКЦ СО РАН была достигнута 93 % эффективность при использовании 768 вычислительных ядер. При использовании гибридного суперЭВМ, оснащенного графическими картами, было достигнуто 55-кратное ускорение и 96 % эффективность на 60 графических картах. В случае использования гибридных суперЭВМ с ускорителями Intel Xeon Phi было достигнуто 134-кратное ускорение и 75 % эффективность при использовании 224 ускорителей Intel Xeon Phi. С помощью имитационного моделирования показана масштабируемость реализации до одного миллиона ускорителей, что соответствует экзафлопсному уровню производительности. Для быстрого преобразования Фурье использовалась библиотека FFTW.

В *разделе 3.5* сформулированы основные выводы по третьей главе.

В **Главе 4** (Моделирование гидродинамических процессов в самосогласованном гравитационном поле) описаны результаты моделирования гидродинамических процессов, начиная от крупно-масштабных объектов (космологические структуры), заканчивая объектами масштаба протопланетного диска.

В *разделе 4.1* (Моделирование динамики крупномасштабных космологических структур) представлены результаты по моделированию крупно-масштабных космологических структур. В рамках двухфазной многокомпонентной гидродинамической модели с учетом космологического расширения и подсеточных процессов было смоделировано образование космологических структур – волос (филаменты в зарубежной литературе), стен (блины Я.Б. Зельдовича в российской литературе), скоплений (кластеры в зарубежной литературе) галактик, пустот (войды в зарубежной литературе). Смоделирована эволюция и столкновение в МГД модели скоплений галактик. В результате вычислительного эксперимента было показано качественное соответствие структуры смоделированного и наблюдаемых скоплений, количественное соответствие масс смоделированных галактик и расстояний между ними с наблюдаемыми значениями.

В *разделе 4.2* (Моделирование динамики галактических структур) приведены результаты по моделированию эволюции взаимодействия галактик. Объяснен механизм образования спиральных неустойчивостей в галактическом диске в модели изотермической гидродинамики, приводящий к образованию многорукавных галактик (двух-, четырех- и семирукавная структура) в ходе развития гравитационной неустойчивости. Определены параметры для образования каждого вида галактик. Таким образом, разработанная вычислительная модель и метод для ее разрешения ведет себя в соответствии с теоретическими оценками по этой задаче: системы с меньшим соотношением массы диска к массе Гало дают большее число рукавов, что имеет большое значение для изучения наблюдаемых неосесимметричных структур в дисковых галактиках. Приведены результаты по моделированию в полной гидродинамической модели сценариев столкновения галактик, которые подтвердили основанную на наблюдательных данных теоретическую гипотезу зависимости исхода взаимодействия галактик от скорости в момент столкновения. Были также решены задачи образования хвостов галактик в газодинамической, магнитно-газодинамической и полной двухфазной постановке при их взаимодействии с другими галактиками и межгалактическим газом.

В *разделе 4.3* (Моделирование динамики молекулярных облаков и межзвездной среды) приведены результаты по исследованию образованию, эволюции и коллапса молекулярных облаков в межзвездной среде. Были исследованы задачи коллапса молекулярных облаков в различных режимах, на которых было продемонстрировано преимущество разработанного в диссертации метода над лагранжевыми методами при воспроизведении высоких градиентов решения. Смоделирован сценарий образования полярных течений при коллапсе молекулярных облаков в МГД модели. Исследована задача образования молекулярных облаков в ходе развития МГД турбулентности. Было показано, что для альфвеновского числа Маха прослеживается корреляция $\mathcal{M} \sim n^2$ и большая часть облака $n > 10$ см$^{-3}$ попадают в сверхальфвеновскую область. Причина возникновения такого режима связано с самоорганизацией в замагниченной турбулентной межзвездной среде в трансальфеновском режиме $\mathcal{M} \sim 1$ при $n \sim 1$. При таких плотностях контуры косинуса угла колинеарности между векторами скорости и магнитного поля образуют седловидную структуру, что говорит о том, что сжатие происходит вдоль силовых линий магнитного поля. Затем за счёт влияния самогравитации происходит дальнейшее увеличение массы и плотности облаков. В свою очередь в полученных плотных облаках турбулентность является только сверхальфвеновской с числом Маха $\mathcal{M} > 100$.

В *разделе 4.4* (Моделирование образования протопланетного диска) исследован один из сценариев эволюции протопланетной системы на ранней и поздней стадии. На ранней стадии смоделирован механизм образования однопланетной системы вследствие эволюции плотного пылевого кольца. На поздней стадии рассматривалась эволюция несколько сформированных планетезималей, в ходе которой было образовано три объекта высокой плотности, которые можно интерпретировать в качестве потенциальных протопланет. Кроме этого в ходе моделирования за счет самоорганизации была получена область разрежения рядом со звездой. Она образовалась в результате влияния звездного ветра, из-за которого часть вещества была выброшена во внешнюю часть диска. Это, в частности, является одной из причин невозможности образования газовых гигантов вблизи звезды.

В *разделе 4.5* сформулированы основные выводы по четвертой главе.

В **Заключении** диссертации сформулированы основные выводы и основные результаты диссертации.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В диссертации сформулированы и решены постановки новых задач математического моделирования гидродинамических процессов в самосогласованном гравитационном поле на суперЭВМ. Разработаны математические модели, созданы оригинальные эффективные численные схемы и их параллельные реализации в виде наукоемкого программного обеспечения для проведения суперкомпьютерных вычислительных экспериментов.

Построена новая модель упруго-пластических деформаций с учетом фазовых переходов, основанная на решении уравнений теории упругости и максвелловских релаксаций для описания фазовых переходов между твердым телом, жидкостью и газом. Для этого был сформулирован общий вид уравнения состояния и исследована его корректность. Такой вид уравнения состояния был выработан в результате оригинальных вычислительных экспериментов и их сравнения с натурными экспериментами на задаче "о сварке взрывом" металлических пластин. Для разрешения уравнения на основе метода Годунова был разработан, реализован и верифицирован численный метод решения уравнений теории упругости в лагранжевых координатах. На задаче "о сварке взрывом" двух алюминиевых пластин был объяснен механизм волнообразования и продемонстрирован сценарий прохождения всех фазовых переходов с образованием кумулятивной струи, состоящей из частиц материала.

Построена новая гидродинамическая модель астрофизических объектов. Модель основана на совместном решении переопределенной системы уравнений многокомпонентной односкоростной (магнитной) газовой динамики и уравнений для первых моментов бесстолкновительного уравнения Больцмана для описания бесстолкновительной компоненты. Использование такого подхода для описания бесстолкновительной среды позволяет сформулировать термодинамически согласованную модель процесса звездообразования и эффекта от взрыва сверхновых, что невозможно сделать в модели N-тел, а также использовать единый вычислительный подход к численному разрешению таких гиперболических моделей, что особенно важно в контексте использования суперЭВМ. Использование односкоростной модели для многокомпонентной газодинамической среды позволяет естественным образом учесть химокинетику в астрофизических течениях. Для обеспечения бездивергентности магнитного поля используется теорема Стокса.

Разработан новый численный метод высокого порядка точности на гладких решениях и с малой диссипацией решения в области разрывов для решения уравнений газовой динамики, магнитной газовой динамики и решения уравнений для первых моментов бесстолкновительного уравнения Больцмана. В основе численного метода лежит метод разделения операторов, который расщепляет исходную систему уравнений на эйлеров этап, на котором происходит учет работы сил, и лагранжев этап, на котором происходит адвективный перенос гидродинамических величин. В основе решения уравнений на каждом этапе лежит метод Годунова с использованием линеаризованных распадов разрыва. Для построения решения линеаризованного распада разрыва используется специальная модификация схемы осреднения Рое и кусочно-параболический метод на локальном шаблоне для построения численного метода с малой диссипацией решения в области разрыва и высокого порядка точности на гладких решениях. Использование компактного шаблона для организации вычислений позволило использовать минимальное перекрытие подобластей, а гиперболичность математической модели позволило сформулировать единый вычислительный метод для всех компонент, что позволило получить 55-кратное ускорение на графическом ускорителе и 134-кратное ускорение на ускорителе Intel Xeon Phi, а также высокую масштабируемость как в случае классических архитектур, так и в случае гибридных суперЭВМ.

Проведена серия вычислительных экспериментов, позволившая: впервые в рамках полной гидродинамической модели исследовать задачу столкновения галактик, определить диапазоны гидродинамических параметров для развития каждого сценария столкновения: рассеивание галактик, слияние галактик, свободное прохождение галактик, разлет галактик с образованием новой галактики, определить области звездообразования, возникающие при столкновении галактик, и образования сложных химических соединений; впервые исследовать задачу образования различного числа рукавов галактики, определить гидродинамические параметры для образования двух-, четырех- и семирукавных галактик; впервые исследовать задачу самоорганизации молекулярных облаков, происходящей за счет самосогласованного гравитационного и магнитного полей и показать преимущество разработанного численного метода над лагранжевым методом сглаженных частиц при воспроизведении высоких градиентов решения. Полученные результаты подтверждают существующие теории и согласуются с наблюдениями и результатами натурных экспериментов.

Разработанная в диссертации численная модель трехмерных гидродинамических процессов в самосогласованном гравитационном поле **рекомендуется** для использования специалистами в области материаловедения принимать обоснованные решения при постановке натурных экспериментов для создания новых материалов, а специалистам в области космологии, астрофизики и геофизики экспериментально исследовать механизмы образования пекулярных галактик, областей звездообразования в них, развития МГД процессов на масштабах межзвездной среды и геофизических масштабах. В качестве **перспективы дальнейшей разработки темы** предполагается качественное расширение численной модели для учета релятивистских эффектов, более сложных уравнений состояния и химической кинетики на различных пространственных масштабах. Расширение численного метода предполагается в сторону использования подвижных сеток, что позволит при сохранении параллельных алгоритмов более детализированно воспроизводить разномасштабные гидродинамические течения. Разработанные параллельные алгоритмы в перспективе могут быть эффективно реализованы на современных архитектурах программируемых логических интегральных схем, что существенно повысит производительность вычислений. В дальнейшем такой программный комплекс предполагается использовать для широкого круга задач астрофизики и геофизики: образование и взаимодействие галактик различных типов в рамках космологической модели, детальное исследование процесса звездообразования в рукавах галактик, объяснение механизмов образования планетных систем различного типа, исследование влияния солнечного ветра и импактных событий на объекты солнечной системы.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Годунов С.К., Киселев С.П., Куликов И.М., Мали В.И. Моделирование ударно-волновых процессов в упругопластических материалах на различных (атомный, мезо и термодинамический) структурных уровнях. – Москва, Ижевск: Ижевский институт компьютерных исследований. – 2014. – 296 С.

2. Kulikov I. GPUPEGAS: A New GPU-accelerated Hydrodynamic Code for Numerical Simulations of Interacting Galaxies // The Astrophysical Journal Supplements Series. – 2014. – V. 214, I. 1. – Article Number 12.

3. Kulikov I.M., Chernykh I.G., Snytnikov A.V., Glinskiy B.M., Tutukov A.V. AstroPhi: A code for complex simulation of dynamics of astrophysical objects using hybrid supercomputers // Computer Physics Communications. – 2015. – V. 186. – P. 71-80.

4. Kulikov I., Vorobyov E. Using the PPML approach for constructing a low-dissipation, operator-splitting scheme for numerical simulations of hydrodynamic flows // Journal of Computational Physics. – 2016. – V. 317. – P. 318-346.

5. Kulikov I., Chernykh I., Snytnikov A., Protasov V., Tutukov A., Glinsky B. Numerical Modelling of Astrophysical Flow on Hybrid Architecture Supercomputers // In Parallel Programming: Practical Aspects, Models and Current Limitations (ed. M. Tarkov). – 2014. – P. 71-116.

6. Kulikov I. PEGAS: Hydrodynamical code for numerical simulation of the gas components of interacting galaxies // Book Series of the Argentine Astronomical Society. – 2013. – V. 4. – P. 91-95.

7. Vshivkov V., Lazareva G., Snytnikov A., Kulikov I., Tutukov A. Hydrodynamical code for numerical simulation of the gas components of colliding galaxies // The Astrophysical Journal Supplement Series. – 2011. – V. 194, I. 2. – Article Number 47.

8. Vshivkov V., Lazareva G., Snytnikov A., Kulikov I., Tutukov A. Computational methods for ill-posed problems of gravitational gasodynamics // Journal of Inverse and Ill-posed Problems. – 2011. – V. 19. – P. 151-166.

9. Тутуков А.В., Лазарева Г.Г., Куликов И.М. Газодинамика центрального столкновения двух галактик: слияние, разрушение, пролет, образование новой галактики // Астрономический журнал.– 2011. – Т. 88, №9. – С. 837-851.

10. Godunov S., Kulikov I. Computation of Discontinuous Solutions of Fluid Dynamics Equations with Entropy Nondecrease Guarantee // Computational Mathematics and Mathematical Physics. – 2014. – V. 54, I. 6. – P. 1012-1024.

11. Годунов С.К., Киселев С.П., Куликов И.М., Мали В.И. Численное и экспериментальное моделирование образования волн при сварке взрывом // Труды Математического Института им. В.А. Стеклова. – 2013.– Т. 281. – С. 16 - 31.

12. Kulikov I., Lazareva G., Snytnikov A., Vshivkov V. Supercomputer Simulation of an Astrophysical Object Collapse by the Fluids-in-Cell Method // Lecture Notes in Computer Science. – 2009. – V. 5698. – P. 414-422.

13. Вшивков В.А., Лазарева Г.Г., Куликов И.М. Модификация метода крупных частиц для задач гравитационной газовой динамики. // Автометрия. – 2007. – Т. 43, Вып. 6. – С. 56-65.

14. Вшивков В.А., Лазарева Г.Г., Киреев С.Е., Куликов И.М. Параллельная реализация модели газовой компоненты самогравитирующего протопланетного диска на суперЭВМ // Вычислительные технологии. – 2007. – Т. 12, Вып. 3. – С. 38-52.

15. Вшивков В.А., Лазарева Г.Г., Куликов И.М. Операторный подход для численного моделирования гравитационных задач газовой динамики // Вычислительные технологии. – 2006. – Т. 11, Вып. 3. – С. 27-35.

16. Kulikov I., Chernykh I. Glinskiy B., Weins D., Shmelev A. Astrophysics simulation on RSC massively parallel architecture // Proceedings - 2015 IEEE/ACM 15th International Symposium on Cluster, Cloud, and Grid Computing, CCGrid 2015. – 2015. – P. 1131-1134.

17. Protasov V., Serenko A., Nenashev V., Kulikov I., Chernykh I. High-Performance Computing in Astrophysical Simulations // Journal of Physics: Conference Series. – 2016. – V. 681. – Article Number 012022.

18. Kulikov I., Chernykh I., Tutukov A. A New Hydrodynamic Model for Numerical Simulation of Interacting Galaxies on Intel Xeon Phi Supercomputers // Journal of Physics: Conference Series. – 2016. – V. 719. – Article Number 012006.

19. Kulikov I., Chernykh I., Protasov V. Mathematical modeling of formation, evolution and interaction of galaxies in cosmological context // Journal of Physics: Conference Series. – 2016. – V. 722. – Article Number 012023.

20. Kulikov I., Chernykh I., Nenashev V., Katysheva E. Numerical modeling of interacting galaxies on Intel Xeon Phi supercomputers // CEUR Workshop Proceedings. – 2015. – V. 1482. – P. 226-237.

21. Glinskiy B., Kulikov I., Snytnikov A., Chernykh I., Weins D. A multilevel approach to algorithm and software design for exaflops supercomputers // CEUR Workshop Proceedings. – 2015. – V. 1482. – P. 4-16.

22. Куликов И.М., Черных И.Г., Глинский Б.М. AstroPhi: программный комплекс для моделирования динамики астрофизических объектов на гибридных суперЭВМ, оснащенных ускорителями Intel Xeon Phi // Вестник Южно-Уральского Государственного Университета. Серия: Вычислительная математика и информатика. – 2013. – Т. 2, Вып. 4. – С. 57-79.

23. Протасов В.А., Куликов И.М. PADME – новый код для моделирования процесса формирования георесурсов планет на гетерогенных вычислительных системах // Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов. – 2015. – Т. 326, Вып. 8. — С. 61-70.

24. Вшивков В.А., Лазарева Г.Г., Киреев С.Е., Куликов И.М. Численное решение трехмерных задач динамики самогравитирующих многофазных систем // Научный вестник НГТУ. – 2011. – Вып. 3 (44). – С. 69-80.

25. Лазарева Г.Г., Куликов И.М., Вшивков В.А., Кошкарова Е.А., Берендеев Е.А., Горр М.Б., Антонова М.С. Параллельная реализация численной модели столкновения галактик // Вестник Новосибирского государственного университета. Серия: Информационные технологии. – 2011. – Т. 9., Вып. 4. – С. 71-78.

Результаты интеллектуальной деятельности по теме диссертации:

1. Программа для численного решения уравнений магнитной газовой динамики в трехмерной постановке на суперЭВМ, свидетельство 2016617832 от 14 июля 2016 г.

2. Программа для моделирования динамики трехмерных астрофизических газовых объектов, свидетельство 2013611678 от 19 апреля 2013 г.

3. Программа для решения нестационарных задач акустики в трехмерной постановке на гибридных суперЭВМ, свидетельство 2012618663 от 21 сентября 2012 г.

4. Программный пакет для решения задач гравитационной газовой динамики PEGAS, свидетельство 2012617347 от 15 июня 2012 г.