



Heterogeneous computing systems in problems of modeling filaments formation and pre-stellar objects

Boris Rybakin*, Valery Goryachev**

* Dep. of Gas and Wave Dynamics, MSU, ** Dep. of Mathematics, TvSTU

Столкновения молекулярных облаков и зарождение звезд

Целью нашей работы является анализ результатов параллельного численного моделирования соударения молекулярных облаков при лобовом ударе с учетом вращения МО при встречном движении.

Изучение динамики молекулярных облаков (МО) – огромных скоплений газа в межзвездной среде (МЗС) важно для объяснения изменений во Вселенной, в первую очередь для понимания процессов звездообразования. Моделирование таких процессов играет важную роль в изучении эволюции галактик и многообразия туманностей, сопровождающихся диссипативным взаимодействием турбулентных, тепловых и магнитных полей межзвездного вещества.



Пионерское исследование численных расчетов столкновений облаков с облаками (ССС) было выполнено Habe & Ohta (1992). One can find a last results of CCC simulation "Massive Star Formation Triggered by Collisions of Molecular Clouds" in presentation of Torii, at all (Nagoya Univ., 2019). Динамические процессы в молекулярных облаках с вращением только начинают изучаться, вопрос о том, какую роль играет вращение в эволюции молекулярных облаков и создании дозвездных зон, остается открытым.



Одно недавнее исследование вращения и структуры спирального молекулярного облака G052.24 + 00.74 представлено в Guang-Xing Li, F. Wyrowski, K Menten "Revealing a spiral-shaped molecular cloud in our galaxy: Cloud fragmentation under rotation and gravity". *A&A*, 598, A96, 1-15, (2017)

Нестационарное движение газа описываются системой уравнений Эйлера, которые представляют собой законы сохранения массы, импульса и энергии.



$$\begin{split} \frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t} + \frac{\partial \boldsymbol{F}_i}{\partial x_i} &= 0 ,\\ \boldsymbol{U} = (\rho, \rho u_i, E)^T \quad \text{-vector of conservative variables,} \\ \boldsymbol{F}(\boldsymbol{U})_i &= \left(\rho u_i, \ \rho u_i u_j + P \delta_{ij} u^j, \ u_i E + P \delta_{ij} u^j\right)^T \\ \boldsymbol{E} &= \rho \left(\frac{1}{2} u^i u_j + \frac{P}{(\gamma - 1)\rho}\right) \text{- a full energy,} \end{split}$$

Here ρ is the mass density, u = is the velocity vector. The total energy density *e* and gas pressure *P* are related through the ideal gas closure, where adiabatic index - $\gamma = c_p / c_v$ is equal to 5/3.

Было проведено моделирование соударения для МО в областях десять и сорок парсек. Расчетная сетка представляет собой куб 1024^3 для всех случаев моделирования столкновений МО без закрутки и с вращением облаков.

Для этого использован собственный код с распараллеливанием на основе уравнений Эйлера с использованием сеток высокой детализации.

Начальные условия при моделировании соударения



MC1 Johansson, E. & Ziegler, U., 2011. $\rho(r) = \rho_{ism} + \frac{\rho_{cl} - \rho_{ism}}{\sqrt{2.718}}$

$$\chi = \frac{\rho_{cl}}{\rho_{ism}} \qquad \qquad l + \left(\frac{r}{R_{cl}}\right)$$

MC2 Pittard, J.M. at al. 2009.

 $\rho(r) = \rho_{ism}\left(\chi + \frac{\alpha}{\alpha + l}(l - \chi)\right)$ $\alpha = exp\left\{ min\left[20.0, 10 \cdot \left(\left(\frac{r}{R_{cl}} \right)^2 - 1 \right) \right] \right\}$

Сценарии столкновения облаков, реализованные в исследовании

В численном эксперименте использовались четыре варианта взаимодействия:

Оси вращения облаков совпадали с направлением удара.

- 1. лобовое столкновение без вращения;
- 2. воздействие не вращающегося облака на вращающееся;
- 3. облака, сталкивающиеся с вращением в одном направлении;
- 4. взаимное проникновение облаков со встречным вращением.

Тестовая задача для гравитационного потенциала



В проведенном тесте мы моделировали гравитационный коллапс газового объема, повторяя исходные данные о распределении плотности вещества центрально-конденсированного шара радиуса R в виде следующей функции.

$$\rho(r) = \begin{cases} \frac{\rho_c}{1 + (r/r_c)^2} & \text{if } r \le R\\ 0 & \text{if } r > R \end{cases}$$

$$\Phi(r) = \begin{cases} 4\pi G \rho_c r_c^2 \left[\frac{\arctan(r/r_c)}{r/r_c} + \frac{1}{2} ln \left(\frac{1 + (r/r_c)^2}{1 + (R/r_c)^2} \right) - 1 \right] & \text{if } r \le R \\ -4\pi G \rho_c \frac{r_c^3}{r} \left[R/r_c - \arctan(R/r_c) \right] & \text{if } r > R \end{cases}$$

$$\nabla \Phi(r) = \frac{GM(r)}{r^2} = \begin{cases} 4\pi G\rho_c \frac{r_c^3}{r^2} \left[r/r^c - \arctan(r/r_c) \right] & \text{if } r \le R \\ r^3 = r^3 = r^3 \end{cases}$$

 $r^{2} \qquad \left[-4\pi G\rho_{c}\frac{r_{c}^{2}}{r^{2}}\left[R/r_{c}-\arctan(R/r_{c})\right] \qquad \text{if} \quad r > R$

Stone J.M., Norman M.L. ZEUS-2D: A Radiation Magnetnohydrodynamics Code for Astrophysical Flows in Two Space Dimensions. I: The Hydrodynamic Algorithms and Tests. The Astrophysical Journal Supplement Series, 80, 753-790 (1992).

Поверхность гравитационного потенциала и некоторая изоденса в $\nabla \Phi(r)$ расчете с использованием сгущения сетки до пятого уровня.

В случае расчета гравитационного потенциала использовались пять уровней уточняющей сетки (AMR) для более точного моделирования эволюции вещества вблизи центра моделируемой сферической области. В решении выполнено уменьшение размера ячеек и повышение точности в 32 раза. Для балансировки нагрузки, вычисления гравитационного потенциала было перенесено на GPU. Уравнения Эйлера расчитывались на обычных процессорах. Гравитационный потенциал и коллапс — численная реализация и распараллеливание

На исходной грубой сетке итерации проводились до тех пор, пока не выполнялся критерий сходимости для грубой вложенной сетки. Затем осуществлялся переход на сетку второго уровня с помощью процедуры CoarseToFine. Далее процедура с удвоением числа разбиений узлов сетки повторялась до получения результатов на сетках пятого уровня. На самой грубой сетке было выполнено 12502 итерации, на сетке второго уровня — 8131 итерация, на третьем уровне — 2311 итераций, на четвертом уровне — 1874 итерации, на пятом уровне — 1665 итераций. После расчетов был осуществлен переход на сетку первого уровня с учетом всех расчетов. На 5-м уровне достигнута остаточная точность е=9,99418.10-7, что превышает заданную. Таким образом, было показано, что численное решение практически совпадает с аналитическим решением, описываемым формулами из Stone J.M., Norman M.L.

Для построения эффективного алгоритма распараллеливания на CPU и GPU необходимо оптимизировать процессы обмена данными между процессорами для расчета уравнений Эйлера и гравитационного потенциала на каждом временном шаге.



Относительное ускорение вычислений на GPU по сравнении с CPU.

Для выбора эффективного решения были проведены тестовые расчеты полученные при распараллеливании с использованием OpenACC, по сравнению с OpenMP. Показаны результаты ускорения вычислений на графическом процессоре NVIDIA GeForce GTX 980 Ti, по сравнению с результатами, полученными на процессоре Intel Xeon E5 2620 с использованием 6 ядер (12 потоков).

В представленном моделировании образование новых протозвездных систем начинается при крупномасштабных сверхзвуковых сжатиях в зоне соударения МО. Согласно сценариям лобового столкновения, противоположно движущиеся облака МС1 и МС2 разных масс, размеров и распределения плотности сталкиваются друг с другом со скоростью набегания 5,32 км с-1, вращаясь в противоположных направлениях. Расчеты проведены с использованием предположений о диаметрах изначально сферических облаков МС1 - 13,44 пк и МС2 - 13,76 пк. Массы облаков для этого сценария были приняты равными 694 М⊙ и 675 М⊙, что соответствует характеристикам гигантских молекулярных облаков (ГМО). Контраст плотности - отношение χ = ρ_{cl}/ρ_{ism}, обозначаемое значениями между центром МО и значением в МЗС, принималось равным 500 в ядрах облаков в начальный момент столкновения. Плотность окружающего газа в M3C принималась р_{іsm}=1×10⁻²⁵ g⋅cm⁻³. В настоящей работе представлены результаты соударения и взаимного проникновения в расчетном пространственном объеме 40×40×40 пк. Уравнения Эйлера решались на сетках высокого разрешения в диапазоне 256³ - 1024³ узлов с использованием схем типа TVD и реализации адаптивного решателя Роу. Численная реализация была выполнена с использованием собственного кода, разработанного для высокопроизводительных компьютерных систем. Программа создана с использованием Coarray Fortran и AMR для уточнения сеток в зонах с большими градиентами. Учитывая возможности, которые предоставляют современные процессоры и графические процессоры, в программу были внесены изменения для повышения производительности расчетов. Это целесообразно при реализации

многосеточных алгоритмов, которые широко используются при решении задач гравитационной газовой динамики.

Расчет проведен для процессоров Xeon E2620 и Xeon E5 2630 Ivy Bridge. Эффективность распараллеливания оценивалась с помощью программы Intel VTune Amplifier XE. Для реализации параллельных вычислений были апробированы новые отмеченные технологии для ЦП. Некоторые подпрограммы, используемые в тестируемом числовом коде, были выполнены с использованием GPU и CUDA..

Cloud's Shape Change before and after Impact Exposure in Two CCC scenarios



На рисунках показано, как происходит локальное перераспределение набегающих газовых потоков в области ядра столкновения. Цветовая кодировка RGB-изображений распределения поля скоростей показывает локальное изменение величины компоненты скорости Ux. Видно, как локальная закрутка взаимопроникающих газовых струй влияет на структуру образовавшихся нитей в области удара. При этом образуются сгустки (clamps). Они группируются в концентрические кольцевые структуры. При ударе вращающихся облаков образуются вытянутые в направлении вращения нити пересжатого газа с периодическими включениями сгустков. Видно, как увеличивается размер новообразования облаков, диаметральные размеры возможных дозвездных областей увеличиваются примерно в полтора раза в сравниваемых вариантах двух сценариев. Можно отметить, что в случае а) столкновения облаков без вращения МО1 попадает в область МО2. При движении по сценарию б) - при встречном движении вращающихся облаков наблюдается обратная картина - облако МС1 наползает на облако МС2. Это достаточно показательный эффект резкого изменения структуры ССС по разным сценариям.

Isodense (χ = 5000) with map distribution of axial velocity component and contours of flow velocity in meridional plane of the calculation domain for MCs collision without rotation (a) and for the case of rotated clouds (b) in the CCC evolution from t = 1.0 to 2.0 Myr.

Internal Vortex Structure of Filaments Originated in Rotated MCs Core



Осциллирующие линии тока и тангенциальные траектории над фрагментированными сгустками в диапазоне 100 < χ < 70000 при взаимном проникновении вращающихся МО в момент времени t = 1.5 Myr.

При взаимном встречном проникновении набегающих и вращающихся облаков наблюдается волновое перераспределение и смещение сгустков повышенной плотности по спиральным траекториям. Пульсации плотности с колебанием локальных пятен сжатия внутри линзовидного ядра вызываются локальными неустойчивостями между образующимися сгустками. Тангенциальные линии тока, показанные на рисунке, наиболее интенсивно деформируются в областях вокруг газовых сгустков и точечных пучков нитей с максимальными значениями плотности вещества.

MCs Collision with Rotation



MC1 20 MC2 : Пространственное изменение формы двух сталкивающихся MC показано на рисунке, где зародившиеся протоядра и зародыши филаментов показаны во время столкновения в соответствии со сценариями столкновения с вращением в одном направлении (с) и в противоположном направлении (d).

Пучки образовавшихся сгустков от сталкивающихся потоков фрагментируются и перераспределяются по кольцам вокруг оси удара. Газовые потоки движутся из зоны центрального застойного пятна к периферии с пространственным повторением сжимаемости вещества в кольцеобразных образованиях.



Pathlines flowing from the impact zone of core formations ($\chi = 10000$) for oncoming rotated MC's collision.

Evolution of Density Contrast Fields in Head-on CCC with Rotation



MC1 \mathfrak{O} MC2 : Isodensity $\chi = 4000 - 25000$ and contours of tangential velocity in the impact zone of MC's for collision with counter rotation of clouds at first stage of evolution.

Изменение углового момента облаков, вращающихся в противоположном направлении, приводит к возникновению периферических нитей во внешних слоях на первой стадии столкновения. По мере развития процесса взаимного проникновения облаков распределение тангенциальной скорости впереди и позади поверхности торможения газовых потоков претерпевает сложную трансформацию в радиальном и осевом направлениях.

Резкие пространственные изменения полей скорости и плотности приводят к спиралевидному изменению переноса газа с выделением тороидальных зон с пересжатием включений вещества в ядре столкновения.

Different level of Iso-densities (separately highlighted in the figure) and tangential velocity contours on them.

Correlation between Density Contrast and Vorticity Field in CCC



Contours of rotation Ω_x component on magnitude iso-surface $|\Omega|=0.5$ in vortex field for case of clouds mutual penetration at a transitional interval of evolution from t = 1.5 to 2.0 Myr.

Визуальный анализ распределения завихренности в области столкновения показывает, что изменения плотности волны провоцируются неустойчивостью Кельвина - Гельмгольца и периодическим изменением направления проникновения газовых струй через застойную поверхность, где скорость стремится к нулевому значению при столкновении потоков и соответствующих распределения плотности вблизи этой поверхности, которые быстро меняются. Неустойчивость ускоряет генерацию вихрей внутри облачного образования, что находит отражение в гофрированных формах слоев ядра с газообразными включениями сверхплотного газа.

Rotation and Divergent Fields in CCC with Counter Rotation



Прогноз образования возможных предзвездных зон нуклеации осуществлялся на основе поиска пространственно ограниченных пересжатых сгустков, где выполняются условия Джинса для консолидации газового вещества в малых объемах и осуществляются благоприятные условия для газообразования. образование стоков, которые могут быть триггером включения механизма самогравитации по методам SPH [Hubber D. at al., Astronomy & Astrophysics, 529].

Начиная с момента времени t=1.395 млн. лет достигается максимальная плотность протозвездных сгустков и отрицательная дивергенция скорости и ускорения – благоприятствующая образованию новых звездных систем.

Fields of velocity divergence div (U) = -1 and -5 and iso-surfaces of density contrast ($\chi > 30000$ at t = 1395)

Change of Density Contrast in Clumps and Filaments with Helicity Contours in CCC with Rotation



Распределение спиральных $H = \boldsymbol{U} \cdot (\nabla imes \boldsymbol{U})$ для контуров высокоградиентных областей коррелирует с зоной увеличения локальной завихренности потока и отрицательным значением дивергенции скоростей. divU увеличивается. Эта ситуация является индикатором возможного местоположения протозвездных газовых сгустков и волокон, где возможна самогравитация и может начаться звездообразование. Расчеты показали, что возможность образования зон с большей плотностью при столкновении вращающихся МО может быть больше, чем в аналогичных местах возникновения облачных остатков при неустойчивости при столкновении без вращения.

Helicity contours in meridional section of CCC domain and contrast density χ =20000 distribution of fragmented clumps at a transitional time interval of collision evolution from t = 1.5 to 2.0 Myr

Summary

- Технология OpenACC была протестирована на задачах формирования гравитационносвязанных областей, возникающих при моделировании столкновений облако-облако.
- Моделирование вращающихся сталкивающихся молекулярных облаков позволило уточнить детали происхождения турбулизации и формоизменения структур внутри остатков МО, в сгустках и филаментах.
- Численный эксперимент показал, как ударное взаимодействие инициирует турбулизацию, провоцирует возникновение нитей и сгустков, а также трансформацию возникающих структур и как вращение может влиять на этот процесс.
- Проведенное моделирование показало, что ударное взаимодействие между сталкивающимися MC провоцируется и усиливается через неустойчивости KH и NTS. Выявлены последствия влияния неустойчивости на изменение формы и распределения остаточных сгустков и нитей.
- В численном эксперименте были получены реалистичные физические поля для ГМО. Было показано, что уровень порога плотности 10⁻¹⁹ g•cm⁻³ внутрь образовавшихся сгустков и нитей (предшественников зарождения звезд) можно попасть в процессе сжимаемости при взаимном проникновении облаков.
- Моделирование столкновения ГМО выявило условия достижения критической плотности в фрагментированных сгустках и филаментах, соответствующих дозвездной консолидации вещества МЗС.

Thank you !

Acknowledgements. This work supported by RFBR Grant 19-29-09070 mk.



In presented modeling new MCs formation starts in large-scale supersonic compressions in impact zone between MCs. According head-on collision scenarios oppositely moving clouds MC₁ and MC₂ of different masses, sizes, and density distribution collide with each other at oncoming velocity of 5.32 km s⁻¹, spinning with angular velocity W = 2.6×10^{-15} s⁻¹ in the case with clouds rotation. The calculations are carried out using suppose about diameters of initially spherical clouds MC₁ - 13.44 pc and MC₂ - 13.76 pc. The cloud masses for this scenario were taken equal to 694 M_☉ and 675 M_☉, which corresponds to giant molecular clouds (GMC) characteristics. Density contrast - the ratio $\chi = \rho_{cl}/\rho_{ism}$ denoted by the values between of the MCs center and value in ISM, was taken equal to 500 in clouds cores at the initial moment of collision. The ambient gas density in ISM was taken as $\rho_{ism}=1 \times 10^{-25}$ g·cm⁻³. The present study considers the collision and mutual penetration with supersonic speeds of molecular clouds in computing spatial volume 40×40×40 pc.

General equations were solved on high refinement grids in the range 256³ - 1024³ nodes, using the schemes of TVD type and implementing Row's adaptive solver. The numerical realization was done using in-house code developed for high-performance computer systems. The program has been created using Coarray Fortran and patch AMR refinement of grids in zones with large gradients of main variables. When implementing the author's computational code, the problems of substantial improvement of the adopted computer architecture were taken into account. Given the capabilities, which modern processors and GPUs provide, changes have been made to the program to improve performance and time realization of solution. Programmatic changes made it possible to smooth out the problem of the influence of the memory cache size in computational threads. Cache sizes for each thread, as well as the overhead of data transfer in the implementation of calculations, began to matter less than data localization. It's advisable in the implementation of multigrid algorithms, which are widely used in solving problems of gravitational gas dynamics.

Calculation is carried out for Xeon E2630 and Xeon E5 2650 Ivy Bridge processors used. The parallelization efficiency was observed using the Intel VTune Amplifier XE program. To realize parallel computations, new noted technologies for CPU were probated. Some routines used in tested numerical code were performed using GPU and CUDA implementation.

Summary

- The OpenACC technology was tested on the problems of formation of gravitationally bound regions, which arise when modeling cloud-cloud collisions.
- Simulation of rotated colliding molecular clouds made it possible to clarify the details of the origin of turbulization and shape morphing of structures inside MCs remnants, in clumps and filaments.
- A numerical experiment showed how shock interaction initiates turbulization, trigger the origin of filaments and clumps, as well as on the transformation of emerging structures and how rotation can affect this process.
- The performed simulation revealed that the shock interplay between colliding MCs is provoked and magnified via KH and NTS Instabilities. The consequences of the influence of the instability on the change in the shape and distribution of remnant clumps and filaments was revealed.
- Realistic physical fields for Giant Molecular Clouds were obtained in the numerical experiment. It was shown that level of density threshold 10⁻¹⁹ g•cm⁻³ inside formed clumps and filaments (precursors in stars nucleation) can be reached in process of compressibility during mutual penetration of clouds.
- The simulation of the GMC collision revealed the conditions for reaching the critical density in fragmented clumps and filaments corresponding to the prestellar consolidation of ISM matter.