

*Численное моделирование
обжата reacting gas
deuterium*

И. Б. Палымский

palymsky@hnet.ru

В двумерной постановке рассматривается задача о движении газового облака заряженных частиц (ядер дейтерия) под действием центральной силы (аналога силы тяжести) и силы кулоновского отталкивания.

$$m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = \sum_{i \neq j} \frac{Gr \cdot m_i m_j - Cu \cdot q_i q_j}{r_{i,j}^{1.5}} (x_j - x_i),$$

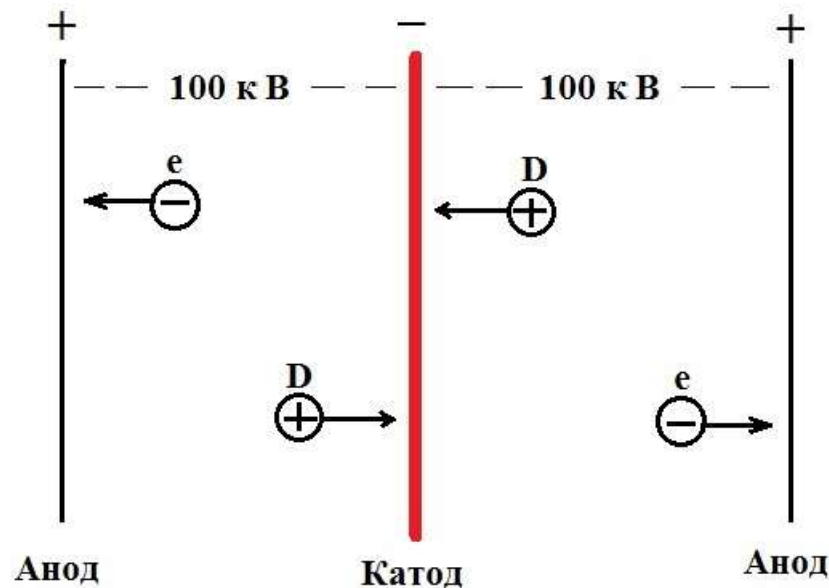
$$m_i \frac{d^2 y_i}{dt^2} = \sum_{i \neq j} \frac{Gr \cdot m_i m_j - Cu \cdot q_i q_j}{r_{i,j}^{1.5}} (y_j - y_i),$$

$$r_{i,j} = ((x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2 + \varepsilon)^{0.5}, \quad i, j = 1, 2 \dots N,$$

$$\varepsilon \ll 1$$

Связь с практическими задачами

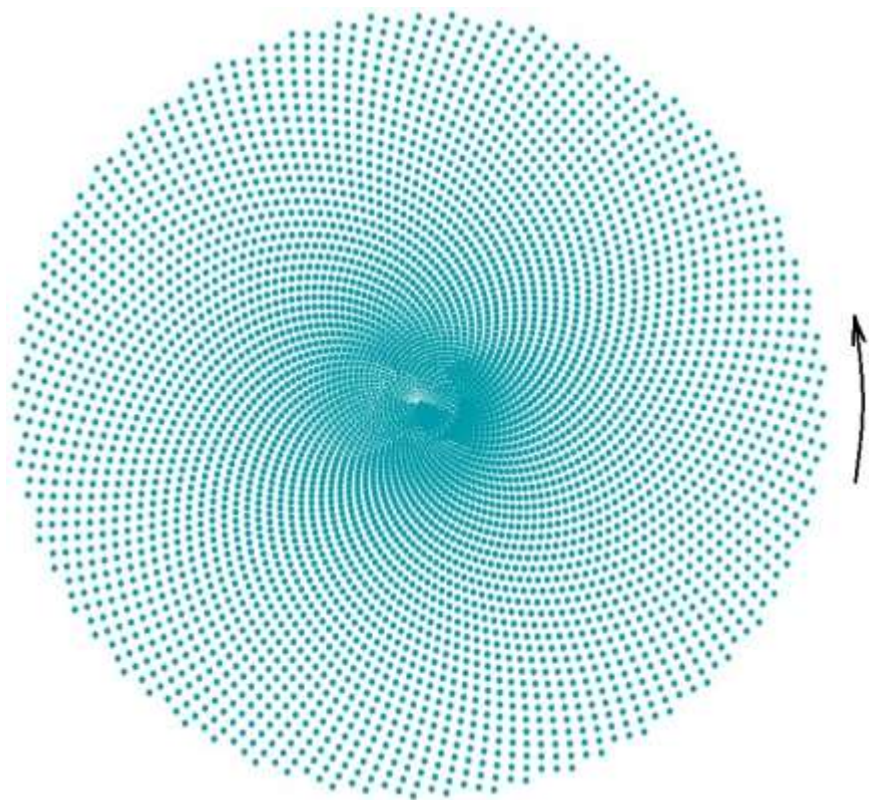
1. После формирования сходящейся к центру кумулятивной ударной волны, ситуация представляется аналогичной наблюдаемой при инерционном лазерном синтезе, где ударная волна инициируется лазерным излучением.
2. Искусственно введенная центральная сила аналогична действию внешнего электростатического поля при инерционном электростатическом удержании.



Обезразмеривание и постановка задачи

Везде $Gr = 1$, $Cu = 1.3$, $m = 2$ (DT) и 3 (T), $q = 1$

В начальный момент времени газовый диск вращается как твердое тело, диаметр и угловая скорость равны 1



Численный метод Чехарда (leap-frog)

Шаг 1. Учитывая все парные взаимодействия, вычисляем действующие на частицы силы:

$$F_{xi} = \sum_{i \neq j} \frac{Gr \cdot m_i m_j - Cu \cdot q_i q_j}{r_{i,j}^{1.5}} (x_j - x_i), \quad F_{yi} = \sum_{i \neq j} \frac{Gr \cdot m_i m_j - Cu \cdot q_i q_j}{r_{i,j}^{1.5}} (y_j - y_i),$$

$$r_{i,j} = ((x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2 + \varepsilon)^{0.5}, \quad \vec{F}_i = (F_{xi}, F_{yi}), \quad i, j = 1, 2, \dots, N.$$

Шаг 2. На полуцелых шагах по времени вычисляем новые значения скорости:

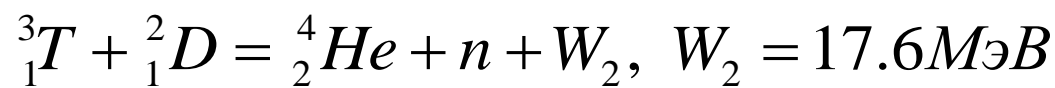
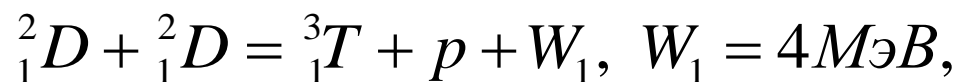
$$\vec{v}_i(t + \tau/2) = \vec{v}_i(t - \tau/2) + \tau \cdot \vec{F}_i(t) / m_i, \quad \vec{v}_i = (u_i, v_i).$$

Шаг 3. На целых шагах по времени определяем новые положения частиц:

$$\vec{r}_i(t + \tau) = \vec{r}_i(t) + \tau \cdot \vec{v}_i(t + \tau/2), \quad \vec{r}_i = (x_i, y_i).$$

D-D и T-D реакции

В расчетах учитываются реакции двух типов:



Законы сохранения энергии и импульса выполнены, а дополнительная степень свободы определена так, чтобы энергия более легкой частицы была равна $0.8 \cdot W_2$.

Реакции наиболее интенсивны при энергии 130 кэВ (0.13 МэВ), что соответствует температуре 10^9 К

(значение 0.13 МэВ принято за потенциальный барьер Pb)

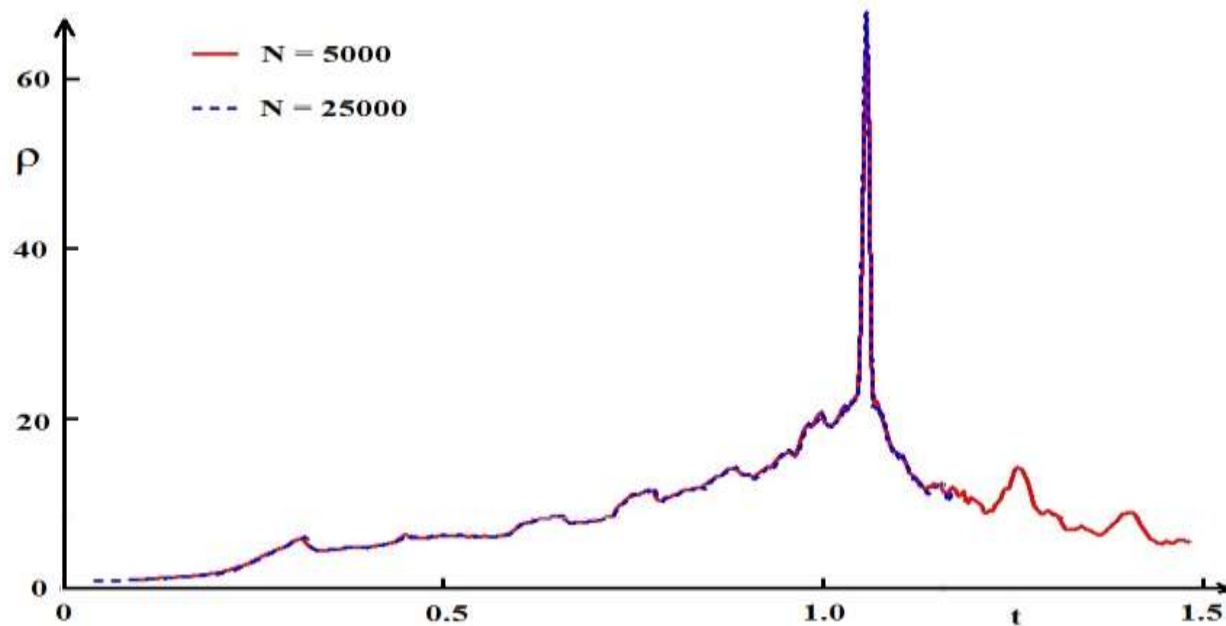
$$W_1 = 30.8 \cdot Pb \quad \text{и} \quad W_2 = 135.4 \cdot Pb$$

$$Pb = Cu \frac{er \cdot er_1}{er - er_1}, \quad er = 10^{-4}, \quad er_1 = 10^{-5}$$

Здесь er и er_1 - масштаб слияния и минимальный масштаб.

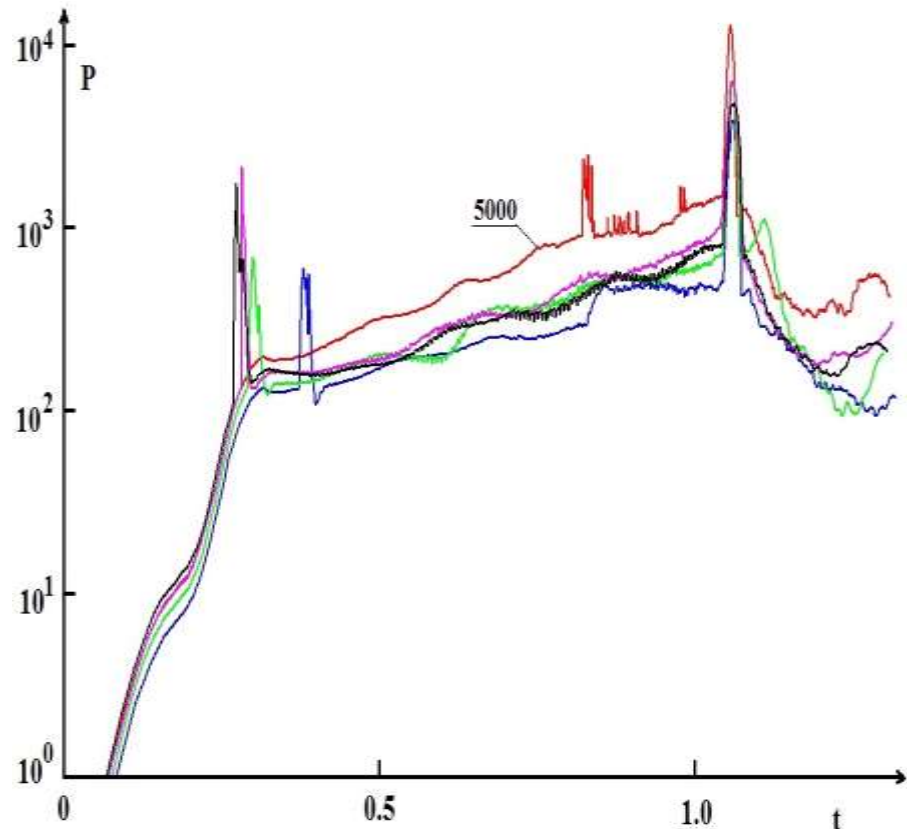
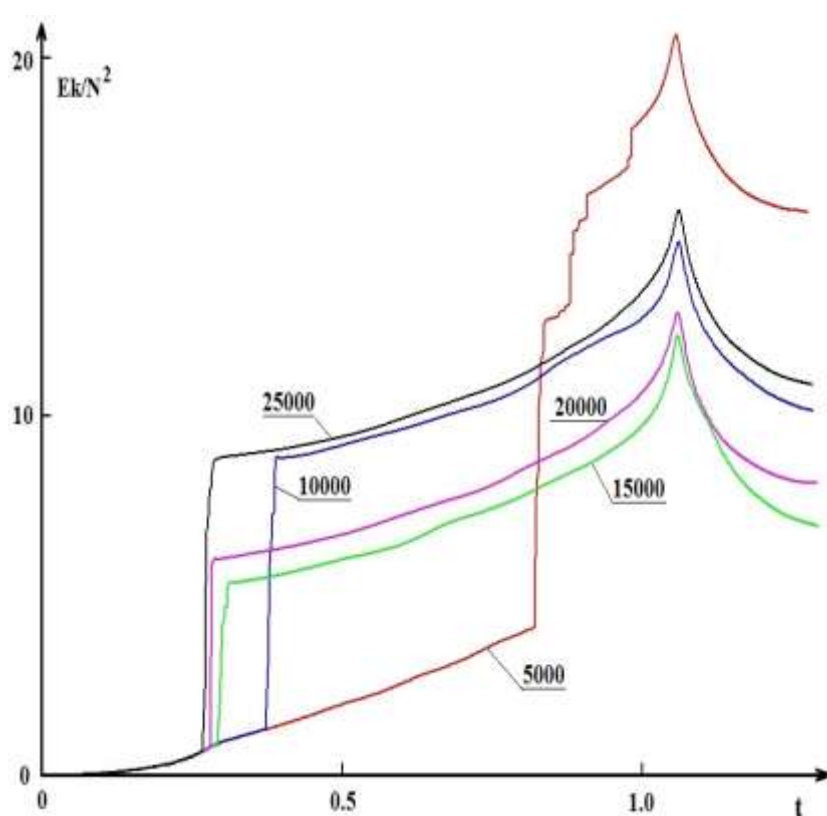
Тестовые расчеты (без учета реакций)

В качестве теста проведены расчеты с различным числом частиц $N = 5000, 10000, 15000, 20000$ и 25000 . Наблюдается хорошая масштабируемость для радиуса газового диска, нормированного значения кинетической энергии (суммарная кинетическая энергия деленная на N^2), давления, температуры и плотности в центре диска.



Расчеты с учетом реакций

При варьировании числа частиц N существенно изменяются кинетическая энергия и радиус газового диска, а давление, плотность и температура в центре газового диска изменяются значительно слабее.



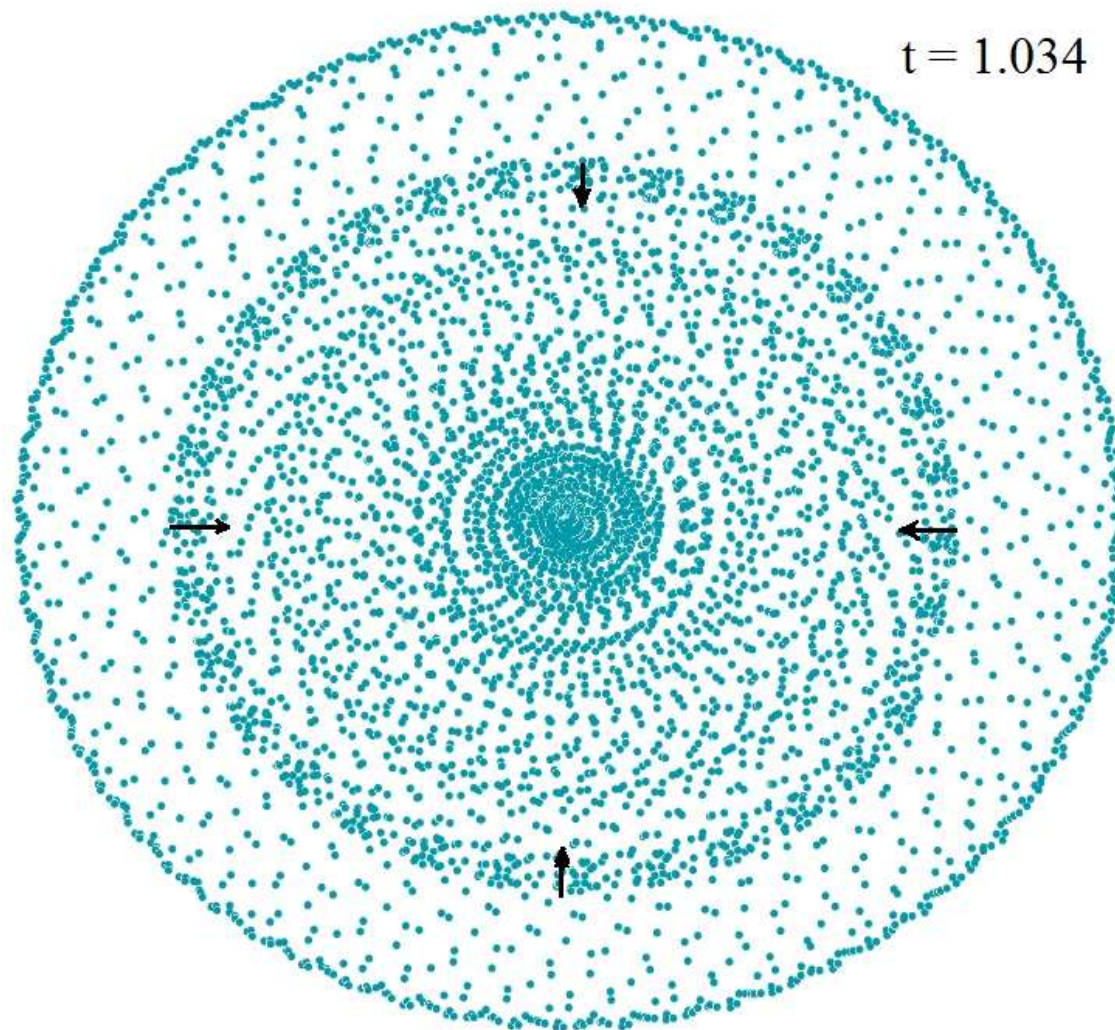
Развитие течения при $N = 5000$

При $N = 5000$ течение развивается следующим образом:

1. Под действием притягивающей центральной силы газовое облако стягивается к центру, в противовес этому из центра формируется расходящаяся ударная волна относительно слабой интенсивности (при $t = 0.34$).
2. После достижения фронтом расходящейся ударной волны внешней границы газового облака, формируется сходящаяся к центру ударная волна высокой интенсивности, обеспечивающая суммарное повышение давления в 40000 раз, плотности в 60 и температуры в 750 раз ($t = 1.1$). Кумуляция энергии в центральной части газового облака сопровождается реакциями.
3. Протекание термоядерных реакций приводит к значительному (примерно 20-кратному) росту кинетической энергии и как следствие рассеянию газового облака.

Сходящаяся ударная волна

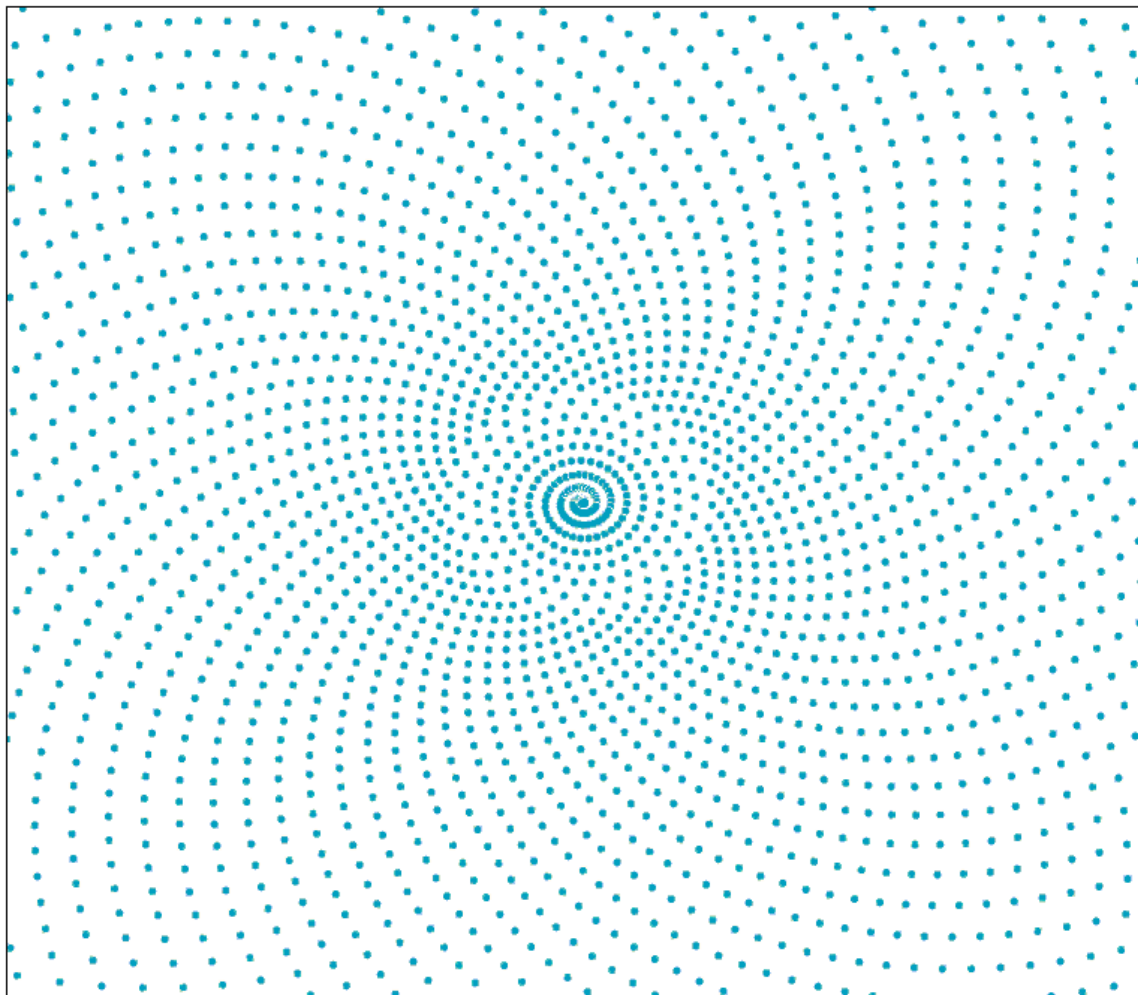
$t = 1.034$



- - He
- - T
- - D
- - p или n

Течение при $Gr = 1$, $Cu = 1.3$ с учетом реакций

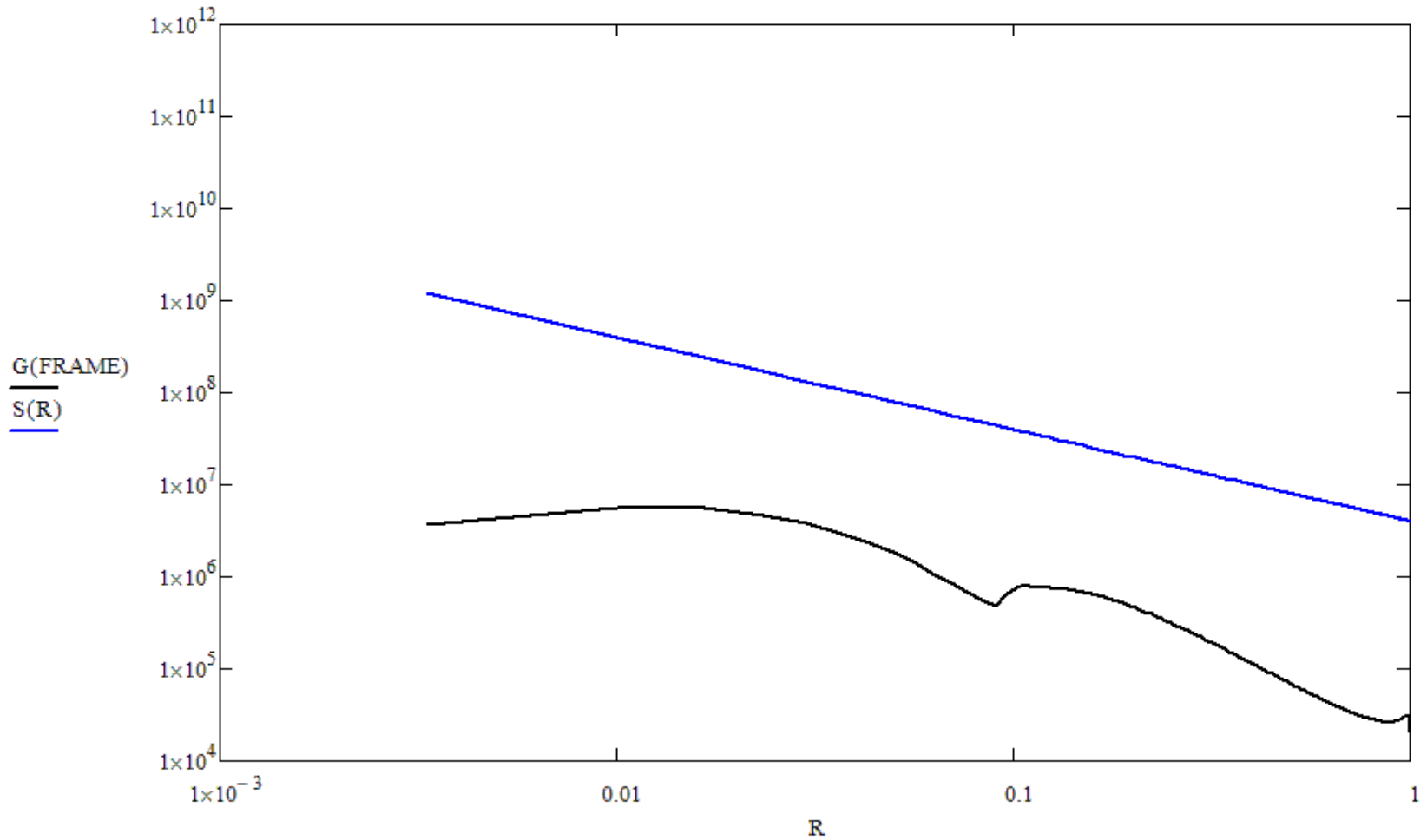
$T_{FRAME} = 0.109$



$(G_x(FRAME), G_y(FRAME), G_k(FRAME))$

Осредненное по углу давление как функция времени

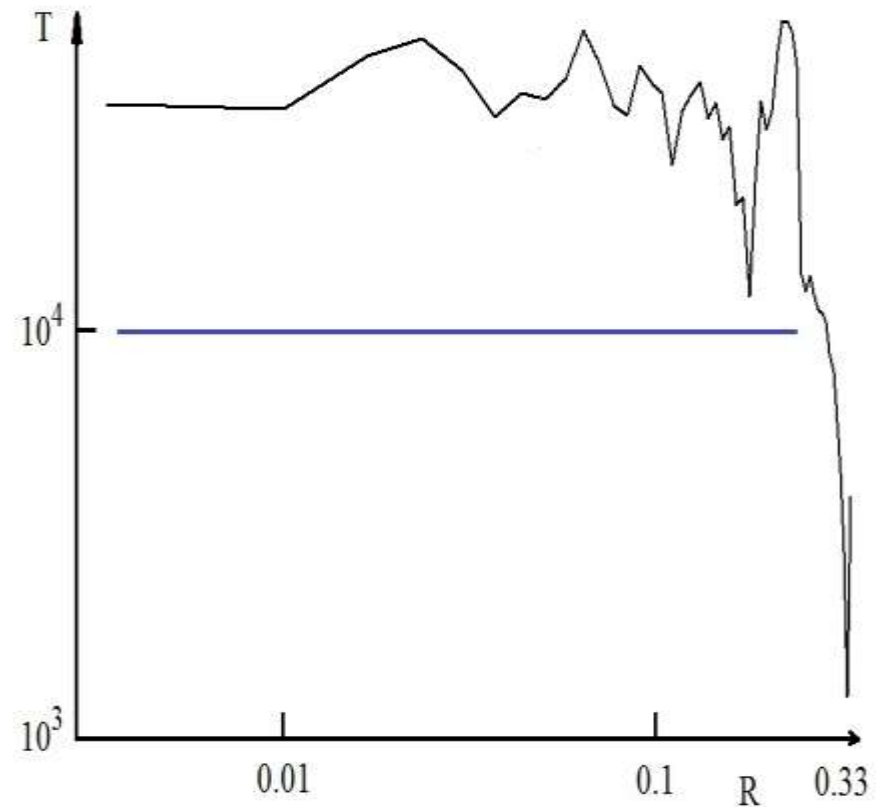
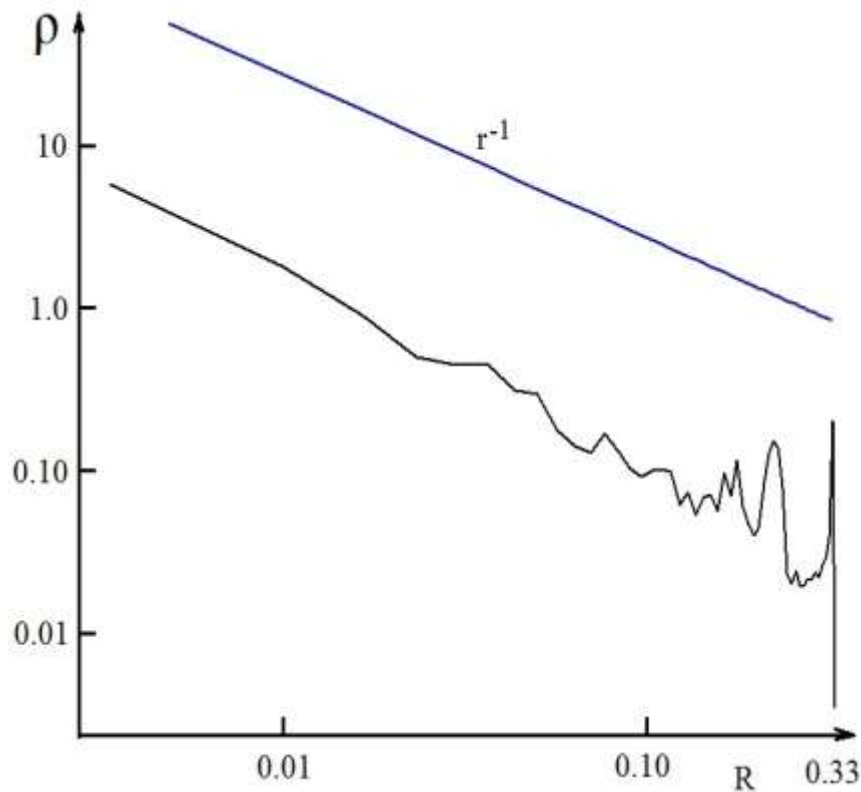
$T_{\text{FRAME}} = 0.089$



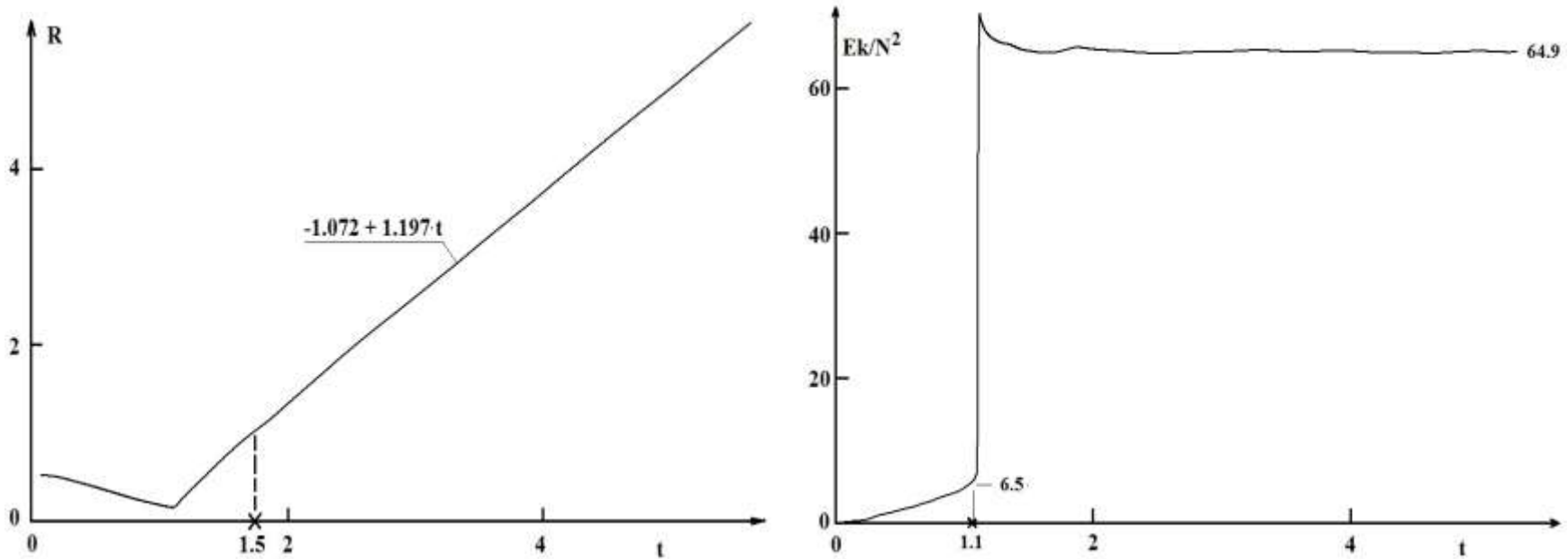
Приближенные степенные законы для давления, плотности и температуры

$$\rho \sim r^{-1}, \quad p \sim r^{-1}, \quad T \sim \text{const}$$

$$\Gamma = 1.034$$



Эффективный радиус и нормированная кинетическая энергия как функции времени



Газовый диск расширяется с постоянной скоростью $v \approx 1.2$, при этом величина потенциальной энергии порядка 10% от полной энергии системы и асимптотически

$$\rho \approx 0.44 \cdot N \cdot t^{-2}, \quad p \approx 9.6 \cdot N^2 \cdot t^{-2}, \quad T = \text{const}$$

Аппаратные и программные средства

1. 8-ми ядерный CPU AMD FX8350 4.3 ГГц (OpenMP)

2. Графический ускоритель NVIDIA GeForce GTS 570
(480 ядер CUDA) (OpenACC)

PGI fortran версии 11.7, 12.8)

CPU

```
! Velocity  
!$omp parallel do  
do I = 1,N  
Ux(I) = Ux(I) + T*Fx(I)  
end do  
!$omp end parallel do
```

GPU

```
! Forces between particles  
!$acc region do private(S1,Sx) cache(X,Lb,Sm) copyin(Gr) copyout(Fx)  
do I = 1,N  
S1 = 0.d0  
do J = 1,N  
if(J.ne.I) then  
Sx = X(J) - X(I)  
S1 = S1 + Gr*dbple(Sm(I)*Sm(J))*Sx  
end if  
end do  
Fx(I) = S1/dbple(Sm(I))  
end do  
!$acc end region
```

Об эффективности распараллеливания

Результаты сравнения при $N = 25000$

1CPU	8CPU	CPU + GPU
6.66 sec/step	1.53 sec/step	0.4 sec/step

1. Использование OpenMP распараллеливания на 8-ми процессорах дает ускорение в 4.4 раза,
2. Графического ускорителя – еще в 3.8 раза.

Таким образом, совместное использование CPU+GPU обеспечивает ускорение счета в 18 раз.

Выводы

В рассматриваемой постановке течение развивается согласно следующему сценарию:

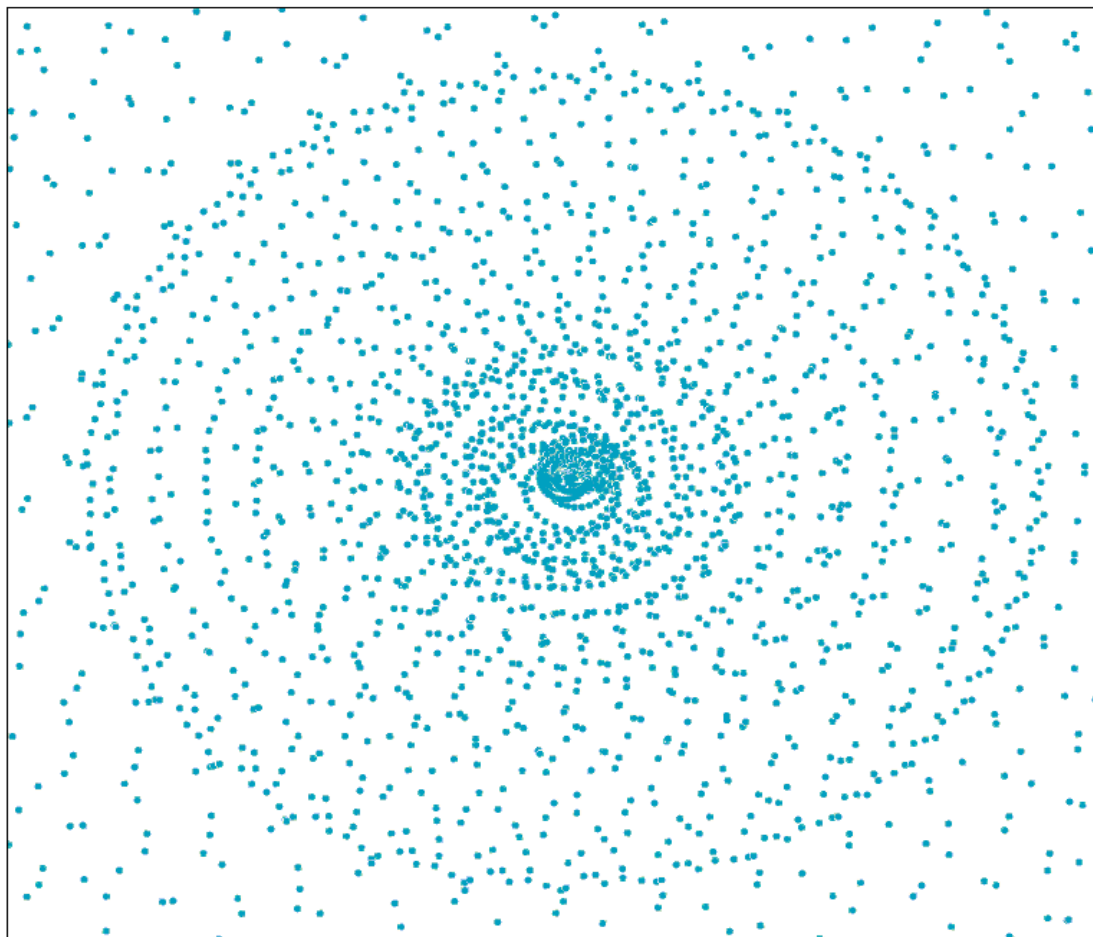
1. Под действием притягивающей центральной силы газовое облако стягивается к центру, в противовес этому из центра формируется расходящаяся ударная волна относительно слабой интенсивности (при $t = 0.34$).

2. После достижения фронтом расходящейся ударной волны внешней границы газового облака, формируется сходящаяся к центру ударная волна высокой интенсивности, обеспечивающая суммарное повышение давления в 40000 раз, плотности в 60 и температуры в 750 раз ($t = 1.1$). Кумуляция энергии в центральной части газового облака сопровождается реакциями.

3. Протекание термоядерных реакций приводит к значительному росту кинетической энергии и как следствие рассеянию газового облака.

Кумуляция энергии в центральной части газового диска при $Gr = 1$, $Cu = 1.3$ ($t = 0.916...1.07$)

$T_{FRAME} = 0.916$



$(G_x(FRAME), G_y(FRAME), G_k(FRAME))$