

# Advekční rovnice

---

- advekční (jednostranná vlnová) rovnice  $u(x, t)$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad u_t + au_x = 0$$

s počáteční podmínkou  $u(x, 0) = u_0(x)$  má řešení

$$u(x, t) = u_0(x - at)$$

- spojitou oblast nezávisle proměnných  $(x, t) \in R \times (0, \infty)$  nahradíme výpočetní sítí  $(x_j, t_n) = (j\Delta x, n\Delta t), j \in Z, n \in N_0$
- spojitou funkci  $u(x, t)$ , diskrétní síťová funkce  $u_j^n \approx u(x_j, t_n)$
- jednoduché diferenční schema

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = 0$$

- z časové vrstvy  $n$  spočítáme další časovou vrstvu  $n + 1$

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{a\Delta t}{\Delta x} (u_j^n - u_{j-1}^n)$$

# Zákony zachování

---

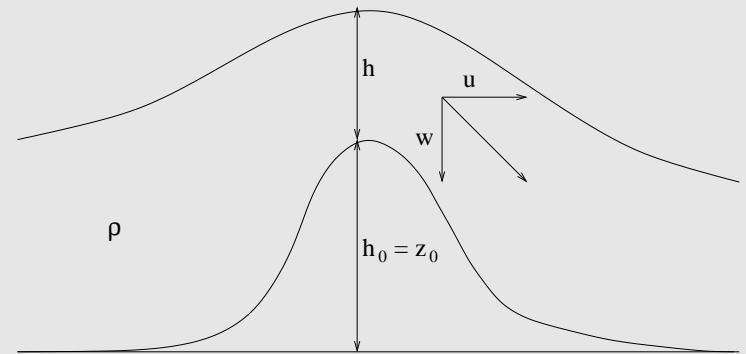
- Burgersova rovnice

$$u_t + uu_x = 0, \quad u_t + \left(\frac{u^2}{2}\right)_x = 0$$

může mít nespojité řešení

- nespojitost – rázová vlna – speciální numerické metody řešení
- obecný zákon zachování – systém  $U_t + (f(U))_x = 0$
- rovnice mělké vody

$$h_t + (hu)_x = 0$$
$$(hu)_t + \left(hu^2 + g\frac{1}{2}h^2\right)_x + ghz_{0x} = 0$$



# Složená schemata pro zákony zachování

- zákon zachování ve tvaru  $U_t + f(U)_x = 0$
- Lax-Friedrichsovo schema, difuzní, dvoukroková varianta

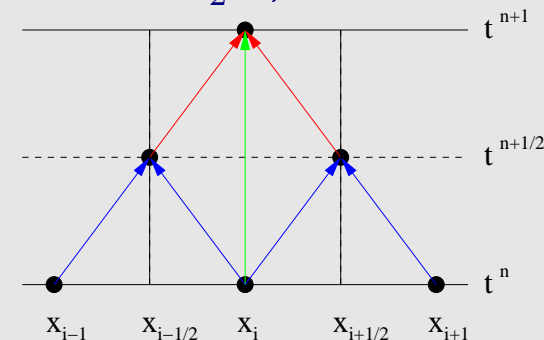
$$U_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(U_i^n + U_{i+1}^n) - \frac{\Delta t}{2 \Delta x} (f(U_{i+1}^n) - f(U_i^n))$$

- Lax-Wendroffovo schema, jednoduché toky, disperzní

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (f(U_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}) - f(U_{i-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}))$$

- stabilita a řád přesnosti

- složené schemata LW LF  $n$



# Zákony zachování ve 2D

---

- obecný systém zákonů zachování  $U(x, y, t) \quad U_t + (f(U))_x + (g(U))_y = 0$
- rovnice mělké vody ve 2D

$$\begin{aligned} h_t + (hu)_x + (hv)_y &= 0 \\ (hu)_t + \left( hu^2 + \frac{1}{2}gh^2 \right)_x + (huv)_y &= 0 \\ (hv)_t + (huv)_x + \left( hv^2 + \frac{1}{2}gh^2 \right)_y &= 0 \end{aligned}$$

- příklad – **protržení přehrady**
- příklad – **protržení přehrady na povrchu stacionární koule**
- příklad – **protržení přehrady na rovníku rotující koule**

# Předpověď počasí

---

- modely na několika úrovních s různým rozlišením – globální, regionální, lokální
- modelování atmosféry, oceánu, oblačnosti
- nejjednodušší modely atmosféry jsou založeny na rovnicích mělké vody
- potřeba vertikálního rozlišení
- simulace vlivu slunečního záření, typu zemského povrchu, mořských proudů
- propojení simulačních modelů s meteorologickým měřením
- zahrnutí zkušeností do simulací

# Eulerovy rovnice

---

- Eulerovy rovnice ve 3D

$$\begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ E \end{pmatrix}_t + \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho u v \\ \rho u w \\ u(E + p) \end{pmatrix}_x + \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho u v \\ \rho v^2 + p \\ \rho v w \\ v(E + p) \end{pmatrix}_y + \begin{pmatrix} \rho w \\ \rho u w \\ \rho v w \\ \rho w^2 + p \\ w(E + p) \end{pmatrix}_z = 0$$

a stavová rovnice ideálního plynu

$$E = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2}\rho (u^2 + v^2 + w^2)$$

- příklad – Rayleigh-Taylorova nestabilita ve 2D
- základem hydrodynamického modelování plazmatu

# Eulerian Hydrodynamical Model/1

- Euler equations for compressible fluid

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

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}^2) + \operatorname{grad} p = 0$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}(E + p)) = \operatorname{div}(\kappa \operatorname{grad} T) + \operatorname{div}(I)$$

- fluid density  $\rho$ , velocity  $\mathbf{u}$ , total energy  $E$  and pressure  $p$  given by equation of state  $p = p(\rho, \epsilon)$ , temperature  $T$ , heat conductivity  $\kappa$ , laser intensity  $I$
- conservation of mass, momentum and energy
- conservation law – possesses discontinuous solution – shock waves, contact discontinuities

## **Eulerian Hydrodynamical Model/2**

- **most important conservativity of numerical methods**
- **typically high order method produce numerical oscillations around discontinuities**
- **special methods needed**
- **available – central schemes, WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory), PPM (Piecewise Parabolic Method)**
- **computational grid is fixed in time**
- **mass flux between cells**
- **limited to fixed computational domain**



# Lagrangian Hydrodynamical Model/1

- Euler equations for compressible fluid in Lagrangian coordinates

$$\begin{aligned}\frac{d\rho}{dt} + \rho \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0, & \frac{d\mathbf{x}}{dt} &= \mathbf{u} \\ \rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} + \operatorname{grad} p &= 0 \\ \rho \frac{d\epsilon}{dt} + p \operatorname{div} \mathbf{u} &= \operatorname{div}(\kappa \operatorname{grad} T) + \operatorname{div}(I)\end{aligned}$$

- internal energy  $\epsilon = E/\rho - \mathbf{u}^2/2$
- total Lagrangian time derivatives include convective terms

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \operatorname{grad}$$

## Lagrangian Hydrodynamical Model/2

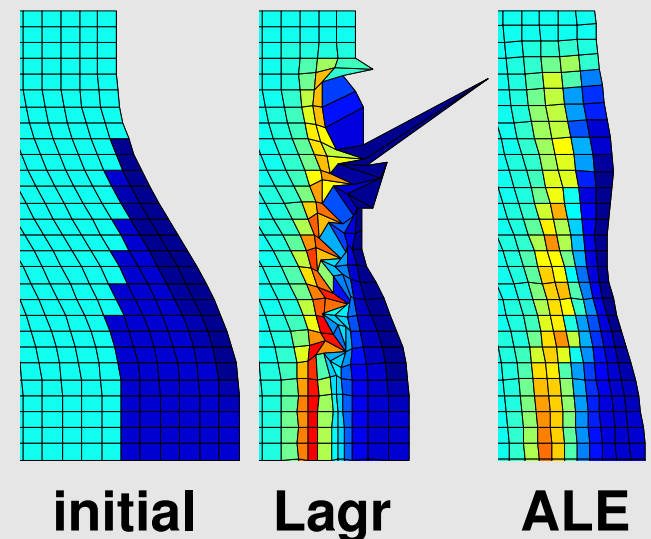
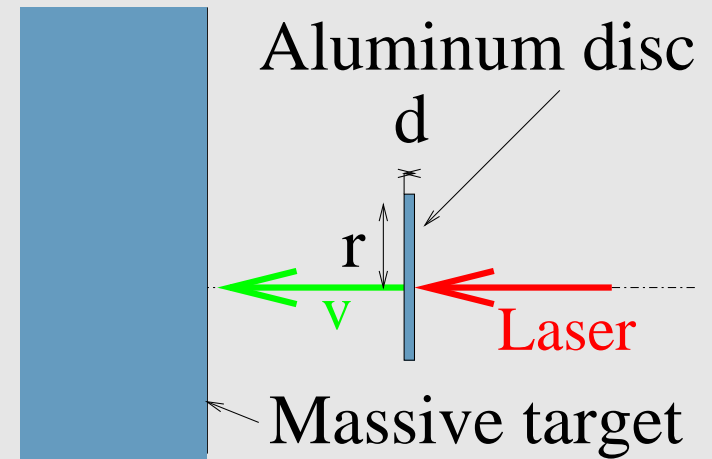
- computational grid is fixed to the fluid and **moves** with the fluid
- no mass flux between cells through edges
- computation domain changes – can be used for compression or expansion, moving boundaries
- typically used in laser plasma simulations
- moving mesh can **degenerate**

## ALE Method

- ALE – Arbitrary Lagrangian Eulerian method. Combination of Lagrangian and Eulerian methods
  - **I. Lagrangian computation** several time steps
  - **II. Rezoning** – mesh untangling and smoothing
  - **III. Remapping** – conservative interpolation of the conservative quantities from old to new, better mesh. Then, back to Lagrangian computation.
- Remapping corresponds to Eulerian part of ALE method, allows mass flux between cells.
- ALE method combines positives of both approaches – grid moves with fluid (as Lagrangian), but Eulerian part keeps it **smooth** .

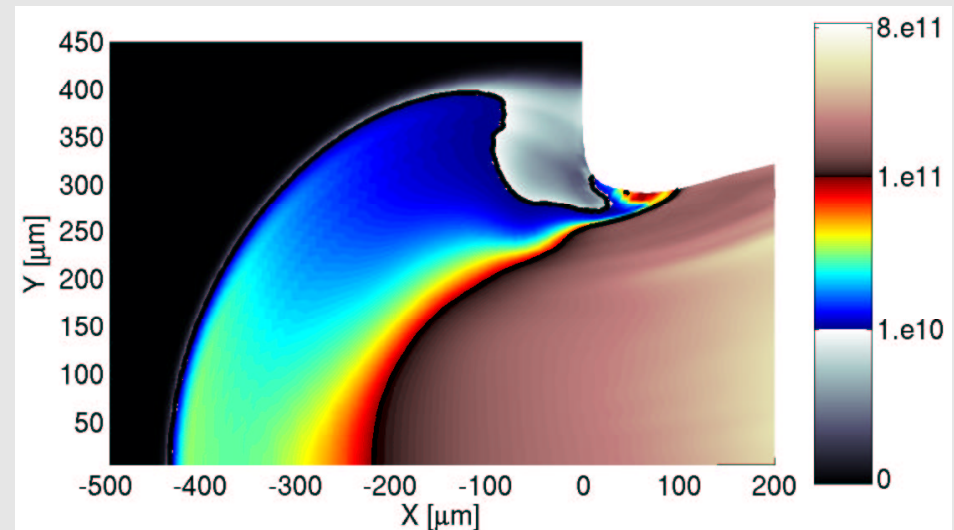
## Numerical Example – Laser Plasma

- Problem parameters similar to a part of the experiment performed on the PALS laser facility
- Disc impact – laser-irradiated Aluminum disc ablatively accelerates up to 54 km/s (for 250 J laser beam) and strikes to massive Aluminum target. The disc starts to sink into the target.
- Simulation starts in the moment of the impact. Lagrangian simulation fails very soon, ALE grid smooth.
- Density colormap of initial grid and Lagrangian and ALE grid in time 0.5 ns.

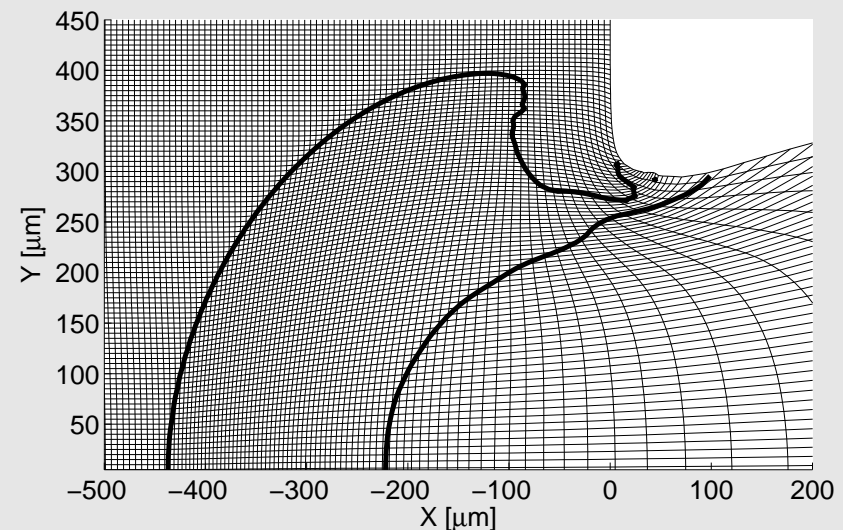


# Crater Formation

- **After impact** – both the massive target and the disc start to raise their temperature, shock wave is formed that propagates into the target and causes heating, melting and evaporation of the target material.
- Colormap of internal energy increase shows the formed crater shape after 30 ns.
- Computational grid is still smooth, computation can continue.
- Crater size and shape corresponds approximately to the experiment.



**solid liquid gas**



## Heat Conductivity

- Heat conductivity represented as parabolic term in the energy equation. By splitting, we solve  $T_t - \nabla \kappa \nabla T = f$  using support operators method
- Green and Gauss theorems express integral properties of operators:
  - Generalized gradient  $\mathbf{w} = \mathbf{G}u = -\kappa \nabla u$
  - Extended divergence  $\mathbf{D} \mathbf{w} = \begin{cases} \nabla \mathbf{w} & \text{on } V \\ -(\mathbf{w}, \mathbf{n}) & \text{on } \partial V \end{cases}$
- Mimetic discrete operators  $G, D$  have the same discrete integral properties, namely gradient is adjoint of divergence  $G = D^*$ .
- Fully implicit scheme in time  $(T^{n+1} - T^n)/\Delta t + DGT^{n+1} = F^{n+1}$ ,
- Matrix of global system is symmetric and positive definite – conjugate gradient method.
- Exact on piecewise linear solutions, otherwise it is second order accurate in space. Works well on bad quality meshes, allows discontinuous diffusion coefficient.

# Simulace plazmatu

---

- plazma jako tekutina – směs elektronů a iontů – hydrodynamika
- závisí na rychlosti elektronů a iontů
- podrobnější popis pomocí rozdělovací funkce  $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$
- Fokker-Planckova rovnice

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{z}} f + \frac{e}{m_e} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{s_{FP}},$$

se srážkovým integro-diferenciálním členem na pravé straně

- Maxwellovy rovnice popisují chování elektromagnetického pole  $\mathbf{E}, \mathbf{B}$
- zahrnutí tepelné vodivosti, kvantových efektů, jaderných a radiačních procesů

# Zdroje výpočetní náročnosti numerických výpočtů

---

- rostoucí velikost výpočetní sítě
- paměť pro uschování jednoho pole na síti  $1TB = 10^{12}B$ ,  $1PB = 10^{15}B$

$n$	1D $n$	2D $n^2$	3D $n^3$	4D $n^4$	5D $n^5$	6 D $n^6$
100	800 B	80 kB	8 MB	0.8 GB	80 GB	8 TB
200	1.6 kB	320 kB	64 MB	13 GB	2.5 TB	0.5 PB
400	3.2 kB	1.2 MB	0.5 GB	0.2 TB	82 TB	32 PB

- většinou potřeba více polí
- ve vyšších dimenzích je třeba více operací na jednu buňku
- se zjemňováním sítě klesá prostorový krok  $\Delta x$  a roste přesnost výpočtu
- časový krok  $\Delta t$  většinou přímo úměrný prostorovému kroku  $\Delta x$  – pro jemnější síť je třeba více časových kroků



# Možnosti urychlení výpočtů

---

- zvyšování frekvence procesoru
- zřetězení (pipeline) – rozdělení instrukce na několik částí, s druhou částí první instrukce se zároveň provádí první část druhé instrukce
- vektorové procesory – aritmetika s vektory (často délka vektoru 256) – vektorové překladače rozloží nejvnitřnější cykly na vektorové cykly
- paralelní výpočty
  - se sdílenou pamětí – otázky synchronizace
  - bez sdílené paměti – komunikace mezi procesory (nejčastěji MPI)
- lepší algoritmy

# Superpočítače

---

- 500 nejvýkonnějších superpočítačů
- nejvýkonnější superpočítač **Blue Gene**