

TESTS HIDRODINÀMICS AMB EL CODI MULTIDIMENSIONAL FLASH

Treball final de màster presentat per: Jordi Casanova i Bustamante

Director del treball: Jordi José i Pont

Co-Director del treball: Enrique García-Berro Montilla

Departament de Física i Enginyeria Nuclear (UPC)

Abstract

El FLASH és un codi estable i flexible, desenvolupat a la Universitat de Chicago, que permet estudiar diferents fenòmens hidrodinàmics. L'objectiu futur és desenvolupar models multidimensionals centrats en el camp de les noves per a caracteritzar algunes fases complexes del fenomen, però degut a la complexitat del codi (més de 500000 línies de programació en C++ i Fortran90), la realització d'una simulació estel·lar necessita tenir un coneixement bàsic del FLASH. Per tant, l'objectiu d'aquest treball és la realització d'alguns tests numèrics per aprendre'n el funcionament. Però a la vegada, l'objectiu és doble, ja que per utilitzar una eina de treball com el FLASH, necessitem testear el propi codi i comprovar que és capaç de resoldre correctament diferents problemes hidrodinàmics que ja s'han simulat prèviament. Així, s'han treballat els diferents tests i hem observat que el codi FLASH és eficaç per simular-los correctament i, per tant, podem esperar que serà un bon codi per a les futures simulacions estel·lars. D'altra banda, aquest primer contacte amb el codi ens ha permès familiaritzar-nos amb l'estructura, adquirir destresa en el seu ús i començar a entendre'l, tot deixant per a més endavant l'estudi detallat dels diferents models numèrics implementats en el codi i eines auxiliars de representació gràfica.

1. Introducció

1.1 Interès del treball. Objectius

Aquest treball de màster està concebut com l'inici d'una tesi doctoral dins el Grup d'Astronomia i Astrofísica de la UPC que es realitzarà en els propers anys. La idea de la tesi és utilitzar el codi FLASH per a realitzar simulacions multidimensionals i així poder estudiar els fenòmens que tenen lloc en les noves clàssiques.

1.2 Noves clàssiques

Les noves són explosions estel·lars que s'esdevenen en un sistema binari d'estrelles. Un dels estels ha arribat a la fi de la seva vida convertit en un nan blanc (on la matèria està degenerada). En els sistemes binaris molt propers, l'estel acompanyant cedeix part del seu gas (material ric en hidrogen), el qual s'arremolina al voltant del nan blanc tot apilant-se durant prop de 100000 anys i esdevenint parcialment degenerat. L'emboïllat s'escalfa per compressió. Com que el material està degenerat, la pressió no està connectada a la temperatura, fet que implica que aquesta última vagi augmentant sense que es produeixi una expansió de la capa. Per tant, ràpidament s'arriba a la temperatura a la qual tenen lloc les reaccions termonuclears en règim explosiu governades per les cadenes pp, seguit del cicle CNO. Per iniciar aquest darrer cicle és necessària la presència del ^{12}C . En algun moment s'ha de produir una barreja entre el material acretat i el material del nucli del nan blanc, per aconseguir aquests isòtops i iniciar el cicle. Mentrestant s'origina la convecció que arrossega els isòtops ^{13}N , ^{14}O , ^{15}O , ^{17}F produïts en les reaccions nuclears cap a les capes externes on es desintegran

via $\beta+$. Conseqüentment, la temperatura augmenta fins al punt que la degeneració es trenca i la quantitat d'energia alliberada serveix per expulsar material cap a l'exterior. S'arriba a una temperatura màxima de $(2-3) \times 10^8 \text{K}$. Aquest fenomen és anomenat allau termonuclear i es desenvolupa en pocs minuts. El material ejectat està enriquit amb els isòtops processats en les reaccions nuclears. Actualment sabem que les noves contribueixen majoritàriament en l'abundància del ^{13}C i el ^{17}O que hi ha a la galàxia; també contribueixen de forma més subtil amb el ^{15}N . Igualment són signatures de les noves la producció del ^7Li , ^{22}Na , ^{26}Al , que poden observar-se en emissió gamma. Els següents isòtops ^{19}F , ^{13}N , ^{18}F , ^{31}P , ^{32}S , ^{33}S , ^{35}Cl són produïts per les noves més massives [\(3,5,6,7,8,9,10,12\)](#).

Podem establir la següent classificació de les noves:

a) neon: les més massives i les que aconsegueixen arribar a una temperatura més alta i, per tant, els cicles MgAl i NeNa poden iniciar-se, traslladant-se l'activitat nuclear cap a nuclis més pesants.

b) non-neon: menys massives i on la temperatura no és suficientment alta com per passar del cicle CNO.

L'interès de les noves també s'extén en l'estudi de grans presolars trobats en alguns meteorits i que van ser formats en noves, deixant-hi, per tant, una empremta característica en la composició isotòpica [\(2,11\)](#).

El futur treball està encaminat a simular explosions per descobrir com l'allau termonuclear es desenvolupa, com es produeix la barreja entre el material acretat i el material del nan blanc i en quin moment es produeix. Diferents grups han estudiat aquest fenomen i, mentre que alguns determinen que la barreja es produeix just abans que la temperatura arriba al punt màxim obtenint explosions molt violentes, altres troben que la barreja es produeix molt al principi obtenint-se explosions molt dèbils. Les diferències

observades semblen tenir la causa en el tractament de les condicions de contorn de les simulacions. La utilització d'un codi estable, eficaç i flexible com el FLASH sembla idoni per a l'estudi.

1.3 Pla de treball

La magnitud del codi FLASH dificulta la realització de la primera simulació estel·lar (que per si mateixa ja és molt complexa). Per tant, l'objectiu del treball final de màster és doble:

a) el primer pas és la familiarització amb el codi tot realitzant una sèrie de tests hidrodinàmics. Així la realització d'aquestes primeres simulacions implicarà començar a conèixer l'estructura i el funcionament del codi.

b) per altra banda, des d'un bon principi necessitem testejar l'eina de treball i saber si realment és fiable i, en conseqüència, podrà ser utilitzada per al tipus d'estudi específic que perseguim.

2. El Codi FLASH

El codi FLASH és un codi hidrodinàmic desenvolupat al FLASH CENTRE de la Universitat de Chicago l'any 1997 per a estudiar, mitjançant la realització de simulacions, els següents fenòmens: noves, supernoves tipus Ia i erupcions de raig X (X-ray bursts). Aquest robust codi està construït per a suportar enormes càlculs de programació en paral·lel i està constituït per més de 560.000 línies de codi de programació. El seu potencial radica en el fet que és multidimensional; és a dir, és capaç de realitzar simulacions fins a 3D i utilitzant tota mena de geometries possibles.

2.1. Instal·lació del programa

La instal·lació del codi FLASH ha necessitat força part del temps del treball i ha estat la tasca més complicada. El codi necessita les següents llibreries i eines per a funcionar correctament: compiladors Intel Fortran90 i C; Message-Passing Interface (MPI); Hierarchical Data Format (HDF) o bé ParallelNetCDF; Interface description language (IDL) per a visualitzar l'anàlisi de l'output del FLASH; gmake i Python.

2.2 Estructura del codi FLASH

Aquest codi és un codi eulerià on l'observador (que està fix) descriu les propietats del fluid en funció de l'espai i el temps. D'altra banda, el FLASH té la possibilitat de treballar amb la unitat GridParticles que implementa un mètode lagrangiana (on el fluid està descrit pel moviment d'aquestes partícules traçadores que són les encarregades de portar arreu la informació).

2.3 Xarxa

El domini computacional es divideix en blocs, cada un d'ells dividit en un cert nombre de cel·les que per

defecte serà 8 en cada direcció. El nombre de cel·les pot ser ampliat a 16, 32 o 64. Al voltant de les cel·les s'hi construeix un perímetre de cel·les barrera, l'objectiu del qual és fer de frontera amb els blocs veïns. La unitat Grid s'encarrega d'extendre els blocs a través del domini mitjançant un conjunt de subrutines. El codi FLASH presenta dues vies per implementar els blocs sobre el domini:

a) Uniform Grid: el domini físic es divideix en una sèrie de punts o cel·les espaiats regularment segons la geometria utilitzada i s'assigna un sol bloc per a tot el domini computacional (tot i que si es vol se'n poden assignar més d'un). Per defecte s'utilitza el mode FixedBlockSize (Fbs) on la grandària del bloc és sempre la mateixa (és a dir, el nombre de cel·les és sempre el mateix). Però es pot utilitzar el mode NonFixedBlockSize (NonFbs) on els blocs poden variar de tamany, establint-se inicialment el nombre total de cel·les en cada direcció, que al seu torn seran repartides en blocs depenent del nombre de processadors que hi tinguem.

b) Adaptive Mesh Refinement (AMR): aquest mètode està basat en el mètode PARAMESH desenvolupat per McNiece l'any 1999. El nostre codi pot implementar dues versions d'aquest model (pm2 i pm3). La xarxa s'adapta a les necessitats del problema refinant i afegint més blocs allà on s'escaigui i desrefinant quan ja no pertoca per no malgastar memòria. Podem triar les variables a refinar i s'aplica un mètode basat en un estimador de Löhner per esbrinar quan és oportú el refinament. El refinament segueix les següents pautes:

1) El bloc fill ocupa la meitat del bloc pare i no pot sobresortir-ne.

2) Blocs contigus només poden diferenciar-se en un sol nivell de refinament.

3) Si omplim les cel·les d'un bloc veí que és més refinat s'utilitza la interpolació de dades (prolongació) i també quan es crea un nou bloc. Però en canvi si el bloc veí és més rude s'utilitzarà un promig de les dades (restricció). Quan els blocs tenen el mateix refinament simplement es copia la informació.

Per omplir els blocs, primer es necessita adquirir les condicions inicials i llavors aplicar l'equació d'estat per obtenir els valors de les variables.

El FLASH pot emmagatzemar data via cell-centered data o face-centered data i pot establir les següents condicions de frontera: periodic, reflect, outflow o bé condicions que l'usuari vulgui definir.

El nostre codi pot treballar amb diferents tipus de geometria (cartesianes, cilíndriques, esfèriques i polars).

2.4 Input/Output

L'anàlisi de les dades pot ser executat implementant els següents formats:

a) direct: cada processador escriu a un arxiu separat.

b) serial: enviem totes les dades a un sol processador.

c) parallel: tots els processadors escriuen a un mateix arxiu. Aquest mètode és possiblement el més factible.

S'ha instal·lat el codi FLASH de manera que utilitza la llibreria HDF enlloc de la ParallelNetCDF per a l'output. Certs estudis amb el FLASH destaquen la millor efectivitat de la segona llibreria alhora de fer programació en paral·lel.

i, per tant, podria enfocar-se el futur treball utilitzant aquesta eina. D'altra banda, fer programació en paral·lel amb el FLASH requereix dominar la tècnica pròpia que utilitza el codi i com es reparteix el treball per blocs i eixos de coordenades i, per tant, es deixa aquest punt com a futur estudi a treballar.

Cal esmentar que no tots els tipus de xarxa (Fbs, NonFbs, pm2 i pm3) suporten tots els formats de sortida (direct, paral·lel i serial).

El FLASH mostra els resultats de les simulacions als arxius checkpointfiles (útils per recomençar una simulació no des del principi) i plotfiles (bàsicament per analitzar les dades).

2.5 Hidrodinàmica

Aquesta unitat s'encarrega de solucionar les equacions d'Euler. El mètode utilitzat per resoldre les equacions és el Piecewise Parabolic Method (PPM). Aquest algoritme fou descrit per Woodward & Colella (1984) i, de fet, es tracta d'una versió del mètode de Godunov (1959), però de segon ordre.

2.6 Equació d'estat

Per a calcular totes les variables necessàries, s'haurà d'implementar una equació d'estat per a resoldre la hidrodinàmica i la xarxa nuclear. El FLASH implementa 3 tipus d'equació d'estat:

- a) gamma: implementa l'equació del gas perfecte.
- b) multigamma: opera igual que l'equació gamma però quan hi ha més d'un fluid en joc. Necessita de la introducció del nombre de protons, nucleons, etc., per a cada una de les espècies.
- c) Helmholtz: equació d'estat que conté més física i és molt més apropiada per descriure els fenòmens astrofísics on hi pot tenir cabuda una descripció relativista, hi pot haver degeneració, etc. Es tracta d'un model elaboradíssim que té en compte la contribució de la radiació, ionització i electrons degenerats/relativistes. El formalisme necessita de complexes rutines i implementa una taula de l'energia lliure de Helmholtz.

2.7 Gravetat

El codi FLASH pot aplicar un camp gravitatori de la següent forma:

- a) constant gravitational field: s'aplica un camp constant en l'espai paral·lel a un dels eixos.
- b) plane-parallel gravitational field: es tracta d'un camp creat per una massa puntual o una distribució esfèrica de massa, però que cau inversament proporcional a la distància al quadrat.

3. Tests realitzats

3.1 Tests hidrodinàmics

a) Sod-shock tube: el problema de Sod estudia l'habilitat del nostre codi per a capturar shocks i discontinuïtats de contacte. Les condicions inicials són establir una interfície plana formant 90° amb l'eix d'abscisses, per tal de generar un salt de pressió i densitat. El fluid està quiet inicialment i es retira la interfície, de manera que es produeix una ona de xoc que avança cap a la dreta. Darrera d'una ona de xoc s'hi forma una perturbació anomenada ona de rarefacció que avança en sentit contrari. Entremig de les dues ones s'hi trobarà una discontinuïtat de contacte ⁽¹³⁾.

S'ha escollit l'equació d'estat gamma, un domini computacional quadrat de costat 1cm i condicions de frontera d'outflow. També amb aquest test s'ha volgut comparar la utilització dels diferents tipus de xarxa disponibles (UG i AMR). Utilitzar UG implica que el domini computacional és cobert amb un sol block; no obstant, si volem ampliar el nombre de blocks podem definir quants blocks per direcció hi volem posar. Però llavors tot el domini té la mateixa resolució. També podem aconseguir màxim refinament a tot arreu utilitzant AMR, però igualant el nombre màxim i mínim de refinament a un únic valor. Però mantenir sempre la xarxa totalment refinada no compensa ja que gasta molta memòria i a la llarga no es pot aconseguir el refinament necessari allà on és realment necessari. Tot i no observar-se gaire diferència en tots aquests tests, AMR és la xarxa que s'estableix sempre per defecte i la que sembla que serà més efectiva en les futures simulacions, les quals ja seran realitzades fent programació en paral·lel i, en conseqüència, es podran utilitzar nivells de refinament més alts.

S'han fet simulacions utilitzant coordenades cartesianes en 1D, 2D i també testant el problema quan la interfície forma un angle de 45° amb l'eix de les abscisses.

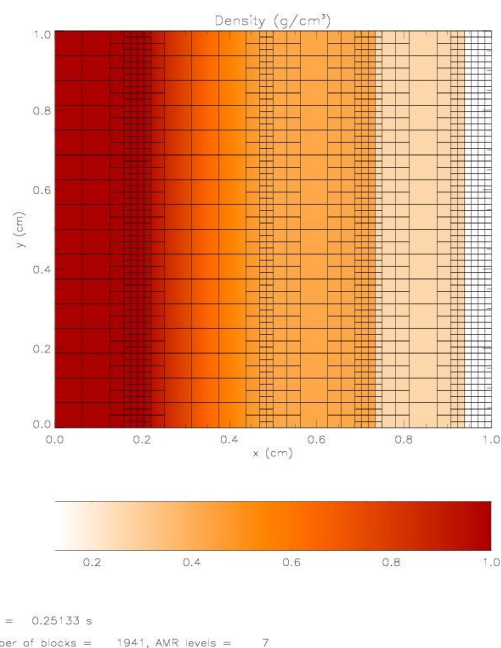


Figura 1: Sod. Camp de densitat

b) Sod Spherical: és un test que es basa en el mateix Sod però que utilitza coordenades esfèriques. La idea és propagar un xoc d'estructura plana i observar si conserva aquesta estructura a mesura que es desenvolupa el xoc. Aquest test ha servit també per a familiaritzar-nos amb la utilització de les coordenades esfèriques. Utilitzar aquest tipus de coordenades amb un sol processador és molt costós en memòria, sobretot amb simulacions en 3D. Però sí s'han pogut realitzar les simulacions en 1D i 2D amb força èxit, tot i observar oscil·lacions en l'estructura del xoc (a nivells de refinament baixos) que van desapareixent quan n'augmentem el refinament ⁽⁴⁾.

c) Interacting Blast-Wave (2Blast): aquest problema enlloc de plantejar un salt de pressió com el Sod, presenta dos salts de pressió molt forts dins del domini computacional. Resulta molt adequat per a testar problemes que comporten ones de xoc molt potents i perfils molt estrets.

A cada discontinuïtat inicial (salt de pressió) hi neix una ona de xoc que es desplaça cap al centre i una ona de rarefacció que ho fa cap a la paret. Aquestes últimes reboten i van a trobar-se amb les ones de xoc que col·lisionen al mig del domini ⁽¹⁵⁾.

d) Sedov explosion problem: aquest problema simula l'evolució en el temps d'una perturbació constituïda per una gran quantitat d'energia concentrada en una petita regió al centre de la xarxa. Per tant estem testant la capacitat del codi per a tractar xocs molt forts. S'estableix una pressió molt petita arreu menys al centre, degut a la perturbació de densitat inicial. Tanmateix és molt difícil de representar una estructura molt fina com és una funció delta, ja que només podem inicialitzar el problema establint una certa amplada per a la perturbació inicial, que serà uns 3.5 cops tan gran com la resolució que utilitzem. Aquest test gaudeix de solució analítica i s'observa que a nivells de refinament alts, la solució és més ajustada i no pateix tantes oscil·lacions com a nivells de refinament baixos ⁽⁴⁾.

e) Advection problem: es crea un puls de densitat d'una amplada determinada que pot tenir forma quadrada o bé gaussiana dintre d'una regió. El puls és transportat a través del domini amb una certa velocitat. Per tant, estem testant l'habilitat del codi per tractar discontinuïtats de contacte per al puls quadrat, estructures estretes (per ambdós casos) i, en definitiva, la unitat hidrodinàmica en general. Els resultats confirmen que tant el puls quadrat com el gaussià resulten mal definits a nivells de resolució baixos (apareixent-hi errors numèrics que fan ampliar i deformar l'estructura), però que s'obtenen resultats molt bons a nivells alts ⁽⁴⁾.

3.2 Gravity Test

Col·lapse d'una esfera homogènia: el problema consisteix en una esfera uniforme d'un cert radi i una

certa densitat, però amb una pressió constant i molt petita, que acaba col·lapsant. Amb aquest problema es testeja la unitat de gravitació que incorpora el FLASH, l'habilitat del codi per mantenir simetria esfèrica durant la implosió i capacitat per a mantenir el perfil de densitat constant dins l'esfera ⁽⁴⁾. S'han utilitzat coordenades cartesianes per a la simulació, i això pot comportar algun problema ja que és complex de descriure les vores i al centre de l'esfera es trenca la simetria esfèrica més fàcilment. S'utilitza també una subrutina especial del FLASH per a refinar especialment la regió del centre de l'esfera.

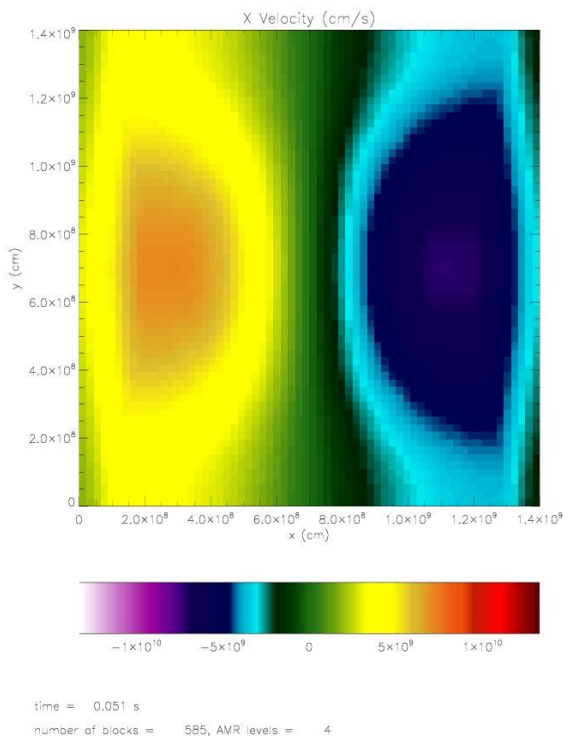


Figura 2: Col·lapse d'una esfera. Camp de velocitat

3.3 Burn Test

Cellular: aquest problema ens servirà bàsicament per a testar la unitat de combustió (Burn) del FLASH.

En un domini computacional de 256x25.6 cm hi tenim carboni amb unes certes condicions inicials de pressió i temperatura. Seguidament s'origina una perturbació, comunicant-hi uns valors més grans de pressió i temperatura; també se li donarà una velocitat per fer moure el material cap endavant. Aquests valors són suficients per a fer detonar el fuel (^{12}C) i iniciar tot un seguit de reaccions nuclears. En aquest cas, la unitat Burn està constituïda per una xarxa nuclear formada per una cadena alfa de 13 isòtops. Però el problema és que la temperatura esdevé tan alta que d'altres reaccions seran més efectives, i per tant, les reaccions que involucren ions més pesats s'hauran de tenir en compte. Així que el FLASH utilitzarà, a

més a més, una cadena de 8 isòtops més pesats per a representar correctament el problema.

Les condicions inicials són suficients per accelerar el material i començar la ignició. S'originen unes inestabilitats en la densitat que generen una estructura cel·lular molt característica, dins la qual es produeixen petites detonacions que mantenen viva la detonació inicial en tot l'eix d'abscisses. En aquest eix s'hi imposen condicions de frontera de reflectivitat, mentre que a l'eix d'ordenades hi tindrem condicions periòdiques.

La unitat Burn s'encarrega de fer tots els càlculs, obtenir els resultats i desenvolupar les reaccions apropiades segons les condicions de temperatura, densitat, etc.

Els resultats demostren que utilitzar un nivell de refinament alt (és a dir, molta resolució) es tradueix en acurades estructures en la temperatura, pressió i densitat, podent-s'hi observar perfectament l'estructura cel·lular. També hem obtingut les estructures que es formen en un dels productes de les reaccions (el Si-28). Aquest test no gaudeix de solució analítica, però sí que s'han realitzat diverses simulacions del problema. La nostra simulació amb el FLASH sembla estar d'acord amb estudis previs del mateix problema ⁽¹⁴⁾.

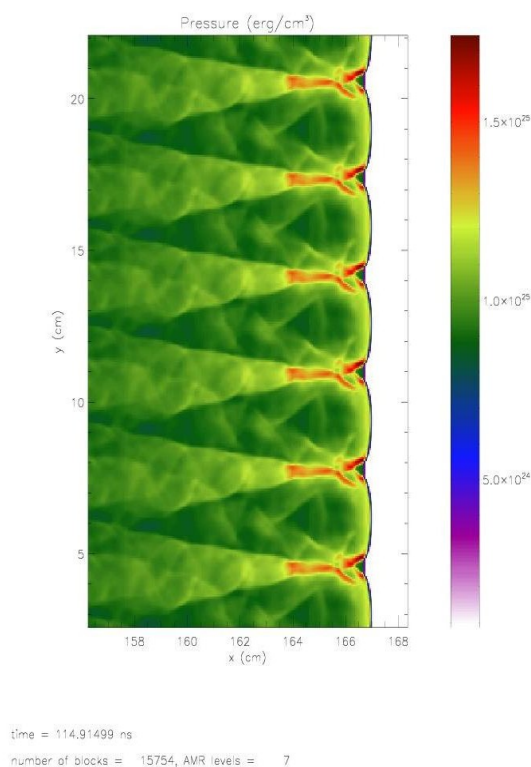


Figura 3: Cellular. Camp de pressió i estructura cel·lular.

4. Conclusions

Totes les simulacions han estat realitzades amb un sol computador i, per tant, encara no s'ha programat en paral·lel. L'inconvenient de fer servir només un processador radica en el fet que no som capaços de fer simulacions que requereixin molta memòria, fet que repercuteix en la limitació del nivell de refinament utilitzat. Properament el Grup d'Astronomia i Astrofísica instal·larà un cluster que serà ubicat a l'Escola Universitària d'Enginyeria Tècnica Industrial de Barcelona (EUETIB) i que serà utilitzat per a fer els futurs càlculs.

Tots els tests que hem realitzat estan força d'acord amb la solució analítica (si el test té solució analítica) o bé reproduïxen força bé els resultats d'estudis previs. Per tant, arribem a la conclusió que el codi FLASH és un bon codi hidrodinàmic. D'altra banda, amb aquest treball s'ha adquirit un cert bagatge que ens ha permès començar a entendre les eines necessàries per manejar el codi properament.

5. Treball futur

Per començar a fer una simulació aplicada a les noves necessitem anar encara més enllà en el coneixement tècnic del codi fins arribar al nivell de poder modificar-lo, corregir-lo o bé ampliar-lo, de manera que s'adapti el millor possible a les nostres necessitats.

Apart de l'aspecte tècnic, seguidament es detallen els punts que s'hauran de treballar en el futur:

- Extensió de la xarxa de reaccions nuclears.
- Estudi dels processos de barreja a la interfície nucli-embolcall de l'estel. En particular, l'inici del transport convectiu.
- Estudi de la propagació del front de combustió en una nova.
- Aplicació a altres escenaris astrofísics com els X-Ray Bursts.

6. Referències

- Consulta del tutorial i eines requerides pel codi FLASH al web: <http://flash.uchicago.edu>
- S. Amari et al., 2001. Presolar grains from novae. *The Astrophysical Journal*, 551:1065-1072.
- A.C. Calder et al., 2002. Mixing by non-linear gravity wave breaking on a white dwarf surface. 2002nuas.conf..186T
- S.A. Colgate et al., 1965. The hydrodynamic behavior of supernovae explosions. *The astrophysical journal*, 143, 626.
- C. Iliadis et al., 2002. The effects of thermonuclear reaction-rate variations on nova nucleosynthesis: a sensitivity study. *The astrophysics journal*, 142:105-137.
- A. Glasner et al., 2002. Multidimensional nova simulations. AIPC..637..124G
- J. José. Thermonuclear burning in the frontier of stellar degenerate cores. Tesis doctoral.
- J. José et al., 2005. Nucleosynthesis in classical novae. *Nuclear Physics A* 777 (2006) 550-578.
- J. José, 2005. Prospects in classical nova modeling and nucleosynthesis. *Nuclear Physics A* 758 (2005) 713c-720c.

- (10) J. José et al., 1999. Nuclear uncertainties in the NeNa-MgAl cycles and production of ^{22}Na and ^{26}Al during nova outbursts. *The astrophysical journal*, 520:347-360.
- (11) J. José et al., 2004. The imprint of nova nucleosynthesis in presolar grains. *The astrophysical journal*, 612:414-428.
- (12) J. José et al., 2007. The first nova explosions. *The astrophysical journal*, 662: L103-L106.
- (13) G. A. Sod, 1978. A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. *Journal of computational physics* 27, 1-31.
- (14) F.X. Timmes et al., 2000. On the cellular structure of carbon detonations. *The astrophysical journal*, 543:938-954.
- (15) P. Woodward et al., 1984. The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks. *Journal of computational physics* 54, 115-173.