

doi: 10.3969/j.issn.1000-8349.2016.04.13

在天体物理研究中常用的计算程序 ZEUS, ATHENA 和 NIRVANA 的发展及应用

叶 景^{1,2,3}, 沈呈彩⁴, 倪 蕾^{1,2}, 林 隽^{1,2}

(1. 中国科学院 云南天文台, 昆明 650216; 2. 中国科学院 天文大科学研究中心, 北京 100012; 3. 南京大学 现代天文与天体物理教育部重点实验室, 南京 210093; 4. Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics, Cambridge MA 02138, USA)

摘要: 流体动力学 (Hydrodynamics, HD) 与磁流体动力学 (Magnetohydrodynamics, MHD) 高效数值计算方法被广泛应用于天体物理领域, 用来研究和解释天体系统中有关磁场和流场的演化以及能量转化过程, 如磁重联、恒星演化及形成、吸积盘等问题。通过对三个开源程序 ZEUS, ATHENA 和 NIRVANA 的探讨, 详细阐述经典网格方法的起源、发展及适用于求解 MHD 方程的数值方法。同时介绍了基于此类程序已展开的科研工作和获得的成果, 旨在通过对一些具体实例的计算的介绍, 分析相应算法的优缺点, 探索有关算法和程序在天体物理领域中的应用。希望提供给读者关于 MHD 数值优化方面一些参考与借鉴。

关键词: (磁) 流体动力学; 交错网格; Godunov 算法; 算子分裂法; 并行计算

中图分类号: P144.7 **文献标识码:** A

1 引 言

数值模拟技术是现代天体物理领域不可缺少的基本研究手段, 为现代天体物理研究及观测检验提供了强有力的数值实验工具; 同时日益增长的研究需求也使天体物理成为超级计算机及计算技术发展的重要推动者之一。20 世纪 90 年代以来, 计算机技术的迅速提高极大地推动了天体物理数值模拟工作的发展, 并在现代架构的超级计算平台上, 发展了各种高精度和高分辨率的高性能并行数值算法, 使得在大规模数值模拟中引入对各种复杂物理过程的描述成为可能, 如辐射转移过程, 恒星形成模型, 各种力学、辐射和化学反馈作用, 吸积和喷

收稿日期: 2016-08-30; 修回日期: 2016-11-29

资助项目: 国家自然科学基金 (11333007, 11273055, 11603070, 11573064, U1631130); 973 项目 (2013CBA01503); 南京大学现代天文与天体物理教育部重点实验室开放基金; 中国科学院前沿科学重点研究项目 (QYZDJ-SSW-SLH012)

通讯作者: 林隽, jlin@ynao.ac.cn

流过程等的描述。结合数值模拟和半解析模型(如星系形成和演化等)进行研究,也为理论模型的观测检验提供了基本的手段。

流体力学模拟也是天体物理学研究中应用十分广泛的方法和手段。它在研究流体的宏观运动时,将流体近似看成连续介质。在流体运动中,由于压力、温度等因素的改变,流体质点的体积或密度会发生改变。在受到一定压力或温度变化下流体质点的体积或密度可以改变,这种性质称为可压缩性。真实的流体都是可以压缩的,但是液体的可压缩性很差,可以近似看作不可压缩的流体。在天体物理中,除极少数情况外,通常遇到的都是可压缩流体。非相对论流体力学是建立在由三个守恒定律所决定的框架当中,即质量守恒、动量守恒和能量守恒。用于描述流体运动的观点和方法有两种,即拉格朗日(Lagrange)方法和欧拉(Euler)方法,但使用两种方法得到的结果是等效的。

磁流体动力学是用来描述等离子体在磁场中的运动状态。等离子体是一类特殊的流体(气体),它是由带正电的离子、带负电的电子和中性粒子组成。磁流体动力学将等离子体作为连续介质处理,其特征尺度远远大于德拜半径,特征时间远远大于粒子的平均碰撞时间,不需要考虑单个粒子的表现。电流是由带电流体定向运动所产生的,或者是由随时间变化的磁场或流体以外的电荷分布产生的。所以,系统的运动可用一种具有通常的流体动力学变量(密度、速度和压强)的单导电流体来描述。磁流体动力学的连续性方程保持不变,其与流体力学的连续性方程相同。但当考虑了磁场作用后,就必须在动量方程中加入洛仑兹(Lorentz)力。值得一提的是,在一个只有洛仑兹力的系统当中,其方向垂直于带电粒子或是流体的运动方向,因此不对带电粒子或是带电流体做功,只改变运动轨迹。然而,在一个复杂系统里面,还可能有的力(比如重力和电场力)存在,而这些力是会对带电粒子或带电流体做功的。在这些力对粒子或流体做功的同时,洛仑兹力会改变粒子或流体的轨迹,也就改变了其他的力做功的效率。最终的效果是这些力对带电粒子或流体做功的过程受到了影响,可以看作是洛仑兹力对带电粒子或是流体间接做了功。

天体物理中(磁)流体动力学的研究内容是极其丰富的,如磁流体力学波、(磁)流体动力学不稳定性、各种自相似解、(磁)流体中的湍流、磁流体中的磁重联的研究,太阳及星系的发电机理论,双星和年轻星周盘以及活动星系核的吸积与喷流,伽马射线暴以及(磁)流体中的激波等。其中,辐射磁流体力学(RMHD)作为磁流体力学一个重要的分支,也越来越受到研究人员的关注^[1]。最近,杨孝鸿^[2]介绍了国际上恒星形成的RMHD数值模拟;部德福^[3]则总结了不同类型的黑洞吸积模型下的吸积和外流,重点解释了热吸积流中风的问题和超高吸积率下吸积流的辐射问题,等等。但有趣的是,这些发生在物理环境和系统尺度都非常不同的现象,都可由同一个高度非线性的(磁)流体动力学方程组来描述。这是因为在等离子体和MHD框架内的物理过程都可以通过一个标度变换将有关的控制方程无量纲化,而这些背景环境、空间尺度、时间尺度完全不同的物理问题都可以通过求解这样一套无量纲方程组而得到解决^[4]。为了从理论上解释其物理本质,理解和把握这些过程和现象,各式各样的数值计算程序被开发出来并应用于天体物理中的各个领域,获得了丰硕的成果。由于(磁)流体方程本身的复杂性,旨在准确求解的解析解方法往往是行不通的,人们不得不求助于计算机来数值求解这样一组双曲线偏微分方程组。目前相应的研究逐渐发展成为了一个新的

学科——计算磁流体动力学。针对常见的不定常流的初始间断的分解,即黎曼(Riemann)问题(如分段激波问题),常见的求解器有 Roe solver^[5], HLLC solver^[6], HLLC solver^[7, 8], HLLD solver^[9], Rotated-hybrid Riemman solvers^[10]等。目前天体物理领域存在着许多计算流体程序,如 SHASTA (SHarp And Smooth Transport Algorithm), ZEUS, FLASH, ENZO, VAC (Versatile Advection Code), ATHENA, NIRVANA, BIFORST 等都是利用高分辨率激波捕捉格式来编制的。

在天体物理数值实验中使用的计算程序有很多种,本文仅介绍比较常用的三种程序,即 ZEUS, ATHENA, NIRVANA。我们将比较各个程序的算法的优劣性,介绍有限元方法及 MHD 模拟的关键技术,探讨基于这些程序已展开的对有关物理问题的研究和进展,进而设想针对某些特殊天体活动现象,如太阳爆发、黑洞吸积盘间歇性喷流^[11]、磁中子星上发生的罕见耀发^[12]等,提出其可能的应用潜力。

2 (磁) 流体动力学模拟

天体物理中不同尺度的(磁)流体动力学模拟最大的挑战来自于:(1)大尺度的时空跨度和动力学范围;(2)等离子体-辐射-重力-对流-磁场多相成分构成的复杂体系;(3)激波和湍流,各种流体不稳定性、引力坍缩、辐射转移、大范围磁场等复杂物理过程。随着超级计算软硬件技术的惊人快速发展,已使计算规模逐步走向 PETA/EXA 尺度,但是天体物理学尺度的超大规模模拟在计算量、计算方法、计算机资源(内存、存储、I/O、通讯)以及数据分析和可视化等各方面仍面临着巨大挑战。而在天体物理模拟中,一些特殊的过程使计算变得更为复杂:一是亚网格尺度(Sub-Grid Scale)的物理过程,如恒星形成和动力学反馈、小尺度湍流;二是激波-湍流相互作用或共存的体系,对其计算格式的基本要求是不仅能够捕捉非定常激波,同时还要能分辨湍流惯性区的最小尺度,因此其数值算法必须具备低耗散和低色散数值误差的特征。前者的一种解决方案是加入亚网格分析模块,如针对小尺度湍流采用大涡旋模拟(LES)中使用的亚网格分析模型(SGS)。而对于后者,这仍是计算流体力学未解决的问题。一种可能的折衷解决方案是采用混合(Hybrid)计算格式,即在非激波区采用低耗散的差分格式,而在存在间断的区域,采用非线性重构(TVD^[13], PPM^[14], WENO^[15]等)。众所周知,描述流体的方法有两种,即拉格朗日方法和欧拉方法;前者主要是指平滑粒子流体力学方法,即 Smoothed Particle Hydrodynamical (SPH)方法^[16, 17]。本文涉及到的三类程序都是基于欧拉网格的,下面我们简要介绍欧拉方法在 MHD 模拟中的应用。

2.1 欧拉方法

MHD 方程着重于宏观地描述等离子体流场和磁场之间的相互作用,因而常用的 MHD 程序都必须引入欧拉方法。欧拉方法主要基于有限差分或有限体积方法对上述方程组在欧拉网格上进行空间离散,流场由网格点所处空间的物理量信息离散表示。在具体计算时通常利用任意一个网格点及其邻近网格点的物理量,通过泰勒(Taylor)展开,将微分转变为差分;或者重构该网格点附近物理量的分布,求解黎曼问题,得到通量函数的演化。例如在研究太

阳耀斑活动和日冕物质抛射 (CME) 时遇到的流场结构非常复杂, 普遍包含以激波为代表的间断面。因此, 擅长激波捕捉的各种数值格式在欧拉方法的模拟中得到广泛应用。比较典型的有基于 Godunov^[18] 方法的 PPM 格式, 以及高阶 WENO 格式。

基于 Godunov 方法的高阶格式, 其核心思想是利用精确黎曼解来捕捉流场中的激波与间断面。具体过程是, 首先利用特定的插值方法得到各网格内的物理量分布; 在每个间断处, 根据左右物理状态, 求解黎曼问题得到网格边界通量函数随时间变化; 依据通量函数的平均值变化和离散化的控制方程得到下一个时刻网格中心的物理量。PPM 格式采用的插值方法采用二阶抛物线函数, 达到了三阶计算精度^[14]。目前应用比较广泛的 FLASH, ENZO 和 ATHENA 程序均采用 PPM 格式。

WENO 格式利用多个相邻网格点组成数个差分模板 (Stencil), 在每个模板内对所需通量导数进行差分, 依据每个模板内的光滑程度设定各模板权重。模板越光滑, 权重越高, 如某一模板中间存在间断, 该模板的权重将非常小。对各模板内的通量差分进行加权平均, 作为最终的目标网格点处通量差分。高阶 WENO 有限差分格式, 能实现对复杂流场, 特别是激波和漩涡等结构及其相互作用实现高精度的捕捉。这些特点在宇宙学流体力学程序 WIGEON 的实际运行中有很好的展现^[19]。

欧拉方法的优点在于能够同时对平滑区域和间断区域进行高精度模拟, 同时具有捕捉强激波、漩涡、湍流等复杂流动特性的能力; 缺点是在网格数固定的情况下对高密度区域的分辨率不足。更大规模的固定网格模拟, 对于计算资源的要求会因为 CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) 条件呈非线性增长。

2.2 自适应网格, 非结构网格方法和笛卡尔网格方法

为了弥补固定网格方法在高密度区域分辨率不足而在低密度区域网格过密造成的计算资源浪费的问题, 自适应网格技术 (Adaptive Mesh Refinement) 也就应运而生, 并且在 20 世纪末被引进天体物理 MHD 模拟中。利用自适应技术对计算网格进行优化的主要过程是, 首先设定网格优化判据, 依此对感兴趣的局部计算区域进行标记, 并增加网格密度。常用的判据是物质密度及其梯度、流场间断、气体冷却时间等。以密度梯度判据为例, 当某一网格上的密度相对于该网格所处网格层级平均密度超过某一阈值时, 该网格即会被自动标记, 并加密生成下一层级的子网格。具体计算时, 需要根据上层网格和同层相邻网格确定特定网格的边界条件, 将边界处物理量反馈给上层网格, 递归推进时间演化, 以保持所有网格的时间同步。如果最初的根网格规模为 128^3 或 256^3 , 考虑到一般使用 5 层或 6 层网格加密, 在最后一层网格处, 有效分辨率已可以达到 16384^3 以上。

目前在天体物理领域中经常用到的 SHASTA, FLASH, ENZO, NIRVANA 程序都采用了自适应网格技术, 模拟中所需的网格总数一般为根网格数 10 倍左右^[20-23]。自适应网格技术能够以相对小的资源消耗增长为代价, 显著地提高局部区域的分辨率。该方法存在的问题之一是, 最终结果可能会受到加密判据的很大影响, 例如采用密度判据, 可能会忽视大尺度上的复杂速度结构, 抑制大尺度的流动不稳定性向加密区域的级联传递。此时需要借助于亚网格模型 (即静态网格细化), 修正可能的误差^[24]。

为了更好地追踪各种复杂结构下的磁流体动力学过程,非结构网格方法也成为 MHD 模拟最新发展的方向之一。非结构网格方法利用诸如三角形或四面体等简单形状分别在二维、三维空间中构造网格单元,镶嵌填充计算区域。相对于结构网格,非结构网格的节点位置,单元大小、形状和网格疏密具有较大的灵活性,因而能更方便地处理复杂外形,提高计算精度,但内存需求较大^[25]。

另一种流体力学计算中逐渐受到关注的方法是笛卡尔网格^[26, 27]。不同于结构化的贴体网格,笛卡尔网格中的单元基本按照笛卡尔坐标方向 (X, Y, Z) 排列,流场可以采用有限体积法进行模拟计算,在与模型表面相交的单元处需要给出特殊的处理,为此,必须准确计算和判断网格单元与模型表面的相交情况。在处理复杂几何结构的情形中,笛卡尔网格方法经常结合 Ghost cell 方法来处理边界条件^①。ZEUS, ATHENA, NIRVANA 都是利用笛卡尔网格(不同坐标系下通过坐标变换可以相互转换),在网格单元边界处重构流场物理量在交错网格单元上的分布,再通过有限差分或有限体积法来求解流体欧拉方程组。

2.3 RMHD 问题的潜在应用

辐射在各种各样的天体系统中扮演着重要的角色,比如恒星形成^[28]、超新星^[29]和超质量黑洞的吸积^[30]。运动的流体可以吸收、发射和分散光子,并在辐射区中进行着能量和动量的相互变换。当能量和动量通量中光子相对于粒子或磁场的作用较大时,辐射将显著地影响流体的动力学行为。数学上,辐射项的表现形式是在原 MHD 方程组的能量方程中增加了一个关于温度 (T) 和密度 (ρ) 的函数,或者是增加一个辐射转移 (Radiative Transport, RT) 方程与 MHD 方程并列求解。在行星际介质 (ISM) 模拟中, Koyama 和 Inutsuka^[31] 给出的光学薄辐射项模型为 $\rho\Gamma/m_H - (\rho/m_H)^2 \Lambda(T)$, 其中 Γ 和 Λ 分别为加热率和冷却率;在黑洞吸积中的 MRI 模拟中, Balbus 和 Hawley^[32, 33] 先求解了辐射转移方程得到辐射能量密度、辐射通量和辐射压强,然后将相应的结果嵌入 MHD 方程组中的能量和动量方程进而求解。前者在计算上不会造成太大的困难,在时间上进行显式或隐式的离散都较易实现;后者则经常是通过一个半隐式的时间离散来求解,其中动力学部分方程是用显式方法,辐射部分是用隐式方法,因为这样可以保证程序算法上的稳定,也可以节约计算时间,但是属于这类问题的后求解式方法,自洽性会受到影响。无论使用哪种方法,都要注意将辐射项与其他项之间的量纲匹配,可通过将两者统一到高斯制或者是国际单位制完成。在时标匹配方面,长时标的因素在短时标的过程中表现为背景强度的抬升或是降低,而短时标的变化在长时标的过程中则表现为高频率的波动;如果两者时标相同或接近,那么最终我们会得到一个较为复杂的结果,两者的贡献就难以区分开来。

目前,求解 RMHD 问题主要的难点是,如何求解 RT 方程与 MHD 方程组耦合起来,同时求解。比较常用的处理方法是利用短特征法 (short characteristics method) 求解 RT 方程,再通过计算 Eddington 张量 (Variable Eddington Tensor, VET) 使得 RMHD 问题完备(即存在唯一解)。但这个方法往往是非常耗费计算资源的。Yang 和 Yuan^[34] 就局部热平衡条件

^①Ghost cells 方法是在计算流体力学中常见的方法,常用于处理复杂的几何边界结构。在具体计算中,默认每个边界向外延拓数行,使得整个计算区域变为一个规则的凸集,被延拓的区域称为 ghost zone。使用 ghost cells 的目的有两个:(1) 通过外推,(使用交错网格时)补充一些物理量在边界的信息;(2) 克服边界上的 Gibbs 现象。

(LTE) 下的辐射转移问题利用通量限制法 (FLD) 逼近 VET, 结合 HLLD 黎曼求解器进行了 RMHD 的数值实验。其结果初步证明, FLD 对处理辐射激波问题精度很高, 但在光学薄区域的高度各向异性辐射场中精度欠佳。Jiang 等人^[35] 随后在 FLD 的基础上改进了 RT 方程的计算方法, 他们通过 Eddington 张量的计算并结合 Godunov 算法, 避免了在求解辐射力矩方程的过程中使用类似扩散的逼近方法。经过一系列测试之后发现, 不管是光学薄还是光学厚的情况, 该方法更加精确而且计算效率也不比 FLD 低。

Davis 等人^[36] 同样利用短特征法求解与时间无关的多频率 RT 方程, 来模拟恒星大气, 并把结果与利用标准的算子分裂法 (operator splitting) 得到的结果相对比。接着 Jiang^[37] 考虑了随时间变化 (frequency-integrated) 的 RT 方程, 重新改进了算法, 使得即使在高度异向的辐射区内精度也足够高, 弥补了原来算法的缺陷。总而言之, 辐射 MHD 问题在光学薄的条件下常常可以用一些简单的源项来近似处理, 较容易实现; 而广义的 RMHD 问题则需要将 RT 方程与 MHD 方程组耦合并联立求解。目前这方面的工作正处于起步阶段, 相应的辐射转移模型也比较简单, 给我们今后的工作留有很大的发展空间。

2.4 几点思考

MHD 模拟中一个公认的挑战是在计算过程中任意时刻磁场散度为 0 的数值控制。否则, 随着计算的进行, 离散误差不断增加, 离基本物理方程限制性条件越来越远, 最终会导致计算的终止。传统的做法是通过演化磁矢势 ($\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, 即通过磁矢势 \mathbf{A} 的演化来确定 \mathbf{B} 的演化), 使得散度为 0 的条件被自然地保证了。但其有两个缺点: (1) 必须要进行二次派生 [由 \mathbf{A} 得 \mathbf{B} , 然后由 \mathbf{B} 再求洛伦兹力 ($\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B}$] 计算; (2) 会在激波等不连续处发生陡变, 产生虚假电流。然而, Evans 和 Hawley^[38] 提出的传输限制法 (Constraint Transport, CT) 可以克服上述缺点。Evans 和 Hawley 发现: 如果先把电动势 (Electromotive Force, EMF) $\varepsilon = \mathbf{v} \times \mathbf{B}$ 在整个网格上确定下来, 然后用它去更新此计算步中的磁场分量, 就能保证积分形式的磁感应方程中的磁通量守恒。也就是说, 如果磁场在初始时, 是满足 $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ 的, 那么在此后的计算过程中此条件也是满足的。从数学语言讲, 我们有

$$\frac{d\phi_m}{dt} = \frac{d}{dt} \int_S \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} \cdot d\mathbf{S} = \int_l \varepsilon \cdot d\mathbf{l}, \quad (1)$$

其中 ϕ_m 是磁通量, ε 是 EMF (驱动磁场的演化)。通过数学推导, 可以证明 $d\phi_m/dt = 0$, 进而其通量变化也是守恒的, 即 $d(\nabla \cdot \mathbf{B})/dt = 0$ 。

虽然这一方法行之有效, 但如何计算 ε 也引入了求解 MHD 方程组的第二个难题: 阿尔芬波的耗散问题。因为 ε 的具体求解关系着 MHD 波的稳定性和精确性。磁流体当中存在横波与纵波, 而横波, 比如 Alfvén 波, 是不耗散的, 这样我们就不能用耗散的数值算法来处理。而且, 阿尔芬波还紧密地与密度和磁场耦合在一起。这就意味着, 单一的算子分裂法在此不适用。这就决定我们必须寻找一种新的算法, 这种算法既可以解决 MHD 波带来的稳定性问题, 又可与 CT 法相结合来解决 $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ 这一问题。Hawley 和 Stone^[39] 提出了特征值法 (Method of Characteristics, MOC), 结合 CT 技术可以很好地达到目的。

另外, 在高马赫数或者低 β 值的情况下, 特别是在自适应网格中, 密度、热压可能会非常接近于 0 或者为负值。为了避免这种非理性的结果, 常见的做法是求解近似于总能量方程

的热能方程中算出热能密度, 通过与 MHD 系统中真实的热能密度进行比较, 当真实的热能密度小于某个容忍值时 (由人为选择), 取两者中较大值。这个方法可以显著地减少非理性结果出现的可能, 但是还不能完全避免, 因此在方法优化上还有很大的改进空间。

在自适应网格处理方面, 其加密判据在 MHD 求解中一般的选择是给质量密度、动量密度、能量密度和磁场强度各提供一个控制阈值, 当各物理量的梯度或二次求导低于相应的阈值时, 相邻等级的网格就会以 2:1 的格式进行细化。当然, 加密判据也可选用电流密度做参照物, 但网格尺度有数值粘性, 表现为数值磁重联或数值耗散, 会产生数值电流, 这与 MHD 方程计算的磁雷诺数大小有关。当数值耗散为物理耗散的 1% ~ 2% 时, 数值耗散带来的误差是可以接受的, 这种情况下可以选用电流密度作为判据。

MHD 计算中最具挑战性的一个方面是计算精度和稳定性的博弈。在能保证算法稳定性的原则下, 尽可能地提高算法的精度也是现在研究的热点。而我们常常会遇到一个难题, 即在具有间断的耦合双曲线问题中, 高阶精度的格式会降低为一阶精度。Godunov 格式和 WENO 格式是欧拉方法里面常见的高阶格式, 其优点是能够同时对平滑区域和间断区域进行高精度重构计算, 同时还具有捕捉强激波、漩涡、湍流等复杂流动特性的能力。当然, 在实际的计算当中, 针对具体的计算格式的选用, 还是要首先考虑物理问题的需要。

3 ZEUS, ATHENA 与 NIRVANA 程序介绍

ZEUS, ATHENA 与 NIRVANA 是天体物理模拟中被广泛使用的代表性程序, 我们就从计算方法方面来详细地介绍各程序的算法、框架和特性。希望给予读者一些具体的认识, 以便于未来潜在用户在使用此类程序时, 可以根据具体物理问题对程序本身进行相应的优化。

3.1 基于有限差分法的 ZEUS 运行原理

ZEUS 程序主要是针对这三种问题来设计的: 流体动力学 (hydrodynamics)^[40], 理想磁流体动力学 (ideal MHD)^[41] 和辐射动力学 (radiation hydrodynamics)^[42]。“ZEUS”这个名字第一次见诸于 David Clarke 的博士研究生的工作中。当时, 这个程序是用来模拟 MHD 喷流的^[43]。20 世纪 80 年代后期, Stone 把程序移植到 UNIX 平台并起名为 ZEUS-2D 用来解决 2 维或 2.5 维自引力辐射情况下的 MHD 方程^[40]。同时, 许多新的算法也被加入其中: (1) 协变公式, 以便处理不同几何坐标下的模拟工作; (2) 一个人工粘滞张量 (捕捉激波制式); (3) 一个新的更精确的 MHD 算法用来处理阿尔芬波, 原理是结合了 CT 算法和 MOC (Method Of Characteristics) 算法; (4) 引入了辐射动力学问题。随后, David Clarke 又重新编写了 ZEUS-3D 用来处理三维问题。因此, 目前存在两个不同的版本 ZEUS-2D 和 ZEUS-3D, 算法在总体上是一样的, 但在细节实现方面则大相径庭。到了 1996 年, Mike Norman 的研究团组在 USCD (National Center for Supercomputing Applications) 开发出了并行计算的版本叫做 ZEUS-MP, 大大加快了科学计算的效率^[44, 45]。

偏微分方程数值求解的过程必然少不了离散化。考虑理想的 MHD 方程:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad , \quad (2)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla p - p \nabla \Phi + \frac{1}{4\pi} (\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} \quad , \quad (3)$$

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{e}{\rho} \right) = -p \nabla \cdot \mathbf{v} \quad , \quad (4)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad . \quad (5)$$

其中, ρ , \mathbf{v} , e , \mathbf{B} 和 Φ 分别为质量密度、等离子体的流速、系统的能量密度、磁场和重力势。算子 D/Dt 表示拉格朗日微分, 即

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \quad . \quad (6)$$

而重力势 Φ 满足如下泊松方程:

$$\nabla^2 \Phi = 4\pi G \rho \quad , \quad (7)$$

其中 G 是引力常数。这里的求解方法是时域显式的有限差分法。ZEUS 采用了算子分裂法^[46] (split method) 将求解过程分成两部分: 对源项求解 (source step) 和对传输项 (transport step) 求解。因此, 在处理有关源项方程的过程中所涉及到的方程为:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla \rho - \rho \nabla \phi - \nabla \cdot \mathbf{Q} - \nabla \left(\frac{\mathbf{B}^2}{2} \right) + (\nabla \cdot \nabla) \mathbf{B} \quad , \quad (8)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -p \nabla \cdot \mathbf{v} - \mathbf{Q} : \nabla \mathbf{v} \quad . \quad (9)$$

这里引入人工粘滞 \mathbf{Q} , 用于捕捉激波间断面, 稳定算法等, 其形式由 von Neumann 和 Richtmyer^[47] 的工作中给出。而传输项的方程为:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV = - \int_{dV} \rho (\mathbf{v} - \mathbf{v}_g) \cdot d\mathbf{S} \quad , \quad (10)$$

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} dV = - \int_{dV} \rho \mathbf{v} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_g) \cdot d\mathbf{S} \quad , \quad (11)$$

$$\frac{d}{dt} \int_V e dV = - \int_{dV} e (\mathbf{v} - \mathbf{v}_g) \cdot d\mathbf{S} \quad , \quad (12)$$

$$\frac{d}{dt} \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \int_{\partial S} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_g) \times \mathbf{B} \cdot d\mathbf{l} \quad , \quad (13)$$

其中, \mathbf{v}_g 是网格移动速度。而在本文中采用的是固定的欧拉网格, 所以 $\mathbf{v}_g = 0$ 。另外 $\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla$ 。利用有限差分分别求解源项和传输项的过程可见文献 [40] 中的详细讨论。值得注意的是, 在求解 MHD 方程的过程中, 必须一直满足磁场的无源条件 (divergence-free), 即 $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ 。ZEUS 是通过计算单元网格上磁通量的变化, 即

$$\frac{d\Phi_S}{dt} = \frac{d}{dt} \int_S \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} \cdot d\mathbf{S} = \int_l \varepsilon \cdot d\mathbf{l} \quad . \quad (14)$$

再利用短特征法 (MOC)^[39] 计算电动势 ε , 保证阿尔芬波无耗散性, 从而实现磁场无源条件。

3.2 基于有限体积法的 ATHENA 运行原理

这里提及的 ATHENA 程序是 ATHENA4.2 版本, 它是 James Stone 在 2013 年公开的开源版本, 属于 C 语言源程序。不同于 ZEUS, ATHENA 是基于有限体积法的 unsplit Godunov 算法, 其原理是结合了 PPM (Piecewise Parabolic Method), CTU (Corner Transport Upwind)^[48] 和 CT 三种方法, 收敛精度更高。ATHENA 默认的环境是对可压缩、绝热、非粘性的理想 MHD 问题的求解, 即

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho \mathbf{v}] = 0, \quad (15)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho \mathbf{v} \mathbf{v} - \mathbf{B} \mathbf{B} + P^*] = 0, \quad (16)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot [(e + P^*) \mathbf{v} - \mathbf{B}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{v})] = 0, \quad (17)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} - \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) = 0, \quad (18)$$

$$P^* = P + \frac{\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}}{2}, \quad (19)$$

$$e = P/(\gamma - 1) + \frac{\rho(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v})}{2} + \frac{\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}}{2}, \quad (20)$$

其中, ρ 为质量密度, $\rho \mathbf{v}$ 为动量密度, \mathbf{B} 为磁场, e 为总能量密度及 P 为气体压强。求解该方程组的第一步的原理就是实现一个基于笛卡尔网格的有限体积法离散过程。方程组 (15)–(20) 可以简化为:

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{f} = 0. \quad (21)$$

这里, 具有守恒性质的变量:

$$\mathbf{q} \equiv (\rho, \rho v_x, \rho v_y, \rho v_z, B_x, B_y, B_z, e)^T, \quad (22)$$

和通量矢量:

$$\mathbf{f}_x \equiv \begin{pmatrix} \rho v_x \\ \rho v_x^2 + P^* - B_x^2 \\ \rho v_x v_y - B_x B_y \\ \rho v_x v_z - B_x B_z \\ 0 \\ v_x B_y - B_x v_y \\ v_x B_z - B_x v_z \\ (e + P^*) v_x - B_x (\mathbf{B} \cdot \mathbf{v}) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}_y \equiv \begin{pmatrix} \rho v_y \\ \rho v_y v_x - B_y B_x \\ \rho v_y^2 + P^* - B_y^2 \\ \rho v_y v_z - B_y B_z \\ v_y B_x - B_y v_x \\ 0 \\ v_y B_z - B_y v_z \\ (e + P^*) v_y - B_y (\mathbf{B} \cdot \mathbf{v}) \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{f}_z \equiv \begin{pmatrix} \rho v_z \\ \rho v_z v_x - B_z B_x \\ \rho v_z v_y - B_z B_y \\ \rho v_z^2 + P^* - B_z^2 \\ v_z B_x - B_z v_x \\ v_z B_y - B_z v_y \\ 0 \\ (e + P^*)v_z - B_z(\mathbf{B} \cdot \mathbf{v}) \end{pmatrix}. \quad (23)$$

如果考虑二维情形, 通过对控制单元 (i, j) 上的积分, 设时间步长 $\Delta t = t^{n+1} - t^n$, 得到:

$$q_{i,j}^{n+1} = q_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{x,i-1/2,j}^{n+1/2} - F_{x,i+1/2,j}^{n+1/2}) + \frac{\Delta t}{\Delta y} (F_{y,i,j-1/2}^{n+1/2} - F_{y,i,j+1/2}^{n+1/2}), \quad (24)$$

其中,

$$\begin{aligned} q_{i,j}^n &\equiv \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{y_i - \Delta y/2}^{y_i + \Delta y/2} \int_{x_i - \Delta x/2}^{x_i + \Delta x/2} q(x, y, t^n) dx dy, \\ F_{x,i \pm 1/2,j}^{n+1/2} &\equiv \frac{1}{\Delta y \Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{y_i - \Delta y/2}^{y_i + \Delta y/2} f_x(x_i \pm \Delta/2, y, t) dy dt, \\ F_{y,i,j \pm 1/2}^{n+1/2} &\equiv \frac{1}{\Delta y \Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{y_i - \Delta y/2}^{y_i + \Delta y/2} f_y(x_i, y \pm \Delta/2, t) dy dt. \end{aligned} \quad (25)$$

值得注意的是, 当方程组写成矩阵形式, 它的通量函数只在 z 方向是不为 0 的, 也就是说分解方法的使用会破坏我们的约束条件, 即 divergence-free 条件, 所以算子分裂法 (split method) 不适用于此时的 MHD。类似地, 这里也要应用 CT 方法来保证磁场散度为 0 的条件得到满足, 但具体实施方式与 ZEUS 略有不同。因为 ATHENA 是直接考虑磁感应方程来实现 CT 方法, 利用有限体积法全离散过程中本身的物理量守恒性, 可以保证磁通量也是守恒的, 电动势 ε 通过迎风有限差分 CTU^[49] 求得, 其中的 Godunov 通量由黎曼求解器获得。

利用有限体积法的一个特点是可以把全局 MHD 问题分解为 N (单元网格数) 个局部的黎曼问题, 通过精确求解黎曼问题得到每个单元网格边界上的物理量状态, 从而重构通量函数 \mathbf{f} , 进而完成整个迭代求解过程。ATHENA 提供了多种黎曼求解器来计算网格上的通量, 如非线性的 HLLE, HLLC (针对 hydrodynamics), HLLD (针对 MHD) 或者线性的 Roe 求解器。其他的求解器还包括 Toro 的 FORCE^[50], 以及简单情况下的精确求解器 (如 isothermal hydro)。选择一个适当的求解器, 关键的因素是速度和精确度。根据经验, HLLC 求解 hydro 方程, HLLD 求解 MHD 方程或者 Roe 求解任一方程都是最常见的选择。

具体的计算过程如下:

我们初步限制在单个网格单元上, 角标为 i , 只考虑 x 方向的重建过程。已知中心平均的守恒参数 q_i , 可以求出与之相关的原始参数向量 $V_i = \{\rho, v_x, v_y, v_z, B_x, B_y, B_z, P\}$, 以及

\tilde{V}_i , 使得 $V_i = (\tilde{V}_i, B_x)$ 。接着, 利用 PPM 方法通过求解以下方程计算 \tilde{V}_i 元边界上的状态:

$$\frac{\partial \tilde{V}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial \tilde{V}}{\partial x} = \boldsymbol{\sigma} , \quad (26)$$

其中,

$$\tilde{V} = (\rho, v_x, v_y, v_z, B_y, B_z, P)^T , \quad \boldsymbol{\sigma} = (0, 0, 0, 0, v_y(\partial B_x / \partial x), 0, 0)^T , \quad (27)$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} v_x & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v_x & 0 & 0 & B_y/\rho & B_z/\rho & 1/\rho \\ 0 & 0 & v_x & 0 & -B_x/\rho & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v_x & 0 & -B_x/\rho & 0 \\ 0 & B_y & -B_x & 0 & v_x & 0 & 0 \\ 0 & B_z & 0 & -B_x & 0 & v_x & 0 \\ 0 & \gamma P & 0 & 0 & 0 & 0 & v_x \end{pmatrix} . \quad (28)$$

这里, 矩阵 \mathbf{A} 可用 V_i 线性处理, 源项 $\boldsymbol{\sigma}$ 可用常数项 $v_{y,i}(B_{x,i+1/2} - B_{x,i-1/2})/\Delta x$ 替代。标注 $\tilde{V}_{i+1/2}^L$ 和 $\tilde{V}_{i+1/2}^R$ 分别为网格单元的左边界和右边界。最终结果就是为了求出 $V_{i+1/2}^L = (\tilde{V}_{i+1/2}^L, B_{x,i+1/2})$ 和 $V_{i-1/2}^R = (\tilde{V}_{i-1/2}^R, B_{x,i-1/2})$ 。

在 y 方向上的边界计算, 我们遵循同一个过程, 只需把矩阵 \mathbf{A} 替换成 y 方向的波动矩阵, 把源项 $\boldsymbol{\sigma}$ 替换成 $v_x(\partial B_y / \partial y)$ 即可。结合式 (24), 对下一个时刻的物理量进行更新, 就完成了整个计算的迭代过程, 直到收敛。

3.3 基于有限体积法的 NIRVANA 的运行原理

NIRVANA 采用块结构化的 AMR 和并行体系架构, 求解守恒形式的耗散 MHD 方程:

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 , \quad (29)$$

$$\begin{aligned} & \partial_t e + \nabla \cdot \left[\left(e + p + \frac{1}{2\mu_0 |\mathbf{B}|^2} \right) \mathbf{v} - \frac{1}{\mu_0} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{B}) \mathbf{B} \right] \\ & = \rho \mathbf{f}_e \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot \left[\nu \boldsymbol{\tau} + \frac{\eta}{\mu_0} \mathbf{B} \times (\nabla \times \mathbf{B}) + \kappa \nabla T \right] , \end{aligned} \quad (30)$$

$$\partial_t (\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot \left[\rho \mathbf{v} \mathbf{v} + \left(p + \frac{1}{2\mu_0 |\mathbf{B}|^2} \right) \mathbf{I} - \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} \mathbf{B} \right] = \rho \mathbf{f}_e + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} , \quad (31)$$

$$\partial_t \mathbf{B} - \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) = \nabla \times (\eta \nabla \times \mathbf{B}) . \quad (32)$$

这里, 具有守恒性质的物理量为气体密度 ρ , 动量 $\rho \mathbf{v}$ (\mathbf{v} 是速度矢量), 总能量密度 e 和磁场 \mathbf{B} ; 气体压力 p 和温度 T 是独立的变量。扩散项中的介质参数有: 动力学粘滞系数 ν , 磁扩散系数 η 和热传导系数 κ ; \mathbf{f}_e 是作用在等离子的外力, μ 是真空中介电常数。

上述方程组加上磁场的无源条件 ($\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$) 得以完备。一旦初始条件满足无源条件, 由法拉第感应定律可知随后的演化就一直满足。大气压力根据理想气体状态方程有 $p = (\gamma - 1)[e - \rho \mathbf{v}^2 / 2 - \mathbf{B}^2 / (2\mu)]$, 其中 γ 是比热比。式 (31) 和 (30) 中的粘滞应力张量为:

$$\boldsymbol{\tau} = \nu \left[\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I} \right] . \quad (33)$$

式 (29)—(32) 可写成,

$$\partial_t \mathbf{u} = -\nabla \cdot \mathbf{F}_{\text{ideal}} + \nabla \cdot \mathbf{F}_{\text{diss}} \quad , \quad (34)$$

$$\partial_t \mathbf{B} = -\nabla \times \mathbf{E}_{\text{ideal}} - \nabla \times \mathbf{E}_{\text{diss}} \quad . \quad (35)$$

其中, $\mathbf{u} = (\rho, e, \rho \mathbf{v})$, $\mathbf{F}_{\text{ideal}}$ 和 $\mathbf{E}_{\text{ideal}}$ 分别是通量函数和电场的理想 MHD 部分, \mathbf{F}_{diss} 和 \mathbf{E}_{diss} 分别是通量函数和电场耗散部分,

$$\mathbf{F}_{\text{diss}} = (0, \mathbf{v}\tau + \frac{\eta}{\mu} \mathbf{B} \times (\nabla \times \mathbf{B}) + \kappa \nabla T, \boldsymbol{\tau})^T \quad , \quad (36)$$

$$\mathbf{E}_{\text{diss}} = \eta \nabla \times \mathbf{B} \quad . \quad (37)$$

而 $\mathbf{F}_{\text{ideal}}$ 和 $\mathbf{E}_{\text{ideal}}$ 的表达式可以很容易从剩余的项推导出来。

对于理想 MHD 部分, $\bar{\mathbf{F}}_{\text{ideal}}$ 和 $\bar{\mathbf{E}}_{\text{ideal}}$ 的计算采用高精度的针对双曲型守恒方程的激波捕捉算法, 所采用的算法是最初由 Kravtsov 等人^[51] 针对二维气体动力学和哈密顿-雅克比系统提出, 然后被推广到三维 MHD 的一个二阶精度、定向非剖分、Godunov 格式的中心迎风算法, 并整合了 CT 算法以保证无散条件 $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ 。数值通量的计算是基于众所周知的 HLL 公式, 而 E 是通过将相应的通量值求平均而得到其定义在边心的值。粘滞项、欧姆耗散项和热传导项采用通量守恒的形式, 用直接有限微分的方法离散化。更多详细的介绍可参考 Ziegler 的论述^[52]。

在空间离散化后得到的半离散时域常微分方程组可以通过三步 SSP RK3 (Strong Stability Preserving third-order Runge-Kutta) 积分方法求解。为了方便起见省略网格下标, 这三步可写成:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{u}}^{(1)} &= \bar{\mathbf{u}}^n + \delta t \cdot (-\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{F}}_{\text{ideal}}^n + \bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{F}}_{\text{diss}}^n) \quad , \\ \bar{\mathbf{B}}^{(1)} &= \bar{\mathbf{B}}^n - \delta t \cdot (\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\text{ideal}}^n + \bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\text{diss}}^n) \quad , \\ \bar{\mathbf{u}}^{(2)} &= \frac{3}{4} \bar{\mathbf{u}}^n + \frac{1}{4} \bar{\mathbf{u}}^1 + \frac{1}{4} \delta t \cdot (-\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{F}}_{\text{ideal}}^1 + \bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{F}}_{\text{diss}}^1) \quad , \\ \bar{\mathbf{B}}^{(2)} &= \frac{3}{4} \bar{\mathbf{B}}^n + \frac{1}{4} \bar{\mathbf{B}}^1 - \frac{1}{4} \delta t \cdot (\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\text{ideal}}^1 + \bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\text{diss}}^1) \quad , \\ \bar{\mathbf{u}}^{(3)} &= \bar{\mathbf{u}}^{n+1} = \frac{1}{3} \bar{\mathbf{u}}^n + \frac{2}{3} \bar{\mathbf{u}}^2 + \frac{2}{3} \delta t \cdot (-\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{F}}_{\text{ideal}}^n + \bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{F}}_{\text{diss}}^n) \quad , \\ \bar{\mathbf{B}}^{(3)} &= \frac{1}{3} \bar{\mathbf{B}}^n + \frac{2}{3} \bar{\mathbf{B}}^2 - \frac{2}{3} \delta t \cdot (\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\text{ideal}}^n + \bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\text{diss}}^n) \quad . \end{aligned} \quad (38)$$

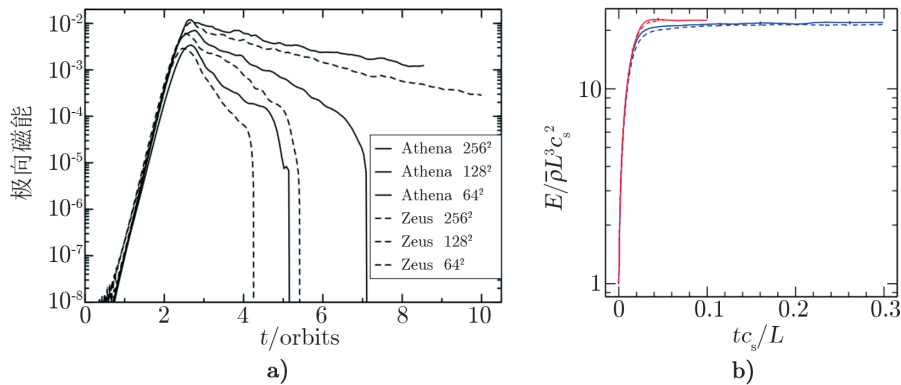
其中, 时间步长 $\delta t = t^{n+1} - t^n$, 其通过 CFL 条件与网格精度相关。如果 $(\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{B}}^n)_{i,j,k} = 0$, 式 (38) 保证了在第二、三两步 $\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{B}}^n = 0$ 都成立。这就保证了磁场在自适应格子上无散的属性。

3.4 ZEUS, ATHENA 与 NIRVANA 的比较

由上述数值算法的描述中, 可以看出 ATHENA 和 NIRVANA 的核心算法基本一致, 都是基于有限体积法的 Godunov 格式的欧拉方法, 但与 ZEUS 有较大差异。Stone^[53] 通过 MRI

和 MHD 湍流两个实例，验证了程序的可靠性，也比较了 ATHENA 和 ZEUS 在计算精度上的差异。

图 1 a) 是分别利用 ZEUS 和 ATHENA 模拟吸积盘中的 MRI 机制，在不同分辨率下各程序的表现差异。我们知道，在二维情况下，MHD 湍流不能被非净通量维持。所以磁能在饱和之后会衰退，并可能与数值磁重联有关 (或数值耗散)。一般来说，越高的分辨率，衰退越慢。从图 1 a) 看出，不管在哪个分辨率中，ATHENA 衰退得都比 ZEUS 慢。也就是说，在相同的分辨率下，ATHENA 确实要比 ZEUS 更精确，显示出更小的扩散性。图 1 b) 则是模拟了行星际介质中的 MHD 湍流中动能和磁能在不同分辨率下的发展过程，可以看出，他们的结果都是一致的，也从另一方面验证了两种程序的可靠性。综上，ATHENA 在精度上确实要比 ZEUS 高，且同 ZEUS 一样可靠。



注: a) 不同分辨率下的二维 MRI 过程中的极向磁能的变化; b) MHD 湍流驱动下的磁能和动能的演化: ZEUS(虚线), ATHENA(实线); 分辨率: 128^3 (蓝色), 256^3 (红色)。

图 1 ZEUS 和 ATHENA 就两个应用实例的差异表现^[53]

对比 ATHENA 和 NIRVANA，两者算法基本相同，其主要差异是对无源条件的处理和并行效率上。图 2 a) 和 b) 分别显示了 ATHENA 和 NIRVANA 程序在天河二号超算上模拟 Orszag-Tang Vortex 的二维 MHD 情况，从图中可知 NIRVANA 在强扩展性和弱扩展性上的特性都比 ATHENA 略胜一筹，但计算中也发现无源条件的保证 ATHENA 的精度可以达到 10^{-12} ，而 NIRVANA 是 10^{-6} ，两者各有所长。

作为天体物理中被广泛应用的开源程序，ZEUS, ATHENA 和 NIRVANA 的不同点如表 1 所示。可以看出，ZEUS 是基于 Fortran 语言开发的供科学计算的平台；ATHENA 和 NIRVANA 则是基于 C 语言开发的程序，计算效率比 ZEUS 高且供二次开发的接口很多；面对复杂的物理问题，ATHENA, NIRVANA 比 ZEUS 更具有优势，可以处理更多的物理问题；目前 ATHENA 的自带物理问题相对比较全面，有可压缩的 HD 和 MHD 问题 (1D, 2D, 3D)、相对论 HD 和 MHD 问题、理想气体状态方程、平流效应、重力效应、欧姆耗散和霍尔效应、N-S 粘滞、热传导效应、光学薄辐射冷却等。但这些程序对扩散项的处理都是显式时间积分法，必须满足 CFL 条件。

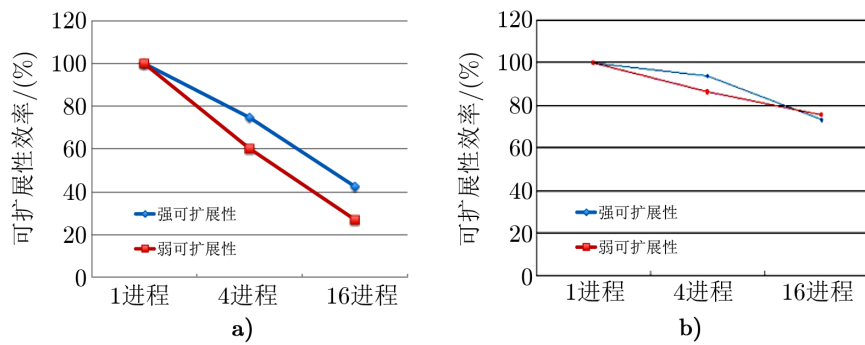


图 2 ATHENA (图 a)) 和 NIRVANA (图 b)) 的 CPU 可扩展性差异

表 1 各程序表现差异

	ZEUS	ATHENA	NIRVANA
计算平台	Fortran	C 语言 +MPICH	C 语言 +MPICH2
计算格式	WENO	Godunov	Godunov
方法	有限差分	有限体积	有限体积 + 有限差分
热传导求解	—	经典显式时间迭代	显式时间迭代或超级时间步
辐射效应	辐射转移方程	光学薄辐射函数	光学薄辐射函数
细化功能	—	SMR	AMR+SMR
数据格式	HDF5	pdf, pgm, ppm, tab, vtk, bin	IDL, SILO, HDF

ZEUS-MP/ATHENA/NIRVANA 的数据通讯模式是基于 MPI 库的, 并且大量地使用粗粒度并行计算概念。这种策略背后的思想是: 第一, 为了保持用于通讯的程序的简洁, 而不是在很多不同的地方大量地调用 MPI 函数; 第二, 使得用于计算的程序和用于通讯的程序分开。全局的数据收集 (通信) 和全局缩小操作 (比如与 CFL 计算有关的时间步) 通过标准的 MPI ALLtoall 和 MPI Allreduce 库程序完成。在点对点数据传输的情况下, 异步通讯被尽可能地采用以减少闲置时间。不同类型的异步任务在统一的数据传输模式下完成。整个流程基本上可以分成三步。第一步, 分区边界的网格结构在网格管理体系的帮助下进行分析。基于分析结构以及异步类型一个通讯数据层被建立, 然后是参与数据通讯的处理器之间的通信。在通信过程中, 处理器交换有关数据总数的信息。这一步只需在时域求解过程中进行。第二步, 需要转移的数据被收集, 然后打包到两个大的数据流 (包括物理量的数据和通用块相关信息) 并安排传输时间。数据打包通过最基本的 ANSI-C 实现, 没有采用特别的 MPI 数据类型。第三步, 解压接收到的数据, 并放在结构化的列表中以备进行后续处理, 比如指定守护单元等。第二步和第三步需要在每一次时域求解后运行。

4 相关程序的发展及应用

一般认为宇宙磁场起源于宇宙等离子体中的局部不均匀性。这种不均匀性导致等离子体中出现压力和密度梯度,然后驱动等离子体朝着梯度减小的方向运动。在同样的压力梯度下,电子的运动显然会比其他带电粒子的运动快,由此造成在德拜半径以外的正负电荷的分离,其立即在相应的区域当中产生宏观传导电流并进一步产生磁场。这就是通常所说的 Biermann 电池效应(见文献 [54-56] 中的详细讨论)。当然,在宇宙的环境中这样产生出来的磁场往往是很弱的,称为种子磁场,其强度一般在 $10^{-25} \sim 10^{-23}$ T 的量级,必须通过发电机过程将其大幅度放大至 10^{-11} T 以上的量级才能够被探测到。在宇宙中的很多地方都存在发电机过程,如行星内部的流体核心中、恒星的对流区当中及其他行星际中,以及黑洞与星系核周围的吸积盘当中。因此,宇宙磁场的产生及维持分属于两个不同的过程:先是产生种子磁场,然后是种子磁场的放大。与后者相比,我们显然对产生种子磁场的 Biermann 电池效应了解得更加全面和深刻,对放大种子磁场并维持大尺度磁场的发电机过程了解得不够,特别是对发生在恒星和行星内部的发电机过程的了解远远不够^[57]。太阳以至于恒星内部的发电机过程一直都是未解之热门课题,也是 MHD 数值模拟方法和技术经常能够发挥重要作用的领域。

当磁场被电池效应产生出来,然后被发电机过程放大之后,它与周围等离子体和其他磁场的相互作用往往会导致物理本质上非常复杂和表现非常丰富的过程和现象,甚至是异常剧烈的爆发过程。对这些现象和过程的研究构成了天体物理领域内十分重要的工作内容。经常在天体系统中产生的喷流就是一个典型的例子。喷流常发生在恒星中,尺度为千千米或万千米。它们通常被解释为高能等离子体束从一个中心能量源或者“引擎”中射出。在恒星的尺度上,引擎常常是一个原恒星;在银河系中,它有可能是一个大质量的黑洞。由于喷流过程中被发现伴随着偏振很明显的辐射,这表明喷流是发生在磁场存在的区域,甚至直接是因磁场的相互作用导致的^[11, 12]。

在众多天体物理问题中,从太阳大气的动力学、太阳风及行星磁层的相互作用到星际云、恒星形成区、中子星、活动星系核的演化和动力学过程中,磁场都起着至关重要的作用。每一个复杂的天体系统,都表现出多尺度的空间结构和时间变化。为了研究这些现象,我们必须要求解一个多维度的偏微分动力学方程。当然,许多潜在的天体物理研究,除了要控制磁场外,还需要考虑辐射转移、部分完全电离、核反应、分子物理等。在此项工作中,我们将重点考察 MHD 方程。

4.1 ZEUS 的发展及应用

Stone^[40-42] 最早给出了著名的开源程序 ZEUS-2D 算法的理论解释,并做了相关案例的测试,然后系统地总结了 ZEUS 中针对 HD, MHD 和 RHD 问题的算法。随后,Low^[58](1995)在其中加入了双极扩散效应来分析原恒星中的磁场演化。Stone^[59]在处理部分电离的非理想 MHD 问题时加入了欧姆耗散,拓展了数值算法。Dessart^[60]改进了 RHD 算法,利用伪 3D 方法对星际风(star winds)的衍射进行了数值研究。当 ZEUS 在天体物理研究过程中得到广泛应用并取得显著成绩的同时,其中的相关算法也在不断地完善。在这个过程中,计算天体

物理学研究至少在如下几个方面取得了重要成果。

4.1.1 吸积盘的磁旋转不稳定性 (Magnetorotational Instability, MRI) 研究

Fromang^[61, 62] 研究了零通量吸积盘中由 MRI 驱使的 MHD 湍流性质。在特殊的初始磁场环境下, 利用局部剪切盒 (shearing-box)^[63] 近似, 即在局部动量方程和能量方程中加入一些源项, 并且在辐射方向上适用特殊的边界条件来求解; 此方法常用于研究吸积盘局部的动力学行为, 但是不能描述整体的性质, 比如质量的吸积率、辐射密度和温度或者辐射能谱等。他发现湍流活动随着分辨率的增加而降低。通过对其傅里叶空间的分析, 他找到原因是 MRI 限制了能量通量下降到网格耗散的尺度。该结果表明数值耗散的尺度, 当与网格的尺度相当时, 是决定 MHD 湍流是否饱和的关键因素。同时, 此工作的结果表明, 在研究 MHD 湍流时, 等离子体物理耗散 (包括粘滞和电阻) 的作用不能被忽略。

4.1.2 恒星形成的磁解耦阶段

Desch 和 Mouschovias^[64] 描述了一个坍缩的分子云核心的磁解耦模型。他们注意到, 在磁解耦阶段, 中性粒子的运动与磁场强度之间相互影响不再显著。他们分析了弱电离磁性气体的阻抗率, 同时分别计算了欧姆耗散和双极扩散的贡献。结果表明, 决定磁解耦机制的是双极扩散, 不是欧姆耗散, 并且该阶段发生在恒星中心物质形成之前。这个过程中没有出现流体激波, 在磁场被物质冻结之前, 磁通量问题可以用双极扩散来解决。

4.1.3 活动星系核 (AGN) 反馈和冷却流

近年, 人们越来越清晰地认识到, AGN 对大尺度结构和星系形成有一定的影响。Vernaleo 和 Reynolds^[44] 通过一系列高分辨率的三维流体动力学模拟分析了喷射活动星系和其在一个星系团内介质 (Intracluster medium, ICM) 中的冷却调节吸积反应。他们发现, 理想的 HD 模型不能维持一个长期的加热与冷却平衡; 灾变性冷却的发生可以因喷流的出现而往后延迟, 但却无法避免。这些模型失败的主要原因有可能是因为一个低密度通道的形成, 喷流可以在其中任意流动, 把能量从冷却核运输出来; 也可能是因为处理快速喷流的方法过于简单而导致失败。因此, 他们建议加大计算的复杂程度 (大角度喷流推进或 ICM 湍流), 或者加入额外的物理问题 (比如 MHD 效应和等离子体的传输过程) 以产生一个随空间分布的加热项, 从而避免可能出现的灾变性冷却。

4.1.4 星系团内介质中的温度分布结构

Reynolds 等人^[45] 指出, 理想 HD 模型不能解释星系团核心区域里的气体温度结构及射电星系/ICM 相互作用的观测形态。最近的研究表明, 在磁场存在的情况下, ICM 中的热传导过程可能对重现许多系统中的温度层至关重要。如果这是正确的, 不禁让人联想到其他的传导过程也可能很重要。带着这个想法, 他们利用 ZEUS-MP 对 ICM 中的 AGN 气孔的演化过程进行了 3D 模拟, 模型中包含了一个不可忽略的剪切粘滞。结果表明即使一个中等水平的剪切粘滞, 也可能限制流体的不稳定性, 对维持 ICM 洞的完整性起着重要的作用。

4.1.5 太阳爆发过程中各种波的研究

Wang 等人^[65-67] 利用 ZEUS-2D 模拟了太阳爆发的过程。其物理模型是 Lin 和 Forbes^[68] 的灾变模型。他们分析了这个过程中色球层中的 Moreton 波和日冕层 EIT 的来源^[65]、磁通

量绳平衡态与初始磁场位型的关系^[66]及速度涡旋、快模激波的反射和折射对 EUV 波形成的贡献^[67]。这些工作对太阳爆发中大尺度的波动现象或伴生现象产生的物理机制进行了解释,具有重要的物理意义。

4.2 ATHENA 的发展及应用

ATHENA 是继 ZEUS 之后发展出来的高阶数值模拟程序,它更侧重于 MHD 问题的计算。Gardiner 和 Stone^[49, 69, 70]系统地给出了求解二维、三维理想 MHD 方程的非算子分解的 Godunov 算法,分析了算法的 CFL 条件,并利用一系列经典案例的测试来验证算法的可靠性。紧接着,他们^[71]为研究吸积盘的动力学性质加入了剪切盒模型的近似模拟,此算法同时也被广泛地应用于 MRI 的非线性动力学研究。随后,Skinner 和 Oshiker^[72]把原来基于直角坐标系的程序扩展到圆柱坐标系中。Beckwith 和 Stone^[73]考虑了相对论 MHD 问题,改进了算法。初步用来研究超声速的磁化喷流和由相对论 Kelvin-Helmholtz 不稳定性驱使的湍流导致的磁场强度增强。现在已经可以将此方法加入原程序的模块当中并对外公开,这对计算和解决相对论 MHD 问题具有重要意义。下面列出基于 ATHENA 取得的几个重要成果。

4.2.1 原行星盘 (Protoplanetary Disks, PPDs) 中的气体与固体耦合的运动学特征

Bai 和 Stone^[74]设计了一个粒子-气体混合的算法,用来计算气流通量的特征和粒子凝聚性。方法中通过使用两种积分算子:半隐性算子和全隐性算子,分析了该方法的稳定性。他们研究了非线性饱和状态的通量不稳定性数值收敛,结果表明该方法使得气流特征在中等分辨率的网格上是收敛的,而粒子凝聚性只能在高分辨率网格上收敛。此项工作为气体-粒子混合模型在 ATHENA 上实现的可能性做出了验证,具有开拓性的意义。

4.2.2 漩涡吸积盘的动力学研究

Shen 等人^[75]对垂直分层的三维开普勒盘进行了高分辨率的 HD 模拟,同时说明 ATHENA 在处理 HD 问题上也展现了良好的秉性。他们研究一个由 Kolmogorov 湍流驱动的符合幂律分布的漩涡。在三维模型下,漩涡浮现和消退得很慢,只有长宽比小于 1 的才能幸存,但可惜没有得到任何持续的动力学湍流和传输的证据。相反,后期剩余的传输过程主要是由缓慢衰退的大尺度漩涡决定的,其中几乎不可压缩的惯性波也作出了一些额外的贡献。这对于评估大尺度漩涡在吸积盘中的角色并理解产生和破坏他们的机制,具有重要的意义。

4.2.3 磁热不稳定性 (MagnetoThermal Instability, MTI) 的非线性行为

在弱磁化、稀薄等离子体中,热传导对对流稳定性的影响十分重要。这种对流不稳定性会造成所谓的 MTI。Parrish 和 Stone^[76, 77]利用 MHD 模拟,考虑各向异性的电子热传导效应,先后用 ATHENA 程序来研究二维平行平面大气及三维模型下 MTI 的发展及饱和过程。他们研究了强磁场和各向同性热传导对 MTI 的线性阶段和非线性阶段的影响,得出对热流贡献最多的是对流运动的结论。这些结果可以解释各种天体系统中的 MTI 现象,如星系簇中的热气体温度分布和低辐射率的吸积流的结构等。

4.2.4 激波与星系际介质云相互作用的磁流体动力学研究

Shin 等人^[78]利用星系介质的密度不均匀性与激波的相互作用模型,对激波与星系际介质云的相互作用进行了 MHD 模拟。他们假设介质云足够地小,辐射冷却、热传导及自引力

都可以忽略。通过设置各种各样的初始磁场位形, 他们发现在早期的相互作用阶段, 介质云被冲击后的结构对初始磁场的变化不敏感, 而后期阶段强磁场能够显著地改变介质云的动力学形态, 遏制住了云的分裂行为。与 HD 模型相比, 即使是弱磁场也会大幅度地影响介质云的演化。此工作利用三维的 MHD 模拟, 细致地展示出了激波-介质云相互作用的过程, 对考察其中的湍流及不稳定性发生的阶段并分析其影响因素, 理解其物理机制, 具有重要意义。

4.2.5 吸积盘冕环内的磁重联过程

Salvesen 等人^[79] 利用局部剪切盒逼近理想 MHD 模型来捕捉黑洞吸积盘内的中等尺度结构。吸积盘中产生的磁场通过 MRI 的动力学过程被源源不断地传输到冕环上。这导致冕环变成了一个强磁压、低密度和很厚的几何形态的环境, 吸积的能量被大量地耗散掉, 其原因可能是由于无碰撞的磁重联产生了物质外流。他们使用了一个定位规则来确认电流密度加强的区域, 以此来跟踪磁重联发生的位置。通过描述位置、方向、大小、形状、强度和这些区域内的运动学过程, 并分析数值耗散的空间分布来校对物理意义上的能量耗散率。同时, 利用电流密度区域的统计分布, 也可以用来确定冕环的高度 (对耗散率贡献最大)、重联相关的流体特征和一些代表性的参数, 并用于未来大规模的重联模拟, 具有潜在的应用价值。

4.3 NIRVANA 的发展及应用

NIRVANA 是 Ziegler 发展的用于 MHD 模拟的 AMR 软件, 在算法上类似于 ATHENA, 但不同于 ATHENA 有限体积法的全离散过程, NIRVANA 属于半离散过程 (即空间维度上积分及时间维度上保持微分形式); 而且因为加入了 AMR 特性, 擅长多尺度计算而被天体物理领域广泛应用。NIRVANA 的雏形是以 “NIRVANA+” 的名字出现的, 最初用来处理电离气体 HD/MHD 的二维问题, 当时已具备 AMR 功能^[80]。随后, Ziegler 又加入泊松方程求解器, 并将他的程序正式命名为 NIRVANA^[81]。紧接着, 在 AMR 基础上加入了自引力问题^[82]。2008 年, Ziegler 才第一次系统地总结 NIRVANA 在 MHD 计算中的数值算法, 并且详细地阐述了并行计算实现的框架。这不管是对于程序的直接使用者或是用于二次开发的使用者来说都是非常有意义的^[52]。下面列出基于 NIRVANA 的使用而取得的重要成果。

4.3.1 原行星吸积盘的行星迁移动力学行为

Kley 等人^[83] 利用三维的辐射流体动力学 (RHD) 模拟来考察不同质量的原行星在辐射盘内的迁移行为。在模拟过程中, 他们加入了对辐射转移方程的求解, 是由隐式的 FLD (Flux-limited Diffusion) 方法求解的。经典的标准模型指出, 假设考虑局部等温的吸积盘, 在低行星质量阶段, 会导致一个向内 (I 类) 的迁移。而考虑非等温的情形, 最近的研究证明 I 类迁移的方向会从向内改成向外迁移。Kley 等人的工作证明了这一观点, 发现质量为 33 倍地球质量的原行星会向外迁移。因此, 此结果可帮助解决一些向内 I 类迁移过快的问题。

4.3.2 基于 NIRVANA 的剪切盒 (shearing-box) 模型算法

Gressel 和 Ziegler^[84] 在 NIRVANA 原有的基础上加入了剪切盒近似, 用来解决某些需要局部剪切周期性边界条件的问题。他们同时也展示了一个真实的研究 MRI 的模拟结果, 验证了算法的正确性, 进一步加强了 NIRVANA 的兼容性。

4.3.3 太阳爆发现象中的磁重联过程

Mei 等人^[85]利用二维的灾变模型^[86-88]模拟了太阳爆发过程。通过分析联接 CME 和耀斑的磁重联电流片的内部精细结构,他们发现磁重联先后经历了 Sweet-Parker 和撕裂模阶段,同时展现了随时间演化的 Petschek 部分,并证实(或是重现)了 Vasylunas (1975) 的理论结果^[89]。这是第一次利用数值实验的手段,将 CME/耀斑电流片中的内部精细结构如此详细地展示出来。这些工作说明了 NIRVANA 在太阳领域还有很多的应用潜力。

4.3.4 太阳色球部分电离等离子体环境下磁重联过程中的新发现

Ni 等人^[90]在较为真实的色球层中部环境下研究了磁重联发生的物理机制和过程,模型考虑了部分电离、双极扩散效应、辐射冷却和重力分层作用,磁雷诺数可达到 $10^6 \sim 10^7$, 接近真实值的范围。在高分辨率的数值计算下,首次分辨出四级磁岛联级过程最小电流片的宽度大约为 30 m, 接近离子和中性粒子碰撞的平均自由程;磁重联率可达到 0.01~0.03, 与观测所得到的重联率范围一致;磁重联出流的速度可达到 $40 \text{ km}\cdot\text{s}^{-1}$, 接近观测到的色球喷流的速度。其中很重要的一个数值实验结果是我们首次发现在多级磁岛的边缘有很多小尺度激波出现,这些激波结构能使初始温度为 7 000 K 的等离子体被加热到 80 000 K 以上,可能是色球磁重联过程中等离子体被加热的重要物理机制。该过程可用于解释最近 IRIS 在太阳色球观测到的温度高于 80 000 K 的等离子体团产生的原因^[91-93]。

4.3.5 日冕电流片中能量转化和谱分析的详细研究

通过 2.5 维的高精度磁流体力学数值模拟实验, Ni 等人^[94]研究了日冕电流片中磁能与热能和动能之间的转化和能量谱分布。我们的数值实验表明,在接近日冕真实参数的低等离子体密度和等离子体 β 环境下,磁岛不稳定磁重联过程中与重联 X 相连的磁岛内有快模激波和慢模激波结构出现。这些不同尺度的激波是磁重联过程中加热等离子体的主要物理机制,等离子体可由初始 $1 \times 10^6 \text{ K}$ 的温度被加热到 $3 \times 10^7 \text{ K}$ 以上。在磁岛不稳定性磁重联和激波出现前,被磁重联过程耗散的磁能只有 20% 转化成热能;在激波结构出现后最终转化为热能的磁能达到 60% 以上。在二级磁岛出现后,沿着电流片方向磁能谱不是一个简单的单幂律谱^[95],谱指数随着波数的增加而增加,平均的谱指数为 1.8,接近湍流的 Kolmogorov 湍流谱指数。我们还计算了随磁通量变化的磁岛分布函数,发现在中间大小的磁通量区间,磁岛的分布函数接近单幂律谱,这与 Huang 和 Bhattacharjee^[96]的结果一致。

5 总结和展望

本文简要回顾并介绍了经典的 MHD 数值模拟方法的发展和应用,特别是对天体物理中广泛使用的 ZEUS, ATHENA 和 NIRVANA 三种开源程序的介绍。在天体物理的研究中,人们通过观测得到的结果和理论推导的结果往往相差很大,或者存在决定着整个大尺度 MHD 过程的小尺度的物理机制因观测设备分辨率不足而无法被捕捉到的困难。比如在太阳爆发过程中,观测发现耀斑-CME 之间的电流片厚度因投影效应的影响可以达到 $10^4 \sim 10^5 \text{ km}$ 的量级^[97];而理论的电流片厚度可能只有几十米或者几千米。为了使理论和观测统一,自然需

要利用数值模拟技术来解释在如此厚的电流片当中发生了什么样的物理过程。因此, 数值模拟技术作为理论和观测的桥梁, 发挥着至关重要的作用。随着高性能计算平台能力的日益提升, 数值模拟的精度也相应提高, 使得研究天体系统中小尺度的内部精细结构成为可能。同时, 为了提高计算效率和计算的准确性, 数值模拟方法或算法的研究也变得十分重要。

MHD 模拟在大尺度或中等尺度的计算中, 多用欧拉方法来重现特殊的天体现象; 而 PIC (Particle-in-cell)^[98-101] 在小尺度上的模拟则用拉格朗日方法来跟踪电子加速或离子加速的运动轨迹, 常见于多种天体物理现象和实验室激光等离子体现象的研究。网格生成技术和网格细化技术 (SMR 或 AMR) 则决定着数值求解 MHD 方程组的精度问题。不同类型网格生成的复杂度不同, 消耗的计算资源也不同; 而网格细化技术可实现局部网格精度加密, 在进行多尺度物理现象研究时, 只对感兴趣的区域加密从而避免全局加密, 以免造成计算效率大幅度降低。

(磁) 流体动力学模拟目前最大的挑战是多尺度的空间跨度和复杂物理过程的重现。尽管高速计算软硬件技术飞速地发展, 但依然面临着天体物理学尺度的超大计算量的挑战, 我们急需发展出新的高效计算方法以及数据可视化技术。一些特殊的过程 (比如激波-湍流) 需要亚网格尺度和捕捉激波制式, 使得计算更加复杂。这也就是为什么做 MHD 模拟首先要研究数值计算方法, 因为我们一定要做到计算过程的稳定性、高效性、准确性和可扩展性。

集上述特性于一体的、具有代表性的三个程序 ZEUS, ATHENA 和 NIRVANA, 是天体物理中用于 MHD 模拟的著名开源程序。我们比较了各个程序的核心算法、程序框架和加入多种物理效应的思想。通过对计算方法的讨论, 我们可以十分精确地分析出各个程序的计算精度和计算效率, 及具有的功能性。在深刻理解程序本身原理的基础上, 进一步改造、优化、发展及应用。目前, 国内天体物理 MHD 数值模拟依旧处于薄弱的阶段, 我们使用的数值模拟工具或源程序都是国外大学或研究所内项目团队多年开发出来的相对比较成熟的平台, 但应用于具体的物理问题时往往存在许多问题 (算法兼容性、边界条件或没有考虑某些物理效应等); 因此, 发展一套相关领域内适用的、国人自主研发的程序, 将会迸发出许多潜在的应用, 具有重要的意义。我们借鉴他人成果的同时必须要有创新, 才能使国内天体物理数值模拟工作在国际中占有一定的地位, 这将是科研人员和工程人员今后共同努力的方向。

最后, 针对各个程序, 我们给出了一些具有代表性的工作, 一部分是对程序本身算法、架构或新的物理问题的发展; 另一部分是利用程序本身的普适性对我们感兴趣的物理问题进行深入研究、并重现相应的和可能的观测结果, 从而揭示其物理本质。目的是给相关科学领域的研究者一个比较全面的认识, 设想未来可能的应用潜力。在太阳物理领域的应用目前正在探索阶段, 是否能够通过改造这些程序 (算法、架构或者并行规则等) 使其真正地适用于太阳大气的复杂物理环境, 将是我们接下来考察的重心; 同时, 是否利用这些程序展开的数值模拟工作可以对观测结果或现有的理论模型提供一些影响和补充? 这些都是值得我们在以后的工作当中进一步深入思考和探索的问题。

参考文献:

- [1] 汪景琇, 袁峰, 陈鹏飞, 等. 天文学进展, 2016, 34: 365
- [2] 杨孝鸿. 天文学进展, 2016, 34: 477
- [3] 部德福, 袁峰. 天文学进展, 2016, 34: 522
- [4] Ryutov D D, Drake R, Remington B. *ApJS*, 2000, 127: 465
- [5] Roe P L. *J. Comput. Phys.*, 1981, 43: 357
- [6] Einfeldt B. *Siam J. Numer. Anal.*, 1988, 25: 294
- [7] Toro E F, Spruce M, Speares W. *Shock Waves*, 1994, 4: 25
- [8] Quirk J J. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 1994, 18: 555
- [9] Miyoshi T, Kusano K. *J. Comput. Phys.*, 2005, 208: 315
- [10] Nishikawa H, Kitamura K. *J. Comput. Phys.*, 2008, 227: 2560
- [11] Yuan F, Lin J, Wu K, et al. *MNRAS*, 2009, 395: 2183
- [12] Meng Y, Lin J, Zhang L, et al. *ApJ*, 2014, 785: 62
- [13] Harten A. *J. Comput. Phys.*, 1983, 49: 357
- [14] Colella P, Woodward P R. *J. Comput. Phys.*, 1984, 54: 174
- [15] Liu X D, Osher S, Chan T. *J. Comput. Phys.*, 1994, 115: 200
- [16] Gingold R A, Monaghan J J. *MNRAS*, 1977, 89: 375
- [17] Monaghan J J. *ARA&A*, 1992, 30: 543
- [18] Godunov S K. *Mat. Sb.*, 1959, 47: 271
- [19] Feng L L, Shu C W, Zhang M. *ApJ*, 2004, 612: 1
- [20] 沈呈彩, 林隽. 天文学报, 2009, 50: 391
- [21] Fryxell B, Olson K, Ricker P. *ApJS*, 2000, 131: 273
- [22] O'Shea B W, Bryan G, Bordner J. *Springer Lecture Notes in Computational Science & Engineering*, 2004, 41: 341
- [23] Ziegler U. *A&A*, 2005, 435: 385
- [24] Iapichino L, Schmidt W, Niemeyer J C. *MNRAS*, 2011, 414: 2297
- [25] Mavriplis D J. *Ann Rev Fluid Mech*, 1997, 29: 473
- [26] 王俊杰, 高正红. 应用力学学报, 2006, 23(4): 623
- [27] 刘剑明, 赵宁, 胡偶, 等. 空气动力学学报, 2010, 28(1): 61
- [28] Krumholz M R, Klein R I, McKee C F, et al. *Science*, 2009, 323: 754
- [29] Nordhaus J, Burrows A, Almgren A, et al. *ApJ*, 2010, 720: 694
- [30] Hirose S, Krolik J H, Blaes O. *ApJ*, 2009, 691: 16
- [31] Koyama H, Inutsuka S I. *ApJ*, 2002, 564: L97
- [32] Balbus S A, Hawley J F. *ApJ*, 1991, 376: 214
- [33] Balbus S A, Hawley J F. *Reviews of Modern Physics*, 1998, 70: 1
- [34] Yang X, Yuan F. *PASJ*, 2012, 64(4): 101
- [35] Jiang Y F, Stone J M, Davis S W. *ApJS*, 2012, 199: 14
- [36] Davis S W, Stone J M, Jiang Y F. *ApJS*, 2012, 199(1): 9
- [37] Jiang Y F, Stone J M, Davis S W. *ApJS*, 2014, 213(1): 603
- [38] Evans C, Hawley J F. *ApJ*, 1988, 332: 659E
- [39] Hawley J F, Stone J M. *Computer Physics Communications*, 1995, 89: 127
- [40] Stone J M, Norman M L. *ApJS*, 1992, 80: 753
- [41] Stone J M, Norman M L. *ApJS*, 1992, 80: 791
- [42] Stone J M, Norman M L. *ApJS*, 1992, 80: 819
- [43] Clarke D A, Norman M L, Burns J O. *ApJ*, 1986, 311: 63
- [44] Vornaleo J C, Reynolds C S. *ApJ*, 2006, 645: 83
- [45] Reynolds C S, McKernan B, Stone J M, et al. *MNRAS*, 2005, 357: 242
- [46] Hawley J F, Smarr L L, Wilson J R. *ApJ*, 1984b, 55: 211

- [47] von Neumann J, Richtmyer R D. *J. Appl. Phys.*, 1950, 21: 232
- [48] Van Leer B. *J. Comput. Phys.*, 1977, 23: 276
- [49] Gardiner T A, Stone J M. *J. Comput. Phys.*, 2005, 205: 509
- [50] Toro E F. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*. Heidelberg: Springer, 1999: 1
- [51] Kravtsov A V, Klypin A A, Khokhlov A M. *ApJS*, 1997, 111: 73
- [52] Ziegler U. *Computer Physics Communications*, 2008, 179: 227
- [53] Stone J M. *ASP Conf. Ser.*, 2009, 406: 277
- [54] Biermann L. *Z. Naturforsch.*, 1950, 5a: 65
- [55] Roxburgh I W. *MNRAS*, 1966, 132: 201
- [56] Widrow L M. *Review of Modern Physics*, 2002, 74: 775
- [57] Cameron R H, Jiang J, Schüssler M, et al. *JGR*, 2014, 119(2): 680
- [58] Low M. *ApJ*, 1995, 442: 726
- [59] Stone J M. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 1999, 109: 261
- [60] Dessart L. *A&A*, 2002, 383(3): 1113
- [61] Fromang S. *A&A*, 2007, 58(5): 1610
- [62] Fromang S. *A&A*, 2007, 476(3): 1123
- [63] Hawley J F, Gammie C F, Balbus S A. *ApJ*, 1995, 440: 742
- [64] Desch S J, Mouschovias T C. *ApJ*, 2001, 550: 1
- [65] Wang H, Shen C, Lin J. *ApJ*, 2009, 700: 1716
- [66] Wang H, Liu S, Gong J, et al. *A&A*, 2015, 15: 363
- [67] Wang H, Liu S, Gong J, et al. *ApJ*, 2015, 805: 114
- [68] Lin J, Forbes T G. *JGR*, 2000, 105: 2375
- [69] Gardiner T A, Stone J M. *J. Comput. Phys.*, 2008, 227: 4123
- [70] Stone J M, Gardiner T A. *New Astronomy*, 2009, 14: 139
- [71] Stone J M, Gardiner T A. *ApJS*, 2010, 189: 142
- [72] Skinner M A, Ostriker E C. *ApJS*, 2010, 188: 290
- [73] Beckwith K, Stone J M. *ApJS*, 2011, 193: 6
- [74] Bai X, Stone J M. *ApJS*, 2010, 190: 297
- [75] Shen Y, Stone J M, Gardiner T A. *ApJ*, 2006, 653: 513
- [76] Parrish I J, Stone J M. *ApJ*, 2005, 633: 334
- [77] Parrish I J, Stone J M. *ApJ*, 2007, 664: 135
- [78] Shin M S, Stone J M, Snyder G F. *ApJ*, 2008, 680: 336
- [79] Salvesen G, Begelman M C, Simon J B, et al. *American Astronomical Society, HEAD meeting*, 2013, 126: 29
- [80] Ziegler U. *Computer Physics Communications*, 1998, 109: 111
- [81] Ziegler U. *J. Comput. Phys.*, 2004, 196: 393
- [82] Ziegler U. *Computer Physics Communications*, 2005, 170: 153
- [83] Kley W, Bitsch B, Klahr H. *A&A*, 2009, 506: 971
- [84] Gressel O, Ziegler U. *Computer Physics Communications*, 2007, 176: 652
- [85] Mei Z, Shen C, Wu N, et al. *MNRAS*, 2012, 425: 2824
- [86] Forbes T G. *Geophys. Astrophys. Fluid Dynamics*, 1991, 62: 15
- [87] Lin J, Forbes T G. *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, 2000, 105: 2375
- [88] Lin J. *Chin. J. Astron. Astrophys.*, 2002, 2: 539
- [89] Vasyliunas M V. *Reviews of Geophysics*, 1975, 13(1): 303
- [90] Ni L, Kliem B, Lin J, et al. *ApJ*, 2015, 799: 79
- [91] Peter H, Tian H, Curdt W, et al. *Science*, 2014, 346: 1255726
- [92] Tian H, Deluca E E, Cranmer S R, et al. *Science*, 2014, 346: 1255711
- [93] Vissers G J M, Rouppe van der Voort L, Rutten R J, et al. *ApJ*, 2015, 812: 11
- [94] Ni L, Lin J, Mei Z, et al. *ApJ*, 2015, 812(2): 92

- [95] Ni L, Ziegler U, Huang Y M, et al. *Physics of Plasmas*, 2012, 19(7): 93
[96] Huang Y M, Bhattacharjee A. *Physical Review Letters*, 2012, 109(26): 909
[97] Lin J, Murphy N A, Shen C, et al. *Space Science Reviews*, 2015, 194(1): 237
[98] Innes D E, Guo L J, Huang Y M, et al. *ApJ*, 2015, 813(2): 59
[99] Edwards S J, Parnell C E. *Solar Physics*, 2015, 290(7): 1
[100] Drake J F, Opher M, Swisdak M, et al. *ApJ*, 2010, 709: 963
[101] Drake J F, Swisdak M, Che H, et al. *Nature*, 2006, 443: 553

Investigation of the Wildly-used Astrophysical Codes: ZEUS, ATHENA and NIRVANA

YE Jing^{1,2,3}, SHEN Cheng-cai⁴, NI Lei^{1,2}, LIN Jun^{1,2}

(1. *Yunnan Observatories, Chinese Academy of Sciences, Kunming 650216, China;* 2. *Center for Astronomical Mega-Science, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100012, China* 3. *Key Laboratory of Modern Astronomy and Astrophysics, Ministry of Education, Nanjing University, Nanjing 210093, China;* 4. *Havard-Smithsonian Center for Astrophysics, Cambridge MA 02138, USA*)

Abstract: Hydrodynamics (HD) and Magnetohydrodynamics (MHD) simulation technics have been wildly developed, in the last decade, in order to describe the plasma behavior in a magnetic field related to some kinds of astrophysical system, such as magnetic reconnection in solar eruptions or the interstellar medium, star formation, and accretion flows. As we know, MHD approximation considers the plasmas as a collisionless neutral fluid and focuses on the macro description of dynamic phenomenons. Basically, we have two ways to describe fluids. One of them is Lagrangian method, while the other is Eulerian method. And MHD simulations usually belong to Eulerian class. In this work, three Eulerian grid-based codes: ZEUS, ATHENA and NIRVANA (2D or 3D) are introduced to solve MHD problems. We discuss the category of grid generation (Structured mesh, Unstructured mesh and Cartesian mesh) as well. Indeed, the main challenge for computational MHD in astrophysics is the huge discrepancy in space scaling and complex physical process coupling (shock-turbulence).

Furthermore, we present in detail a high-order accurate unsplit Godunov scheme using FVM for ATHENA and NIRVANA while ZEUS consists of finite-differencing the equations with split method. Relevant works using these codes are also illustrated to provide a better understanding of MHD computing optimization and feasible applications for various astrophysical problems such as accretion, star formation or solar atmosphere.

Key words: HD/MHD simulation; Staggered mesh; Godunov scheme; Split method; MPI computing