

М. А. Еремин, Е. О. Васильев, В. Н. Любимов

## ASTROCHEMHYDRO: ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ КОД ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ХИМИКО-ДИНАМИЧЕСКОЙ ЭВОЛЮЦИИ МЕЖЗВЕЗДНОЙ СРЕДЫ

Разработан и реализован параллельный трехмерный численный код для моделирования химической и динамической эволюции межзвездной среды. С использованием разработанного комплекса программ было выполнено численное моделирование физико-химической эволюции облака межзвездного газа, взаимодействующего с плоской ударной волной. Проведенные расчеты позволяют проследить превращения химических реагентов в результате динамического взаимодействия облака с ударной волной и изучить кинетику молекулярного водорода в зависимости от различного набора параметров. *Физика межзвездной среды; компьютерное моделирование; параллельные вычисления*

### ВВЕДЕНИЕ

Наблюдения являются основным способом получения информации об астрофизических объектах, однако астрономические наблюдения осложнены целым рядом факторов: во-первых, удаленностью объектов изучения, во-вторых, поглощением излучения в межзвездной среде на пыли, и, в-третьих, поглощением в атмосфере Земли. В отличие от других разделов физики, в астрофизике проведение экспериментов за редкими исключениями невозможно, что обусловлено, с одной стороны огромными пространственными и временными масштабами, и с другой, специфическими процессами, протекающими в астрофизических системах, которые зачастую не воспроизводимы в земных условиях.

В последние двадцать лет в связи с прогрессом в области компьютерных технологий роль численного моделирования в астрофизике резко возросла, поскольку именно оно позволяет проследить эволюцию различных астрофизических систем исходя из «первых принципов». Например, компьютерное моделирование широко применяется для верификации космологических моделей, исследования эволюции галактик и т. д. Для корректной интерпретации астроно-

мических наблюдений, а прежде всего это данные о химическом составе, необходимо самосогласованное моделирование динамической и химической эволюции межзвездного газа. Подобного рода задачи являются чрезвычайно сложными и ресурсоемкими. Это связано, например, с тем, что характерные времена протекания химических реакций и гидродинамических процессов отличаются на много порядков. Моделирование динамики химически реагирующих газов предъявляет особые требования и к объему необходимой оперативной памяти. Отметим, что учет переноса излучения, совершенно необходимый в задачах подобного рода, до сих пор выполняется в рамках достаточно грубых приближений. В межзвездной среде взаимодействие ударных волн, джетов и звездного ветра с облаками межзвездного газа имеет место при больших числах Рейнольдса, и является турбулентным. Таким образом, моделирование процессов, протекающих в астрофизических системах, может быть выполнено только с применением современных численных схем высокого разрешения и технологий параллельных вычислений.

Укажем на тот факт, что пространственное распределение межзвездной среды (МЗС) крайне неоднородно, вещество в МЗС сосредоточено в областях различной плотности и температуры: газовые и газопылевые облака, глобулы Бокка, гигантские молекулярные облака, теплая межоблачная среда и зоны НШ и т. д. Все это приводит к существенным различиям в физико-химических свойствах различных составляющих межзвездной среды. Например, температура газа в плотных молекулярных облаках, являющихся центрами активного звездообразования, составляет всего несколько Кельвин, в то

Контактная информация: [ereminmikhail@gmail.com](mailto:ereminmikhail@gmail.com).

Статья рекомендована к публикации программным комитетом международной научной конференции «Параллельные вычислительные технологии-2011» (<http://agora.guru.ru/pavt>).

Работа поддержана грантом ВолГУ 70-2011-а/ВолГУ, грантами РФФИ № 11-02-97124-р\_поволжье\_а, № 11-02-01332-а, № 09-02-97021, а также ФЦП Рособразование госконтракт П1248.

время как в горячем корональном газе, образующемся при взрывах сверхновых, температура межзвездного газа достигает нескольких миллионов Кельвин, различие плотности газа в этих составляющих межзвездной среды также оценивается как минимум в шесть порядков [1–3].

Газ в межзвездной среде находится в основном в двух фазах: в теплой разреженной фазе с температурой порядка  $10^4$  К и холодной плотной фазе с температурой около 100 К [4, 5]. Наибольшая часть массы межзвездного вещества сосредоточена в облаках различной плотности и размера, динамика и взаимодействие которых оказывают значительное влияние на эволюцию межзвездной среды.

Для описания эволюции МЗС важно иметь модели, адекватно описывающие динамику облаков. На эволюцию облака помимо других факторов может оказывать значительное влияние его взаимодействие с ударными волнами, образующимися, например, при вспышках сверхновых. Кроме того, химическая и динамическая трансформации облака могут быть обусловлены его прохождением через галактическую ударную волну. В результате этого взаимодействия может значительно меняться не только форма и размер, но и химический состав облака. Химические реакции, в свою очередь, также могут оказывать сильное влияние на динамику процесса, являясь эффективным способом отвода тепла.

Основными целями нашей работы являются:

- Разработка и реализация параллельного трехмерного кода AstroChemHydro для моделирования процессов в межзвездной среде с учетом химических реакций.
- Численное моделирование физико-химической эволюции облака межзвездного газа, взаимодействующего с плоской ударной волной.

## 1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

### 1.1. Уравнения газодинамики смеси газов

Система уравнений, описывающая течение смеси химически реагирующих газов в одножидкостном приближении, записывается в виде [6, 7]:

$$\frac{\partial p X_i}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u} X_i) = \rho \sigma_i, \quad i = 1, \dots, n_s, \quad (1)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p, \quad (3)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla([E + p]\mathbf{u}) = -L. \quad (4)$$

Здесь  $\rho$ ,  $p$ ,  $\mathbf{u} = \{u, v, w\}$  – плотность, давление и вектор скорости смеси газов соответственно,  $X_i = \rho_i / \rho$  – массовая доля (концентрация)  $i$ -го газа,  $\sigma_i$  – массовая скорость производства  $i$ -го компонента, определяемая набором химических реакций,  $n_s$  – количество реагентов в смеси,  $E = \rho(\mathbf{u}^2/2 + e)$  – объемная энергия,  $e$  – удельная внутренняя энергия,  $L = \Lambda - \Gamma$  – функция неравновесных тепловых потерь,  $\Lambda = \Lambda(E, q^{(i)})$  – скорость (темп) объемного охлаждения,  $\Gamma = \Gamma(v, q^{(i)})$  – скорость объемного нагрева. Отметим, что в химическом равновесии все  $\sigma_i$  тождественно равны нулю.

Плотность  $i$ -го компонента определяется через его атомный вес  $A_i$  и концентрацию  $n_i$  по формуле:

$$\rho_i = A_i m_p n_i,$$

где  $m_p$  – масса протона.

Массовые доли газов, входящих в состав смеси, удовлетворяют соотношению нормировки:

$$\sum_{i=1}^{n_s} X_i = 1. \quad (5)$$

Давление  $p$  определяется уравнением состояния, которое связывает давление и температуру газа с плотностью и удельной тепловой энергией. Для замыкания системы (1)–(4) в данной модели будем использовать уравнение состояния в форме уравнения состояния для идеального газа:

$$p = \rho e(\gamma - 1) = \frac{\rho k_B T}{\mu m_p}, \quad (6)$$

где  $\gamma$  – показатель адиабаты (для одноатомного газа  $\gamma = 5/3$ ),  $k_B$  – постоянная Больцмана.

Средняя молекулярная масса смеси  $\mu$  вычисляется следующим образом

$$\frac{1}{\mu} = k \sum_{k=1}^{n_s} \frac{x_k}{A_k}. \quad (7)$$

Система уравнений, описывающая невязкие течения многокомпонентной смеси химически реагирующих газов (1)–(4) записывалась в безразмерной форме с использованием нескольких

базисных величин. Перечислим наиболее важные размерные параметры задачи:  $L_0 = 1$  пк – характерный пространственный масштаб,  $T_0 = 10^4$  К – температура,  $n_0 = 0,1$  г/см<sup>3</sup> – концентрация,  $c_{s0} \approx 12$  км/с – адиабатическая скорость звука,  $t_0 \approx 10^5$  лет – характерное время задачи.

### 1.2. Описание химической модели

Уравнения для моделирования газовых течений с химическими реакциями представляют собой нестационарные трехмерные уравнения для плотности газа, плотностей химических компонентов, скорости и энергии. В общем виде уравнения сохранения массы химических компонентов можно записать в виде:

$$\frac{\partial \rho X_i}{\partial t} = -\nabla(\rho u X_i) - \nabla(\rho v X_{d,i}) + \rho \sigma_i. \quad (8)$$

При условии малой диффузии отдельных компонентов ( $u \gg v d_i$ ) уравнение сохранения массы  $i$ -го компонента можно рассматривать отдельно как перенос пассивного компонента (первое слагаемое) и химические превращения компонента (последнее слагаемое).

Массовая скорость производства  $i$ -го компонента зависит от скорости его образования  $F_i$  и разрушения  $D_i$ , так что

$$\sigma_i = F_i - D_i X_i, \quad i = 1, \dots, n_s.$$

В соответствии с идеей метода расщепления по физическим процессам, решение системы уравнений (8) строится как совокупность решений уравнений адвекции и химической кинетики. Таким образом, для переноса каждого из химических компонентов записывается отдельное уравнение непрерывности и отдельно решается система уравнений химической кинетики:

$$\frac{dX_i}{dt} = F_i - D_i X_i, \quad i = 1, \dots, n_s. \quad (9)$$

Химическая кинетика межзвездного газа включает в себя следующие основные компоненты: H, H<sup>+</sup>, H<sup>-</sup>, He, He<sup>+</sup>, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub><sup>+</sup>, C, C<sup>+</sup>, O и O<sup>+</sup>. Для расчета концентрации электронов мы предполагаем выполнение закона сохранения заряда. Массовая доля гелия предполагалась равной  $Y_{\text{He}} = 0,24$ . Обилия углерода и кислорода приняты равными солнечным [9]:  $(C/H)_{\odot} = 2,45 \cdot 10^{-4}$ ,  $(O/H)_{\odot} = 4,57 \cdot 10^{-4}$ . Скорости химических реакций для столкновительных и радиационных процессов были взяты из [10, 11]. В системе химических реакций учтен процесс образования молекулярного водорода на пылинках [12]:



который является доминирующим каналом образования H<sub>2</sub> в межзвездной среде с металличностью близкой к солнечному значению.

### Процессы охлаждения и нагрева, включенные в модель

Процесс	Ссылка
H возбуждение	[13]
H столкновительная ионизация	[13]
H <sup>+</sup> рекомбинация	[13]
He возбуждение	[13]
He столкновительная ионизация	[13]
свободно-свободные переходы (H <sup>+</sup> , He <sup>+</sup> )	[13]
He <sup>+</sup> рекомбинация	[13]
H <sub>2</sub> вращательно-колебательные переходы	[10, 12]
H <sub>2</sub> столкновительная диссоциация	[14]
рекомбинация на пылинках	[15]
столкновения газ-пыль	[15]
СП 2326A	[15]
ОИ 6300 A	[15]
СИ(609 μm), тонкая структура, 3 уровня	[12]
СП (158 μm), тонкая структура, 2 уровня	[12]
ОИ (63 μm), тонкая структура, 3 уровня	[12]
ионизация космическими лучами	[10]
образование H <sub>2</sub> в газе	[16]
образование H <sub>2</sub> на пыли	[12]

Отметим, что скорости образования и разрушения являются функциями, сильно зависящими от температуры, так что система уравнений химической кинетики, как правило, является жестокой. Уравнения переноса (адвекции) химических компонентов решаются в строгом соответствии с выбранной численной схемой для переноса плотности газа. Для решения системы жестких дифференциальных уравнений химической кинетики в параллельном коде AstroChemHydro используется стандартный пакет DVODE [8].

В уравнении для энергии были учтены основные процессы радиационных потерь и нагрева, характерные для межзвездного газа (см. табл.). Отметим, что для скорости охлаждения во вращательно-колебательные переходах моле-

кулярного водорода взята аппроксимация для низкой плотности из работы [10]. Скорость охлаждения  $H_2$  для любой плотности рассчитывалась с помощью формализма, разработанного в [12].

### 1.3. Численный метод интегрирования уравнений

Для компьютерного моделирования химико-динамических процессов в межзвездной среде нами была реализована явная численная схема для системы (1)–(4) в декартовой системе координат. При построении численной схемы использовался метод расщепления по физическим процессам, согласно которому численное решение строится как решение уравнений, описывающих различные физические процессы.

В данном разделе кратко опишем алгоритм, использованный для численного интегрирования уравнений (1)–(4), описывающих течение смеси химически взаимодействующих газов. Система (1)–(4) может быть записана в виде:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\nabla \cdot U + S, \quad (10)$$

где  $U = [\rho X_i, \rho, \rho u, \rho E]^T$  – вектор консервативных переменных,  $S = S_{\text{react}} + S_{\text{therm}}$  – источниковый член, состоящий из двух слагаемых различной природы:  $S_{\text{therm}}$  – вектор, описывающий изменение концентрации  $i$ -го компонента за счет химических реакций,  $S_{\text{therm}}$  – сточниковое слагаемое, описывающее изменение внутренней энергии смеси за счет неравновесных процессов охлаждения и нагрева.

Для дискретизации системы уравнений (1)–(4) мы использовали метод расщепления Стрэнга. На первом шаге решалась система уравнений химической кинетики на первой половине временного шага  $\Delta t/2$  и учитывалось изменение внутренней энергии. Консервативные переменные модифицировались следующим образом:

$$U^* = U^n - \frac{\Delta t}{2} S^n. \quad (11)$$

На этом шаге происходит изменение плотностей взаимодействующих газов, вызванное химическими реакциями, и внутренней энергии смеси за счет процессов нагрева и охлаждения. Заметим, что плотность смеси предполагается неизменной в течение этого временного шага.

На втором шаге рассчитывалось изменение консервативных величин за счет адвекции и работы сил давления в пренебрежении источниковых слагаемых, так что

$$U^{**} = U^{*n} - \Delta t \nabla F^{n+1/2},$$

где  $F^{n+1/2}$  – потоки величин через границы ячеек на шаге  $n + 1/2$ .

Если в некоторых ячейках решение оказывается нефизичным, то есть плотность смеси или массовая доля какого-либо компонента оказывается отрицательной, то в этих ячейках мы искусственно полагаем плотность равной неотрицательной малой величине, которая определяется пользователем.

На третьем шаге система уравнений химической кинетики интегрировалась на второй половине временного шага  $\Delta t/2$ , и мы корректировали внутреннюю энергию в соответствии с формулой

$$U^{m+1} = U^{**} - \frac{\Delta t}{2} S^{**}. \quad (13)$$

На четвертом, заключительном шаге, происходит вычисление нового временного шага из условия устойчивости Куранта–Фридрихса–Леви:

$$\Delta e = C \min\left(\frac{\Delta x}{|u_{i,j,k}| + c_s}, \frac{\Delta y}{|y_{i,j,k}| + c_s}, \frac{\Delta z}{|w_{i,j,k}| + c_s}\right),$$

где  $u, v, w$  – компоненты вектора скорости,  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$  – размеры ячеек в  $x, y$  и  $z$  направлениях соответственно,  $c_s$  – скорость звука, определяемая из уравнения состояния,  $C < 1$ .

Обратим внимание на то, что структура уравнений системы (2)–(4) не изменилась после введения уравнений непрерывности для компонентов смеси, и, несмотря на наличие источниковых слагаемых в правой части, она остается гиперболической. Для уравнений гиперболического типа разработаны схемы высокого разрешения, имеющие высокий порядок аппроксимации в областях гладкого течения и обеспечивающие отсутствие паразитных осцилляций на скачках [17].

В параллельном трехмерном коде AstroChemHydro для численного решения уравнений химической динамики многокомпонентной смеси газов используется явная конечно-объемная схема неубывания полной вариации (TVD).

Опишем некоторые особенности реализованной схемы. Во-первых, пространственно-нерасщепленная TVD схема относится к типу MUSCL [18], имеет третий порядок аппроксимации по пространству в областях гладкого течения и первый на скачках. Во-вторых, за счет

применения алгоритмов пересчета типа Рунге-Кутты, реализованная численная схема обладает вторым порядком по времени. В-третьих, для вычисления потоков величин через границы дискретных ячеек использовался приближенный метод Хартена–Лакса–ван Леера с учетом контактного разрыва (HLLC) [19].

#### 1.4. Архитектура кода AstroChemHydro

Параллельный численный код AstroChemHydro написан на языке C++ с использованием объектно-ориентированной парадигмы программирования.

В основу реализованного программного обеспечения положен модульный принцип, позволяющий легко переходить от расчета одной физической модели к другой. Входные параметры хранятся в отдельных файлах. Объем необходимой машинной памяти определяется требуемым пространственным разрешением и точностью расчета. Результаты расчета записываются через определенные промежутки времени в различные файлы в формате, определяемом пользователем (бинарном или текстовом). Предусмотрена возможность продолжения расчета с любого заданного момента времени.

Особого внимания, на наш взгляд, заслуживает реализация параллельной версии кода AstroChemHydro. Для облегчения процесса создания параллельных трехмерных программ нами была создана библиотека MPIParallel3D для распараллеливания трехмерных вычислительных программ для компьютеров с массивно-параллельной архитектурой.

Разработанная библиотека позволяет в полуавтоматическом режиме производить распараллеливание трехмерных расчетных программ для MPP архитектур.

Инструмент предназначен в первую очередь для распараллеливания по данным с трехмерной декомпозицией. Библиотека является объектно-ориентированной и реализована в виде класса MPIParallel3D на языке C++.

Класс MPIParallel3D включает методы, позволяющие выполнять основные операции с данными, необходимые в параллельной программе, без обращения к низкоуровневым функциям стандарта MPI [20, 21]:

- Функции для копирования или автоматического распределения между процессами одномерных и многомерных массивов, и обмена границами между ними.

- Коллективные действия над переменными: синхронизация переменных, сравнение, выбор максимума или минимума среди значений на всех процессах и др.

- Функции для вывода в файл распределенных одномерных и многомерных массивов.

- Вспомогательные функции, полезные при отладке параллельной программы – вывод распределенных одномерных и многомерных массивов на консоль, приостановка программы с выводом пользовательского сообщения и другие.

Все функции автоматически производят взаимодействие процессов исходя из параметров декомпозиции, инкапсулированных в классе. Единственным входным параметром являются размеры расчетной области, передаваемые в объект класса.

Исходя из вида декомпозиции, заданной пользователем (линейная или кубическая), автоматически определяются параметры распределения расчетной области между процессами. В пользовательском режиме помимо трехмерной, возможна двумерная или одномерная декомпозиции.

Основной целью при написании данной библиотеки являлось максимальное упрощение распараллеливания вычислительного кода без необходимости постоянной отладки стандартных операций коммуникации процессов.

При этом мы пытались создать наиболее универсальный инструмент, не привязанный к определенной структуре программы или архитектуре вычислительной системы. Таким образом, данный класс можно использовать для распараллеливания большинства программ, в которых предполагается параллельность по данным.

Разработанная библиотека была использована для распараллеливания численного кода AstroChemHydro. Применение данного инструмента значительно упростило и ускорило процесс распараллеливания, даже для человека, имеющего слабое представление о технологиях параллельного программирования.

Следует отметить высокую эффективность полученной параллельной версии программы, которую удалось достигнуть благодаря использованию различных алгоритмов обмена границами в библиотеке MPIParallel3D. Проведенные тесты показывают, что эффективность параллельной версии кода составляет 70–90 % в зависимости от параметров задачи (см., например, [25]).

### 1.5. Моделирование взаимодействия облака межзвездного газа с ударной волной

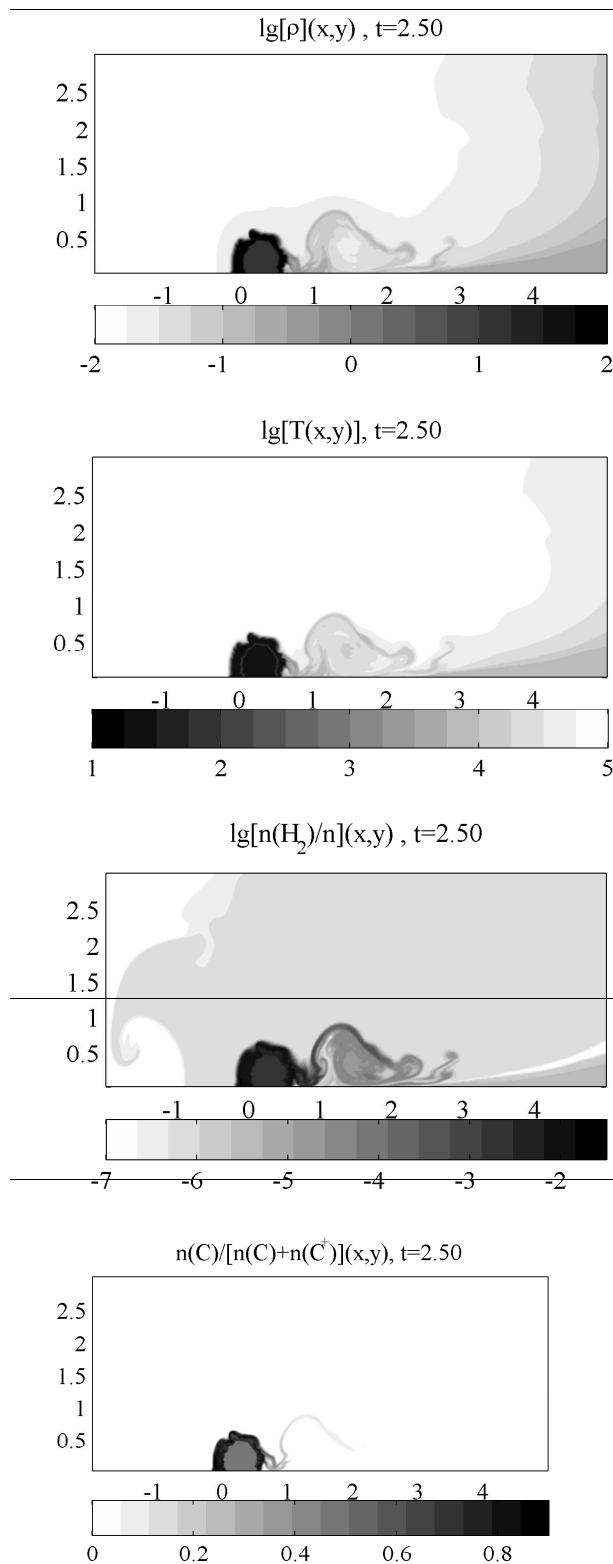
В качестве примера применения разработанного кода нами было проведено двумерное численное моделирование физико-химической эволюции облака межзвездного газа, взаимодействующего с плоской ударной волной. Изучение этого процесса с помощью многомерного динамического моделирования с учетом различных физических факторов проводится достаточно давно [22–24], однако, совместное химико-динамическое исследование стало возможным только в последние несколько лет. Установленное существенное влияние химических процессов на динамическую и тепловую эволюцию газа указывает на необходимость такого рода исследований. Кроме того, изучая самосогласованно химические превращения, мы можем получить физические величины, характеризующие реальные космические объекты, наблюдаемые с помощью оптических и радиотелескопов, интерпретировать наблюдения и понять природу этих объектов.

В представленном примере химические процессы описываются 26 реакциями с участием 11 компонентов. Проведенные расчеты позволяют оценить изменение массы молекулярного водорода и других реагентов в результате взаимодействия облака с ударной волной. В задаче взаимодействия «ударная волна – облако» важен учет молекуляризации водорода на пыли, а в уравнении для энергии были учтены процессы радиационных потерь во вращательно-колебательных линиях молекулярного водорода.

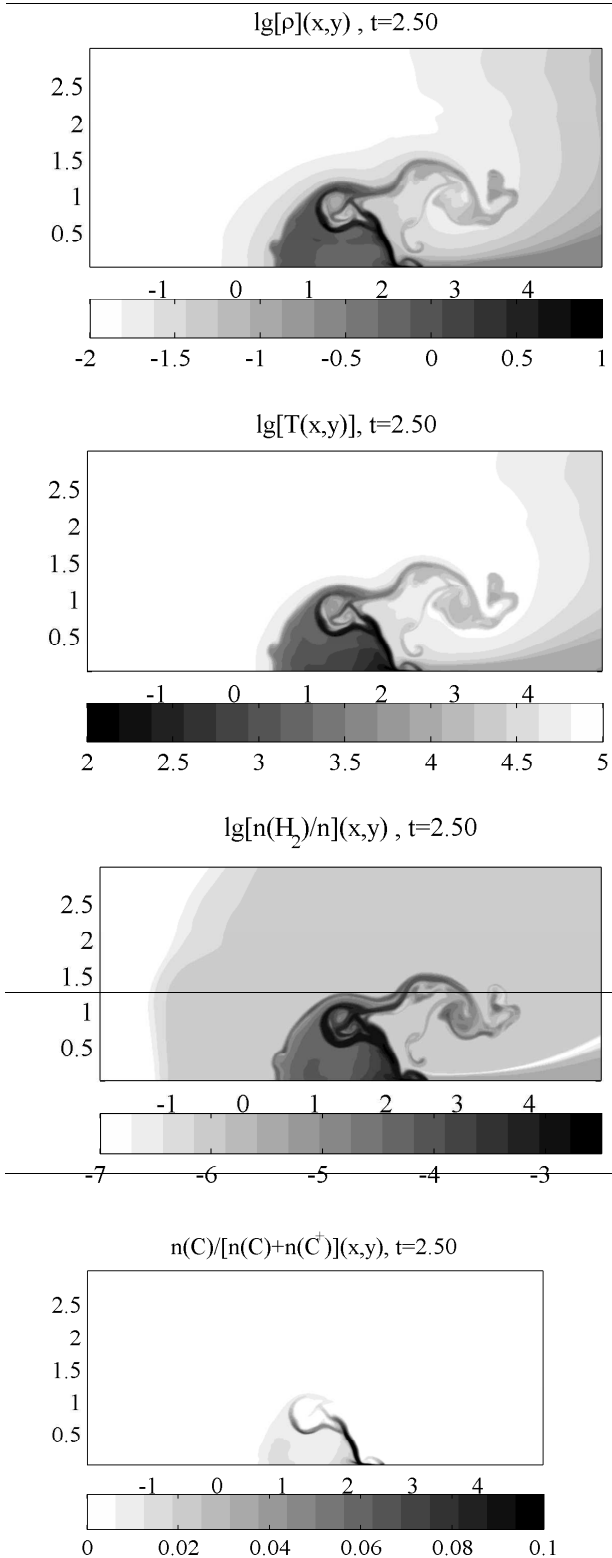
В численных моделях рассматривалось сферическое облако радиусом 1 пк. Температура облака варьировалась в пределах от  $10^2$  К (модель 1) до  $10^3$  К (модель 2), концентрация от 1 до  $10 \text{ см}^{-3}$ . Теплая фаза межзвездной среды задавалась с температурой  $10^4$  К и концентрацией  $0.1 \text{ см}^{-3}$ . Температура на фронте ударной волны составляла порядка  $10^5$  К.

Моделирование показало, что при взаимодействии облака с ударной волной наблюдается сильное охлаждение его внешних слоев.

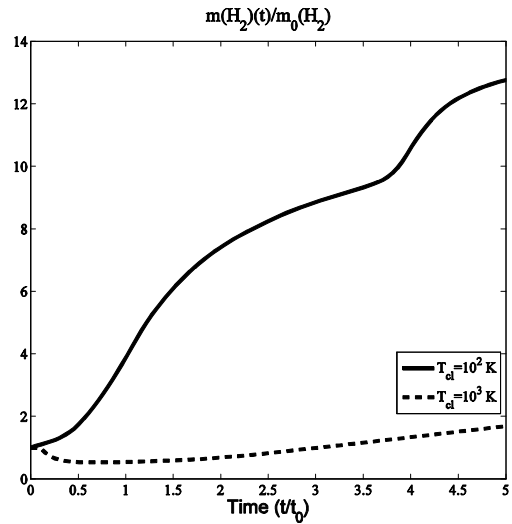
В результате образуется плотная оболочка, в которой эффективно происходит формирование молекулярного водорода и рекомбинация углерода.



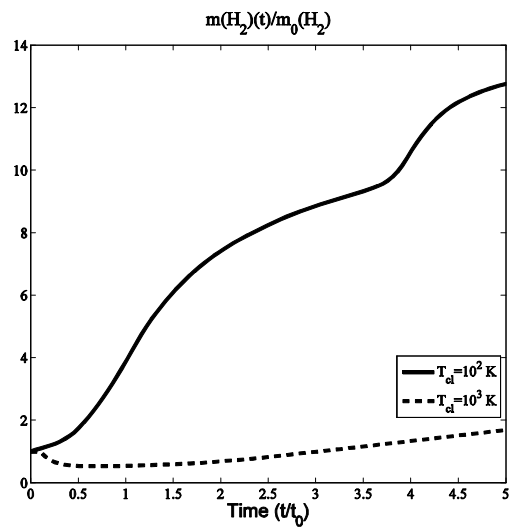
**Рис. 1.** Распределение логарифма плотности, логарифма температуры, логарифма относительного содержания молекулярного водорода  $\text{H}_2$  и относительного содержания углерода  $\text{C}$  в момент времени  $t = 2.5 \cdot 10^5$  лет для модели 1



**Рис. 2.** Распределение логарифма плотности, логарифма температуры, логарифма относительного содержания молекулярного водорода  $H_2$  и относительного содержания углерода  $C$  в момент времени  $t = 2.5 \cdot 10^5$  лет для модели 2



**Рис. 3.** Зависимость относительного содержания молекулярного водорода  $m(H_2)/m_0(H_2)$  от времени для моделей 1 и 2 (сплошная и пунктирная кривые соответственно)



**Рис. 4.** Зависимость относительного содержания нейтрального углерода  $m(C)/m_0(C)$  от времени для моделей 1 и 2 (красная и синяя кривые соответственно)

Проведенные расчеты также позволяют сделать вывод о сильной зависимости динамики взаимодействия от плотности облака. Холодное плотное облако с температурой 100 К в результате взаимодействия уменьшается в размерах, но «выживает». Перегретое же облако (с температурой 1000 К) практически полностью прогревается за времена около  $2.5 \cdot 10^5$  лет, оставляя

после себя лишь филаментные структуры. Химическая эволюция также сильно различается в этих моделях: в первом случае масса углерода быстро растет и стремится к насыщению, что связано с быстрой рекомбинацией ионов в облаке, масса образовавшегося молекулярного водорода в два раза больше, чем во второй модели (см. рис. 3 и 4).

### ВЫВОДЫ

В заключение нашей работы сформулируем основные выводы:

- Разработан и реализован трехмерный параллельный код AstroChemHydro для численного моделирования химической и динамической эволюции межзвездной среды.
- Разработана и реализована библиотека MPIParallel3D, позволяющая значительно сократить время для распараллеливания трехмерных вычислительных программ.
- Результат взаимодействия облака с ударной волной существенным образом зависит от начальной плотности газа в облаке.
- В процессе взаимодействия облака с ударной волной наблюдается сильная молекуляризация водорода во внешних слоях облака.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Spitzer L.** Physics of fully ionized gases. New York: Interscience, 1962.
2. **Бочкарев Н. Г.** Основы физики межзвездной среды. М.: МГУ, 1991.
3. **Field G.B.** Thermal instability // The Astrophysical Journal. 1965. V. 142. P. 531–567.
4. **Марочник Л. С., Сучков А. А.** Галактика. М.: Наука, 1984.
5. **McKee C. F., Ostriker J. P.** A theory of the interstellar medium – Three components regulated by supernova explosions in an inhomogeneous substrate // The Astrophysical Journal. 1977. V. 218. P. 148–169.
6. **Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П.** Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
7. **Оран Э., Борис Дж.** Численное моделирование реагирующих потоков. М.: Мир, 1990.
8. **Brown P. N., Byrne G. D., Hindmarsh A. C.** VODE: A Variable-Coefficient ODE Solver // SIAM J. Sci. Stat. Comput. 1989. V. 10. P. 1038–1051.
9. **Asplund M., Grevesse N., Sauval A. J.** Cosmic Abundances as Records of Stellar Evolution and Nucleosynthesis / 2005, in ASP Conf. Ser. ed. T. G. Barnes III, F. N. Bash (San Francisco: ASP), V. 336. P. 25–35.
10. **Galli D., Palla F.** The chemistry of the early Universe // Astronomy and Astrophysics. 1998. V. 335. P. 403–420.
11. **Shapiro P. R., Kang H.** Hydrogen molecules and the radiative cooling of pregalactic shocks // The Astrophysical Journal. 1987. V. 318. P. 32–65.
12. **Hollenbach D., McKee C. F.** Molecule formation and infrared emission in fast interstellar shocks. I Physical processes // The Astrophysical Journal Supplement Series. 1979. V. 41. P. 555–592.
13. **Cen R.** A hydrodynamic approach to cosmology – Methodology // The Astrophysical Journal Supplement Series. 1992. V. 78. P. 341–364.
14. **Mac Low M.-M., Shull J. M.** Molecular processes and gravitational collapse in intergalactic shocks // The Astrophysical Journal. 1986. V. 302. P. 585–589.
15. **Hollenbach D., McKee C. F.** Molecule formation and infrared emission in fast interstellar shocks. III - Results for J shocks in molecular clouds // The Astrophysical Journal. 1989. V. 342. P. 306–336.
16. **Launay J. M., Le Dourneuf M., Zeppen C. J.** The reversible  $H + H = H_2(v, j) + e^-$  reaction – A consistent description of the associative detachment and dissociative attachment processes using the resonant scattering theory // Astronomy and Astrophysics. 1991. V. 252. P. 842–852.
17. **Harten A.** High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws // Journal of Computational Physics. 1983. V. 49, № 3. P. 357–593.
18. **van Leer B.** Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second order sequel to Godunov's methods // Journal of Computational Physics. 1979. V. 32, № 1. P. 101–136.
19. **Toro E. F., Riemann.** Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics. A Practical Introduction. Springer, Berlin, 1997.
20. **Антонов А. С.** Параллельное программирование с использованием технологии MPI. М.: МГУ, 2004. 71 с.
21. **Эндрюс Г. Р.** Основы многопоточного, параллельного и распределенного программирования. М.: Издательск. дом Вильямс, 2003. 512 с.
22. On the Hydrodynamic Interaction of Shock Waves with Interstellar Clouds. II. The Effect of Smooth Cloud Boundaries on Cloud Destruction and Cloud Turbulence / F. Nakamura [et al.] // The Astrophysical Journal Supplement Series. 2006. V. 164. P. 477–505.
23. **Klein R. I., McKee Ch. F., Colella Ph.** On the hydrodynamic interaction of shock waves with interstellar clouds. 1: Nonradiative shocks in small clouds // The Astrophysical Journal. 1994. V. 420. P. 213–236.



24. **Pittard J. M., Hartquist T. W., Falle S.A.E.G.** The turbulent destruction of clouds - II. Mach number dependence, mass-loss rates and tail formation // The Monthly Notes of the Royal Astronomical Society. 2010. V. 405. P. 821–838.

25. **Еремин М. А., Любимов В. Н.** Параллельный код для трехмерного моделирования космической газодинамики // Параллельные вычислительные технологии (ПавТ'2010): науч. конф. (Уфа, 30 марта – 3 апреля 2010).

## ОБ АВТОРАХ

**Еремин Михаил Анатольевич**, доц. каф. теоретической физики и волновых процессов Волгоградск. гос. ун-та (ВолГУ). Дипл. спец. по физике (ВолГУ, 1994). Канд. физ.-мат. наук по применению вычислительн. техники, математическ. моделирования и математическ. методов в науч. иссл. (ВолГУ, 1998). Иссл. в обл. астрофизики и газ. дин., паралл. вычислений.

**Васильев Евгений Олегович**, ст. науч. сотр. НИИ физики ЮФУ, отдел радиофизики и космических исследований, г. Ростов-на-Дону. Канд. физ.-мат. наук по астрофизике и радиоастрономии (Ростовск. гос. ун-т, 2002). Иссл. в области физики и химии межзвездн. среды.

**Любимов Виктор Николаевич**, магистрант каф. теоретическ. физики и волновых процессов Волгоградск. гос. ун-та. Диплом бакалавра физики ВолГУ (2008). Иссл. в обл. физики межзвездн. среды и паралл. вычислений.