

Исследование течений разреженного газа с помощью метода прямого статистического моделирования Монте-Карло.

В.В. Айрапетян, Ю.П. Галюк, В.П. Мемнонов

В работе получена оценка качества генератора случайных чисел с очень большим периодом и описаны эффективные способы назначения вырабатываемых им последовательностей на вычислительные узлы. Это имеет большое значение для задач с очень большими и продолжительными расчетами методом ПСМ, когда используются несколько сотен и больше процессоров. Также выполнено численное моделирование течений в осесимметричных каналах. Определены параметры этих течений, при которых появляется минимум Кнудсена в объемном расходе, а также получены другие характеристики таких течений.

1. Введение

Для описания течений разреженного газа уравнения сплошной среды должны заменяться на решение уравнения Больцмана или соответствующее ему численное моделирование на молекулярном уровне как в методе прямого статистического моделирования Монте-Карло (ПСМ). В этом методе на последовательных малых интервалах времени прослеживается попеременно движение отдельных молекул по ячейкам расчетной области и затем их взаимные столкновения в этих ячейках. Статистические методы Монте-Карло широко применяются для численного моделирования различных задач в науке и технике. Причем существенной частью этих методов является интенсивное использование псевдослучайных последовательностей для моделирования различных статистических распределений и исходов событий. Обычно эти последовательности вырабатываются специальными компьютерными программами, генераторами случайных чисел (ГСЧ). Поэтому они являются только некоторыми приближениями к последовательностям настоящих случайных чисел. Степень этого приближения проверяется с помощью различных локальных и глобальных [1], тестов, которые хороший генератор должен выдерживать с необходимостью. В то же время как достаточные в некотором практическом смысле можно рассматривать специальные проверки путем решения типичных задач, допускающих независимую оценку результатов с помощью аналитических или численных методов и относящихся к области дальнейшего применения этих ГСЧ [2], [3]. Поэтому сравнение результатов численного моделирования задачи с точным решением этой задачи дает оценку качества применявшегося генератора, которую можно распространить для практического использования и в некотором круге проблем, так или иначе связанных с этой задачей.

С этой целью в настоящей работе методом (ПСМ) численно моделируется на параллельном кластере задача о релаксации вращательной энергии молекул из первоначального неравновесного состояния посредством межмолекулярных столкновений, для расчета которых применяются псевдослучайные подпоследовательности испытываемого генератора. В конечном, равновесном состоянии должно установиться распределение Больцмана с известной и одинаковой для всех степеней свободы температурой T_t . Именно по величине отклонений от этого теоретического значения с учетом ошибок самого метода ПСМ, в наибольшей степени связанных со статистическим рассеянием из-за неизбежной ограниченности используемых статистических выборок, и оценивалось качество тестируемого генератора. Кроме этого с целью оценки степени независимости случайных величин по одновременно вычисляемым выборочным коэффициентам корреляции оценивались истинные коэффициенты корреляции между конечными температурами, полученными на разных процессорах, а также в том случае, когда на каждом процессоре производились дополнительные выборки в конечном состоянии для увеличения общей выборки.

Течения газа в осесимметричных каналах используются во многих прикладных задачах, причем нередко диаметры цилиндрических трубок оказываются порядка длины свободного пробега молекул. Поэтому в таких задачах находит естественное применение метод ПСМ. Наряду с вытеканием газа в вакуум или сильно разреженный объем на практике встречаются также и медленные течения между сосудами с небольшим перепадом давления. Такая задача и рассматривалась в этой работе.

2. Оценка качества генератора случайных чисел с большим периодом для применения в параллельных программах

В настоящей работе тестируется линейный мультипликативный генератор вида

$$Z_{i+1} = A * Z_i \pmod{M}, \quad (1)$$

причем для моделирования с помощью методов Монте-Карло последовательность Z_i нормируется и превращается в последовательность U :

$$U = [U_i = Z_i/M; \quad i = 1, 2, \dots] \quad (2)$$

элементы которой представляют собой как бы результат моделирования из равномерного распределения на интервале $[0,1)$. В работе [4] уже проделана проверка такого генератора с модулем $M = 2^{31} - 1$ и 207 множителями A_j , прошедших всесторонние теоретические тесты в статье [1]. В результате были получены оценки различных множителей A_j и способы их применения в параллельных программах. Однако для очень больших и продолжительных расчетов с использованием многих сотен процессоров нужны генераторы с гораздо большим модулем и периодом. Одним из них является генератор *DH*, предложенный в статье [5], с модулем $M = 2^{128}$ и множителем $= 5^{100109}$. Его период P равен $P = 2^{126}$.

2.1. Реализация генератора *DH*

Для реализации операции умножения по модулю M с очень большими числами в этом генераторе удобно представлять каждый из соответствующих множителей U и V в виде двух частей, выделяя отдельно биты левее $n = 128$, которые не повлияют на результат, U_1, V_1 , и остальные справа U_0, V_0 , которые как раз очень существенны. Тогда при перемножении $U = 2^n U_1 + U_0$ на $V = 2^n V_1 + V_0$ получаем выражение:

$$UV = 2^{2n} U_1 V_1 + 2^n (U_1 V_0 + V_1 U_0) + U_0 V_0 \quad (3)$$

в котором первое слагаемое просто отбрасывается при этой операции, а в остальных после умножений, в которых в зависимости от разрядности машины, в свою очередь, может потребоваться дополнительное разбиение на части и умножение их "столбиками" и "перекрестно". Следует отметить, что на 32-х разрядной машине аппаратно реализуются только арифметические операции (умножение и сложение целых чисел) над 4-х байтными операндами (*integer*4, long*). На языках высокого уровня можно описать операнды длиной 8 байт (*integer*8 - Фортран*), (*long long - С*). Арифметика по модулю $2^{**}128$ может быть осуществлена только программным путем. В частности, в настоящей работе для 32-разрядной машины из 4 целых чисел типа *integer*4* фактически образовывалось целое число *integer*16*. В этом случае на 32-х разрядной машине для перемножения двух операндов достаточно провести 10 операций умножения из 16 и сложить результаты (6 умножений можно не делать, так как они не войдут в сумму из-за взятия результата по модулю $2^{**}128$). Все частичные произведения должны делаться как беззнаковые (старший бит является значимым, а не знаковым, на языке С аналогом являются операнды *unsigned long*). При суммировании длинных операндов обязательно надо учитывать возможность появления бита переполнения, который надо добавить к старшей части операнда. Проще всего обойти эти проблемы, используя программирование на Ассемблере, где существует беззнаковый вариант операции

умножения (команда *MUL*). Более того, одна из форм этой команды позволяет получать неусеченный результат (двойная размерность от размерности операндов), чего нет в языках высокого уровня. Также в Ассемблере имеется форма операции сложения с учетом бита переноса (команда *ADC*). Такая программа на Ассемблере была создана Ю.П. Галюком¹. Получаемый после компиляции файл *rand128.o* эквивалентен фортрановской подпрограмме с именем "*rand128*" для чего к ее имени внутри ассемблеровского текста программы *rand128.s* добавлен символ подчеркивания, и после этого она может использоваться при вызове из программ на Фортране или С. Существенно также то, что генератор *rand128.s* оказался в два раза более быстрым, чем такой генератор на фортране, реализованный с помощью специальных приемов для преодоления вышеотмеченных трудностей в работе [6]. Отметим также, что совпадение с последовательностью случайных чисел, вырабатываемых реализацией генератора *DH* этой работы послужила дополнительной проверкой ассемблеровского умножения в *rand128.s*.

2.1.1. Разбиение на подпоследовательности и назначение их на процессоры

Для разбиения на большие подпоследовательности, которые затем применяются в параллельных программах на отдельных процессорах для получения независимых реализаций, была создана специальная программа, в которой осуществляются с помощью *rand128.s* соответствующие большие скачки. Начальные значения этих подпоследовательностей в виде двух частей $z(1)$, $z(2)$ с целыми типа *integer* * 8 для представления целого числа типа *integer* * 16 запоминаются двумерным столбиком в двумерном массиве *nsmf()* и по позиции *In* в нем с помощью своего значения *myrank*, которое предварительно должно быть передано в рабочие подпрограммы, каждый процессор может уникально их использовать. Действительно по нижеследующей формуле получаем для каждого процесса *myrank* начальное значение его подпоследовательности.

$$z(1) = nsmf(2 * myrank + 1 + 2 * St * numprocs)$$

$$z(2) = nsmf(2 * myrank + 2 + 2 * St * numprocs) \quad In = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4)$$

где *numprocs* обозначает число запущенных процессов в параллельной MPI - задаче, а целое число *St* используется для более широкого применения, например, при переходе на новые подпоследовательности, для распределенных вычислений с запуском на разных кластерах отдельных MPI - задач. Кроме этого также с помощью умножения посредством *rand128.s* в этой программе получается представление множителя $= 5^{100109}$ в виде двух частей целого типа *integer* * 16 в форме *ml(1)*, *ml(2)* типа *integer* * 8, которые применяются уже во всех процессорах.

2.2. Проверка генератора *DH* с помощью численного моделирования точно решаемой задачи

Как уже отмечалось выше сравнение результатов численного моделирования задачи с точным решением этой задачи дает оценку качества применявшегося генератора, которую можно распространить для практического использования и в некотором круге других близких задач. В нашей точно решаемой задаче рассматриваются молекулы, равномерно распределенные в объеме с зеркально отражающими стенками и имеющие только поступательные и вращательные степени свободы. Причем в начальный момент создается неравновесное состояние системы, когда вся энергия сосредоточена только на поступательных степенях свободы. В конечном состоянии молекулы должны иметь распределение Больцмана для всех степеней свободы. Отклонения поступательной T_{tr} и вращательной T_r температур от известного теоретического значения в равновесии T_t могут существовать, но при идеальных генераторах это возможно только вследствие ограниченного размера статистической выборки N . Связанную с этим ошибку r_N метода Монте-Карло [11], например, для вращательной температуры δT_r можно записать в виде:

¹Эта программа будет выставлена на сайте

$$r_N = x(D(T_r)/N)^{1/2}, \quad (5)$$

где $D(T_r)$ - дисперсия вращательной температуры, N - величина выборки, а параметр x принимался равным 3, соответствуя коэффициенту доверия 0.997. Поэтому, если в результате релаксации со статистической выборкой N получаются отклонения от T_t ,

$$\delta T_r = |T_r - T_t|, \quad (6)$$

больше r_N , то это означает, что испытуемый генератор с вероятностью 0.997 нехорош.

Относительно взаимодействия частиц предполагалось, что молекулы сталкиваются как твердые сферы, а в неупругих вероятностях вращательных переходов при этом используется значение 5 для параметра числа столкновений, что соответствует вероятности неупругого перехода 0,2. Расчетное поле разбивается на одномерные ячейки, в которых производятся процедуры столкновений метода ПСМ [2]. Временной шаг τ был равен половине среднего времени между столкновениями для одной молекулы, а вся расчетная область содержала N_m молекул, причем во всех расчетах N_m равнялось 100001. После достижения равновесного состояния через промежутки времени Δt , равные

$$\Delta t = N_{tf} \times \tau, \quad (7)$$

выполнялись еще K_{ts} дополнительных выборок параметров системы. В итоге суммарный объем статистической выборки N получается тогда равным:

$$N = N_m \times K_{ts} \times numprocs, \quad (8)$$

где $numprocs$ - число используемых процессоров параллельного кластера.

В начальном состоянии, как уже говорилось выше, вся энергия была сосредоточена только на поступательных степенях свободы молекул. Поступательная температура T_{tr} полагалась равной 500К, вращательная же T_r была равна нулю. Предполагалось, что молекулы обладают только двумя вращательными степенями свободы. В использованной модели вращательной релаксации Ларсена-Боргнаке (ЛБ) [7] строго выполняются законы сохранения энергии и импульса и условие детального баланса [12]. Поэтому в процессе вращательной релаксации должно устанавливаться конечное равновесное состояние с одинаковыми значениями температуры T_t равными 300К, как это следует из закона сохранения полной энергии для данного случая. Несмотря на то, что модель ЛБ только приближенно описывает во времени вращательную релаксацию, конечное равновесное состояние получается точным. И сравнение результатов численного моделирования проводится именно по этому конечному состоянию.

2.2.1. Результаты численного моделирования

Численное моделирование вращательной релаксации выполнялось на 40 процессорном кластере Санкт-Петербургского университета. Однако практически можно было использовать одновременно не больше 16 процессоров. Поэтому в приводимых ниже данных часто сначала накапливалась необходимая выборка шагами по 16, а затем она обрабатывалась специальной программой. В частности, именно таким путем были получены результаты для 208 процессоров, при использовании только одной выборки $K_{ts} = 1$ на каждом из них. Начальные значения подпоследовательностей для них выбирались описанным выше способом через интервалы 2^{64} . Так же, как и в работе [4], в случае $K_{ts} = 1$ отклонения конечных поступательной T_{tr} и вращательной T_r температур от известного теоретического значения в равновесии $T_t = 300K$ оказались меньше соответствующей Монте-Карловской ошибки $r_N = 0,197$. При этом истинные коэффициенты корреляции¹ между конечными температурами, полученными на разных процессорах, оказались равны нулю.

¹Подробные определения их и способ оценки даны в работе [4]

В практических расчетах методом ПСМ часто для увеличения суммарной выборки в конечном состоянии делают дополнительные выборки. Результаты численного моделирования для такого случая с $K_{ts} = 14$ представлены на Рис.1. Здесь решались 13 MPI-задач по 16 процессов в каждой с $K_{ts} = 14$, начальные значения подпоследовательностей генератора DH для них последовательно выбирались с помощью переменных $myrank$ и St в формуле (4). Монте-карловская ошибка r_N была постоянной и равнялась 0.190. Она изображена прямой 1. Кривой 2 на Рис.1 представляется максимальное отклонение для конечных температур $\delta T_r = |T_r - T_t|$ или $\delta T_{tr} = |T_{tr} - T_t|$. Как видно, эти отклонения часто оказываются выше прямой ошибки r_N . Поэтому такой способ увеличения суммарной выборки нужно применять с осторожностью. Точно такая же ситуация в таком случае проявилась и в работе [4]. Коэффициенты $|r_{odev}|$ и $|r_{be}|$ оценивают попарные корреляции между последовательными по времени соседними промоделированными значениями T_r для каждого из 16 процессоров и, наоборот, последовательно удаленными парами. Они изображаются кривыми 6 и 4. И, наконец, граничные переменные rb_{odev} и rb_{be} изображаются кривыми 5 и 3. Эти переменные определяют границу, преодоление которой выборочными коэффициентами корреляции $|r_{odev}|$ и $|r_{be}|$ появляются уже отличные от нуля истинные коэффициенты корреляции. И теперь из Рис.1 следует, что соседние пары коррелированы, поскольку кривая 6 везде выше своей граничной кривой 5. Возможно это каким-то образом связано и с преодолением кривой 2 Монте-Карловской ошибки r_N . Этот вопрос требует дополнительных исследований.

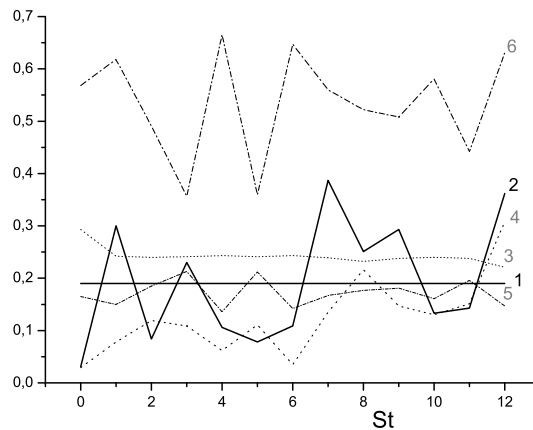


Рис. 1. Кривые максимального отклонения $|\delta T_{tr,r}|_{max}$ -2, ошибки r_N -1, коэффициентов корреляции $|r_{odev}|$ -6, $|r_{be}|$ -4 и граничных переменных rb_{odev} -5, rb_{be} -3 для разных St .

3. Численное моделирование течений в осесимметричных каналах

Течения газа в осесимметричных каналах используются во многих прикладных задачах, причем нередко диаметры цилиндрических трубок оказываются порядка длины свободного пробега молекул. Поэтому в таких задачах находит естественное применение метод ПСМ. Наряду с вытеканием газа в вакуум или сильно разреженный объем на практике встречаются также и медленные течения между сосудами с небольшим перепадом давления. Такая задача и рассматривалась в этой работе. Течение воздуха по цилиндрической трубке радиуса R между сосудами с концентрациями молекул n_1 и n_2 причем $n_2 = 0.88n_1$ численно моделировалось методом ПСМ. В разработанной нами параллельной программе использовались некоторые подпрограммы из книги Берда [2]. Столкновения молекул воздуха моделирова-

лись как соударения твердых сфер, а их взаимодействие со стенками трубки моделировалось как диффузное рассеяние. Известно, что такое интересное явление в течениях разреженных газов как существование минимума Кнудсена в зависимости объемного расхода от числа Кнудсена или чаще от обратного числа Кнудсена возникает из-за конкурирующего влияния на поток между столкновениями молекул между собой и их взаимодействием со стенками. Поэтому, уменьшая длину трубки, можно проследить исчезновение минимума Кнудсена. На Рис.2 нижняя штрихованная кривая соответствует сравнительно длинной трубке с отношением длины к радиусу Rl равным 26 и выраженным минимумом, а верхняя гораздо меньшая с этим отношением Rl равным 10 уже очень слабо прогнута.

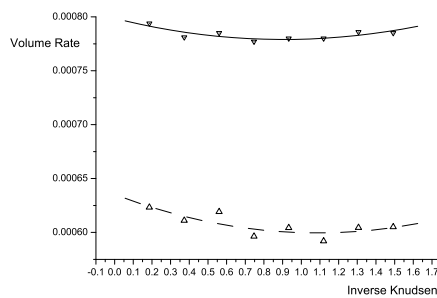


Рис. 2. Кривые расхода: при $Rl = 26$ - нижняя и при $Rl = 10$ - верхняя.

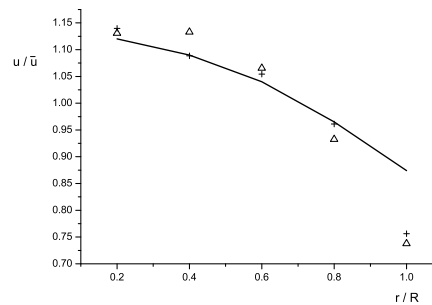


Рис. 3. Сплошная кривая по (1), моделирование при $Rl = 10$ - треугольники, при $Rl = 26$ - плюсики

В таких течениях представляет интерес также распределение величины скорости u на срезе трубки по радиусу r . В работе [8] приводится формула для такого распределения, выраженная через число Кнудсена Kn и коэффициент C_1 скорости скольжения:

$$\frac{u}{\bar{u}} = \frac{1 + 4C_1Kn - r^2/R^2}{1/2 + 4C_1Kn} \quad (9)$$

где \bar{u} - средняя по срезу скорость, а R - радиус трубки. На Рис. 3 сравнивается распределение по этой формуле при $Kn = 0,75$ и $C_1 = 1,1466$ с распределением при $Rl = 10$ в виде треугольников и в виде плюсов при $Rl = 26$, полученными численным моделированием в трубках с такими параметрами. Как видно, около стенки имеются значительные расхождения с этой формулой. В остальной же части трубки совпадение сравнительно неплохое, причем оно явно лучше для длинной трубки с более развитым потоком. Исследовалось также распределение концентрации молекул вдоль трубки, которое оказалось строго линейным за исключением совсем небольших интервалов около концов.

4. Заключение

Проведенное численное моделирование точно решаемой задачи приводит к выводу, что генератор DH , предложенный в статье [5] показывает хорошие результаты без дополнительных выборов в конечном состоянии на каждом процессоре. Если же они все-таки делаются, то возможны ошибки. Средние по времени не совпадают со средними по ансамблю. Для осесимметричных течений при небольших перепадах давления на концах трубки показано изменение кривой минимума Кнудсена при уменьшении длины трубки и получены распределения скорости по радиусу и концентрации вдоль нее.

Литература

1. Fishman G.S., Moore L.R. An Exhaustive Analysis of Multiplicative Congruential Random Number Generators with Modulus $2^{31} - 1$ // SIAM J. Sci. Stat. Comput. -1986. -Vol. 7, No.1. -P. 24-45.

2. Bird G.A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. -Clarendon Press, Oxford, 1994. 458 p.
3. Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. -Наука, М., 1982. 296 с.
4. Мемнонов В.П. Тестирование генераторов случайных чисел с помощью численного моделирования точно решаемой задачи // Вестник СПбГУ. Сер. 1, 2009, вып.1
5. Dyadkin I.G., Hamilton K.G. A study of 128-bit multipliers for congruential pseudorandom number generators // Comput. Phys. Commun. -2000. -Vol.125, -P.239-258.
6. Marchenko M.A., Mikhailov G.A. Parallel realization of statistical simulation and random number generators // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. -2002. -Vol.17, No.1. -P. 113-124.
7. Borgnakke C., Larsen P.S. Statistical collision model for Monte Carlo simulation of polyatomic gas mixture // J. Comput. Phys. -1975. -Vol. 18, -P. 405-420.
8. Srekanth A.K. Slip Flow through Long Circular Tubes // Advances in Appl. Mech. Suppl. 5. -1969. -Vol. 1, -P. 667-680.