

Бюджетное учреждение высшего образования Ханты-Мансийского автономного округа — Югры «Сургутский государственный университет»

На правах рукописи

Быковских Дмитрий Александрович

Моделирование течения газа Кнудсена в трехмерной области методом Монте-Карло

Специальность 05.13.18 —

«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук, профессор
Галкин Валерий Алексеевич

Сургут — 2019

Оглавление

| | Стр. |
|--|-----------|
| Введение | 5 |
| Глава 1. Обзор математических моделей и методов решения задач газовой динамики | 14 |
| 1.1 Обзор исследований и задач газовой динамики | 14 |
| 1.2 Обзор точных решений уравнений движения газа Кнудсена | 17 |
| 1.3 Обзор статистических методов решения задач динамики разреженного газа | 19 |
| 1.4 Проблематика эффективного использования современных вычислительных систем | 22 |
| 1.5 Выводы по главе | 25 |
| Глава 2. Описание метода Монте-Карло моделирования течения газа Кнудсена в трехмерной изменяющейся во времени области | 26 |
| 2.1 Модель идеального бесстолкновительного газа с подвижными границами | 26 |
| 2.1.1 Одночастичная функция распределения и ее связь с макроскопическими величинами | 27 |
| 2.1.2 Граничные условия | 29 |
| 2.2 Бессеточный метод Монте-Карло | 30 |
| 2.2.1 Расчет траекторий движения частиц с учетом возможного взаимодействия с подвижными границами | 30 |
| 2.2.2 Статистические оценки макроскопических параметров | 32 |
| 2.2.3 Оценка погрешностей | 34 |
| 2.3 Выводы по главе | 36 |
| Глава 3. Предметно-ориентированный комплекс программ «Midges» и его тестирование | 37 |
| 3.1 Реализация модели идеального бесстолкновительного газа в виде комплекса программ | 37 |

| | Стр. |
|--|-----------|
| 3.1.1 Структура комплекса программ | 37 |
| 3.1.2 Оптимизация программного кода | 41 |
| 3.2 Тестовая задача о моделировании движения встречных пучков газа | 45 |
| 3.2.1 Описание математической модели и постановка вычислительной задачи | 45 |
| 3.2.2 Моделирование и анализ результатов | 46 |
| 3.3 Выводы по главе | 53 |
| Глава 4. Моделирование адиабатического сжатия газа Кнудсена в изменяющейся во времени области | 54 |
| 4.1 Модель адиабатического сжатия в одномерном пространстве . . . | 55 |
| 4.1.1 Постановка вычислительной задачи | 55 |
| 4.1.2 Построение аналитического решения | 55 |
| 4.1.3 Моделирование и анализ результатов | 57 |
| 4.2 Модель адиабатического сжатия в трехмерном пространстве . . . | 60 |
| 4.2.1 Постановка вычислительной задачи | 60 |
| 4.2.2 Построение аналитического решения | 61 |
| 4.2.3 Моделирование и анализ результатов | 64 |
| 4.3 Выводы по главе | 68 |
| Глава 5. Моделирование фильтрации идеального бесстолкновительного газа в пористой среде | 69 |
| 5.1 Описание математической модели | 69 |
| 5.2 Постановка вычислительной задачи | 70 |
| 5.3 Моделирование и анализ результатов | 72 |
| 5.4 Выводы по главе | 83 |
| Заключение | 84 |
| Список литературы | 86 |
| Приложение А. Описание структуры комплекса программ «Midges» | 98 |

| | |
|--|----|
| Приложение Б. Свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ | 99 |
|--|----|

Введение

Актуальность темы. С развитием высокопроизводительных вычислительных систем появился новый способ исследования фундаментальных и прикладных задач газовой динамики — численное моделирование. Прогресс в разработке численных методов позволил существенно расширить круг задач, доступных анализу. В настоящее время существуют два принципиально различных подхода к моделированию газодинамических процессов: детерминированный (методы контрольных объемов, конечных элементов, конечных разностей и др.) и стохастический (вероятностный). К последнему из перечисленных подходов относится метод Монте-Карло, с помощью которого в диссертационной работе исследуется течение газа Кнудсена с подвижными и неподвижными границами в трехмерной области.

Благодаря методу Монте-Карло появился новый способ исследования явлений или процессов посредством моделирования траекторий частиц различной природы: нейтроны, фотоны, фононы и др. Исследование поведения частиц, которые не взаимодействуют друг с другом, но взаимодействуют с подвижными границами является актуальной задачей, которая может быть связана с управлением различными высокотехнологичными процессами. Полученные при моделировании результаты используются в различных областях науки и отраслях промышленности, например, в промышленных процессах, где требуется высокий вакуум, таких, как перегонка или движение объектов на больших высотах, где важно понимать механику движения разреженного газа в областях с низкой плотностью (свободно-молекулярный режим). Другим примером может служить задача управления течением тепловых нейтронов в различных средах (рассеивание тепла), которая актуальна в атомной энергетике, и может быть рассмотрена как процесс фильтрации газа в пористой среде. И наконец, к такой задаче можно отнести исследование особых зон с высокой плотностью бесстолкновительного газа, спецификой которого является наличие управляющего воздействия на структуру течения за счет пространственно-временного изменения границ областей.

С другой стороны, повышенный интерес к моделированию течений разреженного газа методом Монте-Карло связан с эффективным использованием современных высокопроизводительных вычислительных систем, поскольку раз-

работанные алгоритмы и программы, использующие методы Монте-Карло, обладают высоким уровнем параллелизма. При этом необходимо верифицировать комплекс программ на задачах, имеющих точные решения, во избежание получения неправильных результатов численного решения задач газовой динамики.

Существуют точные решения уравнения Больцмана, которые обращают интеграл столкновения в нуль и описывают течение газа Кнудсена с наличием границ, для сравнительно простых случаев: течение газа с границами, не нарушающего максвелловского распределения; течение Куэтта; течение Пуазейля и др. В работе исследуется задача об адиабатическом сжатии идеального бесстолкновительного газа в замкнутой области с подвижной границей. Такая задача относится к исследованию явления параметрической неустойчивости, при котором нарастание энергии возмущения сопровождается непрерывным сжатием газа с течением времени в пространстве. Эта параметрическая неустойчивость может рассматриваться как распространение бегущих волн в изменяющейся во времени области.

Степень разработанности темы. Обзор математических моделей и методов решения задач динамики разреженного газа, представленный в первой главе, показывает, что существует потребность в развитии бессеточных методов Монте-Карло, применяемых для моделирования течения газа Кнудсена. Моделирование нестационарного течения газа Кнудсена осложняется в случае, когда течение протекает в трехмерной изменяющейся во времени области. При моделировании течения газа методом Монте-Карло требуется статистически большое количество частиц, поэтому необходимо разработать эффективные алгоритмы расчета траекторий движения частиц газа, учитывающие взаимодействие с подвижными границами, и реализовать в виде комплекса программ для высокопроизводительных вычислительных систем. При этом существует потребность в разработке точных решений течения кнудсеновского газа с подвижными границами для верификации комплекса программ.

Целью работы является разработка алгоритмов расчета движения газа Кнудсена в трехмерной области с подвижными и неподвижными границами методом Монте-Карло; создание комплекса проблемно-ориентированных программ, позволяющего визуализировать моделируемые процессы, для современных высокопроизводительных вычислительных систем и его верификация;

проведение вычислительных экспериментов по исследованию задачи фильтрации газа в пористой среде.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие **задачи**:

1. Разработать метод и алгоритмы расчета движения кнудсеновского газа в трехмерной изменяющейся во времени области.
2. Разработать тестовые задачи с подвижными границами для верификации комплекса проблемно-ориентированных программ.
3. Разработать, отладить и протестировать комплекс проблемно-ориентированных программ для численного решения задач кинетики идеального бесстолкновительного газа в трехмерном пространстве, позволяющий визуализировать динамику процессов.
4. Выполнить распараллеливание и оптимизацию программного кода для проведения расчетов на высокопроизводительных вычислительных системах.
5. Провести вычислительные эксперименты по исследованию задачи фильтрации идеального бесстолкновительного газа в пористой среде.
6. Осуществить анализ полученных результатов расчета.

Научная **новизна** выносимых на защиту результатов заключается в следующем:

1. Впервые найден класс точных решений для модели адиабатического сжатия газа Кнудсена в трехмерной области с подвижной границей.
2. Разработан бессеточный метод Монте-Карло, позволяющий моделировать течения газа Кнудсена в трехмерной области с подвижными границами и основанный на методе прямого моделирования Г. Берда и метода динамики молекул.
3. Создан комплекс программ для проведения вычислительных экспериментов по моделированию течения идеального бесстолкновительного газа в трехмерном пространстве методом Монте-Карло с применением технологий параллельных вычислений.
4. Получены новые численные решения задачи фильтрации для идеального бесстолкновительного газа в пористой среде.

Теоретическая и практическая значимость. К теоретической значимости относится класс точных решений, найденный для модели адиабатического сжатия газа Кнудсена в трехмерной области, который может быть

использован для верификации комплекса программ. Практическая значимость заключается в разработке эффективных алгоритмов расчета течения газа Кнудсена с подвижными и неподвижными границами, основанных на методе Монте-Карло. Созданный комплекс программ может быть использован для эффективного решения инженерно-технических задач, требующих моделирования процессов газовой динамики с использованием высокопроизводительных вычислительных систем. Результаты диссертационной работы имеют практическое значение для исследований проблем динамики разреженного газа, статистической физики и оптики.

Объектом исследования является модель идеального бесстолкновительного газа.

Предметом исследования является течение идеального бесстолкновительного газа в трехмерной области с подвижными и неподвижными границами.

Методология и методы исследования включают методы математического и статистического моделирования (метод Монте-Карло), параллельного программирования для высокопроизводительных вычислительных систем, теорию вероятностей и математической статистики.

Для выполнения поставленной цели применялся подход, основанный на:

- 1) построении математической модели течения газа Кнудсена;
- 2) разработке метода моделирования течения идеального бесстолкновительного газа в трехмерной изменяющейся во времени области;
- 3) разработке алгоритмов решения задачи;
- 4) реализации алгоритмов в виде комплекса программ;
- 5) проведении вычислительных экспериментов с последующим анализом результатов.

На защиту выносятся следующие результаты, соответствующие пунктам паспорта специальности 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» по физико-математическим наукам:

1. Найден класс точных решений для модели адиабатического сжатия кнудсеновского газа в трехмерной области с подвижной границей.
2. Разработан бессеточный метод Монте-Карло, предназначенный для моделирования нестационарного течения газа Кнудсена в трехмерной области с подвижными границами. Выполнено сравнение численных

- решений, полученных с помощью разработанного метода, с найденными точными решениями.
3. Разработан и реализован комплекс программ, позволяющий моделировать течение идеального бесстолкновительного газа в трехмерном пространстве с применением технологий параллельных вычислений. Выполнена верификация разработанного комплекса программ на задачах газовой динамики, имеющих аналитические решения. Эффективность комплекса программ подтверждена численными экспериментами.
 4. Получены результаты численного исследования задачи фильтрации кнудсеновского газа в пористой среде. Построена зависимость коэффициента фильтрации от размеров ячеек пористой среды. Установлена линейная зависимость между скоростью течения и скоростью фильтрации для идеального бесстолкновительного газа.

Таким образом, в соответствии с паспортом специальности 05.13.18 в диссертации присутствуют оригинальные результаты одновременно из трех областей: математического моделирования, численных методов и комплексов программ.

Достоверность полученных результатов работы обеспечивается использованием математической модели идеального бесстолкновительного газа, основанной на фундаментальных законах сохранения массы, импульса и энергии; моделированием методом Монте-Карло и проведением тестовых расчетов на задачах газовой динамики, показывающих степень близости численного решения к аналитическому в зависимости от количества частиц участвующих в эксперименте.

Апробация работы. Основные результаты работы были представлены на:

- Всероссийских научно-практических конференциях «Север России: стратегии и перспективы развития» (Сургут, 2015, 2016).
- Международных конференциях «Математика и информационные технологии в нефтегазовом комплексе», посвященных дню рождения великого русского математика академика П. Л. Чебышева (Сургут, 2016, 2019).
- Всероссийской конференции молодых ученых «Наука и инновации XXI века» (Сургут, 2016).

- Всероссийских конференциях «Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов для решения задач математической физики», посвященных памяти К. И. Бабенко (Абрау-Дюрсо, Новороссийск, 2016, 2018).
- Международной конференции «Супервычисления и математическое моделирование» (Саров, 2018).
- Международной научной конференции «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики» (Академгородок, Новосибирск, 2019).
- Семинарах кафедры Прикладной математики БУ ВО «Сургутский государственный университет».

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 17 научных работах [1–17], из них:

- 4 статьи изданы в журналах, рекомендованных ВАК, включая 1 статью опубликованную в международных журналах, входящих в реферативную базу Scopus, которая переведена на английский язык [1–4];
- 2 публикации в сборниках научных статей [5; 6];
- 9 публикаций представлены в сборниках трудов и тезисах докладов конференций [7–15];
- 2 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ [16; 17].

Работа выполнена при поддержке государственных грантов:

1. Грант РФФИ №18-01-00343 А «Математическое моделирование образования структур в задачах физической кинетики и гидродинамики».
2. Грант РФФИ №18-47-860004 р_а «Иерархическая система новых информационно-вычислительных технологий, основанная на математических моделях объектов естественного и антропогенного происхождения со сложной динамикой, включая кинетику с нелокальными связями, гидродинамику и явления со статистически неустойчивым поведением».

Личный вклад автора заключается в разработке алгоритмов и их реализации в виде комплекса проблемно-ориентированных программ, включая отладку и тестирование, и проведении вычислительных экспериментов. Автор самостоятельно отыскал класс точных решений задачи об адиабатическом сжатии газа Кнудсена в трехмерной области с подвижной границей. В совместных

исследованиях автор принимал участие во всех этапах работы: в постановках задач, в выборе и формулировке математической модели, в создании численного метода и анализе полученных результатов. В совместных работах научному руководителю д.ф.-м.н. В. А. Галкину принадлежит первоначальная постановка задач, определение направлений исследований и интерпретация полученных результатов, выбор тестовых задач для верификации комплекса программ.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и двух приложений. Полный объём диссертации составляет 100 страниц, включая 26 рисунков и 16 таблиц. Список литературы содержит 126 наименований.

Первая глава начинается с краткого описания истории возникновения и развития газовой динамики. Приводится обзор исследований задач течения газа с наличием границ и задач из смежных областей. В параграфе 1.2 выделены некоторые точные решения задач газа Кнудсена с подвижными и неподвижными границами. В параграфе 1.3 приведен обзор методов решения задач газовой динамики. Представлено краткое описание методов Монте-Карло, применяемых для моделирования течения разреженного газа, включая их назначение, преимущества и недостатки. Параграф 1.4 посвящен проблемам и способам адаптации алгоритмов и программ, связанных с эффективным использованием современных высокопроизводительных вычислительных систем. Представлены общие рекомендации, сформулированные Б. Н. Четверушкиным, которые следует учитывать при разработке алгоритмов и их реализации в виде комплекса программ.

По обзору литературы сделаны выводы о перспективных направлениях исследования течения газа Кнудсена с подвижными и неподвижными границами, в том числе, о необходимости разработки алгоритмов и комплекса программ для высокопроизводительных вычислительных систем.

Во второй главе рассматривается математическая модель газа Кнудсена. Для вероятностной модели газа определена одночастичная функция распределения, показана ее связь с макроскопическими величинами. Подробно описан бессеточный метод Монте-Карло, предназначенный для моделирования течения идеального бесстолкновительного газа в трехмерной области с подвижными границами. Представлены формулы расчета траектории движения частиц в пространстве с учетом многократного взаимодействия с подвижными границами. Для течения газа, состоящего из статистически большого числа частиц,

приведены формулы статистических оценок макроскопических параметров из локальных характеристик частиц газа. В конце главы рассмотрены способы оценки погрешностей полученных результатов.

Третья глава посвящена разработанному проблемно-ориентированному комплексу программ. Рассмотрена схема работы комплекса программ, включая подробное описание каждого этапа. Представлены особенности такой схемы работы при реализации алгоритмов в виде программного кода. Описаны использованные методы оптимизации программного кода, позволяющие эффективно задействовать вычислительные ресурсы центрального процессора, такие как декомпозиция данных; векторизация вычислений, связанная прежде всего с расчетом траекторий движения частиц с учетом возможного взаимодействия с подвижными границами; быстрое извлечение обратного корня, используемое при нормализации векторов, и другие.

Выполнена верификация комплекса программ на задаче о столкновении встречных пучков газа, имеющей аналитическое решение. Выполнена оценка погрешностей статистических оценок макроскопических величин при различном числе частиц в вычислительном эксперименте и количестве испытаний, показавшая высокую точность полученных численно результатов. Показана высокая производительность разработанного комплекса программ.

Четвертая глава посвящена адиабатическому сжатию газа Кнудсена в одномерной и трехмерной замкнутых областях. Описан класс точных решений для кнудсеновского газа с подвижной границей. Выполнено моделирование течения газа Кнудсена методом Монте-Карло с различными скоростями подвижной границы. Проведено качественное и количественное сравнение полученных результатов. Достигнута высокая производительность программы расчета траекторий движения частиц, входящей в состав созданного комплекса проблемно-ориентированных программ, с учетом возможного взаимодействия с подвижными и неподвижными границами.

В пятой главе представлено численное исследование задачи фильтрации идеального бесстолкновительного газа в пористой среде, полученное с помощью разработанного комплекса программ. На основе системы уравнений, состоящей из соотношения Клапейрона-Менделеева, уравнения неразрывности и линейного закона Дарси, получена формула фильтрации идеального газа в пористой среде. Проведены численные эксперименты по исследованию зависимости скорости течения и скорости фильтрации газа Кнудсена для трех

конфигураций пористой среды. Выполнено качественное и количественное сравнение полученных результатов, включая оценку погрешностей статистических оценок макроскопических величин, показавшую высокую точность полученных результатов. Представлена визуализация течения газа и распределения статистических оценок макроскопических величин для трех конфигураций пористой среды.

В заключении сформулированы основные результаты, полученные в ходе диссертационного исследования.

В приложениях описывается структура размещения файлов и каталогов разработанного комплекса программ, представлены свидетельства о регистрации государственных программ для ЭВМ.

Глава 1. Обзор математических моделей и методов решения задач газовой динамики

1.1 Обзор исследований и задач газовой динамики

История развития газовой динамики начинается с феноменологического направления (термодинамики), возникшего в середине XVII века [18]. Начальные исследования связаны с проведением натуральных экспериментов, накоплением фактов и созданием учения о теплоте такими учеными, как Э. Торричелли, О. Герике, Р. Бойль и др.

Попытки ответить на вопрос о природе теплоты привели к корпускулярной гипотезе, сформулированные Р. Клаузиусом в 1857 г. Клаузиус ввел такие понятия как идеальный газ (1854 г.), энтропия (1865 г.) и средняя длина свободного пробега (1860 г.). Исследуя среднюю длину свободного пробега, в 1859 г. Максвелл пришел к открытию закона распределения молекул по скоростям. Так постепенно развивалось новое направление: молекулярно-кинетическая теория.

Параллельно с этим продолжалось развитие термодинамики. В 1834 г. опытным путем Б. П. Э. Клапейроном было получено уравнение состояния идеального газа, основанное на законах Бойля-Мариотта (1662 г.) и Гей-Люссака (1802 г.) и дополненное в 1874 г. Д. И. Менделеевым. С помощью соотношения Клапейрона–Менделеева были объяснены многие закономерности теплового движения молекул в газе и выведены макроскопические свойства газа.

Дальнейшее развитие идей Дж. К. Максвелла в МКТ получили в трудах Л. Больцмана, начиная с 1866 г. Уравнение Больцмана (1.1), написанное в 1872 г., использовалось для обоснования молекулярно-кинетической теории, второго закона термодинамики, возрастания энтропии и вывода уравнений гидродинамики [19].

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{F}{m} \frac{\partial f}{\partial v} = J(f, f), \quad (1.1)$$

где f — функция распределения; v — скорость молекул; x — координаты местоположения молекул; m — масса молекулы; F — сила, действующая на молекулу; t — время; $J(f, f)$ — интеграл столкновений.

Уравнение Больцмана играет огромную роль в естествознании, технике, формировании научного мировоззрения. Оно в своих модификациях широко

используется при описании разреженного газа в аэромеханике, излучения света в атмосферной оптике и движения тепловых нейтронов в атомных реакторах.

Идеи Больцмана были доказаны в 1905 г. теоретически работами А. Эйнштейна [20] и М. Смолуховского [21] по теории броуновского движения. А экспериментальное подтверждение нашли в опытах Ж. Б. Перрена [22] в 1909 г.

Невозможность решения дифференциального уравнения Больцмана, послужила толчком к развитию математического аппарата. Дальнейшие исследования, которые в 1902 г. были отражены в теории Дж. В. Гиббса [23], были связаны с объединением двух направлений в одно — статистическая термодинамика. На основе теоремы Ж. Лиувилля [24], доказанной еще в 1838 г., Гиббс формулирует в теории мощный метод, в котором макроскопические свойства тела рассматриваются как свойства ансамбля, состоящего из совокупности точек (частиц) в фазовом пространстве, поведение которых полностью описывается законами классической механики. Работы Дж. Д. Биркгофа [25] также составили новый этап в развитии качественной теории. Основным объектом исследования у Биркгофа становится динамическая система, эволюция которой на основе динамического закона однозначно определяется начальным состоянием.

В 1927 г. Биркгофом [25] было предложено понятие динамического бильярда. Это понятие связано с исследованием свойств траекторий движения по инерции материальной точки единичной массы (частицы) внутри плоской замкнутой области. К основным свойствам относят перемешивание, эргодичность, энтропию, тепловое (статистическое) равновесие, которые полезны для вывода законов эволюции систем, состоящих из большого числа частиц. Большой вклад в понимание этих свойств для проблем статистической механики внесли Э. Хопф [26] и Н. С. Крылов [27] в 30–40-е годы XX в. Первое фундаментальное исследование эргодических свойств представлено в работе Я. Г. Синая [28] в 1970 г. Исследования в этом направлении продолжают Л. А. Бунимовичем [29], А. Ю. Лоскутовым [30] и др. авторами [31–36], где также изучаются вариационные принципы бильярдной динамики, геометрия лучей света, существование каустик, механизмы возникновения хаоса и др.

Развитие динамического бильярда привело к исследованию задач с подвижными границами. В 1949 г. Э. Ферми был предложен механизм ускорения частиц движущихся в магнитном поле для объяснения происхождения космических лучей высокой энергии [37]. В последующих работах [38–44] были введены

модели, реализующие механизм ускорения Ферми с помощью столкновений частицы с осциллирующей стенкой, в которых исследовались стохастические свойства. Особенностью таких моделей является то, что скорость частицы много больше скорости движущейся стенки. При нарушении гладкости движения скорости стенки от времени (пилообразный закон) в зависимости от начальных условий частицы может наблюдаться неограниченный рост скорости [45].

В динамике разреженного газа при очень больших числах Кнудсена ($Kn > 100$) столкновениями между частицами газа можно пренебречь. Такой режим, когда частицы взаимодействуют только с границами, называется свободномолекулярный, а газ именуется кнудсеновским. Практический интерес в моделировании такого сорта задач резко возрос в 50-х годах XX в. и связан с освоением околокосмического пространства, а также созданием специальных вакуумных установок, которые используются, например, в металлургии [46—49].

Задачи, связанные с исследованием динамических систем, состоящих из частиц газа, расположенных в сосуде с подвижной стенкой (поршнем), играют важную роль в неравновесной статистической механике (Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц [50], Р. Фейнман [51]). Исследование таких динамических систем с большим числом степеней свободы является сложной проблемой, в которой изучаются процессы релаксации газа, состояния статистического и теплового равновесия. Также эти вопросы успешно исследуются с применением вычислительного эксперимента [52—54].

В конце XIX в. атомистика вышла за рамки молекулярно-кинетической теории газов и наметилось ее проникновение в другие направления физики, например, в учение об электрических явлениях. В 1905 г. для описания движения частиц электронного газа в металлах Г. А. Лоренц предложил модель [55], в последствии получившую название газ Лоренца. Газом Лоренца называется динамическая система, описывающая свободное движение частиц, взаимодействующих по закону зеркального отражения с неподвижными сферическими рассеивателями в пространстве. Но применение этой модели было ошибочным, поскольку в ней не учитывались квантово-механические свойства электронов. Однако модель была впервые использована в 1962 г. для описания процесса рассеяния тепловых нейтронов в тяжелой жидкости [56]. Подобная модель также была выбрана для исследования свойств фильтрации идеального газа различными авторами [57—61]. Газ Лоренца является одной из разновидностей рассеивающих бильярдов, где частица упруго отражается от круглых бесконеч-

но тяжелых рассеивателей в плоской области [30; 62–66]. Для такой модели проведены исследования свойств перемешивания и диффузии.

1.2 Обзор точных решений уравнений движения газа Кнудсена

В этом параграфе представлен обзор точных решений некоторых задач газовой динамики при условии свободномолекулярного течения. Иначе говоря, в исследуемой области при очень больших средних длинах свободного пробега столкновения между частицами газа достаточно редки, так что их можно не рассматривать. Как правило, такие решения описывают весьма искусственные ситуации, но при этом их можно использовать как для апробации новых методов, так и для верификации программ.

1. Существует небольшое число точных решений уравнения Больцмана ввиду сложной структуры интеграла столкновений. В случае, когда установлен свободномолекулярный режим, интеграл столкновений, стоящий в правой части уравнения Больцмана, можно не учитывать. При отсутствии внешних сил уравнение Больцмана сводится к уравнению Лиувилля и записывается в виде:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} = 0. \quad (1.2)$$

Общее решение этого уравнения, найденное методом характеристик, имеет вид:

$$f(x, v, t) = f_0(x - v(t - t_0), v). \quad (1.3)$$

Функция распределения не изменяется вдоль прямолинейной траектории движения частиц.

2. Одним из возможных решений уравнения Лиувилля (1.2) является бегущее локальное максвелловское распределение, предложенное А. А. Никольским [67]:

$$f(x, v, t) = \text{const} \cdot \exp\left\{-[x - v(t - t_0)]^2\right\}, \quad (1.4)$$

где $v, x \in R_3$; $t > 0$.

Тогда значения макроскопических величин имеют следующий вид:

$$\rho(x, t) = \frac{\text{const}}{|t - t_0|^3}, \quad (1.5)$$

$$\bar{v}(x, t) = \frac{const}{|t - t_0|^3}, \quad (1.6)$$

$$T(x, t) = \frac{const}{|t - t_0|^2}. \quad (1.7)$$

Это решение верно либо в безграничном пространстве, либо при наличии границ, не нарушающих этого распределения. Например, границы, которые зеркально отражают частицы, должны быть либо неподвижны, либо двигаться с постоянной скоростью в направлении, перпендикулярном стенкам, и с произвольной скоростью в касательном к ним направлении.

3. Одномерная задача о поршне. Рассматривается пространство, заполненное одномерным покоящимся газом с плотностью n_0 и температурой T . Газ разделен тонкой перегородкой (поршень), движущейся со скоростью u . В начальный момент времени $t = 0$ поршень расположен в $x = 0$. При переходе в систему координат, движущуюся вместе с поршнем, поршень становится неподвижным. В этом случае газ, расположенный с левой стороны от поршня, приобретает отрицательную скорость, направленную к плоскости поршня. Газ, находящийся с правой стороны от поршня, имеет положительную скорость u .

В одномерном случае значения макроскопических величин можно получить, используя следующую формулу:

$$\begin{aligned} n\bar{Q}(x, t) = & \frac{1}{t} \int_{-\infty}^0 Qn_0 f\left(\frac{x - x'}{t} - u, x'\right) dx' + \\ & + \frac{1}{t} \int_0^{+\infty} Qn_0 f\left(\frac{x - x'}{t} + u, x'\right) dx', \end{aligned} \quad (1.8)$$

где $x' = x - vt$; $f(x, v) = \beta/\pi^{1/2} \cdot \exp\{- (\beta v)^2\}$ — максвелловское распределение по скоростям; $\beta = 1/\sqrt{2RT}$; Q — молекулярный признак, связывающий макроскопические свойства с функцией распределения.

В частности, числовая плотность $n(x, t)$ получается при $Q = 1$:

$$n(x, t) = n_0 + n_0/2[\operatorname{erf}\{\beta(x/t + u)\} - \operatorname{erf}\{\beta(x/t - u)\}], \quad (1.9)$$

где $\operatorname{erf}(a) = 2/\pi^{1/2} \int_0^a \exp\{-x^2\} dx$.

4. Задача о течении и теплопередаче между двумя параллельными бесконечными твердыми пластинами, движущимися в своей плоскости относительно

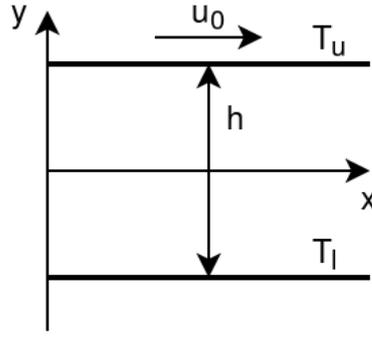


Рис. 1.1. Схема течения Куэтта

друг друга, называется течением Куэтта [49; 68]. Пусть верхняя пластина движется в своей плоскости относительно нижней границы со скоростью u_0 . Температуры верхней T_u и нижней T_l пластин имеют постоянные значения. Газ, заключенный между пластинами, отражается от них зеркально-диффузно (см. рис. 1.1).

В случае, когда установлен свободномолекулярный режим течения газа, плотность ρ , скорость v_x и температура T газа между пластинами имеют следующий вид:

$$\rho = \rho_0, \quad (1.10)$$

$$v_x = \frac{u_0 \sqrt{T_u} - \sqrt{T_l}}{2 \sqrt{T_u} + \sqrt{T_l}}, \quad (1.11)$$

$$T = \sqrt{T_u T_l} + \frac{m u_0^2}{3k} \frac{\sqrt{T_u T_l}}{(\sqrt{T_u} + \sqrt{T_l})^2}. \quad (1.12)$$

Таким образом, расстояние между пластинами h не влияет на скорость и температуру газа. Эти параметры зависят от скоростей и температур стенок.

1.3 Обзор статистических методов решения задач динамики разреженного газа

Метод Монте-Карло — численный метод решения математических задач при помощи моделирования случайных величин [69; 70].

Первая работа по использованию вероятностного метода была опубликована А. Холлом [71] в 1873 году именно при организации стохастического процесса

экспериментального определения числа π путем бросания иглы на лист линованной бумаги. Идея такого эксперимента возникла у Ж. Л. Л. Бюффона для вычисления числа π в 1777 году.

Бурное развитие и применение методов статистического моделирования (Монте-Карло) в различных областях прикладной математики началось с середины прошлого столетия. Это было связано с решением качественно новых задач, возникших при исследовании новых процессов. Одним из первых, кто применил ММК для моделирования траекторий нейтронов был Дж. фон Нейман. Первая работа с систематическим изложением была опубликована в 1949 году Метрополисом и Уламом [72]. Метод Монте-Карло применялся для решения линейных интегральных уравнений, в котором решалась задача о прохождении нейтронов через вещество.

Невозможность решения уравнения Больцмана за исключением самых простейших случаев, описанных в предыдущем параграфе, привело к развитию численных методов в газовой динамике. Для различных режимов стационарных и нестационарных течений существует множество разнообразных методов как конечно-разностных для решения уравнения Больцмана, так и статистических для моделирования процессов перелета и столкновений молекул, ведущих к уравнению Больцмана [73].

К конечно-разностным методам относят регулярные (классические конечно-разностные квадратурные подходы) и полурегулярные методы (для вычисления интегралов столкновения используется метод Монте-Карло) [74], кинетически-согласованные разностные схемы [75] и другие [76; 77]. Конечно-разностные методы включают расчет двух этапов: 1) усреднение по скоростям молекул; 2) разностная аппроксимация уравнений для газодинамических параметров. Такие методы хорошо описывают газодинамические течения при малых числах Кнудсена ($Kn < 1$).

В статистических методах поведение частиц основано на кинетическом описании молекулярной динамики, при этом нет необходимости в моделировании реального числа частиц и определении начальных условий (местоположение и скорость) для каждой частицы [78]. Главное преимущество методов Монте-Карло заключается в простоте их применения к течениям с более сложной геометрией. Изменения, которые привели бы к полной практической невозможности применения методов интегрального уравнения, в этом подходе обычно приводят к небольшим изменениям вычислений в программе [79].

Одним из первых применений метода Монте-Карло в динамике разреженного газа был метод динамики молекул (Б. Ж. Алдер и Т. Э. Уэйнрайт [80]). Основная идея метода заключается в одновременном построении траекторий статистически большого числа моделирующих частиц. При вычислении траекторий упругих сферических молекул учитываются их столкновения, которые происходят, когда расстояние между двумя молекулами становится равным их диаметру. За исключением задания начальных условий, этот подход вполне детерминирован. К достоинству метода можно отнести то, что он является бессеточным и позволяет моделировать также нестационарные течения. Но при рассмотрении траектории отдельной частицы из-за возможного столкновения с другими частицами, необходимо изучить и их траектории, что приводит к существенному увеличению количества расчетов.

Для моделирования процесса свободномолекулярного обтекания вогнутого тела с многократным отражением от поверхности применяется метод пробных частиц, который был впервые предложен Дж. К. Хэвилендом [81]. Согласно этому методу, прослеживаются траектории отдельных молекул и вычисляется функция распределения по фактическому числу пробных частиц, находящихся в каждой дискретной ячейке, на которое разбито все фазовое пространство. Частица, столкнувшаяся с поверхностью, заменяется частицей, скорость которой выбрана случайным образом в соответствии с вероятностным распределением, заданным граничными условиями. В переходном режиме, слежение осуществляется не только за пробными частицами, но и требуется знание функции распределения полевых частиц, что приводит к некоторому итерационному процессу, позволяющему учитывать межмолекулярные столкновения. Недостатком этого метода является то, что его нельзя применять к нестационарным течениям.

Альтернативным методу пробной частицы стал метод прямого статистического моделирования Г. Берда [82]. Суть этого метода заключается в разделении двух физических процессов на одном временном шаге Δt : 1) расчет столкновений (решение задачи пространственно однородной релаксации); 2) свободномолекулярный перенос с учетом взаимодействия с границами. Как и в предыдущем методе моделируемая область разбивается на ячейки, в которых функция распределения определяется некоторым набором частиц. На границах этой области устанавливается вид функции распределения и закон взаимодействия частиц газа с поверхностью. Основное отличие этого метода за-

ключается в том, что в процессе моделирования осуществляется одновременное слежение за всем ансамблем частиц [83]. Это позволяет строить статистически большое число траекторий частиц с учетом меняющейся во времени частоты столкновений (нестационарный процесс), что приводит к некоторому процессу установления. Этот метод является одним из самых популярных в динамике разреженного газа, существует множество работ, посвященных его модификациям и исследованиям в этом направлении [84–87].

При моделировании задач газовой динамики методом Монте-Карло требуется генерировать с помощью детерминированного алгоритма большое количество значений псевдослучайных величин с различными законами распределения, такими, как равномерное, нормальное, больцмановское [69]. Существует огромное количество различных алгоритмов, например, метод середины квадрата [88], вихрь Мерсенна [89] и др. Известно, что алгоритмы генерируют ограниченный диапазон случайных величин, поэтому необходимо, чтобы получаемые последовательности обладали различными свойствами, такими, как скорость генерации случайных величин, статистическая зависимость [90; 91] и др. Для проверки меры близости генерируемого диапазона случайных величин к требуемому распределению используются специальные статистические тесты.

1.4 Проблематика эффективного использования современных вычислительных систем

Актуальность численного моделирования фундаментальных задач газовой динамики обусловлена, в частности, необходимостью расширения набора эталонных численных решений для валидации моделей, активно разрабатываемых во всем мире. Результаты расчетов позволяют получить новые данные о физике течения газа и продвинуться в исследованиях сложных и до сих пор малоизученных явлений.

Научный прогресс в сфере прикладной математики тесно связан с возможностью эффективного использования современных вычислительных систем. Суперкомпьютерное моделирование широко применяется при решении актуальных инженерно-технических задач в различных высокотехнологичных отраслях промышленности, таких как авиастроение, оптика, атомная энергетика и многих других. В современном мире массовые суперкомпьютерные технологии являются «технологическим оружием» в конкурентной борьбе на

мировых высокотехнологичных рынках [92]. Использование этих технологий позволяет существенно сократить сроки и стоимость разработок.

В настоящее время наблюдается быстрый рост пиковой производительности вычислительных систем, которая еще в конце 2018 года превысила 200 петафлопс [93]. С одной стороны, эволюция продолжает идти в сторону увеличения числа процессорных ядер, которое в крупнейших системах уже перевалило за миллион. Это обусловлено не только увеличением числа узлов в суперкомпьютерах, но и ростом числа ядер в процессорах, объединённых общей памятью узла. Последнее привело к развитию технологий параллельных вычислений и переходу на более сложную модель, сочетающую распределённую и общую память. С другой стороны, рост пиковой производительности процессорного ядра обеспечивается не только за счёт повышения тактовой частоты, но и за счёт расширения векторных регистров, что, с учётом не столь значительного роста пропускной способности памяти, еще более усложняет эффективное использование процессоров. Поэтому эффективное использование высокопроизводительных вычислительных систем требует преодоления ряда фундаментальных проблем.

С ростом числа многоядерных процессоров в высокопроизводительных вычислительных системах происходит их усложнение как на аппаратном уровне, так и на программном. Возникает проблема, связанная с трудностью «адаптации алгоритмов на архитектуру высокопроизводительных вычислительных систем с экстремальным параллелизмом» [94]. Преодоление данной проблемы зачастую требует создания новых вычислительных алгоритмов. Это делает создание расчетных кодов, в полной мере использующих возможности современных вычислительных систем, сложной и актуальной научной проблемой.

Другой проблемой является то, что необходимо в алгоритмах учитывать независимую работу узлов с учетом восстановления расчетов в случае отказа узла на высокопроизводительной вычислительной системе [95—98].

Следует подчеркнуть, что ключевое значение имеет не вычислительная способность устройства, а скорость передачи данных из «медленной» памяти в регистры вычислительного устройства [99]. В большинстве случаев при правильной организации данных процент от пиковой производительности программ при расчетах с числами двойной точности для задач газовой динамики с использованием центральных процессоров выше, чем с использованием графических процессоров [100—102].

Существует огромное количество языков программирования, программного обеспечения и технологий, позволяющих довольно эффективно разрабатывать приложения для любой отрасли, начиная с простых программ, которые позволяют выполнить простые расчеты, и заканчивая огромными пакетами прикладных программ, позволяющими моделировать сложные процессы, учитывающие большое число факторов [103]. Не смотря на то, что использование таких технологий, как OpenMP и MPI, позволяет обмениваться информацией между системами с общей и распределенной памятью соответственно, основным недостатком являются задержки, возникающие при синхронизации операций и обмене данными.

С одной стороны, происходит фантастически быстрый рост мощной вычислительной техники, что дает реальную возможность приступить к моделированию тех задач газовой динамики, которые ранее были недоступным для численного решения. С другой стороны, пришлось столкнуться с той ситуацией, когда при расчетах на многопроцессорной высокопроизводительной вычислительной технике используется лишь небольшая часть ее потенциальных возможностей [75]. Эта проблема в первую очередь связана с трудностями адаптации алгоритмов решения задач математической физики к архитектуре многопроцессорных ЭВМ с распределенной памятью. Кроме того, имеется много других существенных проблем, например, визуализация огромного количества данных, полученной на супервычислительной системе, проблема передачи и обработки этого объема данных и многие другие, которые мешают эффективному использованию многопроцессорных систем.

В заключение следует отметить предложенные Б. Н. Четверушкиным [75] общие требования и рекомендации, предъявляемые к вычислительным алгоритмам с целью эффективного использования высокопроизводительных вычислительных систем:

1. Внутренний параллелизм метода.
2. Обеспечение равномерной загрузки многоядерного процессора.
3. Минимизация обмена данными между различными типами памяти и вычислительными узлами.
4. Простота, позволяющая добиться успешной адаптации к архитектуре вычислительного устройства.

1.5 Выводы по главе

Результаты проведенного анализа позволяют сделать вывод об актуальности диссертационного исследования как в теоретическом, так и в практическом направлениях. Основным вычислительным методом для моделирования течения газа Кнудсена был выбран метод Монте-Карло, который является развитием бессеточного метода динамики молекул и позволяет моделировать как стационарные, так и нестационарные течения, в том числе в области с переменной во времени геометрией.

Для моделирования нестационарного течения, состоящего из статистически большого числа частиц, требуется разработать комплекс программ, позволяющий визуализировать течение газа в переменной во времени области, для современных высокопроизводительных вычислительных систем. При этом существует потребность в разработке точных решений течения кнудсеновского газа с подвижными границами для верификации комплекса программ.

Глава 2. Описание метода Монте-Карло моделирования течения газа Кнудсена в трехмерной изменяющейся во времени области

Некоторые важные понятия и проблемы кинетической теории газов можно исследовать, изучая макроскопические характеристики газа, состоящего из материальных частиц с условной положительной массой. Принимается во внимание и то, что вероятность эффективного сечения столкновения мала, т.е. столкновения частиц газа друг с другом настолько редки, что ими можно пренебречь. Физические свойства у такого газа будут во многом зависеть от его взаимодействия со стенками, которые ограничивают исследуемую область пространства. Подобного рода задачи возникают при исследовании течений газа низкой плотности и могут решаться в рамках предложенной модели. Рассматриваемые в параграфе 1.2 простые модели, для которых существуют точные решения, находят применение в реальных задачах [104].

Эффективным способом решения задач динамики разреженного газа является численное моделирование методом Монте-Карло. В этой главе представлен модифицированный метод Монте-Карло, позволяющий моделировать течение кнудсеновского газа в трехмерной области с подвижными границами. Разработанный метод относится к классу бессеточных и основан на методе прямого статистического моделирования [82] и методе динамики молекул [80].

Рассматриваемая в диссертационной работе модель идеального бесстолкновительного газа — динамическая система, состоящая из статистически большого числа частиц, которые не взаимодействуют друг с другом, но взаимодействуют с подвижными и неподвижными границами.

2.1 Модель идеального бесстолкновительного газа с подвижными границами

Для полного описания газового потока в классической механике необходимо задать положение и скорость каждой молекулы в момент времени t . При использовании такого детерминированного подхода возникают следующие проблемы: невозможность моделирования достаточного числа частиц; определение начальных условий (положение и скорость) для каждой частицы. Эти труд-

ности можно обойти, если перейти к статистическому описанию, используя распределения вероятностей.

В обзорной главе рассматривалось, что движение частиц газа Кнудсена описывается уравнением Лиувилля (1.2), в котором центральное место занимает функция распределения (см. параграф 1.2). С помощью функции распределения можно вычислить макроскопические величины.

Пусть вероятностная модель (вероятностное пространство), введенная А. Н. Колмогоровым в 30-х годах XX века [105], определяется набором из трех объектов:

$$(\Omega, \mathcal{A}, P), \quad (2.1)$$

где $\Omega = R_n$ — пространство элементарных событий; $\mathcal{A} = B(R_n)$ — наименьшая σ -алгебра подмножеств множества Ω (борелевская σ -алгебра); P — вероятностная мера, определенная на борелевских множествах \mathcal{A} .

Для того чтобы определить частицу в такой вероятностной модели, необходимо задать для нее функцию распределения.

2.1.1 Одночастичная функция распределения и ее связь с макроскопическими величинами

Пусть состояние системы в момент времени t определяется точкой в $6N$ -мерном фазовом пространстве, где N — число частиц, а 6 — число параметров у каждой частицы [68]. Поскольку начальное состояние системы, состоящей из N частиц, неизвестно, то можно определить его вероятностно как N -частичную функцию распределения. Из условия, что частицы между собой не взаимодействуют, следует, что влияние параметров одной частицы на параметры другой отсутствует, поэтому можно упростить модель, перейдя от N -частичной к одночастичной функции распределения $f(x, v, t)$. Такая функция определяет вероятность нахождения частицы в элементе объема $dx dv$ фазового пространства R_6 ($R_3 \times R_3$ — декартово произведение пространства координат на пространство скоростей) в окрестности точки (x, v) в момент времени t [106].

Также одночастичная функция связана с плотностью вероятности обнаружения частицы $\tilde{f}(x, v, t)$ в элементе объема $dx dv$ фазового пространства R_6 в окрестности точки (x, v) в момент времени t следующим соотношением:

$$f(x, v, t) \sim C(m, N, V)\tilde{f}(x, v, t), \quad (2.2)$$

где m — масса одной молекулы; N — число молекул; V — элемент объема dx .

В частности, в работе К. Черчиньяни [107] соотношение (2.2) имеет следующий вид:

$$f = Nm\tilde{f}. \quad (2.3)$$

В результате интегрирования f по всему пространству получается, что

$$\int_{R_6} f dx dv = Nm. \quad (2.4)$$

Смысл функции f состоит в том, что она есть (ожидаемая) массовая плотность в фазовом пространстве одной частицы.

Несмотря на то, что состояние такой системы отобразить можно кривой в $6N$ -мерном фазовом пространстве, с точки зрения исследования динамической системы в целом или ее части наиболее интересны макроскопические параметры, такие как плотность, давление, температура. Эти макроскопические параметры представляют собой качественные характеристики в сравнении с набором параметров частицы. Поскольку такие параметры являются усредненными, то эти макроскопические параметры можно получить с помощью одночастичной функции распределения f , связанной, в частности, с плотностью вероятности \tilde{f} соотношением (2.3). Из условия нормировки \tilde{f} следует, что

$$\int_{R_6} \tilde{f} dx dv = P(\Omega) = 1. \quad (2.5)$$

С помощью статистического усреднения можно вычислить среднее значение функции $g(x)$, определенной и интегрируемой в пространстве R_n :

$$Mg(x) = \int_{R_n} g(x)P(dx). \quad (2.6)$$

Тогда макроскопические параметры, такие как плотность (2.7), массовая (гидродинамическая) скорость (2.8), внутренняя энергия единицы массы газа (2.9), температура (2.10) и давление (2.11), рассчитываются по следующим формулам:

$$\rho(x, t) = \int_{R_3} f dv, \quad (2.7)$$

$$\bar{v}(x, t) = \frac{1}{\rho} \int_{R_3} v f dv, \quad (2.8)$$

$$e(x, t) = \frac{1}{2\rho} \int_{R_3} (v - \bar{v})^2 f dv, \quad (2.9)$$

$$T(x, t) = \frac{2}{3R} e, \quad (2.10)$$

$$p(x, t) = \frac{1}{3} \int_{R_3} (v - \bar{v})^2 f dv, \quad (2.11)$$

где R — газовая постоянная.

Из формул (2.7)–(2.11) следует стандартное соотношение Клапейрона-Менделеева для идеального газа

$$p = R\rho T. \quad (2.12)$$

2.1.2 Граничные условия

Одним из наиболее часто встречающихся типов граничных условий является условие на поверхности раздела газа и твердого тела. В случае, когда межмолекулярные столкновения редки, течение газа может существенно зависеть от столкновений частиц с границей [108]. Взаимодействие газа с границей может быть различным, например, зеркальное упругое отражение или диффузное упругое отражение. Кроме того, столкновение с границей может быть неупругим; частица может войти в некоторую полость поверхности и затем выйти оттуда с энергией, отличной от энергии на входе. Энергия частицы после взаимодействия с границей может также зависеть от температуры границы.

Пусть $G(x, t) \subset R_3$ замкнутая область, которая может изменяться с течением времени. Ее граница $\partial G(x, t)$ состоит из конечного объединения C^1 -гладких поверхностей (границ) $\partial G_j(x, t)$, где $j = \overline{1, M}$.

В работе рассматривается зеркальное упругое отражение частиц газа от абсолютно гладкой поверхности. Масса границы условно много больше массы частицы. В этом случае, модель взаимодействия газа с движущейся поверхностью имеет следующий вид (см. рис. 2.1):

$$f(x, v, t) = f(x, v - 2n(v - u, n), t), \quad (2.13)$$

где n — единичный вектор нормали к поверхности в точке $x \in \partial G_j(x, t)$ в момент времени t ; u — скорость подвижной границы.

2.2 Бессеточный метод Монте-Карло

Рассматриваемый в работе метод Монте-Карло предназначен для моделирования течения газа Кнудсена в трехмерной изменяющейся во времени области.

Для моделирования течения газа, состоящего из статистически большого числа частиц, требуется установить начальные параметры частиц согласно заданной функции распределения молекул в фазовом пространстве. Для создания псевдослучайной последовательности близкой к требуемому закону распределения используются генераторы псевдослучайных чисел (см. параграф 1.3).

Важным преимуществом метода Монте-Карло в сравнении с конечно-разностными методами является то, что граничные условия формулируются в терминах описания взаимодействия каждой молекулы с границей. Это приводит к простой реализации метода моделирования течения газа в трехмерной области с подвижными границами. Поскольку частицы газа не сталкиваются друг с другом, то нет необходимости дополнительно вводить расчетную сетку (см. параграф 1.3), а вычисление траектории движения каждой частицы с учетом возможного взаимодействия с границами можно выполнять независимо. Таким образом, метод обладает внутренним параллелизмом.

2.2.1 Расчет траекторий движения частиц с учетом возможного взаимодействия с подвижными границами

Расчет каждой траектории движения частицы можно производить независимо друг от друга как на всем промежутке времени $[0, t^*]$, так и на одном шаге по времени Δt . Был выбран последний вариант, поскольку необходимо сохранять промежуточные результаты на $[0, t^*]$ как о местоположении частиц, так и о различных глобальных (макроскопических) параметрах течения газа для дальнейшего исследования.

Перемещение частицы определяется ее скоростью и установленным шагом по времени с помощью формулы (2.14).

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} + v\Delta t, \quad (2.14)$$

где i — номер итерации; x — пространственные координаты частицы; v — скорость частицы.

Пусть частица на временном шаге Δt взаимодействует с границами K раз, тогда шаг Δt разбивается на $(K+1)$ полуинтервалов. Пусть для определенности в моменты времени $t_1 < t_2 < \dots < t_k < \dots < t_K$ частица взаимодействует с одной из границ один раз. Тогда $(t_{K+1} - t_0) = \Delta t$, а расчет траектории движения частицы вычисляется с помощью следующих формул:

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} + \sum_{k=0}^K v_k^{(i+1)} (t_{k+1} - t_k), \quad (2.15)$$

$$v_k^{(i+1)} = \begin{cases} v^{(i)}, & k = 0 \\ v_{k-1}^{(i+1)} - 2n_{j(k)}(v_{k-1}^{(i+1)} - u_{j(k)}, n_{j(k)}), & k = \overline{1, K} \end{cases}, \quad (2.16)$$

где v_k — скорость частицы после k -го взаимодействия с границей; $\sum_{k=0}^K (t_{k+1} - t_k) = \sum_{k=0}^K \Delta t_k = \Delta t$ — временной шаг; K — число столкновений частицы с границами; $u_{j(k)}$ — скорость j -й границы в момент времени t_k на $(i+1)$ -ом шаге; $n_{j(k)}$ — нормаль к поверхности j -й границы в точке столкновения в момент времени t_k на $(i+1)$ -м шаге.

На рис. 2.1 представлена схема взаимодействия частицы с границей по закону зеркального отражения.

Осталось определить момент времени столкновения частицы с границей, что приводит к задаче поиска пересечения траекторий движения частицы и границы.

Пусть граница определяется поверхностью 2-го порядка в трехмерном пространстве [109]:

$$S(x_1, x_2, x_3) = Ax_1^2 + Ex_2^2 + Hx_3^2 + 2Bx_1x_2 + 2Fx_2x_3 + 2Cx_1x_3 + 2Dx_1 + 2Gx_2 + 2Ix_3 + J = 0. \quad (2.17)$$

А коэффициенты получены в результате преобразования из матричной формы:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ 1 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} A & B & C & D \\ B & E & F & G \\ C & F & H & I \\ D & G & I & J \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ 1 \end{bmatrix} = 0. \quad (2.18)$$

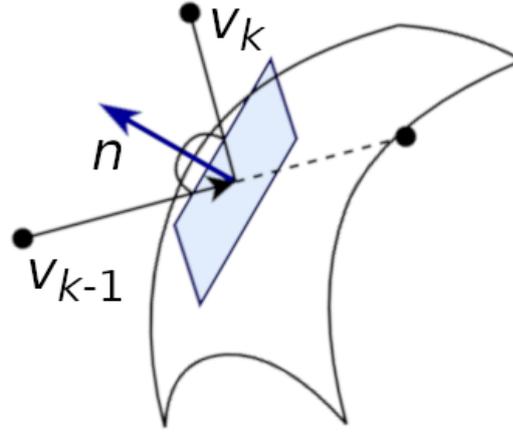


Рис. 2.1. Схема взаимодействия частицы с границей по закону зеркального отражения: v_{k-1} — скорость частицы до столкновения; v_k — скорость частицы после k -го столкновения с границей; n — единичная нормаль к поверхности границы в точке столкновения частицы с границей

При подстановке уравнения траектории движения частицы (2.14) в переменные x_1, x_2, x_3 , получается следующее уравнение относительно t :

$$at^2 + bt + c = 0, \quad (2.19)$$

где параметры a, b, c квадратного уравнения соответственно равняются

$$\begin{aligned} a &= Av_1^2 + Ev_2^2 + Hv_3^2 + 2Bv_1v_2 + 2Cv_1v_3 + 2Fv_2v_3; \\ b &= v_1(Ax_1 + Bx_2 + Cx_3 + D) + v_2(Bx_1 + Ex_2 + Fx_3 + G) + \\ &\quad + v_3(Cx_1 + Fx_2 + Hx_3 + I); \\ c &= Ax_1^2 + Ex_2^2 + Hx_3^2 + 2Bx_1x_2 + 2Cx_1x_3 + 2Fx_2x_3 + \\ &\quad + 2Dx_1 + 2Gx_2 + 2Ix_3 + J. \end{aligned}$$

Если часть коэффициентов исходного уравнения равняется нулю, то в некоторых случаях, отбросив нулевые коэффициенты, можно получить более простые варианты уравнения. Использование таких уравнений позволяет уменьшить объем вычислений.

2.2.2 Статистические оценки макроскопических параметров

Пусть при моделировании некоторого процесса течения газа условно фиксируется некоторая ограниченная подобласть, сквозь которую могут проходить частицы. На рис. 2.2 представлен пример такой подобласти, который далее будет называться элементарной областью. Пусть в определенный момент времени t в этой элементарной области D (куб с ребром h) будет содержаться

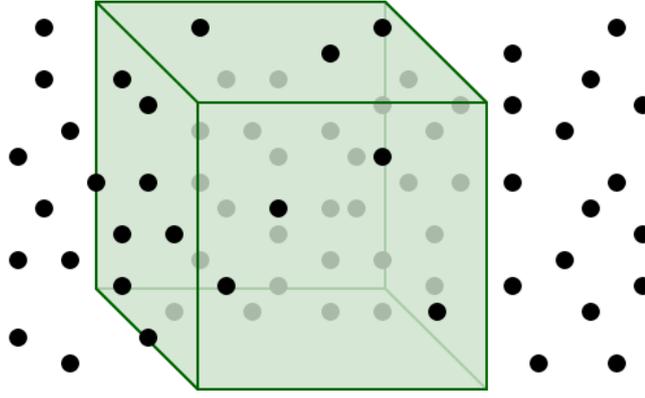


Рис. 2.2. Схема расположения частиц и элементарной области

определенное количество частиц L , которые выделены серым цветом. Частицы, расположенные вне области, обозначены черным цветом.

При описании математической модели в пункте 2.1.1 макроскопические параметры рассматривались как интегральные характеристики средних величин. Известно, что моделирование течения газа методом Монте-Карло осуществляется конечным числом частиц N . Тогда при переходе от непрерывных величин к дискретным, интегралы, вычисляющие значения макроскопических параметров, следует заменить конечными суммами. Для этих целей вводятся статистические оценки, позволяющие приближенно вычислить значения макроскопических величин в точке. Эти статистические оценки макроскопических величин вычисляются с помощью локальных параметров частиц, принадлежащих элементарной области, по следующим формулам:

$$\hat{\rho}(x, t) = \frac{1}{NV} \sum_{j: x_j \in D(x, h)}^N m_j, \quad (2.20)$$

$$\hat{v}(x, t) \cong \begin{cases} 1/(\hat{\rho}NV) \sum_{j: x_j \in D(x, h)}^N v_j m_j, & \hat{\rho} > 0 \\ 0, & \hat{\rho} = 0 \end{cases}, \quad (2.21)$$

$$\hat{e}(x, t) = \frac{1}{2(N-1)} \sum_{k=1}^3 \left[\sum_{j: x_j \in D(x, h)}^N (v_j^k)^2 - \frac{1}{N} \left(\sum_{j: x_j \in D(x, h)}^N v_j^k \right)^2 \right], \quad (2.22)$$

$$\hat{T}(x, t) = \frac{2}{3R} \hat{e}, \quad (2.23)$$

$$\hat{p}(x, t) = \frac{2}{3} \hat{\rho} \hat{e}, \quad (2.24)$$

где V — объем элементарной области; $D(x, h)$ — элементарная область; m_j — масса j -й частицы; v_j — скорость j -й частицы; R — газовая постоянная.

2.2.3 Оценка погрешностей

Непрерывная функция распределения молекул в фазовом пространстве описывает бесконечное множество возможных значений параметров частиц. Замена такой функции дискретным набором параметров частиц, может приводить к значительному статистическому разбросу.

Основной характеристикой сходимости любого численного метода является скорость. С одной стороны, скорость сходимости метода Монте-Карло зависит от числа частиц, участвующих в вычислительном эксперименте, а, с другой стороны, от усредненных величин, полученных при определенном числе испытаний.

Оценка погрешностей при моделировании независимых испытаний. Одно из главных преимуществ стохастических расчетных методов связано с тем, что можно оценить статистическую ошибку, т.е. в ходе расчета можно вычислить не только средние значения, но и дисперсию.

Пусть $\xi = \xi(\omega)$ — интегрируемая случайная величина. Пусть функция $\xi(\omega)$ отображает множество Ω на множество всех действительных чисел R_1 . Тогда математическое ожидание $M\xi$ и дисперсия $D\xi$ случайной величины ξ определяется формулами (2.25) и (2.26) соответственно [105; 110].

$$M\xi = \int_{\Omega} \xi(\omega)P(d\omega) = \int_{R_1} x dF_{\xi}(x), \quad (2.25)$$

где $P(d\omega)$ — вероятность того, что величина ω определена на интервале $d\omega$; $F_{\xi}(x) = P\{\xi(\omega) < x\} = \int_{-\infty}^x f_{\xi}(t)dt$ — функция плотности распределения случайной величины ξ в точке x ; $f_{\xi}(t)$ — плотность распределения случайной величины.

$$D\xi = \int_{R_1} [x - M\xi]^2 dF_{\xi}(x) = M\xi^2 - (M\xi)^2 \quad (2.26)$$

Доверительный интервал $(M\xi - \delta, M\xi + \delta)$, в котором находится истинное значение $\tilde{\xi}$ случайной величины ξ с заданной вероятностью P , определяется

следующим образом [111]:

$$P \left\{ \left| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i - M\xi \right| \leq \frac{\alpha s}{\sqrt{n}} \right\} = \Phi(\alpha), \quad (2.27)$$

где ξ_i — неизвестная величина, полученная в результате i -го испытания; n — число независимых испытаний; $s = \sqrt{D\xi}$ — среднеквадратичное отклонение; $\Phi(\alpha) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\alpha e^{-t^2/2} dt$ — функция Лапласа.

Правило трех сигм. Доверительный интервал $(\hat{\mu} - 3\sigma, \hat{\mu} + 3\sigma)$, в котором находится истинное значение μ случайной величины ξ , распределенной по нормальному закону, с заданной вероятностью P , определяется следующим образом [112]:

$$P \left\{ \left| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i - \hat{\mu} \right| \leq \frac{3\hat{s}}{\sqrt{n}} \right\} \approx 0.9973, \quad (2.28)$$

$$\hat{\mu} = \bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i, \quad (2.29)$$

$$\hat{s}^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2, \quad (2.30)$$

где $\hat{\mu}$ — математическое ожидание $M\xi$; n — число независимых испытаний; x_i — неизвестные величины, полученные в результате испытаний; \hat{s} — несмещенная оценка дисперсии $D\xi$.

Таким образом, можно утверждать, что случайная величина ξ не отклонится от математического ожидания $\hat{\mu}$ по абсолютной величине больше чем на 3σ ($\sigma = \hat{s}/\sqrt{n}$) с вероятностью 0.9973.

Одним из недостатков метода Монте-Карло является то, что статистическая погрешность уменьшается очень медленно по сравнению с другими численными методами [113; 114].

Статистическая флуктуация. Другим способом оценки погрешности колебаний макроскопических параметров служит статистическая флуктуация [50]. Порядок убывания погрешности величины, зависящей от числа частиц, можно оценить с помощью относительной флуктуации, которая определяется следующим выражением:

$$\frac{\sqrt{\langle(\Delta F)^2\rangle}}{\langle F \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{L}}, \quad (2.31)$$

где $(\Delta_F)^2 = \langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2$ — средняя квадратичная флуктуация; F — статистическая оценка макроскопической величины; L — число частиц в выделенной подобласти (эlemente объема dx).

Сравнение численного решения с аналитическим. В случае, если для задачи существует аналитическое решение, точность численного решения макроскопических параметров можно оценить с помощью максимальных абсолютной Δ_F и относительной δ_F погрешностей:

$$\Delta_F = \max_t |F_{num} - F_{an}| \quad \delta_F = \frac{\Delta F}{|F_{an}|} \cdot 100\%, \quad (2.32)$$

где F_{num} — численное значение; F_{an} — аналитическое значение; $t \in [0, t^*]$ — временной отрезок.

2.3 Выводы по главе

Разработан метод Монте-Карло, позволяющий моделировать течение газа Кнудсена, в основе которого лежит расчет траекторий движения частиц с учетом возможного их взаимодействия с подвижными границами.

Общее правило таково: стандартное отклонение примерно обратно квадратному корню из полного объема выборки. Получается, что разброс величин, полученных в результате численного моделирования, определяется только полным объемом выборки и не зависит от того, получены ли они в 100 испытаниях с 10 молекулами в эксперименте, или в 10 испытаниях со 100 молекулами. Это дает уверенность, что уменьшение числа частиц не приведет к систематическим изменениям или нестабильности в течении. Тем не менее, желательно более внимательно изучить значение действительного числа молекул, включенных в процесс.

Одним из важных аспектов исследования динамической системы является предсказание эволюции изучаемого процесса с течением времени на основе знаний о его начальном состоянии. С появлением границ резко возрастает сложность отыскания аналитического решения такого сорта задач. Решение проблемы заключается в разработке программного обеспечения, которое позволит моделировать изменение плотности распределения (с помощью конечного числа частиц) с течением времени в области с подвижными границами.

Глава 3. Предметно-ориентированный комплекс программ «Midges» и его тестирование

Описанная в предыдущей главе модель идеального бесстолкновительного газа в изменяющейся во времени области реализована в виде комплекса программ с условным названием «Midges». Данный комплекс программ разрабатывался автором с учетом поставленных задач для высокопроизводительных вычислительных систем. Получены свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ [16; 17].

В этой главе представлено описание схемы работы и алгоритмов комплекса программ. Выполнено тестирование комплекса программ на задаче о столкновении встречных пучков газа, имеющей аналитическое решение.

Материалы главы нашли отражение в работах [3; 4].

3.1 Реализация модели идеального бесстолкновительного газа в виде комплекса программ

Первоначально, программный комплекс разрабатывался автором диссертации для проведения широкого круга исследований течения кнудсеновского газа в переменной во времени области (см. приложение Б). Ввиду низкой производительности программного комплекса, автором было принято решение, связанное с разработкой комплекса программ под конкретную задачу с применением различных оптимизаций. Это привело к модификации алгоритмов и позволило в конечном итоге существенно повысить производительность программ, связанных с расчетом траекторий движения частиц.

3.1.1 Структура комплекса программ

На рис. 3.1 представлена общая схема работы комплекса программ [82].

Под **инициализацией общих параметров** подразумевается установка константных значений, таких как, общее время t^* , шаг по времени Δt , число частиц N и др.

Под **заданием начального состояния модели** подразумевается инициализация параметров частиц с помощью генератора псевдослучайных чисел,

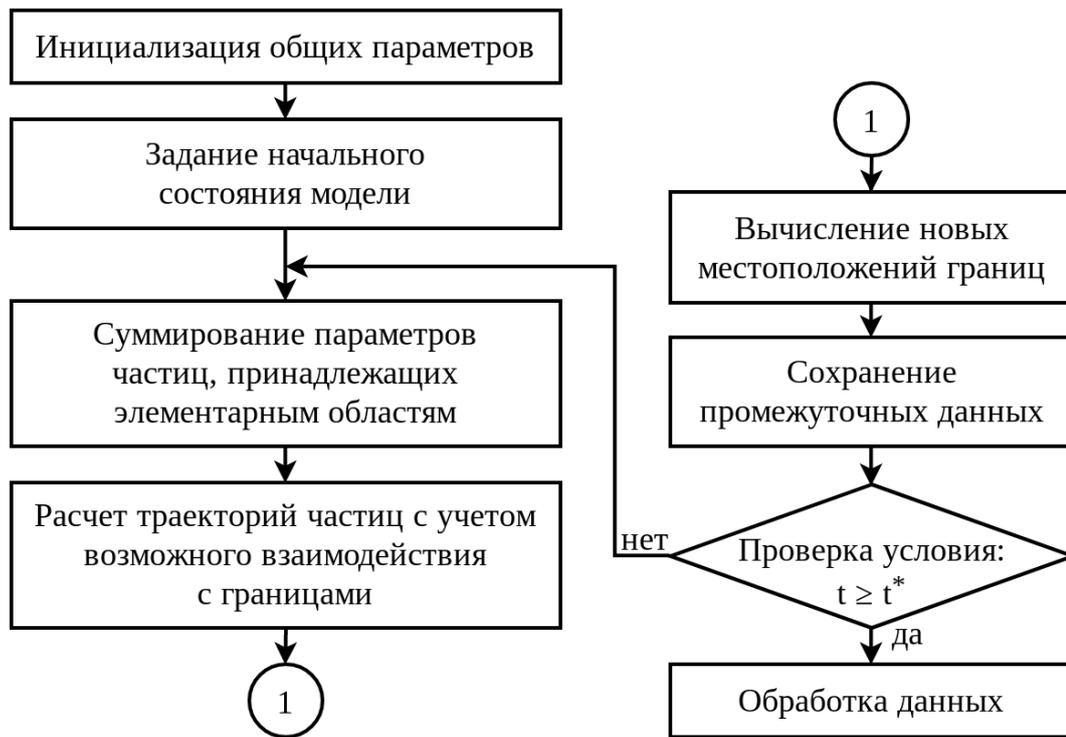


Рис. 3.1. Общая схема работы комплекса программ

границ и элементарных областей. В качестве генератора псевдослучайных чисел был выбран вихрь Мерсенна [89]. Этот генератор имеет большой период ($2^{199372} - 1$) и проверен с помощью наборов статистических тестов, определяющих меры близости полученной псевдослучайной последовательности к случайной.

После этого выполняется циклический процесс, состоящий из следующих этапов:

1. **Вычисление траекторий частиц** с учетом возможного взаимодействия с подвижными границами за временной шаг.
2. **Вычисление нового местоположения для каждой границы** в требуемый момент времени t .
3. **Накопление сумм параметров частиц** (общая масса, сумма компонентов скоростей и квадратов скоростей), принадлежащих элементарной области в момент времени t . С помощью этих сумм вычисляются статистические оценки макроскопических параметров по формулам (2.20)–(2.24).
4. **Сохранение промежуточных данных** включает сохранение фазового пространства и сумм параметров частиц через различные промежутки времени (см. рис. 3.2), которые потом используются на этапе обработки данных для визуализации течения газа и вычисления

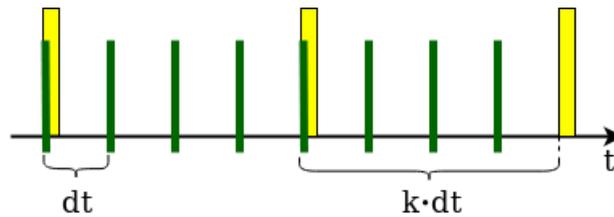


Рис. 3.2. Схема сохранения данных на жесткий диск: желтым цветом — сохранение фазового пространства; зеленым цветом — сохранение статистических данных

статистических оценок макроскопических параметров соответственно. Также данные о фазовом пространстве могут использоваться для продолжения вычислительного эксперимента, если необходимо, или, например, в случае аварийного завершения работы.

Повторение этих этапов продолжается до тех пор, пока не будет выполнено условие ($t \geq t^*$), сравнивающее время жизни частиц t , участвующих в эксперименте, с предельным временем t^* , или пока не будет прервана работа программы.

Расчет ранее описанных этапов может выполняться несколькими программами. В этом случае каждая программа также выполняет перечисленные этапы, но работает со своим блоком частиц, участвующих в эксперименте, независимо. Исходный массив частиц разбивается на блоки. Каждая программа работает независимо и рассчитывает траектории только для своих блоков, накапливая суммы параметров частиц и записывая результаты в файлы. Расчет статистических оценок макроскопических параметров происходит отдельной программой после успешного выполнения расчетов траекторий частиц для всех блоков.

Последний этап (**обработка данных**) включает набор программ, которые используются по мере необходимости для следующих целей:

1. **Расчет статистических оценок макроскопических параметров.** Разработана программа, которая вычисляет статистические оценки с помощью накопленных сумм параметров частиц для одного, нескольких или всех блоков сразу. Это может быть полезно тогда, когда необходимо сравнить полученные результаты при различном числе частиц.
2. **Визуализация процесса течения газа.** Реализована программа, которая с помощью графической библиотеки «Mesa 3D», предостав-

ляющая API OpenGL, отображает на экране частицы, границы, элементарные области и другую дополнительную информацию, например, время. Также программа позволяет сохранять результаты в виде набора изображений в формате PNG, из которых при необходимости можно создать анимацию. Визуализация распределений статистических оценок макроскопических параметров выполняется с помощью сторонней программы TecPlot, для которой подготовка данных выполняется отдельной программой.

3. **Построение графиков** зависимости статистических оценок макроскопических параметров от времени. В случае, когда существует точное решение, дополнительно рассчитываются максимальные и относительные погрешности по формулам (2.32).

Исходный код комплекса программ написан на языке Си с применением математической библиотеки Intel Math Kernel Library (Intel MKL) для генерации псевдослучайной последовательности чисел, используя вихрь Мерсенна. Исключениями являются программы (скрипты), предназначенные для построения графиков и реализованные на языке Python. Мотивацией выбора этого языка послужило удобство работы с разными типами данных, огромное количество готовых модулей. С помощью модулей решаются такие задачи, как построение графиков и символьные вычисления, которые используются для получения точного решения при вычислении интегралов.

Описание организации файлов комплекса программ в файловой системе подробно представлено в приложении А.

Реализация указанных схем и структур в виде комплекса программ позволяет преодолеть ряд проблем. Во-первых, можно запускать множество программ для расчета траекторий движения частиц параллельно. В случае сбоя работы нескольких программ, требуется заново проводить расчет не всей задачи, а лишь вышедшей из строя части программ, участвующих в расчетах. При длительных вычислениях предусмотрены записи промежуточных состояний моделируемого процесса. Это позволяет продолжить расчет траекторий частиц с последней удачной записи. Во-вторых, если необходимо повысить точность статистических оценок, то можно увеличить число частиц, используя результаты из текущего эксперимента. Для этого необходимо выполнить основные этапы, запустив на расчеты программы, для новых дополнительных блоков с частицами и пересчитать статистические оценки. В-третьих, появляется воз-

возможность распределять нагрузку между процессорами, параметры которых могут существенно отличаться: частота работы, время выполнения системных команд или число ядер; поскольку одним из важных критериев эффективного использования сложной вычислительной системы при моделировании течения газа является то, насколько равномерно будет распределена нагрузка между процессорами и их ядрами.

3.1.2 Оптимизация программного кода

Для расчета траекторий движения статистически большого числа частиц, которые не взаимодействуют друг с другом, но могут сталкиваться с границами, необходимо провести огромный объем однотипных вычислений. Расчет каждой траектории частицы может выполняться независимо, но требуется синхронизация через установленный шаг Δt для вычисления статистических оценок макроскопических величин в определенные моменты времени t . Оптимальным решением будет накапливать отдельно суммы параметров частиц для каждого блока частиц, расчет траекторий которых производится отдельной программой. Вычисление статистических оценок макроскопических величин также выполняется отдельной программой. Это позволяет уменьшить число синхронизаций и повысить производительность программ.

С другой стороны, возникает задача рациональной декомпозиции данных при численном моделировании течения газа на высокопроизводительных вычислительных системах [103; 115]. Следует учитывать, что производительность программы будет существенно зависеть от объема и скорости перемещаемых данных, а также структуры и организации памяти в вычислительной системе [99].

В разработанном комплексе программ применяется многоуровневая декомпозиция данных. Во-первых, N частиц, участвующих в вычислительном эксперименте, разбиваются на блоки размером $n_{gr}N_{gr}$. В свою очередь, каждый блок делится на n_{gr} групп, где в каждой группе по N_{gr} частиц. Наконец, так как каждая частица состоит из 6 параметров (3 координаты и 3 компоненты скорости), то данные группируются по параметрам частиц в массивы размерами N_{gr} . Такая многоуровневая структура данных позволяет минимизировать число задержек, вызванных перемещением данных, и уменьшить число кэш-промахов.

К ключевым аспектам эффективного использования современных центральных процессоров следует отнести векторизацию вычислений [116]. Исполь-

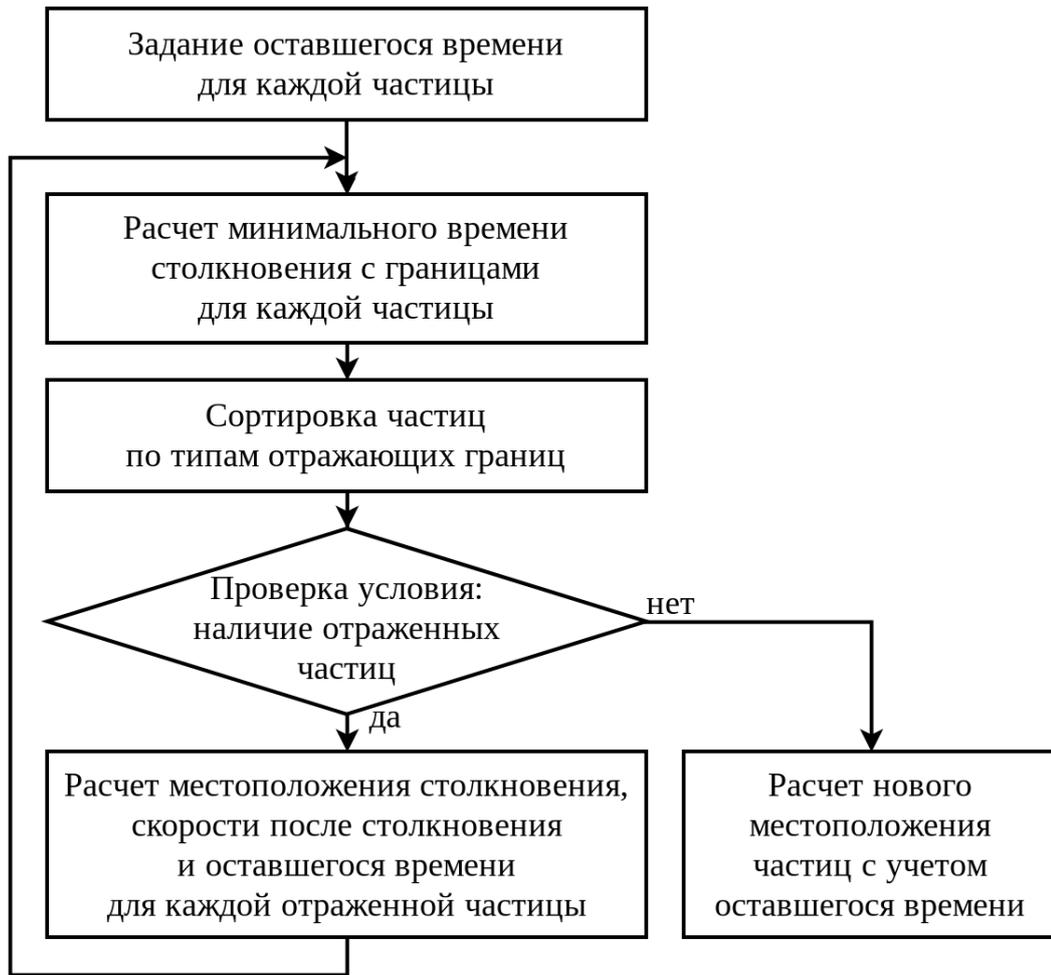


Рис. 3.3. Схема расчета траектории движения частиц с учетом их возможного взаимодействия с подвижными границами

зование векторизации при расчетах траекторий движения частиц позволяет выполнять несколько операций за такт при условии объединения данных в массивы частиц по параметру. При этом возникает следующая проблема: каждая частица, движущаяся в пространстве с определенной скоростью, за интервал времени Δt может столкнуться несколько раз с различными границами.

На рис. 3.3 представлена схема расчета траекторий движения частиц с учетом их возможного взаимодействия с подвижными границами. Такая схема позволяет ускорить расчеты за счет векторизации вычислений. Расчет траекторий N_{gr} частиц начинается с установки оставшегося времени Δt_i для каждой i -й частицы равный Δt . Далее выполняется поиск точек пересечения траектории движения каждой частицы с границами и вычисление времени столкновения по формуле (2.19). При этом выбирается минимальное время t_i , которое дополнительно должно принадлежать интервалу времени $(0, \Delta t_i)$, и запоминается номер отражающей границы для каждой частицы. После это

осуществляется сортировка частиц в зависимости от того, с каким типом границ они столкнулись. Границы условно делятся на плоскости, сферы и т.д. для того, чтобы не тратить вычислительные ресурсы для расчета нулевых коэффициентов (см. пункт 2.2.1). Хотя саму сортировку векторизовать невозможно, но за счет перестановки данных можно уменьшить число расчетов, переставляя в конец те частицы в группе, которые на оставшемся временном шаге Δt_i не взаимодействуют с границами. Если существует частицы, которые пересеклись с границами согласно заданным критериям, то происходит корректировка их параметров. Частицы перемещаются в точки столкновений и для них вычисляются новые скорости, значения которых дополнительно зависят от номеров границ, с которыми они взаимодействуют. После этого происходит корректировка оставшегося времени Δt_i . Благодаря выполненной сортировке последовательность этих операций также векторизуется. Для оставшихся частиц повторяются операции, начиная с поиска точки пересечения. Если ни одна частица не столкнулась с границей, то выполняется их перемещение в новые местоположения.

Известно, что операции деления и извлечения корня требуют для их выполнения в десятки раз больше тактов ядра процессора, чем операции сложения (вычитания) и умножения, которые выполняются за несколько тактов [117]. В циклах «медленные» операции, стоящие перед дополнительными условиями, если возможно, переносятся внутрь условия. Для этого приходится модифицировать дополнительные условия эквивалентными преобразованиями с помощью дополнительных операций сложения и умножения. Это приводит к увеличению скорости расчетов.

Для быстрого извлечения обратного квадратного корня, который используется при нормализации векторов, применяется решение, предложенное в [118]. Суть этого решения заключается в замене «медленных» операций набором «быстрых». Для этого требуется выполнить следующую последовательность действий: после преобразования числа с плавающей точкой в целочисленное выполняются операции вычитания и битового сдвига, затем после обратного преобразования производится аппроксимация числа с плавающей точкой методом Ньютона.

Пусть по формулам (2.15)–(2.19) найдена точка пересечения траекторий движения частицы и границы [31; 109]. В результате расчетов может случиться так, что эта точка окажется по другую сторону полупространства, ограни-

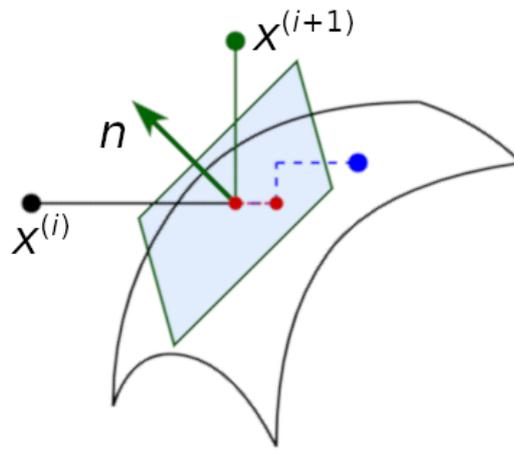


Рис. 3.4. Иллюстрация, поясняющая корректировку траектории движения частицы при взаимодействии с границей с помощью поправочного коэффициента $\delta_m t$: черная линия — траектория движения частицы до столкновения; синий пунктир — траектория движения частицы без корректировки; зеленая линия — траектория движения частицы с учетом корректировки с помощью поправочного коэффициента

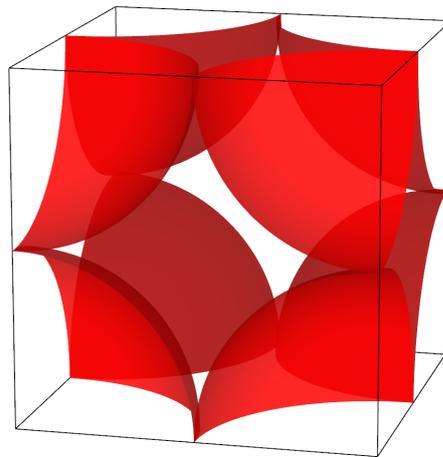


Рис. 3.5. Ячейка кубической сетки пористой среды

ченного поверхностью, из-за вычислительной погрешности. Это приведет к повторному отражению и неверной траектории движения частицы (см. рис. 3.4). Решение заключается в добавлении поправочного коэффициента $\delta_m t$, который будет сдвигать частицу по ее траектории назад на эту величину (смещение выделено красным цветом).

Пусть пористая среда состоит из неподвижных сфер (границ), расположенных в узлах кубической сетки. На рис. 3.5 представлена ячейка, принадлежащая такой сетке. Тогда, если за временной шаг частица пролетает

расстояние меньше половины длины ячейки, можно утверждать, что частица может взаимодействовать только с одной из 8 сфер, центры которых расположены в узлах ячейки. Это приводит к уменьшению перебора границ, от которых отражается частица, и существенному увеличению скорости расчетов траекторий движения частиц.

3.2 Тестовая задача о моделировании движения встречных пучков газа

3.2.1 Описание математической модели и постановка вычислительной задачи

Рассматривается модель движущихся навстречу друг другу двух групп частиц:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} f_1(x, t) + v_1 \frac{\partial}{\partial x} f_1(x, t) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} f_2(x, t) + v_2 \frac{\partial}{\partial x} f_2(x, t) = 0 \end{cases} . \quad (3.1)$$

Функция распределения двух групп молекул определяется следующей системой [106]:

$$\begin{cases} f_1(x, t) = \rho_0(1 - \theta(x - v_1 t)) \\ f_2(x, t) = \rho_0 \theta(x - v_2 t) \end{cases} , \quad (3.2)$$

где $\rho_0 = \text{const} > 0$ — начальная плотность; $\theta(x)$ — функция Хевисайда; $v_1 = v_0 \geq 0$ — скорость 1-й группы частиц; $v_2 = -v_0 \leq 0$ — скорость 2-й группы частицы.

Для такой задачи существует аналитическое решение, которое имеет следующий вид:

$$v(x, t) = \begin{cases} 0, & |x| \leq v_0 t \\ -v_0, & x > v_0 t \\ v_0, & x < -v_0 t \end{cases} , \quad (3.3)$$

$$\rho(x, t) = \begin{cases} 2\rho_0, & |x| \leq v_0 t \\ \rho_0, & |x| > v_0 t \end{cases} , \quad (3.4)$$

$$T(x, t) = \begin{cases} v_0^2/(3R), & |x| \leq v_0 t \\ 0, & |x| > v_0 t \end{cases} . \quad (3.5)$$

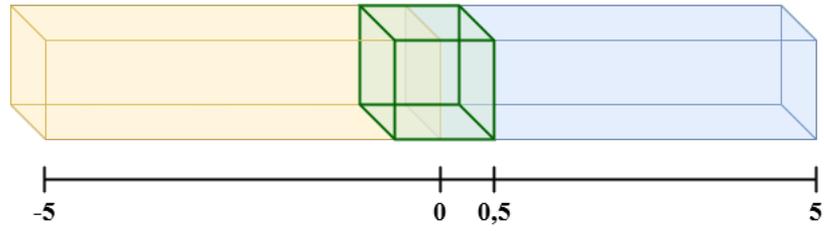


Рис. 3.6. Вычислительная схема

На рис. 3.6 представлена вычислительная схема. Начальное местоположение частиц определяется случайным образом с равномерным законом распределения на интервале $(-5; 5)$. Модуль скорости частиц равен 1, направление движения определяется по формуле (3.2). Элементарная область устанавливается в центре, ее объем равен 1. Вычисление нового местоположения i -й частицы определяется формулой (2.14). Для данной задачи установка границ и граничных условий не требуется. Размер элементарного объема Δx выбран из условия:

$$\Delta x \geq |v_0| \Delta t, \quad (3.6)$$

где $|v_0| \Delta t$ — расстояние, которое преодолевает частица за один временной шаг.

3.2.2 Моделирование и анализ результатов

На рис. 3.7 и 3.8 представлены сравнения результатов численного моделирования с аналитическим решением. Из графиков видно, что статистические оценки макроскопических параметров газа с увеличением числа частиц N приближаются к их аналитическим значениям (скорость $v_0 = 1$, плотность $\rho_0 = 0.1$ и температура $T \approx 0.0400908$).

В табл. 3.1 и 3.2 представлены погрешности статистических оценок макроскопических параметров, полученных в результате моделирования при различном числе частиц N и испытаний n . Строки в таблицах сгруппированы так, чтобы произведение величин $N \cdot n$ было постоянным, и отсортированы в порядке убывания погрешностей. Анализ данных в таблицах показывает, что с увеличением числа частиц порядок погрешностей статистических оценок макроскопических параметров уменьшается согласно выражению (2.31). Для того чтобы уменьшить погрешность статистических оценок макроскопических величин на порядок, необходимо увеличить число частиц в эксперименте или независимых испытаний на два порядка.

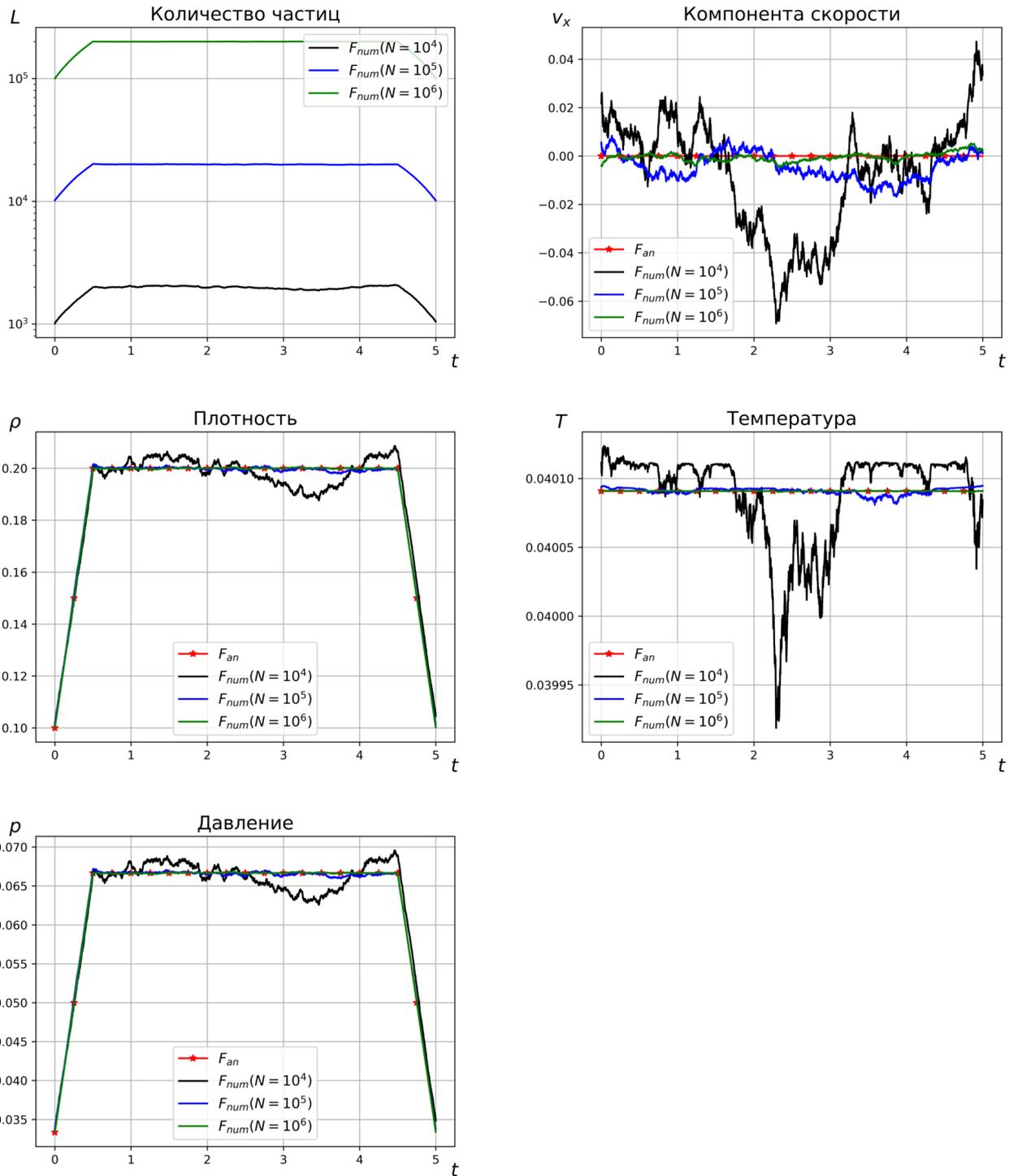


Рис. 3.7. Графики изменения аналитического решения F_{an} и статистических оценок макроскопических параметров F_{num} при различном числе частиц в эксперименте N в зависимости от времени t

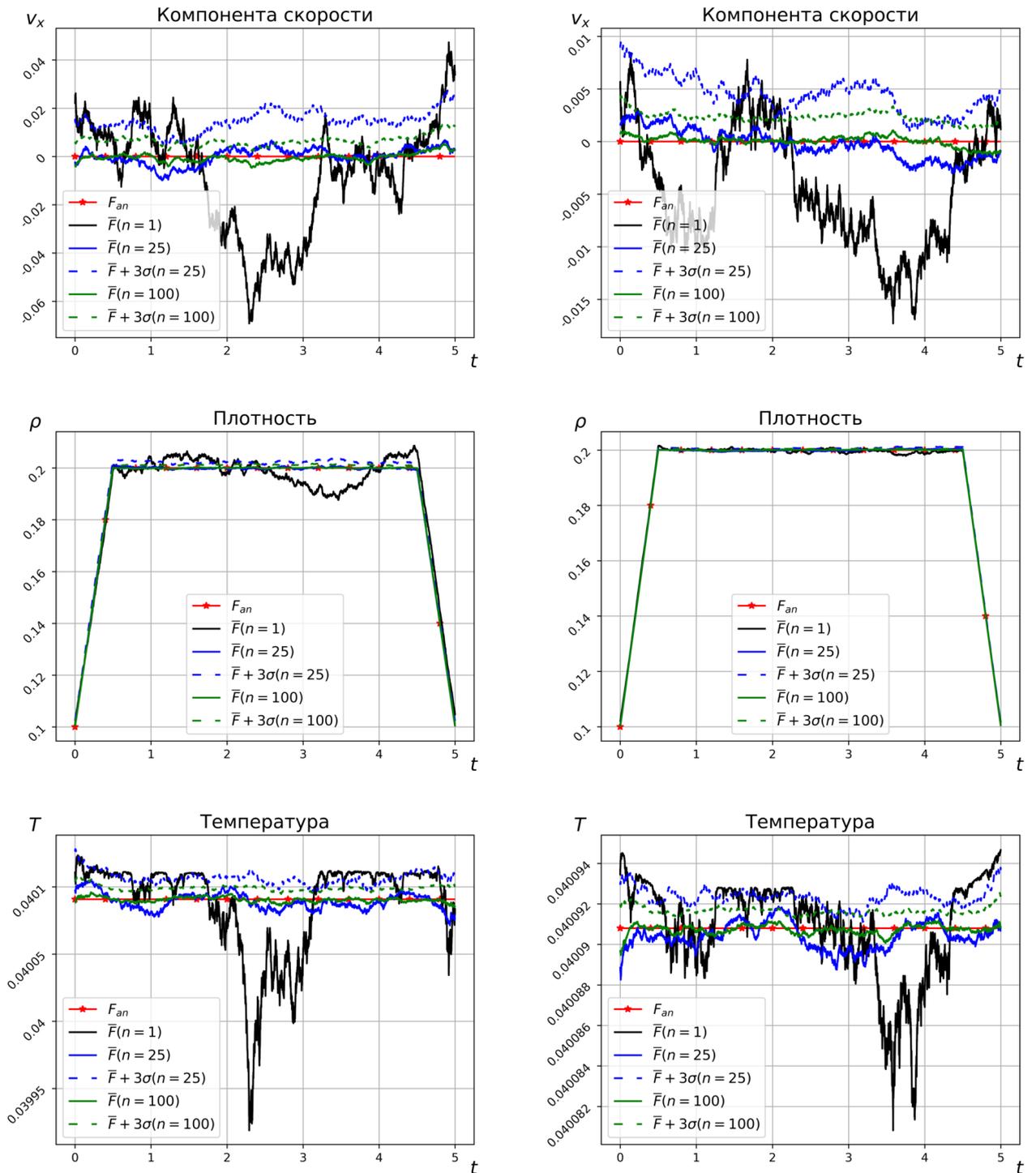


Рис. 3.8. Графики изменения аналитического решения F_{an} , статистических оценок макроскопических параметров \bar{F} и верхней границы доверительного интервала $\bar{F} + 3\sigma$ при различном числе испытаний n в зависимости от времени t : слева — $N = 10^4$; справа — $N = 10^5$

Таблица 3.1

Оценка максимальной относительной погрешности δ_F статистических оценок макроскопических величин при различном числе частиц N и испытаний n

| N | n | δ_ρ | δ_T | δ_p |
|--------|--------|----------------------|----------------------|----------------------|
| 10^4 | 10^2 | $2.28 \cdot 10^{-1}$ | $1.47 \cdot 10^{-2}$ | $2.24 \cdot 10^{-1}$ |
| 10^6 | 1 | $2.29 \cdot 10^{-1}$ | $1.96 \cdot 10^{-3}$ | $2.28 \cdot 10^{-1}$ |
| 10^5 | 10^2 | $1.77 \cdot 10^{-1}$ | $3.33 \cdot 10^{-3}$ | $1.77 \cdot 10^{-1}$ |
| 10^7 | 1 | $1.77 \cdot 10^{-1}$ | $9.20 \cdot 10^{-5}$ | $1.77 \cdot 10^{-1}$ |
| 10^4 | 10^4 | $5.06 \cdot 10^{-2}$ | $2.58 \cdot 10^{-3}$ | $4.88 \cdot 10^{-2}$ |
| 10^6 | 10^2 | $5.06 \cdot 10^{-2}$ | $1.59 \cdot 10^{-4}$ | $5.05 \cdot 10^{-2}$ |
| 10^8 | 1 | $5.06 \cdot 10^{-2}$ | $1.74 \cdot 10^{-5}$ | $5.06 \cdot 10^{-2}$ |
| 10^5 | 10^4 | $1.60 \cdot 10^{-2}$ | $1.88 \cdot 10^{-4}$ | $1.60 \cdot 10^{-2}$ |
| 10^7 | 10^2 | $1.60 \cdot 10^{-2}$ | $3.19 \cdot 10^{-5}$ | $1.60 \cdot 10^{-2}$ |
| 10^9 | 1 | $1.60 \cdot 10^{-2}$ | $2.93 \cdot 10^{-6}$ | $1.60 \cdot 10^{-2}$ |

Таблица 3.2

Оценка максимальной абсолютной погрешности Δ_F статистических оценок макроскопических величин при различном числе частиц N и испытаний n

| N | n | Δ_v | Δ_ρ | Δ_T | Δ_p |
|--------|--------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| 10^4 | 10^2 | $5.21 \cdot 10^{-3}$ | $4.57 \cdot 10^{-4}$ | $5.88 \cdot 10^{-6}$ | $1.49 \cdot 10^{-4}$ |
| 10^6 | 1 | $5.22 \cdot 10^{-3}$ | $4.57 \cdot 10^{-4}$ | $7.87 \cdot 10^{-7}$ | $1.52 \cdot 10^{-4}$ |
| 10^5 | 10^2 | $1.30 \cdot 10^{-3}$ | $3.53 \cdot 10^{-4}$ | $1.33 \cdot 10^{-6}$ | $1.18 \cdot 10^{-4}$ |
| 10^7 | 1 | $1.31 \cdot 10^{-3}$ | $3.53 \cdot 10^{-4}$ | $3.69 \cdot 10^{-8}$ | $1.18 \cdot 10^{-4}$ |
| 10^4 | 10^4 | $4.75 \cdot 10^{-4}$ | $1.01 \cdot 10^{-4}$ | $1.03 \cdot 10^{-6}$ | $3.25 \cdot 10^{-5}$ |
| 10^6 | 10^2 | $4.75 \cdot 10^{-4}$ | $1.01 \cdot 10^{-4}$ | $6.38 \cdot 10^{-8}$ | $3.37 \cdot 10^{-5}$ |
| 10^8 | 1 | $4.74 \cdot 10^{-4}$ | $1.01 \cdot 10^{-4}$ | $6.99 \cdot 10^{-9}$ | $3.37 \cdot 10^{-5}$ |
| 10^5 | 10^4 | $1.85 \cdot 10^{-4}$ | $3.20 \cdot 10^{-5}$ | $7.52 \cdot 10^{-8}$ | $1.06 \cdot 10^{-5}$ |
| 10^7 | 10^2 | $1.85 \cdot 10^{-4}$ | $3.20 \cdot 10^{-5}$ | $1.28 \cdot 10^{-8}$ | $1.07 \cdot 10^{-5}$ |
| 10^9 | 1 | $1.85 \cdot 10^{-4}$ | $3.20 \cdot 10^{-5}$ | $1.17 \cdot 10^{-9}$ | $1.07 \cdot 10^{-5}$ |

Оценка максимальной величины σ_F при различном числе частиц N и испытаний n

| N | n | σ_v | σ_ρ | σ_T | σ_p |
|--------|--------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| 10^4 | 10^2 | $3.39 \cdot 10^{-3}$ | $4.56 \cdot 10^{-4}$ | $5.47 \cdot 10^{-6}$ | $1.52 \cdot 10^{-4}$ |
| 10^5 | 10^2 | $1.15 \cdot 10^{-3}$ | $1.45 \cdot 10^{-4}$ | $7.94 \cdot 10^{-7}$ | $4.83 \cdot 10^{-5}$ |
| 10^4 | 10^4 | $3.20 \cdot 10^{-4}$ | $4.10 \cdot 10^{-5}$ | $5.85 \cdot 10^{-7}$ | $1.36 \cdot 10^{-5}$ |
| 10^6 | 10^2 | $3.31 \cdot 10^{-4}$ | $4.74 \cdot 10^{-5}$ | $5.95 \cdot 10^{-8}$ | $1.58 \cdot 10^{-5}$ |
| 10^5 | 10^4 | $1.01 \cdot 10^{-4}$ | $1.28 \cdot 10^{-5}$ | $5.71 \cdot 10^{-8}$ | $4.27 \cdot 10^{-6}$ |
| 10^7 | 10^2 | $1.02 \cdot 10^{-4}$ | $1.49 \cdot 10^{-5}$ | $5.53 \cdot 10^{-9}$ | $4.98 \cdot 10^{-6}$ |

На рис. 3.8 помимо точного решения F_{an} также отображены математические ожидания величин \bar{F} и верхние границы доверительных интервалов $\bar{F} + 3\sigma$ при различном числе частиц N и испытаний n . Из графиков видно, что с увеличением числа испытаний отклонение верхней границы доверительного интервала (пунктирная линия) от точного решения F уменьшается. При этом точное решение не превышает верхних границ доверительных интервалов. В тоже время, средние величины \bar{F} с ростом числа испытаний n также стремят к точному решению F_{an} . Оценка значения максимальной величины σ представлена в табл. 3.3. При сравнении полученных значений σ со значениями Δ_F , взятых из табл. 3.2, видно, что порядок погрешностей при фиксированном параметре $n \cdot N$ одинаковый.

Ввиду того, что в разработанном комплексе программ значительное время занимает расчет основных этапов, связанных с вычислением траекторий движения частиц и накоплением сумм параметров частиц, по сравнению с обработкой данных, то оценка производительности R_{task} выполнялась именно для этого блока операций, включая установление начального состояния и сохранение промежуточных результатов. Сбор и анализ данных о производительности последовательных и параллельных программ выполнялся с помощью приложения Intel VTune Amplifier XE, которое позволяет считывать значения аппаратных счетчиков вычислительного устройства. Расчеты производились на процессоре Intel Xeon E5-2690 V2 с пиковой производительностью R_{peak} равной 240 GFlops DP для 10 ядер.

Таблица 3.4

Структура кэш-памяти процессора Intel Xeon E5-2690 V2

| level | type | coherency line size | number of sets | ways of associativity | size, KB |
|-------|-------------|------------------------|-------------------|--------------------------|----------|
| 1 | data | 64 | 64 | 8 | 32 |
| 1 | instruction | 64 | 64 | 8 | 32 |
| 2 | unified | 64 | 512 | 8 | 256 |
| 3 | unified | 64 | 20480 | 20 | 25600 |

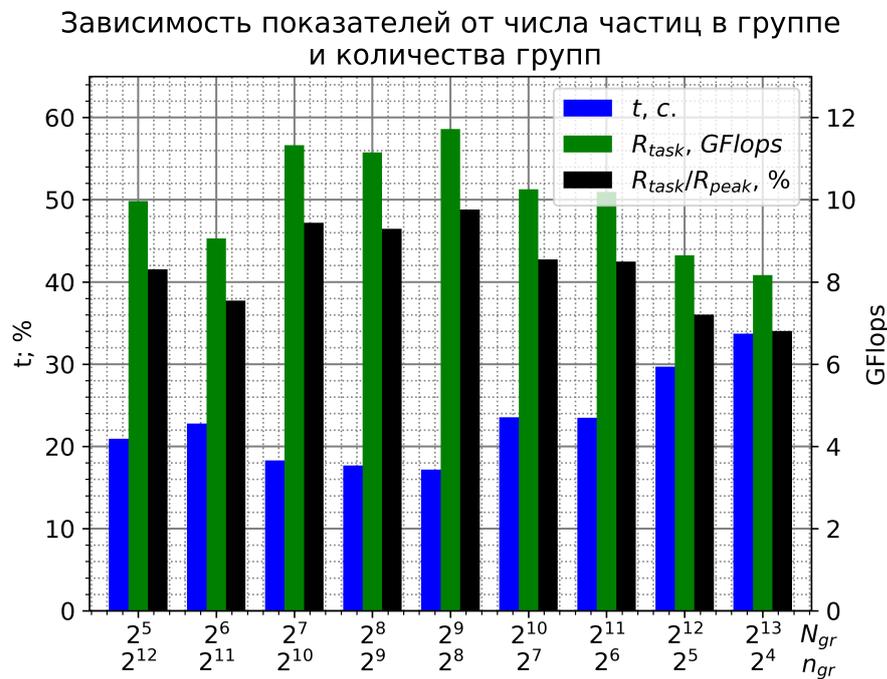


Рис. 3.9. Диаграмма зависимости времени работы t и производительности программы R_{task} от числа частиц в группе N_{gr} и количества групп n_{gr} в одном эксперименте на процессоре Intel XEON E5-2690 V2

Оценка производительности различных версий программы
на процессоре Intel Xeon E5-2690 V2

| Версия программы | Число ядер | t , с. | R_{task} , GFlops | R_{task}/R_{peak} , % |
|---|------------|----------|---------------------|-------------------------|
| Неоптимизированная | 1 | 173.349 | 0.631 | 2.63 |
| Векторизованная | 1 | 17.173 | 11.717 | 48.82 |
| Векторизованная с исп. технологии OpenMP | 10 | 31.945 | 69.453 | 28.93 |

Анализ кэш-памяти процессора, структура которого представлена в табл. 3.4, указывает на то, что используемые в расчетах данные предпочтительнее группировать в блоки размером по 4 КВ ($64 \cdot 64$ В) для уменьшения числа кэш-промахов. Это подтверждается результатами, представленными на рис. 3.9. Были проведены серии вычислительных тестов при шаге по времени $\Delta t = 0.001$, числе итераций 5000, различном числе частиц в группе N_{gr} и количестве групп n_{gr} , при условии, что общая величина частиц $N_{gr} \cdot n_{gr}$ для всех испытаний постоянна и равна 2^{17} . На рис. 3.9 представлена диаграмма, на которой синим цветом обозначено затраченное время на расчеты (левая шкала), зеленым цветом выделена производительность программы (правая шкала), черным цветом — процент от пиковой производительности в пересчете на одно ядро (левая шкала).

В табл. 3.5 представлены результаты работы разных версий программы при следующих параметрах: шаг по времени $\Delta t = 0.001$, число итераций 5000, число частиц $N = N_{gr} \cdot n_{gr} = 2^9 \cdot 2^8 = 2^{17}$ на ядро. Последний столбец показывает процент производительности программы от пиковой в пересчете на ядро, поскольку структура комплекса программ устроена таким образом, что можно запускать программы, связанные с расчетом траекторий движения частиц, независимо друг от друга, а статистические оценки макроскопических параметров вычислять после. Самой быстрой и эффективной оказалась векторизованная версия без использования технологии OpenMP. Результаты показали почти 49% от пиковой производительности. Ускорение оптимизированной версии по сравнению с неоптимизированной составило более чем в 18 раз. Использование

технологии OpenMP привело к замедлению более чем в 1.5 раза, это связано с ожиданием и синхронизацией работы потоков.

3.3 Выводы по главе

Создан и отлажен комплекс программ, позволяющий моделировать движение частиц идеального газа в трехмерной области с подвижными границами методом Монте-Карло. Подробно представлено описание схемы работы комплекса проблемно-ориентированных программ, включая различные оптимизации программного кода. Выполнена верификация комплекса программ на тестовой задаче, имеющей аналитическое решение. Показано, что с увеличением числа частиц в испытании и/или количества испытаний с последующим усреднением статистические оценки макроскопических параметров приближаются к аналитическим решениям. Для тестовой задачи о столкновении встречных пучков газа с применением декомпозиции данных и векторизации вычислений была достигнута производительность, равная 49% от пиковой.

Глава 4. Моделирование адиабатического сжатия газа Кнудсена в изменяющейся во времени области

Исследование динамических систем с изменяющейся во времени областью (например, область имеющая подвижные границы) является актуальной задачей в современных разделах естествознания. Например, исследование течения сильно разреженного газа, в котором можно пренебречь размерами частиц и их столкновениями друг с другом, в области с подвижными границами может быть связано с освоением околокосмического пространства и созданием специальных вакуумных установок [46; 48]. Выявление специфических особенностей при исследовании течения газа Кнудсена в замкнутой области может осложняться тем, что частицы газа могут многократно отражаться от движущейся поверхности. Исследуемые течения газа в таком классе задач являются нестационарными.

Рассматриваемая в этой главе модель адиабатического сжатия газа может относиться к явлению параметрической неустойчивости, при котором нарастание энергии возмущения сопровождается непрерывным сжатием газа с течением времени в пространстве. Такая неустойчивость может рассматриваться как распространение бегущих волн в изменяющейся во времени области [119–121]. Другое применение подобной модели связано с исследованием космических лучей высокой энергии, взаимодействующих с движущимися магнитными облаками в космическом пространстве [45]. В такой модели, называемой моделью ускорения Ферми, подробно изучаются механизмы неограниченного роста скорости частиц, взаимодействующих с движущейся по периодическому закону границей.

И наконец, построение тестовых задач, имеющих аналитические решения, позволит провести верификацию разработанного комплекса программ. Аналитические решения имеют достаточно важное значение, так как позволяют выявлять физические закономерности достаточно общего характера, которые трудно выявить при численном исследовании.

По материалам главы опубликованы работы [2; 15].

Подробное описание математической модели приведено в главе 2.

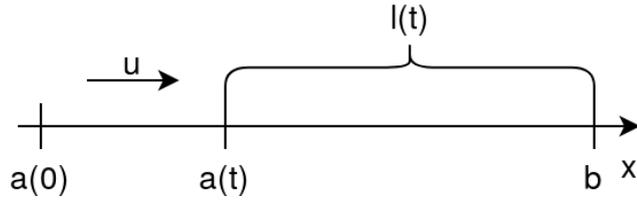


Рис. 4.1. Схема изменения местоположения границ с течением времени t

4.1 Модель адиабатического сжатия в одномерном пространстве

Рассматривается тестовая задача об адиабатическом сжатии идеального бесстолкновительного газа в одномерном пространстве.

4.1.1 Постановка вычислительной задачи

Пусть в начальный момент времени $t = 0$ на интервале (a_0, b_0) равномерно распределены частицы. Их плотность внутри интервала равна $\rho_0 = 1$. Скорость каждой частицы $|v_0| = 1$, а направление (т.е. знак скорости) определяется случайным образом с равномерным распределением.

Пусть на концах отрезка $[a_0, b_0]$ расположены границы (см. рис. 4.1). Левая граница неподвижна и ее положение определяется уравнением $b = b_0$. Правая граница движется со скоростью $u \in (0, v_0]$, уменьшая размер одномерной области $l(t) = b - a(t)$. Ее местоположение определяется уравнением $a(t) = a_0 + ut$.

Частицы не взаимодействуют между собой, но взаимодействуют с границами по закону зеркального отражения.

4.1.2 Построение аналитического решения

Пусть частицы разбиваются на группы в зависимости от скорости. Тогда в начальный момент времени $t = 0$ существуют 2 группы частиц. Первая группа частиц имеет скорость $v_1 = v_0$ и функцию распределения молекул f_1 , а вторая — скорость $v_2 = -v_0$ и функцию распределения f_2 [112]:

$$f_1(x, 0) = f_2(x, 0) = \frac{0.5}{b - a(0)} I_{(a(0), b)}(x), \quad (4.1)$$

где $I_M(x) = \begin{cases} 1, & x \in M \\ 0, & x \notin M \end{cases}$ — ступенчатая функция.

При взаимодействии частиц с границами изменяется их скорость, т.е. одновременно с исчезновением частицы из $(i-1)$ -й группы будет появляться частица

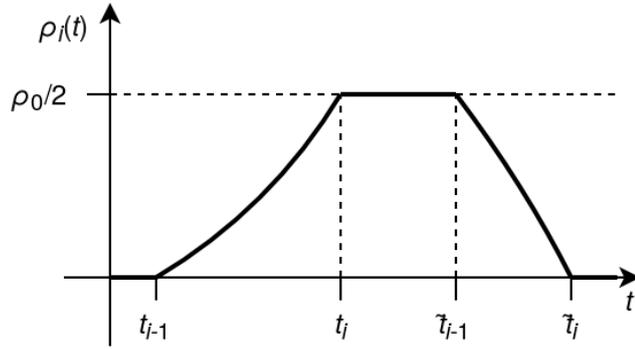


Рис. 4.2. Схема изменения средней плотности ρ_i для i -й группы частиц в зависимости от времени t

из i -й группы. Формула вычисления v_i скорости для i -й группы частиц с учетом описанных условий запишется в виде:

$$v_i = \begin{cases} -v_{i-1}, & i - \text{четный} \\ -v_{i-1} + 2u, & i - \text{нечетный} \end{cases}. \quad (4.2)$$

Поскольку частицы одной группы движутся в одном направлении, то для каждой группы можно определить моменты времени возникновения первой и последней частиц, обозначены t_i и \tilde{t}_i соответственно, по следующей формуле:

$$t_i = t_{i-1} + l(t_{i-1})/\tilde{v}_i, \quad (4.3)$$

$$\text{где } \tilde{v}_i = \begin{cases} -v_i + u, & i - \text{четный} \\ v_i, & i - \text{нечетный} \end{cases}.$$

Функция распределения для i -й группы молекул с течением времени определяется

$$f_i(x, t) = \frac{0.5}{b - a(t)} Q_i(x, t), \quad (4.4)$$

где $Q_i(x, t) = [I_{(t_i, \tilde{t}_{i-1})}(t) \cdot I_{(a(t), b)}(x) + I_{(t_{i-1}, t_i)}(t) \cdot [I_{(a(t), a(t_{i-1})+v_i(t-t_{i-1}))}(x) \cdot ((i \bmod 2) + I_{(b+v_i(t-t_{i-1}), b)}(x) \cdot ((i+1) \bmod 2))] + I_{(\tilde{t}_{i-1}, \tilde{t}_i)}(t) \cdot [I_{(a(\tilde{t}_{i-1})+v_i(t-\tilde{t}_{i-1}), b)}(x) \cdot ((i \bmod 2) + I_{(a(t), b+v_i(t-\tilde{t}_{i-1}))}(x) \cdot ((i+1) \bmod 2)]]]$.

Изменение средней плотности $\rho_i(t)$ для i -й группы молекул на отрезке $[a(t), b]$ с течением времени t определяется формулой (4.5) и представлено на рис. 4.2. На полуинтервале $[t_{i-1}, t_i)$ количество частиц увеличивается, а на $[\tilde{t}_{i-1}, \tilde{t}_i)$ их число уменьшается. На временном полуинтервале $[t_i, \tilde{t}_{i-1})$ величина $\rho_i(t)$ постоянна и равна начальной плотности $\rho_0/2$.

$$\rho_i(t) = \frac{1}{l(t)} \int_{R_1} f_i(x, t) dx, \quad (4.5)$$

С помощью плотности распределения частиц f_i и скоростей v_i вычисляются остальные макроскопические параметры модели по формулам (2.7)–(2.11), в которых интегралы заменяются конечными суммами [106]:

$$\rho(x, t) = \sum_{i=1}^n f_i(x, t), \quad (4.6)$$

$$\bar{v}(x, t) = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^n v_i f_i(x, t), \quad (4.7)$$

$$e(x, t) = \frac{1}{2\rho(x, t)} \sum_{i=1}^n (v_i - \bar{v}(x, t))^2 f_i(x, t), \quad (4.8)$$

$$T(x, t) = \frac{2}{3R} e(x, t), \quad (4.9)$$

$$p(x, t) = \frac{2}{3} \rho(x, t) e(x, t). \quad (4.10)$$

4.1.3 Моделирование и анализ результатов

Были проведены серии вычислительных экспериментов при $\rho_0 = 1$, $[a_0, b_0] = [-0.5, 0.5]$, различном числе частиц N и скоростях границы u . На рис. 4.3 представлена визуализация процесса. Синим цветом выделены частицы, которые движутся справа налево, желтым — в противоположном направлении. Красным цветом выделены границы.

На рис. 4.4 представлены графики изменений статистических оценок макроскопических величин при $u = \{1.0, 0.1\}$. Графики плотностей содержат средние плотности i -х групп частиц в зависимости от времени, что соответствует схеме, изображенной на рис. 4.2. Из остальных графиков видно, что с увеличением числа частиц, численное решение приближается к аналитическому с ростом частиц N в эксперименте. Для качественного совпадения аналитического и численного решения достаточно $N = 10^4$ частиц. Для лучшей наглядности при построении графиков температур использовалась логарифмическая шкала, поскольку начальное и конечное значения величин различаются на порядок. Следует отметить тот факт, что точное решение содержит осцилляции, частота которых увеличивается при уменьшении скорости движущейся

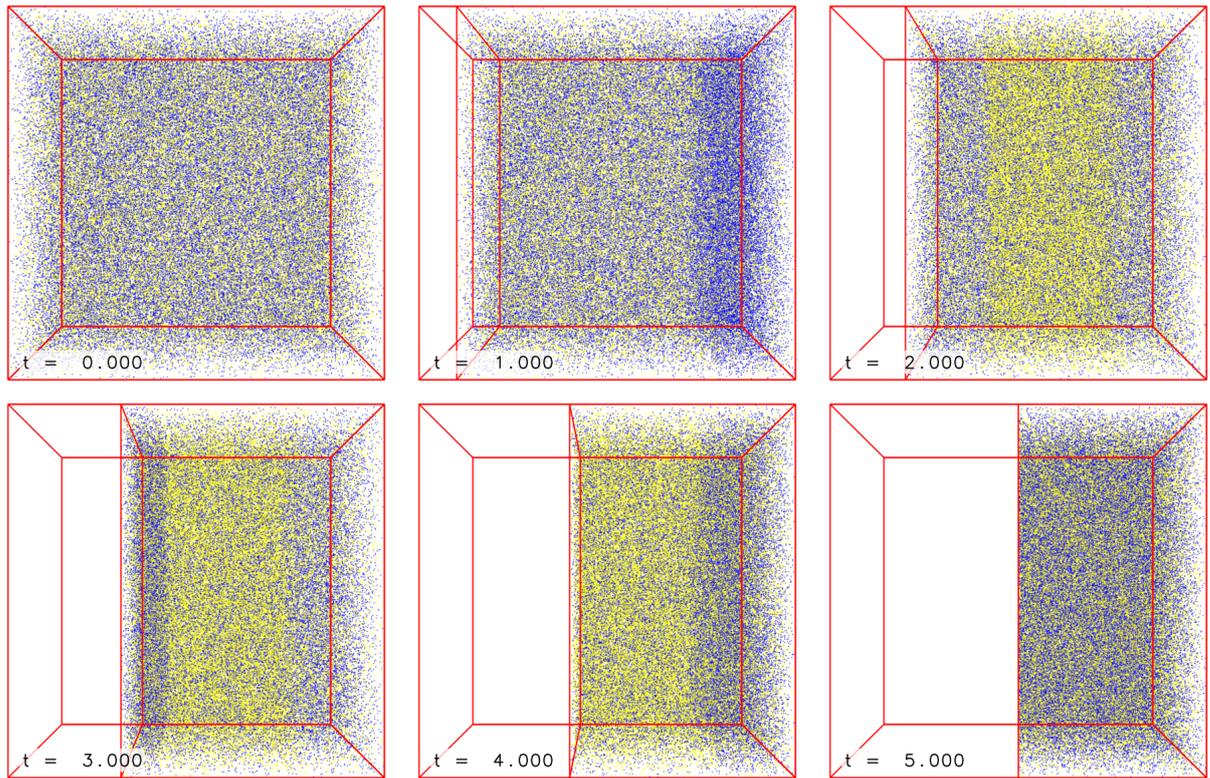


Рис. 4.3. Распределение частиц ($N = 2^{17} = 131072$) в пространстве в различные моменты времени t при $u = 0.1$

Таблица 4.1

Оценка максимальной абсолютной погрешности при различном числе частиц N и скоростях границы u

| u | N | Δ_v | Δ_T | Δ_p |
|-----|--------|----------------------|----------------------|----------------------|
| 1.0 | 10^2 | $4.10 \cdot 10^{-1}$ | $3.06 \cdot 10^{-2}$ | $4.98 \cdot 10^{-1}$ |
| | 10^4 | $6.54 \cdot 10^{-2}$ | $2.90 \cdot 10^{-3}$ | $4.78 \cdot 10^{-2}$ |
| | 10^6 | $3.80 \cdot 10^{-3}$ | $1.76 \cdot 10^{-4}$ | $2.92 \cdot 10^{-3}$ |
| 0.1 | 10^2 | $4.84 \cdot 10^{-1}$ | $1.08 \cdot 10^{-2}$ | $1.59 \cdot 10^{-1}$ |
| | 10^4 | $3.94 \cdot 10^{-2}$ | $8.40 \cdot 10^{-4}$ | $1.14 \cdot 10^{-2}$ |
| | 10^6 | $3.60 \cdot 10^{-3}$ | $6.55 \cdot 10^{-5}$ | $8.51 \cdot 10^{-4}$ |

стенки u . Это объясняется инерцией потока газа при взаимодействии с границами, одна из которых движется с постоянной скоростью u . Также можно качественно оценить совпадения графика компоненты скорости v_x (см. рис. 4.4) с общим количеством частиц (см. рис. 4.3), направление которых выделено определенным цветом, в моменты времени t .

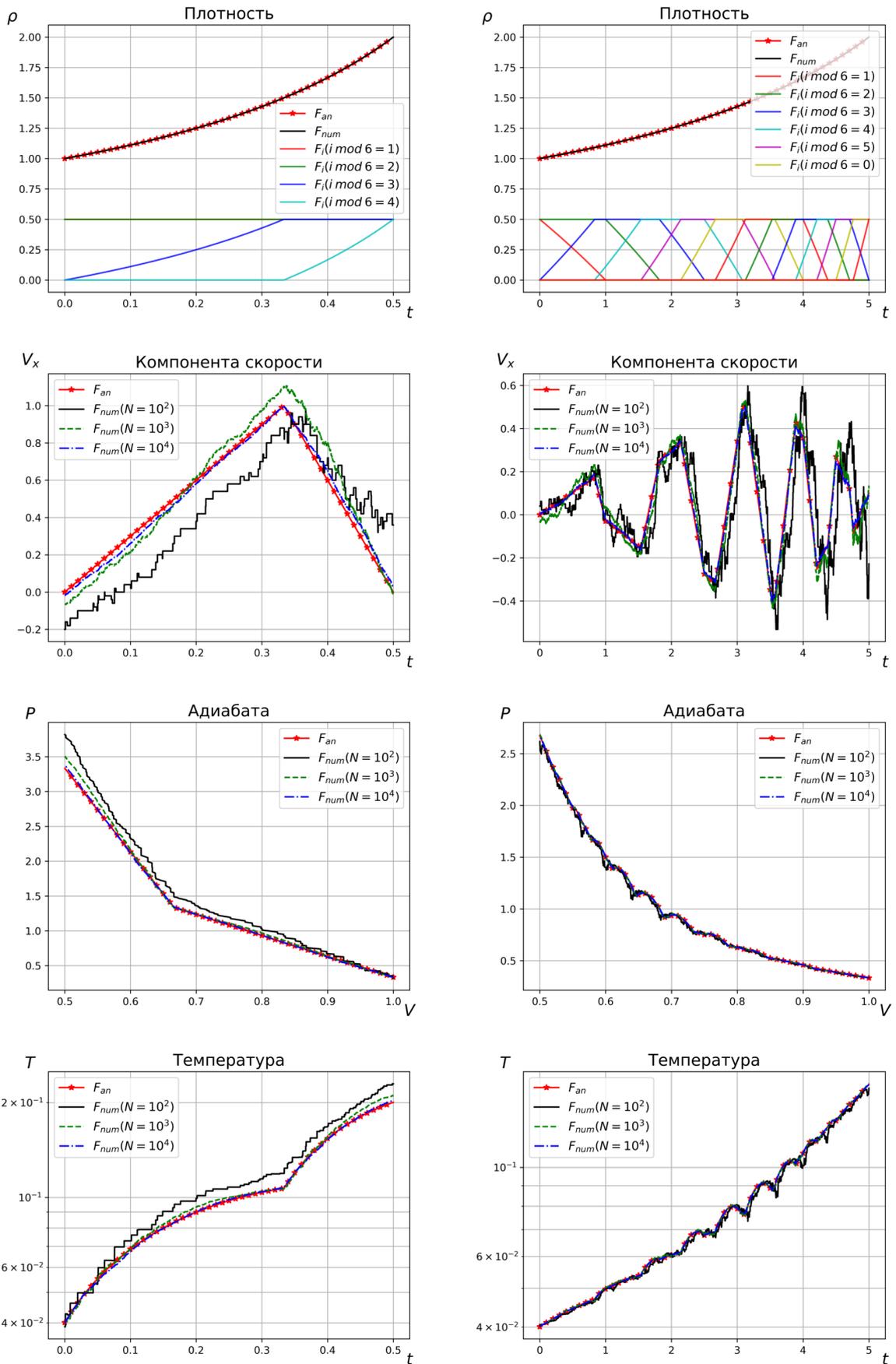


Рис. 4.4. Графики изменения аналитического решения F_{an} и статистических оценок макроскопических параметров F_{num} при различном числе частиц в эксперименте N в зависимости от времени t : слева — $u = 1.0$; справа — $u = 0.1$

Оценка максимальной относительной погрешности при различном числе частиц N и скоростях границы u

| u | N | δ_v | δ_T | δ_p |
|-----|--------|-------------------|----------------------|----------------------|
| 1.0 | 10^2 | $6.68 \cdot 10^4$ | $1.55 \cdot 10^1$ | $1.55 \cdot 10^1$ |
| | 10^4 | $6.23 \cdot 10^3$ | 3.21 | 3.21 |
| | 10^6 | $3.43 \cdot 10^2$ | $1.43 \cdot 10^{-1}$ | $1.43 \cdot 10^{-1}$ |
| 0.1 | 10^2 | $4.50 \cdot 10^5$ | $1.08 \cdot 10^1$ | $1.08 \cdot 10^1$ |
| | 10^4 | $6.11 \cdot 10^4$ | $8.98 \cdot 10^{-1}$ | $8.98 \cdot 10^{-1}$ |
| | 10^6 | $3.06 \cdot 10^3$ | $7.62 \cdot 10^{-2}$ | $7.62 \cdot 10^{-2}$ |

В табл. 4.1 и 4.2 представлены результаты максимальных абсолютных и относительных погрешностей на отрезке $t \in [0, 0.5]$ при $u = 1.0$ и на отрезке $t \in [0, 5]$ при $u = 0.1$, рассчитанные по формулам (2.32). Большая относительная погрешность гидродинамической скорости объясняется тем, что точное решение расположено близко к нулю (значения равные нулю отбрасывались). Анализ данных в таблице показывает, что порядок погрешности величин уменьшается согласно выражению (2.31). Также в таблице не представлены значения погрешностей плотности, так как на их точность влияет только вычислительная погрешность.

4.2 Модель адиабатического сжатия в трехмерном пространстве

Рассматривается задача об адиабатическом сжатии идеального бесстолкновительного газа в трехмерном пространстве с подвижной границей.

4.2.1 Постановка вычислительной задачи

Пусть в начальный момент времени в кубе равномерно распределены частицы. Их плотность внутри интервала равна $\rho_0 = 1$. Вектор скорости каждой частицы определяется случайным образом с равномерным распределением на единичной сфере. Куб ограничен плоскостями (гранями), одна из которых движется внутрь со скоростью u , уменьшая объем замкнутой области.

4.2.2 Построение аналитического решения

Пусть при $t = 0$ в замкнутой области (кубе) размером $[a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \times [a_3, b_3]$ равномерно распределены частицы. Тогда плотность распределения частиц по пространственным координатам $f(x, 0)$ в трехмерном кубе [69; 122] определяется, как

$$f_x(x, 0) = \prod_{i=1}^3 \frac{1}{(b_i - a_i)} I_{(a_i, b_i)}(x_i). \quad (4.11)$$

Координаты случайного вектора скорости v , равномерно распределенного на поверхности единичной сферы, задаются системой уравнений [123–125]:

$$\begin{cases} v_1 = x(\theta, \varphi) = \sin \theta \cos \varphi \\ v_2 = y(\theta, \varphi) = \sin \theta \sin \varphi \\ v_3 = z(\theta, \varphi) = \cos \theta \end{cases}, \quad (4.12)$$

где $\theta = \arccos(2\xi - 1)$; $\varphi = 2\pi\eta$; ξ и η — случайные величины, равномерно распределенные в интервале $(0, 1)$.

Поскольку площадь поверхности единичной сферы равна 4π , то плотность распределения по скоростям в декартовой системе координат имеет вид:

$$f_v(v, 0) = \frac{1}{4\pi} I_{M_v}(v), \quad (4.13)$$

где $M_v = \{\sum_{i=1}^3 v_i^2 = 1^2\}$ — множество радиус векторов v , концы которых расположены на поверхности единичной сферы.

Основываясь на том, что пространство координат не зависит от пространства скоростей, то функция распределения молекул в фазовом пространстве при $t = 0$ равняется

$$f(x, v, 0) = f_x(x, 0) f_v(v, 0). \quad (4.14)$$

В отличие от пространства координат, компоненты которого не зависят друг от друга, пространство скоростей имеет зависимые компоненты. Тогда плотность распределения частиц по скоростям можно представить в виде произведения условной и частной плотностей распределения [126]:

$$f_v(v, 0) = f_v(v_i | v_j, v_k, 0) \int_{R_1} f_v(v, 0) dv_i = \frac{1}{2} I_{(-1, 1)}(v_i) \frac{1}{2\pi} I_{M_v}(v), \quad (4.15)$$

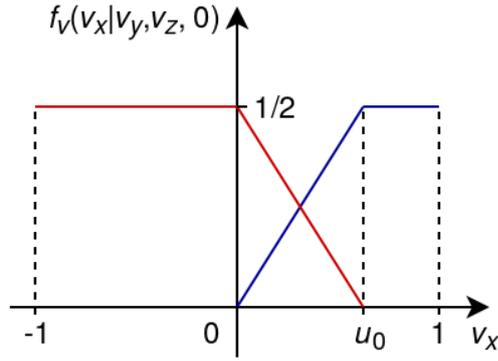


Рис. 4.5. Схема условной плотности распределения $f_v(v_x | v_y, v_z, 0)$ частиц по компоненте скорости v_x при $t = 0$

где $f_v(v_i | v_j, v_k, 0)$ — условная плотность распределения i -й компоненты скорости при выполнении j -й и k -й компонент; $i, j, k \in \{1, 2, 3\}$ и $i \neq j \neq k$.

Пусть на границах области расположены плоскости, одна из которых подвижна, а остальные — нет. Пусть левая граница движется внутрь, уменьшая первоначальную область, со скоростью $u = (u_1, 0, 0)$, где $u_1 \in (0, 1]$.

Пусть выполняется условие: нормали у противоположных стенок параллельны осям. Тогда при взаимодействии частицы со стенкой, происходит изменение только в одной компоненте скорости, совпадающей с ненулевой компонентой нормали. В случае, когда стенка неподвижна, меняется лишь знак на противоположный в этой компоненте скорости. Если рассмотреть проекции скоростей частиц v_y и v_z (или v_2, v_3 соответственно), то можно заметить, что эти величины по модулю постоянны. Из условия начального распределения частиц в фазовом пространстве, законов сохранения и зеркального отражения выдвигается предположение о том, что их условные плотности распределения с течением времени меняться не будут, т.е.

$$f_v(v_2 | v_1, v_3, t) = \frac{1}{2} I_{(a_2, b_2)}(v_2) = f_v(v_3 | v_1, v_2, t) = \frac{1}{2} I_{(a_3, b_3)}(v_3). \quad (4.16)$$

Так же как и в одномерной модели адиабатического сжатия газа, частицы в начальный момент времени делятся условно на две большие группы в зависимости от взаимодействия с подвижной или неподвижной стенками, у которых нормали параллельны оси x . На рис. 4.5 представлено такое разбиение на группы. Синим цветом выделена условная плотность распределения частиц, относящихся к 1-й группе (будут взаимодействовать с неподвижной границей), а красным — ко 2-й (будут взаимодействовать с подвижной границей). Следует

отметить тот факт, что значение скорости v_1 при $t = 0$ для частиц 1-й группы изменяется от 0 до 1, а для 2-й — от -1 до u_0 .

Объем V куба, изменяющегося с течением времени t , рассчитывается по следующей формуле:

$$V(t) = l_1(t) \prod_{i=2}^3 (b_i - a_i), \quad (4.17)$$

где $l_1(t) = b_1 - (a_1 + ut)$.

Функция распределения молекул $f(x, v, t)$ в трехмерном кубе имеет вид:

$$\begin{aligned} f(x, v, t) &= f_x(x, t) f_v(v, t) = \\ &= \frac{1}{V(t)} Q_j(x_1, t) \prod_{i=2}^3 I_{(a_i, b_i)}(x_i) \cdot f_v(v_1 | v_2, v_3, t) \int_{R_1} f_v(v, t) dv_1. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Величины $Q_j(x_1, t)$ и $f_v(v_1 | v_2, v_3, t)$ рассчитываются с помощью формул (4.2)–(4.4), где j — номер группы частиц.

С помощью формул (4.14), (4.18) и ранее указанных утверждений вычисляются макроскопические величины по следующим формулам [126]:

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \int_{R_3} f_x(x, t) f_v(v, t) dv = \\ &= f_x(x, t) \int_{R_3} \left[f_v(v_i | v_j, v_k, t) \int_{R_1} f_v(v, t) dv_i \right] dv = \\ &= f_x(x, t) \int_{R_1} f_v(v_i | v_j, v_k, t) dv_i \int_{R_3} f_v(v, t) dv = \\ &= f_x(x, t) \int_{R_1} f_v(v_i | v_j, v_k, t) dv_i, \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$\begin{aligned} \bar{v}_i(x, t) &= \int_{R_3} v_i f_x(x, t) f_v(v, t) dv / \rho(x, t) = \\ &= \left[f_x(x, t) \int_{R_1} v_i f_v(v_i | v_j, v_k, t) dv_i \right] / \left[f_x(x, t) \int_{R_1} f_v(v_i | v_j, v_k, t) dv_i \right] = \\ &= \int_{R_1} v_i f_v(v_i | v_j, v_k, t) dv_i / \int_{R_1} f_v(v_i | v_j, v_k, t) dv_i, \end{aligned} \quad (4.20)$$

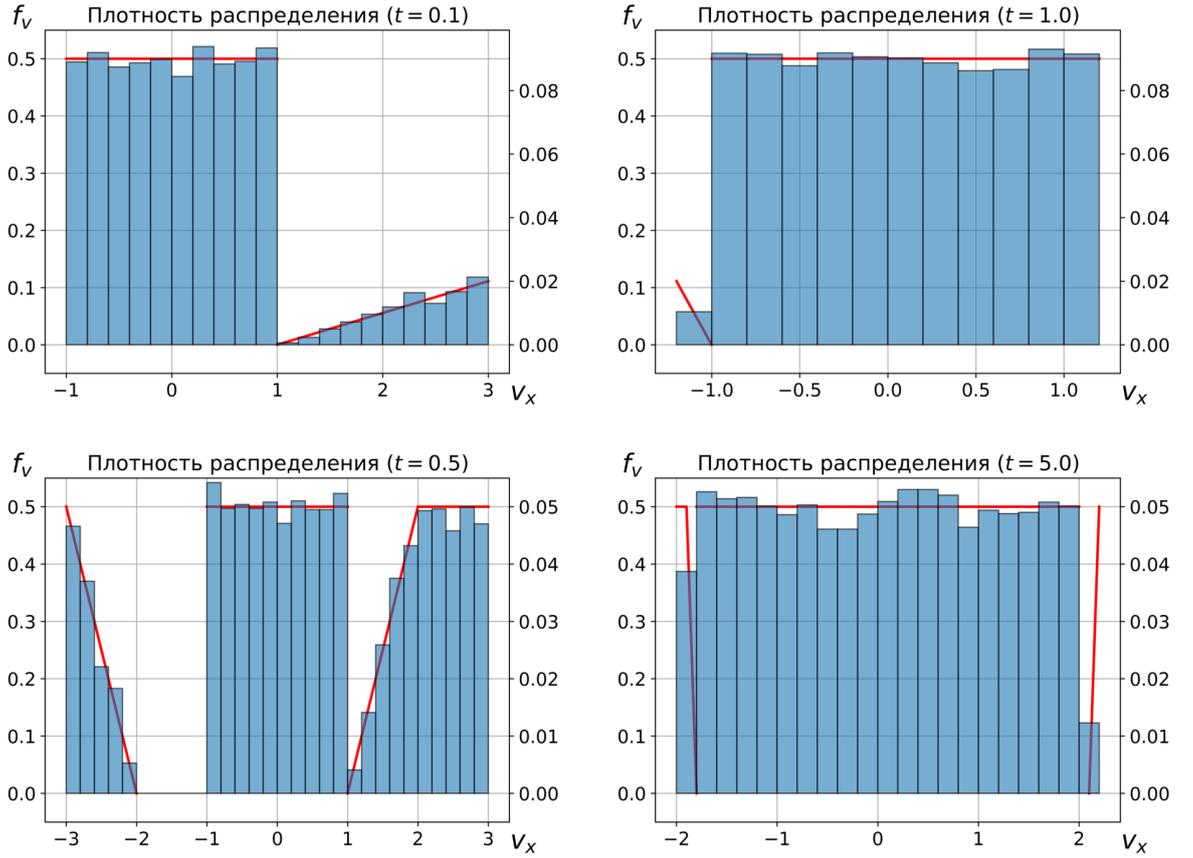


Рис. 4.6. Графики изменения условной плотности распределения $f_v(v_x|v_y, v_z, t)$ и гистограммы вдоль компоненты скорости v_x в различные моменты времени t : слева — $u = 1.0$; справа — $u = 0.1$

$$e(x, t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \left[\int_{R_1} (v_i - \bar{v}_i(x, t))^2 f_v(v_i|v_j, v_k, t) dv_i / \int_{R_1} f_v(v_i|v_j, v_k, t) dv_i \right], \quad (4.21)$$

$$T(x, t) = \frac{2}{3R} e(x, t), \quad (4.22)$$

$$p(x, t) = \frac{2}{3} \rho(x, t) e(x, t). \quad (4.23)$$

4.2.3 Моделирование и анализ результатов

Были проведены серии вычислительных экспериментов при $\rho_0 = 1$, $[a_i, b_i] = [-0.5, 0.5]$ ($i = \overline{1, 3}$), различном числе частиц N и скоростях границы $u = (u_0, 0, 0)$.

Для качественного сравнения условной плотности распределения $f_v(v_x|v_y, v_z, t)$ вдоль компоненты v_x , рассчитанного аналитическим

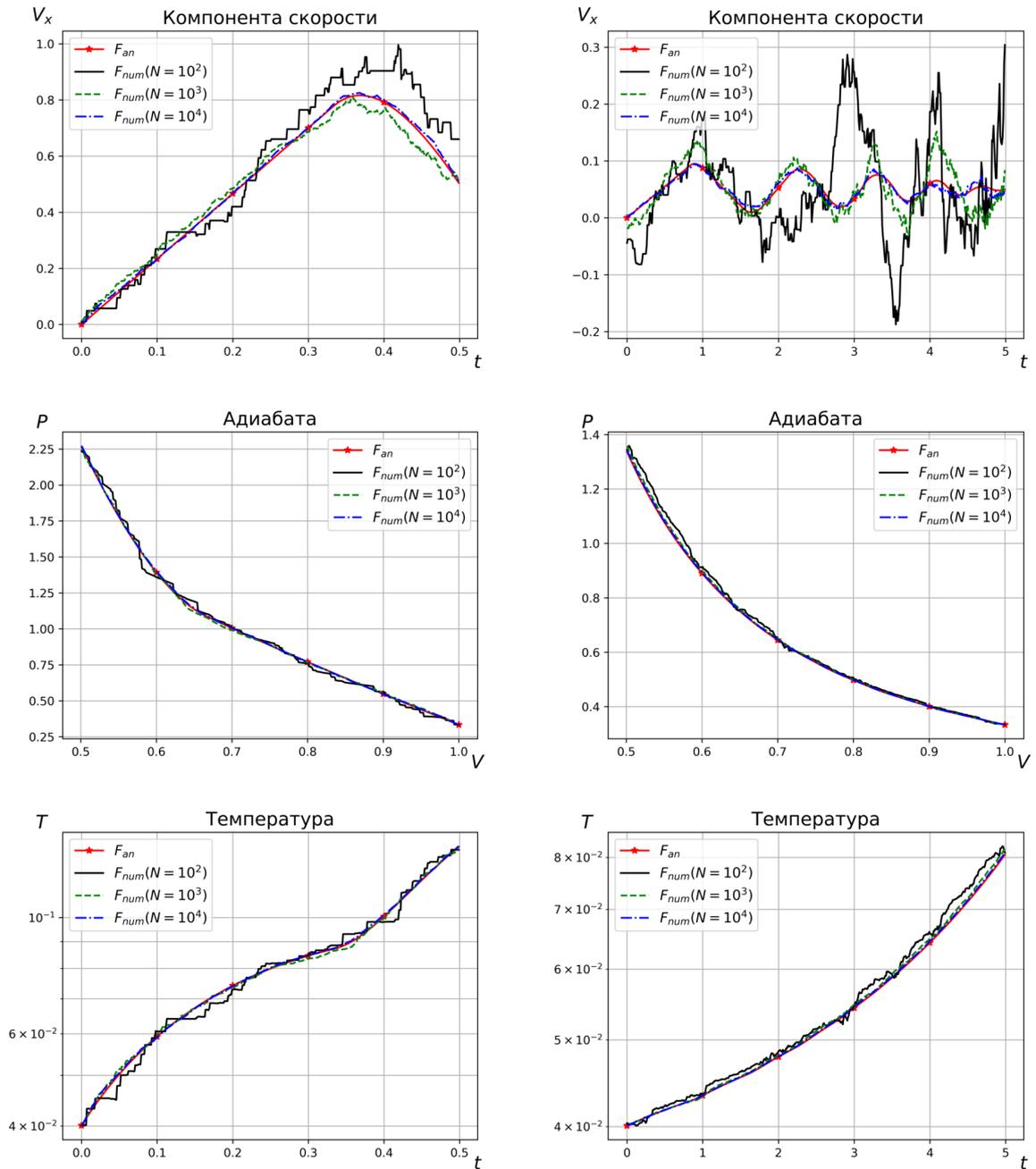


Рис. 4.7. Графики изменения аналитического решения F_{an} и статистических оценок макроскопических параметров F_{num} при различном числе частиц в эксперименте N в зависимости от времени t : слева — $u = 1.0$; справа — $u = 0.1$

способом, с результатами численного решения была дополнительная построена гистограмма распределения. На рис. 4.6 представлены графики изменения условной плотности распределения $f_v(v_x|v_y, v_z, t)$ и гистограммы при $N = 10^4$ в различные моменты времени t . Гистограмма распределения получена из статистического ряда с шагом 0.2. Число разрядов (делений), которое зависит от шага, рационально выбирать так, чтобы в результате их совокупность была в районе 10-20 [112]. Левая вероятностная шкала относится к графикам изменения условной плотности распределения, а правая частотная шкала — к гистограмме плотности распределения. Из графиков видно, что при выравнивании масштабов шкал гистограмма распределения вдоль оси v_x сохраняет существенные особенности условной плотности распределения $f_v(v_x|v_y, v_z, t)$, вычисленной аналитически.

На рис. 4.7 представлены графики изменений статистических оценок макроскопических величин при $u_0 = \{1.0, 0.1\}$. Из графиков видно, что с увеличением числа частиц N в эксперименте, численное решение приближается к аналитическому.

В табл. 4.3 и 4.4 представлены оценки максимальных абсолютных и относительных погрешностей на отрезке $t \in [0, 0.5]$ при $u_0 = 1.0$ и на отрезке $t \in [0, 5]$ при $u_0 = 0.1$, рассчитанные по формулам (2.32). Максимальные относительные погрешности температуры δ_T и давления δ_p совпадают, поскольку погрешность плотности зависит только от вычислительной погрешности. С уменьшением скорости стенки u_0 уменьшаются максимальные абсолютные и относительные погрешности температуры и давления. Порядок погрешности статистических оценок макроскопических величин убывает согласно выражению (2.31).

Оценка производительности разработанного комплекса программ производилась на процессоре Intel Xeon E5-2690 V2 (240 GFlops DP для 10 ядер). Результаты показали 39% от пиковой производительности на одно ядро (см. табл. 4.5) для основного расчетного блока (без вычисления статистических оценок макроскопических параметров) с учетом сохранения данных при следующих параметрах: шаг по времени $\Delta t = 0.001$, число итераций 5000, число частиц $N = 2^{17}$. Ускорение оптимизированной версии по сравнению с неоптимизированной составило более чем 12 раз.

Таблица 4.3

Оценка максимальной абсолютной погрешности при различном числе частиц N и скоростях границы u

| u_0 | N | Δ_v | Δ_T | Δ_p |
|-------|--------|----------------------|----------------------|----------------------|
| 1.0 | 10^4 | $2.55 \cdot 10^{-2}$ | $1.26 \cdot 10^{-3}$ | $1.70 \cdot 10^{-2}$ |
| | 10^6 | $2.69 \cdot 10^{-3}$ | $2.96 \cdot 10^{-4}$ | $4.55 \cdot 10^{-3}$ |
| | 10^8 | $2.05 \cdot 10^{-4}$ | $1.15 \cdot 10^{-5}$ | $1.82 \cdot 10^{-4}$ |
| 0.1 | 10^4 | $1.85 \cdot 10^{-2}$ | $4.05 \cdot 10^{-4}$ | $6.70 \cdot 10^{-3}$ |
| | 10^6 | $2.07 \cdot 10^{-3}$ | $2.26 \cdot 10^{-5}$ | $3.65 \cdot 10^{-4}$ |
| | 10^8 | $2.79 \cdot 10^{-4}$ | $3.86 \cdot 10^{-6}$ | $6.29 \cdot 10^{-5}$ |

Таблица 4.4

Оценка максимальной относительной погрешности при различном числе частиц N и скоростях границы u

| u_0 | N | δ_v | δ_T | δ_p |
|-------|--------|----------------------|----------------------|----------------------|
| 1.0 | 10^4 | $7.66 \cdot 10^1$ | 2.13 | 2.13 |
| | 10^6 | $3.09 \cdot 10^1$ | $2.54 \cdot 10^{-1}$ | $2.54 \cdot 10^{-1}$ |
| | 10^8 | 1.34 | $9.46 \cdot 10^{-3}$ | $9.46 \cdot 10^{-3}$ |
| 0.1 | 10^4 | $1.18 \cdot 10^2$ | $5.07 \cdot 10^{-1}$ | $5.07 \cdot 10^{-1}$ |
| | 10^6 | $2.67 \cdot 10^1$ | $2.93 \cdot 10^{-2}$ | $2.93 \cdot 10^{-2}$ |
| | 10^8 | $7.90 \cdot 10^{-1}$ | $4.92 \cdot 10^{-3}$ | $4.92 \cdot 10^{-3}$ |

Таблица 4.5

Оценка производительности различных версий программы на процессоре Intel Xeon E5-2690 V2 в пересчете одно ядро

| Версия программы | Число ядер | t , с. | R_{task} , GFlops | R_{task}/R_{peak} , % |
|--------------------|------------|----------|---------------------|-------------------------|
| Неоптимизированная | 1 | 198.51 | 0.8 | 3.3 |
| Векторизованная | 1 | 15.48 | 9.42 | 39.25 |

4.3 Выводы по главе

В этой главе рассмотрены модели адиабатического сжатия газа Кнудсена в одномерном и трехмерном пространствах с подвижной границей, для которых были найдены точные решения. Идея нахождения класса точных решений заключается в определении функции распределения молекул в пространстве координат и скоростей с течением времени. С помощью условной плотности распределения и предположениях, основанных на начальном распределении частиц в фазовом пространстве, законах сохранения и зеркального отражения, удалось свести решение трехмерной задачи к одномерной. Принципиальное отличие при вычислении макроскопических величин между одномерной и трехмерной задачами заключалось в том, что в первом случае необходимо суммировать функцию распределения по скоростям, поскольку пространство скоростей дискретное, а в последнем случае требуется интегрировать функцию распределения по кусочно-непрерывному пространству скоростей. Дополнительно были проведены серии вычислительных экспериментов с использованием разработанного комплекса программ при различных параметрах моделей. Результаты верификации разработанного комплекса программ демонстрируют качественное и количественное соответствие статистических оценок макроскопических величин с полученными аналитическими решениями. В задачах расчета траекторий движения частиц в замкнутой области с подвижными границами была достигнута производительность, равная 39% от пиковой.

Глава 5. Моделирование фильтрации идеального бесстолкновительного газа в пористой среде

В этой главе рассматривается задача фильтрации идеального бесстолкновительного газа в трехмерной пористой среде. Предполагается, что можно установить связь между скоростью течения и скоростью фильтрации газа. Значимым параметром при моделировании процесса фильтрации газа в пористой среде является коэффициент фильтрации.

Пусть математическая модель пористой среды представляет собой идеальную модель грунта, состоящую из рассеивающих сфер. Тогда данную модель можно рассматривать как динамическую систему, состоящую из статистически большого числа частиц, свободно движущихся в пространстве и упруго отражающихся от неподвижных сфер, расположенных в определенном порядке. Такая модель именуется газом Лоренца [62].

Подобные модели, описывающие поведение двухкомпонентного газа, состоящего из легких молекул с одной стороны и тяжелых молекул с другой, актуальны в атомной энергетике и находят свое применение в задачах рассеивания тепла, связанных с управлением движением тепловых нейтронов в различных средах [56].

Также газ Лоренца может рассматриваться как динамическая система бильярдного типа (см. параграф 1.1). В такой модели рассматривается движение одной частицы в многомерной области, состоящей из неподвижных отражающих сфер. Динамические системы бильярдного типа относятся к неравновесной статистической механике. В этих системах исследуются эргодические свойства, такие как перемешивание, диффузия и др. [30; 63; 66].

Материалы главы отражены в работах [1; 5].

5.1 Описание математической модели

Математическая модель фильтрации идеального газа в пористой среде описывается следующей системой уравнений (см. формулу (5.1)):

1) линейный закон фильтрации (закон Дарси) — динамический закон движения потока в пористой среде, который устанавливает связь скорости фильтрации потока с перепадом давления;

2) закон сохранения массы газа в пористой среде (уравнение непрерывности) устанавливает связь скорости изменения потока газа с изменением плотности за единицу времени;

3) уравнение состояния идеального газа (соотношение Клапейрона-Менделеева) необходимо для того, чтобы установить природу рассматриваемого газа и его термодинамический характер движения.

$$\begin{cases} u = -\frac{k}{\mu} \nabla p \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho u) = 0 \\ p = \rho RT \end{cases}, \quad (5.1)$$

где k — проницаемость среды; $\mu = 1/3 \langle v \rangle \langle \lambda \rangle \langle \rho \rangle$ — динамическая вязкость среды; $\langle v \rangle$ — средняя скорость молекул; $\langle \lambda \rangle$ — средняя длина свободного пробега молекул.

Далее рассматривается одномерный случай при условии, что течение стационарно

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \quad (5.2)$$

После интегрирования уравнение приобретает следующий вид:

$$\rho u = C, \quad (5.3)$$

где C — константа.

При подстановке первого и последнего уравнений из системы (5.1) в (5.3) с последующим интегрированием получается формула фильтрации идеального газа в пористой среде:

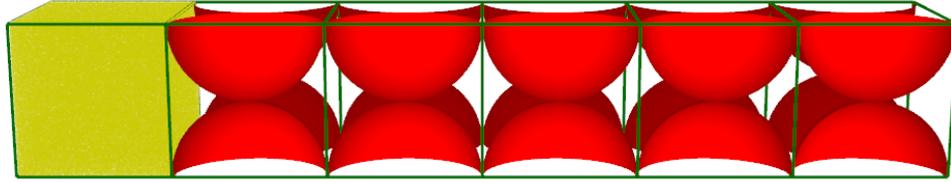
$$u_{j,i} = -\frac{k p_j^2 - p_i^2}{\mu 2p_j L}, \quad (5.4)$$

где индексы j и i — номера элементарных областей; L — длина фильтрующей части пористой среды (расстояние между элементарными областями).

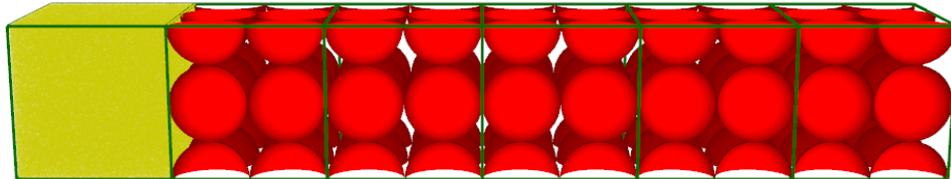
5.2 Постановка вычислительной задачи

Пусть моделируемая область, имеющая форму прямоугольного параллелепипеда, не ограничена в положительном направлении оси x . Область условно разбита на 3 подобласти. Первая пустая подобласть в начальный момент времени равномерно заполняется частицами газа. Направление движения каждой

t = 0000.0

а) Конфигурация 1 ($K1$)

t = 0000.0

б) Конфигурация 2 ($K2$)

t = 0000.0

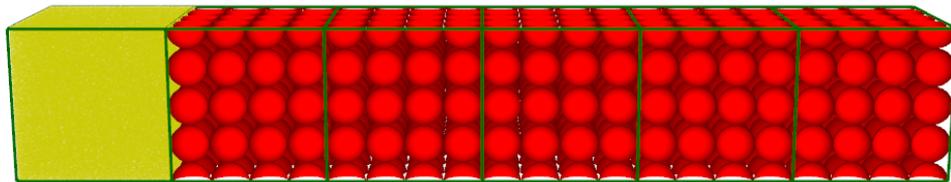
в) Конфигурация 3 ($K3$)

Рис. 5.1. Вычислительная схема: красным цветом — пористая среда; зеленым цветом — границы элементарных областей; желтым цветом — частицы

частицы также определяется случайным образом с равномерным распределением, где модуль скорости равен 1. Вторая подобласть — пористая среда, состоящая из твердых сфер радиусом r , центры которых расположены в узлах кубической сетки. На рис. 5.1 представлена вычислительная схема с тремя видами конфигураций пористой среды, которые зависят от радиуса сфер и их количества (см. табл. 5.1). Последняя подобласть пуста и не ограничена.

С другой стороны, часть подобласти, в которой движутся частицы, содержит 6 элементарных областей, в которых вычисляются статистические оценки макроскопических параметров. Границы элементарных областей выделены зеленым цветом. Нумерация элементарных областей осуществляется слева направо вдоль оси x , начиная с нуля. Число сфер для i -й конфигурации пористой среды определяется формулой (5.5).

Параметры конфигурации пористой среды

| i | Радиус сферы, $r(i)$ | Число сфер, $n(i)$ |
|-----|----------------------|--------------------|
| 1 | 0.5 | 160 |
| 2 | 0.25 | 720 |
| 3 | 0.125 | 4000 |

$$n(i) = 10 \cdot 2^{(i+1)} \cdot (2^{(i-1)} + 1)^2 \quad (5.5)$$

Таким образом, объем пористой среды равен объему 10 элементарных областей. Течение идеального газа направлено слева направо.

5.3 Моделирование и анализ результатов

Были проведены серии вычислительных экспериментов с различным количеством частиц для трех конфигураций пористой среды. На рис. 5.2 представлена визуализация течения газа в пористой среде в различные моменты времени t при $N = 10^8$. Анализ распределения частиц газа в пористых средах показывает, что скорость течения газа уменьшается с уменьшением объема порового пространства.

В рамках вычислительного эксперимента решалась обратная задача о нахождении коэффициента k/μ , связывающего скорость течения (статистическую оценку гидродинамической скорости) и скорость фильтрации (см. формулу (5.4)) в зависимости от конфигурации пористой среды.

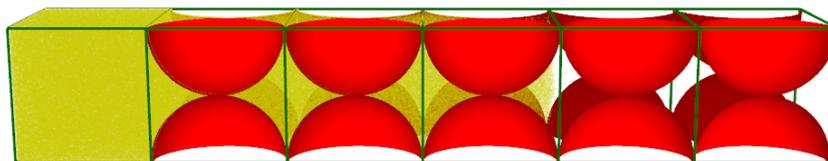
Поскольку коэффициент k/μ содержит величины, которые можно вычислить по формуле (5.6), тогда для каждой конфигурации достаточно найти отношение k/λ .

$$\frac{k}{\mu} = \frac{3k}{\rho \langle v \rangle \lambda} = \frac{6}{(\rho_j \rho_i)} \frac{k}{\lambda} \quad (5.6)$$

Расчет коэффициента k/λ для каждой конфигурации пористой среды условно разделен на два этапа:

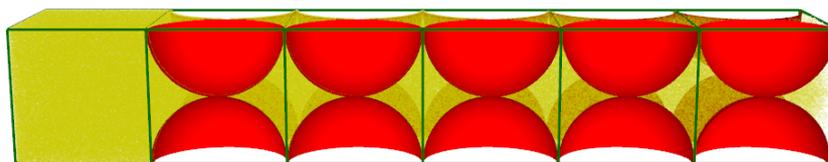
1. Для каждой пары $u_{j,i}(t)$ и $v_j(t)$ с одинаковыми номерами j и i вычисляется значение коэффициента k/λ по формуле (5.7).

$t = 0003.0$



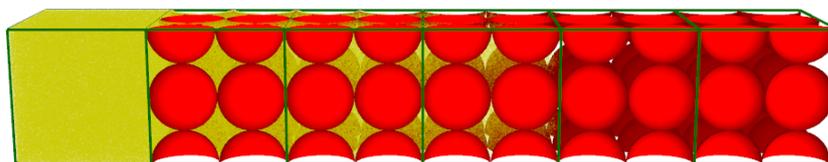
а) $K1$

$t = 0006.0$



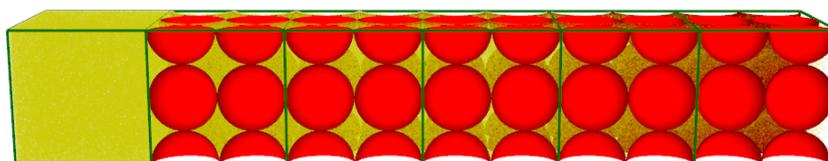
б) $K1$

$t = 0003.0$



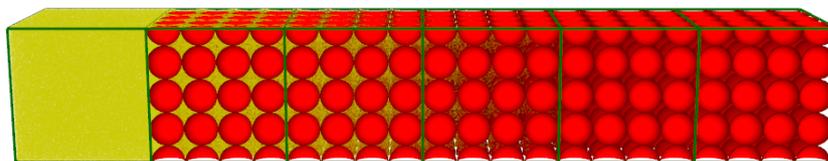
в) $K2$

$t = 0006.0$



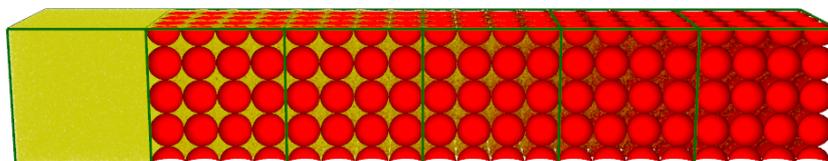
г) $K2$

$t = 0003.0$



д) $K3$

$t = 0006.0$



е) $K3$

Рис. 5.2. Течение газа для различных конфигураций пористой среды в различные моменты времени t при $N = 10^8$

$$\frac{k}{\lambda} = \sum_{k=0}^n u_{j,i}(t_k)v_j(t_k) / \sum_{k=0}^n u_{j,i}^2(t_k) \quad (5.7)$$

Формула (5.7) основана на МНК. Величины, полученные в ходе вычислительного эксперимента, выбраны на полуинтервале времени $t_k \in [600; 1000)$, когда течение газа выходит на квазистационарный режим, при $\Delta t = 0.1$. Значения k/λ представлены в табл. 5.2 в зависимости от j и i при различном количестве частиц для трех конфигураций.

2. Полученные значения k/λ усредняются по номерам $2 \leq i < j \leq 5$ для каждой конфигурации пористой среды. На рис. 5.3–5.6 представлены результаты, где значения коэффициента k/λ для каждой конфигурации пористой среды взяты из табл. 5.3 при $N = 10^8$.

Анализируя данные табл. 5.2 по столбцам, можно заметить большую разницу между максимальными и минимальными значениями k/λ в столбцах с номерами $i = 1$ для каждой конфигурации в зависимости от числа частиц N в эксперименте. Это объясняется тем, что при попадании частиц газа из пустой области в пористую среду сильно изменяется характер течения газа. Существенное изменение в течении газа происходит на границе между пустой областью и пористой средой. Поэтому усреднение коэффициентов k/λ проводилось при $2 \leq i < j \leq 5$. Усредненные коэффициенты для каждой конфигурации в зависимости от числа частиц N и номера конфигурации представлены в табл. 5.3. Из результатов видно, что для каждой конфигурации с ростом количества частиц в эксперименте порядок изменения величин k/λ при переходе уменьшается. Дополнительный анализ данных в полученной таблице показывает, что с увеличением числа частиц в эксперименте наблюдается близкая к линейной зависимость между значениями коэффициента k/λ и размером ячейки конфигурации пористой среды (диаметром рассеивающих сфер, из которых состоит пористая среда).

Также был проведен анализ максимальной погрешности статистических оценок макроскопических параметров $\sigma_F = \hat{s}/\sqrt{n}$ на полуинтервале времени $t \in [600, 1000)$ (см. пункт 2.2.3). В табл. 5.4 представлены результаты максимальных погрешностей σ_F , которые были выбраны среди пяти элементарных областей и трех конфигураций пористой среды, с группировкой по статистическим оценкам макроскопических величин в зависимости от числа

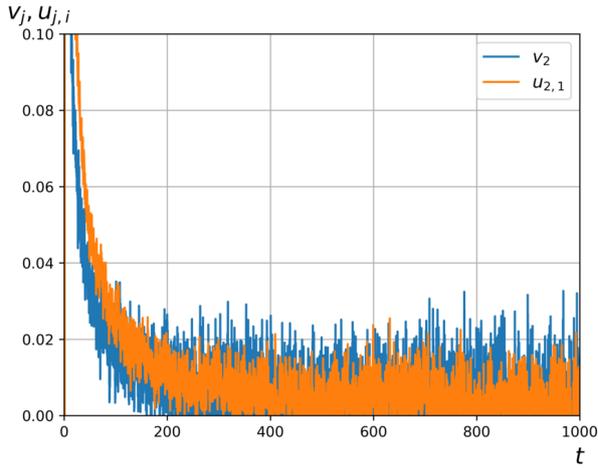
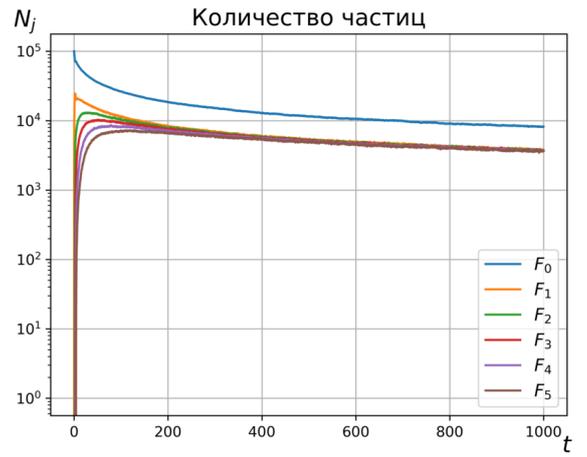
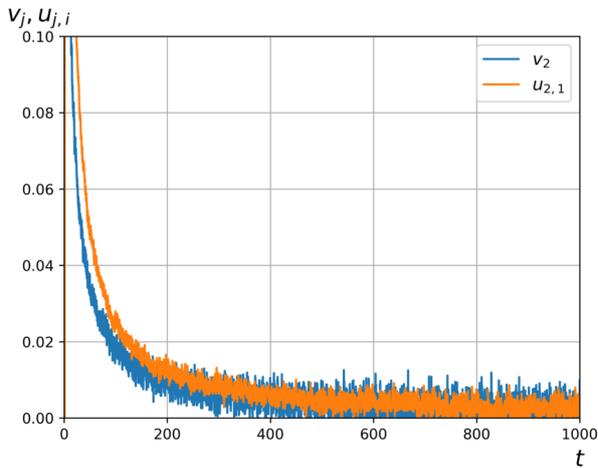
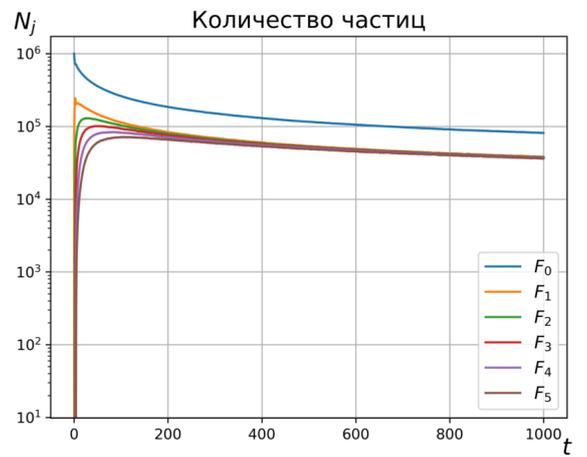
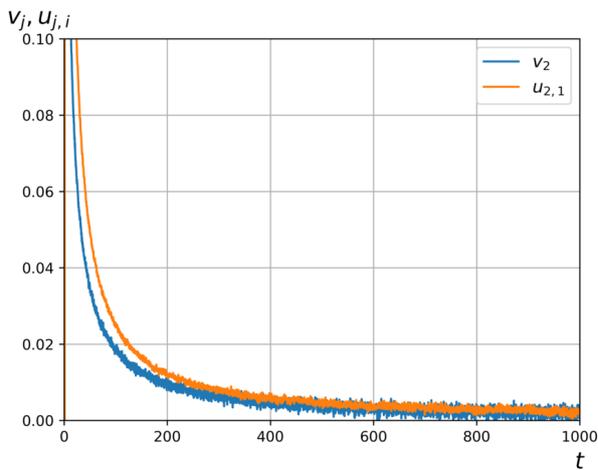
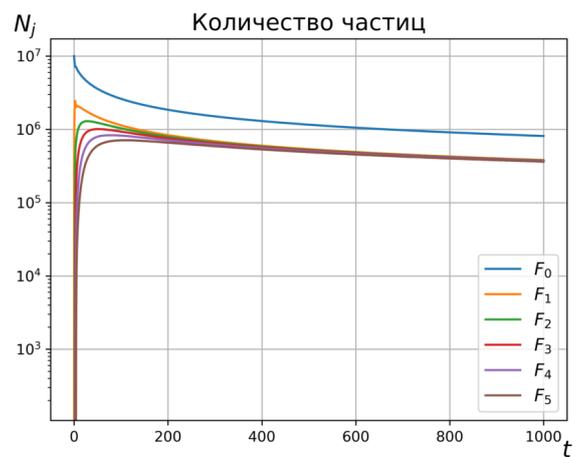
а) $K1; N = 10^5$ б) $K1; N = 10^5$ в) $K1; N = 10^6$ г) $K1; N = 10^6$ д) $K1; N = 10^7$ е) $K1; N = 10^7$

Рис. 5.3. Графики зависимости скорости течения v_j и скорости фильтрации $u_{j,i}$ от времени t для $K1$ при различном количестве частиц N

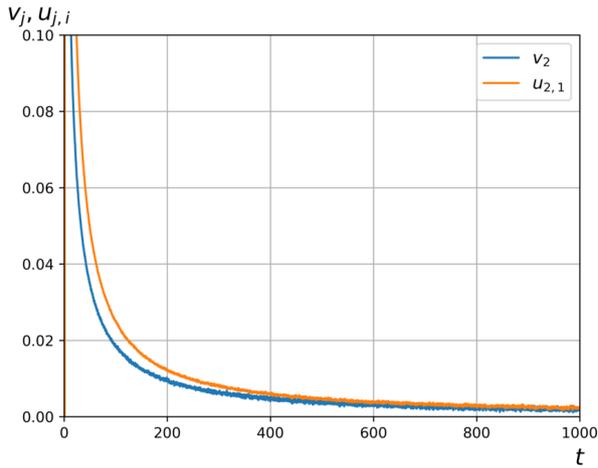
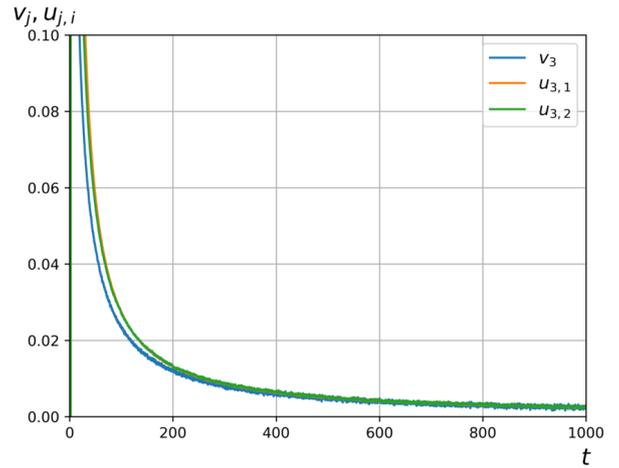
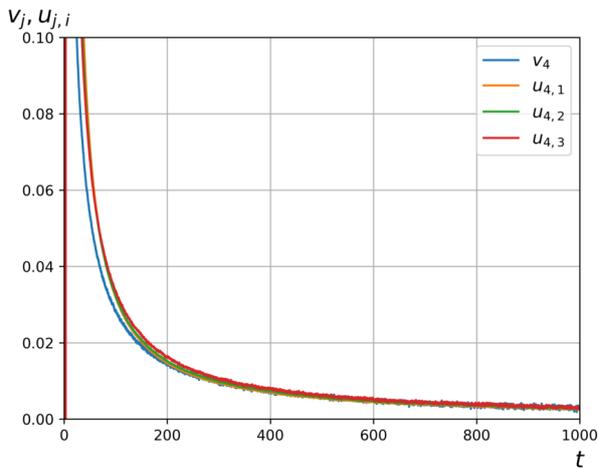
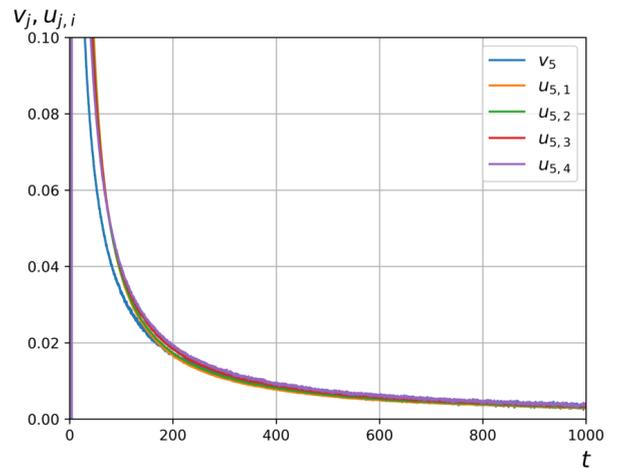
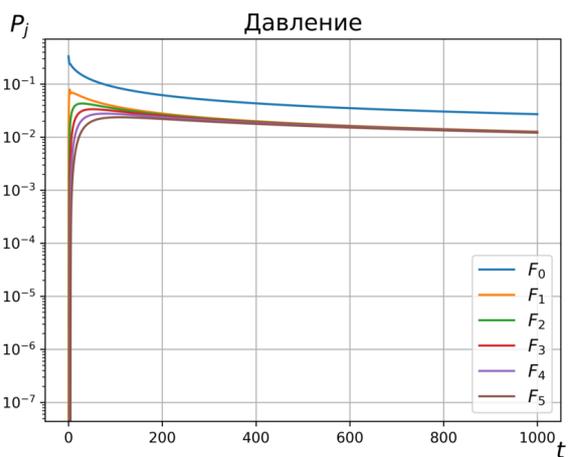
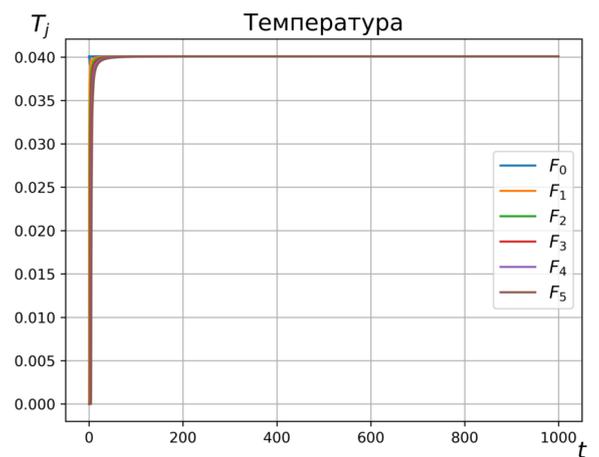
а) $K1; N = 10^8$ б) $K1; N = 10^8$ в) $K1; N = 10^8$ г) $K1; N = 10^8$ д) $K1; N = 10^8$ е) $K1; N = 10^8$

Рис. 5.4. Графики зависимости скорости течения v_j и скорости фильтрации $u_{j,i}$, статистических оценок давления P_j и температуры T_j от времени t для $K1$ при $N = 10^8$

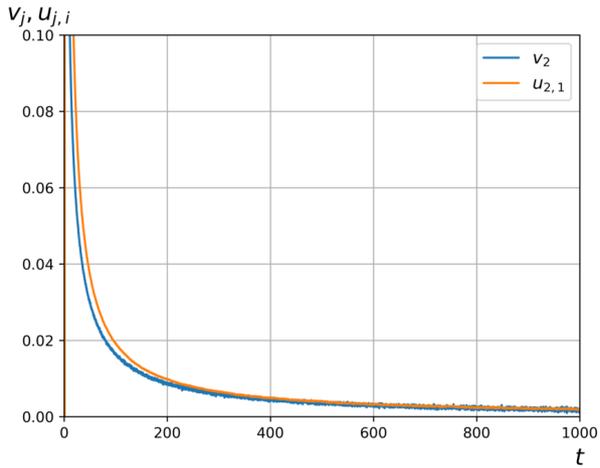
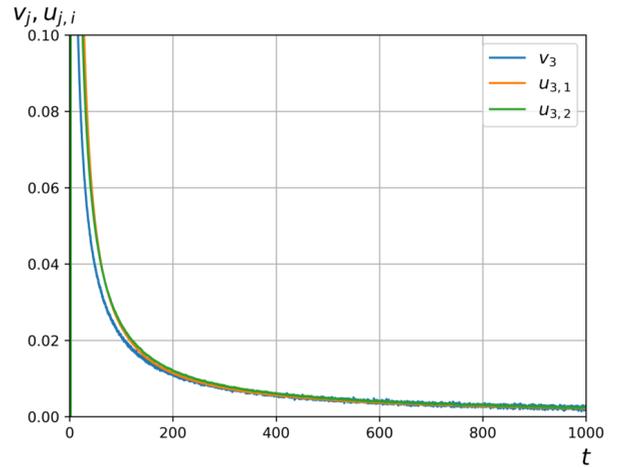
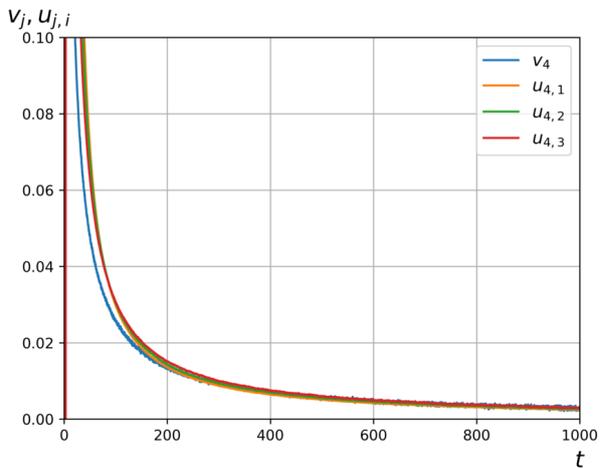
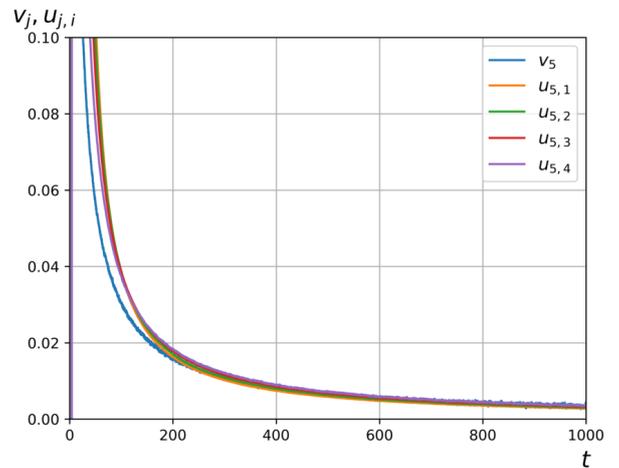
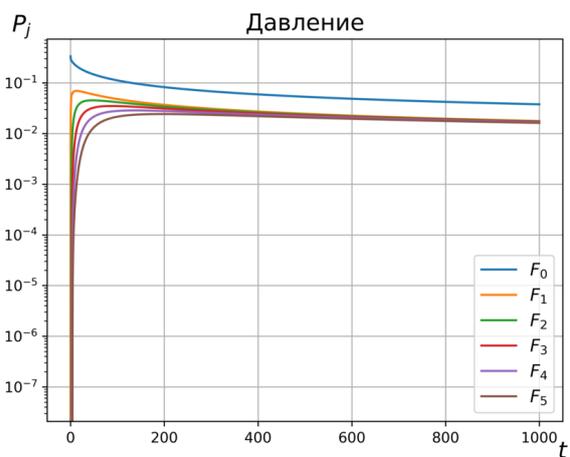
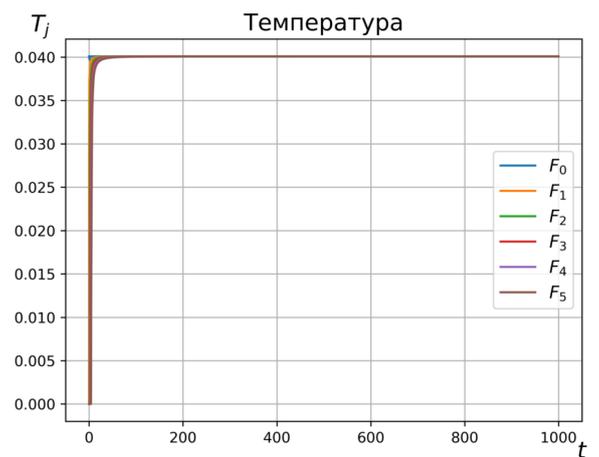
а) $K2; N = 10^8$ б) $K2; N = 10^8$ в) $K2; N = 10^8$ г) $K2; N = 10^8$ д) $K2; N = 10^8$ е) $K2; N = 10^8$

Рис. 5.5. Графики зависимости скорости течения v_j и скорости фильтрации $u_{j,i}$, статистических оценок давления P_j и температуры T_j от времени t для $K2$ при $N = 10^8$

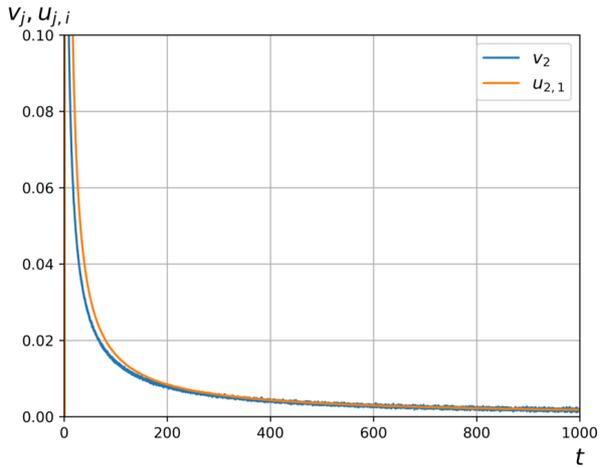
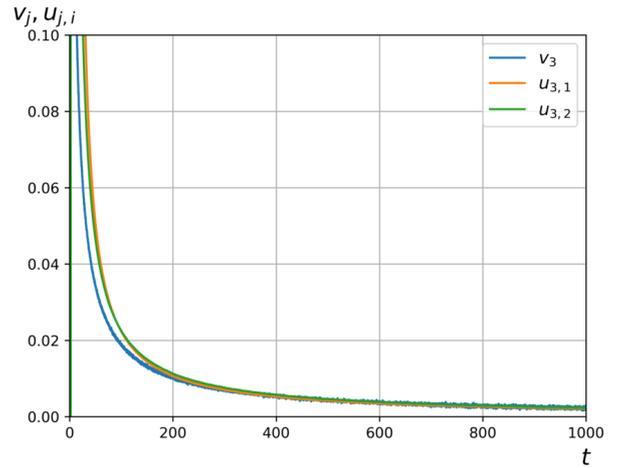
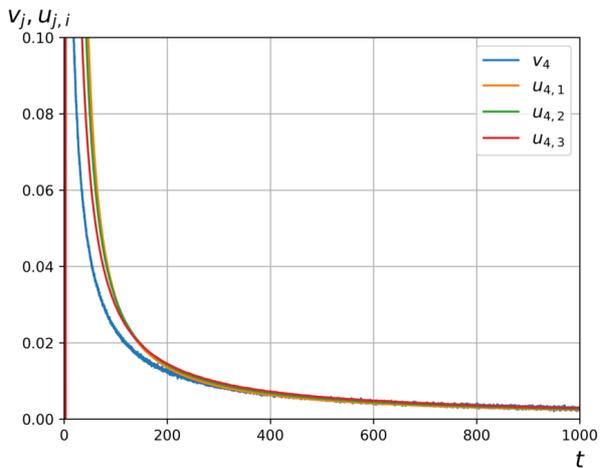
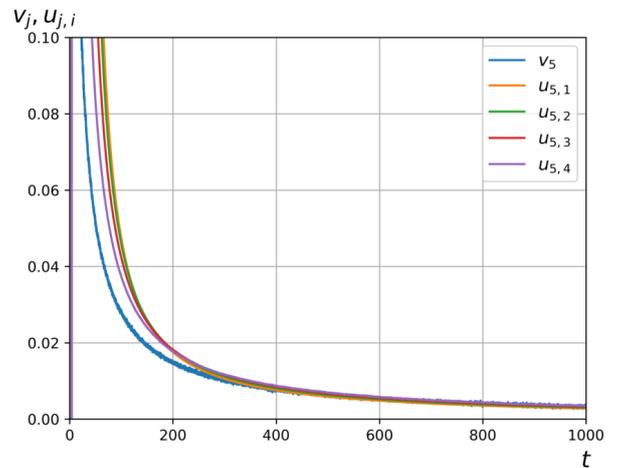
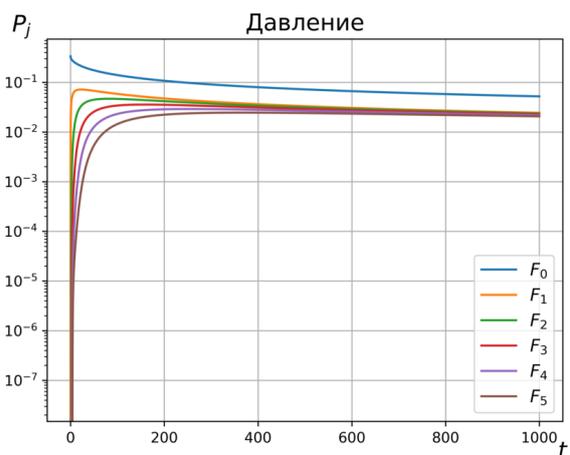
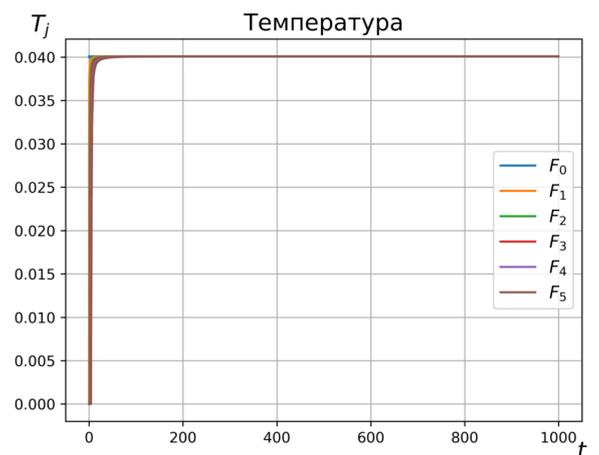
а) $K3; N = 10^8$ б) $K3; N = 10^8$ в) $K3; N = 10^8$ г) $K3; N = 10^8$ д) $K3; N = 10^8$ е) $K3; N = 10^8$

Рис. 5.6. Графики зависимости скорости течения v_j и скорости фильтрации $u_{j,i}$, статистических оценок давления P_j и температуры T_j от времени t для $K3$ при $N = 10^8$

Таблица 5.2

Значение коэффициента k/λ в зависимости от количества частиц N , конфигурации пористой среды и номеров элементарных областей j, i

| N | $j \setminus i$ | k/λ | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|--------|-----------------|-------------|--------|--------|--------|--|--------|--------|--------|--------|--|------|---|---|---|--|--------|--------|--------|--------|--|
| | | $K1$ | | | | | $K2$ | | | | | $K3$ | | | | | | | | | |
| | | 1 | 2 | 3 | 4 | | 1 | 2 | 3 | 4 | | 1 | 2 | 3 | 4 | | | | | | |
| 10^5 | 2 | 0.0616 | | | | | 0.0596 | | | | | | | | | | 0.0462 | | | | |
| | 3 | 0.1498 | 0.0462 | | | | 0.0648 | 0.0578 | | | | | | | | | 0.0598 | 0.0506 | | | |
| | 4 | 0.2132 | 0.1540 | 0.0796 | | | 0.0686 | 0.0624 | 0.0575 | | | | | | | | 0.0646 | 0.0592 | 0.0527 | | |
| | 5 | 0.2514 | 0.2288 | 0.1741 | 0.0902 | | 0.0315 | 0.0263 | 0.0203 | 0.0126 | | | | | | | 0.0665 | 0.0618 | 0.0579 | 0.0528 | |
| | 2 | 0.1476 | | | | | 0.1079 | | | | | | | | | | 0.0596 | | | | |
| 10^6 | 3 | 0.2290 | 0.1912 | | | | 0.1331 | 0.1169 | | | | | | | | | 0.0648 | 0.0578 | | | |
| | 4 | 0.2648 | 0.2431 | 0.1944 | | | 0.1402 | 0.1264 | 0.1100 | | | | | | | | 0.0686 | 0.0624 | 0.0575 | | |
| | 5 | 0.2886 | 0.2692 | 0.2437 | 0.2117 | | 0.1443 | 0.1321 | 0.1197 | 0.1110 | | | | | | | 0.0692 | 0.0638 | 0.0598 | 0.0569 | |
| | 2 | 0.1946 | | | | | 0.1149 | | | | | | | | | | 0.0604 | | | | |
| | 3 | 0.2417 | 0.2288 | | | | 0.1299 | 0.1181 | | | | | | | | | 0.0664 | 0.0603 | | | |
| 10^7 | 4 | 0.2684 | 0.2541 | 0.2291 | | | 0.1390 | 0.1275 | 0.1169 | | | | | | | | 0.0691 | 0.0632 | 0.0580 | | |
| | 5 | 0.2847 | 0.2683 | 0.2463 | 0.2254 | | 0.1446 | 0.1337 | 0.1240 | 0.1161 | | | | | | | 0.0699 | 0.0645 | 0.0600 | 0.0569 | |
| | 2 | 0.2018 | | | | | 0.1152 | | | | | | | | | | 0.0607 | | | | |
| | 3 | 0.2450 | 0.2359 | | | | 0.1308 | 0.1201 | | | | | | | | | 0.0663 | 0.0600 | | | |
| | 4 | 0.2702 | 0.2561 | 0.2340 | | | 0.1396 | 0.1284 | 0.1175 | | | | | | | | 0.0692 | 0.0633 | 0.0584 | | |
| 10^8 | 5 | 0.2863 | 0.2699 | 0.2485 | 0.2295 | | 0.1451 | 0.1343 | 0.1241 | 0.1160 | | | | | | | 0.0702 | 0.0648 | 0.0605 | 0.0573 | |

Таблица 5.3

Средние значения коэффициента k/λ в зависимости от количества частиц N и номера конфигурации пористой среды

| N | k/λ | | |
|--------|-------------|--------|--------|
| | $K1$ | $K2$ | $K3$ |
| 10^5 | 0.1288 | 0.0395 | 0.0558 |
| 10^6 | 0.2256 | 0.1194 | 0.0597 |
| 10^7 | 0.2420 | 0.1227 | 0.0605 |
| 10^8 | 0.2457 | 0.1234 | 0.0607 |

Таблица 5.4

Оценка максимальной величины σ_F при $N = 10^5$ частиц и различном числе испытаний n

| N | n | σ_v | σ_ρ | σ_T | σ_p |
|--------|--------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| 10^5 | 10^1 | $5.43 \cdot 10^{-3}$ | $5.32 \cdot 10^{-4}$ | $1.09 \cdot 10^{-5}$ | $1.77 \cdot 10^{-4}$ |
| 10^5 | 10^2 | $1.18 \cdot 10^{-3}$ | $1.08 \cdot 10^{-4}$ | $3.61 \cdot 10^{-6}$ | $3.61 \cdot 10^{-5}$ |
| 10^5 | 10^3 | $3.24 \cdot 10^{-4}$ | $3.00 \cdot 10^{-5}$ | $3.33 \cdot 10^{-7}$ | $1.00 \cdot 10^{-5}$ |

частиц в эксперименте. Порядок максимальной погрешности σ_F убывает согласно выражению (2.31).

На рис. 5.3–5.6 представлены результаты сравнения скорости течения v_j (статистической оценки гидродинамической скорости) и скорости фильтрации $u_{j,i}$ (см. формулы (5.4), (5.6)), а значения коэффициента k/λ взяты из табл. 5.3 в зависимости от конфигурации пористой среды при $N = 10^8$. Начальное отклонение скорости течения v_j и скорости фильтрации $u_{j,i}$ объясняется малой плотностью газа, проходящего сквозь элементарную область. На полуинтервале времени $t \in [600, 1000)$ с выходом на квазистационарное течение, графики скорости течения и скорости фильтрации газа совпадают. На рис. 5.3 представлено сравнение графиков, демонстрирующее, что с ростом числа частиц в вычислительном эксперименте уменьшается амплитуда колебаний скорости течения и скорости фильтрации.

Оценка производительности программы на процессоре Intel Xeon E5-2690 V2 в пересчете на одно ядро в зависимости от конфигурации пористой среды и шага по времени Δt

| Конфигурация | Δt | t , с. | R_{task} , GFlops DP | R_{task}/R_{peak} |
|--------------|------------|----------|------------------------|---------------------|
| K1 | 0.1 | 3.548 | 6.829 | 28.5 |
| | 0.01 | 2.408 | 7.703 | 32.1 |
| | 0.001 | 2.091 | 8.323 | 34.7 |
| K2 | 0.1 | 3.928 | 6.820 | 28.4 |
| | 0.01 | 2.517 | 7.875 | 32.8 |
| | 0.001 | 2.208 | 8.731 | 36.4 |
| K3 | 0.1 | 4.143 | 6.791 | 28.3 |
| | 0.01 | 2.468 | 7.910 | 33.0 |
| | 0.001 | 2.125 | 8.902 | 37.1 |

Анализ полученных результатов позволяет сделать вывод о том, что с выходом на квазистационарный режим течения газа Кнудсена наблюдается линейная зависимость между скоростью течения и скоростью фильтрации.

Поле статистических оценок макроскопических параметров строится разбиением области на подобласти, где каждая подобласть — элементарная область. На рис. 5.7 представлены распределения температуры и давления при $N = 10^8$ и $t = 6.0$ для трех конфигураций пористой среды, а размер сетки (число элементарных областей по каждому измерению для моделируемой части области) равен $128 \times 32 \times 32$. Распределение температуры вдоль оси x равномерно для трех конфигураций, в то время как статистическая оценка давления распространяется неравномерно и стремительно падает. Это объясняется тем, что давление зависит от плотности газа, а температура — нет.

Оценка производительности разработанного комплекса программ выполнена на процессоре Intel Xeon E5-2690 V2 с пиковой производительностью 240 GFlops DP для 10 ядер. В табл. 5.5 представлена результаты замеров производительности программы на одно ядро для 3-х конфигураций с различным шагом по времени Δt . Оценка производительности рассчитывалась для основных расчетных этапов (см. пункт 3.1.1) со следующими параметрами: число

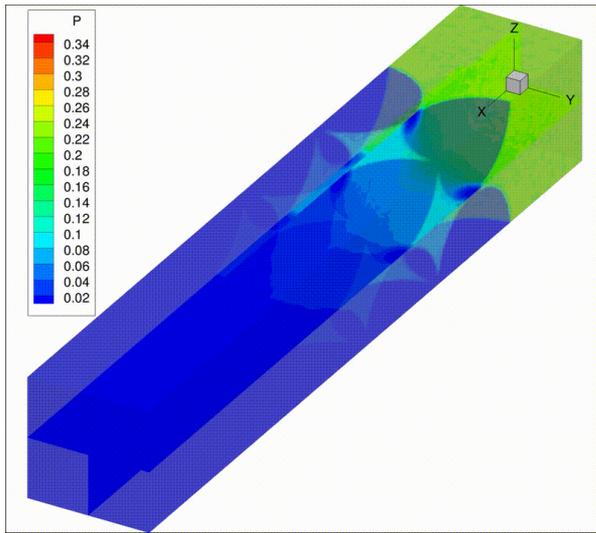
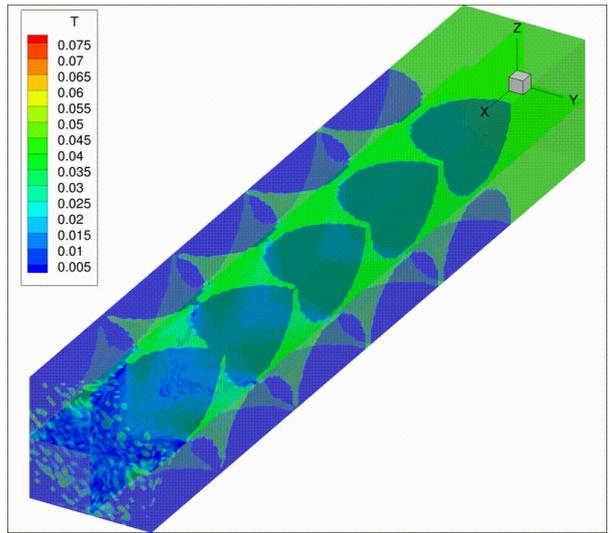
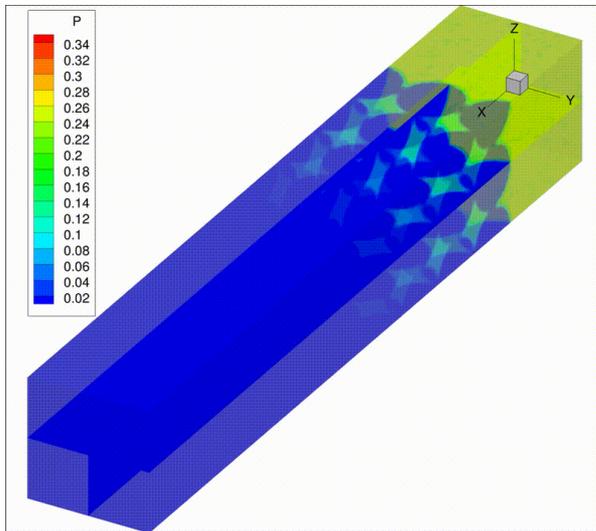
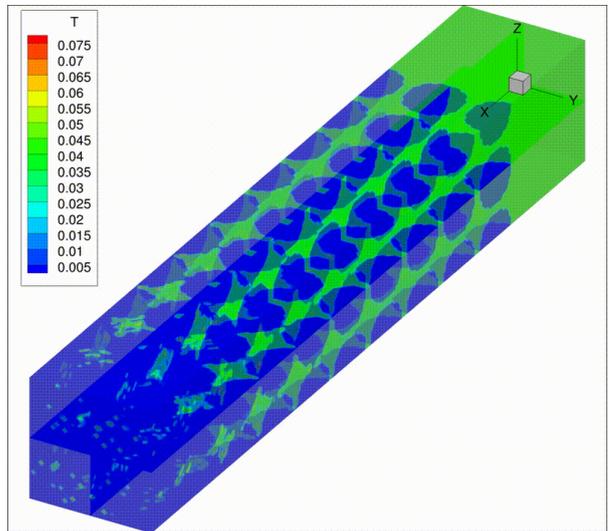
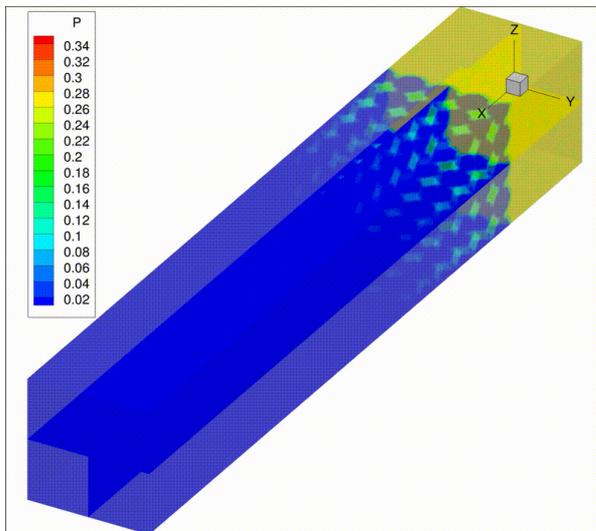
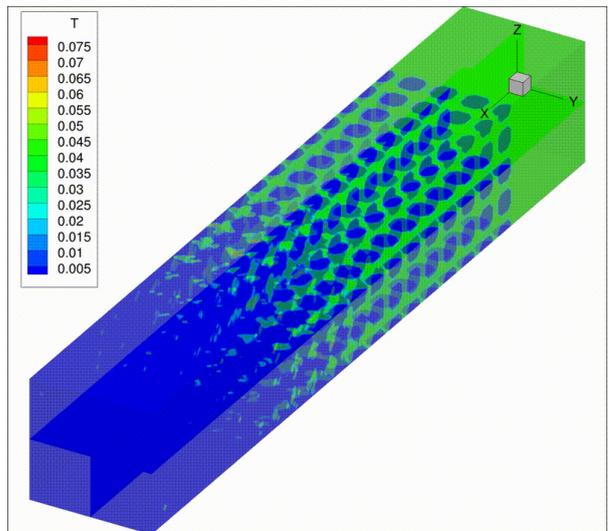
а) $K1; P$ б) $K1; T$ в) $K2; P$ г) $K2; T$ д) $K3; P$ е) $K3; T$

Рис. 5.7. Области распределения давления P и температуры T для различных конфигураций пористой среды при $N = 10^8$: левый столбец — поле давления; правый столбец — поле температуры

частиц $N = 2^{17} = 131072$; число шагов $n = 300$; число элементарных областей равно 6. Анализ таблицы показывает, что при увеличении временного шага Δt происходит падение производительности до 28% от пиковой в пересчете ядро. Дополнительный анализ показал, что это связано с увеличением числа столкновений с границами, что приводит к увеличению числа перестановок частиц в группе (см. пункт 3.1.2). При этом время работы программы в сравнении с шагом по времени увеличивается медленнее, поэтому выгоднее с точки зрения расчетов по времени считать с большим шагом. Также следует учитывать и то, что длина шага ограничена и зависит от размера ячейки пористой среды (см. рис. 3.5) и скорости частицы. Это связано с использованием оптимизации, которая позволяет существенно уменьшить число вариантов возможных столкновений частиц с границами (см. пункт 3.1.2).

5.4 Выводы по главе

В данной главе рассматривалась задача фильтрации течения идеально-го бесстолкновительного газа в пористой среде. Было проведено численное исследование задачи методом Монте-Карло с различным числом частиц в эксперименте и тремя конфигурациями пористой среды, в ходе которого была установлена линейная зависимость между скоростью течения и скоростью фильтрации газа при выходе на квазистационарное течение. Подробно описан алгоритм расчета коэффициента фильтрации. При проведении исследований была установлена линейная зависимость коэффициента фильтрации от размеров ячеек пористой среды, в узлах которой расположены сферы. Для идеального газа, у которого отсутствует внутреннее трение, коэффициент фильтрации зависит от структуры пористой среды. Представлена визуализация течения газа, распределения давления и температуры для трех конфигураций. Выполнен расчет оценки производительности созданного комплекса программ при различном временном шаге для трех конфигураций, показавшая высокую эффективность используемых алгоритмов.

Заключение

Диссертационная работа посвящена моделированию течения газа Кнудсена в трехмерной области с подвижными и неподвижными границами методом Монте-Карло. Для моделирования течения кнудсеновского газа был создан комплекс проблемно-ориентированных программ, предназначенный для высокопроизводительных вычислительных систем. Одним из преимуществ созданного комплекса программ является визуализация данных, которая позволила оценить полученные результаты при исследовании газодинамических моделей.

В процессе комплексного исследования задач, описывающих течение газа Кнудсена с подвижными и неподвижными границами, получен ряд новых результатов:

1. Найден класс точных решений для модели адиабатического сжатия кнудсеновского газа в трехмерной замкнутой области с подвижной границей, исследованной методом Монте-Карло.
2. Разработаны бессеточный метод Монте-Карло и алгоритмы расчета течения идеального бесстолкновительного газа в области с подвижными границами.
3. Создан комплекс проблемно-ориентированных программ для численного решения задачи о течении идеального бесстолкновительного газа в трехмерной изменяющейся во времени области, позволяющий визуализировать динамику процесса.
4. Выполнена оптимизация программного кода с учетом декомпозиции данных и векторизации вычислений для проведения расчетов на высокопроизводительных вычислительных системах.
5. Выполнена верификация разработанного комплекса программ на задачах газовой динамики с аналитическими решениями. Достигнута производительность, равная 49% от пиковой, при численном решении задачи о столкновении встречных пучков газа и 39% — при численном решении задачи об адиабатическом сжатии газа в трехмерной замкнутой области с подвижной границей методом Монте-Карло.
6. В вычислительных экспериментах по исследованию задачи фильтрации была построена зависимость коэффициента фильтрации от размеров ячеек пористой среды. Установлена линейная зависимость между

скоростью течения и скоростью фильтрации для идеального бесстолкновительного газа.

Автор выражает благодарность и большую признательность научному руководителю Галкину Валерию Алексеевичу за поддержку, помощь, обсуждение результатов и научное руководство. Также очень признателен профессорско-преподавательскому составу СурГУ за поддержку и ценные замечания. Отдельная благодарность авторам шаблона *Russian-Phd-LaTeX-Dissertation-Template* за помощь в оформлении диссертации.

Список литературы

1. *Быковских, Д. А.* Моделирование и визуализация течения идеального газа в пористой среде методом Монте-Карло / Д. А. Быковских, В. А. Галкин // Научная визуализация. — 2019. — Т. 11, № 3. — С. 27–42. — (перевод Bykovskih, D. A. An ideal gas flow modeling and visualization in porous medium by Monte Carlo method / D. A. Bykovskih, V. A. Galkin // Scientific Visualization. 2019. V. 11. N. 3. P. 27–42.)
2. *Быковских, Д. А.* О вычислительном тесте для модели адиабатического сжатия идеального бесстолкновительного газа / Д. А. Быковских, В. А. Галкин // Вестник кибернетики. Электр. Журн. — 2019. — 1 (33). — С. 15–23.
3. *Быковских, Д. А.* О вычислительном тесте для одной модели бесстолкновительного идеального газа / Д. А. Быковских, В. А. Галкин // Вестник кибернетики. Электр. Журн. — 2017. — 3 (27). — С. 119–127.
4. *Галкин, В. А.* Управление динамикой невзаимодействующих частиц в плоской области / В. А. Галкин, Т. В. Гавриленко, Д. А. Быковских // Вестник кибернетики. Электр. Журн. — 2015. — 3 (19). — С. 148–159.
5. *Галкин, В. А.* Фильтрационная модель движения идеального газа в пористой среде / В. А. Галкин, Д. А. Быковских [и др.] // Вестник кибернетики. Электр. Журн. — 2016. — Т. 4 (24). — С. 50–57.
6. *Галкин, В. А.* Моделирование движения частиц газа в пористой среде при периодическом воздействии на границу среды / В. А. Галкин, Д. А. Быковских [и др.] // Вестник кибернетики. Электр. Журн. — 2016. — Т. 4 (24). — С. 58–65.
7. *Быковских, Д. А.* Моделирование движения невзаимодействующих частиц в пространстве / Д. А. Быковских, В. А. Галкин, Т. В. Гавриленко // Северный регион: наука, образование, культура. Материалы I Всероссийской научно-практической конференции «Север России: стратегии и перспективы развития». — Сургут: Изд-во СурГУ, 2015. — С. 48–55.

8. *Галкин, В. А.* О моделировании динамики невзаимодействующих частиц с переменной во времени геометрией / В. А. Галкин, Т. В. Гавриленко, Д. А. Быковских // Тезисы докладов Международной конференции «Математика и информационные технологии в нефтегазовом комплексе», посвященная дню рождения великого русского математика академика П.Л. Чебышева. — Сургут: Изд-во ИЦ СурГУ, 2016. — С. 131—132.
9. *Быковских, Д. А.* О моделировании идеального газа с переменной во времени геометрией / Д. А. Быковских, В. А. Галкин, Т. В. Гавриленко // Северный регион: наука, образование, культура. Материалы II Всероссийской научно-практической конференции «Север России: стратегии и перспективы развития». — Сургут: Изд-во СурГУ, 2016. — С. 19—24.
10. *Галкин, В. А.* Об управлении поведением идеального газа с переменной во времени геометрией / В. А. Галкин, Т. В. Гавриленко, Д. А. Быковских // Тезисы докладов XXI Всероссийской конференции «Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов для решения задач математической физики», посвященной памяти К.И. Бабенко. — М.: ИПМ им. М. В. Келдыша, 2016. — С. 74—75.
11. *Быковских, Д. А.* Модель фильтрации идеального газа в пористой среде / Д. А. Быковских // Материалы III Всероссийской конференции молодых ученых «Наука и инновации XXI века». — Сургут: Изд-во СурГУ, 2016. — С. 22—26.
12. *Быковских, Д. А.* Фильтрационная модель движения идеального газа в пористой среде / Д. А. Быковских, В. А. Галкин // Тезисы докладов XVII Международной конференции «Супервычисления и математическое моделирование». — Саров: ИПК ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2018. — С. 36—37.
13. *Быковских, Д. А.* Фильтрационная модель движения газа в пористой среде / Д. А. Быковских, В. А. Галкин // Тезисы докладов XXI Всероссийской конференции «Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов для решения задач математической физики», посвященной памяти К.И. Бабенко. — М.: ИПМ им. М. В. Келдыша, 2018. — С. 24—25.

14. *Быковских, Д. А.* Моделирование течения идеального бесстолкновительного газа в пористой среде методом Монте-Карло / Д. А. Быковских, В. А. Галкин // Труды Международной конференция «Математика и информационные технологии в нефтегазовом комплексе», посвященная дню рождения великого русского математика академика П.Л. Чебышева. — Самара: Изд-во ООО «Порто-принт», 2019. — С. 185—188.
15. *Быковских, Д. А.* О вычислительном тесте для модели адиабатического сжатия идеального бесстолкновительного газа / Д. А. Быковских, В. А. Галкин // Тезисы докладов Международной конференции «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики». — Новосибирск: ИПЦ НГУ, 2019. — С. 43.
16. *Быковских, Д. А.* Midges: Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016617287 / Д. А. Быковских, В. А. Галкин [и др.] — Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 29.06.2016 г.
17. *Быковских, Д. А.* Midges D3: Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016617145 / Д. А. Быковских, В. А. Галкин [и др.] — Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 28.06.2016 г.
18. *Гельфер, Я. М.* История и методология термодинамики и статистической физики / Я. М. Гельфер. — 2-е изд. — М. : Высш. школа, 1981. — 408 с.
19. *Веденяпин, В. В.* Кинетические уравнения Больцмана и Власова / В. В. Веденяпин. — М. : ФИЗМАТЛИТ, 2001. — 111 с.
20. *Эйнштейн, А.* Собрание научных трудов. Т. 3 / А. Эйнштейн. — М. : НАУКА, 1999. — 408 с.
21. *Smoluchowski, M.* Zur kinetischen Theorie der Brownschen Molekularbewegung und der Suspensionen / M. Smoluchowski // Annalen der Physik. — 1906. — Vol. 21, no. 14. — P. 756—780.
22. *Perrin, J.* Brownian Movement and Molecular Reality / J. Perrin, F. Soddy. — London : Taylor, Francis, 1910. — 97 с.
23. *Гиббс, Д. В.* Основные принципы статистической механики / Д. В. Гиббс. — М. : ОГИЗ, 1946. — 204 с.
24. *Liouville, J.* Note on the Theory of the Variation of Arbitrary Constants / J. Liouville // J. Math. Pure. Appl. — 1838. — Vol. 3. — P. 342—349.

25. *Биркгоф, Д. Д.* Динамические системы / Д. Д. Биркгоф. — Ижевск : Издательский дом «Удмуртский университет», 1999. — 408 с.
26. *Hopf, E.* On the Time Average Theorem in Dynamics / E. Hopf // Proc Natl Acad Sci USA. — 1932. — Vol. 18, no. 1. — P. 93–100.
27. *Крылов, Н. С.* Работы по обоснованию статистической физики / Н. С. Крылов. — М. : Академия Наук СССР, 1950. — 208 с.
28. *Синай, Я. Г.* Динамические системы с упругими отражениями. Эргодические свойства рассеивающих бильярдов / Я. Г. Синай // УМН. — 1970. — Т. 2, № 152. — С. 141–192.
29. *Бунимович, Л. А.* О бильярдах, близких к рассеивающим / Л. А. Бунимович // Матем. сб. — 1974. — Т. 94(136), 1(5). — С. 49–73.
30. *Лоскутов, А. Ю.* Основы теории сложных систем / А. Ю. Лоскутов, А. С. Михайлов. — М.-Ижевск : Институт компьютерных исследований, 2007. — 620 с.
31. *Гальперин, Г. А.* Биллиарды и хаос / Г. А. Гальперин, Н. И. Чернов. — М. : Знание, 1991. — 48 с.
32. *Поликарпов, С. А.* О периодических траекториях динамических систем : автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук : 01.02.01 / Поликарпов Сергей Алексеевич. — Москва, 2004. — 16 с.
33. *Чернов, Н. И.* Хаотические бильярды / Н. И. Чернов, Р. Маркарян. — М.-Ижевск : Ижевский институт компьютерных исследований, 2012. — 464 с.
34. *Cruz, J. P.* Comparative Study on Efficiency of Mirror Retroreflectors / J. P. Cruz, A. Plakhov // 30th Euro Mini-Conference. — New York: Springer, 2015. — P. 20–32.
35. Experimental investigations of chaos-assisted tunneling in a microwave annular billiard / R. Hofferbert [et al.] // Physical review. E. — 2005. — Vol. 71, no. 046201. — P. 1–21.
36. *Costa, D. R. da.* Dynamical and statistical properties of a rotating oval billiard / D. R. da Costa, D. F. Oliveira, E. D. Leonel // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. — 2014. — Vol. 19, no. 6. — P. 1926–1934.

37. *Fermi, E.* On the Origin of the Cosmic Radiation / E. Fermi // Phys. Rev. — 1949. — Vol. 75, no. 8. — P. 1169—1174.
38. *Заславский, Г. М.* Стохастичность динамических систем / Г. М. Заславский. — М. : Наука, 1984. — 272 с.
39. Fermi accelerator in atom optics / F. Saif [et al.] // Phys. Rev. A. — 1998. — Vol. 58, no. 6. — P. 4779—4783.
40. *Carvalho, R. E. de.* Fermi acceleration on the annular billiard: a simplified version / R. E. de Carvalho, F. C. de Souza, E. D. Leonel // J. of Physics A: Mathematical and General. — 2006. — Vol. 39, no. 14. — P. 3561—3573.
41. Бильярды с возмущаемыми границами и некоторые их свойства / А. Ю. Лоскутов [и др.] // Нелинейная динам. — 2010. — Т. 6, № 3. — С. 573—604.
42. *Gebhard, F.* Relaxation of ideal classical particles in a one-dimensional box / F. Gebhard, K. zu Münster // Ann. Phys. — 2011. — Vol. 523, no. 7. — P. 552—565.
43. Velocity distribution for quasistable acceleration in the presence of multiplicative noise / A. V. Kargovsky [et al.] // Phys. Rev. E. — 2013. — Vol. 87, no. 042133. — P. 1—8.
44. Leaky Fermi accelerators / K. Shah [et al.] // Phys. Rev. — 2015. — Vol. 91, no. 6. — P. 1—7.
45. *Наплеков, Д. М.* Минимальная модель ускорения Ферми / Д. М. Наплеков, А. В. Тур, В. В. Яновский // ЖТФ. — 2010. — Т. 80, № 5. — С. 11—22.
46. *Кошмаров, Ю. А.* Прикладная динамика разреженного газа / Ю. А. Кошмаров, Ю. А. Рыжов. — М. : Машиностроение, 1977. — 184 с.
47. Основы вакуумной техники / Б. И. Королев [и др.]. — М. : Энергия, 1975. — 416 с.
48. *Schen, C.* Rarefied Gas Dynamics / C. Schen. — Berlin : Springer-Verlag, 2005. — 406 p.
49. *Черняк, В. Г.* Кинетика разреженного газа / В. Г. Черняк. — СПб. : Лань, 2018. — 540 с.
50. *Ландау, Л. Д.* Статистическая физика. Т. 5 / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — 3-е изд. — М. : Мир, 1976. — 584 с.

51. *Фейнман, Р.* Фейнмановские лекции по физике. Т. 4 / Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс. — М. : Мир, 1976. — 257 с.
52. *Чернов, Н. И.* Динамика массивного поршня, погруженного в идеальный газ / Н. И. Чернов, Д. Л. Лебовиц, Я. Г. Синай // УМН. — 2002. — Т. 57, 6(348). — С. 3—86.
53. *Васькин, В. В.* Статистическая механика нелинейных динамических систем / В. В. Васькин, Н. Н. Ердакова, И. С. Мамаев // Нелинейная динам. — 2009. — Т. 5, № 3. — С. 385—402.
54. *Козлов, В. В.* Кинетика бесстолкновительного газа: выравнивание температуры, возрастание грубой энтропии и парадокс Гиббса / В. В. Козлов // Нелинейная динам. — 2009. — Т. 5, № 3. — С. 377—383.
55. *Lorentz, H. A.* The Motion of Electrons in Metallic Bodies / H. A. Lorentz // KNAW. — 1905. — Vol. 7. — P. 438—453.
56. *Haviland, J. K.* Application of the Monte Carlo Method to Heat Transfer in a Rarefied Gas / J. K. Haviland, M. L. Lavin // Physics of Fluids. — 1962. — Vol. 5. — P. 1399—1405.
57. *Wu, Y.-S.* Steady and Transient Analytical Solutions for Gas Flow in Porous Media with Klinkenberg Effects / Y.-S. Wu, K. Pruess, P. Persoff // Transport in Porous Media. — 1998. — Vol. 32, no. 1. — P. 117—137.
58. *Маскет, М.* Течение однородных жидкостей в пористой среде / М. Маскет. — М. : НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2004. — 628 с.
59. *Белоцерковская, М. С.* Численное моделирование процессов фильтрации с использованием метода вложенных сеток : автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук : 05.13.18 / Белоцерковская Марина Сергеевна. — Москва, 2007. — 14 с.
60. *Леонтьев, Н. Е.* Основы теории фильтрации / Н. Е. Леонтьев. — 2-е изд. — М. : МАКС Пресс, 2017. — 88 с.
61. *Бахвалов, Н. С.* Осреднение процессов в периодических средах. Математические задачи механики композиционных материалов / Н. С. Бахвалов, Г. П. Панасенко. — М. : Наука, 1984. — 352 с.

62. *Ефимов, К. М.* Эргодические свойства газа Лоренца и близких к нему динамических систем : автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук : 01.01.05 / Ефимов Константин Михайлович. — Москва, 1984. — 85 с.
63. *Козлов, В. В.* Полиномиальные законы сохранения для газа Лоренца и газа Больцмана-Гиббса / В. В. Козлов // УМН. — 2016. — Т. 71, 2(428). — С. 81—120.
64. *Dettmann, C. P.* Diffusion in the Lorentz Gas / C. P. Dettmann // Commun. Theor. Phys. — 2014. — Vol. 62, no. 4. — P. 521—540.
65. *Zeitz, M.* Active Brownian particles moving in a random Lorentz gas / M. Zeitz, K. Wolff, H. Stark // Eur. Phys. J. E. — 2017. — Vol. 40, no. 23. — P. 1—10.
66. Rough boundary effect in thermal transport: A Lorentz gas model / H. Chen [et al.] // Phys. Rev. E. — 2018. — Vol. 98. — P. 1—6.
67. *Никольский, А. А.* Простейшие точные решения уравнения Больцмана для движений разжженного газа / А. А. Никольский // Докл. АН СССР. — 1963. — Т. 151, № 2. — С. 299—301.
68. *Коган, М. Н.* Динамика разреженного газа / М. Н. Коган. — М. : Наука, 1967. — 440 с.
69. *Соболь, И. М.* Численные методы Монте-Карло / И. М. Соболь. — М. : НАУКА, 1973. — 312 с.
70. *Марчук, Г. И.* Метод Монте-Карло в атмосферной оптике / Г. И. Марчук, Г. А. Михайлов. — М. : Наука, 1976. — 145 с.
71. *Hall, A.* On an experiment determination of π / A. Hall // Messeng. Math. — 1873. — No. 2. — P. 113—114.
72. *Metropolis, N.* The Monte-Carlo method / N. Metropolis, S. Ulam // J. Amer. Stat. Assoc. — 1949. — Vol. 44, no. 247. — P. 335—341.
73. *Хлопков, Ю. И.* Статистическое моделирование в вычислительной аэродинамике / Ю. И. Хлопков. — М. : ООО «Азбука-2000», 2006. — 158 с.
74. *Дарьин, Н. А.* Конечно-разностный метод решения уравнений газовой динамики с использованием адаптивных сеток, динамически связанных с решением / Н. А. Дарьин, В. И. Мажукин, А. А. Самарский // ЖВ-МиМФ. — 1988. — Т. 28. — С. 1210—1225.

75. *Четверушкин, Б. Н.* Кинетически-согласованные схемы в газовой динамике / Б. Н. Четверушкин. — М. : МГУ, 1999. — 232 с.
76. *Белоцерковский, О. М.* Статистический метод частиц в ячейках для решения задач динамики разреженного газа. I. Основы построения метода / О. М. Белоцерковский, В. Е. Яницкий // ЖВМиМФ. — 1975. — Т. 15. — С. 1195—1208.
77. *Нурлыбаев, Н. А.* Метод дискретных скоростей для решения уравнения Больцмана / Н. А. Нурлыбаев // ЖВМиМФ. — 1992. — Т. 32. — С. 1829—1834.
78. *Иванов, М. С.* Сравнительный анализ алгоритмов метода прямого статистического моделирования в динамике разреженного газа / М. С. Иванов, С. В. Рогазинский // ЖВМиМФ. — 1988. — Т. 28. — С. 1058—1070.
79. *Davis, D. H.* Monte Carlo Calculation of Molecular Flow Rates through a Cylindrical Elbow and Pipes of Other Shapes / D. H. Davis // J. Appl. Phys. — 1960. — Vol. 31, no. 7. — P. 1169—1176.
80. *Alder, B. J.* Phase Transition for a Hard Sphere System / B. J. Alder, T. E. Wainwright // J. Chem. Phys. — 1957. — Vol. 27. — P. 1208—1209.
81. *Шидловский, В. П.* Вычислительные методы в динамике разреженных газов / В. П. Шидловский. — М. : МИР, 1969. — 277 с.
82. *Берд, Г.* Молекулярная газовая динамика / Г. Берд. — М. : Мир, 1981. — 321 с.
83. *Хлопков, Ю. И.* Прямое статистическое моделирование эволюции вихревой системы в разреженном газе / Ю. И. Хлопков, И. В. Воронич, О. И. Ровенская // Матем. моделирование. — 2007. — Т. 19. — С. 39—47.
84. *Иванов, М. С.* Экономичные схемы прямого статистического моделирования течений разреженного газа / М. С. Иванов, С. В. Рогазинский // Матем. моделирование. — 1989. — Т. 1, № 7. — С. 130—145.
85. *Koura.* A sensitive test for accuracy in evaluation of molecular collision number in the direct-simulation Monte Carlo method / Koura // Physics of Fluids A: Fluid Dynamics. — 1990. — Vol. 2, no. 7. — P. 1287—1289.
86. Analysis of Numerical Errors in the DSMC Method / D. A. Fedosov [et al.] // AIP Conference Proceedings. — 2005. — Vol. 762, no. 1. — P. 589—594.

87. *Никонов, В. В.* Модификация метода Монте-Карло (модель мягких ядер) для прямого моделирования течения разреженного газа / В. В. Никонов // Известия Самарского научного центра РАН. — 2018. — Т. 20, № 1. — С. 78—81.
88. *Von Neumann, J.* Various techniques used in connection with random digits / J. Von Neumann // NBS Appl. Math. Ser. — 1951. — Vol. 12. — P. 36—38.
89. *Matsumoto, M.* Mersenne Twister: A 623-Dimensionally Equidistributed Uniform Pseudo-Random Number Generator / M. Matsumoto, T. Nishimura // ACM Trans. Model. Comput. Simul. — 1998. — Vol. 8, no. 1. — P. 3—30.
90. *Бусленко, Н. П.* Метод статистических испытаний (Монте-Карло) и его реализация на цифровых вычислительных машинах / Н. П. Бусленко, Ю. А. Шрейдер. — М. : ФИЗМАТЛИТ, 1961. — 228 с.
91. Вопросы построения программных систем оценки качества стохастических алгоритмов / А. О. Прокофьев [и др.] // Physics of Fluids. — 1962. — Т. 12, № 3—1. — С. 169—178.
92. *Велихов, Е. П.* Промышленность, инновации, образование и наука в Российской Федерации / Е. П. Велихов, В. Б. Бетелин // Вестник РАН. — 2008. — Т. 78, № 5. — С. 500—508.
93. Список 500 лучших суперкомпьютеров. — URL: <https://www.top500.org/lists/2019/06/> (дата обр. 18.07.2019).
94. *Четверушкин, Б. Н.* Кинетические модели и высокопроизводительные вычисления / Б. Н. Четверушкин, В. И. Савельев // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. — 2015. — № 79. — С. 1—31.
95. *Бондаренко, А. А.* Оптимальное сохранение контрольных точек на локальные устройства хранения / А. А. Бондаренко, М. В. Якововский // Труды международной конференции «Суперкомпьютерные дни в России». — М.: Издательство Московского университета, 2015. — С. 288—293.
96. *Бондаренко, А. А.* Координированное сохранение контрольных точек с журналированием передаваемых данных и асинхронное восстановление расчетов после отказов / А. А. Бондаренко, П. А. Ляхов, М. В. Якововский // Труды международной конференции «Суперкомпьютерные дни в России». — М.: Издательство Московского университета, 2018. — С. 694—704.

97. *Киселев, А. В.* Оптимальный период записи контрольной точки для длительных вычислительных задач / А. В. Киселев // Труды международной конференции «Суперкомпьютерные дни в России». — М.: Издательство Московского университета, 2016. — С. 694—704.
98. *Elnozahy, E.* Checkpointing for Petascale systems: a look into the future of practical rollback-recovery / E. Elnozahy, J. Plank // IEEE Transactions on Dependable and Secure Computing. — 2004. — Vol. 1, no. 2. — P. 97—108.
99. *Касперски, К.* Техника оптимизации программ. Эффективное использование памяти / К. Касперски. — СПб. : БХВ-Петербург, 2003. — 464 с.
100. *Суков, С. А.* Переносимое решение для моделирования сжимаемых течений на всех существующих гибридных суперкомпьютерах / С. А. Суков, А. В. Горобец, П. Б. Богданов // Матем. моделирование. — 2017. — Т. 29, № 8. — С. 3—16.
101. *Смирнов, Г. С.* Как быстрее всего решать задачи квантового и классического атомистического моделирования, используя современное суперкомпьютерное программное и аппаратное обеспечение? / Г. С. Смирнов, В. В. Стегайлов // Труды международной конференции «Суперкомпьютерные дни в России». — М.: Издательство Московского университета, 2015. — С. 215—225.
102. *Горобец, А. В.* Параллельные технологии математического моделирования турбулентных течений на современных суперкомпьютерах : автореф. дис. . . . д-ра физ.-мат. наук : 05.13.18 / Горобец Андрей Владимирович. — Москва, 2015. — 35 с.
103. *Воеводин, В. В.* Параллельные вычисления / В. В. Воеводин, В. В. Воеводин. — СПб. : БХВ-Петербург, 2002. — 608 с.
104. *Хир, К.* Статистическая механика, кинетическая теория и стохастические процессы / К. Хир. — М. : МИР, 1976. — 600 с.
105. *Колмогоров, А. Н.* Основные понятия теории вероятностей / А. Н. Колмогоров. — М. : Наука, 1974. — 120 с.
106. *Галкин, В. А.* Анализ математических моделей: системы законов сохранения, уравнения Больцмана и Смолуховского / В. А. Галкин. — М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. — 408 с.

107. *Черчиньяни, К.* Математические методы в кинетической теории газов / К. Черчиньяни. — М. : Мир, 1973. — 246 с.
108. *Хаппуль, Д.* Гидродинамика при малых числах Рейнольдса / Д. Хаппуль, Г. Бреннер. — М. : МИР, 1976. — 632 с.
109. *Циссарж, В. В.* Математические методы компьютерной графики / В. В. Циссарж, Р. И. Марусик. — К. : ФАКТ, 2004. — 464 с.
110. *Ширяев, А. Н.* Вероятность. Т. 1 / А. Н. Ширяев. — 3-е изд. — М. : МЦНМО, 2004. — 520 с.
111. *Кац, М.* Статистическая независимость в теории вероятностей, анализе и теории чисел / М. Кац. — М. : Изд. иностранной литературы, 1963. — 156 с.
112. *Вентцель, Е. С.* Теория вероятностей / Е. С. Вентцель. — М. : Высш. шк., 1999. — 576 с.
113. *Крянев, А. В.* Метрический анализ и обработка данных / А. В. Крянев, Г. В. Лукин, Д. К. Удумян. — М. : ФИЗМАТЛИТ, 2012. — 308 с.
114. *Франк-Каменецкий, А. Д.* Моделирование траекторий нейтронов при расчете реакторов методом Монте-Карло / А. Д. Франк-Каменецкий. — М. : Атомиздат, 1978. — 96 с.
115. *Головченко, Е. Н.* Декомпозиция расчетных сеток для решения задач механики сплошных сред на высокопроизводительных вычислительных систем : дис. . . . канд. физ.-мат. наук : 05.13.18 / Головченко Евдокия Николаевна. — Москва, 2014. — 165 с.
116. *Bik, A. J.* The Software Vectorization Handbook: Applying Intel Multimedia Extensions for Maximum Performance / A. J. Bik. — California : Intel Press, 2004. — 300 p.
117. *Fog, A.* Instruction tables: Lists of instruction latencies, throughputs and micro-operation breakdowns for Intel, AMD and VIA CPUs [Электронный ресурс] / A. Fog. — 2019. — URL: https://www.agner.org/optimize/instruction_tables.pdf (дата обр. 13.09.2019).
118. *Robertson, M. A.* Brief History of InvSqrt / M. A. Robertson. — Department of Computer Science, Applied Statistics, 2012. — 48 p.

119. *Весницкий, А. И.* Волны в системах с движущимися границами и нагрузками / А. И. Весницкий. — М. : ФИЗМАТЛИТ, 2001. — 320 с.
120. *Сидоров, А. Ф.* Избранные труды: Математика. Механика / А. Ф. Сидоров. — М. : ФИЗМАТЛИТ, 2001. — 576 с.
121. *Черный, Г. Г.* Газовая динамика / Г. Г. Черный. — М. : Наука, 1988. — 424 с.
122. *Banks, J.* Handbook of simulation: principles, methodology, advances, applications, and practice / J. Banks. — New York : Wiley, 1998. — 849 p.
123. *Sibuya, M.* A method for generating uniformly distributed points on N-dimensional spheres / M. Sibuya // Ann Inst Stat Math. — 1962. — Vol. 14, no. 1. — P. 81–85.
124. *Marsaglia, G.* Choosing a point from the surface of a sphere / G. Marsaglia // Ann Math Stat. — 1972. — Vol. 43, no. 2. — P. 645–646.
125. *Копытов, Н. П.* Равномерное распределение точек на поверхностях и его применение в исследованиях структурно-неоднородных сред : дис. . . . канд. физ.-мат. наук : 05.13.18 / Копытов Никита Павлович. — Екатеринбург, 2015. — 121 с.
126. *Крамер, Г.* Математические методы статистики / Г. Крамер. — 2-е изд. — М. : МИР, 1975. — 648 с.

Приложение А

Описание структуры комплекса программ «Midges»

Таблица А.1

Структура расположения каталогов и файлов комплекса программ «Midges»

| Директория | Назначение |
|-------------------|---|
| / | В корне директории расположены исполняемые файлы, предназначенные для сборки программ и выполнения различных задач (*.sh) |
| /settings | В директории содержатся заголовочные и исполняемые файлы с настройками (*.h, *.sh) |
| /include | В директории расположены заголовочные файлы (*.h) |
| /src | Подкаталоги этой директории содержат файлы с исходными кодами (*.c) |
| /seq | Последовательная версия |
| /par | Векторизованная версия |
| /extra | Визуализация данных и вычисление статистических оценок макроскопических параметров |
| /bin | В директории расположен комплекс программ |
| /data | В директории содержатся данные, полученные в процессе расчетов программ |
| /phase_space | Фазовое пространство (*.mps; binary) |
| /pictures | Изображения (*.png) |
| /statistical_data | Суммы параметров частиц (*.msd; binary) |
| /thermodynamics | Статистические оценки макроскопических величин (*.dat, *.mmp) |
| /processing | В директории расположены программы, предназначенные для вычисления точного решения, построение графиков, расчет погрешностей, полученные результаты (таблицы, графики) и др. (*.py, *.png и т.д.) |

Приложение Б

Свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2016617287

Midges

Правообладатель: *Бюджетное учреждение высшего образования Ханты-Мансийского автономного округа – Югры «Сургутский государственный университет» (RU)*

Авторы: *Быковских Дмитрий Александрович (RU), Галкин Валерий Алексеевич (RU), Гавриленко Тарас Владимирович (RU), Бычин Игорь Валерьевич (RU), Гореликов Андрей Вячеславович (RU), Ряховский Алексей Васильевич (RU), Гавриленко Анна Владимировна (RU), Девицын Иван Николаевич (RU), Егоров Александр Алексеевич (RU), Дубовик Алексей Олегович (RU)*

Заявка № 2016614533

Дата поступления 04 мая 2016 г.

Дата государственной регистрации
в Реестре программ для ЭВМ 29 июня 2016 г.

Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

Г.П. Ивлиев Г.П. Ивлиев



РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2016617145

Midges D3

Правообладатель: *Бюджетное учреждение высшего образования Ханты-Мансийского автономного округа - Югры «Сургутский государственный университет» (RU)*

Авторы: *Быковских Дмитрий Александрович (RU), Галкин Валерий Алексеевич (RU), Гавриленко Тарас Владимирович (RU), Бычин Игорь Валерьевич (RU), Гореликов Андрей Вячеславович (RU), Ряховский Алексей Васильевич (RU), Гавриленко Анна Владимировна (RU), Девицын Иван Николаевич (RU), Егоров Александр Алексеевич (RU), Дубовик Алексей Олегович (RU)*

Заявка № 2016614531

Дата поступления 04 мая 2016 г.

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ 28 июня 2016 г.



Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

Г.П. Ивлиев Г.П. Ивлиев