



## بیست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

### بررسی راهکردی برای کاهش مدت زمان اجرای کد برنامه DSMC برای شبیه سازی یک سانتریفیوژ در ابعاد واقعی

صادق یوسفی نسب\*، عبدالحمید مینوچهر، احمدرضا ذوالفقاری، علی نوروزی  
دانشگاه شهید بهشتی، دانشکده مهندسی هسته‌ای، گروه راکتور

#### چکیده:

یک روش برای شبیه‌سازی یک مجموعه ذراتی که از معادله بولتزمن تبعیت می‌کنند تکنیک DSMC می‌باشد. ذرات درون هر شبکه سلولی که برای سلول بندی کل حجم فضای نمونه تعیین شده‌اند به طور متوالی در امتداد یک مسیر خطی پیشروی می‌کنند و سپس برای برخورد با دیوارها و برخورد با یکدیگر چک می‌شوند و پس از گذشت زمان کافی، توزیع نهایی مولکول‌ها در داخل محیط مورد نظر به دست می‌آید. تعداد مناسب برخوردهای درون یک سلول متناسب با نسبت برخورد، دانسیته ذرات، و بازه زمانی محاسبه می‌گردد. با توجه به اینکه حجم محاسباتی در کد مورد استفاده شده در روش DSMC و همچنین مدت زمان مورد نیاز برای بدست آوردن نتایج مطلوب، بسیار زمانبر می‌باشد در این مقاله از تکنیکی استفاده گردیده است که این مقدار زمانی مورد نیاز را به حدود یک چهارم زمان اولیه کاهش خواهد داد.

#### مقدمه

یک مدل دینامیک گاز به دو طریق می‌تواند مورد ارزیابی قرار گیرد، یکی تقریب پیوسته ناویراستوکس و دیگری محاسبات گسسته دینامیک مولکولی. گرچه یک تقریب ناویراستوکس خیلی بیشتر از لحاظ محاسباتی، به صرفه‌تر نسبت به محاسبات دینامیک مولکولی می‌باشد، اما می‌بایست اعتبار هر دو روش بر اساس فیزیک سیستم شبیه‌سازی شده، مورد ارزیابی قرار گیرند. خوشبختانه روش DSMC یک پیشنهاد دیگری برای شبیه‌سازی یک گاز رقیق است. این روش از یک نظر محاسباتی، دینامیک مولکولی را مورد شبیه‌سازی قرار می‌دهد و از نظر دیگر یک روش مونت کارلو برای حل معادلات غیرخطی وابسته به زمان بولتزمن می‌باشد. نسبت به محاسبات دقیق برخورد بصورت دینامیک مولکولی، روش DSMC نیز برخوردهای تصادفی از نوع الاستیک و توزیع سرعت‌های بعد از برخورد مشخص شده از تئوری جنبشی یک گاز رقیق را ایجاد می‌کند [۱]. در ابتدا برای ذرات یک موقعیت تصادفی اختیار می‌گردد. سرعت، مختصات مکانی و انرژی درونی هر یک از مولکول‌ها در کامپیوتر ذخیره می‌شود و با حرکت



## بیست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

مولکولها در طی زمان عوض می‌شود. پس در این روش با توجه به سرعت هر مولکول و اندازه گام زمانی، مقدار جابجایی ذرات و در نتیجه مختصات جدید آنها بدست می‌آید [۲] و در انتها، کمیت‌های ماکروسکوپی از قبیل سرعت متوسط و دما بعد از نمونه‌گیری از سلول‌بندی‌های صورت گرفته و میانگین‌گیری از آنها قابل محاسبه می‌باشند. از آنجایی که مقدار بازه‌زمانی می‌بایستی از متوسط زمان برخورد ذرات کمتر باشد لذا بدست آوردن یک بازه‌زمانی مناسب و ماکزیمم مقدار آن بسیار حائز اهمیت می‌باشد. Pradhan و Kumaran با استفاده از سرعت متوسط مولکولی و Mean Free Path در نزدیک دیواره توانستند یک مقدار مناسب برای بازه‌زمانی بدست آورند [۳]. Macrossan نیز متناسب با روش‌های برخورد ذرات، یک بازه‌زمانی مناسب برای کاهش زمان مورد نیاز ارائه کرد [۴]. Jong-Shinn Wu نیز با استفاده از بازه‌های زمانی متغیر، توانست راه‌کردی برای کاهش مدت زمان مورد نیاز ارائه دهد [۵]. روش موازی کردن کد برنامه، روشی بسیار کارآمد در کاهش مدت زمان مورد برای رسیدن به نتایج حالت پایدار می‌باشد ولی این روش زمانی کار آمد می‌باشد که قسمت‌هایی از برنامه که قرار است بطور جداگانه هر کدام اجرا و در انتها با یکدیگر اسمبل گردند به یکدیگر ارتباطی نداشته باشند در صورتی که کد برنامه DSMC دارای این شرط نبوده و هر قسمت از برنامه اجرایی آن به یکدیگر مرتبط می‌شوند پس متأسفانه این روش مورد استفاده واقع نمی‌گیرد و یا اینکه بدست آوردن تکنیکی برای پیاده‌سازی این روش بسیار مشکل‌ساز و دردسر-ساز می‌باشد، به همین دلیل در این مقاله روشی دیگر برای کاهش این مدت زمان مورد نیاز استفاده گردیده است.

### روش عددی (راه‌کردهای محاسبه بازه‌زمانی بهینه)

(۱) روش اول: حالت کلی برای انتخاب یک بازه‌زمانی مناسب، در نظر گرفتن مقدار بازه‌زمانی در یک محدوده  $10^{-10} < dt < 10^{-4}$  متناسب با میزان هدف مورد نظر می‌باشد [۶].

(۲) روش دوم: اگر گاز مورد بررسی در یک فضای استوانه‌ای، گاز آرگون و هلیوم، در نظر بگیریم، در این روش ابتدا لازم است که مقدار  $\lambda$  را بدست آورده که همان Mean Free Path در دیواره می‌باشد: [۷]

$$\lambda = \frac{V}{\sqrt{2}N\pi d^2} \quad (1) \quad , \quad \rho_w = \frac{M}{V} \Rightarrow \lambda = \frac{M}{\sqrt{2} \times \pi \times \rho_w \times d^2} \quad (2)$$

بازه‌زمانی متناسب با زمان بین برخوردها کوچک انتخاب می‌شود. میانگین زمان برخورد از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$t_{av} = \frac{\lambda}{C_{av}} \quad (3) \quad , \quad C_{av} = \sqrt{\frac{KTg}{M}} \quad (4)$$

درجه کلویین و ثابت بولتزمن برابر  $1.38 \times 10^{-23}$ ، مقدار  $\lambda$  برابر با  $2.316742 \times 10^{-7}$  m بدست می‌آید. متوسط سرعت مولکولی برابر  $17717 \text{ms}^{-1}$  می‌گردد. این روابط مقدار متوسط زمان برخورد را برابر  $2/752221 \times 10^{-9}$  s بدست می‌آورند. حال می‌بایستی مقدار بازه‌زمانی مورد استفاده در شبیه‌سازی، کمتر از این مقدار متوسط زمان



## بیست و یکمین کنفرانس هسته‌ای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

برخورد باشد لذا این مقدار را بر عدد ۵/۵ تقسیم کرده تا بتوان این مقدار را به اندازه‌ی بیش از ۵ برابر متوسط زمان برخورد کاهش داد، لذا مقدار بازه‌زمانی برابر  $10^{-10} \times 5$  می‌گردد.

۳) روش سوم: روش دیگر بدست آوردن بازه‌زمانی، استفاده از روش بازه‌متغیر می‌باشد [۸]. در این روش مقدار مربوط به بازه‌زمانی کاملاً بستگی به نوع روش برخوردی دارد که در شبیه‌سازی از آنها استفاده می‌شود. مدل‌های مورد بررسی در شبیه‌سازی استفاده شده، سه مدل HS و VHS و VSS می‌باشد. چونکه مقدار بازه‌زمانی در هر روش برخورد مورد استفاده می‌بایستی از متوسط زمان برخورد کمتر باشد لذا در اینجا مقدار بازه‌زمانی در هر روش بطور مجزا محاسبه می‌گردد تا بتوان از کمتر بودن مقدار آن بازه، از متوسط زمان برخورد مطمئن شد. اگر از مدل HS استفاده گردد، مقدار متوسط سرعت حرارتی در حالت تعادل در گاز مورد استفاده برابر  $C_{mean} = \sqrt{\frac{\lambda K T g}{m \pi}}$  می‌باشد و مقدار m.f.p برای این روش برابر با  $\lambda_{hs} = knH$  می‌باشد که اگر از محیط استوانه‌ای در شبیه‌سازی استفاده گردد بجای H از Rmax استفاده می‌شود.  $kn$  عدد نادسن می‌باشد و خواهیم داشت:

$$\tau_{HS} = \frac{\lambda_{hs}}{C_{mean}} \quad (5)$$

و چونکه نمونه‌گیری از نتایج، می‌بایستی بعد از حداقل ۴ بازه‌زمانی انجام شود (این کار فرصت کافی را برای اطلاعات آماری که ذرات حمل می‌کنند فراهم می‌نماید) لذا برای بدست آوردن بازه‌زمانی کفایت که مقدار  $\tau_{HS}$  بر عدد ۴ تقسیم گردد. ولی در دو مدل VHS و VSS چونکه تنها تفاوت آنها در استفاده از پارامتر پراکندگی VSS می‌باشد لذا تفاوتی از لحاظ بازه‌زمانی ندارند و مقدار m.f.p برای این دو روش برابر است با:

چونکه در مدل VHS و VSS این مقدار  $\omega$  از ۰/۵ بزرگتر می‌باشد لذا مقدار  $Upsilon$  هم موجود و غیر صفر می‌باشد. (در مدل HS مقدار  $\omega$  برابر ۰/۵ می‌باشد). برای بدست آوردن بازه‌زمانی در دو مدل VHS و VSS روابط زیر موجودند:

بعد از بدست آوردن مقدار بازه‌زمانی، مقدار نهایی بازه‌زمانی در کل شبیه‌سازی از روابط زیر بدست می‌آید:

$$T_{steady} = \frac{N_{steady} \times R_{max}}{C_{mean}}, T_{limit} = \tau T_{steady}, \text{Maxstep} = \frac{T_{limit}}{dt} \quad (9)$$

که  $N_{steady}$  تعداد زمان‌های جریانی تا رسیدن به حالت پایدار می‌باشد که در اینجا برابر ۲۰ در نظر گرفته شده است. کافی است که  $\text{Maxstep}$  بدست آمده به سمت مثبت بی‌نهایت رند گردد تا مقدار ماکزیمم بازه‌زمانی در کل زمان اجرای شبیه‌سازی DSMC بدست آید. برای یک شعاع ماکزیمم  $m = 0.282$  و برای عدد نادسن ۰/۰۰۲ مقدار بازه-



# بیست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

زمانی برای مدل‌های برخورد VHS و VSS برابر  $10^{-7} \times 9762 \text{ sec}$  و برای مدل HS برابر مقدار  $10^{-6} \times 10527$  خواهد بود. یکی از مزایای استفاده از روش سوم این می‌باشد که مقدار بازه‌زمانی در هر روش برخورد استفاده شده بطور مجزا محاسبه می‌گردد تا بتوان از کمتر بودن مقدار آن بازه از متوسط زمان برخورد مطمئن شد. مزیت روش دوم در این می‌باشد که می‌توان به کوچک‌ترین مقدار لازم برای بازه‌زمانی (بدون در نظر گرفتن مقدار متوسط زمان برخورد در آن) مورد استفاده در شبیه‌سازی دست پیدا کرد. روش اول به هدف کاربر از میزان دقت مورد نیاز از اطلاعات خروجی بستگی دارد که بنابر میزان این دقت می‌توان مقدار بازه‌زمانی را انتخاب کرد. در شبیه‌سازی انجام گرفته در این مقاله، از روش سوم استفاده شده است.

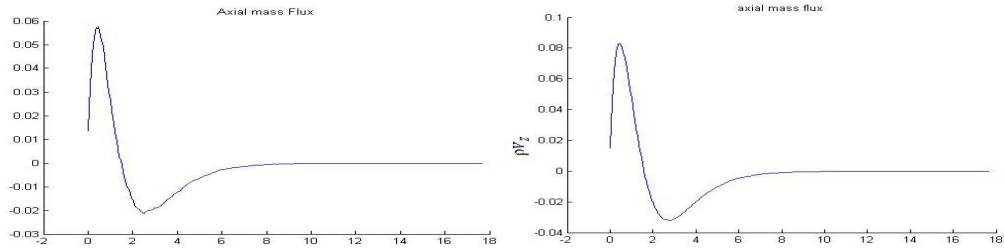
## نتایج

به دلیل اینکه بررسی روش DSMC برای رسیدن به جواب مطلوب نهایی می‌تواند بسیار وقت‌گیر و سنگین باشد، در این مقاله از تکنیکی استفاده شده است که زمان مورد نیاز را به بیش از چهار برابر زمان در حالت اولیه می‌توان کاهش داد. در حالت اول، کد نوشته شده توسط روش DSMC، برای هر ۱۰۰ بازه‌زمانی نمونه‌گیری شده و نتایج بعد از گذشت ۷۲۰ ساعت (۳۰ شبانه روز) فایل‌های بروزرسانی شده بدست آمده‌اند. همچنین هر ذره شبیه‌سازی شده نماینده  $3 \times 10^{16}$  مولکول واقعی (FN) شعاع استوانه  $9/49$  سانتیمتر و ارتفاع آن  $185$  سانتیمتر در نظر گرفته شده است. این شبیه‌سازی انجام گرفته معادل  $8/9$  ثانیه تحلیل یک استوانه دوار در حالت واقعی می‌باشد که این مدت زمانی، فرصت کافی برای به حالت پایدار رسیدن جریان را فراهم می‌سازد. حال در ادامه به معرفی تکنیک مورد استفاده برای کاهش زمان شبیه‌سازی پرداخته خواهد شد. روش کار به این طریق می‌باشد که در حالت اول، نسبت تعداد مولکول‌های واقعی به تعداد ذرات شبیه‌سازی شده برابر  $3 \times 10^{16}$  و تعداد ذرات موجود در محیط شبیه‌سازی برابر  $100000$  ذره می‌باشد. حال اگر برنامه اجرا گردد حدود ۲۰ درصد از CPU کامپیوتر را به خود اختصاص می‌دهد و از بقیه CPUها هیچ استفاده‌ای نمی‌گردد. لذا در این قسمت، برای اینکه از تمام CPUهای کامپیوتر استفاده گردد، (برای یک سیستم حداقل ۵ هسته‌ای) نسبت تعداد مولکول‌های واقعی به شبیه‌سازی شده را ۵ برابر کرده و از طرفی تعداد ذرات موجود در محیط شبیه‌سازی را  $20000$  ذره قرار می‌گیرد و این کار را برای ۵ برنامه جداگانه انجام داده و هر ۵ برنامه را بطور همزمان در یک سیستم اجرا و سپس نتایج حاصل می‌گردند. در این حالت دیگر هر ۱۰۰ درصد CPU در حال پردازش اطلاعات می‌باشند. سپس نتایج بدست آمده از هر ۵ برنامه اجرا شده را با هم میانگین‌گیری کرده و با این کار مقدار نویزهای بوجود آمده در هر یک از نتایج جداگانه، به مقدار زیادی کاهش پیدا می‌کنند. مشاهده شد که زمان حدود ۳۰ روزی مورد نیاز در حالت اول، با اعمال این تکنیک به حدود ۷ روز کاهش پیدا کرد و بعد از گذشت ۷ روز نتایجی تقریباً مشابه نتایج حالت اول حاصل می‌گردد. در اینجا برخی از نتایج بدست آمده از این تکنیک نشان داده شده است.

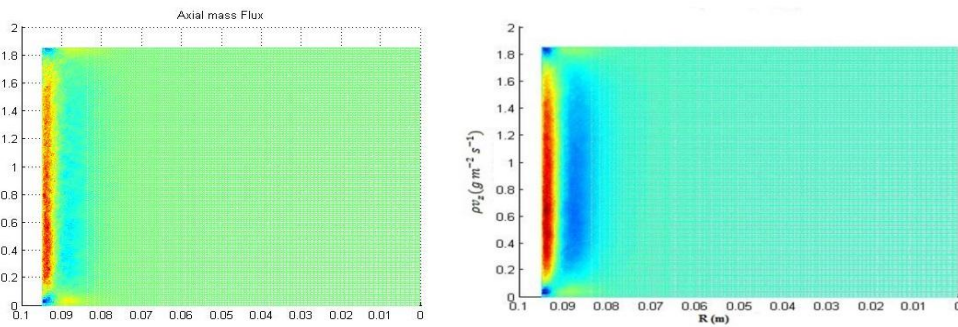


# بیست و یکمین کنفرانس هشتاد و یکم ایران

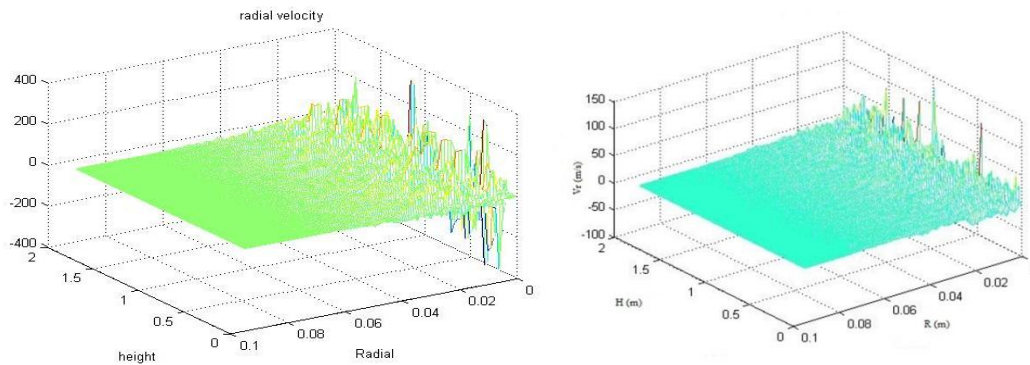
۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان



شکل ۱. نمودار شار جرمی محوری بر حسب مختصات شعاعی گسترده در حالت اول  
 شکل ۲. نمودار شار جرمی محوری بر حسب مختصات شعاعی گسترده با استفاده از تکنیک کاهش زمان



شکل ۲. نمای سه بعدی از شار جرمی محوری بر حسب شعاع در حالت اول  
 شکل ۳. شار جرمی محوری بر حسب شعاع با استفاده از تکنیک کاهش زمان

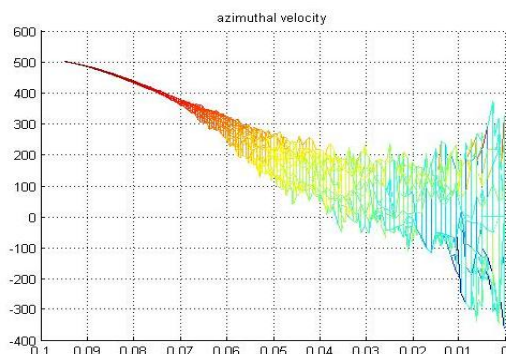


شکل ۴. پروفایل سرعت شعاعی بر حسب مختصات شعاعی در حالت اول  
 شکل ۵. پروفایل سرعت شعاعی بر حسب مختصات شعاعی با استفاده از تکنیک کاهش زمان

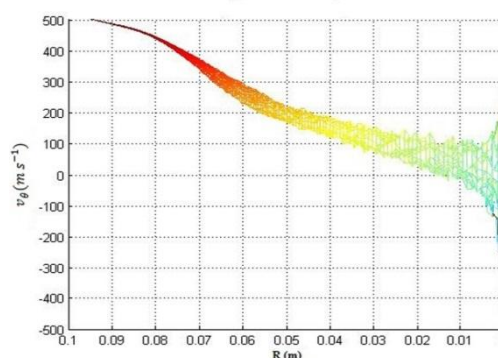


# بیست و یکمین کنفرانس هسته‌ای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان



شکل ۷. نمودار سرعت چرخشی بر حسب شعاع با استفاده از تکنیک کاهش زمان



شکل ۶. نمودار سرعت چرخشی بر حسب شعاع در حالت اول

## بحث و نتیجه گیری

با توجه به اینکه روش DSMC، روشی بسیار کارآمد در مدل‌سازی یک ساترفیوژ، برای بدست آوردن پروفایل‌های سرعت شعاعی، شار جرمی محوری، دانسیته و دما با استفاده از یک روش شبیه‌سازی به جای حل‌های تحلیلی می‌باشد و جریان غیر خطی گازها در مقیاس مولکولی با دقت خوبی مورد آنالیز قرار می‌گیرد، لذا می‌توان زمانبر بودن زمان اجرای کد برنامه آن تا رسیدن به یک حالت پایدار را از معایب آن در نظر گرفت که در این مقاله روشی را مورد بررسی قرار دادیم که می‌توان در مدت زمانی حدود یک چهارم زمان اولیه مورد نیاز آن، به نتایج مشابهی به حالت اول دست یافت.

## مراجع

- [1] Alexander, F.j. and A.L. Garcia, "The Direct Simulation Monte Carlo Method," Computers in Physics, Vol. 11, No. 6, Nov/Dec, PP. 1-3. 1997.
- [۲] ف. سادات صالحی، م. نصرت‌اللهی، "تحلیل و مقایسه روش‌های حل تحلیلی معادله بولتزمن و DSMC برای تعیین پارامترهای آبرو دینامیکی ماهواره در مدار LEO"، هفتمین همایش سالانه (بین‌المللی) انجمن هوافضای ایران، تهران، دانشگاه صنعتی شریف، ۳۰ بهمن - ۲ اسفند ۱۳۸۶.
- [3] S. Pradhan and V. Kumaran, "The generalized Onsager model for the secondary flow in a high-speed rotating cylinder," J. Fluid Mech., vol. 686, pp. 140-141, 2011.
- [4] M. N. Macrossan, "MATLAB codes for the DSMC calculation of Couette flow, using the variable-hard-sphere (VHS) collision model," University of Queensland, Department of Mechanical Engineering Report No. 2009/02, PP. 1-5. 2009.
- [5] Jong-Shinn Wu, Kun-Chang Tseng, Fu-Yuan Wu, "Parallel three-dimensional DSMC method using mesh refinement and variable time-step scheme," Department of Mechanical Engineering, PP. 5-8. accepted 3 July 2004.
- [6] J. Durivault, P. Louvet, *Etude theorique de l'ecoulement dans une centrifugeuse a countercurrent thermique*, Rapport CEA, R-4174, Commissariat a l'Energie Atomique France, PP. 3-4. 1976.



# بیست و یکمین کنفرانس هسته‌ای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

- [7] M. Hittinger, M. Holt, B. Soubbaramayer, C. Cortet, *Simulation of gas flow in front of the scoop of a gas centrifuge,* " In *The Proceedings of Fifth Workshop on Gases in Strong Rotation, Charlottesville, Virginia* (ed. H. G. Wood). pp. 515–532, 1983.
- [8] H. G. Wood, J. B. Morton, *Onsager's pancake approximation for the fluid dynamics of a gas centrifuge,* *J. Fluid Mech*, pp.101, 1–31,299-311, 1980.
- [9] H. Mikami, *Rotating supersonic flow about scoop inlet using an unsteady implicit technique,* *In The Proceedings of Fourth Workshop on Gases in Strong Rotation, Oxford* (ed. E. Ratz). pp. 94–112, 1981.