

УДК 510.67:554

О КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНЫХ МОДЕЛЯХ КОНВЕКЦИОННО-ДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ ПРИМЕСЕЙ

Рубцов С. Е., Павлова А. В., Савенков С. И.

ABOUT CELLULAR-AUTOMATIC MODELS OF CONVECTION-DIFFUSION
PROCESSES OF SUBSTANCES

Rubtsov S.E., Pavlova A.V., Savenkov S.I.

Kuban State University, Krasnodar, 350040, Russia

e-mail: rub_serg@mail.ru

Abstract. The work is devoted to cellular-automaton modeling of the substance diffusion and convection. Used approaches allow us to represent a complex process by a relatively simple transition functions and can serve as a supplement to the traditional models used to study the impurity transfer.

We constructed models of the single-component substance migration in terms of cellular automata for plane and spatial cases, which can be used in solving the environmental problems. Two dimensional CA with Margolus neighbourhood (TM diffusion), extended in three-dimensional space, is used as the basis for cellular-automaton model of impurity propagation in atmosphere. The classical model of the TM diffusion is supplemented by the elements that implement pollution transference by the wind and the obstacle avoidance of scattering impurities. The wording of the rules of movement and collision ensures that the laws of conservation of mass and momentum are valid.

We also created windows-based application that implements described CA-algorithms. Pulse and continual sources of impurity emission can be considered in the application, and it is possible to demonstrate results as the projection on one of the planes at the set distance from the source. In addition, we implemented the transition from Boolean values to the continuous distribution functions of the impurity concentration, which is done by averaging the values of the states of the cells using the user-defined proximity.

Keywords: cellular-automatic modeling, three-dimensional model, impurity, diffusion, transfer, obstruction

Введение

Решение широкого круга научных и практических задач связано с моделированием процессов течения и диффузии. Традиционно используемыми для описания указанных процессов в сплошной среде математическими инструментами являются диффузионное уравнение и уравнения Навье – Стокса, решаемые, как правило, с помощью численных методов. Клеточно-автоматное (КА) моделирование газовой динамики может расширить возможности изучения диффузионных и реакционных процессов в атмосфере и водной среде.

Интерес к КА моделям, общие принципы построения которых сформулированы в [1], особенно вырос в конце прошлого века с появлением моделей физико-химических процессов [2–6]. Кроме того, в работе [7] было обосновано соответствие так называемой “Gas-Lattice” уравнениям Навье – Стокса. На сегодняшний день дискретные модели, основанные на булевой алгебре, позволяют реализовать эффективные программные средства. И интерес к КА моделированию стимулируется как развитием вычислительной техники, так и широким использованием алгоритмов параллельного программирования.

Рубцов Сергей Евгеньевич, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры математического моделирования Кубанского государственного университета; e-mail: rub_serg@mail.ru.

Павлова Алла Владимировна, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры математического моделирования Кубанского государственного университета; e-mail: pavlova@math.kubsu.ru.

Савенков Сергей Иванович, студент кафедры математического моделирования Кубанского государственного университета; e-mail: kmm@fpm.kubsu.ru.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ и Администрации Краснодарского края (16-41-230175).

В различных научных областях используются результаты исследований в области миграции субстанций. Так, различные типы математических моделей используются для описания конвекционно-диффузионных процессов распространения загрязнений в водной и воздушной средах. Разработка моделей распространения загрязнителей, позволяющих оценить характер их пространственного и временного распределения, служит решению проблемы мониторинга экологической ситуации, а также прогноза загрязнения окружающей среды и последствий воздействия на экосистему. Модели диффузии и конвекции также могут быть применены для описания миграции субстанций в верхней мантии Земли у нижнего основания литосферных плит вдоль границы Мохоровичича. На сегодняшний день ведутся интенсивные исследования клеточно-автоматных моделей диффузионных процессов, область их применения продолжает расширяться [8–12].

Настоящая работа посвящена клеточно-автоматному моделированию диффузии и конвекции субстанций в атмосфере. Используемые подходы позволяют представить сложный процесс с помощью относительно простых функций перехода и могут служить дополнением к развитым в гидродинамике математическим моделям и хорошо зарекомендовавшим себя численным методам, традиционно применяемым для изучения миграции различных субстанций [13].

В основу клеточно-автоматной модели распространения примеси в атмосфере положена двумерная КА диффузия с окрестностью Марголуза (ТМ-диффузия) [14], распространенная на трехмерное пространство, к которой добавлены процессы переноса субстанций под действием ветра и взаимодействия с препятствиями (строения, неровности рельефа).

Клеточный автомат представляется множеством клеток дискретного пространства, каждой из которых в соответствие поставлен конечный автомат. Рассматриваются одинаковые конечные автоматы, определяемые множеством координат клеток, входных состояний, внутренних состояний и функцией перехода (локальным оператором).

1. Трехмерная ТМ-диффузия

Ранее авторами были реализованы двумерные клеточно-автоматные модели диффу-

зии субстанций [15] и течения жидкости при наличии препятствий и примесей [16].

КА-алгоритм диффузии может быть распространен на трехмерное пространство. Аналогично плоскому случаю, область пространства представляется клеточным массивом с множеством имен

$$M = \{(i, j, k) : i, j, k = 0, \dots, N\},$$

в котором выделяется два подмножества: имена с четными индексами

$$M' = \{(i, j, k) : i \bmod 2 = j \bmod 2 = k \bmod 2 = 0\}$$

и нечетными

$$M'' = \{(i, j, k) : i \bmod 2 = j \bmod 2 = k \bmod 2 = 1\}$$

индексами.

Шаблон

$$T(i, j, k) = \{(i, j, k), (i, j + 1, k), (i + 1, j + 1, k), (i + 1, j, k), (i, j, k + 1), (i, j + 1, k + 1), (i + 1, j + 1, k + 1), (i + 1, j, k + 1)\}$$

определяет для каждого имени $(i, j, k) \in M$ локальную конфигурацию, представляющую собой блок из восьми кубиков

$$S(i, j) = \{(u_1, (i, j, k)), (u_2, (i, j + 1, k)), (u_3, (i + 1, j + 1, k)), (u_4, (i + 1, j, k)), (u_5, (i, j, k + 1)), (u_6, (i, j + 1, k + 1)), (u_7, (i + 1, j + 1, k + 1)), (u_8, (i + 1, j, k + 1))\},$$

как это показано на рис. 1.

КА функционирует в синхронном двухтактном режиме. Каждая итерация подразделяется на два такта. На четных тактах базовая подстановка применяется к четным блокам, на нечетных — к нечетным.

Подстановка выполняет поворот состояний в клетках блока вокруг одной из трех осей с вероятностью p по часовой стрелке и с вероятностью $(1 - p)$ — против часовой стрелки. Для определения оси поворота в каждую подстановку вводится контекстная клетка (x_q, m_q) , для вычисления направления поворота блока состояний — контекстная клетка (x_p, m_p) , а управления чередованием четного и нечетного тактов — (x_t, m_t) . При этом вероятность выбора осей X или Y

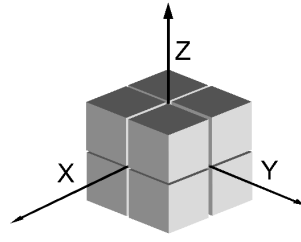
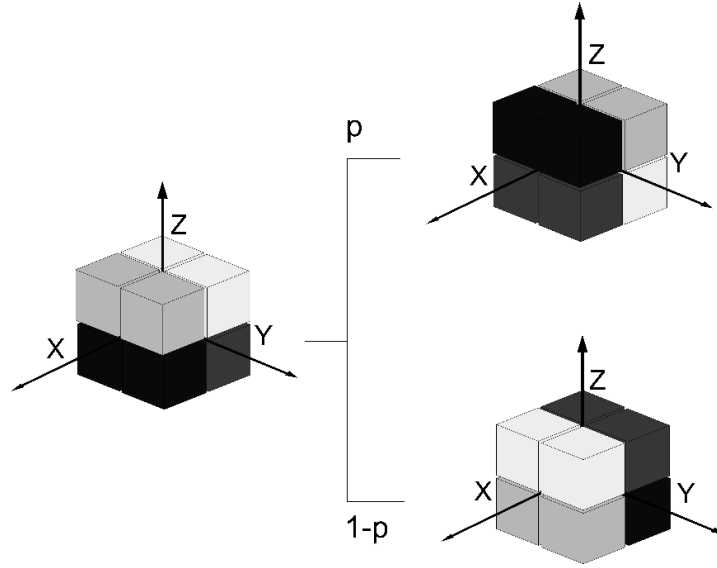


Рис. 1. Представление блока в пространстве

Рис. 2. Базовая подстановка: вращение осуществляется относительно оси Y

меньше, чем оси Z , так как в атмосферных процессах коэффициент диффузии в горизонтальной плоскости превышает аналогичный коэффициент по вертикальной оси (рис. 2).

Полная система подстановок имеет довольно громоздкий вид. Ниже приведены подстановки, отвечающие рис. 2 для четного подмножества имен, и контекстные подстановки

$$\begin{aligned} \Theta_3 : & \{ (u_1, (i, j, k)), (u_2, (i, j + 1, k)), \\ & (u_3, (i + 1, j + 1, k)), (u_4, (i + 1, j, k)), \\ & (u_5, (i, j, k + 1)), (u_6, (i, j + 1, k + 1)), \\ & (u_7, (i + 1, j + 1, k + 1)), (u_8, (i + 1, j, k + 1)) \} * \\ & * \{ (Y, m_q), (0, m_p), (0, m_t) \} \rightarrow \\ & \rightarrow \{ (u_4, (i + 1, j, k)), (u_3, (i + 1, j + 1, k)), \\ & (u_7, (i + 1, j + 1, k + 1)), (u_8, (i + 1, j, k + 1)), \\ & (u_1, (i, j, k)), (u_2, (i, j + 1, k)), \\ & (u_6, (i, j + 1, k + 1)), (u_5, (i, j, k + 1)) \}; \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \Theta_4 : & \{ (u_1, (i, j, k)), (u_2, (i, j + 1, k)), \\ & (u_3, (i + 1, j + 1, k)), (u_4, (i + 1, j, k)), \\ & (u_5, (i, j, k + 1)), (u_6, (i, j + 1, k + 1)), \\ & (u_7, (i + 1, j + 1, k + 1)), (u_8, (i + 1, j, k + 1)) \} * \\ & * \{ (Y, m_q), (1, m_p), (0, m_t) \} \rightarrow \\ & \rightarrow \{ (u_5, (i, j, k + 1)), (u_6, (i, j + 1, k + 1)), \\ & (u_1, (i, j, k)), (u_2, (i, j + 1, k)), \\ & (u_8, (i + 1, j, k)), (u_7, (i + 1, j + 1, k + 1)), \\ & (u_3, (i + 1, j + 1, k)), (u_4, (i + 1, j, k)) \}; \end{aligned}$$

$$\Theta_q : (x, m_q) \rightarrow (\alpha_q, m_q);$$

$$\Theta_p : (x, m_p) \rightarrow (\alpha_p, m_p);$$

$$\Theta_t : (x, m_t) \rightarrow (\alpha_t, m_t),$$

$$\alpha_p = \begin{cases} 1, & \text{rand} < p; \\ 0, & \text{rand} \geq p, \end{cases}$$

$$\alpha_t = \begin{cases} 1, & (i, j) \in M'; \\ 0, & (i, j) \in M'', \end{cases}$$

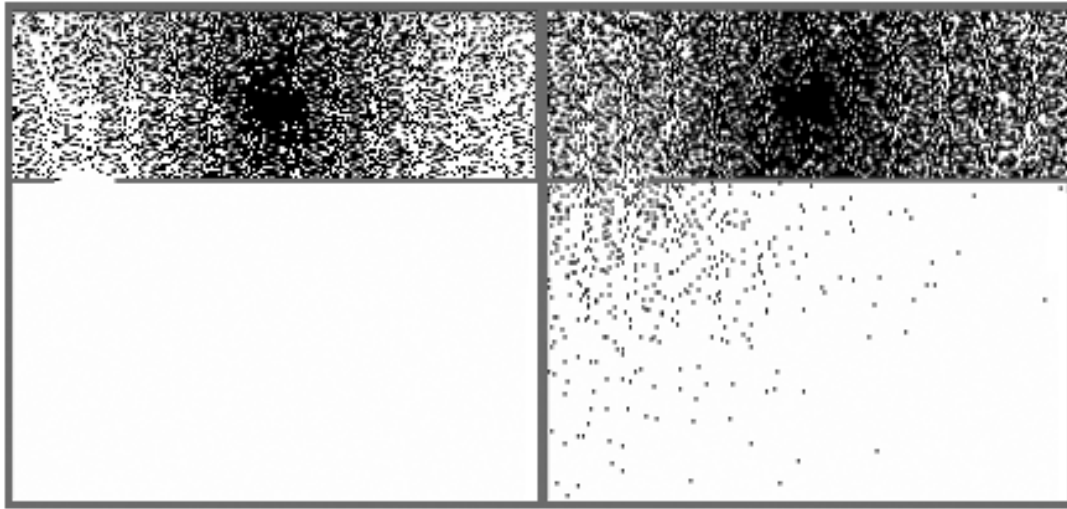


Рис. 3. Миграция субстанции при наличии препятствий

$$\alpha_q = \begin{cases} X, & \text{rand} < q; \\ Y, & q \leq \text{rand} < 2q; \\ Z, & \text{rand} \geq 2q, \end{cases}$$

$$\left(q \leq \frac{1}{3} \right).$$

Остальные подстановки записываются аналогично. Формулировка правил перемещения и столкновения обеспечивает выполнение законов сохранения массы и импульса.

2. Моделирование процесса диффузии при наличии препятствий

Для реализации обхода препятствий рассеивающейся примесью принят следующий подход.

В классическую модель ТМ-диффузии наряду с массивом состояния атмосферы $U(i, j, k)$, элементы которого принимают значения 0 или 1 (отсутствие, наличие примеси соответственно), для описания расположения на клеточно-автоматной решётке препятствия введен массив $P(i, j, k)$ с аналогичными значениями элементов: 0 — отсутствие препятствия, 1 — наличие.

КА функционирует в синхронном четырехтактном режиме. Как и в классическом случае, после выбора оси вращения все блоки четного разбиения массива $U(i, j, k)$ на первом такте с заданными вероятностями p и $1 - p$ поворачиваются на $\pi/2$ соответственно по часовой стрелке или против часовой стрелки.

На втором такте значения элементов массива $U(i, j, k)$ сравниваются с соответствующими значениями элементов $P(i, j, k)$ и в случае, если $U(i, j, k) = P(i, j, k) = 1$, осуществляется обратный поворот блока, содержащего клетку (i, j, k) . Тот же алгоритм реализован для блоков нечетного разбиения на третьем и четвертом тактах.

На рис. 3 представлены результаты 2D-моделирования рассеяния субстанции при наличии в среде внутреннего препятствия. В расчетах использовались следующие значения входных параметров: двумерный КА; источник постоянной мощности; границы области отражают примесь, вероятность $p = 1/2$.

3. Моделирование переноса субстанций (ветра)

При отсутствии препятствий перенос можно осуществить синхронным сдвигом состояний клеток массива $U(i, j, k)$ вдоль координатных осей с вероятностью, пропорциональной соответствующим компонентам вектора скорости ветра. Указанный сдвиг добавляется третьим тактом к ТМ-диффузии. Основной проблемой в этом случае является выбор коэффициента пропорциональности.

При наличии препятствий после сдвига необходимо выполнить еще один такт: сопоставление значения элементов массива $U(i, j, k)$ с соответствующими значениями элементов массива $P(i, j, k)$ и в случае, если $U(i, j, k) = P(i, j, k) = 1$, перенос значения

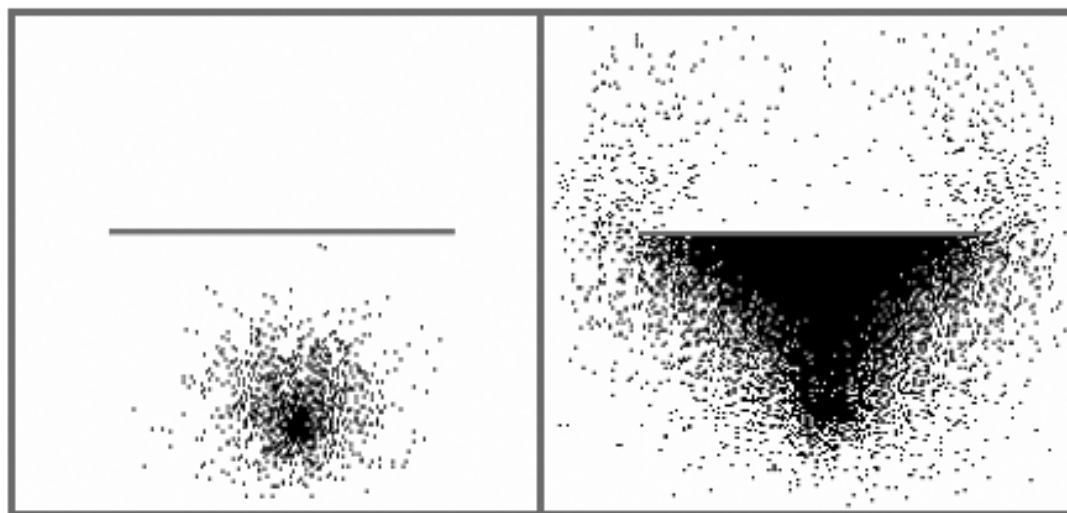


Рис. 4. Миграция субстанции при наличии препятствий и ветра

$U(i, j, k) = 1$ в ближайшую ячейку с нулевым значением случайным образом.

На рис. 4 приведены результаты 2D-моделирования рассеяния примеси в среде, содержащей внутреннее препятствие. В данном случае также рассмотрен двумерный КА, источник постоянной мощности, границы отсутствуют, вероятность $p = 1/2$. Приведенный пример соответствует модели с сильным «северным» ветром по шкале Бофорта [15].

Заключение

Таким образом, в работе развиты клеточно-автоматные методики моделирования процесса рассеяния примеси, построены модели миграции однокомпонентной субстанции в терминах клеточных автоматов, допускающие использование при решении задач экологии. Создано Windows-приложение, реализующее описанные КА-алгоритмы, одно из окон которого представлено на рис. 5.

В приложении могут рассматриваться импульсные и постоянные источники выброса примеси, предусмотрена возможность демонстрации результатов в проекции на одну из плоскостей на задаваемом расстоянии от источника. Кроме того, для сравнения с результатами конечно-разностного моделирования реализован переход от булевых значений к непрерывным функциям распределения концентрации примеси, который производится посредством осреднения значений состояний клеток по задаваемой пользователем окрестности.

Результаты исследования закономерностей распространения загрязнителей и их пространственно-временного распределения крайне важны для оценки состояния атмосферы и тенденций ее изменения, являясь основой для планирования мероприятий по обеспечению экологических норм. И использование клеточно-автоматных методик моделирования экологических процессов может служить полезным дополнением развитых численно-аналитических методов исследования указанных процессов. Однако следует отметить, что интерпретация и корректное сравнение результатов КА-моделирования с полученными другими методами численного моделирования иногда ограничивается качественным соответствием без проведения количественного анализа точности. Существуют также проблемы масштабирования клеточно-автоматных моделей. В настоящее время предпринимаются попытки решения проблемы перехода от физического описания процесса к КА-представлению, в частности в работах О.Л. Бандман [17, и др.].

Литература

1. Фон Нейман Дж. Теория самовоспроизводящихся автоматов. М.: Мир, 1971. 384 с.
2. Toffoli T. Cellular Automata as an Alternative to (rather than approximation of) Differential Equations in Modeling Physics // Physica D. 1984. Vol. 10. P. 117–127.
3. Toffoli T., Margolus N. Cellular Automata Machines. USA: MIT Press, 1987. 279 p.
4. Bandman O. Comparative Study of Cellular

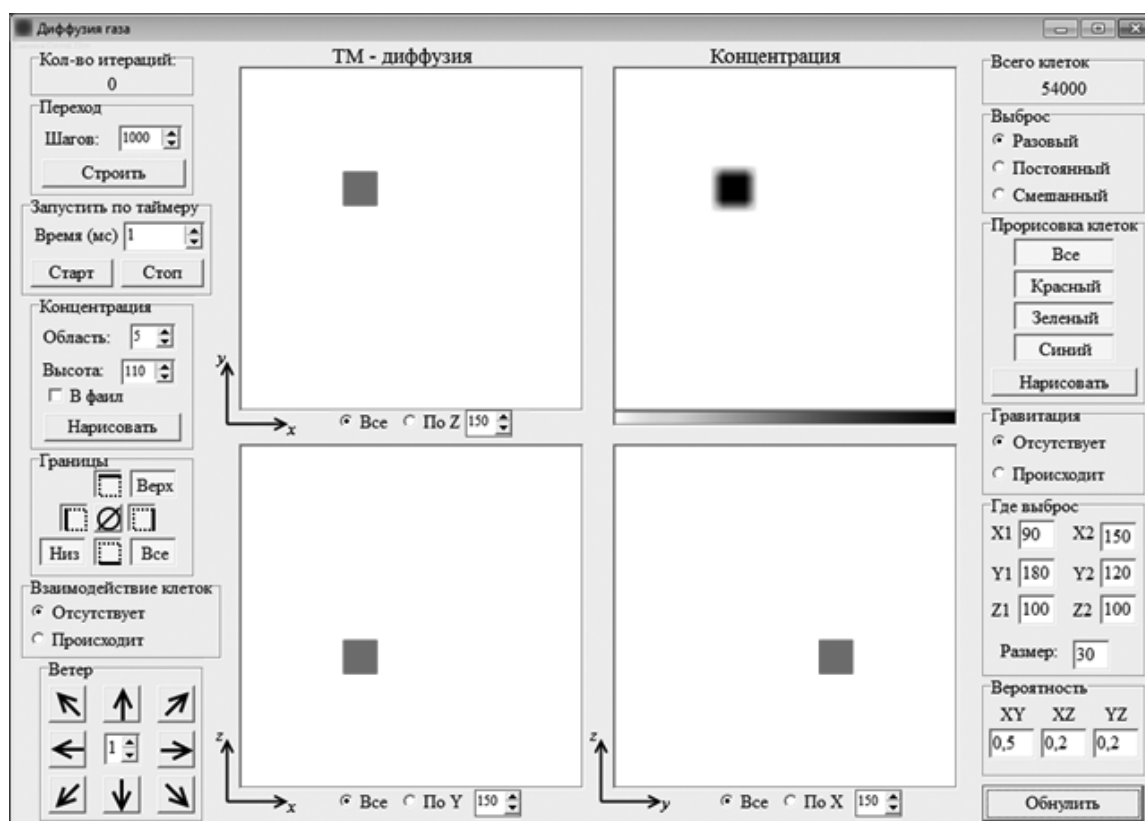


Рис. 5. Стартовое окно приложения

- automata Diffusion Models // Lecture Notes in Computer Science. 1999. Vol. 1662. P. 395–399.
5. Weimar J. Cellular Automata for Reaction-Diffusion Systems // Parallel Computing. 1997. Vol. 23, No. 11. P. 1699–1715.
6. Frisch U., Hasslacher B., Pomeau Y. Lattice-Gas automata for Navier – Stokes equations // Physical Review Letter. 1986. No. 56. P. 1505–1508.
7. Frisch U., Crutchfield J.P., Hasslacher B., Lallemand P. Rivet L.-P. Lattice Gas hydrodynamics in two and three dimensions // Complex Systems. 1987. Vol. 1. P. 649–707.
8. Ванаг В.К. Диссипативные структуры в реакционно-диффузионных системах. Эксперимент и теория. Ижевск: ИКИ, 2008. 300 с.
9. Boccaro N. Reaction-Diffusion complex systems. Berlin: Springer, 2004. 397 p.
10. Bandman O. Parallel Simulation of Asynchronous Cellular Automata Evolution // Proc. of 7th International Conference on Cellular Automata, for Research and Industry, ACRI 2006. Vol. 4173 of LNCS. Springer, 2006. P. 41–47.
11. Bandman O.L. A method for construction of cellular automata simulating pattern formation processes // Theoretical background of applied discrete mathematics. 2010. No. 4. P. 91–99.
12. Kalgin K.V. Comparative Study of Parallel Algorithms for Asynchronous Cellular Automata Simulation on Different Computer Architectures // Proc. of ACRI-2010, LNCS 6350. Springer. 2010. P. 399–408.
13. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982. 315 с.
14. Бандман О.Л. Клеточно-автоматное моделирование пространственной динамики. Новосибирск: СО РАН, 2000. 113 с.
15. Рубцов С.Е., Павлова А.В., Сунозов А.А. К клеточно-автоматному моделированию процесса диффузии и взаимодействия субстанций // Защита окружающей среды в нефтегазовом комплексе. 2014. № 2. С. 30–34.
16. Рубцов С.Е., Павлова А.В., Шкурлат И.И. О клеточно-автоматных моделях процесса течения жидкости при наличии препятствий и примеси // Защита окружающей среды в нефтегазовом комплексе. 2014. № 7. С. 39–44.
17. Бандман О.Л. Инварианты клеточно-автоматных моделей реакционно-диффузионных процессов // Прикладная дискретная математика. 2012. № 3(17). С. 108–120.

References

1. Fon Nejman Dzh. *Teorija samovosproizvodjashih avtomatov* [The theory of self-reproducing automatas], Moscow, Mir Publ., 1971, 384 p. (In Russian)
2. Toffoli T. Cellular Automata as an Alternative to (rather than approximation of) Differential Equations in Modeling Physics. *Physica D*, 1984, vol. 10, pp. 117–127.
3. Toffoli T., Margolus N. *Cellular Automata Machines*. USA, MIT Press, 1987.
4. Bandman O. Comparative Study of Cellular automata Diffusion Models. *Lecture Notes in Computer Science*, 1999, vol. 1662, pp. 395–399.
5. Weimar J. Cellular Automata for Reaction-Diffusion Systems. *Parallel Computing*, 1997, vol. 23, no. 11, pp. 1699–1715.
6. Frisch U., Hasslacher B. and Pomeau Y. Lattice-Gas automata for Navier – Stokes equations. *Physical Review Letter*, 1986, no. 56, pp. 1505–1508.
7. Frisch U., Crutchfield J.P., Hasslacher B., Lallemand P. Rivet L.-P. Lattice Gas hydrodynamics in two and three dimensions. *Complex Systems*, 1987, vol. 1, pp. 649–707.
8. Vanag V.K. *Dissipativnye struktury v reakcionno-diffuzionnyh sistemah. Jeksperiment i teorija* [Dissipative structures in reaction-diffusion systems. Experiment and Theory]. Izhevsk, IKI Publ., 2008, 300 p. (In Russian)
9. Boccaro N. *Reaction-Diffusion complex systems*. Berlin, Springer, 2004, 397 p.
10. Bandman O. Parallel Simulation of Asynchronous Cellular Automata Evolution. *Proc. of 7th International Conference on Cellular Automata, for Research and Industry, ACRI 2006*, vol. 4173 of LNCS. Springer, 2006, pp. 41–47.
11. Bandman O.L. A method for construction of cellular automata simulating pattern formation processes. *Theoretical background of applied discrete mathematics*, 2010, no. 4, pp. 91–99.
12. Kalgin K.V. Comparative Study of Parallel Algorithms for Asynchronous Cellular Automata Simulation on Different Computer Architectures. *Proc. of ACRI-2010*, LNCS 6350, Springer, 2010, pp. 399–408.
13. Marchuk G.I. *Matematicheskoe modelirovanie v probleme okruzhajushhej sredy* [Mathematical modeling in environmental problem]. Moscow, Nauka Publ., 1982, 320 p. (In Russian)
14. Bandman O.L. *Kletочно-автоматное моделирование пространственной динамики* [Cellular automata modeling the spatial dynamics]. Novosibirsk, SO RAN Publ., 2000, 113 p. (In Russian)
15. Rubtsov S.E., Pavlova A.V., Sunozov A.A. K kletочно-автоматному моделированию процесса диффузии и взаимодействия веществ [To cellular-automatic modeling of the process of diffusion and substances interaction]. *Zashhita okruzhajushhej sredy v neftegazovom komplekse* [Environmental protection in oil and gas complex], 2014, no. 2, pp. 30–34. (In Russian)
16. Rubcov S.E., Pavlova A.V., Shkurat I.I. O kletочно-автоматных моделях процесса течения жидкости при наличии препятствий и примесей [About Cellular automata models of the process flow of the liquid in the presence of obstacles and impurities]. *Zashhita okruzhajushhej sredy v neftegazovom komplekse* [Environmental protection in oil and gas complex], 2014, no. 7, pp. 39–44. (In Russian)
17. Bandman O.L. Invarianty kletочно-автоматных моделей реакционно-диффузионных процессов [Invariants Cellular Automaton models of reaction-diffusion processes]. *Prikladnaja diskretnaja matematika* [Applied discrete mathematics], 2012, no. 3 (17), pp 108–120. (In Russian)

Статья поступила 27 июня 2016 г.

© Рубцов С. Е., Павлова А. В., Савенков С. И., 2016