

МЕХАНИКА

УДК 510.67:554

КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МИГРАЦИИ И ГРАВИТАЦИОННОГО ОСАЖДЕНИЯ ПРИМЕСИ В ПОТОКЕ ЖИДКОСТИ

Рубцов С. Е., Павлова А. В.

CELLULAR AUTOMATA MODELING OF MIGRATION AND GRAVITATIONAL SEDIMENTATION OF IMPURITY IN A LIQUID FLOW

Rubtsov S. E., Pavlova A. V.

Kuban State University, Krasnodar, 350040, Russia
e-mail: kmm@fpm.kubsu.ru

Abstract. To date, the main direction of numerical methods for calculating turbulent flows is the solution of the averaged Navier–Stokes equations. Cellular automata (CA) models of gas dynamics make it possible to broaden the possibilities of studying diffusion and migration processes in the atmosphere and in the aquatic environment.

In the paper we present an approach to modeling the process of pollutant migration in a flow of liquid, special attention is given to simulation of the gravitational sedimentation mechanism of a heavy impurity. Thus, in terms of cellular automata, we constructed a model of migration of a single-component substance in a flow for a plane case. We also implemented a CA simulating the propagation of an impurity that settles under the effect of gravity.

The modeling of the flow of a substance using particles that characterize the presence of a mass unit at a given point in space involves their motion in the direction specified by the velocity vector, which changes when particles collide with obstacles or with each other. The fulfillment of the laws of energy, mass, and momentum conservation is provided by the formulated rules of particle movement and collision. When modeling the flow of a liquid with an impurity, each particle is endowed with a sign indicating whether it is “pure” (ie, an element of the main flow) or an impurity. If the mass of impurity particles is different from the mass of “pure” particles, greater, for example, it is necessary to take into account the gravitational interactions of the particles in the model. In this case, an additional phase appears in the elementary automata, implementing the effect of gravity, performed in an asynchronous mode and realizing the movement of the “heavy” impurity particles from upper to lower cells. This phase can be added to the main automaton in a certain number of cycles, which allows us to adjust the mass value of the impurity particles.

The results illustrating the evolution of the cellular automaton modeling the propagation of the “heavy” impurity entering into a flow of liquid over a certain time interval are presented. The transition from the physical description of the process to its CA model and back is accomplished by comparing physical characteristics with the average number of particles in a certain number of cells.

Keywords: cellular automaton model, flow, impurity, transport, gravitational sedimentation.

Введение

Несмотря на большое разнообразие используемых в настоящее время компьютерных реализаций моделей транспорта загрязняющих веществ в окружающей среде [1–3 и др.], область применения имеющихся разработок зачастую ограничена. Решение проблем мониторинга и диагностики состояния эко-

системы региона требует использования разных подходов для создания комплекса моделей, описывающих взаимосвязанные между собой процессы различных пространственно-временных масштабов.

Традиционно применяемые математические инструменты для описания процессов миграции и рассеяния в сплошной среде —

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, доцент профессор кафедры математического моделирования Кубанского государственного университета; e-mail: pavlova@math.kubsu.ru

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ и администрации Краснодарского края р_юг_а 16-41-230175.

уравнения Навье–Стокса и диффузионное уравнение. На сегодняшний день основным направлением численных методов расчета течений является решение осредненных уравнений Навье–Стокса. Клеточно-автоматные (КА) модели газовой динамики, базовые положения которых изложены в [4], позволяют расширить возможности исследования диффузионных и миграционных процессов в атмосфере и водной среде. В настоящее время интенсивно развивается не только исследование КА-моделей различных физических и химических процессов, но и их применение [5–7]. Уже достигнуты определенные успехи в преодолении сложностей интерпретации результатов КА-моделирования и сопоставления их с экспериментальными данными, а также результатами, полученными с помощью других подходов [8, 9]. Например, в работе [9] предлагается методика, основанная на введении не зависящей от способа его математического представления безразмерной характеристики процесса (инварианта КА-модели), позволяющей определить масштабирующие коэффициенты между модельными и реальными параметрами процесса.

При решении задач оценки состояния водных бассейнов большое внимание уделяется изучению закономерностей пространственно-временного распределения загрязнителей при реализации различных сценариев миграции загрязняющих веществ. Так, при попадании последних в водную среду масштабы и характер распространения загрязнения зависят от многих факторов: направления и интенсивности течений в акватории, физических и химических параметров загрязнителя, метеорологических условий и пр. В работе представлен подход к моделированию процесса миграции загрязнителя в потоке жидкости, реализована имитация механизма гравитационного осаждения тяжелой примеси.

Клеточный автомат определяется множеством клеток дискретного пространства, каждой из которых соответствует элементарный конечный автомат. Все конечные автоматы $\{V, S, \delta\}$ одинаковы и описываются множеством входных состояний V , множеством внутренних состояний S и функцией $\delta : V \times S \rightarrow S$, задающей состояние элементарного автомата на следующем шаге и называемой функцией переходов (локальным оператором). Последние традиционно подразделяются на детерминированные и стохастические (по способу выбора состояния), а также

синхронные и асинхронные (по правилам перехода клеток в новое состояние). Изменение конфигурации при переходе к новым элементарным состояниям является итеративным, процесс перехода автомата из одного состояния в другое называется эволюцией клеточного автомата.

1. Моделирование потока жидкости

Моделирование потока субстанции с помощью частиц [10], характеризующих наличие в точках пространства единицы массы, предполагает их движение в заданном вектором скорости \mathbf{s} направлении, которое меняется при столкновениях частиц с препятствиями или между собой. Выполнение законов сохранения энергии, массы и импульса обеспечивается составлением определенных правил перемещения и столкновения частиц. Переход от физического описания процесса к его КА-модели и обратно осуществляется посредством сравнения физических характеристик со средним числом частиц в определенном количестве ячеек.

Классическая КА-модель потока жидкости (FHP-I) [10] описывается тройкой (W, A, N) , где $W = \{w_1, w_2, \dots, w_i, \dots\}$ — множество заданных координатами клеток, каждой из которых сопоставлен конечный автомат A , N — упорядоченное множество, содержащее элементы, соседствующие с клеткой w ,

$$N(w) = \{N_i(w) : N_0(w) = w, \\ N_i(w) \in W \ \& \ d(w, N_i(w)) = 1, \\ (i = \overline{1,6})\}.$$

При этом предполагается, что каждая клетка соседствует сама с собой.

Состояние клетки (рис. 1), определяемое булевыми функциями, характеризует наличие или отсутствие в данный момент составляющей скорости в указанной точке и представляется вектором $\mathbf{s}(w) = \{s_0(w), \dots, s_i(w), \dots, s_6(w)\}$.

Множество состояний всех клеток $w \in W$ в заданный момент дискретного времени t носит название глобального состояния $\sigma(t) = \{\mathbf{s}(w_1), \mathbf{s}(w_2), \dots, \mathbf{s}(w_i), \dots\}$ КА [11]. Разработанные правила составляют таблицу переходов элементарного клеточного автомата.

Состояние клетки w в каждый момент времени t определяет набор находящихся в

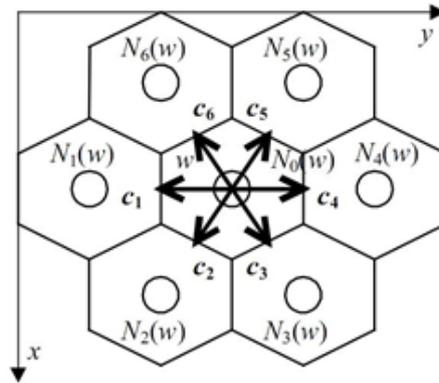


Рис. 1. Клетка автомата w , векторы скорости \mathbf{c}_i находящихся в ней частиц, и соседствующие клетки $N_i(w)$ [10]

ней частиц, векторы скорости \mathbf{c}_i этих частиц могут быть равны нулю ($i = 0$) или направлены в сторону любой из соседних клеток $N_i(w)$ ($i = \overline{1,6}$).

При использовании КА-моделей потоков, позволяющих прогнозировать характер временного и пространственного распределения переносимых ими примесей, практический интерес представляют осредненные значения концентраций частиц $\langle n \rangle$ и их скоростей $\langle \mathbf{u} \rangle$ по выбранной окрестности $Av(w)$. Осреднение скорости производится по формуле

$$\langle \mathbf{u} \rangle (w) = \frac{1}{m} \sum_{w_j \in Av(w)} \sum_{i=0}^6 s_i \mathbf{c}_i,$$

где m — количество клеток, попавших в $Av(w)$, \mathbf{c}_i — единичный вектор скорости соответствующего s_i — i -го разряда состояния $\mathbf{s}(w_j)$ клетки $w_j \in Av(w)$. Осредненное значение концентрации частиц $\langle n \rangle$ определяется следующим образом:

$$\langle n \rangle (w) = \frac{1}{m} \sum_{w_j \in Av(w)} \sum_{i=0}^6 s_i (w).$$

Клетки автомата $w_i \in W$, $W = W_m \cup W_b \cup W_s$, могут быть отнесены к одному из трех различных множеств: внутренние клетки среды $w_m \in W_m$; клетки, принадлежащие границам $w_b \in W_b$; клетки источника $w_s \in W_s$. Полагается, что $W_m \cap W_s = W_m \cap W_b = W_s \cap W_b = \emptyset$, т.е. множества внутренних клеток среды W_m , источников W_s и границ W_b не пересекаются попарно.

Существенным параметром клеточного автомата является режим его функционирования. Как и в представленной в [11] модели

ГНР-I, используется синхронный КА. На каждом такте его работы одновременно осуществляется смена состояния $s_i(t)$ каждой клетки из W на локальное состояние $s_i(t+1)$, соответственно в целом происходит переход глобального состояния от $\sigma(t)$ к $\sigma(t+1)$. Каждый такт состоит из двух фаз: сдвига и столкновения. Т.е., функция переходов δ является композицией сдвига δ_1 , реализующего перенос вещества в потоке, и столкновения δ_2 , интерпретирующего процесс диффузии в жидкости: $\delta(s) = \delta_2(\delta_1(s))$. Реализация функции сдвига обеспечивает сохранение массы и импульса в пределах всего КА, функцию столкновения δ_2 определяет внутреннее состояние элементарного автомата, в соответствии с правилами перехода (вероятностными или детерминированными), определяющими сохранение массы $m(w)$ и импульса $\mathbf{p}(w)$, направления движения частиц изменяются независимо от состояний соседних клеток.

В принадлежащих границам клетках выполняется условие сохранения массы вследствие того, что общее число частиц в таких клетках не меняется. Так как поведение частиц в клетках стенок моделирует заданные граничные условия, условие сохранения импульса для них может не выполняться. Во внутренних клетках среды выполняются законы сохранения массы и импульса

$$\sum_{i=0}^6 \delta_2(s_i(w_b)) = \sum_{i=0}^6 s_i(w_b),$$

$$\sum_{i=0}^6 \delta_2(\mathbf{c}_i(w_b)) = \sum_{i=0}^6 s_i(w_b) \mathbf{c}_i(w_b).$$

Законы сохранения могут нарушаться для множества клеток, принадлежащих источни-

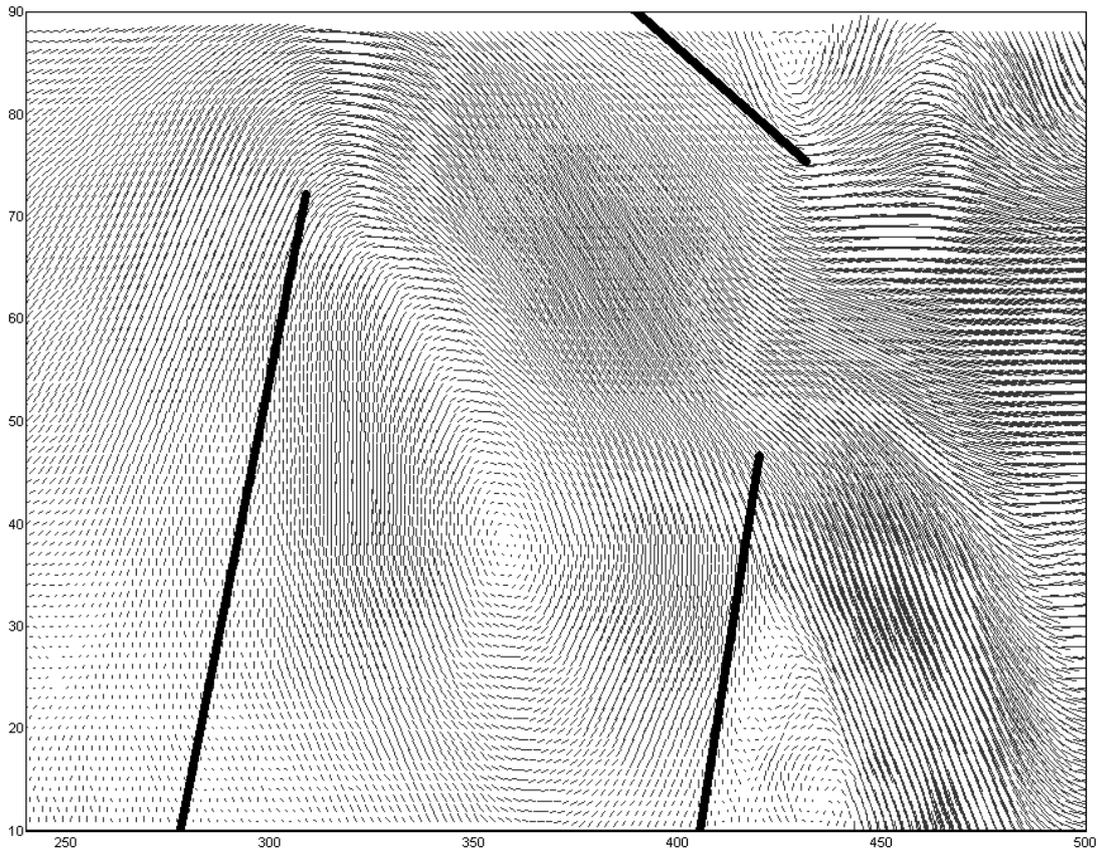


Рис. 2. Результат моделирования потока жидкости в канале с препятствиями

ку $w_s \in W_s$, продуцирующему частицы со скоростями, имеющими различные направления.

На рис. 2 представлен фрагмент клеточного автомата размером 100×2000 клеток. Клетки с координатами в интервале $[(2,1), (99,1)]$ принадлежат источнику, клетки с координатами в интервалах $[(1,1), (1,2000)]$ и $[(100,1), (100, 2000)]$ — границам. Рассмотренная двумерная область может рассматриваться как сечение протяженного (вдоль оси Oz) параллелепипеда, имитирующего трехмерный поток. Направление каждой стрелки на рисунке отвечает направлению потока в ее основании, а длина пропорциональна скорости потока в соответствующей точке.

2. Моделирование потока с «тяжелой» примесью

При моделировании потока жидкости с примесью каждая частица наделяется признаком, указывающим, является она «чистой» (т.е. элементом основного потока) либо примесью. Под клеточным автоматом модели ФНР-I понимается уже четверка объектов

(W, A, N, P) . Здесь состояние частицы $p \in P$ представлено значением $v(p) = 0$ для «чистой» частицы и $v(p) = 1$ — для примеси. В такой модели состояние клетки представляется булевой матрицей $s(w)$, определяющей набор частиц в этой клетке и их состояние. На рис. 3 изображена клетка, где пунктирные стрелки обозначают частицы, являющиеся примесью, а сплошные — «чистые», и матрица состояния.

Фаза сдвига δ_1 элементарного автомата в такой модели реализуется так же, как в отсутствие примеси. В реализации фазы столкновения появляются изменения, так как в построенной модели каждая частица характеризуется некоторым состоянием. Правила столкновения трансформируются в вероятностные в случае, если оба вида частиц присутствуют в клетке. Кроме того, если масса частиц примеси больше массы «чистых» частиц, в модели необходимо учитывать гравитационную составляющую процесса миграции. В таком случае в элементарном автомате появляется еще одна фаза, реализующая действие силы тяжести. В этой фазе, выполняе-

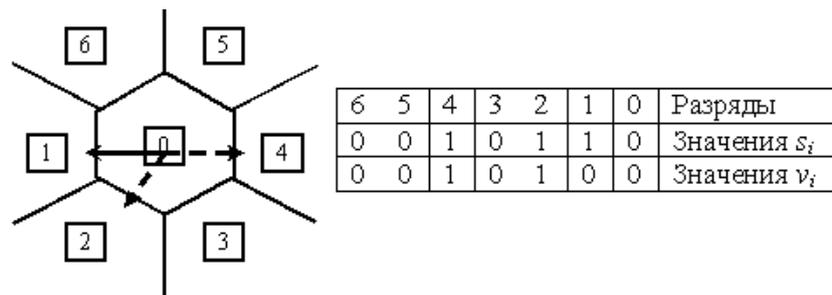


Рис. 3. Клетка автомата и матрица состояния (2 частицы содержат примесь, 1 частица — «чистая»)

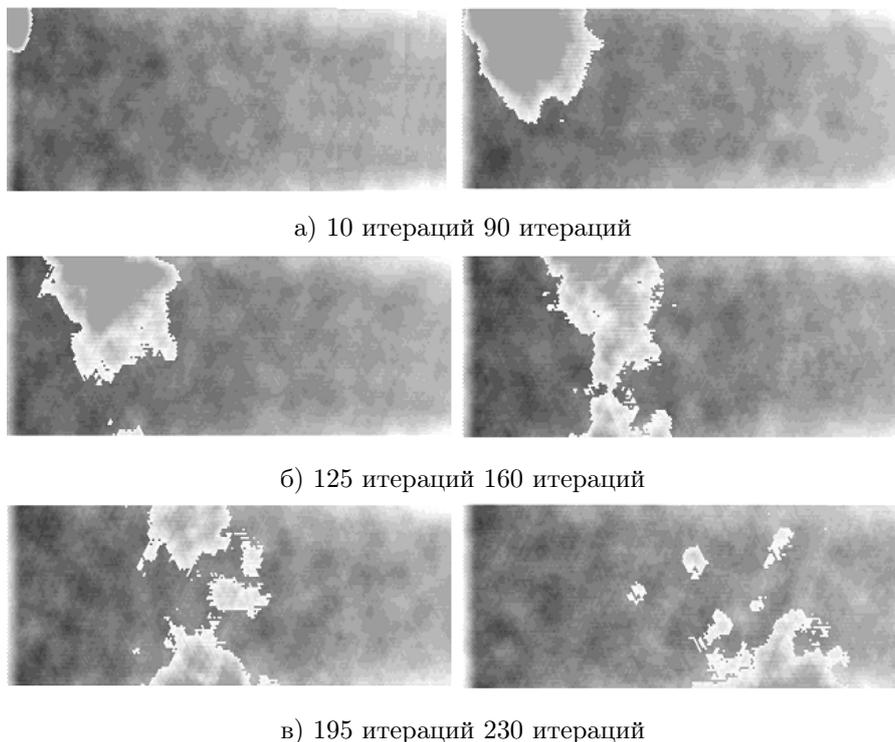


Рис. 4. Изменение концентрации в потоке жидкости оседающей примеси в процессе эволюции клеточного автомата

мой в асинхронном режиме, осуществляется перемещение частиц «тяжелой» примеси из верхних клеток в нижние. Данная фаза может быть добавлена к основному автомату через определенное число тактов, что позволяет регулировать величину массы частиц примеси [12].

Рис. 4 иллюстрирует эволюцию клеточного автомата, моделирующего распространение поступающей в поток жидкости оседающей «тяжелой» примеси за определенный временной интервал. Темный тон соответствует чистым частицам, светлый — областям автомата с наибольшей концентрацией примеси. Выбран клеточный автомат 100×2000 кле-

ток, в который, начиная с момента, когда весь автомат заполнен чистыми частицами, поступают частицы загрязняющей примеси в течение 50 итераций. Клетки, служащие источником примеси, занимают отрезок с координатами $[(2,1), (22,1)]$. Переход от булевых значений к непрерывным функциям распределения произведен путем осреднения значений состояний клеток по заданной окрестности.

Заключение

В работе представлены модели потоков жидкости на основе клеточных автоматов, в том числе — потоков с примесью, что потребовало модификации модели ФНР-I. Реализован

КА, моделирующий распространение примеси, оседающей под действием силы тяжести.

Описанные модели могут найти применение в значимом для практического использования диапазоне изменения параметров при решении задач оценки состояния водных акваторий, а также прогнозирования последствий их загрязнения. При разработке моделей миграции и осаждения загрязняющих веществ клеточно-автоматный подход может сочетаться с конечно-разностными [1–3], а также факторизационными [13, 14], когда совместные вычислительные эксперименты будут служить определению инвариантов и масштабов [9] для КА-моделей.

Литература

1. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982. 320 с.
2. Пененко В.В., Алоян А.Е. Модели и методы для задач охраны окружающей среды. Новосибирск: Наука, 1985. 245 с.
3. Алоян А.Е. Моделирование динамики и кинетики газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. М.: Наука, 2008. 415 с.
4. Фон Нейман Дж. Теория самовоспроизводящихся автоматов. М.: Мир, 1971. 384 с.
5. Boccara N. Reaction-Diffusion complex systems. Berlin: Springer, 2004. 397 p.
6. Ваняг В.К. Диссипативные структуры в реакционно-диффузионных системах. Эксперимент и теория. Ижевск: ИКИ, 2008. 300 с.
7. Bandman O. Parallel Simulation of Asynchronous Cellular Automata Evolution // Proc. of 7th International Conference on Cellular Automata, for Research and Industry (ACRI 2006). 2016. Vol. 4173 of LNCS. Springer. P. 41–47.
8. Bandman O. Mapping physical phenomena onto CA-models // AUTOMATA-2008. Theory and Applications of Cellular Automata. London: Luniver Press, 2008. P. 381–397.
9. Бандман О.Л. Инварианты клеточно-автоматных моделей реакционно-диффузионных процессов // Прикладная дискретная математика. 2012. № 3(17). С. 108–120.
10. 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.
11. Malinetskii G.G., Stepanov M.E. Simulation of diffusion processes by means of cellular automata with Margolus neighborhood // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 1998. Vol. 38, № 6. P. 973–975.
12. Рубцов, С.Е., Павлова А.В., Шкурят И.И. О клеточно-автоматных моделях процесса те-

чения жидкости при наличии препятствий и примеси // Защита окружающей среды в нефтегазовом комплексе. 2014. № 7. С. 39–44.

13. Павлова А.В., Калайдин В.В. Об одной модели распространения загрязняющей примеси от площадного источника // Защита окружающей среды в нефтегазовом комплексе. 2012. № 2. С. 18–22.
14. Бабешко В.А., Зарецкая М.В., Евдокимова О.В., Павлова А.В., Бабешко О.М., Круглякова О.П., Курилов П.И., Тереножкин А.М., Гендина И.В. Оценка влияния вулканических и природно-технологических загрязнений на экосистему Азовского моря // Защита окружающей среды в нефтегазовом комплексе. 2010. № 9. С. 6–12.

References

1. Marchuk G.I. *Matematicheskoe modelirovanie v probleme okruzhajushhej sredy* [Mathematical modeling in environmental problem]. Moscow, Nauka Pub., 1982, 320 p. (In Russian).
2. Penenko V.V., Alojjan A.E. *Modeli i metody dlja zadach ohrany okruzhajushhej sredy* [Models and methods for environmental objectives]. Novosibirsk, Nauka Pub., 1985, 245 p. (In Russian).
3. Alojjan A.E. *Modelirovanie dinamiki i kinetiki gazovyh primesej i aehrozolej v atmosphere* [Modeling of dynamics and kinetics of gas impurities and aerosols in the atmosphere]. Moscow, Nauka Pub., 2008, 415 p. (In Russian)
4. Fon Nejman Dzh. *Teorija samovosproizvodjashihsvja avtomatov* [The theory of self-reproducing automatats]. Mosccow, Mir Pub., 1971, 384 p. (In Russian)
5. Boccara N. *Reaction-Diffusion complex systems*. Berlin, Springer, 2004. 397 p.
6. Vanag V.K. *Dissipativnye struktury v reakcionno-diffuzionnyh sistemah. Jeksperiment i teorija* [Dissipative structures in reaction-diffusion systems. Experiment and Theory]. Izhevsk, IKI Pub., 2008, 300 p. (In Russian)
7. Bandman O. Mapping physical phenomena onto CA-models. In: *AUTOMATA-2008. Theory and Applications of Cellular Automata*. London, Luniver Press, 2008, pp. 381–397.
8. Bandman O. Parallel Simulation of Asynchronous Cellular Automata Evolution. *Proc. of 7th Int. Conference on Cellular Automata, for Research and Industry (ACRI 2006)*, 2016, Vol. 4173 of LNCS. Springer, pp. 41–47.
9. Bandman O.L. Invarianty kletochno-avtomatnyh modelej reakcionno-diffuzionnyh processov [Invariants Cellular Automaton models of reaction-diffusion processes]. *Prikladnaja diskretnaja matematika* [Applied discrete mathematics], 2012, no. 3, pp 108–120. (In Russian)
10. 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.
11. Malinetskii G.G., Stepanov M.E. Simulation of diffusion processes by means of cellular automata with Margolus neighborhood. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 1998, vol. 38, no. 6, pp. 973–975.
 12. Rubcov S.E., Pavlova A.V., Shkurat I.I. О клеточно-автоматных моделях процесса течения жидкости при наличии препятствий и примеси [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 the oil and gas sector], 2014, no. 7, pp. 39–44. (In Russian)
 13. Pavlova A.V., Kalajdin V.V. Ob odnoj modeli rasprostraneniya zagryznajushhej primesi ot ploshhadnogo istochnika [On one propagation model contaminant from the area source]. *Zashhita okruzhajushhej sredy v neftegazovom komplekse*, 2012, no. 2, pp. 18–22. (In Russian).
 14. Babeshko V.A., Zaretskaya M.V., Evdokimova O.V., Pavlova A.V., Babeshko O.M., Kruglyakova O.P., Kurilov P.I., Terenozhkin A.M., Gendina I.V. Ocenka vlijaniya vulkanicheskikh i prirodno-tehnologicheskikh zagryznenij na jekosistemu Azovskogo morja [Assessing the impact of volcanic and natural-technological pollution on the ecosystem of the Sea of Azov]. *Zashhita okruzhajushhej sredy v neftegazovom komplekse*, 2010, no. 9, pp. 6–12. (In Russian)

© Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества, 2017

© Рубцов С. Е., Павлова А. В., 2017

Статья поступила 25 сентября 2017 г.