

Ф И З И К А

УДК 510.67:554

КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИИ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ПРИМЕСЕЙ

Рубцов С. Е., Павлова А. В., Олейников А. С.

CELLULAR AUTOMATA MODELING OF MULTICOMPONENT IMPURITIES DIFFUSION

Rubtsov S. E., Pavlova A. V., Olejnikov A. S.

Kuban State University, Krasnodar, 350040, Russia

e-mail: kmm@fpm.kubsu.ru

Abstract. The work is dedicated to cellular automata (CA) modeling of diffusion-reaction processes of multicomponent impurities.

Three-dimensional CA models of the following scenarios relating to the dispersion and impurity transformation were constructed: independent dispersion of constituents of a multicomponent contaminant, the absorption of one substance by another (pollutant neutralization model), the appearance of a new substance as a result of the interaction between the two initial (chemical reaction model). In this paper we implemented the CA-diffusion in a spatial domain with a complicated boundary. The binary type parameter was mapped to each block in the base substitution, as a result of which all the blocks were divided into two types: internal and boundary. This parameter, as a result, determines the necessity of the corresponding block's rotation when performing the base substitution. Thereby the boundary of the modeling domain can be specified arbitrarily.

For the computer experiments and analysis of results, we developed an application that implements the above models, reproducing the spatio-temporal concentration distribution of the gas impurities and the formation process of a secondary contaminant from precursor gases.

The application allows us to consider the constant and pulse emission sources of the pollutant, and also display the distribution of impurity particles in an arbitrary section of the region at any time iteration and at the required distance from the emission source.

Keywords: cellular-automata models, impurity diffusion, pollutant interaction, transformation.

Введение

Среди задач экологии немаловажную роль играют исследования закономерностей и особенностей распространения атмосферных примесей и их пространственно-временного распределения. Экологический мониторинг как инструмент контроля интенсивности воздействия на окружающую среду позволяет лишь регистрировать изменения характеристик процессов. Результаты математического моделирования на основе данных мониторинга составляют основу для оценки текущего состояния и тенденций изменения воздушного бассейна, а также разработки возмож-

ных мероприятий по обеспечению чистоты атмосферы [1–3]. Для прогнозирования экологической ситуации требуется не только теоретическая проработка методик выполнения измерений, но и разработка новых методов анализа состояния объектов природной среды, совершенствование моделей отдельных природных явлений и экосистемы в целом.

Распространяясь в атмосфере, газообразные и аэрозольные примеси, участвуя в различных химических процессах, могут вызывать так называемое вторичное загрязнение [2], оказывающее негативное воздействие на состояние окружающей среды.

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.

Олейников Александр Сергеевич, 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_а.

Мигрируя, загрязнители на различных стадиях химических реакций претерпевают изменения от деградации до перехода в иные химические формы. На сегодняшний день разработаны эффективные модели кинетики и динамики аэрозолей и газообразных примесей в атмосфере [1–4 и др.], для применения которых требуются, как правило, значительные вычислительные мощности. Расширить возможности исследования миграции и физико-химических процессов превращения реагентов в атмосфере позволяет клеточно-автоматное (КА) моделирование.

В настоящее время клеточно-автоматные модели [5–8], активно развивающиеся применительно к диффузионно-реакционным процессам, привлекают пристальное внимание [8–14]. Интерес к ним стимулируется и интенсивным использованием алгоритмов параллельного программирования. Дискретные модели, основанные на булевой алгебре, базовые алгоритмы которых впервые сформулированы в [5], позволяют разработать эффективные программные средства за счет представления сложных процессов посредством простых функций перехода конечного автомата. И область применения КА подходов продолжает расширяться.

Огромное разнообразие модификаций клеточных автоматов, моделирующих пространственную динамику, определило понятие мелкозернистого параллелизма, объединяющего различные модели вычислений, характеризующиеся следующими главными свойствами КА: процесс вычисления глобальных конфигураций является итерационным, при этом виртуальный параллелизм определения новых клеточных состояний неограничен; взаимодействия между клетками являются локальными, т.е. при вычислении функции перехода для каждой клетки в качестве переменных состояния используется ограниченное число близлежащих клеток. На алфавит состояний клеток (булевый, целочисленный, символьный и вещественный) ограничения не накладываются.

Настоящая работа посвящена реализации КА-моделей диффузии и взаимодействия загрязняющих веществ в атмосфере. Разработанные модели использовались в численных экспериментах по воспроизведению пространственно-временного распределения концентрации газовых примесей, а также

формирования вторичного загрязнителя из газов-предшественников.

1. Диффузия и взаимодействие примесей

В работе [14] КА-алгоритм диффузии был распространен на трехмерное пространство. Клеточный автомат представлен в виде множества клеток дискретного пространства, каждой из которых в соответствие поставлен конечный автомат. Рассмотрены одинаковые конечные автоматы, определяемые множеством координат клеток, внутренних состояний, входных состояний и локальным оператором (функцией перехода).

Область пространства, как и в плоском случае, представлена клеточным массивом, множество имен которого обозначено через

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

В M выделено два подмножества:

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

— имена с четными индексами и

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

— с нечетными.

Для каждого имени $(i, j, k) \in M$ локальная конфигурация определена шаблоном [14]

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

Конфигурация представляет блок из восьми кубиков

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

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

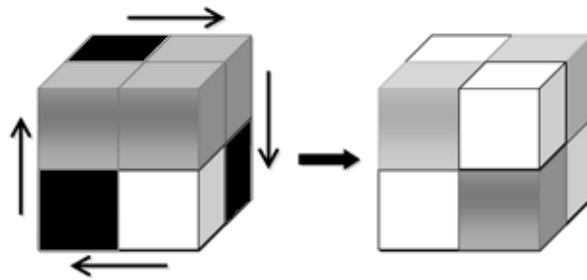


Рис. 1. Взаимодействие клеток при переходе

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 для управления чередованием четного и нечетного тактов — контекстная клетка (x_t, m_t) .

Составляющие многокомпонентной примеси могут мигрировать как независимо друг от друга (консервативные примеси), так и вступать в химические реакции. При моделировании реакционных процессов использованы описанные в [15] для плоского случая таблицы принятия решений. Реализованы следующие сценарии поведения примесей: поглощение одного вещества другим (модель нейтрализации загрязнителей посредством используемых реагентов), независимое распространение составляющих многокомпонентного загрязнителя, появление нового вещества в результате взаимодействия двух исходных (модель образования вторичного загрязнителя).

При этом перемещение производится блоками по восемь клеток. Пример взаимодействия клеток при переходе проиллюстрирован на рис. 1.

Каждой клетке поставлено в соответствие положительное целочисленное значение, идентифицирующее примесь, находящуюся в этой клетке. Число ноль сопоставляется «чистой» клетке. При реализации реакционного процесса для двух примесей после выполнения базовой подстановки для составляющих блока выполняется проверка возможности химической реакции между примесями. Если последняя возможна, один из элементов принимает значение новой примеси, другая молекула примеси пропадает.

2. Моделирование положения границ

При классическом моделировании диффузии описание неплоской границы сопряжено с определенными сложностями. Так, при реализации конечно-разностных моделей в случае, когда граница не является горизонтальной, обычно осуществляется переход от декартовой системы координат к обобщенной $(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \varsigma)$ с помощью следующих формул [2]:

$$x_1 = \bar{x}_1, \quad x_2 = \bar{x}_2, \quad \varsigma = \frac{x_3 - \tilde{\delta}(x_1, x_2)}{H - \tilde{\delta}(x_1, x_2)} H,$$

где H — высота верхней границы области распространения примеси, $\tilde{\delta}(x_1, x_2)$ — функция, описывающая рельеф. В терминах клеточных автоматов построение модели миграции и осаждения примесей с учетом наличия плоских наклонных и рельефных границ упрощается.

Реализована КА-диффузия в пространственной области со сложной границей. Каждому блоку в базовой подстановке сопоставлен параметр бинарного типа, в результате чего все блоки подразделяются на два вида: внутренний и граничный. Введенный параметр в результате определяет необходимость вращения данного блока при выполнении базовой подстановки. При этом граница области моделирования может быть задана произвольным образом.

Ниже для наглядности проиллюстрирована реализация построения плоских наклонных границ (рис. 2). Жирная линия соответствует граничной плоскости. Клетки, пересекаемые этой линией, и клетки, расположенные выше нее, являются граничными (выделены жирным контуром). При моделировании базовая подстановка не будет применяться к этим клеткам.

Осаждение примеси на установленной границе моделируется как накопление частиц в

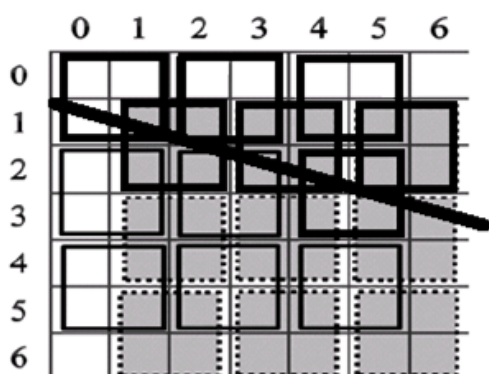


Рис. 2. Двумерная граница

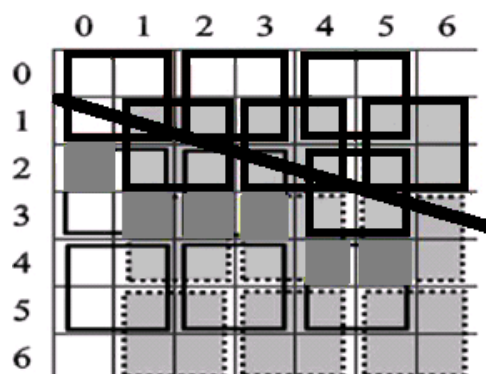


Рис. 3. Моделирование области осаждения

крайних клетках рассматриваемой области. На рис. 3 граничные клетки выделены темно-серым цветом. В зависимости от типа граничных условий в этих клетках в процессе работы алгоритма может накапливаться (осаждаться) примесь.

В пространственной модели реализованы аналогичные подходы построения границ и выбора граничных блоков.

3. Программная реализация

Разработанные модели миграции многокомпонентной загрязняющей субстанции в терминах клеточных автоматов могут найти применение при решении конкретных задач экологии.

На сегодняшний день не существует единого систематического подхода для построения КА-моделей по заданным характеристикам процесса, зачастую приходится ограничиваться качественным сходством результатов моделирования с наблюдаемым явлением, однако иногда это удается сделать, исходя из опыта и сопоставления с результатами, полученными с использованием численно-аналитических методов.

Для проведения компьютерных экспериментов и анализа результатов разработано приложение на языке Object Pascal (компилятор Free Pascal) с использованием средств программирования трехмерной графики – OpenGL. Главное окно программы изображено на рис. 4.

Приложение позволяет рассматривать постоянные и импульсные источники выброса загрязняющего вещества, реализована возможность отображения результатов в проекции на выбранную плоскость на требуемом

расстоянии от источника выброса. Программа дает возможность отображать распределение примесей на любой временной итерации в произвольном сечении области моделирования. Осредненные значения количества частиц в рассматриваемом сечении при необходимости выводятся на экран в нижнем левом углу окна. На рис. 5 представлен пример выбора сечения и отображения результатов диффузии примеси от двух источников, расположенных соответственно выше и ниже выбранного сечения.

В приложении также предусмотрена возможность прорисовки клеток, соответствующих каждому типу взаимодействующих частиц. Так, на рис. 6 справа представлены результаты распределения частиц реагентов (верхнее и нижнее изображения) и продукта реакции (среднее изображение) для одновременного выброса в разных точках пространства двух взаимодействующих примесей, $t = 1000$, размеры источников – $10 \times 10 \times 10$, размер области моделирования – $300 \times 300 \times 300$.

Кроме того, реализован переход от булевых значений к непрерывным функциям распределения загрязнителя, производимый путем осреднения по задаваемой пользователем окрестности значений состояний клеток автомата.

Результаты моделирования миграции загрязняющих веществ позволяют решать проблемы блокирования распространения загрязнителей, прогнозирования последствий воздействия на экосистему и оценки локального состояния окружающей среды. Используемые подходы обеспечивают возможность посредством относительно простых функций

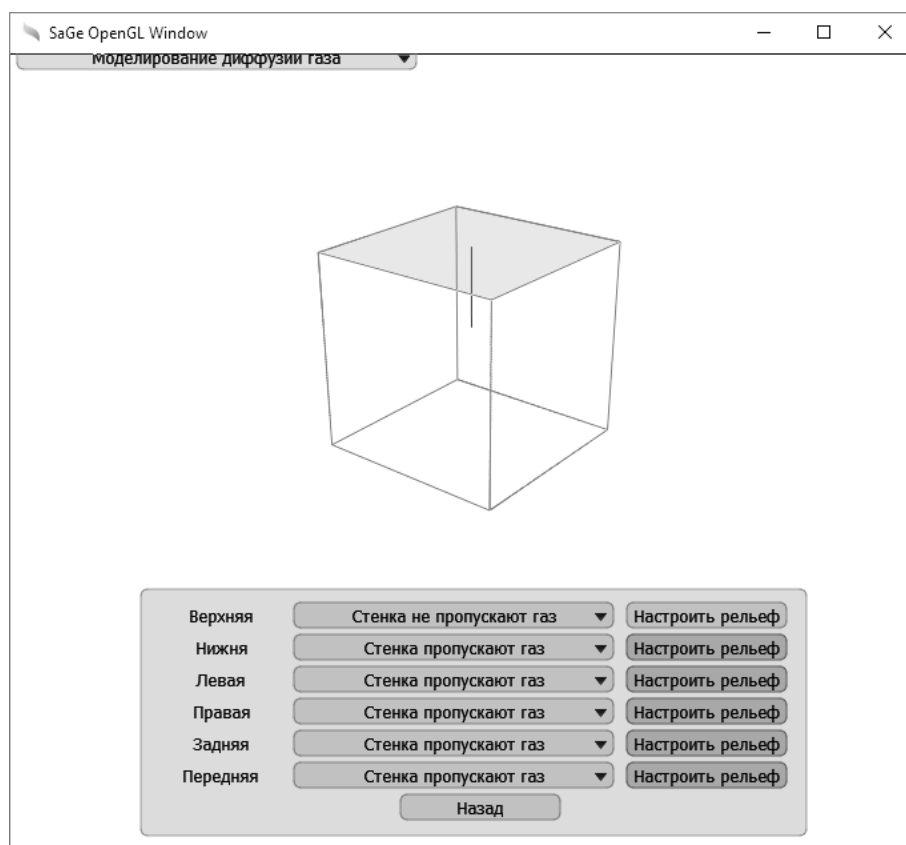


Рис. 4. Главное окно программы

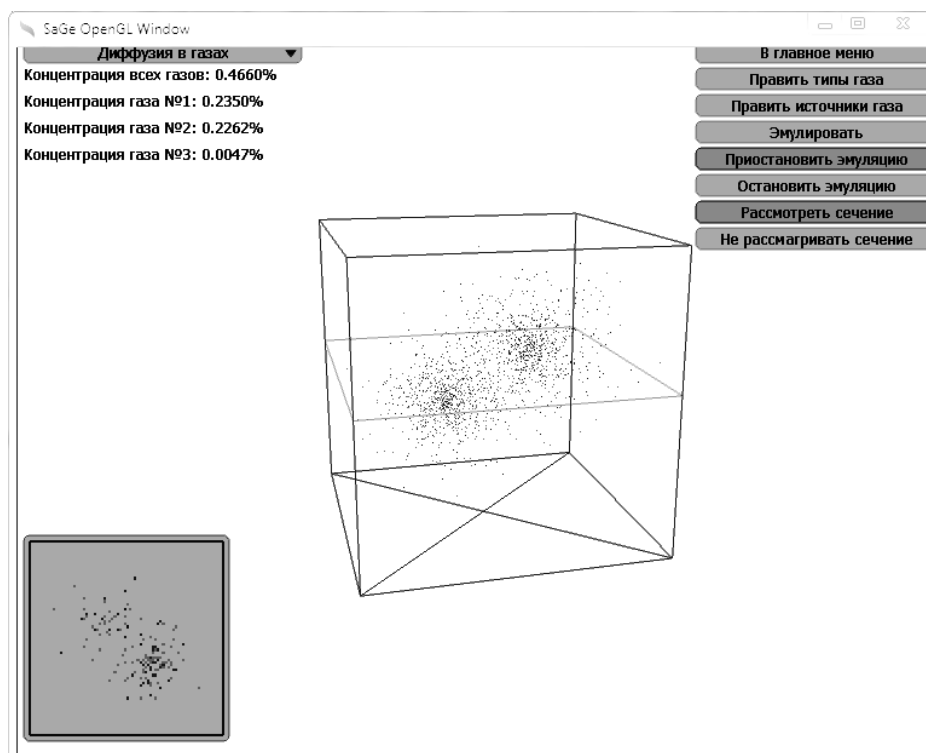


Рис. 5. Выбор сечения

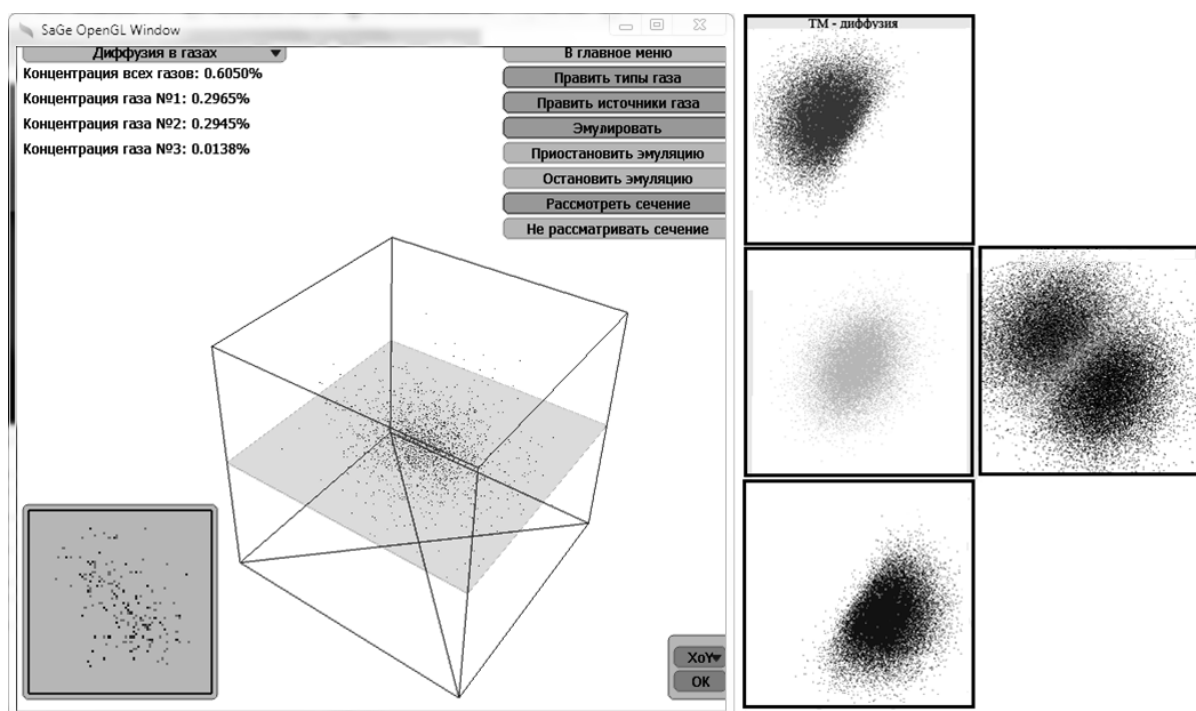


Рис. 6. Распределение частиц при взаимодействии субстанций друг с другом

перехода моделировать сложные процессы и могут применяться в качестве дополнения к развитым математическим моделям гидродинамики и традиционно применяемым для изучения миграции различных субстанций и хорошо зарекомендовавшим себя численным методам. Применение клеточно-автоматных моделей экологических процессов может быть полезным дополнением указанных численно-аналитических методов. Однако при построении КА-модели того или иного явления следует подобрать корректный способ перехода от его физико-химического представления к клеточно-автоматному описанию процесса. В работе [16] предложен подход, позволяющий определить масштабирующие коэффициенты (длина стороны клетки в метрах, время итерации в секундах, константа скорости реакции с размерностью c^{-1}), связывающие реальные и модельные характеристики процессов, на основе введения понятия инварианты КА-модели. Предлагаемая в [16] методика в целом ряде случаев может быть применена для интерпретации результатов работы построенных диффузионно-реакционных КА-моделей в привычных понятиях и обратно.

При создании моделей рассеяния, трансформации и осаждения примесей клеточно-автоматный подход может сочетаться с

конечно-разностными [1–4], а также факторизационными [17]. Дальнейшей целью исследований в данном направлении являются совместные вычислительные эксперименты для различных моделей процессов миграции загрязнителей, которые послужат определению масштабов и инвариантов [16] для КА-моделей.

Литература

1. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982. 320 с.
2. Алоян А.Е. Моделирование динамики и кинетики газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. М.: Наука, 2008. 415 с.
3. Алоян А.Е., Пискунов В.Н. Моделирование региональной динамики газовых примесей и аэрозолей // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2005. Т. 41, № 3. С. 328–340.
4. Пискунов В.Н. Теоретические модели кинетики формирования аэрозолей. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2000. 209 с.
5. Фон Нейман Дж. Теория самовоспроизводящихся автоматов. М.: Мир, 1971. 384 с.
6. 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.
7. Toffoli T., Margolus N. Cellular Automata

- Machines. MIT Press, 1987. 279 p.
8. Weimar J. Cellular automata for reaction-diffusion systems // *Parallel Computing*. 1997. Vol.23. No. 11. P. 1699–1715.
 9. Ваняг Г.К. Диссипативные структуры в реакционно-диффузионных системах. Эксперимент и теория. Ижевск: ИКИ, 2008. 300 с.
 10. Boccara N. *Reaction-Diffusion complex systems*. Berlin: Springer, 2004. 397 p.
 11. 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.
 12. 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.
 13. 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.
 14. Рубцов С.Е., Павлова А.В., Савенков С.И. О клеточно-автоматных моделях конвекционно-диффузионных процессов примесей // *Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества*. 2016. № 2. С. 62–68.
 15. Рубцов С.Е. Павлова А.В. Клеточно-автоматные модели диффузионно-реакционных процессов многокомпонентных примесей // *Защита окружающей среды в нефтегазовом комплексе*. 2016. № 6. С. 55–60.
 16. Бандман О.Л. Инварианты клеточно-автоматных моделей реакционно-диффузионных процессов // *Прикладная дискретная математика*. 2012. № 3(17). С. 108–120.
 17. 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.
 - zolej [Modeling of regional dynamics of gas impurities and aerosols]. *Izvestia RAN. Fizika atmosfery i okeana* [Bull. of Russian Academy of Science. Atmospheric and ocean physics], 2005, vol. 41, no. 3, pp. 328–340. (In Russian)
 4. Piskunov V.N. *Teoreticheskie modeli kinetiki formirovaniya aehrozolej* [Theoretical models of aerosol formation kinetics]. Sarov, RFYAC-VNIIEHF, 2000, 209 p. (In Russian)
 5. Fon Nejman Dzh. *Teoriya samovosproizvodjashih-sja avtomatov* [The theory of self-reproducing automatas]. Moscow, Mir Pub., 1971, 384 p. (In Russian)
 6. 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.
 7. Toffoli T., Margolus N. *Cellular automata machines*. MIT Press, 1987.
 8. Weimar, J. Cellular automata for reaction-diffusion systems. *Parallel computing*, 1997, vol. 23, no. 11, pp. 1699–1715.
 9. Vanag V.K. *Dissipativnye struktury v reakcionno-diffuzionnyh sistemah. Jeksperiment i teoriya* [Dissipative structures in reaction-diffusion systems. Experiment and Theory]. Izhevsk, IKI pub., 2008, 300 p. (In Russian)
 10. Boccara N. *Reaction-Diffusion complex systems*. Berlin, Springer, 2004, 397 p.
 11. Bandman O. Parallel simulation of asynchronous cellular automata evolution. In: *Proc. of 7th International Conference on Cellular Automata, for Research and Industry (ACRI 2006)*. 2016. Vol. 4173 of LNCS. Springer, pp. 41–47.
 12. 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.
 13. Kalgin K.V. Comparative study of parallel algorithms for asynchronous cellular automata simulation on different computer architectures. In: *Proc. of ACRI-2010, LNCS 6350*. Springer, 2010, pp. 399–408.
 14. Rubtsov S.E., Pavlova A.V., Savenkov S.I. O kletочно-avtomatnyh modelyah konvekcionno-diffuzionnyh processov primesej [About cellular-automatic models of convection-diffusion processes of substances]. *Jekologicheskij vestnik nauchnyh centrov Chernomorskogo jekonomicheskogo sotrudnichestva* [Ecological Bulletin of Research Centers of the Black Sea Economic Cooperation], 2016, no. 4, pp. 62–68. (In Russian)
 15. Rubtsov S.E., Pavlova A.V. Kletочно-avtomatnye modeli diffuzionno-reakcionnyh processov mnogokomponentnyh primesej [Cellular-automata models of diffusion-reaction processes of multicomponent impurities]. *Zashhita okruzhajushhej sredy v neftegazovom komplekse*

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. Aloyan 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)
3. Aloyan A.E., Piskunov V.N. Modelirovanie regional'noj dinamiki gazovyh primesej i aehro-

- [Environmental protection in the oil and gas sector], 2017, no. 6, pp. 55–60. (In Russian)
16. 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)
17. 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 vlijanija vulkanicheskikh i prirodno-tehnologicheskikh zagryaznenij 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* [Environmental protection in the oil and gas sector], 2010, no. 9, pp. 6–12. (In Russian).

© Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества, 2017

© Рубцов С. Е., Павлова А. В., Олейников А. С., 2017

Статья поступила 12 декабря 2017 г.