

МАТЕМАТИКА

УДК 536.2:004.94

DOI: 10.31429/vestnik-18-4-8-13

МОДЕЛИРОВАНИЕ МИГРАЦИИ ПОЛЛЮТАНТОВ С ПОМОЩЬЮ ТРЕХМЕРНЫХ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ

Рубцов С. Е., Павлова А. В., Истомин Н. К., Телятников И. С.

В работе предложена модификация КА-модели диффузии с окрестностью Марголуса. Ее пространственная реализация и добавление факторов, влияющих на распространение вещества (ветра и гравитации), приближает модель к имитируемому процессу. В модель также введена возможность обхода препятствий (неровности рельефа, элементы застройки и т.д.). Для удобства интерпретации и анализа результатов работы предлагаемой модели предусмотрена возможность перехода от булевых значений, полученных с помощью КА, к непрерывным функциям, описывающим поле концентрации примеси, посредством процедуры осреднения по заданному радиусу.

Ключевые слова: клеточный автомат, пространственная диффузия, окрестность Марголуса, перенос примеси, осаждение, деградация.

MODELING THE MIGRATION OF POLLUTANTS USING THREE-DIMENSIONAL CELLULAR AUTOMATA

S. E. Rubtsov¹, A. V. Pavlova¹, N. K. Istomin², I. S. Telyatnikov³¹ Kuban State University, Krasnodar, Russia² Federal Research Center for Rice, Krasnodar, Russia³ Southern Scientific Centre of Russian Academy of Science, Rostov-on-Don, Russia
e-mail: pavlova@math.kubsu.ru

Abstract. The paper proposes a modification of the CA-model of diffusion with the vicinity of Margolus. Its spatial implementation and the addition of factors affecting the propagation of matter (wind and gravity) brings the model closer to the simulated process.

The automata simulating diffusion operates in a two-stroke synchronous mode. The model also introduces the possibility of bypassing the obstacles (uneven terrain, elements of construction, etc.). To simulate the convection process, a third cycle was introduced into the CA operation algorithm, which is responsible for the movement of particles under the influence of the wind, taking into account their possible collision. CA-diffusion in space with various kinds of obstacles was implemented. When modeling the interaction between a substance and an obstacle, each block in the basic substitution is associated with a binary type parameter, as a result of which all blocks are subdivided into two types: internal and boundary. As a result, the introduced parameter determines the necessity to rotate the block under consideration when performing basic substitution. In this case, the boundary of the modeling area can be specified in the form of planes (plates) and parallelepipeds. Obstacles are specified by a separate boolean three-dimensional array. The use of such obstacles, simulating walls and buildings, allows us to simulate the diffusion of contaminants, for example, in urban environments. With a given probability, particles can settle on vertical and horizontal surfaces.

An additional parameter was also introduced into the CA, which makes it possible to simulate the movement of a pollutant under the influence of gravity. To take into account the degradation of the impurity, one more phase was added to the cellular automata model, at which each cell with a particle can turn into a cell of the environment with a certain given probability.

For the convenience of interpretation and analysis of the proposed model results, the possibility of transition from Boolean values obtained with the help of the CA to continuous functions describing the field of impurity concentration by means of averaging over a given radius is provided.

Keywords: cellular automata, spatial diffusion, the vicinity of Margolus, impurity transfer, sedimentation, degradation.

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.

Истомин Никита Константинович, младший научный сотрудник Лаборатории информационных, цифровых и биотехнологий Федерального научного центра риса; e-mail: istomin_nike@mail.ru.

Телятников Илья Сергеевич, канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник лаборатории математики и механики Федерального исследовательского центра «Южный научный центр РАН»; e-mail: ilux_t@list.ru.

Работа выполнена при поддержке РФФИ и администрации Краснодарского края (19-41-230005).

Введение

Выбросы отходов производства, интенсивное использование природных ресурсов и такие разрушительные явления как пожары, одним из негативных последствий которых является интенсивное массовыделение, приводят к загрязнению воздушного бассейна и представляют угрозу окружающей среде. Проблемы оценки экологической нагрузки на территории, подверженные воздействиям загрязняющих веществ (ЗВ), требуют развития методов математического моделирования распространения поллютантов и прогнозирования развития экологической ситуации. Результаты моделирования диффузии используются для прогнозирования мест с повышенным загрязнением вследствие выбросов различных опасных примесей при производственных авариях, для создания эффективных систем пожаротушения, принцип которых основан на распространении углекислого газа, и т.д.

Широко используемым математическим инструментом решения задач конвекции-диффузии в атмосфере и водной среде являются конечно-разностные методы [1, 2]. Но анализ исследований и публикаций по моделированию различных процессов окружающей среды, в том числе связанных с проблемами переноса и осаждения загрязняющих примесей, демонстрирует растущий интерес к применению дискретных клеточно-автоматных (КА) [3–7 и др.] подходов, а также гибридных моделей. На сегодняшний день КА получили широкое применение в моделировании пространственно-распределенных динамических систем, прототипами которых являются физические системы.

В работе предложена модификация КА-модели диффузии с окрестностью Марголуса. Ее пространственная реализация и добавление факторов, влияющих на распространение вещества (ветра и гравитации), приближает модель к имитируемому процессу. В модель также введена возможность обхода препятствий (неровности рельефа, элементы застройки и т.д.).

1. КА-модель диффузионного процесса в атмосфере

Идею клеточных автоматов в конце сороковых годов прошлого века независимо друг от друга сформулировали Джон фон Нейманом и Конрад Цусе. Клеточный автомат представлялся универсальной вычислитель-

ной средой для построения, анализа и сравнения характеристик алгоритмов. Уже в семидесятых годах на фоне бурного развития микроэлектроники появилась потребность в быстродействующих электронных схемах на параллельных элементарных автоматах, а в дальнейшем КА стали применять не только для построения параллельных устройств, но и для развития новых моделей вычислений. С середины восьмидесятых годов XX в. стали разрабатываться КА, моделирующие различные физические процессы [8–11]. И сегодня клеточные автоматы представляют собой удобную среду моделирования различных естественных и искусственных систем, явлений и процессов, допускающих высокий уровень распараллеливания [12, 13]. В настоящее время математические модели типа КА широко применяются для имитации перколяции, реакции-диффузии, кристаллизации и т.д.

Пространственный клеточный автомат можно описать как трехмерную таблицу, для ячеек которой определено множество клеток, называемых окрестностью. Каждая клетка является конечным автоматом, состояния которого определяются состояниями соседних клеток и, возможно, ее собственным состоянием. Для работы КА требуется задание входных состояний всех ячеек и правил их перехода из одного состояния в другое, т.е. функции, задающей состояние элементарного автомата на следующем шаге и называемой функцией переходов (локальным оператором). На каждой итерации, используя правила перехода и состояния соседних ячеек, определяется новое состояние каждой ячейки. Итеративная смена конфигурации при переходах всех элементарных состояний в новые состояния называется эволюцией КА.

В данной работе выбран модифицированный 3D вариант КА-модели диффузии с окрестностью Марголуса (ТМ-диффузия) [9]. Для реализации трехмерной диффузии клеточным автоматом с окрестностью Марголуса пространство разделяется множеством равноудаленных плоскостей, параллельных координатным плоскостям. Пересечение двух соседних плоскостей с двумя перпендикулярными соседними плоскостями образует ячейку, которая является конечным автоматом. Пространственный клеточный автомат можно представить как трехмерную сетку, разделенную на четные и нечетные блоки. Элементарный блок (рис. 1), состоит из восьми ячеек, каждая из которых характеризует некоторую область пространства.

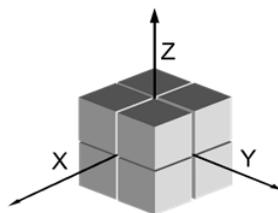


Рис. 1. Представление блока в пространстве

Автомат функционирует в двухтактном синхронном режиме, т.е. каждая итерация делится на два такта. Базовая подстановка применяется к четным блокам на четных тактах, к нечетным — на нечетных. Подстановка производит в клетках блока поворот состояний вокруг одной из трех осей с вероятностями: p — по часовой стрелке, $(1 - p)$ — против. В каждую подстановку введены контекстные клетки: (x_q, m_q) — для определения оси поворота; (x_p, m_p) — для вычисления направления поворота блока состояний; (x_t, m_t) — для управления чередованием четного и нечетного тактов. При равной вероятности выбора направления поворотов блоков ($p = 0,5$), коэффициент диффузии для этой модели равен $3/2$. Уменьшая p и манипулируя значениями шагов по времени (τ) и пространству (h), можно моделировать процесс диффузии с любым коэффициентом. При этом предусмотрена возможность изменения вероятности поворота блоков клеточного автомата с целью вариации коэффициента диффузии и учета квазигоризонтального характера атмосферных процессов [1].

2. Имитация переноса, осаждения и обхода препятствий

При рассеянии примеси в атмосфере важными факторами, влияющими на распределение загрязнителя, являются ветер и гравитация.

Для моделирования процесса конвекции в алгоритм работы КА введен третий такт, отвечающий за перемещение частиц под действием ветра с учетом их возможного столкновения. Для реализации ветра в алгоритме КА добавлена новая фаза — смещение.

Для примера будем полагать, что конвекция вводится вдоль плоскости xOy . Во время выполнения этой фазы к каждой клетке, занимаемой частицей, будет применяться действие ветра, задаваемое в полярных координатах: $v_x = v \cos \alpha$, $v_y = v \sin \alpha$. Здесь v — скорость, а α — угол, задающий направле-

ние ветра. При моделировании ветра в КА смещение частицы примеси на одну клетку осуществляется по направлению ветра вдоль осей Ox и Oy с вероятностями p_x , p_y соответственно, рассчитываемыми как отношение

$$p_x = \frac{v_x}{v_{\max}}, \quad p_y = \frac{v_y}{v_{\max}}.$$

Перенос субстанций при отсутствии препятствий моделируется синхронным сдвигом клеток массива состояний с пропорциональными соответствующим компонентам вектора скорости ветра вероятностями. Сдвиг добавляется в качестве третьего такта к ТМ-диффузии.

Реализована КА-диффузия в пространстве с различного рода препятствиями. Добавление в алфавит клеточного автомата клеток-препятствий заставляет пересмотреть стандартные подстановки блоков. При моделировании взаимодействия субстанции с препятствием каждому блоку в базовой подстановке сопоставлен параметра 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 в виде плоскостей (пластин) и параллелепипедов. Препятствия задаются отдельным булевым трехмерным массивом. Использование таких препятствий, моделирующих стены и здания, позволяет имитировать диффузию загрязняющих примесей, например, в условиях городской застройки.

На рис. 2, 3 представлены результаты работы КА при наличии описанных типов препятствий. Так, препятствие в виде пластины представлено в виде группы клеток, располагающихся на одном из слоев, параллельных плоскости YZ (рис. 2). Параллелепипеды разной высоты представлены в виде трех групп клеток, основания которых лежат на одной плоскости (рис. 3).

С заданной вероятностью частицы могут оседать на вертикальных и горизонтальных

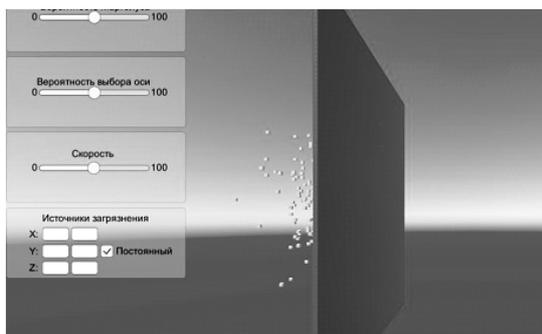


Рис. 2. Препятствие в виде пластины

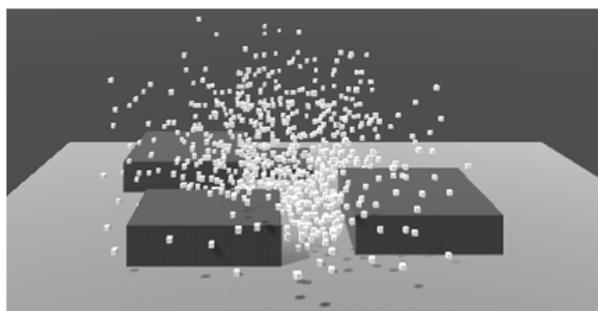


Рис. 3. Препятствия в виде параллелепипедов

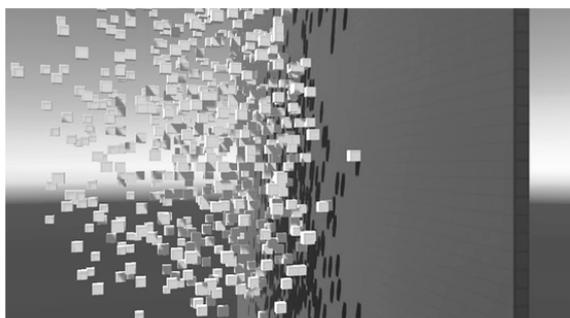


Рис. 4. При обходе препятствия примесь смещается под действием ветра

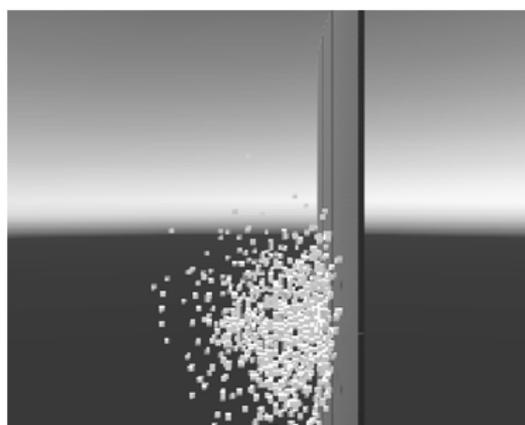


Рис. 5. Смещение примеси под действием гравитации

поверхностях. Для моделирования осаждения необходимо несколько изменить алгоритм поворота блока, в котором находятся клетки с препятствиями. Вводя вероятность осаждения, задается условие, при котором клетка с препятствием поглотит частицу загрязнителя, в противном случае считается, что частица отскочила от препятствия. Для каждой клетки с препятствием ведется подсчет осевших частиц, чтобы смоделировать карту осадений, при построении которой используется осреднение для получения сглаженных результатов.

В КА модель введен также дополнительный параметр, позволяющий имитировать перемещение поллютанта под действием гравитации. В зависимости от массы загрязняющего вещества и плотности среды, в которой идет процесс конвекции-диффузии, в течение некоторого времени примесь может опускаться вниз или подниматься. Параметр, отвечающий за гравитационные свойства ЗВ, принимает значения на промежутке $[-1; 1]$. Для

промежутка $[-1; 0)$ частицы вещества будут подниматься вверх (для разогретых загрязнителей), для промежутка $(0; 1]$ — опускаться.

Рис. 4 иллюстрируют работу КА при наличии препятствия и северо-восточного ветра.

На рис. 5 представлено смещение «тяжелой» примеси под действием гравитации.

Простейшей реакцией при распространении загрязняющего вещества в атмосфере является его распад с течением времени. Для учета деградации примеси в модель клеточного автомата необходимо добавить еще одну фазу, на которой каждая клетка с частицей может превратиться в клетку среды с некоторой заданной вероятностью.

Заключение

Основная проблема построения клеточно-автоматных моделей физических процессов — создание КА с заданными свойствами. Для перехода от модельных величин к реальным и обратно необходимо подобрать масштабирующие коэффициенты. В работе [14] предлагает-

ся возможное решение проблемы определения таких коэффициентов с помощью так называемых инвариантов КА-моделей (безразмерных характеристик процесса, не зависящих от способа его математического представления), позволяющих построить клеточный автомат по физическому описанию явления и интерпретировать результаты работы модели в привычных физических понятиях.

Для удобства интерпретации и анализа результатов работы предлагаемой модели предусмотрена возможность перехода от булевых значений, полученных с помощью КА, к непрерывным функциям, описывающим поле концентрации примеси, посредством процедуры осреднения по заданному радиусу

$$D_a = \frac{S}{(2r)^3}.$$

Осредненное значение (концентрация) D_a вычисляется как отношение количества частиц S в исследуемом пространстве к размеру этого пространства, определяемого радиусом осреднения r . Выполнено сравнение результатов работы клеточного автомата с данными, полученными при помощи разностной схемы с расщеплением по координатам. Для клеточного автомата проведена настройка в соответствии с результатами расчетов по явной и неявной схемам для начально-граничной задачи первого рода в параллелепипеде [15].

Реализованы линейный и распараллеленный варианты работы КА, при этом тестовые расчеты показали, что с ростом количества потоков, увеличивается скорость расчетов. Параллельный алгоритм осреднения не дает существенного увеличения скорости для числа потоков больше двух, однако он значительно выигрывает по времени с ростом радиуса осреднения.

Программная реализация КА модели диффузии в воздушной среде в системе построения клиентских приложений WPF позволила провести численные эксперименты, демонстрирующие работу клеточного автомата для заданных источников загрязнения при наличии ветра, препятствий и гравитации.

В дальнейшем в конечно-разностную модель будут введены дополнительные механизмы, описывающие трансформации загрязнителей и взаимодействие элементов многокомпонентных субстанций, что позволит настроить диффузионно-реакционные КА [7] для адекватной интерпретации результатов их работы.

Литература

1. *Алоян А.Е.* Моделирование динамики и кинетики газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. М.: Наука, 2008. 415 с.
2. *Пененко В.В., Алоян А.Е.* Модели и методы для задач охраны окружающей среды. Новосибирск: Наука, 1985. 245 с.
3. *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.
4. *Бандман О.Л.* Отображение физических процессов на их клеточно-автоматные модели // *Вестник томского государственного университета*. 2008. № 2(3). С. 5–17.
5. *Алексеев Д.В., Казунина Г.А., Чередниченко А.В.* Клеточно-автоматное моделирование процесса разрушения хрупких материалов // *Прикладная дискретная математика. Дискретные модели реальных процессов*. 2015(а). № 2 (28). С. 103–117.
6. *Беланков А.Б., Столбов В.Ю.* Применение клеточных автоматов для моделирования микроструктуры материала при кристаллизации // *Сиб. журн. индустр. матем.* 2005. № 8:2. С. 12–19.
7. *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.
8. *Chopard B., Droz M.* Cellular automata model for heat conduction in a fluid // *Physical Letters A*. 1988. Vol. 126. No. 8/9. P. 476–480.
9. *Weimar J.* Cellular automata for reaction/diffusion systems // *Parallel Computing*. 1997. Vol. 23. No 11. P. 1699–1715.
10. *Магминецкий Г., Степанцов М.* Клеточные автоматы для расчета некоторых газодинамических процессов // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 1996. Т. 36. № 5. С. 137–145.
11. *Свирижев Ю.М.* Нелинейные волны, диссипативные структуры и катастрофы в экологии. М.: Наука, 1987. 368 с.
12. *Аладьев В.З.* Классические однородные структуры. Клеточные автоматы. Fultus Books. CA, Palo Alto, 2009. 535 с.
13. *Матюшкин И.В., Заплетина М.А.* Обзор по тематике клеточных автоматов на базе современных отечественных публикаций // *Компьютерные исследования и моделирование*. 2019. Т. 11. № 1. С. 9–57.
14. *Бандман О.Л.* Инварианты клеточно-автоматных моделей реакционно-диффузионных процессов // *Прикладная дискретная математика*. 2012. № 3(17). С. 108–120.
15. *Кочкин Н.С., Павлова А.В., Рубцов С.Е.* Клеточно-автоматное и конечно-разностное моделирование процесса миграции примеси // *Актуальные проблемы прикладной математической науки*. 2019. № 1. С. 10–15.

тики, информатики и механики: труды Международной конференции. Воронеж: Научно-исследовательские публикации, 2020. С. 950–953.

References

1. Aloyan A.E. *Modelirovanie dinamiki i kinetiki gazovykh primesey i aerorozley v atmosfere* [Modeling the dynamics and kinetics of gaseous impurities and aerosols in the atmosphere]. Nauka, Moscow, 2008. (In Russian)
2. Penenko V.V., Aloyan A.E. *Modeli i metody dlya zadach okhrany okruzhayushchey sredy* [Models and methods for environmental protection problems]. Nauka, Novosibirsk, 1985. (In Russian)
3. 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.
4. Bandman O.L. Otobrazhenie fizicheskikh protsessov na ikh kletочно-avtomatnye modeli [Mapping physical processes on their cellular automata models]. *Vestnik tomского gosudarstvennogo universiteta* [Bulletin of the Tomsk State University], 2008, no. 2(3), pp. 5–17. (In Russian)
5. Alekseev D.V., Kazunina G.A., Cherednichenko A.V. Kletочно-avtomatnoe modelirovanie protsessa razrusheniya khrupkikh materialov [Cellular-automatic modeling of the process of destruction of brittle materials]. *Prikladnaya diskretnaya matematika. Diskretnye modeli real'nykh protsessov* [Applied Discrete Mathematics. Discrete models of real processes], 2015(a), no. 2 (28), pp. 103–117. (In Russian)
6. Belankov A.B., Stolbov V.Yu. Primenenie kletочnykh avtomatov dlya modelirovaniya mikrostruktury materiala pri kristallizatsii [Application of cellular automata for modeling the microstructure of a material during crystallization]. *Sibirskiy zhurnal industrial'noy matematiki* [Siberian Journal of Industrial Mathematics], 2005, no. 8:2, pp. 12–19. (In Russian)
7. Rubtsov S.E., Pavlova A.V. Kletочно-avtomatnye modeli diffuzionno-reaktsionnykh protsessov mnogokomponentnykh primesey [Cellular-automatic models of diffusion-reaction processes of multicomponent impurities]. *Zashchita okruzhayushchey sredy v neftegazovom komplekse* [Environmental protection in the oil and gas complex], 2016, no. 6, pp. 55–60. (In Russian)
8. Chopard B., Droz M. Cellular automata model for heat conduction in a fluid. *Physical Letters A*, 1988, vol. 126, iss. 8/9, pp. 476–480.
9. Weimar J. Cellular automata for reaction/diffusion systems. *Parallel Computing*, 1997, vol. 23, no. 11, pp. 1699–1715.
10. Maglineykiy G., Stepantsov M. Kletочnye avtomaty dlya rascheta nekotorykh gazodinamicheskikh protsessov [Cellular automata for calculating some gas-dynamic processes]. *Zhurnal vychislitel'noy matematiki i matematicheskoy fiziki* [Journal of Computational Mathematics and Mathematical Physics], 1996, vol. 36, no 5, pp. 137–145. (In Russian)
11. Svirezhev Yu.M. *Nelineynye volny, dissipativnye struktury i katastrofy v ekologii* [Nonlinear waves, dissipative structures and catastrophes in ecology]. Nauka, Moscow, 1987. (In Russian)
12. Alad'ev V.Z. *Klassicheskie odnorodnye struktury. Kletочnye avtomaty* [Classic homogeneous structures. Cellular automata]. Fultus Books. CA, Palo Alto, 2009. (In Russian)
13. Matyushkin I.V., Zapletina M.A. Obzor po tematike kletочnykh avtomatov na baze sovremennykh otechestvennykh publikatsiy [Review on the topic of cellular automata based on modern domestic publications]. *Komp'yuternye issledovaniya i modelirovanie* [Computer Research and Modeling], 2019, vol. 11, no. 1, pp. 9–57. (In Russian)
14. Bandman O.L. Invarianty kletочно-avtomatnykh modeley reaktsionno-diffuzionnykh protsessov [Invariants of cellular automata models of reaction-diffusion processes]. *Prikladnaya diskretnaya matematika* [Applied discrete mathematics], 2012, no. 3(17), pp. 108–120. (In Russian)
15. Kochkin N.S., Pavlova A.V., Rubtsov S.E. Kletочно-avtomatnoe i konechno-raznostnoe modelirovanie protsessa migratsii primesi [Cellular-automatic and finite-difference modeling of the process of migration of impurities]. *Aktual'nye problemy prikladnoy matematiki, informatiki i mekhaniki: trudy Mezhdunarodnoy konferentsii* [Actual problems of applied mathematics, informatics and mechanics: proceedings of the International conference]. Nauchno-issledovatel'skie publikatsii, Voronezh, 2020, pp. 950–953. (In Russian)