

К КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНЫМ МОДЕЛЯМ КОНВЕКЦИОННО-ДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ

А. В. Павлова, С. Е. Рубцов

Кубанский государственный университет, 350040, Краснодар

УДК 510.67:554

Работа посвящена развитию методов моделирования механизмов переноса и рассеяния субстанций, разработке и сопоставлению моделей, основанных на применении конечно-разностных методов решения задач распространения примесей, а также клеточно-автоматных (КА) моделей указанных процессов. В основу модели распространения примеси в атмосфере положена двумерная КА диффузия с окрестностью Марголуса (ТМ-диффузия), распространенная на трехмерное пространство, добавлены процессы переноса субстанций под действием ветра и взаимодействия с препятствиями (строения, неровности рельефа). При отсутствии препятствий перенос осуществлен синхронным сдвигом состояний клеток вдоль координатных осей с вероятностью, пропорциональной соответствующим составляющим скорости ветра. Сдвиг добавляется третьим тактом к ТМ-диффузии, при наличии препятствий после сдвига выполняется еще один такт. Для сравнения с результатами конечно-разностного моделирования реализован переход от булевых значений к непрерывным функциям распределения примеси путем осреднения значений состояний клеток по задаваемой окрестности.

Ключевые слова: пространственная модель, примесь, диффузия, клеточно-автоматные модели, препятствие, перенос.

Результаты изучения процессов миграции субстанций востребованы в различных областях научной и хозяйственной деятельности. Работа направлена на развитие методов моделирования механизмов переноса и рассеяния субстанций, разработку и сопоставлению моделей, основанных на применении конечно-разностных методов решения задач распространения примесей, а также клеточно-автоматных (КА) моделей указанных процессов. КА моделирование позволяет расширить возможности исследования миграционных и диффузионных процессов в водной среде и атмосфере.

В основу модели распространения примеси в атмосфере положена двумерная КА диффузия с окрестностью Марголуса (ТМ-диффузия) [1], распространенная на трехмерное пространство. Используемые КА подходы дают возможность моделировать сложные процессы посредством относительно простых функций перехода [1, 2, и др.], они могут быть использованы в дополнение к хорошо зарекомендовавшим себя в гидродинамике математическим моделям и развитым численным методам, используемым для изучения рассеяния загрязняющих субстанций [3].

Двумерные клеточно-автоматные модели течения жидкости и диффузии примесей, ранее реализованные авторами [4, 5] получили дальнейшее развитие в настоящей работе. Пространственная область аналогично плоскому случаю представляется клеточным массивом, в множестве имен которого $M = \{(i, j, k) : i, j, k = 0, \dots, N\}$ выделяются подмножества имен с четными $M_1 = \{(i, j, k) : i \bmod 2 = j \bmod 2 = k \bmod 2 = 0\}$ и нечетными $M_2 = \{(i, j, k) : i \bmod 2 = j \bmod 2 = k \bmod 2 = 1\}$ индексами. Для каждого имени $(i, j, k) \in M$ шаблон

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

задает локальную конфигурацию в виде блока из восьми кубиков

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

$$(u_7, (i+1, j+1, k+1)), (u_8, (i+1, j, k+1))\}.$$

Функционирует клеточный автомат в двухтактном синхронном режиме. На первом шаге каждой итерации, подразделяемой на два такта, к четным блокам применяется базовая подстановка, на втором — соответственно к нечетным. В результате подстановки в клетках блока с вероятностью p реализуется поворот состояний вокруг одной из трех осей по часовой стрелке и с вероятностью $(1-p)$ — против часовой стрелки. При этом в каждую подстановку с целью выбора оси поворота блока вводится контекстная клетка (x_q, m_q) , для определения его направления — контекстная клетка (x_p, m_p) . Контекстная клетка (x_t, m_t) служит для управления чередованием четного и нечетного тактов. Контекстные подстановки можно описать следующим образом:

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

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

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

где

$$\alpha_p = \begin{cases} 1, & \text{rand} < p; \\ 0, & \text{rand} \geq p, \end{cases} \quad \alpha_t = \begin{cases} 1, & (i, j) \in M_1; \\ 0, & (i, j) \in M_2, \end{cases} \quad \alpha_q = \begin{cases} X, & \text{rand} < q; \\ Y, & q \leq \text{rand} < 2q; \\ Z, & \text{rand} \geq 2q, \end{cases} \quad q \leq \frac{1}{3}.$$

Так как атмосферные процессы можно считать квазигоризонтальными [3] и горизонтальные коэффициенты диффузии превышают коэффициент диффузии в вертикальном направлении, вероятность выбора осей X или Y меньше, чем оси Z . Выполнение законов сохранения (массы, импульса и энергии) обеспечивается формулировкой правил перемещения и столкновения. Полная система подстановок не приводится в силу громоздкого вида.

В случае, когда граница рассматриваемой области имеет сложную конфигурацию, а также при наличии разного рода препятствий внутри области при использовании конечно-разностных методов возникают определенные трудности. Применение КА моделей позволяет этих трудностей избежать.

При моделировании препятствий вместе с массивом состояния атмосферы $U(i, j, k)$ с элементами значений 0 или 1, соответствующими отсутствию или наличию примеси, в классическую модель ТМ-диффузии, введен массив $P(i, j, k)$, описывающий расположения препятствий на клеточно-автоматной решётке, с аналогичными значениями элементов (0 соответствует отсутствию, 1 — наличию препятствия). Функционирует КА в четырехтактном синхронном режиме.

После определения оси вращения аналогично классическому случаю на первом такте четные блоки разбиения массива $U(i, j, k)$ с заданной вероятностью p поворачиваются на $\pi/2$ по часовой стрелке и с вероятностью $(1-p)$ — против часовой стрелки. На втором такте осуществляется сравнение значений элементов массива $U(i, j, k)$ и соответствующих значений элементов $P(i, j, k)$. В случае, когда оба сравниваемых значения равны единице $U(i, j, k) = P(i, j, k) = 1$, производится обратный поворот содержащего клетку (i, j, k) блока. На третьем и четвертом тактах этот же алгоритм выполняется для блоков нечетного разбиения.

Если препятствия нет, перенос выполняется путем синхронного сдвига вдоль координатных осей состояний клеток массива $U(i, j, k)$ с вероятностью, пропорциональной составляющим вектора скорости ветра. Синхронным сдвиг производится третьим тактом после двухтактной ТМ-диффузии. При этом основную проблему составляет выбор коэффициента пропорциональности.

При наличии препятствия следует выполнить еще один такт после сдвига, необходимо сопоставить значения соответствующих элементов массивов $U(i, j, k)$ и $P(i, j, k)$. Если $U(i, j, k) = P(i, j, k) = 1$, случайным образом производится перенос значения $U(i, j, k) = 1$ в ближайшую ячейку, имеющую нулевое значение.

С помощью изложенного подхода произведены численные эксперименты, исследована пространственно-временная структура распределения примеси. Выполнен переход от булевых к непрерывным функциям, описывающим распределения концентрации примеси, путем осреднения по заданной пользователем окрестности значений состояния клеток. Путем сопоставления характеристик КА (начального состояния, размеров КА, правил переходов, вероятностей их использования) с данными простых конечно-разностных моделей осуществляется подбор параметров для более сложных КА моделей.

Результаты изучения пространственно-временного распределения и закономерностей распространения загрязняющих примесей в воздушной и водной средах чрезвычайно важны для оценки экологической ситуации и тенденций ее изменения. Применение клеточно-автоматных методов моделирования диффузионно-миграционных процессов может быть использовано в качестве дополнения опробованных численно-аналитических методик исследования распространения загрязнителей, хотя при сопоставлении КА-модельных

величин физическим характеристикам процесса зачастую возникают трудности. На сегодняшний день проблемы масштабирования КА моделей не до конца решены, однако их исследователи предпринимают попытки корректной формализации перехода от физического описания процессов к их КА-представлению, так в работах [6, 7] представлены общие принципы сопоставления физических и модельных величин.

Список литературы

- [1] Toffoli T., Margolus N. Cellular Automata Machines. USA: MIT Press, 1987. 279 p.
- [2] Бандман О.Л. Клеточно-автоматное моделирование пространственной динамики. Новосибирск: СО РАН. 2000. 113 с.
- [3] Марчук, Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982. 315 с.
- [4] 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.
- [5] Рубцов С.Е., Павлова А.В., Шкурят 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.
- [6] Бандман О.Л. Отображение физических процессов на их клеточно-автоматные модели // Вестник Томского государственного университета. 2008. № 2(3). С. 1–13.
- [7] Бандман О.Л. Инварианты клеточно-автоматных моделей реакционно-диффузионных процессов // Прикладная дискретная математика. 2012. № 3(17). С. 108–120.

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

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

Дата поступления — 15 мая 2017 г.