

Ю. Г. Медведев

*(Новосибирск)***ТРЕХМЕРНАЯ КЛЕТочно-АВТОМАТНАЯ МОДЕЛЬ
ПОТОКА ВЯЗКОЙ ЖИДКОСТИ**

Рассмотрены клеточно-автоматные модели в приложении к задачам гидродинамики, а также оригинальная трехмерная модель потока вязкой жидкости с 12 соседями. Представлен пакет программ, позволяющий моделировать трехмерные потоки посредством предложенной модели, и результаты экспериментов моделирования.

Введение. Классический подход к моделированию пространственной динамики основан на описании исследуемого явления дифференциальными и/или интегральными уравнениями, конструировании численного метода их решения, а также компьютерной реализации этого метода. С развитием вычислительной техники стали появляться дискретные модели пространственной динамики. Одна из них – клеточный автомат (КА) – позволяет моделировать широкий класс процессов в различных средах: диффузию, теплопроводность, химические реакции, потоки жидкостей и газов и т. д. Потоки жидкостей и газов описываются следующими моделями на клеточных автоматах [1]: двумерными НРР-моделями (Hardy, Pazzis, Pomeau) с 4 соседями в КА и FHR-моделями (Frisch, Hasslacher, Pomeau) с 6 соседями, а также псевдочетырехмерной FCHC-моделью (Face Centered Hyper Cubic). НРР-модель – это первая КА-модель. Она обладает рядом недостатков вследствие своей детерминированности. FHR-модель вероятностная. Доказано, что она соответствует уравнениям Навье – Стокса потока жидкости. FCHC-модель применяется для моделирования трехмерных потоков. Каждая клетка FCHC-модели имеет 24 соседа, следовательно, размер таблицы переходов автомата равен 2^{24} . Поэтому FCHC-модель очень сложна и почти не используется на практике. В работах [2, 3] независимо предложена трехмерная КА-модель потока жидкости. Каждая ее клетка имеет 12 соседей (размер таблицы переходов автомата 2^{13} с учетом 1 частицы покоя). Эта модель намного проще FCHC по объему вычислений, но обладает меньшей точностью. Она позволяет делать расчеты на имеющейся технике за приемлемое время.

В данной работе на примере известных 2D-моделей показаны принципы составления правил переходов и граничных условий и применения их при описании трехмерной модели с 12 соседями. Также представлен пакет программ, реализующий эти модели. Результаты экспериментов, проведенных при помощи этого пакета, качественно совпадают с результатами, получен-

ными при помощи других моделей. Методы получения количественных результатов для известных КА-моделей описаны в работе [1].

Общие принципы КА-моделирования. Клеточный автомат имеет регулярную структуру. Каждая его клетка сопоставлена с небольшим объемом моделируемого пространства, в котором находится поток. Состояние клетки в каждый момент времени полностью определяется набором некоторых гипотетических частиц с единичной массой и определенным вектором скорости. Эти частицы перемещаются из клетки в клетку и изменяют направление своего вектора скорости так, чтобы выполнялись законы сохранения массы и импульса. Каждый такт работы клеточного автомата разбит на две фазы: столкновение и сдвиг. На фазе столкновения происходит изменение направления движения частиц согласно некоторым правилам столкновения. Новое состояние клетки является функцией только от состояния этой клетки на предыдущем такте и не зависит от состояний других клеток. На фазе сдвига каждая частица перемещается на одну клетку в направлении вектора ее скорости независимо от других частиц, а состояние клетки зависит только от состояний соседних клеток.

Для соблюдения законов сохранения достаточно выполнения следующих условий.

1. Массы частиц одинаковы и равны 1.
2. Скорости частиц равны по величине и могут различаться только по направлению, причем модуль скорости равен 0 или 1.
3. Количество направлений движения совпадает с количеством соседей каждой клетки.
4. Частицы находятся в клетках пространства, причем в каждой клетке не могут находиться несколько частиц, имеющих одинаковый вектор скорости.
5. Правила столкновения должны быть подобраны так, чтобы при каждом столкновении суммарные масса и импульс всех частиц в каждой клетке не изменялись.

Таким образом, состояние клетки можно представить булевым вектором длины $n = k + l$, где k – число соседей, а l – число частиц покоя. Каждый разряд этого вектора задает наличие или отсутствие частицы соответствующего ему направления. На рис. 1 изображена одна клетка ФНР-модели с тремя частицами в ней. Следует заметить, что для экспериментов с потоками наибольший интерес представляют не столько сами гипотетические частицы клеточного автомата с их скоростями движения, сколько осредненные значения их скоростей в некоторой окрестности, получаемые как векторная сумма всех попадающих в нее векторов частиц. Именно они и совпадают с макроscopic-

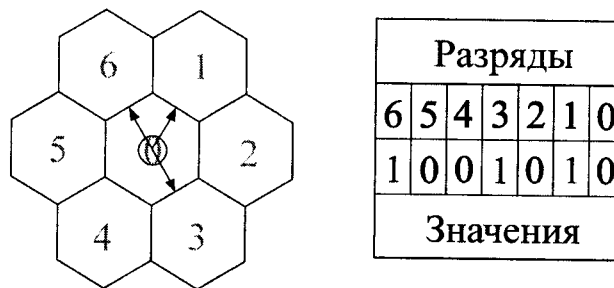


Рис. 1. Клетка ФНР-модели и вектор ее состояния

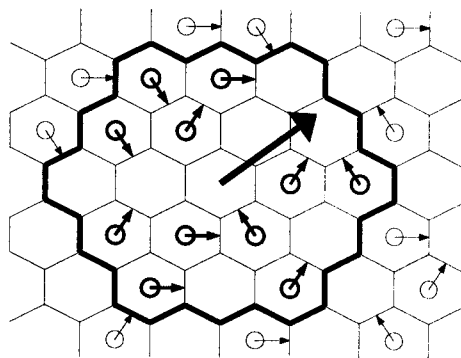


Рис. 2. Осредненный вектор скорости

ческой скоростью реальной жидкости. В силу гексагональной структуры автомата FHP-модели окрестность осреднения имеет форму шестиугольника (рис. 2).

Одно из преимуществ КА-моделей – это простые граничные условия. Они определяются введением в модель дифференциации клеток по типам. При моделировании течения жидкости можно выделить следующие типы клеток: рабочая клетка, клетка-стенка и клетка-источник частиц. У всех клеток одного типа одинаковые функции переходов. У клеток разных типов – разные. На фазе сдвига поведение клеток всех типов одинаково, на фазе столкновения поведение клеток разных типов различно.

Функции переходов клеток-стенок отличаются от функций переходов рабочих клеток тем, что векторы скорости частиц должны изменяться по законам, обеспечивающим отражающие функции препятствия. Простейшим законом отражения является изменение всех векторов скорости частиц на противоположные (рис. 3, а).

Клетки-источники с некоторой вероятностью могут рождать частицы со всеми возможными направлениями вектора скорости. Установив такие клетки в пространстве в одну линию, получим источник равномерного потока частиц. Изменяя вероятность рождения частиц, можно варьировать интенсивность потока.

Рассмотрим подробнее функционирование клеток-стенок (w-клеток, англ. wall), т. е. способы отражения частиц от препятствий. Наиболее простой из них, как отмечено выше, – отражение в обратном направлении (см. рис. 3, а). При более сложном способе частицы отражаются по законам геометрической оптики (рис. 3, b). Здесь необходимо учитывать не только состояние рассматриваемой клетки, но также и положение соседних клеток препятствия. Третий способ – частица отражается в любом допустимом направлении (туда, где нет препятствия) равновероятно (рис. 3, c). Четвертый (комбинированный) способ состоит из этих трех способов отражения с заданной вероятностью срабатывания каждого из них при каждом конкретном столкновении.

Трехмерная модель с ромбододекаэдральной структурой. Попытки моделировать трехмерные потоки проекциями псевдочетырехмерных моделей на трехмерное пространство влекут за собой гигантские затраты машинного времени (размер таблицы переходов автомата 2^{27} при количестве соседей 24 и 3 частицах покоя) и, как следствие, практическую неприменимость

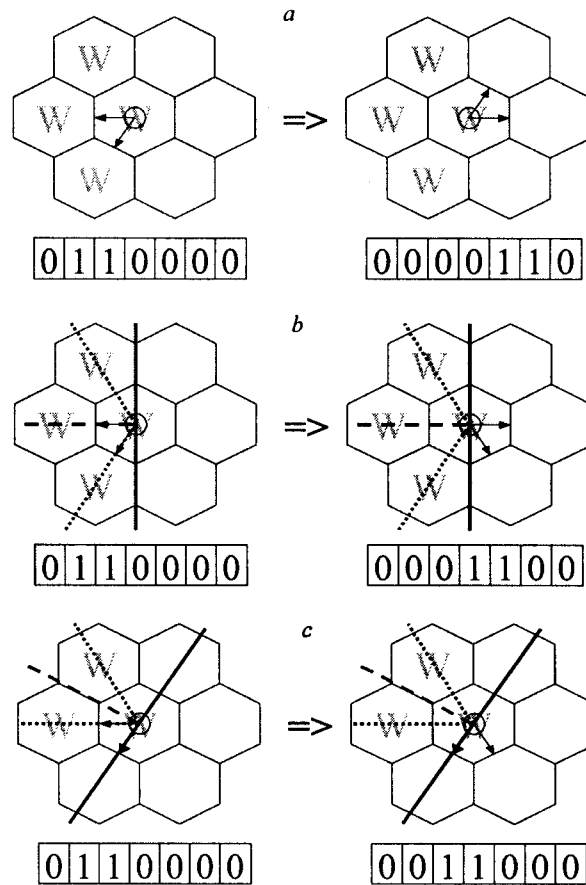


Рис. 3. Типы клеток-стенок

псевдочетырехмерных моделей (по крайней мере, на современном уровне развития вычислительной техники).

В связи с этим предлагается 3D-модель потока с количеством соседей 12 (размер таблицы переходов автомата 2^{13} с учетом 1 частицы покоя), которая позволяет моделировать потоки в значительных объемах на имеющихся в настоящий момент вычислителях. Эта модель аппроксимирует уравнение Навье – Стокса с меньшей точностью, чем псевдочетырехмерная, но, как показали эксперименты, вполне приемлема. Структура решетки автомата основана на полярном комплексе ромбического додекаэдра (рис. 4) и достаточно проста в реализации.

Пусть в автомате будет $l \times m \times n$ узлов. Разместим их в точках 3D-пространства с координатами (x_i, y_j, z_k) в декартовой системе, вычисляемыми по формулам

$$x_i = i + (k \bmod 2)/2;$$

$$y_j = j + (k \bmod 2)/2;$$

$$z_k = (k + (k \bmod 2)/2)\sqrt{2},$$

где $0 \leq i < l, 0 \leq j < m, 0 \leq k < n$.

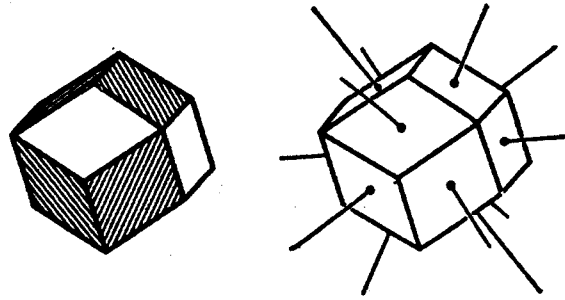


Рис. 4. Ромбический додекаэдр и его полярный комплекс, положенный в основу 3D-модели

Если заполнить трехмерное пространство ромбическими додекаэдрами с единичным расстоянием между двумя противоположными гранями, то при вышеописанном расположении узлов автомата координаты этих узлов будут совпадать с координатами центров додекаэдров. При этом соседние узлы автомата будут находиться в центрах додекаэдров, имеющих общую грань. Интересен тот факт, что узлы решетки при данном пространственном распределении совпадают с центрами плотно упакованных шаров в одном из вариантов плотной упаковки.

На рис. 4 изображен ромбододекаэдр, положенный в основу автомата для трехмерной модели. Клетка представляет собой полярный комплекс ромбододекаэдра, т. е. совокупность лучей, выходящих из его центра перпендикулярно граням. Этим лучам 12, и проходят они через центры соседних фигур, т. е. отрезки, соединяющие соседние узлы (центры клеток) автомата, лежат на полярных комплексах этих клеток.

В различных модификациях 3D-модели возможны различные варианты правил столкновения, но в любом случае, разумеется, должны выполняться законы сохранения массы и импульса при каждом столкновении. Остановимся на одном из них – полном наборе правил с одной частицей покоя. Так как в структуре решетки модели имеется 12 соседей и одна частица покоя, то количество правил столкновения будет равно числу состояний клетки, т. е. 2^{13} . На каждый i -й из этих 8192 входных состояний таблицы переходов автомата строятся все такие выходные состояния, у которых суммарные масса и импульс частиц в клетке не изменялись бы при столкновении. Эти n_i ($i = 1, 2, \dots, 8192$) наборов «вход–выходы» и являются правилами столкновения с вероятностью срабатывания каждого варианта $1/n_i$. Таким образом, будут соблюдены законы сохранения массы и импульса. Экспериментально доказано (полным перебором), что для полного набора правил столкновения количество вариантов находится в интервале от 1 до 56 для разных входных состояний, т. е. модель является вероятностной.

Программный комплекс. Для проведения экспериментов была построена программная модель клеточного автомата, реализованная на языке программирования Си в среде X Window OS Unix. В ее состав входит ядро системы, выполняющее функции переходов элементарных автоматов модели и функции осреднения скорости, и графический пользовательский интерфейс, показывающий поле скоростей потока. Конфигурация автомата сохраняется в файле формата ALT [4], а поле скоростей в графическом BMP-файле.



Рис. 5. Пакет программ моделирования потока

Пакет программ состоит из четырех модулей, изображенных на рис. 5. Далее описаны основные типы данных, используемые при моделировании, а также назначение и способ функционирования программных модулей пакета.

Конфигурация КА представляет собой совокупность состояний каждой клетки автомата, включая информацию о назначении клетки (рабочая клетка, клетка-стенка, клетка-источник) и о частицах (количество частиц и направления движения каждой из них, т. е. вектор состояния клетки). В течение эксперимента конфигурация КА может неоднократно изменяться, являясь, таким образом, моментальным снимком состояний каждой его клетки в определенный момент времени.

Проекция поля скоростей строятся в некоторых сечениях автомата, ортогональных декартовым осям.

Генератор правил столкновения формирует набор правил, по которым взаимодействуют частицы модели. Эти правила впоследствии используются симулятором потока для моделирования столкновений. На протяжении всего эксперимента генератор правил столкновения запускается всего один раз в самом начале.

Конструктор граничных условий формирует начальную конфигурацию автомата. Используется один раз в начале эксперимента.

Симулятор потока преобразует текущую конфигурацию КА в новую, используя правила столкновения. Моделирует заданное количество тактов работы автомата. Может применяться неоднократно в течение одного эксперимента.

Просмотрщик производит осреднение скоростей отдельных частиц и строит поле векторов скоростей потока, выводя проекции трех ортогональных сечений этого поля на экран.

Процесс моделирования происходит следующим образом. Сначала создается набор правил столкновения модели и начальная конфигурация КА. Затем симулятор может неоднократно изменять конфигурацию, используя правила столкновения. После некоторого числа тактов автомата, промодели-

рованных симулятором, можно запустить просмотрщик и увидеть результат. После этого процесс моделирования можно продолжить.

Описание экспериментов моделирования. Экспериментальное исследование модели является очень важным фактором, способным подтвердить или опровергнуть ее валидность, выявить дефекты, указать пути их исправления.

Одним из экспериментов, который был проведен с $2D$ -моделью, является моделирование обтекания потоком жидкости плоской стенки. Была выбрана камера, в один из краев которой помещен источник равномерного потока жидкости, а другой край открыт. Внутри камеры перпендикулярно потоку установлена плоская стенка, не касающаяся краев камеры. Результатом эксперимента явилось поле скоростей ламинарного потока (рис. 6, *a*).

Другой эксперимент поставлен для трехмерной модели и заключается в следующем. При помощи генератора граничных условий создан автомат, в котором клетки-стенки располагались вдоль четырех граней параллелепипеда. На одной из граней были расположены клетки-источники, образующие плоскость, противоположная ей грань осталась открытой. Внутри параллелепипеда помещена плоская стенка, параллельная плоскости источника, касающаяся двух противоположных граней параллелепипеда и не достигающая до двух других граней, образуя щели.

После достаточного для установления стационарного потока числа итераций получено поле скоростей потока. На рис. 6, *b* приведены три сечения параллелепипеда, на каждом из которых изображено поле проекций трехмерных векторов скоростей потока на соответствующую плоскость. Граничные условия для этого эксперимента были выбраны так, чтобы одно из сечений параллелепипеда совпадало с экспериментом, поставленным для плоской модели. При сравнении рис. 6, *a* и *b* видно, что поле векторов скоростей в сечении OXY трехмерной модели имеет такой же вид, что и поле двумерной FHP-модели. Из этого можно сделать вывод, что трехмерная модель в трех-

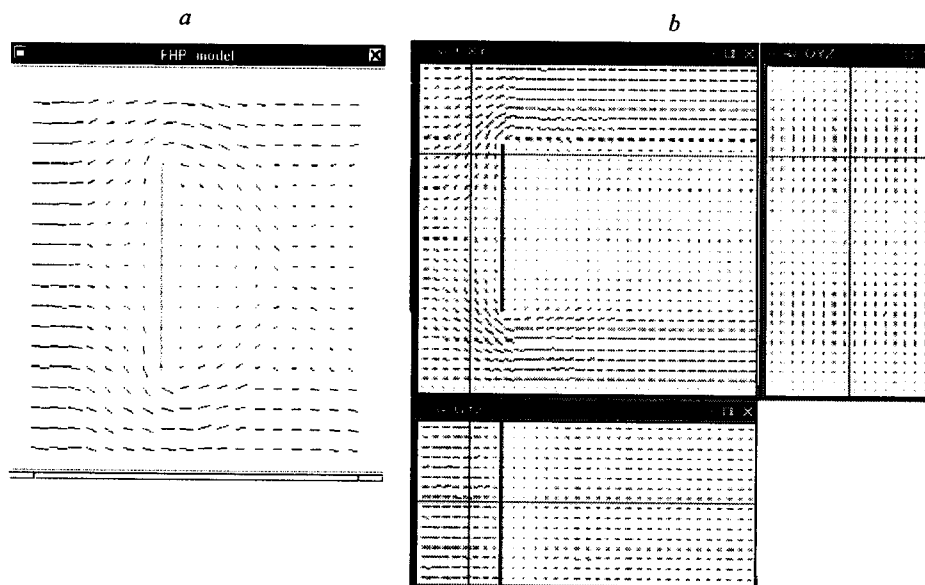


Рис. 6. Поле векторов скоростей потока: $2D$ -модель (*a*), $3D$ -модель (*b*)

мерном пространстве обладает теми же свойствами, что и FHP-модель на плоскости, т. е. моделирует потоки жидкостей и газов, описываемые уравнением Навье – Стокса.

Заключение. Клеточно-автоматная 3D-модель потока с 12 соседями позволяет моделировать потоки в значительных объемах на современных вычислителях. Представленный в работе пакет программ предназначен для моделирования 2D- и 3D-потоков жидкостей. Результаты экспериментов, проведенных при помощи этого пакета, совпадают с результатами экспериментов других моделей. Дальнейшие исследования модели будут проводиться в двух направлениях: распараллеливание пакета программ на кластер и нахождение коэффициентов связи между параметрами модели и параметрами физической среды.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Frisch U., d'Humieres D., Hasslacher B. et al. Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions // Complex Systems. 1987. 1. P. 648.
2. Borsani C., Gattaneo G., De Mattei V. et al. 2D and 3D lattice gas techniques for fluid-dynamics simulations // Proc. of the Third Conference on Cellular Automata for Research and Industry, ACRI'98. London: Springer-Verlag, Ltd, 1998. P. 67.
3. Medvedev Yu. Gas-lattice simulation of high viscous fluid flows // Bulletin of the Novosibirsk Computing Center. Series: Computer Science. Novosibirsk: NCC Publisher, 2002. Issue 17. P. 63.
4. Pogudin Yu. Simulation of fine-grained parallel algorithms with the ALT system // Proc. of the First Intern. Workshop on Distributed Interactive Simulation. N. Y.: IEEE Press, 1998. P. 22.

*Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН,
E-mail: medvedev@ssd.sccc.ru*

*Поступила в редакцию
25 марта 2003 г.*