

УДК 519.68

Ю.Г. Медведев

МНОГОЧАСТИЧНАЯ КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНАЯ МОДЕЛЬ ПОТОКА ЖИДКОСТИ FHP-MP

В статье предлагается расширение класса моделей, называемого решеточными газами, произведенное на основе перехода с булевых на целочисленные значения модулей векторов скорости частиц; в качестве примера предлагается модель FHP-MP. Проведены численные эксперименты по моделированию потока новой моделью и сравнение с известными результатами.

Ключевые слова: *клеточный автомат, имитационное моделирование потоков, решеточные газы.*

Одним из перспективных направлений имитационного моделирования физических процессов является моделирование клеточными автоматами. Клеточно-автоматные модели потоков, называемые решеточными газами (Lattice Gas), были предложены в 70-х годах прошлого века [1] и с тех пор стремительно развиваются. Эти модели дискретны, в их основе лежит булева алгебра, что позволяет создавать эффективные программные реализации и минимизировать использование машинного времени. Но простота решеточных газов накладывает некоторые ограничения на область их применения. В частности, верхний предел чисел Рейнольдса составляет несколько сотен, граничные условия позволяют задавать только неподвижные твердые объекты (стенки), моделирование околосвуковых скоростей влечет искажение результата и т.д. В статье предпринимается попытка решить эти проблемы и предлагается новая клеточно-автоматная модель, названная FHP-MP (multi-particle). Она является обобщением классической модели на булевых векторах FHP (Frish, Hasslacher, Pomeau) [2]. В новой модели допускается более одной частицы в клетке с равными векторами скорости. Попытки использовать частицы разной массы в решеточных газах предпринимались и ранее [3], но в силу ряда причин они не получили должного развития.

В статье приведены результаты экспериментального исследования новой модели FHP-MP, а именно двумерная аппроксимация потока между двумя плоскостями, поток с задвижкой и обтекание круглого препятствия. На этих примерах показана корреляция модели FHP-MP с моделью FHP-I в соответствующем диапазоне скорости потока и давления. Получена парабола Пуазейля для новой модели. При наличии задвижки или круглого препятствия были получены завихрения и наблюдалась дорожка Кармана, что указывает на возможность моделирования турбулентных свойств потока.

1. Описание модели FHP-MP

Основные определения

Под клеточным автоматом CA модели FHP-MP будем понимать тройку объектов (W, A, N) , где $W = \{w_1, w_2, \dots, w_i, \dots\}$ – множество *клеток*, заданное их координатами в некотором дискретном пространстве. Каждой клетке $w \in W$ поставлен в соответствие конечный автомат A , называемый *элементарным автоматом*.

Внутренним состоянием автомата является целочисленный вектор, а не булев вектор как в классической модели ФНР. Каждой клетке $w \in W$ сопоставлены некоторые координаты $x(w)$ и $y(w)$ на декартовой плоскости. Следовательно, между любыми двумя клетками $w_1 \in W$ и $w_2 \in W$ можно подсчитать расстояние $d(w_1, w_2)$.

Для каждой клетки $w \in W$ определено некоторое упорядоченное множество $N(w) = \{N_i(w): N_0(w) = w, N_i(w) \in W \text{ \& } d(w, N_i(w)) = 1, (i = 1, 2, \dots, b)\}$, элементы которого находятся в *отношении соседства* с клеткой w и называются ее *соседними клетками*, или *соседями*. Константа b определяет количество нетождественных соседей каждой клетки $w \in W$. Каждая клетка является соседом сама себе. Входное состояние элементарного автомата A в клетке $w \in W$ поставлено в соответствие внутренним состояниям соседей этой клетки. Таким образом, структура множества клеток W клеточного автомата представляется графом, в котором вершинами являются клетки, а ребра соответствуют отношению соседства. Этот граф

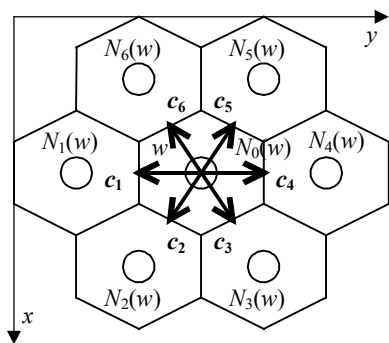


Рис. 1. Векторы скорости частиц.
Нумерация соседей

имеет регулярную структуру и степени вершин равные b . Состояние клетки $w \in W$ представлено вектором $s(w)$ с целочисленными компонентами $s_0(w), s_1(w), \dots, s_b(w)$. Множество состояний $s(w)$ всех клеток $w \in W$ в один и тот же момент времени t называется *глобальным состоянием* $\sigma(t) = \{s(w_1), s(w_2), \dots, s(w_i), \dots\}$ клеточного автомата CA . На рис. 1 изображена клетка w , векторы скорости c_i находящихся в ней частиц и ее соседи $N_i(w)$, $i = 0, 1, \dots, 6$. Таким образом, количество соседей каждой клетки w модели ФНР-МР равно семи, одним из соседей является сама клетка w , т.е. $N_0(w) = w$.

Состояние клетки

Состояние клетки w в каждый момент дискретного времени t однозначно определяется набором находящихся в ней частиц. Вектор скорости c_i каждой из них либо направлен в сторону одной из соседних клеток $N_i(w)$ (при $i = 1, \dots, 6$), либо равен нулю (при $i = 0$).

В отличие от ФНР, в модели ФНР-МР компоненты $s_0(w), s_1(w), \dots, s_b(w)$ вектора состояния $s(w)$ клетки w принимают не булевы, а целочисленные значения. Таким образом, масса частиц в клетке w равна

$$m(w) = \sum_{i=0}^b s_i(w), \quad (1)$$

где $b = 6$ – количество возможных направлений вектора скорости, s_i – i -й компонент вектора состояний s . Физическая интерпретация значений компонентов вектора $s(w)$ следующая: s_i определяет количество частиц с единичной массой в клетке w , векторы скорости c_i которых направлены в сторону соседа $N_i(w)$.

Модельный импульс $\vec{p}$ в клетке $w \in W$ есть сумма всех импульсов $\vec{p}_i = s_i \vec{c}_i$, направленных к соседям $N_i(w)$, где $i = 0, 1, \dots, b$, а $b = 6$:

$$\vec{p} = \sum_{i=1}^b s_i \vec{c}_i. \quad (2)$$

Используя (1) и рис. 1, достаточно просто подсчитать проекции p_x и p_y импульса $\mathbf{p}$ на декартовы оси Ox и Oy :

$$p_x = \frac{\sqrt{3}}{2}(s_2 + s_3 - s_5 - s_6); \quad (3)$$

$$p_y = s_4 - s_1 + \frac{1}{2}(s_3 + s_5 - s_2 - s_6), \quad (4)$$

где s_i – сумма частиц в клетке w , с векторами скорости, направленными к соседу $N_i(w)$.

Поведение клеточного автомата

Определим разбиение клеток $w \in W$ на типы. Клетками *среды* $w_{\text{ср}} \in W_{\text{ср}}$ назовем клетки, в которых выполняются законы сохранения массы и импульса. Клетками *стенки* $w_{\text{ст}} \in W_{\text{ст}}$ называются клетки, в которых выполняется закон сохранения массы, но может нарушаться закон сохранения импульса. И, наконец, *источники* $w_{\text{ист}} \in W_{\text{ист}}$ суть клетки, в которых могут нарушаться как закон сохранения массы, так и закон сохранения импульса. Множества клеток среды $W_{\text{ср}}$, стенки $W_{\text{ст}}$ и источников $W_{\text{ист}}$ попарно не пересекаются ($W_{\text{ср}} \cap W_{\text{ст}} = \emptyset$, $W_{\text{ср}} \cap W_{\text{ист}} = \emptyset$, $W_{\text{ст}} \cap W_{\text{ист}} = \emptyset$). Объединение этих множеств совпадает с множеством всех клеток автомата ($W_{\text{ср}} \cup W_{\text{ст}} \cup W_{\text{ист}} = W$). Поведение стенок и источников задает граничные условия клеточного автомата.

В модели FHP-MP используется клеточный автомат с синхронным режимом функционирования. На каждом такте происходит смена состояний $s(t)$ элементарных автоматов A во всех клетках $w \in W$ на состояния $s(t+1) = \delta(s(t))$, где $\delta(s(t))$ – функция переходов элементарного автомата A . Клеточный автомат CA при этом переходит из глобального состояния $\sigma(t)$ в новое глобальное состояние $\sigma(t+1)$.

Каждый такт работы клеточного автомата выполняется в две фазы: *сдвиг* и *столкновение*. Функция переходов δ элементарного автомата A состоит, таким образом, из композиции функций δ_1 (сдвиг) и δ_2 (столкновение):

$$\delta(s) = \delta_2(\delta_1(s)). \quad (5)$$

Каждая из функций δ_1 и δ_2 должна удовлетворять законам сохранения массы:

$$\sum_{w \in W} \sum_{i=1}^b \delta_j(s_i(w)) = \sum_{w \in W} \sum_{i=1}^b s_i(w), \quad j \in \{1, 2\}, \quad (6)$$

и импульса:

$$\sum_{w \in W} \sum_{i=1}^b \delta_j(s_i(w) \mathbf{c}_i(w)) = \sum_{w \in W} \sum_{i=1}^b s_i(w) \mathbf{c}_i(w), \quad j \in \{1, 2\}. \quad (7)$$

С точки зрения динамики потока жидкости наличие этих двух фаз интерпретируется следующим образом. Столкновения реализуют диффузию в жидкости, а сдвиг – процесс переноса вещества в потоке. Далее подробно описаны эти две фазы.

В фазе *сдвига* в каждой клетке $w \in W$ каждая частица, учтенная в компонентах $s_i(w)$, при $i = 1, \dots, 6$, вектора состояния $s(w)$, перемещается в соседнюю клетку $N_i(w)$, соответствующую ее вектору скорости $\mathbf{c}_i$. Частицы, учтенные в компоненте s_0 , остаются в клетке w . Таким образом, i -й компонент $s_i(w)$ вектора состояния $s(w)$ клетки w после сдвига принимает значение

$$\delta_1(s_i(w)) = \begin{cases} s_i(N_{((i+2) \bmod 6)+1}(w)), & \text{для } i = 1, 2, \dots, b; \\ s_i(w), & \text{для } i = 0. \end{cases} \quad (8)$$

Несмотря на то, что при сдвиге масса и импульс частиц в клетке изменяются, в пределах всего клеточного автомата они сохраняются, т.е. условия (6) и (7) выполняются.

В фазе столкновения происходит изменение направления движения частиц согласно некоторым правилам столкновения, не зависящим от состояний соседних клеток, т.е. δ_2 зависит только от внутреннего состояния своего элементарного автомата. В модели ГНР-МР функция δ_2 вероятностная. Ниже описаны правила столкновения для клеток разных типов: среды, стенок и источников.

Среда. В клетке среды $w_{cp} \in W_{cp}$ функция δ_2 выбирается такой, чтобы сохранились масса $m(w)$:

$$\sum_{i=0}^b \delta_2(s_i(w_{cp})) = \sum_{i=0}^b s_i(w_{cp}) \quad (9)$$

и импульс $p(w)$:

$$\sum_{i=0}^b \delta_2(c_i(w_{cp})) = \sum_{i=0}^b s_i(w_{cp}) c_i(w_{cp}) \quad (10)$$

частиц в клетке. Значение функции δ_2 выбирается равновероятно из всевозможных состояний клетки w_{cp} , удовлетворяющих условиям (9) и (10). При выполнении этих условий условия (6) и (7) тем более выполняются.

Стенки. В клетках $w_{ct} \in W_{ct}$, являющихся стенками, частицы «отражаются» в обратном направлении, нарушая при этом закон сохранения импульса.

$$\delta_2(s_i(w_{cm})) = \begin{cases} s_{((i+2) \bmod 6)+1}(w_{cm}), & \text{для } i = 1, 2, \dots, b, \\ s_i(w_{ct}), & \text{для } i = 0. \end{cases} \quad (11)$$

Из-за того, что количество частиц в клетке не меняется, условия (9), а следовательно, и (6) выполняются. Условие (7) может нарушаться, так как меняются направления векторов скорости c частиц, но это допускается граничными условиями. Такое поведение частиц в клетках-стенках моделирует условие нулевой скорости потока на границах препятствий.

Источники. Каждая клетка-источник $w_{ист} \in W_{ист}$ поддерживает заданную концентрацию частиц $n_0(w_{ист})$. Для этого она генерирует частицы со всевозможными направлениями вектора скорости в случае, если текущая концентрация частиц $n(w_{ист}) < n_0(w_{ист})$. Количество генерируемых частиц равно разности $n_0(w_{ист}) - n(w_{ист})$ заданной и текущей концентраций. Из клеток-источников можно создавать различные объекты. Например, установив их в пространстве в одну линию (как правило, у границы клеточного массива), можно получить источник равномерного потока частиц заданной концентрации. Отдельно установленный источник будет моделировать форсунку. Естественно, при генерации новых частиц ни масса $m(w_{ист})$, ни импульс $p(w_{ист})$ не сохраняются. Граничные условия в клетках-источниках допускают нарушение условий (6) и (7).

Осредненные значения. При моделировании потоков практический интерес представляют не столько значения параметров автомата на микроуровне, т.е. масса $m(w)$ и скорость $c(w)$ частиц в каждой клетке $w \in W$, сколько осредненные значения их скоростей $\langle u \rangle$ и концентраций $\langle n \rangle$ по некоторой окрестности $\Delta v(w)$, кото-

рая включает все клетки $w_j \in W$, удаленные от клетки w не более чем на некоторую величину r , называемую *радиусом осреднения*.

Осредненная скорость вычисляется как сумма всех векторов частиц, попадающих в окрестность осреднения $Av(w)$, деленная на мощность окрестности осреднения:

$$\langle \mathbf{u} \rangle(w) = \frac{1}{|Av(w)|} \sum_{w_j \in Av(w)} \sum_{i=0}^b s_i \mathbf{c}_i, \quad (12)$$

где $|Av(w)|$ – количество клеток, попадающих в окрестность осреднения $Av(w)$, $\mathbf{c}_i$ – единичный вектор скорости, соответствующий i -му разряду вектора состояния $\mathbf{s}(w_j)$, а s_i – значение i -го разряда вектора состояния $\mathbf{s}(w_j)$ клетки $w_j \in Av(w)$.

Осредненная концентрация частиц $\langle n \rangle$ подсчитывается в той же окрестности $Av(w)$ следующим образом:

$$\langle n \rangle(w) = \frac{1}{|Av(w)|} \sum_{w_j \in Av(w)} \sum_{i=0}^b s_i. \quad (13)$$

Осредненные значения скорости и концентрация частиц, являющиеся модельными значениями скорости и давления, соответствуют значениям *скорости* и *давления* моделируемой жидкости и являются параметрами *макроуровня*.

Заметим, что осредненные значения модельных скорости и концентрации будут соответствовать их физическим аналогам только в том случае, когда окрестность осреднения $Av(w)$ состоит исключительно из клеток среды $w \in W$. Если последнее не выполняется для окрестности осреднения, то будем полагать значения $\langle \mathbf{u} \rangle$ и $\langle n \rangle$ неопределенными. Это условие не позволяет определять значения $\langle \mathbf{u} \rangle$ и $\langle n \rangle$ на расстоянии ближе, чем радиус осреднения r от границ (стенок и источников), в том числе и находящихся внутри моделируемого объекта.

2. Экспериментальное исследование модели FHP-MP

Для проверки свойств предложенной модели была создана ее программная реализация, позволяющая проводить вычислительные эксперименты как на однопроцессорных компьютерах, так и на многопроцессорных и многомашинных вычислительных комплексах. Код программ написан на языке Си, параллелизм реализован с помощью библиотеки MPI. Ниже описаны численные эксперименты, проведенные с моделью FHP-MP. Получены качественные характеристики моделируемого потока.

Двумерная аппроксимация потока жидкости между двумя параллельными плоскостями

Этот эксперимент, ставший уже классическим, позволяет проверить модель на соответствие физике. Суть его в том, что продольная скорость потока $\langle \mathbf{u} \rangle_y$ (поток движется вдоль Oy в положительном направлении) при скорости на границах $\langle \mathbf{u} \rangle_{\text{гр}} = 0$ должна быть распределена вдоль направления Ox по параболическому закону.

Клеточный автомат, использующийся в этом вычислительном эксперименте, имеет размеры 100×2000 клеток (вдоль декартовых осей Ox и Oy соответственно). Клетки с координатами в интервале $[(2, 1), (99, 1)]$ являются источниками;

клетки с координатами в интервалах $[(1, 1), (1, 2000)]$ и $[(100, 1), (100, 2000)]$ – стенки. Остальные клетки – клетки среды. Такая двумерная конструкция является сечением параллелепипеда бесконечной ширины (вдоль оси Oz) и аппроксимирует трехмерный поток между двумя параллельными плоскостями.

На рис. 2 изображена проекция скорости потока $\langle u \rangle_y$ на ось Oy в поперечном сечении потока (вдоль Ox). Кривая с маркерами построена исходя из результатов численного моделирования. Проекция аппроксимирована уравнением параболы (на рис. 2 – кривая без маркеров):

$$\langle u \rangle_y(r) = -0.0008r^2 + 2, \quad (14)$$

где r – расстояние от середины до рассматриваемой точки поперечного сечения.

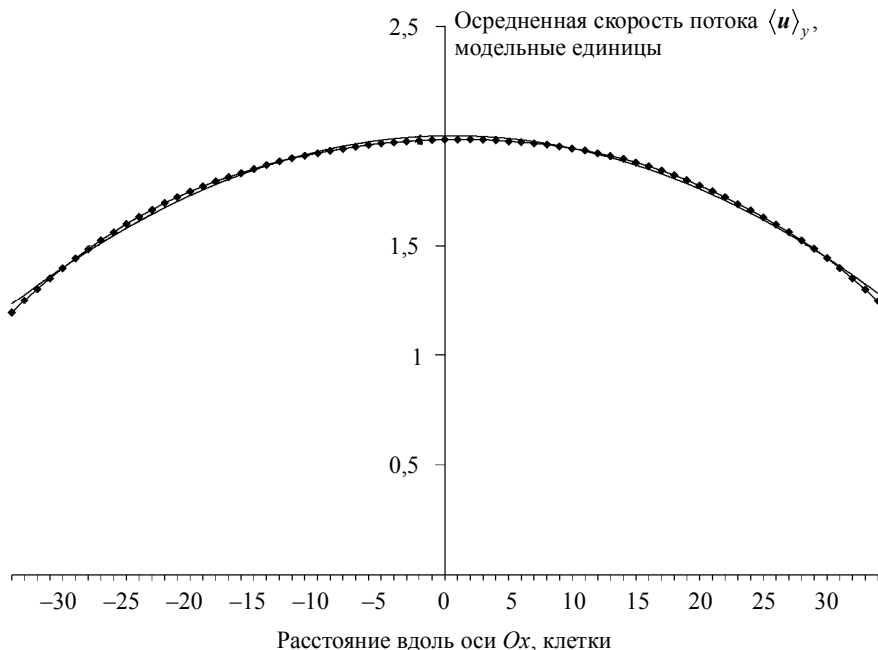


Рис. 2. Парабола Пуазейля и экспериментальная скорость потока

Кривая (14) – теоретически обоснованная парабола Пуазейля – одно из немногих аналитических решений уравнения Навье – Стокса, имеющее вид

$$\langle u \rangle_y(r) = \frac{dP}{4\eta l} (R^2 - r^2), \quad (15)$$

где dP – падение давления на участке трубы длиной l , η – динамическая вязкость жидкости, R – радиус трубы (в двумерном случае R – расстояние между плоскостями).

Количество итераций, после которого проведено осреднение, $T = 20000$. Радиус осреднения $r = 15$ (клеток). Согласно условию, налагаемому на (12) и (13), осредненные значения не могут быть получены на расстоянии до стенок ближе, чем $r = 15$ клеток. Следовательно, теоретическая и экспериментальная кривые в диапазоне, изображенном на рисунке, не опускаются до нуля.

Максимальная скорость потока в проведенном эксперименте, как видно на рис. 2, получилась равной двум, что несколько больше, чем в классической модели FHP. Но данная скорость не является предельной; в новой модели можно увеличивать концентрацию, вырабатываемую источниками, и скорость потока будет значительно превосходить полученную. Следовательно, новая модель позволяет моделировать турбулентные потоки.

Результаты этого эксперимента показывают, что модель FHP-MP адекватно отражает процессы в потоках и соответствует физике.

Поток с задвижкой

Следующий вычислительный эксперимент был проведен с целью исследования обтекания препятствий. Для этого в клеточный автомат, использовавшийся в предыдущем эксперименте, были добавлены граничные условия в виде препятствия, имеющего форму задвижки. Задвижка была установлена на расстоянии трети длины трубы от источников перпендикулярно направлению распространения потока и перекрывала трубу наполовину. Получившееся поле скорости похоже на обтекание задвижки потоком. К сожалению, при мелком масштабе изображения, охватывающем весь клеточный автомат, видны только высокоскоростные части потока. Низкие скорости, каковыми являются скорости за задвижкой, приходится рассматривать отдельно. На рис. 3 в более крупном масштабе приведен фрагмент автомата, находящийся непосредственно за задвижкой. Направление каждой стрелки на рисунке совпадает с направлением потока в ее основании, а длина пропорциональна скорости потока в соответствующей точке. Поток направлен слева направо, задвижка изображена в левой части рисунка. На этом фрагменте отчетливо видны завихрения потока, что указывает на его турбулентность.

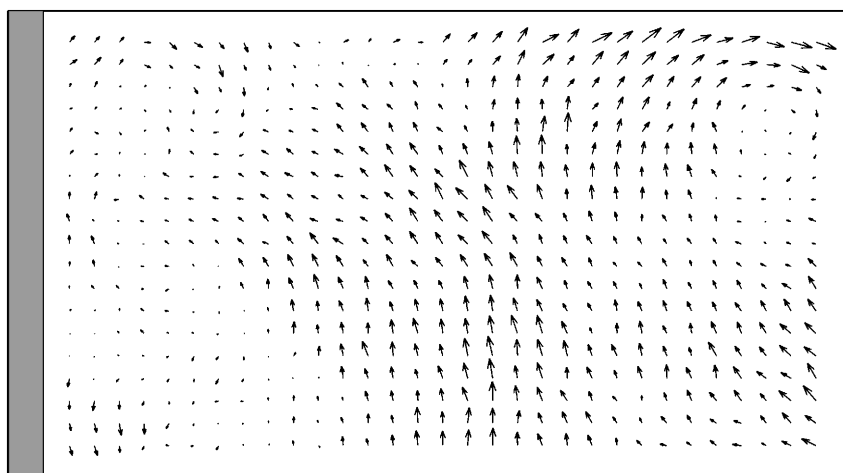


Рис. 3. Поле скорости потока с препятствием в виде задвижки.
Фрагмент за задвижкой

Обтекание круглого препятствия

Еще один эксперимент – с круглым препятствием – также показывает турбулентность потока. В исходный клеточный автомат было добавлено препятствие, имеющее форму круга. Поле скорости этого автомата изображено на рис. 4.

За круглым препятствием видны оторвавшийся вихрь и «змейка», очевидно являющаяся вариантом дорожки Кармана для случая, когда расстояния до ограничивающих поток плоскостей слишком мало.

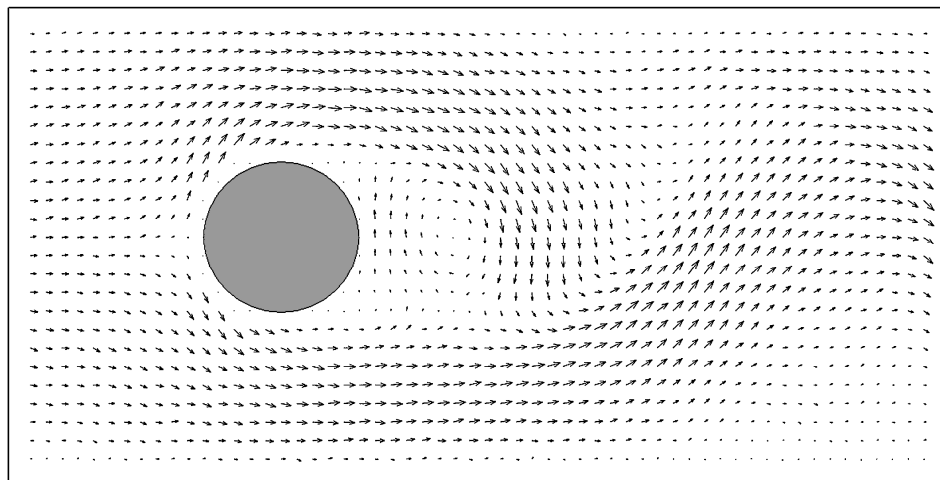


Рис. 4. Поле скорости потока с круглым препятствием

Заключение

В статье предложена новая клеточно-автоматная модель потока FHP-MP, в которой допускается более одной частицы в клетке с равными векторами скорости. Вычислительные эксперименты, проведенные с этой моделью, показывают ее корреляцию с классической моделью FHP и с физическими законами. Экспериментально полученное распределение скорости в модели FHP-MP согласуется с параболой Пуазейля. Максимальная скорость потока в проведенном эксперименте получилась несколько больше, чем в модели FHP. Кроме того, в новой модели можно увеличивать начальную концентрацию частиц, получая скорость потока, значительно превосходящую скорость в классической модели. Следовательно, модель FHP-MP позволяет моделировать турбулентные потоки, что и подтвердили эксперименты с задвижкой и круглым препятствием. В результате этих экспериментов получены потоки с завихрениями, в том числе наблюдалась дорожка Кармана за препятствием, что является признаком турбулентного потока.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Hardy J., Pomeau Y. and de Pazzis O.* 2D Lattice-Gas model // *J. Math. Phys.* 1973. No. 14. P. 1746.
2. *Frisch U., Hasslacher B. and Pomeau Y.* Lattice-Gas automata for Navier – Stokes equations // *Phys. Rev. Lett.* 1986. No. 56. P. 1505.
3. *Rothman D.H., Zaleski S.* Lattice-Gas Cellular Automata: Simple Models of Complex Hydrodynamics. Cambridge University Press, 1997.

Статья представлена кафедрой программирования факультета прикладной математики и кибернетики Томского государственного университета и оргкомитетом 7 Российской конференции с международным участием «Новые информационные технологии в исследовании сложных структур». Поступила в редакцию 21 ноября 2008 г.