Изв.вузов «ПНД», т.4, № 4,5, 1996 УДК 517.39

ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛЕЙ КЛАССА РЕШЕТОЧНЫХ ГАЗОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ГАЗОДИНАМИКИ

Г.Г. Малинецкий, М.Е. Степанцов

В последнее время много внимания уделяется разработке методов численного моделирования, не связанных с построением разностных схем. Одним из перспективных направлений в этой области, несомненно, является применение клеточных автоматов, в частности, для решения задач газодинамики.

В данной работе предлагается общий способ построения моделей типа решеточных газов для любых изотермических газодинамических процессов и приводится пример такого построения, а также рассматривается клеточный автомат, описывающий неизотермические процессы в газе или жидкости.

1. Клеточные автоматы

В настоящее время все активнее идет поиск нетрадиционных подходов к построению математических моделей и решению связанных с ними задач. К числу таких подходов, несомненно, относятся клеточные автоматы (КА) - системы, в которых время и пространство дискретны и все величины принимают значения из конечного (обычно небольшого) набора значений.

При рассмотрении таких систем используется следующая терминология: узел пространственной решетки (чаще всего ортогональной или двумерной гексагональной) называется «клеткой». Ближайшие к нему узлы называются «соседями», причем возможен различный выбор соседей, который определяет различные автоматы. То, что в узле решетки величины принимают некоторый набор значений, называется «данная клетка находится в состоянии с такими значениями величин». И, наконец, законы изменения состояния клеток в зависимости от состояния их соседей (одинаковые во всех клетках) носят название «правил клеточного автомата».

Важным свойством клеточных автоматов является локальность - динамика изменения значений величин в узле решетки зависит лишь от состояния ближайших узлов. Это позволяет значительно повысить скорость расчетов таких моделей на специализированных машинах клеточных автоматов, обладающих высокой параллельностью [1].

Примером КА может служить игра «Жизнь» [1,2]. Этот КА определен на ортогональной решетке на плоскости. Каждая клетка может находиться в одном из двух состояний: 0 - клетка «мертва» и 1 - «жива». Восемь клеток, окружающих данную, называются ее соседями. Законы, определяющие динамику этого КА, следующие:

1) если у живой клетки меньше двух живых соседей, она становится мертвой - «смерть от одиночества»;

2) если у живой клетки больше трех живых соседей, она становится мертвой - «смерть от перенаселения»;

3) если у мертвой клетки ровно три живых соседа, она становится живой - «рождение».

Эти простейшие правила приводят, однако, к сложному поведению КА.. Из случайного начального распределения живых и мертвых клеток возникают различные устойчивые комбинации, причем иногда довольно причудливые.

С помощью этого КА можно имитировать сколь угодно сложные процессы. Было доказано [3], что этот КА эквивалентен универсальной вычислительной машине Тьюринга. Интересно также то, что игра «Жизнь» представляет собой мир, где будущее детерминировано, но «узнать» его (то есть определить состояние автомата на некотором шаге) можно лишь «дожив» до него (проделав все промежуточные шаги) - иного алгоритма не существует.

2. Решеточные газы в задачах газодинамики

Одним из классов клеточных автоматов являются решеточные газы - крайне упрощенные модели, тем не менее хорошо описывающие сложные газодинамические процессы. До настоящего времени было предложено несколько очень удачных моделей такого рода.

Одной из первых удачных попыток такого рода был HPP-газ [4], названный по первым буквам фамилий своих создателей - J. Hardy, Y. Pomeau и O.de Pazzis. Этот автомат задан на ортогональной решетке (2- или 3-мерной). Возможные состояния клетки соответствуют наличию в ней частиц, движущихся параллельно осям координат. На каждом шаге частицы смещаются на одну клетку в направлении своего движения. Столкновения происходят при наличии в одной клетке частиц с противоположно направленными скоростями. Правила столкновений изображены на рис. 1,*а*. Несмотря на имеющуюся явную анизотропию правил, задающих автомат (скорости частиц строго параллельны осям координат), макроскопическая картина поведения автомата является изотропной.

Двумерный вариант этого автомата имеет один недостаток: полученные для него макроскопические уравнения отличаются от уравнений Навье - Стокса. Этого недостатка лишен автомат FHP-газ [5]. Его поле представляет собой не прямоугольную решетку на плоскости, а гексагональную. При этом правила столкновений видоизменяются (рис. 1,*б*). Оба автомата моделируют изотермические процессы в идеальном газе.

Представляет интерес исследовать возможность моделирования газов, в которых в отличие от этих базовых моделей существовало взаимодействие между частицами, происходили процессы с изменением температуры, существовали частицы различной массы, присутствовали внешние силовые поля. Авторы предложили в [6] модификацию HPP-газа, позволяющую моделировать процессы в газе, идущие с изменением температуры. Для этого в модели наряду с частицами, перемещающимися на каждом временном шаге - «быстрыми», рассматриваются такие, которые сдвигаются только на шагах с номером, кратным некоторому заданному числу K - «медленные». В этом случае температуру системы можно задать следующим образом:

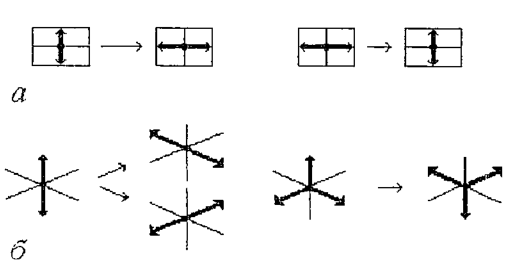


Рис. 1

$$T = \rho_1 T_1 + \rho_2 T_2,$$

где $\rho_{1,2}$ - плотности быстрых и медленных частиц, а $T_{1,2}$ - температура газа, состоящего из частиц одного сорта.

Этот решеточный газ был успешно опробован на ряде модельных задач. В частности, при моделировании изохорного нагревания идеального газа была получена соответствующая уравнению Менделеева - Клапейрона [7] линейная зависимость (рис. 2)

$$p = \alpha T \text{ при } V = \text{const}.$$

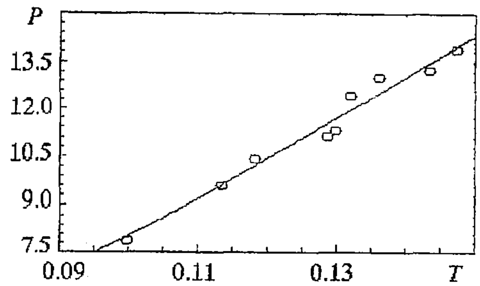


Рис. 2

Возможность введения взаимодействия между частицами в модели FHP рассмотрели Appert и Zalessky в [8,9].

И в том, и в другом случае модель на основе клеточного автомата строилась эвристически: правила этого автомата формулировались, исходя из соображений некоторой аналогии с моделируемыми явлениями, после чего проверялась и доказывалась адекватность модели. Представляется важным создать некий общий алгоритм построения решеточных газов.

3. Алгоритм и пример построения решеточного газа

Динамические процессы в газе определяются видом тензора переноса импульса, поскольку уравнение динамики имеет вид

$$\partial(\rho v_i)/\partial t = -\partial \Pi_{ik}/\partial x_k.$$

Поэтому перед нами стоит следующая задача: нам дан вид тензора переноса импульса, и мы должны, исходя из него, найти правила, задающие интересующую нас модель.

Параметрами модели, принадлежащей классу решеточных газов, будут набор сортов частиц ν, масса m_ν и скорость $\mathbf{u}_\nu$, присущие каждому сорту. Так как каждая частица сорта ν обладает импульсом $m_\nu \mathbf{u}_\nu$, то

$$\partial(\rho\mathbf{v})/\partial t = \Sigma_\nu \partial f_\nu/\partial t \, m_\nu \mathbf{u}_\nu.$$

Рассмотрим для определенности решеточный газ на ортогональной решетке. В нем скорости частиц направлены строго вдоль координатных осей. Пусть ν_i - сорта частиц со скоростями параллельными оси x_i, N_ν - число частиц сорта ν в объеме V.

$$\partial(\rho v_i)/\partial t = \Sigma_{\nu i} \partial f_{\nu i}/\partial t \, m_{\nu i} u_{\nu i},$$

$$\partial f_{\nu i}/\partial t = \lim_{V\to 0} \partial N_{\nu i}/\partial t,$$

$$\partial N_{\nu i}/\partial t = \Sigma_{\nu'} P_{\nu'\nu i} N_{\nu'} - N_{\nu i} \Sigma_{\nu'} P_{\nu i \nu'} - \oint f_{\nu i} \mathbf{v}_\nu d\sigma,$$

где P_{ij} - вероятности превращения частицы сорта i в сорт j. Но так как $\mathbf{v}_\nu$ всегда параллельна оси x_i, то $\mathbf{v}_\nu = \mathbf{v}_{\nu i}$ и $\mathrm{div}\mathbf{v}_{\nu i}=0$.

$$\partial f_{\nu i}/\partial t = \Sigma_{\nu'} P_{\nu'\nu i} f_{\nu'} - f_{\nu i} \Sigma_{\nu'} P_{\nu i \nu'} - \lim_{V\to 0} (1/V) \int_V \mathrm{div}(f_{\nu i}\mathbf{v}_{\nu i}) dV.$$

Учитывая, что

$$\mathrm{div}(f_{\nu i}\mathbf{v}_{\nu i}) = (\mathbf{v}_{\nu i}\mathrm{grad}) f_{\nu i},$$

получаем

$$\partial f_{\nu i}/\partial t = \Sigma_{\nu'} P_{\nu'\nu i} f_{\nu'} - f_{\nu i} \Sigma_{\nu'} P_{\nu i \nu'} - (\mathbf{v}_{\nu i}\mathrm{grad}) f_{\nu i}$$

и $$\partial(\rho\mathbf{v})/\partial t = \Sigma_v m_v \mathbf{u}_v(\Sigma_{v'} P_{v'v} f_{v'} - f_v \Sigma_{v'} P_{vv'}) - (\mathbf{v}\mathrm{grad})\,\rho.$$

Мы получили уравнение Эйлера

$$\partial(\rho\mathbf{v})/\partial t = -(\mathbf{v}\mathrm{grad})\,\rho + \Delta$$

с некоторой добавкой

$$\Delta = \Sigma_v m_v \mathbf{u}_v(\Sigma_{v'} P_{v'v} f_{v'} - f_v \Sigma_{v'} P_{vv'}), \qquad (*)$$

возникающей за счет превращения частиц одного сорта в другой, и представляющей собой изменение импульса в единице объема в результате этого процесса. Заметим, что частным случаем такого превращения являются столкновения частиц (нужно помнить, что частицы, движущиеся в разных направлениях, считаются относящимися к разным сортам), приводящие в модели HPP-газа к уравнению Навье - Стокса [4].

В каждом конкретном случае, выбрав количество и характеристики сортов частиц в модели, мы получим уравнение (*) для P_{ij}. Если его удается решить, задача построения модели выполнена. Надо отметить, что полученное выражение (*) является весьма общим, и к решению конкретной задачи можно подойти, не рассматривая его в явном виде.

Пусть перед нами стоит задача моделирования процессов в идеальном газе в поле тяжести. Тогда уравнение динамики имеет вид

$$\partial(\rho\mathbf{v})/\partial t + (\mathbf{v}\mathrm{grad})\,\rho = \rho\mathbf{g}.$$

Любой объем газа здесь получает дополнительное приращение импульса

$$\Delta = \rho\mathbf{g}.$$

В решеточном газе это можно реализовать, дав возможность частицам, движущимся против направления **g**, превращаться в частицы, движущиеся по направлению **g**. Тогда

$$\Delta = \lim_{V\to 0} 2NPm\mathbf{u}/V,$$

где N - число частиц в объеме V; P - задаваемая нами вероятность изменения направления движения частицы.

$$\Delta = 2\rho P\mathbf{u}.$$

Итак, для моделирования газа в гравитационном поле необходимо в базовом решеточном газе на каждом шаге менять направление скорости частиц,

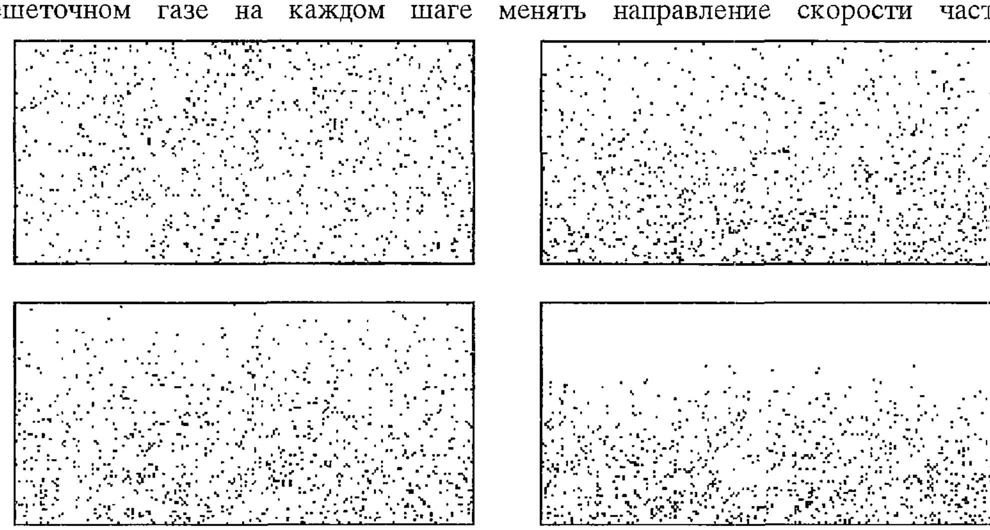


Рис. 3

движущихся вертикально вверх, на противоположное с вероятностью

$$P = g/2u.$$

Такой клеточный автомат был построен, и с его помощью был смоделирован газ, находящийся в однородном гравитационном поле в замкнутом объёме в масштабах, где изменение плотности с высотой становится заметным.

На рис. 3 показан процесс уплотнения нижних и разрежения верхних слоев первоначально однородного газа. На рис. 4 показана зависимость плотности газа от высоты в начале численного эксперимента (однородный газ), в процессе достижения равновесия и после его достижения. В последнем случае зависимость является экспоненциально убывающей.

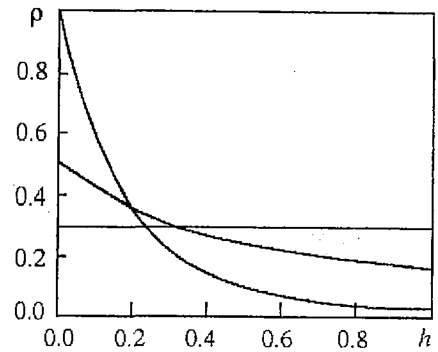


Рис. 4

Заключение

Идея моделирования непрерывного воздействия на систему множеством дискретных воздействий, осуществляемых с некоторой вероятностью, высказанная, в частности, в [8],в данной работе была успешно применена. Полученные результаты позволяют надеяться на более широкое применение решеточных газов для решения тех задач, где традиционные методы плохо или вообще неприменимы.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований. Код проекта 96-01-01161.

Библиографический список

1. *Тоффоли Т., Марголус Н.* Машины клеточных автоматов. М: Мир,1991.
2. *Gardner M.* // Sc. Am. 1970. Vol.223, № 4. P.120 .
3. *Berlekamp E., Conway J., Guy R.* Winning ways for your mathematical plays. Academic Press,1982.
4. *Hardy J., Pomeau Y., de Pazzis O.* // J. Math. Phys. 1978. Vol.19, № 3. P.293.
5. *Frisch U., Hasslacher B., Pomeau Y.* // Phys. Rev. Lett. 1986. Vol.56. P.1505.
6. *Малинецкий Г.Г., Степанцов М.Е.* // Ж.физ.химии 1995. Т. 69, № 8. С.1528.
7. *Квасников И.А.* Термодинамика и статистическая физика (В 2-х ч.). М: МГУ, 1991.
8. *Appert C., Zaleski S.* // Phys. Rev. Lett. 1990. Vol.64. P.1.
9. *Appert C., Zaleski S.* // Physica D. 1991. Vol.47, № 1,2. P.85.

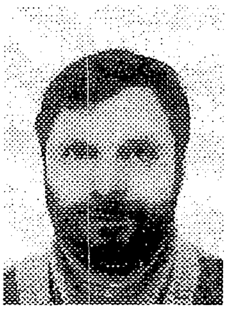
Институт прикладной математики им М.В.Келдыша РАН
Московский государственный университет

Поступила в редакцию 28.06.96

LATTICE GAS MODELS FOR GASDYNAMICS PROBLEMS

G.G. Malinetskii, M.E. Stepantsov

In this paper we propose a general method of lattice gas models construction for any isothermal gasdynamical process. There is also given an example of a cellular automat simulating a non-isothermal process in gas.



Малинецкий Георгий Геннадьевич родился в 1956 году в Уфе, окончил физический факультет МГУ (1979), защитил кандидатскую диссертацию на тему «Нестационарные диссипативные структуры в нелинейных средах» (1982) и докторскую диссертацию на тему «Диффузионный хаос и новые типы упорядоченности в нелинейных средах» (1990) в Институте прикладной математики. В настоящее время работает там же заведующим сектором нелинейной динамики. Автор большого количества статей в области исследования хаоса и нелинейных явлений, а также учебника «Структуры, хаос, вычислительный эксперимент. Введение в нелинейную динамику».

Степанцов Михаил Евгеньевич родился в 1972 году в Куйбышеве. Окончил физический факультет МГУ (1995). В настоящее время является аспирантом кафедры математики физического факультета МГУ. Автор 2 статей, посвященных применению клеточных автоматов для моделирования нелинейных явлений.