

Коэффициенты связи физических и модельных параметров в клеточно-автоматных моделях диффузионного процесса с целочисленным алфавитом*

Ю.Г. Медведев

ИВМиМГ СО РАН

Клеточно-автоматные модели вообще и модели диффузии в частности представляют огромный интерес для исследований в настоящее время [1]. Они являются естественно-параллельными с мелкозернистым параллелизмом, поэтому их программные реализации на суперкомпьютерах хорошо масштабируются и, как правило, показывают эффективность 80-90% на тысячах вычислительных ядер [2].

В работе исследуются две предложенные ранее клеточно-автоматные модели диффузионного процесса — обобщения асинхронного клеточного автомата элементарной диффузии Т. Тоффоли и блочно-синхронного клеточного автомата диффузии Н. Марголуса до клеточных автоматов с целочисленным алфавитом [3]. При описании диффузионного процесса этими моделями для представления концентрации веществ, времени и других физических параметров используются дискретные безразмерные модельные величины. В результате получается довольно точная качественная картина моделируемого процесса, но отсутствует возможность найти его абсолютные количественные характеристики.

В качестве исходных данных задаются размеры моделируемой области X [м] и Y [м], точность Δl [м], начальное распределение концентрации вещества $c(x,y)$, коэффициент диффузии D [м²/с], и время моделирования t [с]. Перед началом моделирования выбираются максимальная модельная концентрация C_{\max} [частиц в клетке] с учетом разрядности компьютера и модельный коэффициент диффузии k из интервала (0,1). Затем вычисляется масштаб линейных размеров $\mu_l = \Delta l / 10$ [м] так, чтобы в пределах точности Δl размещалось как минимум 10 клеток. Далее вычисляются размеры клеточного массива $I = \lfloor X / \mu_l \rfloor$ [клеток] и $J = \lfloor Y / \mu_l \rfloor$ [клеток], масштаб концентрации $\mu_c = c_{\max} / C_{\max}$ [м⁻²], концентрация в каждой клетке $C(i,j) = \lfloor c(x(i),y(j)) / \mu_c \rfloor$ [частиц в клетке], масштаб времени $\mu_t = k \mu_l^2 / 2D$ [с], количество итераций $T = \lfloor t / \mu_t \rfloor$ [итераций]. Физические и модельные координаты связаны соотношениями: $i(x) = \lfloor x / \mu_l \rfloor$, $j(y) = \lfloor y / \mu_l \rfloor$, $x(i) = \mu_l i$ и $y(j) = \mu_l j$. После выполнения T итераций в клеточном массиве будут находиться значения модельной концентрации, соответствующие физической по истечении времени t , из которых могут быть вычислены значения физической концентрации вещества в каждой точке $c(x,y) = \mu_c C(i(x),j(y))$ [м⁻²], являющиеся результатом моделирования.

С введением описанных в работе коэффициентов, связывающих физические величины с внутренними дискретными, исследуемые модели становятся полнофункциональными. Использование таких масштабных коэффициентов делает пригодными исследуемые модели для практического применения.

Литература

1. Бандман О.Л. Клеточно-автоматные модели пространственной динамики // Системная информатика. 2006. №10. С. 59–113.
2. Медведев Ю.Г. Программный комплекс клеточно-автоматного моделирования газопорошковых потоков // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2012): труды международной научной конференции. Челябинск: Изд. центр ЮУрГУ, 2012, с. 732.
3. Medvedev Yu. Multi-particle Cellular-Automata Models for Diffusion Simulation // LNCS. Vol. 6083. Springer — 2010. P. 204–211.

* 1) Исследование выполнено по Программе фундаментальных исследований Президиума РАН, проект № 15.9.

2) Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках проекта № 11-01-00567а.