

УДК: 519.6:536.2

Аппроксимация решения нестационарного уравнения теплопроводности методом вероятностных непрерывных асинхронных клеточных автоматов для одномерного случая

В. В. Жихаревич^а, Л. М. Шумиляк

Черновицкий факультет Национального технического университета,
Харьковский политехнический институт,
Украина, 58032, г. Черновцы, ул. Главная, 203а

E-mail: ^а vzhikhar@mail.ru

Получено 14 апреля 2012 г.,
после доработки 12 мая 2012 г.

В статье рассматривается решение задач теплопроводности с помощью метода непрерывных асинхронных клеточных автоматов. Продемонстрировано согласование распределения температуры в образце между клеточно-автоматной моделью и точным аналитическим решением уравнения теплопереноса в определенный момент времени, что говорит о целесообразном использовании данного метода моделирования. Получена зависимость между временем одного клеточно-автоматного взаимодействия и размерностью клеточно-автоматного поля.

Ключевые слова: уравнение теплопроводности, клеточный автомат, время взаимодействия

Approximation of the solution of the non-stationary equation of heat conductivity by the method of probabilistic continuous asynchronous cellular automats for a one-dimensional case

V. V. Zhykharevych, L. M. Shumylyak

*Chernivtsi faculty of national technical university, Kharkiv polytechnic institute,
Golovna str., 203a, Chernivtsi, Ukraine, 58032*

Abstract. – The solution of problems of heat conductivity by means of a method of continuous asynchronous cellular automats is considered in the article. Coordination of distribution of temperature in a sample at a given time between cellular automat model and the exact analytical solution of the equation of heattransfer is shown that speaks about expedient use of this method of modelling. Dependence between time of one cellular automatic interaction and dimension of a cellular automatic field is received.

Keywords: heat conductivity equation, cellular automat, time of interaction

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2013, vol. 4, no. 2, pp. 293–301 (Russian).

Вступление

На сегодняшний день решение задач теплопроводности является достаточно актуальной проблемой. Особенно когда речь идет о задачах с нелинейными параметрами материалов, сложными граничными и начальными условиями, фазовыми переходами с подвижными границами и тому подобное. В подавляющем большинстве таких случаев аналитические решения получить почти невозможно, а классические численные методы решения, основанные на разностных схемах, могут проявлять неустойчивость [Самарский, Гулин, 1973].

В связи с этим в последнее время все большую популярность приобретают альтернативные подходы относительно численных методов в задачах теплопроводности и диффузии. При этом активно развиваются клеточно-автоматные алгоритмы [Бандман, 2005; Ванаг, 1999]. В частности, при расчетах диффузионных процессов по большей части используют дискретные модели [Малинецкий, Степанцов, 1998], а процессы теплопереноса естественным образом аппроксимируются непрерывными моделями клеточных автоматов [Бобков, Войтко, 2009; Лиманова, Мамзин, Матвеев, 2009].

В работе [Жихаревич, Остапов, 2009] для моделирования разнообразных процессов пространственной динамики, в том числе и теплопереноса и диффузии, применен метод непрерывных асинхронных клеточных автоматов. В частности, продемонстрирована принципиальная возможность клеточно-автоматной аппроксимации стационарного распределения температуры, которое описывается уравнением Лапласа. В то же время вопрос количественной аппроксимации решения нестационарного уравнения теплопроводности для данного метода остался открытым.

Актуальность исследования процессов теплопроводности с использованием клеточно-автоматного подхода обусловлена, прежде всего, его привлекательностью при моделировании сложных систем, например роста дендритных кристаллов (рис. 1). Здесь следует отметить, что за счет сложной геометрии межфазной границы применение других численных методов решения задачи теплопроводности для таких систем является весьма проблематичным. В то же время подобная ситуация практически не влияет на эффективность процесса клеточно-автоматного моделирования, поскольку не зависит от сложности граничных условий [Бандман, 2005].

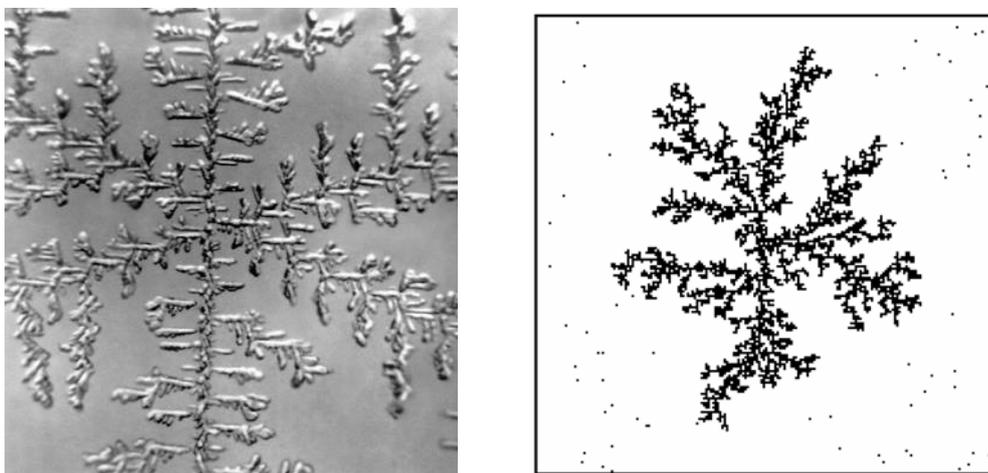


Рис. 1. Дендритный кристалл хлористого аммония (слева) [Малютин, Склярова, 2004] и результат клеточно-автоматного моделирования дендритов (справа) [Жихаревич, Остапов, 2009; Малютин, Склярова, 2004]

Описание модели

Идея метода непрерывных асинхронных клеточных автоматов для решения задач теплопереноса или диффузии заключается в следующем. Выбирается клеточно-автоматное поле в виде некоторого массива ячеек, которые могут приобретать действительные значения. Раз-

мерность задачи совпадает с размерностью массива (одно-, двух- или трехмерный массив). Для простых задач, которые не предусматривают фазовые переходы или другие преобразования, содержимое ячеек трактуется как температура в задачах теплопроводности или как концентрация в задачах диффузии.

Очевидно, что в случаях моделирования сложных явлений содержимое ячеек клеточно-автоматного поля может представлять собой отдельный линейный массив некоторых характеристик, ячейки которого, в свою очередь, кроме температуры и концентрации, могут содержать ряд других параметров, например индекс состояния вещества, внутреннюю энергию и тому подобное.

Размеры поля выбираются исходя из условий достижения необходимой точности клеточно-автоматной аппроксимации моделируемого процесса. Здесь имеет место определенная аналогия с численными методами решения, которые основываются на разностных сеточных схемах, – чем больше количество узлов на единицу длины или времени, тем более точное и более стойкое решение. Отличие заключается в том, что в случае клеточных автоматов решение является абсолютно стойким, а квант времени, как будет показано ниже, является функцией размера поля.

В начале расчетов тепловой или диффузионной динамики клеточно-автоматное поле иницируется некоторыми заданными значениями температуры или концентрации, то есть задаются начальные условия. Что касается определения граничных условий, то здесь можно реализовать два подхода в зависимости от их сложности и динамичности. Если граничные условия являются стационарными, но имеют достаточно сложную геометрию расположения, то наиболее приемлемым подходом является выделение в структуре клеточных автоматов отдельной ячейки для фиксации типа клетки (например, 0 – область динамического изменения температуры или концентрации, 1 – область граничного условия). При этом следует реализовать такую функцию клеточно-автоматных взаимодействий, которая бы учитывала тип клетки и не изменяла значения клеток, обозначенных как граничное условие. В свою очередь граничные клетки могут иницироваться на этапе задания начальных условий. Если граничные условия являются нестационарными, то следует организовать возможность изменения значений граничных клеток параллельно и синхронно с процессом расчетов с помощью отдельной функции. Выделение в структуре клеточных автоматов отдельной ячейки для фиксации типа клетки приводит к увеличению размеров памяти, которая выделяется для хранения клеточно-автоматного поля. Таким образом, в случае сравнительно простой геометрии граничных условий оптимальным подходом является задание значений граничных клеток при реализации соответствующую процедуру в рамках функции клеточно-автоматных взаимодействий. Данная процедура по координатам выбранной клетки должна определять ее значение.

Описанные граничные условия являются изотермическими. При этом имеет место поток тепла на границах в случае теплопереноса или вещества при диффузии, то есть система не является изолированной. Аналогичным способом можно организовать адиабатические граничные условия, при которых система считается изолированной, следовательно, потоки тепла или вещества отсутствуют. Для этого вполне достаточно просто удалить функции задания значений соответствующих граничных клеток. В случае комбинированных граничных условий со сложной геометрией, опираясь на вышеприведенный подход, можно ввести два типа граничных клеток (например, 0 – область динамического изменения температуры, 1 – область изотермического граничного условия, 2 – область адиабатического граничного условия).

После задания начальных и граничных условий можно начинать процесс решения, который являет собой итерационный цикл клеточно-автоматных взаимодействий. Реализация итерационного цикла возможна в двух режимах: синхронном и асинхронном. Синхронный режим предусматривает последовательную детерминированную схему взаимодействия всех клеток поля в течение одного итерационного цикла. При этом для исключения явления упорядоченного взаимодействия клеток, определенных в момент времени t , с клетками, определенными в момент времени $t + 1$, синхронный подход следует организовать или используя два поля клеточных автоматов (один для t , второй для $t + 1$), или распределяя порядок клеточных взаимодействий (например, в момент времени t взаимодействуют клетки $i + 0$ и $i + 1$, $i + 2$ и $i + 3$, ...).

а в момент $t+1$ взаимодействуют $i+1$ и $i+2$, $i+3$ и $i+4$, ...). С другой стороны, асинхронный режим естественным образом лишен возможности упорядоченного взаимодействия клеток, значения которых определены в разные моменты времени. Кроме того, асинхронная схема взаимодействия более приближена к реальным процессам теплопереноса и диффузии, что на «микроуровне» характеризуется стохастической динамикой. В данной работе мы используем именно асинхронную схему взаимодействий клеточных автоматов. Данная схема предусматривает циклическое выполнение трех типичных шагов:

1. На клеточно-автоматном поле случайным образом выбирается некоторая клетка i . При этом все клетки являются равновероятными относительно их выбора.
2. Случайным равновероятным образом выбирается некоторая соседняя клетка $i+1$.
3. Происходит клеточно-автоматное взаимодействие.

Суть клеточно-автоматных взаимодействий в нашем случае заключается в выравнивании (усреднении) температуры при условии одинаковых значений теплоемкости и плотности вещества в двух областях, которые отвечают выбранным клеткам. Если параметры материала разные, то происходит «взвешенное» усреднение по формуле

$$T_{i,i+1}^{t+1} = \frac{c_i^t \rho_i^t T_i^t + c_{i+1}^t \rho_{i+1}^t T_{i+1}^t}{c_i^t \rho_i^t + c_{i+1}^t \rho_{i+1}^t}, \quad (1)$$

где c – удельная теплоемкость, ρ – удельная плотность, T – температура. В общем случае параметры c и ρ могут быть функциями температуры, координаты и времени. Механизм учета коэффициента теплопроводности k рассмотрен ниже.

Проиллюстрируем описанный процесс клеточно-автоматного моделирования теплопереноса на примере элементарного одномерного клеточно-автоматного поля, состоящего из шести клеток (рис. 2). Пусть параметры материала являются стационарными и одинаковыми во всех точках поля, а начальное условие – ступенчатое распределение температуры, изображаемое в виде столбиков соответствующей высоты. Рисунок 2а иллюстрирует пример последовательности асинхронных клеточно-автоматных взаимодействий в случае адиабатических граничных условий. Такое взаимодействие со временем приведет к выравниванию температуры в системе (рис. 2б).

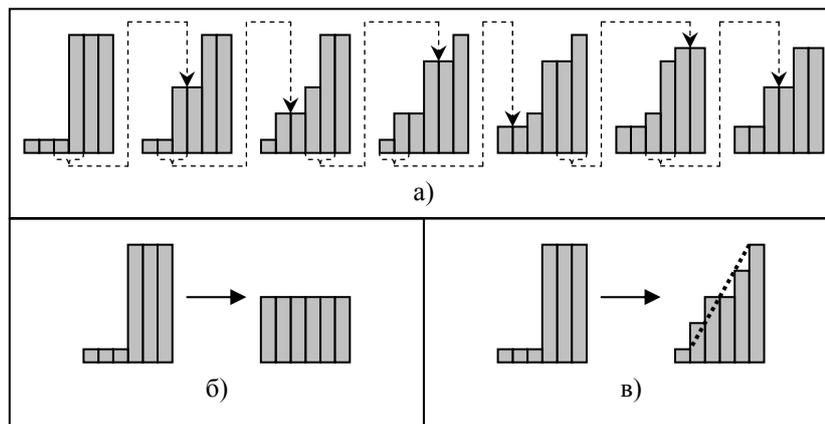


Рис. 2. Иллюстрация клеточно-автоматного моделирования теплопереноса: а) пример последовательности асинхронных клеточно-автоматных взаимодействий; б) переход в стационарное температурное распределение при адиабатических граничных условиях; в) переход в стационарное температурное распределение при изотермических граничных условиях

В случае изотермических граничных условий стационарное температурное распределение будет иметь вид линейной зависимости температуры от координаты, как показано на рис. 2в. При этом принято, что температура крайней левой точки образца поддерживается рав-

ной некоторому минимальному, а крайняя правая – некоторому максимальному значению температуры системы.

Хотелось бы отдельно остановиться на вопросе выбора соседней клетки (второй шаг асинхронной схемы взаимодействий). Здесь следует отметить универсальность приведенного подхода и независимость от характеристик структуры клеточно-автоматного поля. Ведь, кроме разной размерности поля (одно-, двух- или трехмерное), существует определенное многообразие соседства клеток. Например, для двухмерного поля существуют такие структуры соседства, как треугольное, тетрагональное, гексагональное и тому подобные. Более того, в пределах отдельных структур выделяют разные окрестности.

Так, например, для тетрагонального поля клеточных автоматов можно считать соседними клетки с общими ребрами (так называемая окрестность Неймана), или с общими ребрами и вершинами (окрестность Мура), или скопление из четырех клеток с общими ребрами (окрестность Марголуса) и тому подобные. Несмотря на подобное многообразие пространственного представления, описанный выше алгоритм клеточно-автоматных взаимодействий может быть применен в единственном независимом от структуры поля виде.

Анализ результатов

Описанный метод непрерывных асинхронных клеточных автоматов может быть применен для решения задач теплопроводности. В частности, это показано в работе [Жихаревич, Остапов, 2009]. Но для организации количественных расчетов необходимо дать ответ на вопрос о том, сколько следует провести клеточно-автоматных взаимодействий, чтобы полученное температурное распределение можно было бы считать решением задачи в момент времени t .

Рассмотрим одномерный однородный образец. При этом коэффициент температуропроводности примем равным константе. Как известно, процесс теплопроводности в этом случае описывается дифференциальным уравнением второго порядка

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2}, \quad a = \frac{k}{c\rho}, \quad (2)$$

где $T(x,t)$ – температура в точке с координатой x в момент времени t , a – коэффициент температуропроводности, k – коэффициент теплопроводности, c – удельная теплоемкость, ρ – удельная плотность.

Из решения уравнения теплопроводности (2) на участке вещества длиной d вытекает некоторая величина

$$t_{\text{вст}} = \frac{d^2}{a}. \quad (3)$$

Эта величина является характерным временем установления температуры в системе. Из (3) видно, в частности, что при увеличении или уменьшении коэффициента температуропроводности в n раз и соответствующем увеличении или уменьшении размера участка образца в n^2 раз относительная динамическая картина распределения температуры не изменится.

Опираясь на соотношение (3), оценим время одного клеточно-автоматного взаимодействия для описанного асинхронного подхода. Примем $d=1$, $a=1$. Тогда характерный размер одной клетки $d \sim 1/N$, где N – количество ячеек клеточно-автоматного поля. С другой стороны, вероятность выбора клетки для осуществления акта взаимодействия также равняется $1/N$. То есть для обеспечения выбора заданной клетки следует осуществить в среднем N выборов из общей совокупности. По аналогии с процессом массопереноса при диффузии, где коэффициент диффузии прямо пропорционален количеству элементарных актов массопереноса на единицу времени, получим $a \sim N$. Отметим, что подобная аналогия имеет право на существование, по-

сколькo процесс диффузии также описывается дифференциальным уравнением второго порядка (2), но вместо температуры следует рассматривать концентрацию, а вместо коэффициента температуропроводности – коэффициент диффузии. В связи с этим теплопроводность иногда называют «диффузией тепла».

Подставив величины $d \sim 1/N$ и $a \sim N$ в соотношение (3), получим

$$t_{1KA} \sim \frac{1}{N^3}. \quad (4)$$

Таким образом, время одного клеточно-автоматного взаимодействия для одномерного случая обратно пропорционально третьей степени количества ячеек клеточно-автоматного поля.

Проверку справедливости зависимости (4) и поиск коэффициента пропорциональности в ней выполним эмпирическим путем, организовав вычислительный эксперимент. Суть эксперимента заключается в сравнении клеточно-автоматной динамики при разном количестве ячеек клеточно-автоматного поля с конкретным решением уравнения (2). Например, хорошо известно, что динамика распределения температуры в образце со «ступенчатым» начальным условием описывается для одномерного случая следующим законом:

$$p(x,t) = \frac{T_0}{2\sqrt{\pi at}} \exp\left(-\frac{x^2}{4at}\right). \quad (5)$$

Сместим точку скачкообразного начального температурного распределения в середину единичного интервала и проинтегрируем выражение (5) для получения температурного распределения

$$T(x,t) = \int_{-\infty}^x p(z-0.5,t) dz. \quad (6)$$

В ходе вычислительного эксперимента было построено семейство распределений температуры $T(x,t)$ в диапазоне $x \in [0,1]$ в разные моменты времени.

Параллельно с расчетами по формулам (5) и (6) проводилось клеточно-автоматное моделирование процесса теплопереноса. В случаях максимального подобию, которое анализировалось методом наименьших квадратов на наборе контрольных точек, фиксировалось количество клеточно-автоматных взаимодействий. Усредненные значения количества взаимодействий в разные моменты времени t и при разном количестве ячеек клеточно-автоматного поля N занесены в таблицу 1.

Таблица 1. Результаты вычислительного эксперимента

N \ t	0,001	0,002	0,003	0,004	0,005
100	2000	4000	6000	8000	10000
200	16000	32000	48000	64000	80000
300	54000	108000	162000	216000	270000
400	128000	256000	384000	512000	640000
500	250000	500000	750000	1000000	1250000

Анализируя результаты вычислительного эксперимента можно подтвердить справедливость зависимости (4), а также получить коэффициент пропорциональности, который оказывается равным 0,5. Таким образом, время одного клеточно-автоматного взаимодействия для описанного метода составляет

$$t_{1KA} = \frac{1}{2N^3}. \quad (7)$$

Продemonстрируем справедливость формулы (7). Пусть количество ячеек клеточно-автоматного поля $N = 500$. Тогда время одного клеточно-автоматного взаимодействия $t_{1КА} = 0,000000004 = 4 \cdot 10^{-9}$ с. Построим температурное распределение в образце единичной длины, который имеет единичный коэффициент температуропроводности в момент времени $t = 0,01$ с. Для этого нам необходимо осуществить $t / t_{1КА} = 0,01 / 0,000000004 = 2500000$ взаимодействий. На рис. 3 приведены результаты расчетов по формулам (5) и (6) в сравнении с описанным непрерывным асинхронным клеточно-автоматным методом.

Наблюдается высокая степень совпадения, что подтверждает адекватность использования клеточно-автоматного подхода для аппроксимации решения нестационарного уравнения теплопроводности.

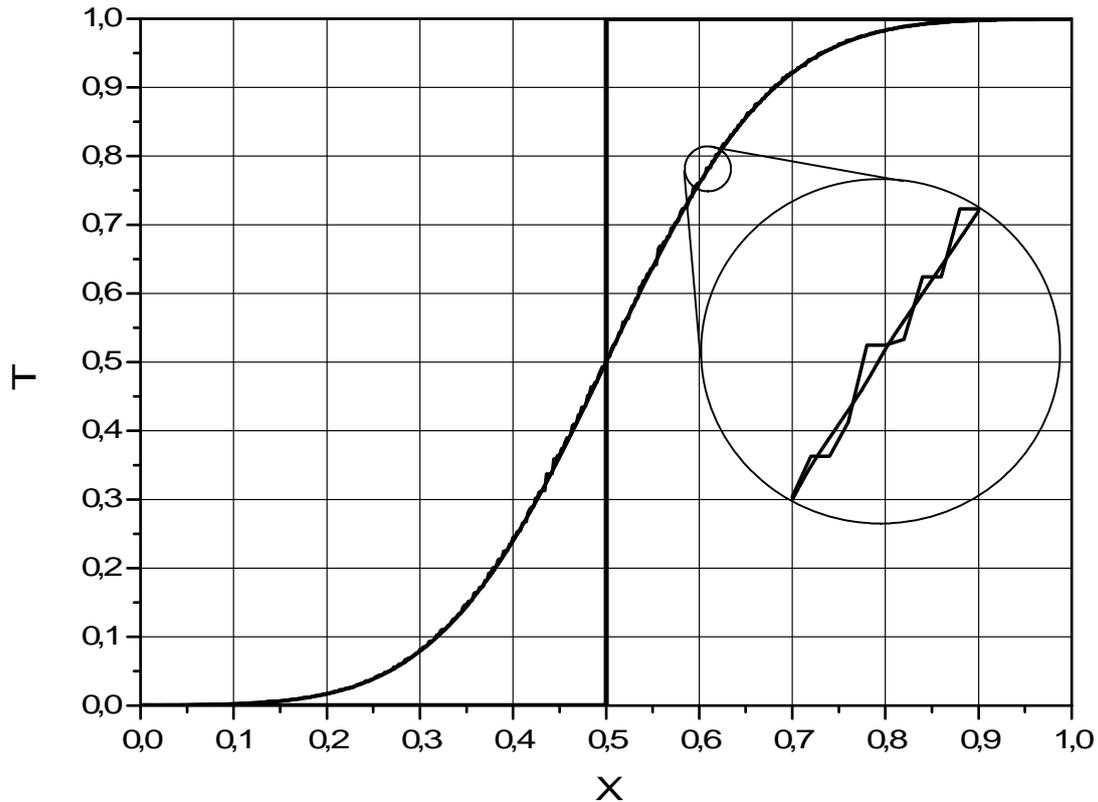


Рис. 3. Распределение температуры в образце в момент времени $t = 0,01$ с ($N = 500$). Гладкая линия – решение по формулам (5) и (6), ломаная – клеточно-автоматное решение. В правой части рисунка – увеличенный в десять раз фрагмент температурного распределения

Формула (7) получена при условиях $d = 1$, $a = 1$. В случае произвольных значений размера образца и коэффициента температуропроводности в формуле (7) появится множитель вида (3)

$$t = \frac{d^2}{a} \times \frac{1}{2N^3}, \quad (8)$$

а неоднородность временных параметров образца следует учитывать неравновероятностью взаимодействий.

Объясним суть неравновероятности взаимодействий на следующем элементарном примере. Пусть мы имеем некоторый образец единичной длины, причем на участке $x [0; 0,5]$ коэффициент температуропроводности – $a = 1$, а на участке $x [0,5; 1]$ он в два раза меньше: $a = 1/2$. Тогда при взаимодействии клеток с координатами $x [0,5; 1]$ выравнивание температуры между

ними будет происходить с вероятностью $1/2$. То есть будет иметь место лишь каждое второе взаимодействие по формуле (1). Определять факт проведения или игнорирования взаимодействия можно методом Монте-Карло. Единичная вероятность взаимодействия, а также время одного взаимодействия определяются максимальным значением коэффициента температуропроводности в системе.

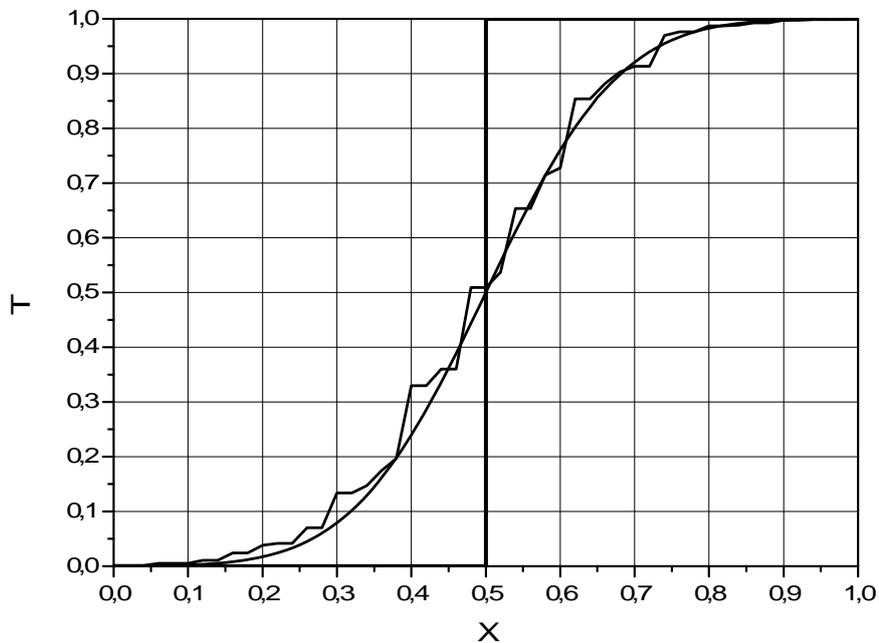


Рис. 4. Распределение температуры в образце в момент времени $t = 0,01$ с ($N = 50$). Гладкая линия – решение по формулам (5) и (6), ломаная – клеточно-автоматное решение

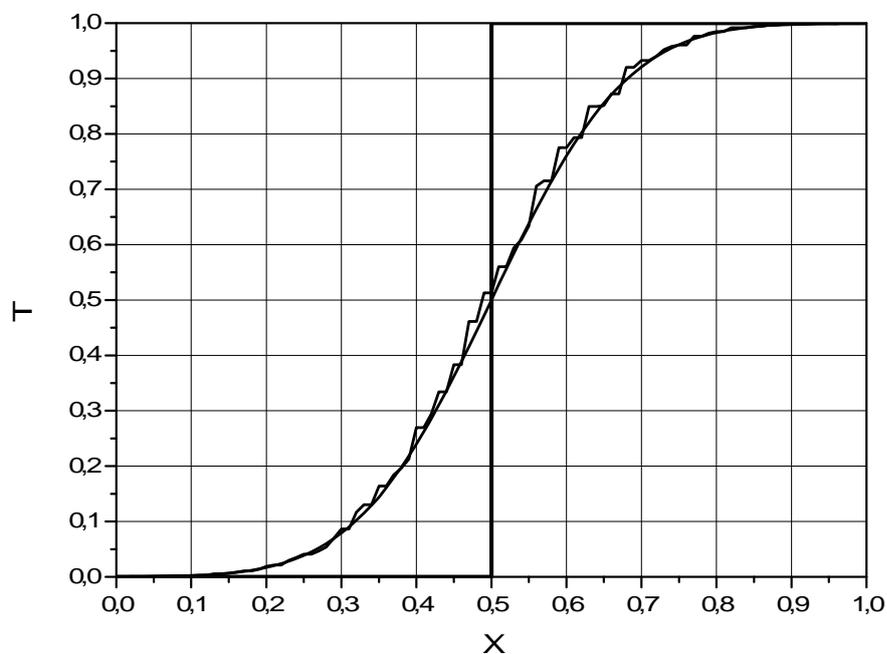


Рис. 5. Распределение температуры в образце в момент времени $t = 0,01$ с ($N = 100$). Гладкая линия – решение по формулам (5) и (6), ломаная – клеточно-автоматное решение

Рассмотрим проблему точности решения нестационарного уравнения теплопроводности методом вероятностных непрерывных асинхронных клеточных автоматов. Вполне очевидно, что, как и в случае любых других численных методов, имеет место зависимость точности решения от количества клеток (узлов), на которые делится система. Рисунок 3 показывает достаточно точную клеточно-автоматную аппроксимацию, что почти полностью накладывается на аналитическое решение ($N = 500$). Рисунки 4 и 5 демонстрируют достаточно «грубое» приближение решения уравнения теплопроводности в случаях 50 и 100 клеток поля соответственно.

Выводы

В ходе проведенного вычислительного эксперимента, который базировался на клеточно-автоматном методе моделирования процесса теплопереноса, было показано, что время одного клеточно-автоматного взаимодействия является функцией размера поля и для одномерного случая обратно пропорционально третьей степени количества клеточных автоматов.

Список литературы

- Бандман О. Л.* Клеточно-автоматные модели пространственной динамики // Системная информатика. – 2005. – Вып. 10. – С. 57–113.
- Бобков С. П., Войтко Ю. В.* Использование систем клеточных автоматов для моделирования нелинейных задач теплопроводности // Химия и химическая технология. – 2009. – Том 52, Вып. 11. – С. 126–128.
- Ванаг В. К.* Исследование пространственно распределенных динамических систем методами вероятностного клеточного автомата // Успехи физических наук. – 1999. – Том 169, № 5. – С. 481–505.
- Жихаревич В. В., Остапов С. Э.* Моделирование процессов самоорганизации и эволюции систем методом непрерывных асинхронных клеточных автоматов // Компьютинг. – 2009. – Том 8, Вып. 3. – С. 61–71.
- Лиманова Н. И., Мамзин Е. А., Матвеев С. Г.* Моделирование процессов теплообмена // Вестник Самарского государственного аэрокосмического университета. – 2009. – Том 19, Вып. 3. – С. 265–269.
- Малинецкий Г. Г., Степанцов М. Е.* Моделирование диффузионных процессов клеточными автоматами с окрестностью Марголуса // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1998. – Том 36, № 6. – С. 1017–1021.
- Малютин В. М., Склярова Е. А.* Компьютерное моделирование физических явлений: Учебное пособие. – Томск: Изд-во ТПУ, 2004. – 156 с.
- Самарский А. А., Гулин А. В.* Устойчивость разностных схем. – М.: Наука, 1973. – 415 с.