

ОСОБЕННОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СИСТЕМ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ОСНОВНЫХ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА

Бобков С.П., Астраханцева И.А.

Бобков Сергей Петрович (ORCID 0000-0001-7315-1625), Астраханцева Ирина Александровна (ORCID 0000-0003-2841-8639)

Ивановский государственный химико-технологический университет,
г. Иваново, Россия. 153000, Ивановская область, г. Иваново, пр. Шереметевский, д. 7.
E-mail: bsp@isuct.ru, i.astrakhantseva@mail.ru

Статья посвящена современным подходам к моделированию процессов молекулярного переноса вещества. Рассматриваются трудности, возникающие при использовании классических непрерывных моделей в форме дифференциальных уравнений с частными производными. Отмечается, что избежать возникающих проблем позволяет переход к дискретным моделям. Описывается один из дискретных методов моделирования – использование систем клеточных автоматов. Дается общее описание метода и вопросы его конкретного использования для изучения процессов диффузии. Приводятся примеры моделирования процесса диффузии в неоднородных средах, а также в условиях нелинейности процесса. Показано, что использование систем клеточных автоматов предоставляет широкие возможности для создания эффективных алгоритмов и программ моделирования различных процессов молекулярного переноса. Отмечается, что предложенный подход может быть рекомендован для использования в научных исследованиях и практических разработках.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, дискретные подходы, клеточные автоматы, диффузия.

PECULIARITIES OF USING CELLULAR AUTOMATA SYSTEMS IN MODELING THE MAIN TRANSFER PROCESSES

Bobkov S.P., Astrahanceva I.A.

Bobkov Sergej Petrovich (ORCID 0000-0001-7315-1625), Astrahanceva Irina Aleksandrovna (ORCID 0000-0003-2841-8639).

Ivanovo State University of Chemical Technology,
Ivanovo, Russia. 153000, Ivanovo region, Ivanovo, Sheremetevsky ave., 7.
E-mail: bsp@isuct.ru, i.astrakhantseva@mail.ru

The article is devoted to modern approaches to modeling the processes of molecular transfer of matter. Difficulties arising from the use of classical continuous models in the form of partial differential equations are considered. It is noted that the transition to discrete models allows avoiding the arising problems. One of the discrete modeling methods is described - the use of systems of cellular automata. A general description of the method and questions of its specific use for studying diffusion processes are given. Examples are given of modeling the diffusion process in non-homogeneous media, as well as under conditions of process nonlinearity. It is shown that the use of cellular automata systems provides ample opportunities for creating efficient algorithms and programs for modeling various processes of molecular transfer. It is noted that the proposed approach can be recommended for use in scientific research and practical development.

Keywords: computer simulation, discrete approaches, cellular automata, diffusion.

ВВЕДЕНИЕ

Главным вопросом, с которым сталкивается исследователь на самых ранних этапах моделирования различных систем (процессов, объектов), является выбор формальной математической схемы будущей модели. Здесь понятие «математическая схема» следует рассматривать не с позиций математики, а как способ мышления, как средство для конкретизации понятий при переходе от словесного описания реального объекта к его формальному представлению. В свою очередь, остановиться на конкретной математической схеме позволяет рассмотрение пространства состояний объекта моделирования [1, 2]. Это пространство может рассматриваться, как непрерывное, а может считаться дискретным. Соответственно, непрерывным или дискретным может быть характер независимых переменных модели – времени и пространственных координат. Эти факты и определяют математическую схему и класс, к которому относится создаваемая модель.

Возможность использования непрерывно-го или дискретного представления реального объекта в модели основывается на понятии дуализма, хорошо известного в философии. Согласно данному свойству, в теории физических явлений, и, в частности, процессов переноса, существуют два противоположных принципа описания – непрерывный и дискретный. Соответствующим образом разделяются и подходы, применяемые для изучения и анализа указанных процессов [3]. В настоящее время успешно используются как непрерывные, так и дискретные модели. Среди исследователей имеются приверженцы той или другой концепции, и оба подхода имеют свои преимущества и недостатки. Вопрос о предпочтении при выборе конкретной математической схемы может быть решен только на основе проверки адекватности модели, достоверности отображения в ней реальных событий.

АКТУАЛЬНОСТЬ ПРОБЛЕМЫ

Долгое время основным инструментом для моделирования технологических процессов переноса служили дифференциальные уравнения с частными производными, которые часто называют уравнениями математической физики. Их использование позволило внести неоценимый вклад в развитие теории и практики огромного количества производственных процессов и оборудования. Поэтому данные модели по праву считаются классическими.

Уравнения математической физики предназначены для изучения процессов переноса субстанции (вещества, энергии) в сплошной среде и в

непрерывном времени. В уравнениях используются функции (фазовые переменные) двух типов. При формировании математических моделей принято использовать их следующие обозначения. Фазовые переменные типа «поток» характеризуют перемещение субстанции в пространстве. Фазовые переменные типа «потенциал», а точнее их неодинаковость в разных точках пространства, служат движущей силой упомянутых потоков [4].

В классических уравнениях переноса состояние системы обычно представляется фазовыми переменными типа «потенциал», и именно они выступают искомыми функциями уравнений. Таким образом, уравнения математической физики описывают непрерывную динамику изменения состояний исследуемой системы, и независимые аргументы в них (время и координаты) также принимаются непрерывными. Кроме того, в уравнениях данного вида полностью отсутствуют стохастические факторы, поэтому искомые функции в них детерминированы, то есть полностью определяются значениями аргументов и начальным состоянием.

В качестве конкретных примеров можно указать модели процессов молекулярного переноса – уравнение теплопроводности Фурье и уравнение диффузии Фика. В них искомыми переменными являются температура и концентрация соответственно. Разность этих величин вызывает потоки тепла или массы [5].

Обе упомянутые модели являются дифференциальными уравнениями с частными производными второго порядка, которые описывают распределение соответствующей потенциальной фазовой переменной в заданной области пространства и ее изменение во времени. Эти свойства непрерывных детерминированных моделей процессов переноса во многом определили их широкое распространение в научных исследованиях.

Массовому использованию классических уравнений также способствовало наличие развитого математического аппарата для работы с ними. Сюда следует отнести теорию дифференциальных уравнений, теорию функций и функциональный анализ, вариационное исчисление и пр. Наличие таких инструментов дало возможность получать аналитические решения целого ряда уравнений, в которых искомая функция представляется в виде выражения (формулы). В этом случае появляются богатые перспективы использования сугубо математических подходов для теоретического рассмотрения исследуемого процесса.

К глубокому сожалению, получить аналитическое решение, то есть представить ответ в

виде ряда или, тем более, отдельного выражения можно далеко не всегда. Например, представить решения нелинейных уравнений в аналитической форме удастся лишь в исключительных случаях [6]. В этой связи, в современных условиях большинство задач, связанных с использованием уравнений математической физики решаются с использованием численных методов. При этом значения искомой функции вычисляются по определенному алгоритму при заданных значениях аргументов. В немалой степени, распространению численных подходов способствует и доступность современных высокопроизводительных компьютерных средств. Однако, следует заметить, что, применяя численные методы решения классических уравнений, мы отходим от непрерывности времени и пространства, поскольку модель становится дискретной [7, 8]. Теперь значения искомой функции определены лишь в конкретных точках.

В порядке дискуссии можно также указать на следующие моменты, возникающие при скрупулезном рассмотрении процедуры вывода классических уравнений переноса.

Практически всегда при выводе этих уравнений используется следующая схема.

1. В однородной и изотропной среде выделяется элементарный объем ΔV , занимаемый некоторой субстанцией. При этом постулируется, что физические свойства среды (плотность, вязкость, теплопроводность и т.д.) одинаковы во всех точках объема и постоянны во времени. Отметим, что здесь речь идет об объекте, имеющем малую, но конечную размерность, тем более что указанные свойства среды носят макроскопический характер и не имеют смысла на микроуровне. Другими словами, имеется в виду конечный, дискретный объем субстанции.

2. Затем рассматриваются потоки субстанции через внешние границы элементарного объема. При этом используются градиентные законы, связывающие указанные потоки с соответствующими потенциалами переноса. Однако, использование градиентных законов означает переход к бесконечно малым величинам, что приводит к непрерывности функций и аргументов в получаемых уравнениях. Здесь дискретность уступает место непрерывности.

3. Вывод заканчивается применением законов сохранения к рассматриваемому объекту. В результате, в общем случае мы получаем систему дифференциальных уравнений с частными производными, т.е. непрерывную и детерминированную модель процесса.

В то же время, использование численных методов при моделировании предполагает возврат к дискретной форме модели. Здесь математические бесконечно малые величины преобразуются в конечные приращения. Резонно указать, что при использовании классического подхода изначально дискретная задача в процессе вывода переводится в непрерывную форму, а затем трансформируется обратно в дискретный вид. Не будет ли более справедливо с самого начала использовать не континуальные методы?

КЛЕТочный АВТОМАТ, КАК МАТЕМАТИЧЕСКАЯ АБСТРАКЦИЯ

Практика показала, что использование классических моделей переноса в ряде случаев существенно затруднено. Особенно это касается задач, при постановке которых в дифференциальные уравнения вводятся нелинейные или пороговые функции. В таких случаях получить аналитические решения практически невозможно.

Трудности возникают также при решении задач со сложной геометрией пространства, когда проблемы возникают как с описанием самой исследуемой области, так и при постановке граничных условий в двух- и трехмерных задачах. Препятствия в решении появляются также при исследовании процессов в гетерогенных средах, а также в случаях, когда свойства вещества меняются в пространстве. В таких случаях целесообразно применять дискретные подходы к моделированию [9, 10].

Парадигма дискретного моделирования заключается в исследовании поведения отдельных элементов системы (ячеек, клеток) на индивидуальном уровне. Элементы расположены в пространстве и функционируют в дискретном времени по заданным алгоритмам. В процессе эволюции элементы взаимодействуют со своим окружением определенным образом. Считается, что динамика всей системы является результатом индивидуального поведения множества взаимодействующих локальных элементов. Такой подход соответствует стратегии моделирования «снизу вверх», когда простое поведение элемента (т.е. установленные для него правила) порождают сложное поведение системы. Другими словами, имеет место синергетический эффект, при котором свойства системы определяются взаимодействием ее составляющих [11, 12].

Одной из разновидностей дискретного подхода к исследованию процессов переноса являются модели в виде систем клеточных автоматов. Данный метод предполагает разбиение исследуемой области пространства на элементы – клетки.

Для удобства моделирования процессов в сплошных средах обычно используют элементы правильной формы, хотя это, в принципе, необязательно. Главным условием дискретизации пространства можно считать выбор такого размера клетки, который позволит считать ее функционально однородной. То есть размеры клетки должны давать возможность считать процесс на клеточном уровне не зависящим от пространственных координат. В таком случае состояние клетки является функцией только одного аргумента – времени. Но поскольку положение клетки в исследуемой области определяется пространственными координатами, есть возможность анализировать динамику системы в целом [13, 14].

Каждая клетка и, соответственно, система функционируют в дискретном времени. Эволюция клетки заключается в том, что она, находясь в конкретном состоянии, взаимодействует с соседними. При этом состояние клетки меняется. В качестве соседей обычно рассматриваются клетки ближайшего окружения. Процедура взаимодействия клеток при моделировании процессов переноса может рассматриваться следующим образом. Состояние всех клеток системы должно характеризоваться значением фазовой переменной типа «потенциал». Разница потенциалов соседних клеток вызывает поток соответствующей субстанции. В результате состояние клеток меняется. Внимательно разбирая описанное поведение клетки, можно указать следующее. В промежуток времени, равный шагу дискретизации, клетка получает от соседей определенный поток субстанции и изменяет свое состояние. То есть она ведет себя, как абстрактный автомат, если считать потоки между клетками сигналами. Собственно, этим и обусловлено название «клеточный автомат». Сказанное позволяет рассмотреть работу клеточных автоматов с использованием положений теории алгоритмов [15].

Алгоритм функционирования такого автомата можно задать с помощью последовательности элементов некоторых множеств:

$$A = \{X, Z, \varphi\} \quad (1),$$

где: X – множество входных сигналов; Z – множество состояний автомата; φ – функция переходов, такая, что $\varphi : Z \times X \rightarrow Z$.

В процессе работы, в любой момент дискретного времени tk автомат может находиться в одном из возможных состояний $z(tk) \in Z$. На каждом шаге времени под действием входного сигнала $x(tk) \in X$ состояние автомата изменяется в соответствии с функцией переходов [16]:

$$z(tk+1) = \varphi[z(tk), x(tk)] \quad (2)$$

Нетрудно заметить, что в данном случае состояние автомата на момент времени $k+1$ является функцией только двух переменных – состояния и входного сигнала в предыдущий момент времени k .

При переходе от отдельного конечного автомата к их совокупности, составляющей систему клеточных автоматов, возникает задача определения множества клеток, плотно заполняющих модельное пространство, и описания связей между клетками [17, 18].

Пусть система состоит из M клеток. Местоположение отдельной клетки в дискретном пространстве можно обозначить ее именем $m \in M$. При этом именами могут служить координаты клетки. Так при моделировании двумерных процессов $m = \{(i,j) : i = 0, 1, \dots, I, j = 0, 1, \dots, J\}$. Поскольку каждой клетке поставлен в соответствие автомат, который определяется своим состоянием z , то теперь клетку можно представить, как пару $(z, m) \in Z \times M$.

Связи между клетками вводятся следующим образом. Считается, что каждая клетка-автомат имеет входы, которые являются выходами других клеток – соседей. Эти контакты служат для передачи сигналов, которыми здесь можно считать информацию о состоянии клеток-соседей. Обозначим множество соседей i -ой клетки, как $O(i)$. Тогда клетка с именем j является соседом клетки i , если $j \in O(i)$. Таким образом, функция перехода (2) для однородного детерминированного клеточного автомата примет вид:

$$z_i(t_{k+1}) = \varphi \left(z_i(t_k), \sum_{j \in O(i)} z_j(t_k) \right) \quad (3)$$

Переходы между состояниями осуществляются по шагам модельного времени для всех клеток синхронно.

Из выражения (3) видно, что правила эволюции клеточного автомата являются локальными, поскольку состояние каждой конкретной клетки зависит от состояния ближайших соседей, а более удаленные клетки никакого влияния не оказывают.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДИФФУЗИИ

Рассмотрим основные подходы и общую методологию моделирования процессов переноса субстанции с использованием клеточных автоматов. После того, как непрерывное модельное пространство разбито на клетки по функциональному признаку следует описать поведение клеток во

времени с помощью функций переходов вида (3). Для этого существуют несколько приемов, но в данной статье рассмотрим подход, в основу которого лежат макроскопические понятия. Здесь для получения функций перехода используются общие законы моделируемого процесса [19-26].

Поскольку в качестве состояний клеток применяются потенциальные фазовые переменные, а входным сигналам соответствуют потоки, целесообразно связать эти параметры с помощью законов сохранения. Известно, что изменение потенциала переноса субстанции в каком-либо макроскопическом объеме пропорционально потоку переноса в этот объем.

Для конкретизации дальнейших рассуждений остановимся на описании процесса диффузии. В соответствии с теорией будет иметь в виду молекулярную диффузию – т.е. перемещение вещества из области с высокой концентрацией в область с низкой концентрацией [20].

Выделим в пространстве клетку с именем i

$$J_{i,j}(t_k) = \sum j_{i,j}(t_k) = \frac{D_{i,j}}{h^2} \sum_{n \in O(i,j)} [C_{i,j}(t_k) - C_n(t_k)] \quad (5)$$

Закон сохранения массы для интервала времени Δt будет иметь вид:

$$J_{i,j}(t_k) = \frac{C_{i,j}(t_k) - C_{i,j}(t_{k-1})}{\Delta t} \quad (6)$$

Выражения (5) и (6) позволяют получить функциональную зависимость для определения концентрации вещества (состояния) клетки i,j на каждом шаге дискретного времени. Для ортогональной системы, когда можно считать, что исследуемая клетка имеет четырех ближайших соседей, можно записать:

$$C_{i,j}(t_k) = C_{i,j}(t_{k-1}) + \frac{\Delta t}{h^2} D_{i,j} \sum_1^4 J_{i,j}(t_k) \quad (7)$$

Выражение (7) является функцией переходов клеточного автомата и позволяет исследовать динамику изменения состояния (концентрации вещества) для каждой клетки системы. Важно отметить, что выражение (7) содержит конкретную физическую характеристику материала индивидуальной клетки – коэффициент диффузии. Это позволяет формировать алгоритм исследования процесса в неоднородных средах.

Зависимость (7) справедлива для внутренних клеток автомата. В то же время, при разбиении пространства будут получены клетки, локали-

зованные на границах исследуемой области. Они играют особую роль, поскольку обеспечивают моделирование взаимодействия системы клеточных автоматов с окружающей средой [21, 22]. Для описания поведения таких клеток выражение (7) требуется модифицировать потому, что количество внутренних соседей у граничных клеток меньше четырех. Суть модификации зависит от принятых гипотез протекания процесса и по смыслу аналогична постановке граничных условий при решении дифференциальных уравнений.

$$j_i(t_k) = D_i \frac{\pm [C_i(t_k) - C_o(t_k)]}{h^2} \quad (4),$$

где j_i – удельный (отнесенный к единице объема) поток массы; D_i – коэффициент диффузии материала клетки; $C_i(t_k)$ и $C_o(t_k)$ – концентрации вещества (состояния) в рассматриваемой и соседней клетках в момент времени t_k ; h – шаг дискретизации пространства.

Конкретный знак в числителе правой части выражения (4) определяется направлением вектора теплового потока.

Перейдем к двумерному пространству и рассмотрим клетку с именем (координатами) i,j . Тогда суммарный поток массы к данной клетке можно выразить так:

Если считается, что исследуемая область пространства изолирована от внешней среды, то это означает отсутствие потоков массы на границе. Поэтому, для описания поведения таких граничных клеток, следует уменьшить количество членов суммы в правой части выражения (7). Если имеет место обмен массой с окружающей средой, то этот поток массы следует учесть. Для этого можно либо непосредственно указать величину потока, либо указать концентрацию вещества во внешней среде.

В первом случае функция переходов (7) для граничной клетки примет вид:

где J_o – поток обмена массой с окружающей средой

$$C_{i,j}(t_k) = C_{i,j}(t_{k-1}) + \frac{\Delta t}{h^2} D_{i,j} \left[\sum_1^n J_{i,j}(t_k) \pm J_o \right] \quad (8)$$

Во втором случае проще всего считать, что исследуемая клетка граничит с некоторой фиктивной внешней клеткой, имеющей постоянную заданную концентрацию. Тогда при моделировании можно использовать выражения (4) и (7).

При исследовании процессов переноса нередки случаи, когда в исследуемой области располагаются источники или поглотители (стоки) массы. Наличие локальных источников можно учесть применением клеток, для которых функция переходов (7) не выполняется, но задан закон изменения состояния (концентрации) во времени. Например:

$$C_{m,n}(t_k) = \Psi(t_k) \quad (9)$$

где m,n – имя клетки, $\Psi(t_k)$ – заданная

$$C_{i,j}(t_k) = C_{i,j}(t_{k-1}) + \frac{\Delta t}{h^2} D_{i,j} \left[\sum J_{i,j}(t_k) + \gamma(t_k) \right], \quad (10)$$

где $\gamma(t_k)$ – удельная мощность источника (стока) массы в момент времени t_k .

Безусловно, величина удельной мощности (потока) может зависеть не только от времени, но и от параметров процесса, свойств материала и пр.

Выражения (9) и (10) полезны при моделировании нелинейных процессов, поскольку помогают учитывать эффекты различного рода взаимодействий параметров исследуемого процесса. В рамках рассматриваемой модели не вызывает особых сложностей и анализ процессов в неоднородных средах. В выражения (4) – (10) уже входят конкретные характеристики материала локальной клетки, так что описать разницу физических характеристик клеток не сложно. При необходимости в модель можно ввести выражения для учета изменения характеристик материала от времени, от концентрации, от положения в пространстве и пр. С этих позиций моделирование процесса в однородном материале будет являться частным случаем.

Наконец, для запуска системы клеточных автоматов следует указать условия начала процесса. Эта процедура заключается в указании исходных значений концентрации для всех имеющихся клеток. При этом, не представляет трудностей ситуация, когда необходимо создать неравномерное начальное распределение концентраций в объекте.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

В примерах будем рассматривать процесс молекулярной диффузии в плоской пластине. Пластина разбита на клетки квадратной формы со стороной квадрата $h = 1$ мм. Количество клеток по оси x составит 21 шт., по оси y – 31 шт. Полученный массив M будет содержать клетки, положение которых (имя) определяется пространственными

функция дискретного времени, в общем случае также функция свойств материала.

Правая часть выражения (9), естественно, может быть равна константе. Понятно, что размеры локального источника могут не ограничиваться одной клеткой, а распространяться на несколько клеток.

В объектах моделирования могут содержаться не локальные, а распределенные источники (стоки) массы, например при объемных химических реакциях. Для таких случаев в правую часть функции переходов (7) удобно ввести дополнительное слагаемое, учитывающее выделение (поглощение) массы:

координатами. Укажем, что каждая клетка, расположенная внутри массива, контактирует с четырьмя соседями и функционирует в соответствии с зависимостями (5) – (7). Будем считать, что объект (пластина) изолирована от внешней среды и клетки, расположенные на границе, имеют меньшее количество соседей. Поэтому для описания поведения граничных клеток, как указано выше, будет использовано выражение (7), соответствующим образом модифицированное. Начальная концентрация вещества в пластине принималась равной 0 условных единиц. Характеристики вещества пластины, локализация и параметры источников будут указаны ниже при обсуждении конкретных примеров. Моделирование проводилось с шагом по времени, равным 0,2 с. Эволюция массива клеток M реализована итерационной последовательностью:

$$M(t+1) = F[M(t)], \quad (11)$$

где t – номер итерации, представляющий собой дискретное время; F – функция переходов.

В процессе моделирования начальное состояние массива $M(0)$ менялось в соответствии с отображением (11), определяя состояния клеток в каждый момент дискретного времени – $M(t)$.

Для иллюстрации результатов состояние массива для заданных моментов времени выводилось в виде графика.

При создании моделирующих программ использовалась математическая система Matlab.

Пример 1. В качестве первого примера рассмотрим достаточно тривиальный процесс диффузии с постоянными коэффициентами (линейная диффузия). Рассматривалась пластина, на одной из границ которой был расположен источ-

ник массы с начальной концентрацией в 1 условную единицу. Коэффициент диффузии материала пластины был принят равным $0,1 \cdot 10^{-5}$ м²/с. Результаты для некоторых моментов времени представлены на рисунке 1. На данном и последующем рисунках вертикальная ось представляет концен-

трацию, следовательно, изображенная поверхность показывает значения массива клеток М (поле концентраций) в конкретные моменты времени. Значения моментов времени проставлены верхнем углу рисунков.

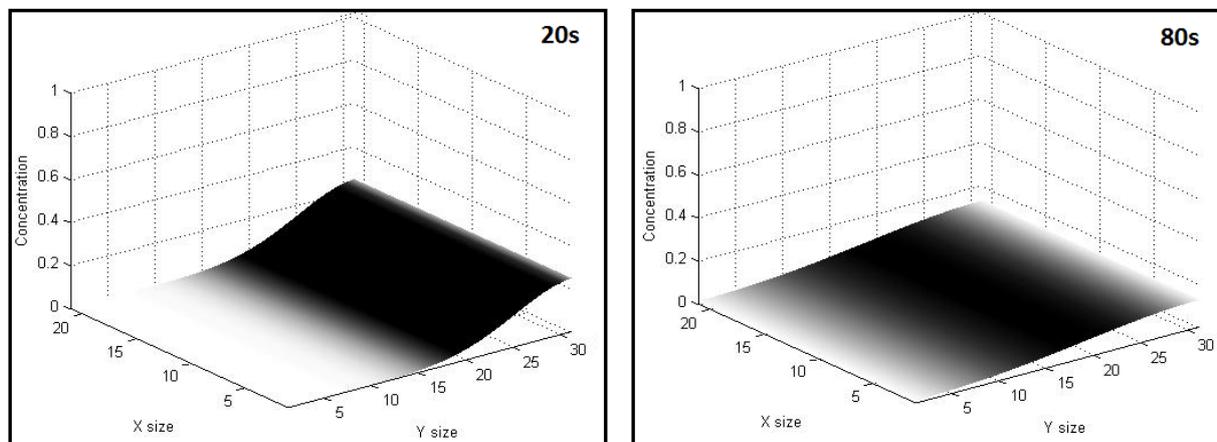


Рис. 1. Моделирование линейной диффузии.
Fig. 1. Simulation of linear diffusion.

Полученные результаты полностью соответствуют принятой теории процесса. Видно, что концентрация вещества постепенно выравнивается по поверхности объекта.

Более любопытную картину можно наблюдать, если положить, что коэффициент диффузии материала зависит от пространственной координаты. Данное предположение делает про-

цесс нелинейным.

Пример 2. Оставив в силе все исходные условия предыдущего примера сделаем коэффициент диффузии линейно убывающим вдоль оси x от $1,0 \cdot 10^{-5}$ до $0,1 \cdot 10^{-5}$ м²/с. Результаты представлены на рисунке 2.

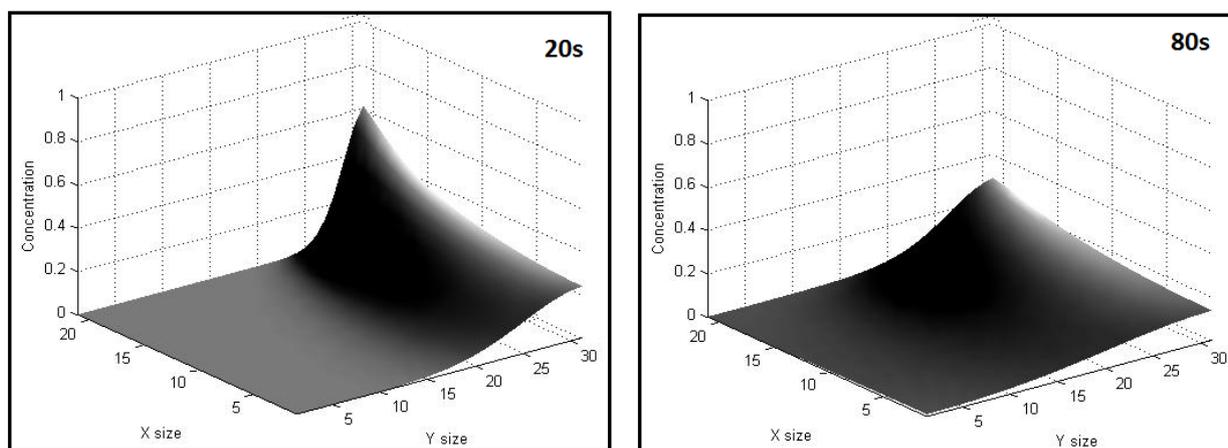


Рис. 2. Моделирование нелинейной диффузии. Коэффициент диффузии зависит от координаты x.
Fig. 2. Modeling of nonlinear diffusion. The diffusion coefficient depends on the x coordinate.

Сравнивая рис. 2 и рис. 1, легко заметить резкие отличия в характере выравнивания концентраций по пластине.

Следует отметить, что переход к анализу поведения нелинейной модели в рамках применяемого подхода осуществлен очень легко – по-

требовалось добавить всего одну строку в моделирующую программу.

Пример 3. Теперь рассмотрим случай, когда источник массы расположен внутри исследуемого объекта. Рассмотрим пластину, в центре которой расположен источник массы, имеющий по-

стоянную концентрацию. Источник имеет квадратную форму в плане, занимает 25 клеток пластины (5×5) и функционирует по уравнению (9). Концентрация вещества в клетках источника равна 1 условной единице. Коэффициент диффузии материала пластины примем постоянным $0,1 \cdot 10^{-5}$

$\text{м}^2/\text{с}$, то есть вернемся к линейной задаче. Результаты показаны на рисунке 3.

Можно указать, что в соответствии с принятыми положениями теории диффузии со временем происходит выравнивание концентрации в пластине.

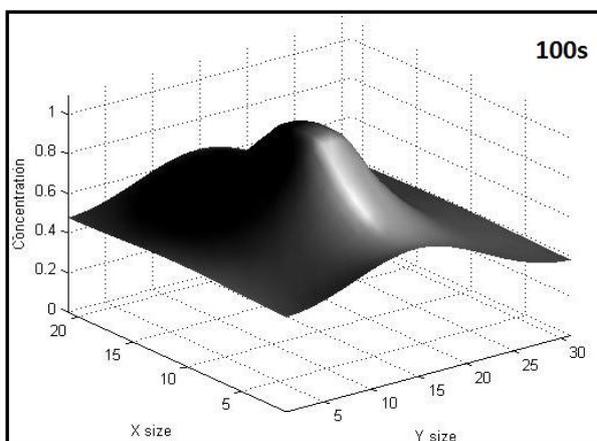
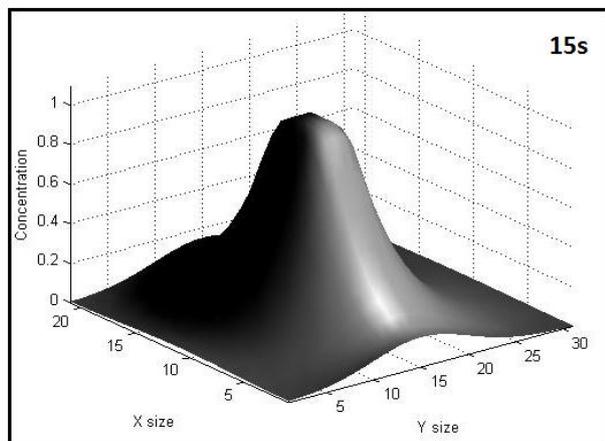


Рис. 3. Моделирование диффузии с источником массы внутри объекта
Fig. 3. Simulation of diffusion with a source of mass inside the object

Пример 4. Усложним процесс путем введения в пластину зоны, материал которой имеет другой коэффициент диффузии. То есть рассмотрим диффузию в неоднородном материале.

Полностью сохранив исходные условия примера 3, добавим в исследуемую пластину линейный участок из материала с меньшим коэффи-

циентом диффузии. Этот участок расположен параллельно оси y , пересекает всю пластину и имеет величину коэффициента диффузии на два порядка меньше, чем остальной материал – $0,1 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$. Результаты иллюстрируются рисунком 4.

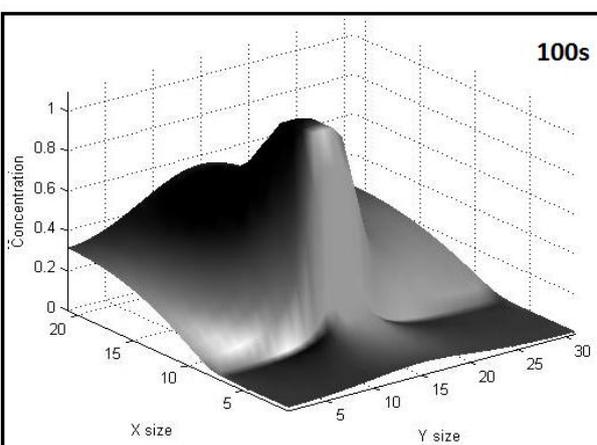
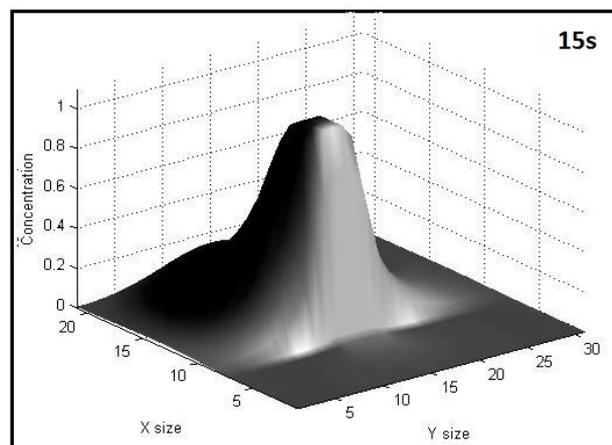


Рис. 4. Моделирование диффузии в неоднородном материале
Fig. 4. Simulation of diffusion in an inhomogeneous material

Результаты, представленные на рис. 4, полезно сравнить с предыдущим рисунком.

Видно, что наличие аномального участка не только существенно замедляет процесс диффузии, но и делает картину распределения концентрации в пластине весьма неравномерным.

Здесь также следует отметить, что для исследования процесса в пластине из неоднородного материала оказалось достаточно изменить небольшой фрагмент моделирующей программы.

Пример 5. Наконец рассмотрим протекание процесса диффузии в объекте, где имеется зона с нулевым коэффициентом диффузии – пол-

ностью не пропускающая вещество (перегородка). Пусть на границе пластины имеется источник массы с постоянной концентрацией, равной 1 условной единице. Пластина имеет линейный непроводящий участок, локализованный от одной из границ до середины пластины. Коэффициент диффузии остального материала пластины постоянный $0,1 \cdot 10^{-5}$ м²/с. Результаты представлены на

рисунке 5. Результаты демонстрируют ситуацию, когда присутствие внутренней перегородки существенно искажает поле концентраций и препятствует распространению вещества. Можно отметить, что все приведенные выше результаты, полученные с использованием дискретного подхода, полностью соответствуют общим представлениям о природе рассмотренных процессов.

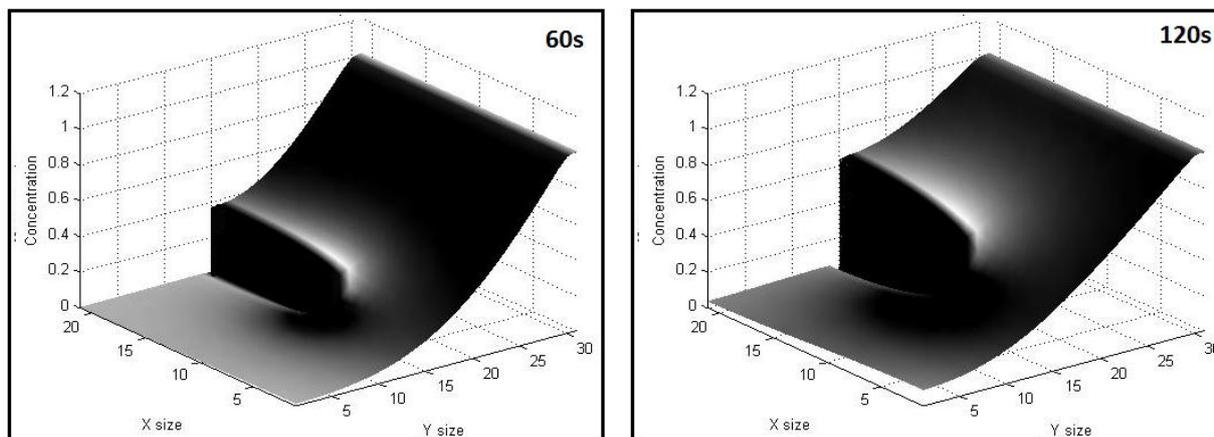


Рис. 5. Моделирование диффузии в объекте с перегородкой.
Fig. 5. Simulation of diffusion in an object with a partition

К сожалению, формат журнальной статьи не позволяет рассмотреть целый ряд других примеров использования систем клеточных автоматов, как инструмента для моделирования процессов молекулярного переноса. Так аналогия процессов диффузии и теплопроводности позволяет использовать приведенные выше зависимости для моделирования молекулярного переноса тепла. В этом случае переносимым потенциалом будет выступать температура, а потоком – поток тепла. Поэтому в уравнениях (4) – (10) достаточно поменять концентрацию на температуру, а коэффициент диффузии на коэффициент температуропроводности [23,25]. При этом вся логика алгоритма моделирования остается неизменной.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ВЫВОДЫ

Представленные результаты свидетельствуют о широких возможностях, присущих дискретным подходам к моделированию процессов переноса. Так применение систем клеточных автоматов позволяет избежать многих трудностей, присущих непрерывным моделям классического типа. В первую очередь это касается решения нелинейных задач переноса. Дискретизация пространства дала возможность создать моделирующие программы, в которых переход к анализу процессов в неоднородной среде или процессов с нелинейными параметрами происходит достаточно легко. Изменения программ были минималь-

ными и касались только зависимостей для расчета характеристик материала и, в необходимых случаях, ввода координат аномальных зон. Модификация программ не затрагивала сам имитационный алгоритм, что является важным преимуществом использования дискретных методов и облегчает применение компьютерной техники.

Другим положительным аспектом, присущим моделям на основе клеточных автоматов, является сравнительная легкость исследования объектов, границы которых имеют сложную форму. Известно, что при использовании классических моделей корректная постановка дополнительных условий на криволинейных границах весьма затруднена. Дискретная постановка задачи позволяет аппроксимировать сложную форму границ дискретными элементами. Возникающая при этом неизбежная погрешность с лихвой компенсируется простотой эксплуатации модели.

Наконец, следует сказать об инструментах реализации моделей. Безусловно, основным инструментом моделирования в настоящее время является компьютер. При этом модели, базирующиеся на классических уравнениях переноса, требуют разработки и использования численных методов решения. Описанный подход, основанный на применении систем клеточных автоматов, не требует специальных математических инструментов и легко реализуется с помощью распростра-

ненных программных средств. Существующие средства визуализации вычислений позволяют выводить результаты не для отдельных моментов времени (как в приведенных выше примерах), а проследить весь процесс эволюции массива клеток во времени. Последовательный вывод изображений для каждого шага дискретного времени формирует своего рода анимационную картину изменения формы поля концентраций, что очень эффективно как в научных, так и в учебных целях.

Конечно, дискретным методам моделирования присущи определенные недостатки. В частности, системы клеточных автоматов требуют значительных затрат машинного времени, особенно при использовании обычных компьютеров с одним процессором. Применение для ускорения вычислений многоядерных процессоров требует дополнительных трудозатрат для решения про-

блемы распараллеливания задачи. Тем не менее, прогресс в развитии вычислительной техники способствует нивелированию данного недостатка.

Рассмотренный в данной работе подход к моделированию позволяет разрабатывать эффективные модели для исследования процессов молекулярного переноса и других динамических пространственных явлений. Это позволяет рекомендовать его к использованию наравне с известными классическими методами для моделирования протекания технологических процессов и анализа работы оборудования современных производств.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

The authors declare the absence a conflict of interest warranting disclosure in this article.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Малинецкий Г.Г., Потапов А.Б., Подлазов А.В.** Нелинейная динамика: Подходы, результаты, надежды. М.: Озон. 2016. 280 с.
2. **Бобков С.П. Астраханцева И.А., Галиаскаров Э.Г.** Применение системного подхода при разработке математических моделей. *Современные наукоемкие технологии. Региональное приложение.* 2021. № 1(65). С. 66–71. DOI:10.6060/snt.20216501.0008
3. **Акопов А.С.** Компьютерное моделирование. М.: Издательство Юрайт, 2022. 389 с.
4. **Норенков И.П.** Основы автоматизированного проектирования. М.: Издательство МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2009. 430 с.
5. **Бобков С.П.** Моделирование основных процессов переноса с использованием клеточных автоматов. *Изв. вузов. Химия и хим. технология.* 2009. Т.52. № 3. С. 109–114.
6. **Chen T.M.** Numerical solution of hyperbolic heat conduction problems in the cylindrical coordinate system by the hybrid Green's function method. *International journal of heat and mass transfer.* 2010. V. 7(53), P. 1319–1325
7. **Inverno M., Luck M.** Multi-agent systems research into the 21st century. *The Knowledge Engineering Review.* 2002. V. 16. P. 271 – 275.
8. **Yoav S., Leyton-Brown K.** Multiagent Systems: Algorithmic, Game-Theoretic and Logical Foundations. Cambridge University Press, 2009. 519 p.
9. **Лебедюк Э.А.** Агентное моделирование: состояние и перспективы. *Вестник РЭУ им. Г. В. Плеханова.* 2017. № 6 (96). С. 155 – 162
10. **Bobkov S. P.** Use of Discrete Approaches for Simulation the Basic Processes of Chemical Technology. *Russian Journal of General Chemistry.* 2021. V. 91. N 6. P. 1190–1197.
11. **Macal C., North M.** Tutorial on Agent-Based Modelling and Simulation. *Journal of Simulation,* 2010. V. 4. P. 151–162.
12. **Gilbert N.** Agent-Based Models. Sage Publications: London. 2007. 153 p.

REFERENECES

1. **Malineckij G.G., Potapov A.B., Podlazov A.V.** Non-linear Dynamics: Approaches, Results, Hopes. M.: Ozon. 2016. 280 p.
2. **Bobkov, S. P., Astrahanceva I.A., Galiaskarov E.G.** Application of a systematic approach in the development of mathematical models. *Modern science-intensive technologies. Regional application.* 2021. N 1(65). P. 66-71. DOI:10.6060/snt.20216501.0008.
3. **Akopov A.S.** Computer modelling. M.: Izdatel'stvo YUrajt, 2022. 389 p.
4. **Norenkov I.P.** Fundamentals of Computer-Aided Design. M.: Izdatel'stvo MGTU im. N.E. Bauman, 2009. 430 p.
5. **Bobkov S.P.** Modeling of the main transfer processes using cellular automata. *Izv. vuzov. Himiya i him. tekhnologiya.* 2009. V.52, N 3. P.109-114.
6. **Chen T. M.** Numerical solution of hyperbolic heat conduction problems in the cylindrical coordinate system by the hybrid Green's function method. *International journal of heat and mass transfer.* 2010. V. 7(53). P. 1319–1325
7. **Inverno M., Luck M.** Multi-agent systems research into the 21st century. *The Knowledge Engineering Review.* 2002. V. 16. P. 271 – 275.
8. **Yoav S., Leyton-Brown K.** Multiagent Systems: Algorithmic, Game-Theoretic and Logical Foundations. Cambridge University Press, 2009. 519 p.
9. **Lebedyuk E.A.** Agent-Based Modeling: Status and Prospects. *Vestnik REU im. G. V. Plekhanova .* 2017. N 6 (96). P. 155–162. (in Russian)
10. **Bobkov S. P.** Use of Discrete Approaches for Simulation the Basic Processes of Chemical Technology. *Russian Journal of General Chemistry.* 2021. V. 91. N 6. P. 1190–1197.
11. **Macal C., North M.** Tutorial on Agent-Based Modelling and Simulation. *Journal of Simulation,* 2010. V. 4. P. 151–162.

13. Galan J. Errors and Artefacts in Agent-Based Modelling. *Journal of Artificial Societies and Social Simulation*. 2008. V. 12, N. 1. P. 151–162.
14. Bobkov, S. P., Astrahanceva I.A. The use of multi-agent systems for modeling technological processes. *Journal of Physics: Conference Series: 2, Moscow*. 2021. P. 012002
15. Бандман О.Л. Клеточно-автоматные модели пространственной динамики. Системная информатика: Сб. науч. тр.: Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2006. Вып. 10. С. 59–111.
16. Бандман О.Л. Клеточно-автоматные модели естественных процессов и их реализация на современных компьютерах. *Прикладная дискретная математика*. 2017. № 35. С. 102–121. DOI: 10.17223/20710410/35/9
17. Dastani M., Gomez-Sanz J. Programming multi-agent systems. *The Knowledge Engineering Review*. 2005. V. 20. P. 151 – 164.
18. Бандман О.Л. Режимы функционирования асинхронных клеточных автоматов, моделирующих нелинейную пространственную динамику. *Прикладная дискретная математика*. 2015. № 1(27). С. 105–119.
19. Бобков С.П. Использование дискретных подходов для моделирования основных процессов химической технологии. *Российский химический журнал* Т. 63 № 3–4 (2019) С. 22–30. DOI: 10.6060/rcj.2019633.3
20. Рубцов С.Е., Павлова А.В., Олейников А.С. Клеточно-автоматное моделирование диффузии многокомпонентных примесей. *Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества*. 2017. №4. С. 86–93.
21. Bobkov S., Galiaskarov E., Astrakhantseva I. The use of cellular automata systems for simulation of transfer processes in a non-uniform area. *CEUR Workshop Proceedings, Moscow*, 20.01.2021. Moscow, 2021.
22. Бандман О.Л. Метод построения клеточно-автоматных моделей процессов формирования устойчивых структур. *Прикладная дискретная математика*. 2010. № 4(10). С. 91–99.
23. Бобков С.П., Галиаскаров Э.Г. Моделирование процесса теплопроводности с использованием систем клеточных автоматов. *Программные продукты и системы*. 2020. № 4. С. 641–650. DOI:10.15827/0236-235X.132.641-650
24. Астраханцева И.А., Бобков С.П. Моделирование систем. Учебное пособие. М.:НИЦ ИНФРА-М, 2023, 216с. ISBN: 978-5-16-017220-0
25. Астраханцева, И. А. Прогнозирование региональной инфляции с помощью алгоритмов машинного обучения / И. А. Астраханцева, А. С. Герасимов, Р. Г. Астраханцев // Известия высших учебных заведений. Серия: Экономика, финансы и управление производством. – 2022. – № 4(54). – С. 6-13. – DOI 10.6060/ivecofin.2022544.620. – EDN ITYDFE.
26. Исследование алгоритмов функционирования криптоактивов для определения оптимального режима налогообложения / И. А. Астраханцева, А. С. Кутузова, Е. Н. Морозов, Р. Г. Астраханцев // Известия высших учебных заведений. Серия: Экономика, финансы и управление производством. – 2022. – № 1(51). – С. 131-137. – DOI 10.6060/ivecofin.2022511.593. – EDN MWOQQN.
12. Gilbert N. Agent-Based Models. Sage Publications: London. 2007. 153 p.
13. Galan J. Errors and Artefacts in Agent-Based Modelling. *Journal of Artificial Societies and Social Simulation*. 2008. V. 12, N 1. P. 151–162.
14. Bobkov, S. P., Astrahanceva I.A. The use of multi-agent systems for modeling technological processes. *Journal of Physics: Conference Series: 2, Moscow*. 2021. P. 012002
15. Bandman O.L. Cellular automaton models of spatial dynamics. *Sistemnaya informatika: Sb. nauch. tr.: Novosibirsk: Izd-vo SO RAN, 2006. Vyp. 10. P. 59-111. (in Russian)*
16. Bandman O.L. Cellular automata models of natural processes and their implementation on modern computers. *Prikladnaya diskretnaya matematika*. 2017. N 35. P. 102–121. DOI: 10.17223/20710410/35/9
17. Dastani M., Gomez-Sanz J. Programming multi-agent systems. *The Knowledge Engineering Review*. 2005. V. 20. P. 151 – 164.
18. Bandman O.L. Operating Modes of Asynchronous Cellular Automata Modeling Nonlinear Spatial Dynamics. *Prikladnaya diskretnaya matematika*. 2015. N 1(27). P. 105–119. (in Russian)
19. Bobkov S.P. Using Discrete Approaches for Modeling the Basic Processes of Chemical Technology. *Rossiiskij himicheskij zhurnal*. V. 63 N 3-4 (2019) P. 22-30. DOI: 10.6060/rcj.2019633.3 (in Russian)
20. Rubcov S.E., Pavlova A.V., Olejnikov A.S. Cellular automaton modeling of diffusion of multicomponent impurities. *Ekologicheskij vestnik nauchnyh centrov Chernomorskogo ekonomicheskogo sotrudnichestva*. 2017. N 4. P. 86-93. (in Russian)
21. Bobkov S., Galiaskarov E., Astrakhantseva I. The use of cellular automata systems for simulation of transfer processes in a non-uniform area. *CEUR Workshop Proceedings, Moscow*, 20.01.2021. Moscow, 2021.
22. Bandman O.L. Metod postroeniya kletочно-автоматных моделей процессов формирования устойчивых структур. *Prikladnaya diskretnaya matematika*. 2010. N 4(10). P. 91–99. (in Russian)
23. Bobkov S.P., Galiaskarov E.G. Modeling the heat conduction process using cellular automata systems. *Programmnye produkty i sistemy*. 2020. N 4. P. 641 – 650. DOI:10.15827/0236-235X.132.641-650.
24. Astrakhantseva I.A., Bobkov S.P. Modeling of systems. Textbook. Moscow: SIC INFRA-M, 2023, 216s. ISBN: 978-5-16-017220-0
25. Astrakhantseva, I. A., Gerasimov, A. S., Astrakhantsev, R. G. (2022). Forecasting regional inflation by machine learning algorithms. *Ivecofin*, 2022. - 4(54), 6-13. DOI: 10.6060/ivecofin.2022544.620. EDN ITYDFE.
26. Astrakhantseva, I. A., Kutuzova, A. S., Morozov, E. N., Astrakhantsev, R. G. (2022). Crypto-assets functioning algorithms to determine the optimal taxation regime. *Ivecofin*, 2022 - 1(51), 131-137. DOI: 10.6060/ivecofin.2022511.593. EDN MWOQQN.

Поступила в редакцию 02.03.2023
Принята к опубликованию 17.05.2023

Received 02.03.2023
Accepted 17.05.2023