Модели класса решеточных газов в задачах газодинамики

Г.Г. Малинецкий, М.Е. Степанцов

В данной работе предлагается общий способ построения моделей типа решеточных газов для любых изотермических газодинамических процессов, а также приводится пример построения клеточного автомата, описывающего неизотермические процессы.

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 — 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. 8 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 (Рис.1).

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 (т.е. 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 соотвествуют 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 напрвленными скоростями. Правила столкновений изображены на Рис.2а.

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.2б).

Оба эти 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"), рассматривались такие, которые сдвигались только на шагах с номером, кратным некоторому заданному числу K ("медленные").

В этом случае температуру системы можно было задать следующим образом:

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

где ρ_i — плотность, а T_i — температура (постоянная) 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.3):

$$P = \alpha T \quad \text{при} \quad V = \text{Const}.$$

Возможность введения взаимодействие 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:

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

Поэтому перед нами стоит следующая задача: нам дан вид тензора Π_{ik}, 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 u_ν, присущие каждому сорту. Так как каждая частица сорта ν обладает импульсом $m_\nu u_\nu$, то

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) = \sum_\nu \frac{\partial f_\nu}{\partial t} m_\nu u_\nu,$$

где f_ν — плотность числа частиц сорта ν.

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.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_i) = \sum_{\nu_i} \frac{\partial f_{\nu_i}}{\partial t} m_{\nu_i} u_{\nu_i},$$

$$\frac{\partial f_{\nu_i}}{\partial t} = \lim_{V \to 0} \frac{\partial N_{\nu_i}}{\partial t}$$

Изменение числа частиц в объеме V находим из выражения:

$$\frac{\partial N_{\nu_i}}{\partial t} = \sum_{\nu_i} P_{\nu'\nu_i} N_{\nu'} - N_{\nu_i} \sum_{\nu'} P_{\nu_i\nu'} - \oint f_{\nu_i} v_{\nu_i} d\sigma.$$

где P_{ij} — вероятности превращения частицы сорта i в сорт j. Но v_{ν_i} всегда параллельны оси x_i, следовательно $\mathrm{div} v_{\nu_i} = 0$. Значит,

$$\frac{\partial f_{\nu_i}}{\partial t} = \sum_{\nu_i} P_{\nu'\nu_i} f_{\nu'} - f_{\nu_i} \sum_{\nu'} P_{\nu_i\nu'} - \lim_{V \to 0} \frac{1}{V} \int_V \mathrm{div}(f_{\nu_i} v_{\nu_i} dV)$$

Учитывая, что

$$\mathrm{div}(f_{\nu_i} v_{\nu_i}) = (v_{\nu_i} \mathrm{grad}) f_{\nu_i},$$

получаем

$$\frac{\partial f_{\nu_i}}{\partial t} = \sum_{\nu'} P_{\nu'\nu_i} f_{\nu'} - f_{\nu_i} \sum_{\nu'} P_{\nu_i\nu'} - (v_{\nu_i} \mathrm{grad}) f_{\nu_i}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) = -(\vec{v}\mathrm{grad})\rho + \sum_\nu m_\nu u_\nu \left(\sum_{\nu'} P_{\nu'\nu} f_{\nu'} - f_\nu \sum_{\nu'} P_{\nu'\nu}\right)$$

Мы получили уравнение Эйлера

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) = -(\vec{v}\mathrm{grad})\rho + \Delta(*)$$

с некоторой добавкой

$$\Delta = \sum_\nu m_\nu u_\nu \left(\sum_{\nu'} P_{\nu'\nu} f_{\nu'} - f_\nu \sum_{\nu'} P_{\nu'\nu}\right), (**)$$

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 напомнить, 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:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\vec{v}) + (\vec{v}\mathrm{grad})\rho = \rho\vec{g}$$

Любой объем газа здесь получает дополнительное приращение импульса $\Delta = \rho\vec{g}$. В решеточном газе это можно реализовать, дав возможность частицам, движущимся против направления $\vec{g}$, превращаться в частицы, движущиеся по направлению $\vec{g}$. Тогда

$$\Delta = \lim_{V\to 0}\frac{2\,N\,P\,m\,\vec{u}}{V},$$

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

$$\Delta = 2\rho\,P\,u$$

Итак, для моделирования газа в гравитационном поле необходимо в базовом решеточном газе на каждом шаге менять направление скорости частиц, движущихся вертикально вверх на противоположное с вероятностью

$$P = \frac{g}{2U}.$$

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

На Рис.4 показан процесс уплотнения нижних и разрежения верхних слоев первоначально однородного газа.

На Рис.5 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.

4 Заключение

Хочется отметить идею моделирования непрерывного воздействия на систему множеством дискретных воздействий, осуществляемых с некоторой вероятностью. Она высказывалась в частности в [8], а в данной работе была успешно применена.

Полученные результаты позволяют надеяться на более широкое применение решеточных газов для решения, в частности тех задач, где традиционные методы плохо или вообще неприменимы.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 96-01-01161 и 96-02-18689).

Список литературы

[1] Тоффоли Т. и Марголус Н. Машины клеточных автоматов. М.: Мир,1991.

[2] Gardner M. // Scient.Amer., 1970 V.223 N4 p.120-123.

[3] Berlekamp E., Conway J. and Guy R. Winning ways for your mathematical plays. Academic Press,1982.

[4] Hardy J., Pomeau Y. and de Pazzis O. // J. Math. Phys., 1978 V.19 N3 p.293-299.

[5] Frisch U., Hasslacher B. and Pomeau Y. // Phys. Rev. Letts., 1986 V.56 p.1505-1508.

[6] Малинецкий Г.Г. и Степанцов М.Е. // Ж.Физ.Химии 1995 т.69 n.8 c.1528-32

[7] Квасников И.А. Термодинамика и статистическая физика. М.: Изд-во МГУ,1991.

[8] Appert C. and Zaleski S. // Phys. Rev. Letts., 1990 V.64, p.1-4.

[9] Appert C. and Zaleski S. // Physica D 1991 V.47 N1 & 2 p.85-92.

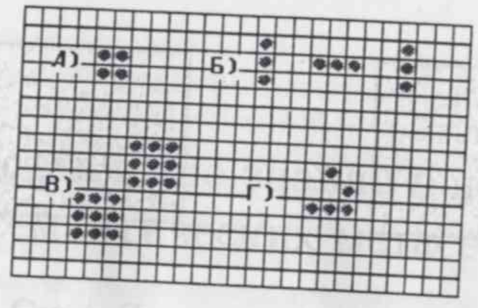

Рис.1

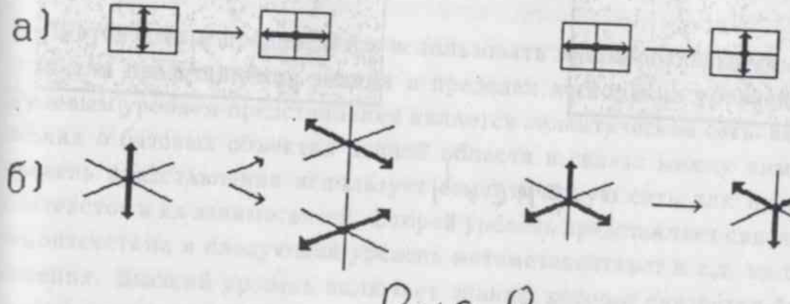

Рис.2

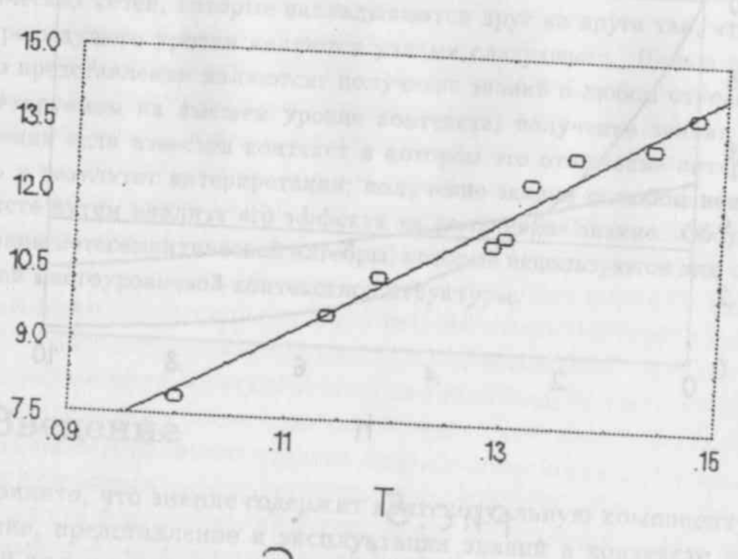

Рис.3

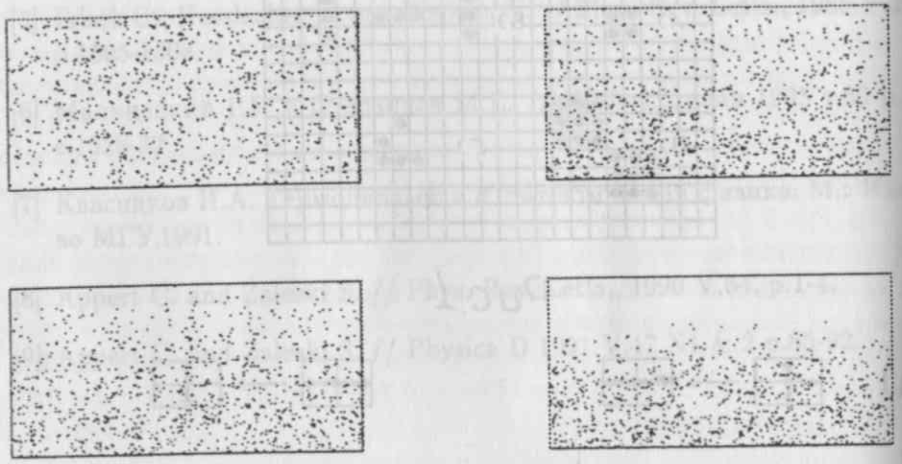

рис. 4

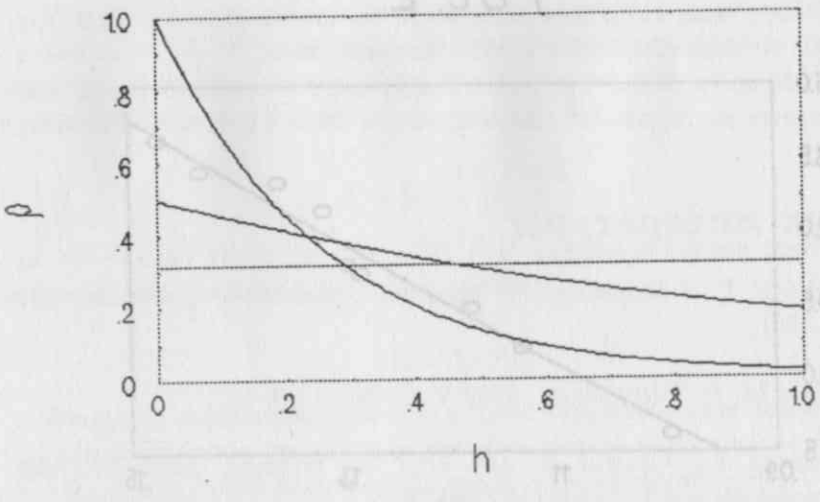

рис. 5

Представление знаний с помощью семантических метасетей

Сеппо Пууронен, Ваган Терзиян

В этой статье предлагается использовать многоуровневые семантические сети для представления знания в пределах нескольких уровней контекста. Нулевым уровнем представления является семантическая сеть, включающая знания о базовых объектах данной области и связях между ними. Первый уровень представления использует семантическую сеть для представления контекстов и их взаимосвязей. Второй уровень представляет связи между метаконтекстами и следующий уровень метаметаконтекст и т.д. на следующих уровнях. Высший уровень включает знание, которое считается "истиной" в любом контексте. Такая семантическая метасеть является множеством семантических сетей, которые накладываются друг на друга так, что отношения предыдущего уровня являются узлами следующего. Целью получения такого представления являются: получение знаний о любом отношении, интерпретируемом на высшем уровне контекста; получение знания о любом отношении если известен контекст в котором это отношение интерпретировалось и результат интерпретации; получение знания о любом неизвестном контексте путем анализа его эффекта на полученное знание. Обсуждаются уравнения метасемантической алгебры, которые используются для обоснования этой многоуровневой контекстной структуры.

1 Введение

Общепринято, что знание содержит контекстуальную компоненту. Приобретение, представление и эксплуатация знаний в контексте дало бы большой вклад в представление знаний, приобретение знаний, объясне-