

ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ ТА КОМП'ЮТЕРНА ТЕХНІКА

УДК 004.942; 536.2

Л. М. Шумиляк¹
В. В. Жихаревич¹
С. Е. Остапов¹

ПРО СУЧАСНІ МЕТОДИ ІМІТАЦІЙНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ТЕПЛОВОЇ ДИНАМІКИ

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

Задачі чисельного моделювання гетерогенних динамічних систем на сьогодні дуже актуальні, оскільки вони дозволяють спостерігати еволюційні закономірності таких систем у режимі реального часу, особливо якщо йдеться про проблеми з нелінійними параметрами матеріалів, складними граничними та початковими умовами, фазовими переходами з рухомими межами тощо. У переважній більшості таких випадків практично неможливо отримати аналітичні розв'язки, а численні методи розв'язання класичних задач можуть бути нестабільними. Класична модель фізичних процесів ґрунтується на диференціальних рівняннях, але практичне їх застосування не дозволяє отримувати прийнятні результати. У реальних практичних завданнях аналітичні розв'язки часто отримуються в найпростіших випадках з обмеженнями та припущеннями. У зв'язку з цим в останні роки стають популярнішими альтернативні підходи. Широко використовуються імітаційні або агентні моделі, де для кожного агента можна створити свої власні правила поведінки. Метод клітинних автоматів (КА) є одним з таких підходів моделювання. Він забезпечує не тільки опис фізичних властивостей матеріалу, але також може описати зміни на мікрорівні. Зокрема, процеси теплопередачі природно апроксимуються неперервними моделями клітинних автоматів. Створення якісної моделі процесу для проведення обчислювальних експериментів дозволяє прогнозувати властивості отриманого матеріалу.

Клітинні автомати найефективніше використовуються для опису поведінки системи, колективна поведінка якої визначається локальною поведінкою її складових елементів, коли система є дуже неоднорідною, а усереднення змінних по всій системі навряд чи може відображати її стан адекватно в цілому. Тому для моделювання процесу плавлення, що супроводжується фазовим переходом першого роду, вибрано метод клітинних автоматів.

Розглянуто питанням використання клітинно-автоматної моделі для дослідження деяких базових фізичних процесів. На прикладі моделювання процесів переносу тепла розглянуті основні підходи і загальна методологія розробки клітинно-автоматних моделей. Показано, що ці моделі можуть стати альтернативою використанню класичних диференціальних рівнянь. Доведено, що модель у вигляді системи клітинних автоматів є досить зручним інструментальним засобом для дослідження нелінійних задач теплопереносу і може описувати досить складну поведінку системи, незважаючи на простоту її опису. Розглянуто типові задачі теорії теплопровідності та їх розв'язання методом клітинних автоматів. Здійснено аналіз точності обчислень КА-методом. Проведене порівняння швидкості обчислень для задачі Стефана за допомогою КА-методу та відомих сіткових методів.

Ключові слова: фазовий перехід, клітинний автомат, теплопровідність.

Вступ і постановка задачі

Вивчення будь-якого фізичного явища зводиться до встановлення залежності між величинами, що характеризують це явище. Для складних фізичних процесів, в яких основні величини можуть суттєво змінюватись в просторі і часі, встановити залежність між цими величинами дуже складно. В цих випадках в нагоді стає метод математичної фізики, який виходить з того, що обмежується проміжок часу і з усього простору розглядається лише елементарний об'єм. Це дозволяє в межах елементарного об'єму та вибраного малого інтервалу часу, знехтувати зміною деяких величин, що характеризують процес і суттєво спростити залежність між величинами.

Чисельне розв'язання рівняння теплопровідності для конкретних граничних умов, форми та характеристик об'єкта є предметом для багатьох наукових досліджень. В Еймс [1], К Мортон, Д. Купер [2] і Маєрс [3] пропонують математичне представлення різницевого скінченного методу. Купер [2] застосовує впровадження сучасних технологій до розвитку теорії диференціальних рівнянь. Теоретичне дослідження процесів теплообміну на сьогодні значною мірою базується на їх чисельному моделюванні з використанням ЕОМ [4].

Таким чином, розвиток чисельних методів розв'язання диференціальних рівнянь знаходиться на високому рівні, але вибір їх різновидів для апроксимації того, чи інакшого фізичного процесу є неоднозначним [5]. Крім того, необхідний аналіз стійкості і збіжності отриманого розв'язку може привести до вимушеної зміни схеми чисельного розв'язку і повторного проведення розрахунків. А складні граничні умови, які часто зустрічаються для опису реальності, надають і без того громіздким розрахункам додаткової складності. Тому актуальним є саме пошук таких моделей, які не є спрощеним розв'язком диференціальних рівнянь, а їх альтернативою. Таким методом є метод клітинних автоматів (КА) [6].

Метою статті є визначення можливостей застосування клітинно-автоматного підходу в задачах теплопровідності, а також оцінка точності та швидкості обчислень у разі застосування побудованої КА-моделі.

Великий внесок у розвиток методу КА зроблено С. Вольфрамом. В [7] він широко аргументує, що досягнення в області клітинних автоматів не є ізольованими, але досить стійкі і мають велике значення для всіх галузей науки. Щодо тематики моделювання фазоутворення за допомогою клітинних автоматів, можна відмітити роботу [8], де наведені результати моделювання руху границь зерен, обумовленого мінімізацією збереженого обсягу енергії або ж кривизною. Також у цій роботі представлений приклад гібридної моделі, яка поєднує клітинні автомати з обчислювальним описом дифузії і розчинення осаду за аномального зростання зерен. Крім того, можна відмітити роботу [9], де з використанням клітинно-автоматної моделі проводяться розрахунки фазового переходу аустеніт-ферит у сталях.

Можливість описання за допомогою клітинних автоматів складних явищ і процесів дозволяє змодельовати не лише сам фазовий перехід в процесі кристалізації, а й ускладнити таку модель наявністю виникаючого при цьому концентраційного переохолодження, що не було змодельоване в попередніх роботах.

Опис КА-моделі

Клітинні автомати є дискретними динамічними системами. КА використовують множину змінних, які взаємодіють тільки локально і одноманітно. Вони відносяться до моделей, які явно зводять макроскопічні явища до точно визначених мікроскопічних процесів. Кожна комірка клітинно-автоматного поля містить значення декількох характеристик речовини. Для нашого випадку це температура клітини T ; концентрація домішки C ; внутрішня теплота H , яка враховується для моделювання фазових переходів та визначає відношення концентрації домішки у рідкій та твердій фазах. Стан клітини (значення характеристик) змінюється в залежності від стану сусідніх комірок.

Процес моделювання асинхронним КА-методом є ітераційним циклом клітинно-автоматних взаємодій. При цьому використовується асинхронна схема взаємодій клітинних автоматів. Ця схема передбачає циклічне виконання трьох типових кроків [10]:

1. На клітинно-автоматному полі випадковим чином вибирається деяка клітина $i = 1$ з цілочисловими координатами x^1, y^1, z^1 . При цьому всі клітини є рівноймовірними щодо їх вибору.

2. Випадковим рівноймовірним чином вибирається деяка сусідня клітка $i = 2$ з цілочисловими координатами x^2, y^2, z^2 . В якості схеми сусідства прийнято окіл Неймана, тобто для двовимірного випадку у клітини є тільки чотири сусіда.

3. Відбувається клітинно-автоматна взаємодія між двома клітинами.

Аналіз отриманих результатів

Клітинно-автоматна взаємодія між двома клітинами описується системою рівнянь для процесу теплопровідності [10]. Система ітераційних рівнянь отримана шляхом декомпозиції великої досліджуваної системи на маленькі частинки (співмірні з клітинами КА). Таким чином, в результаті масових взаємодій маленьких частинок, вся система прямує до стану рівноваги.

Для організації кількісних обчислень необхідно дати відповідь на питання, скільки слід провес-

ти клітинно-автоматних взаємодій, щоб отриманий температурний розподіл можна було б вважати розв'язком задачі в момент часу t . Тому отримано залежність між часом однієї клітинно-автоматної взаємодії та розмірністю клітинно-автоматного поля [10]

$$t_{1KA} = \frac{d_x^2}{M_{\max}} \frac{1}{6N_x^3 N_y N_z} = \frac{d_y^2}{M_{\max}} \frac{1}{6N_y^3 N_x N_z} = \frac{d_z^2}{M_{\max}} \frac{1}{6N_z^3 N_y N_x}, \quad (1)$$

де t_{1KA} — час однієї клітинно-автоматної взаємодії; N_x, N_y, N_z — розмірність клітинно-автоматного поля вздовж координати x, y та z , відповідно; d_x, d_y та d_z — розміри зразка вздовж координати x, y та z , відповідно.

Розглянемо проблему точності розв'язання задач теплопровідності методом неперервних асинхронних клітинних автоматів. Цілком очевидно, що, як і у випадку будь-яких інших чисельних методів, має місце залежність точності розв'язання від кількості клітин (вузлів), на які ділиться система.

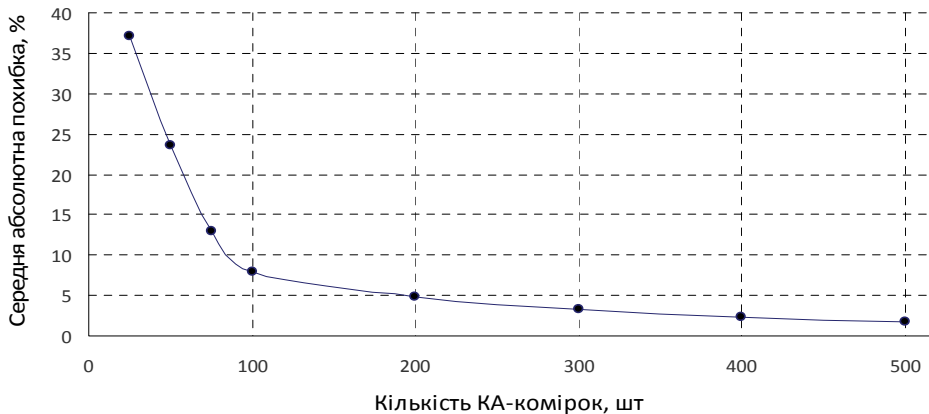
Для дослідження запропонованої КА-моделі виберемо задачу для одновимірного однорідного зразка [10]. При цьому коефіцієнт теплопровідності візьмемо рівним константі. Також припустимо, що теплофізичні характеристики не залежать від температури. В такому випадку задача зводиться до розгляду теплопередачі через плоску нескінченну пластину або ізольований стержень.

В результаті порівняння КА-методу з відомим аналітичним розв'язанням задачі, що розглядається в [10], отримана оцінка точності КА-розв'язку. Похибка КА-методу обчислювалась відносно точного розв'язку згідно з формулою для середньої абсолютної похибки ξ в процентах (MAPE)

$$\xi = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|Y_i - \tilde{Y}_i|}{Y_i} \cdot 100\%, \quad (2)$$

де Y — точне значення, \tilde{Y} — наближене значення.

Як видно з рисунку, точність розв'язання залежить від кількості комірок клітинно-автоматного поля, а для великих розмірностей КА-поля похибка не перевищує декількох процентів.



Залежність похибки КА-обчислень від кількості комірок

Таким чином, кількість комірок КА-поля слід вибирати з огляду на досягнення необхідної точності обчислень. Але, виходячи з аналізу рис., збільшення розмірності КА-поля буде сильно впливати на точність лише за малої кількості комірок. Для великої кількості її збільшення має невеликий вплив на точність, але час обчислень значно збільшується.

Для дослідження запропонованої КА-моделі на стійкість та швидкість обчислень, виберемо складнішу задачу: нестационарну задачу теплопровідності з урахуванням фазових переходів першого роду, так звану задачу Стефана. Розглядаючи такі процеси (плавлення або кристалізація), слід враховувати приховану теплоту плавлення матеріалу [11], [12]. У класичному варіанті задача теплопровідності з рухомою межею розділу фаз — є задачею промерзання вологого ґрунту. Для такої задачі теплопровідності проведено порівняння запропонованого КА-методу з відомими кінцево-різницевиими (К-Р) методами на предмет стійкості розв'язку і швидкості проведення розрахунків за однакової точності розв'язання з ідентичними системними параметрами, результати якого

занесені в таблицю. Температурний розподіл визначався для моменту часу $t = 1$ с. Час обчислення вибирався середнім з 10 експериментів.

Порівняння КА-методу та методу кінцевих різниць

Метод	Кількість вузлів/комірок, шт.	Стійкість	Тривалість обчислення, с
КА метод	50×10	+	0,27
К-Р явна схема	50×10	+	0,41
К-Р неявна схема	50×10	+	0,53
КА метод	100×10	+	1,19
К-Р явна схема	100×10	–	—
К-Р неявна схема	100×10	+	2,11
КА метод	500×10	+	129,7
К-Р явна схема	500×10	–	—
К-Р неявна схема	500×10	+	232,3

Порівняльна характеристика отриманих результатів дозволяє зробити висновок: незважаючи на те, що отримана схема запропонованої КА-моделі містить кількість комірок КА-поля рівну кількості вузлів сітки в кінцево-різницевоїх схемах і температурні поля моделей мають хорошу відповідність, швидкість обчислень КА-моделі приблизно у 2 рази більша. Явна кінцево-різницева схема виявилась нестійкою. На відміну від цього, для КА-моделі закон збереження енергії виконується, що забезпечує її абсолютну стійкість. Це дає підстави для проведення комп'ютерних експериментів на розробленій моделі з розв'язання різних задач теплопровідності.

Висновки

Використано метод неперервних клітинних автоматів. Представлено опис і дослідження результатів застосування методу асинхронних клітинних автоматів для моделювання процесу теплопровідності. Показано, що завдяки своїй простоті й універсальності цей метод є гідною альтернативою раніше відомим класичним методам розв'язання задач теплопровідності, а швидкість обчислень КА-моделі приблизно у 2 рази більша ніж за використання сіткових методів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] W. Ames, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*. Boston, USA: Academic Press, 1992.
- [2] M. P. Coleman, *An Introduction to Partial Differential Equations with Matlab*. Boston, USA: Chapman & Hall, 2013.
- [3] K. W. Morton, and D. F. Mayers, *Numerical Solution of Partial Differential Equations: An Introduction*. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1994.
- [4] С. Колесникова, *Методы решения основных задач уравнений математической физики*. Москва, Россия: МФТИ, 2015.
- [5] Э. А. Аринштейн, «Промерзание влажного грунта,» *Вестник Тюменского государственного университета*, № 6, с. 11-14, 2010.
- [6] О. Л. Бандман, «Дискретное моделирование физико-химических процессов,» *Прикладная дискретная математика*, № 3, с. 33-49, 2009.
- [7] S. Wolfram *A New Kind of Science*. IL, USA: Wolfram Media, 2002.
- [8] K. G. F. Janssens, "An introductory review of cellular automata modeling of moving grain boundaries in polycrystalline materials," *Mathematics and Computers in Simulation*, 80 (7), pp. 1361-1381, 2010.
- [9] R. Golab, D. Bachniak, K. Bzowski, and L. Madej, "Sensitivity Analysis of the Cellular Automata Model for Austenite-Ferrite Phase Transformation in Steels," *Applied Mathematics*, 4, pp. 1531-1536, 2013.
- [10] L. Shumylyak, V. Zhikharevich, and S. Ostapov "Modeling of impurities segregation phenomenon in the melt crystallization process by the continuous cellular automata technique," *Applied Mathematics and Computation*, vol. 290, pp. 336-354. 2016.
- [11] К. Ежовский, и О. Денисова, *Физико-химические основы технологии полупроводниковых материалов: учеб. пособие*. СПб, Россия: СЗТУ, 2005.
- [12] В. В. Жихаревич, Л. М. Шуმიляк, Л. Т. Струтинская, и С. Э. Остапов, «Построение и исследование непрерывной клеточно-автоматной модели процессов теплопроводности с фазовыми переходами первого рода,» *Компьютерные исследования и моделирование*, т. 5(2), с. 141-152, 2013.

Рекомендована кафедрою комп'ютерних систем управління ВНТУ

Стаття надійшла до редакції 22.01.2018

Шумиляк Лілія Михайлівна — асистент кафедри програмного забезпечення комп'ютерних систем, e-mail: lshumylyak@gmail.com ;

Жихаревич Володимир Вікторович — канд. фіз.-мат. наук, доцент кафедри програмного забезпечення комп'ютерних систем;

Останов Сергій Едуардович — д-р фіз.-мат. наук, професор, завідувач кафедри програмного забезпечення комп'ютерних систем.

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, Чернівці

L. M. Shumylyak¹
V. V. Zhykharevych¹
S. E. Ostapov¹

About Modern Methods of Thermal Dynamics Imitation Modeling

¹Yurii Fedkovych Chernivtsi National University

It is well known that many physical properties of crystalline materials obtained by the method of directed crystallization are determined by the distribution of impurity in the melt and its ability to accumulate in the form of separate grains, cells etc. This occurs due to concentrated overcooling and leads to deterioration of the mechanical, electrical and physical properties of the material. It is one of the reasons for their fragility. A series of experiments is needed to investigate the optimal conditions for the growth of semiconductor materials with required properties. The time required is not always available, and the labor and material resources cost is rather high. Therefore, in recent years great attention is paid to the development of the technology of process simulation.

The tasks of heterogeneous dynamical systems numerical simulation are very relevant today, since they allow observing the evolutionary patterns of such systems in real-time, especially when it comes to problems with nonlinear parameters of materials, complex boundary and initial conditions, phase transitions with moving limits, etc. In the vast majority of such cases, it is almost impossible to obtain analytical solutions, and classical based on difference schemes solution numerical methods may be unstable. The classical model of physical processes is based on differential equations. But practical application of it does not allow us to receive acceptable results. In real practical tasks it is often used in the simplest cases with a number of limitations and assumptions. In this regard, alternative approaches are increasingly popular in recent years. There has been widely used imitation or agent models, where each agent can be attributed their own rules of conduct. The method of cellular automata (CA) is one of such simulation approach. It provides not only a description of the physical properties of the material but also can provide for changes at the micro-level. In particular, heat transfer processes are naturally approximated by continuous models of cellular automata. Just creation of a qualitative model of the process, on the basis of computational experiments, allows to predict the properties of the resulting material.

Cellular automata are the most effectively used to describe the behavior of a system the collective behavior of which is determined by the local behavior of its constituent elements, when the system is highly heterogeneous, and averaging of variables throughout the system can hardly reflect its status adequately as a whole. Therefore, while modeling the melting process, accompanied by the first order phase transition, we chose the cellular automata technique.

The work is devoted to the use of cellular automaton model for the study of some basic physical processes. The main approaches and the general methodology of the development of cellular automata models are considered on the example of heat transfer processes modeling. It is shown that these models can become an alternative to the use of classical differential equations. It is proved that the model in the form of a system of cellular automata equations is a very convenient tool for nonlinear heat transfer problems studying and can describe a rather complicated system behavior, despite the simplicity of its description. The typical problems of the thermal conductivity theory and their solving by the cellular automata method are considered. The analysis of accuracy of calculations by the CA-method was carried out. A comparison of the computational speed for the Stefan problem with the help of the CA-method and known net methods has been made.

Keywords: phase transition, cellular automata, thermal conductivity.

Shumylyak Liliia M. — Assistant of the Chair of Computer Systems Software, e-mail: lshumylyak@gmail.com ;
Zhykharevych Volodymyr V. — Cand. Sc. (Eng.), Assistant Professor of the Chair of Computer Systems Software;

Ostapov Serhii E. — Dr. Sc. (Ph-Math), Professor, Head of the Chair of Computer Systems Software

Л. М. Шумиляк¹
В. В. Жихаревич¹
С. Э. Остапов¹

О современных методах имитационного моделирования тепловой динамики

¹Черновицкий национальный университет имени Юрия Федьковича

Задачи числового моделирования гетерогенных динамических систем на сегодня очень актуальны, поскольку они позволяют наблюдать эволюционные закономерности таких систем в режиме реального времени, особенно если речь идет о задачах с нелинейными параметрами материалов, сложными граничными и начальными условиями, фазовыми переходами, с подвижными границами и т. п. В подавляющем большинстве таких случаев практически невозможно получить аналитические решения, а численные методы решения классических задач могут быть нестабильными. Классическая модель физических процессов основана на дифференциальных уравнениях, но практическое их применение не позволяет получать приемлемые результаты. В реальных практических задачах он часто используется в простейших случаях с ограничениями и предположениями. В связи с этим в последние годы альтернативные подходы становятся более популярными. Широко используются имитационные или агентные модели, где для каждого агента можно создать свои собственные правила поведения. Метод клеточных автоматов (КА) является одним из таких подходов моделирования. Он обеспечивает не только описание физических свойств материала, но также может описать изменения на микроуровне. В частности, процессы теплопередачи естественно аппроксимируются непрерывными моделями клеточных автоматов. Создание качественной модели процесса для проведения вычислительных экспериментов позволяет спрогнозировать свойства полученного материала.

Клеточные автоматы наиболее эффективно используются для описания поведения системы, коллективное поведение которой определяется локальным поведением ее составных элементов, когда система является очень неоднородной, а усреднение переменных по всей системе едва ли может адекватно отображать ее состояние в целом. Поэтому для моделирования процесса плавления, сопровождающегося фазовым переходом первого порядка, выбран метод клеточных автоматов.

Рассмотрен вопрос использования клеточно-автоматной модели для исследования некоторых базовых физических процессов. На примере моделирования процессов переноса тепла рассмотрены основные подходы и общая методология разработки клеточно-автоматных моделей. Показано, что эти модели могут стать альтернативой использованию классических дифференциальных уравнений. Доказано, что модель в виде системы клеточных автоматов является довольно удобным инструментальным средством для исследования нелинейных задач теплопереноса и может описывать сложное поведение системы, несмотря на простоту ее описания. Рассмотрены типичные задачи теории теплопроводности и их решения методом клеточных автоматов. Осуществлен анализ точности вычислений КА-методом. Проведено сравнение скорости вычислений для задачи Стефана с помощью КА-метода и известных сеточных методов.

Ключевые слова: фазовый переход, клеточный автомат, теплопроводность.

Шумляк Лилия Михайловна — ассистент кафедры программного обеспечения компьютерных систем, e-mail: lshumylyak@gmail.com ;

Жихаревич Владимир Викторович — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры программного обеспечения компьютерных систем;

Остапов Сергей Эдуардович — д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующий кафедрой программного обеспечения компьютерных систем