

**МОДЕЛИРОВАНИЕ
В ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ**

УДК 519.68

**КОНВЕКЦИОННО-ДИФфуЗИОННАЯ
КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНАЯ МОДЕЛЬ ПОТОКА ЖИДКОСТИ
ЧЕРЕЗ ПОРИСТУЮ СРЕДУ**

О. Л. Бандман

*Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
г. Новосибирск*

E-mail: bandman@ssd.sccc.ru

Предложена клеточно-автоматная модель, которая позволяет исследовать процесс формирования и прохождения потока жидкости или газа через пустоты в твердой среде. Модель является клеточно-автоматным аналогом конвекционно-диффузионного уравнения в частных производных и обладает перед ним тем преимуществом, что простота выражения граничных условий дает возможность исследовать свойства сред со сложной конфигурацией пор. Кроме того, использование вероятностных правил перехода позволяет гибко приспосабливаться к свойствам границ между твердой и жидкой фазой. Дается формальное представление модели и приводятся результаты экспериментального моделирования для среды с гидрофобными, гидрофильными и нейтральными порами.

Введение. Изучение свойств пористых материалов актуально для самых разных областей науки и техники, начиная с геологоразведки (исследование свойств горных пород) и кончая микроэлектроникой (разработка новых материалов для фильтров, адсорбентов, мембран, электродов и т. д.). Несмотря на разнообразие происхождения, применения, назначения, а также широкий диапазон характеризующих их параметров, наличие общих свойств побудило выделить пористую среду в самостоятельный объект исследования и, как следствие, объект для вычислительного моделирования.

Цель моделирования процессов в пористых средах состоит в определении функции распределения некоторых величин (концентрации вещества, скорости потока, времени заполнения или освобождения пор от жидкости или газа и т. д.). Есть два подхода к достижению этой цели. Первый подход основан на рассмотрении пористой среды на макроуровне, когда среда считается однородным веществом, обладающим некоторыми характерными свойствами: пористостью, проницаемостью, плотностью, вязкостью, теплоемкостью и т. д. Обычно все эти свойства определяются экспериментально

для каждого пористого материала отдельно. Задача моделирования состоит в том, чтобы установить средние значения исследуемых величин, при этом методы не отличаются от тех, которые применяются для исследования явлений в любых других однородных материалах. Второй подход заключается в изучении процессов поведения жидкостей или газа в пространстве пор, которые являются пустотами в твердой породе. В этом случае пористая среда задается геометрическими конфигурациями пор, а также свойствами поверхностей стенок пор, которые выражаются в виде граничных условий (гидрофильные, гидрофобные, нейтральные). Цель моделирования состоит в том, чтобы проследить распределение вещества во времени и пространстве пор. Этот подход может быть реализован как с помощью представления процессов в виде дифференциальных уравнений в частных производных (традиционный подход), так и на основе клеточно-автоматного (КА) моделирования [1].

Клеточные автоматы обладают рядом возможностей, позволяющих предположить, что они могут быть полезными для моделирования процессов в порах на микроуровне. Во-первых, в КА-алгоритмах задание граничных условий выполняется очень просто. Оно сводится к обозначению специальными метками клеток, принадлежащих порам, после чего этим клеткам предписывается выполнение соответствующих правил перехода. Во-вторых, использование вероятности в правилах переходов позволяет гибко приспосабливать их к разного типа неоднородностям, а именно анизотропности просачивающейся жидкости, свойствам границ между твердой и жидкой фазой, влияниям внешних сил.

Существует два типа КА-моделей движения жидкости и газа: 1) с булевым алфавитом состояний, которые далее называются конвекционно-диффузионными; 2) с алфавитом состояний в виде булевых векторов, которые относятся к так называемой «клеточно-автоматной гидродинамике» (решеточный газ) [2]. Первые моделируют скалярную величину потока в виде суммарного количества частиц, проходящих через единицу площади за единицу времени. Они более подходят средам с малой пористостью (объем пор меньше объема породы) и с длинными узкими порами. Вторые моделируют импульсы (количества движений). Состояния клеток в них – булевы векторы, имитирующие единичные скорости. Этот тип КА-моделей [3] существенно сложнее конвекционно-диффузионных, но зато позволяет определить поле скоростей потока жидкости в порах, что бывает важно в среде с большим значением коэффициента пористости.

Целью данной работы является исследование конвекционно-диффузионной КА-модели потока жидкости через пористую среду и иллюстрация ее возможностей.

Конвекционно-диффузионная модель пористой среды. Пористая среда представлена дискретным пространством конечных размеров, плотно заполненным клетками двух типов. Один тип клеток имитирует твердую породу с пересекающимися узкими каналами, выложенными клетками второго типа. Эти каналы образуют систему пор, которые могут быть открытыми на границах заданного пространства. Открытые поры являются либо входами в пористую среду (если служат для втекания жидкости), либо выходами из нее (если через них происходит вытекание жидкости). Принимается допущение, что на всех входах давление жидкости так же одинаково, как и на выходах, и перепад $\nabla P = P_{\text{вх}} - P_{\text{вых}}$ обычно известен. Известны также физические свойства жидкости: ρ – плотность, ν – кинематическая вязкость. Стенки каналов могут быть нейтральными (не влияющими на скорость), гидрофильными

(смачивающимися) и гидрофобными (несмачивающимися). Физически эти характеристики выражаются через коэффициенты поверхностного натяжения между поверхностью и жидкостью, которые зависят от свойств как жидкости, так и стенки поры. Целью моделирования обычно является распределение во времени и пространстве потоков жидкости через поры.

Конвекционно-диффузионный клеточный автомат соответствует конвекционно-диффузионному уравнению в частных производных, которое широко применяется в традиционном моделировании процессов в средах с порами в виде каналов [1]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \nabla C = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \nabla_T^2 C, \quad (1)$$

где u – средняя скорость потока вдоль поры; C – концентрация (плотность) жидкости; D_L и D_T – приведенные коэффициенты диффузии вдоль потока и в поперечном направлении соответственно ($D = d\tau/h^2$); ∇ – оператор Га-

мильтона $\left(\nabla = \frac{\partial}{\partial x} i + \frac{\partial}{\partial y} j + \frac{\partial}{\partial z} k \right)$; ∇_T^2 – лапласиан в перпендикулярном к по-

току направлению. Это уравнение имеет конвекционный член (второе слагаемое левой части) и два диффузионных члена, отдельно представляющие продольную (вдоль поры) и поперечную диффузии.

Клеточно-автоматная модель. Формальное описание конвекционно-диффузионного клеточного автомата далее иллюстрируется на примере двумерного случая. С точки зрения общности результатов такой выбор вполне правомерен, так как одномерный вариант не позволяет учитывать влияние взаимодействий жидкой среды с твердыми границами пор, а трехмерный случай сложен для восприятия, хотя принципиально не отличается от двумерного.

Как и в традиционной постановке КА-модель состоит из конвекционной и диффузионной составляющих. Однако, поскольку в КА-модели есть возможность учитывать анизотропию путем введения вероятности в правила переходов, продольная и поперечная составляющие диффузии моделируются одним оператором. Более того, в зависимости от свойств границ между твердой и жидкой фазой для моделирования диффузионной составляющей применяются разные КА-модели. Если пора нейтральная, т. е. свойства ее стенок не влияют на процесс движения жидкости, применяется синхронная КА-диффузия. Если поры гидрофильные или гидрофобные, то в правила переходов вводится вероятность их выполнения, зависящая от расстояния до стенки поры.

В любом случае КА-модель составлена из операторов диффузии и конвекции, применяемых к клеточному массиву $\Omega(A, M) = \{(a, m)\}$, где (a, m) – клетка с состоянием $a \in A$, $A = \{0, 1\}$, причем $a = 1$, если клетка содержит модельную частицу, и $a = 0$, если клетка пуста. Множество имен $M = \{m: m = (i, j, k)\}$ обычно представлено координатами центров клеток в дискретном пространстве. Расстояние между центрами соседних клеток равно единице. Множество непосредственных соседей $N(m)$ клетки с именем m равно $\{m_1, \dots, m_b\}$. В двумерном случае $b = 4$, если используется декартова структура, или $b = 6$, если структура клеточного массива гексагональная. Соответственно в трехмерном пространстве $b = 6$ в декартовой структуре или $b = 12$ в додэкаэдрической. Множество имен подразделяется на два подмножества:

$M = M_W \cup M_P$, где M_W соответствует клеткам твердого вещества (стенки поры), а M_P – клеткам пор. Работа клеточного автомата задается набором локальных операторов и режимом их применения. Локальные операторы имитируют движения модельных частиц с максимально возможным подобием реальным движениям молекул в порах. Режим их работы может быть синхронным, когда все локальные операторы применяются ко всем клеткам одновременно, и асинхронным, когда они применяются к случайно выбранным клеткам и последовательно. В любом случае изменение состояния всех клеток массива составляет итеративный шаг клеточного автомата, переводящий его в глобальное состояние $\Omega(t) \rightarrow \Omega(t+1)$.

Конвекция имитируется продвижением всех частиц вдоль направления приложения внешней силы. Внешняя сила может быть порождена гравитационным, магнитным и электрическим полями, если такие воздействия воспринимается веществом и должны быть учтены. Пусть внешняя сила действует в направлении к j -му соседу, тогда локальный оператор конвекции примет вид подстановки [4]

$$\theta_k : \{(1, m)(0, m_j)\} \xrightarrow{p_1} \{(0, m)(1, m_j)\}. \quad (2)$$

Выражение (2) означает, что каждая частица переместится в j -ю соседнюю клетку $m_j \in N(m)$, если та пуста. Причем это произойдет с вероятностью p_1 , которая определяется степенью влияния конвекционных сил на процесс.

Диффузия моделируется как «наивная» асинхронная диффузия [5] с вероятностными правилами переходов. Оператор диффузии работает следующим образом. Если состояние a клетки с именем $m \in M_P$ равно единице и клетка имеет пустого соседа $m_i \in N(m)$, то они обмениваются состояниями. Выбор соседа для обмена происходит с вероятностями, учитывающими анизотропию поры. Если пора длинная и тонкая, то вероятность выбора соседа, находящегося вдоль канала поры, больше, чем соседа в направлении поперек поры. Если пора не является длинным каналом, то выбор соседа производится равновероятно, т. е. если k ближайших соседей имеют состояние $a = 0$, то вероятность участвовать в обмене у каждого равна $p_2 = 1/k$. После того как пара взаимодействующих клеток определена, к ним применяется локальный оператор диффузии, который отличается от (2) тем, что соседняя клетка $m_i \in N(m)$ выбрана случайным образом:

$$\theta_d : \{(1, m), (0, m_i)\} \xrightarrow{p_3} \{(0, m), (1, m_i)\}, \quad (3)$$

где вероятность p_3 зависит от свойств границы между твердой стенкой и жидкостью. Если пора нейтральная, то ее клетки никак не участвуют в процессе, т. е. если $m_i \in M_W$, то $p_3 = 0$ и (3) не применяется. Если пора гидрофобная, то вероятность p_3 взаимодействия клетки m с клетками, близкими к стенке, сокращается с уменьшением расстояния $d(m, m_w)$, $m_w \in M_W$. Зависимость p_3 от $d(m, m_w)$ может быть выражена любой функцией $p_3(d)$ такой, что $p_3(0) = 0$ и $p_3(d_k) = 1$ (d_k – расстояние до стенок, на котором влияние стенки не замечается), например

$$p_3(d) = 1 - e^{-d/nd_k}. \quad (4)$$

Здесь $n < 1$ – константа, которая подбирается так, чтобы $p_3(d_k)$ при $d = d_k$ было близко к единице. Обычно $n \approx 0,1-0,3$. Если пора гидрофильная, то ве-

роятность взаимодействия клетки m с клетками, близкими к стенке, увеличивается с уменьшением $d(m, m_w)$, т. е. $p_4(0) = 1$ и $p_4(d_k) = 0$, и соответственно может быть выражена функцией

$$p_4(d) = e^{-d/nd_k}. \quad (5)$$

Алгоритм моделирования асинхронного клеточного автомата состоит в том, что на каждом итерационном шаге $|M|$ раз выполняется следующее: к случайно выбранной клетке применяется θ_k и затем к вновь случайно выбранной клетке применяется θ_d .

Три глобальных состояния двумерного клеточного автомата, моделирующего распространение жидкости в пористой среде, изображены на рис. 1. Фрагмент имеет три канала: гидрофильный, гидрофобный и нейтральный. Соотношение между конвекционной и диффузионной составляющими определяется вероятностью $p_1 = 0,2$. Конвекционная составляющая направлена вдоль каналов. Жидкость подается сверху непрерывно со средней плотностью $\langle \rho \rangle = 0,8$, где

$$\langle \rho \rangle = \frac{1}{|Av(m)|} \sum_{Av(m)} a(m). \quad (6)$$

Моделирование проводилось на клеточном массиве размером 300×300 клеток. В установившемся состоянии поток через гидрофобный канал равен 0,5089, гидрофильный – 0,2185 и нейтральный – 0,3660 частиц, проходящих через одну клетку поры за одну итерацию. Полученные соотношения потоков качественно соответствуют ожидаемым, что подтверждает адекватность КА-модели.

Синхронная КА-модель среды с нейтральными порами. Когда пористая среда нейтральная и влияние стенок поры не учитывается, следует применить синхронную КА-модель, называемую в [5] КА-диффузией с окрестностью Марголуса. Использование этой модели целесообразно, так как алгоритм такого клеточного автомата более прост хотя бы потому, что при каждом применении локального оператора приходится только 1 раз (а не 3 раза) прибегать к использованию генератора случайных чисел. Синхронная КА-модель диффузии работает следующим образом. В клеточном массиве определяются два покрытия блоками размером 2×2 клетки: четное и нечетное. Блоки четного покрытия имеют диагональные клетки с координатами (i, j) такими, что $(i + j) = 0 \pmod{2}$, а блоки нечетного покрытия – с координатами

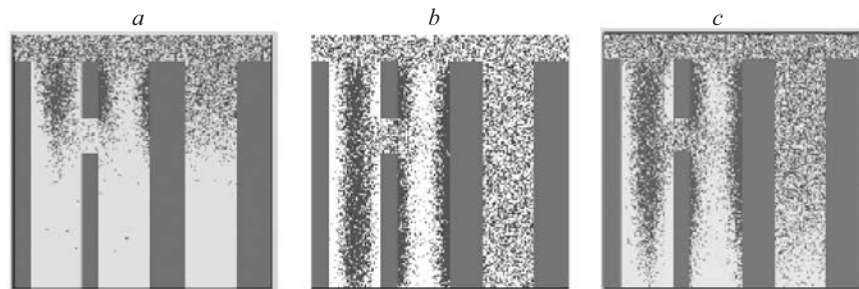


Рис. 1. Три глобальных состояния клеточного автомата, моделирующего распространение жидкости в трех порах пористой среды: $t = 1200$ (a), $t = 4000$ (b), $t = 6000$ итераций (c)

натами диагональных клеток такими, что $(i + j) = 1 \pmod{2}$. Локальный оператор одинаков для блоков обоих типов. Он меняет состояние всех клеток каждого блока, перемещая их состояния в блоке с равной вероятностью либо по часовой, либо против часовой стрелки, т. е. $\theta_d = \{\theta_1, \theta_2\}$, где

$$\begin{aligned} \theta_1: \{(a, (i, j)), (b, (i, j + 1)), (c, (i + 1, j + 1)), (d, (i + 1, j))\} &\xrightarrow{p} \\ &\xrightarrow{p} \{(d, (i, j)), (a, (i, j + 1)), (b, (i + 1, j + 1)), (c, (i + 1, j))\}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \theta_2: \{(a, (i, j)), (b, (i, j + 1)), (c, (i + 1, j + 1)), (d, (i + 1, j))\} &\xrightarrow{1-p} \\ &\xrightarrow{1-p} \{(b, (i, j)), (c, (i, j + 1)), (d, (i + 1, j + 1)), (a, (i + 1, j))\}, \end{aligned}$$

$$a, b, c, d \in \{0, 1\}.$$

Итеративный шаг клеточного автомата разделен тоже на два такта: четный и нечетный, $t = (t_0, t_1)$. На четном такте (t_0) оператор θ_d применяется к четным блокам, на нечетном (t_1) – к нечетным. В [5] доказано, что модельный коэффициент диффузии этого клеточного автомата $D_{\text{mod}} = 1,5$. Оператор θ_d применим к блоку только тогда, когда ни одна клетка блока не принадлежит M_w .

Конкретной задачей, которую можно решить с помощью клеточного автомата с окрестностью Марголуса, является, например, задача распределения концентрации вещества и потока в порах с кавернами. Глобальные состояния, полученные при моделировании процесса прохождения жидкости в нейтральной пористой среде, показаны на рис. 2. Размер клеточного автомата 300×300 клеток. Соотношение конвективной и диффузионной составляющих $p_1 = 0,1$. Каждый итерационный шаг клеточного автомата состоит из трех синхронных тактов: применение θ_k ко всем клеткам, применение θ_1 ко всем четным и применение θ_2 ко всем нечетным клеткам. На рисунке хорошо видно, что при заполнении пространства пор жидкостью остается почти пустой широкая область в верхнем правом углу фрагмента – каверна.

Переход от модельных величин к физическим. Чтобы определить по результату моделирования истинные физические величины (распределение скоростей, давления, потоков в порах), необходимо установить их соответствие модельным параметрам. Обычно бывают известны (кроме структуры пор в твердом веществе) линейные размеры моделируемого образца L (м),

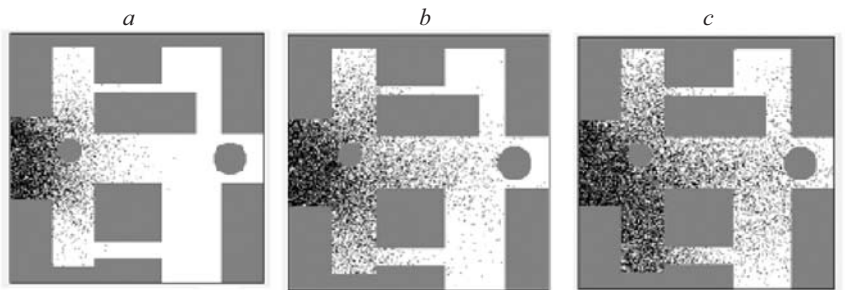


Рис. 2. Три глобальных состояния клеточного автомата, моделирующего заполнение жидкостью пор сложной конфигурации: $t = 1000$ (a), $t = 4000$ (b), $t = 8000$ итераций (c)

коэффициент диффузии D ($\text{м}^2/\text{с}$) и плотность проходящей через поры жидкости ρ ($\text{кг}/\text{м}^3$). Масштабы их соответствия модельным величинам можно определить из следующих предположений:

1. Масштаб длины $\mu_L = L/n$ (м), где L (м) – физический размер моделируемого образца, n – соответствующий ему линейный размер клеточного автомата. При выборе размеров клеточного автомата необходимо иметь в виду условие, известное из классических работ по моделированию пористых сред [1], состоящее в том, что самый узкий канал должен иметь модельную ширину не менее 10–12 клеток.

2. Масштаб коэффициента $\mu_D = D/D_{\text{mod}}$ ($\text{м}^2/\text{с}$) легко вычислить, так как его модельные значения известны. Для асинхронной двумерной КА-диффузии $D_{\text{mod}} = 1,0$ [5], для синхронной $D_{\text{mod}} = 1,5$ [6].

3. Масштаб времени $\mu_T = t_{\text{phys}}/t_{\text{mod}}$ (с) определяется с помощью μ_D и μ_L , т. е. $\mu_T = \mu_L^2/\mu_D$ (с).

4. Масштаб плотности $\mu_\rho = \rho_{\text{phys}}/\rho_{\text{mod}}$, где $\rho_{\text{mod}} = 1/\mu_L^3$ (число 1 – модельная масса частицы в одной клетке), откуда $\mu_\rho = \rho_{\text{phys}}\mu_L^3$ (кг) – масса одной частицы.

5. Масштаб потока $\mu_Q = \mu_\rho/(\mu_L^2\mu_T)$ ($\text{кг}/\text{м}^2 \cdot \text{с}$).

В случае, представленном на рис. 1, моделируемый образец имел следующие параметры: $L \times L = 3 \times 3$ см, жидкостью была вода (коэффициент диффузии $D = 10^{-4}$ $\text{м}^2/\text{с}$, плотность $\rho = 10^3$ $\text{кг}/\text{м}^3$), свойства границ характеризовались формулами (4) и (5) при $q = 0,1$, $d_k = 10$. Согласно приведенным выше соотношениям $\mu_L = 0,03/300 = 10^{-4}$ м, $\mu_D = 10^{-4}$ $\text{м}^2/\text{с}$, $\mu_T = 10^{-4}$ с, $\mu_Q = 10^3$ $\text{кг}/\text{м}^2 \cdot \text{с}$. Ширина поры в образце $L_p = \mu_L n_p = 8 \cdot 10^{-3}$ м, время одной итерации $\Delta t = 10^{-4}$ с, масса частицы $m_c = 10^{-9}$ кг. Поток для гидрофобной поры равен 0,5086, для гидрофильной – 0,2185, для нейтральной – 0,3660 $\text{кг}/\text{м}^2 \cdot \text{с}$.

Заключение. Представлена простая КА-модель распределения потока жидкости в пористой среде. Модель позволяет наблюдать распределение потоков в порах среды при заполнении их и в стационарном состоянии. Влияние свойств поверхности стенок пор на потоки в них учитывается специальным распределением вероятности выполнения правил переходов клеточного автомата, что позволяет моделировать среду с разными свойствами поверхности пор. Хотя приведенные результаты моделирования относятся к двумерным случаям, ничто не мешает распространить их на трехмерные клеточные автоматы. Сложность вычислений в трехмерном случае не является препятствием для моделирования пористых сред, поскольку КА-модели легко и эффективно распараллеливаются. Более того, проблема их параллельных реализаций на многопроцессорных системах тоже решена как для синхронных, так и для асинхронных клеточных автоматов [7, 8].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Sahimi M.** Flow phenomena in rocks: from continuum models to fractals, percolation, cellular automata and simulated annealing // Rev. in Modern Phys. 1993. **65**, N 4. P. 1393.
2. **Rothman D. Y., Zaleski S.** Lattice-Gas Cellular Automata. Cambridge: Cambridge University Press, 1997.

3. **Медведев Ю. Г.** Применение клеточно-автоматной модели потока вязкой жидкости в исследовании трехмерных пористых сред // Автометрия. 2006. **42**, № 3. С. 21.
4. **Achasova S., Bandman O., Markova V., Piskunov S.** Parallel Substitution Algorithm // Theory and Application. Singapore: World Scientific, 1994.
5. **Bandman O.** Comparative study of cellular automata diffusion models // Lecture Notes in Comput. Sci. /Ed. V. Malyskin. Berlin: Springer, 1999. Vol. 1662. P. 395.
6. **Малинецкий Г. Г., Степанцов М. Е.** Моделирование диффузионных процессов клеточными автоматами с окрестностью Марголуса // Журн. вычисл. математики и матем. физики. 1998. № 6. С. 1017.
7. **Медведев Ю. Г.** Исследование вычислительных характеристик программной реализации трехмерной клеточно-автоматной модели потока жидкости // Научный сервис сети Интернет: технологии параллельного программирования: Тр. Всерос. науч. конф. М.: Изд-во МГУ, 2006. С. 79.
8. **Бандман О. Л.** Параллельная реализация асинхронных клеточно-автоматных алгоритмов // Вест. ТГУ. 2006. № 18. С. 79.

Поступила в редакцию 17 ноября 2006 г.
