

А. П. Ершов

## ГАЗОДИНАМИКА КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ

(Обзор)

Цель обзора — познакомить специалистов в области горения и взрыва с методом клеточных автоматов (cellular automata), называемым также методом решеточного газа (lattice gas), — сравнительно новым подходом к моделированию газодинамических процессов. Движение сплошной среды моделируется прямым образом расчетом эволюции специального микромира частиц, которые перемещаются по фиксированной плоской или пространственной решетке и сталкиваются между собой в узлах решетки. По существу, речь идет о предельно упрощенном варианте молекулярной динамики. Указываются преимущества (и недостатки) метода, область его применимости. Приводятся примеры использования в различных задачах, в том числе для расчета реагирующих течений, неустойчивых задач и течений в сложной геометрии. Обсуждаются возможности применения метода в физике горения и взрыва.

Численное моделирование газодинамики развивается с 40-х годов и основано главным образом на применении разностных схем. Такие традиционные методы, называемые в дальнейшем детерминированными, с успехом применялись при решении многих проблем. Вместе с тем детерминированным методам присущи недостатки, затрудняющие их применение в ряде приложений.

Один из примеров такого рода — неустойчивые задачи. Разностные схемы сами по себе могут проявлять паразитную «счетную» неустойчивость. Если же их применять в задачах с неустойчивостью физического происхождения, то в лучшем случае удастся описать начальные стадии ее развития. Продвижение в нелинейную область связано с потерей точности.

Потребность в подходящих методах моделирования существует также в задачах о течениях в пористой среде, в частности при горении и детонации двухфазных систем. Широко применяемый континуальный подход, в котором газовая фаза «размазывается» по всему пространству, а ее характеристики усредняются, неудовлетворителен во многих отношениях. Полное пренебрежение флуктуациями течения и случайностью, например в распределении пор, которые могут влиять на распространение процесса, представляют собой наиболее очевидные недостатки.

Полное гидродинамическое описание процессов в каждой индивидуальной поре и невозможно, и не имеет особого смысла. С другой стороны, полное «размазывание», когда от всей геометрии остаётся только один параметр — пористость, недостаточно продуктивно. Метод клеточных автоматов (далее КА) представляет собой пример компромисса, позволяющего качественно учитывать флуктуации и применяемого во многих задачах газодинамики. Этот метод описывает движение на микроскопическом уровне, но с минимальной подробностью.

### Модель клеточных автоматов

Опишем простейшую стандартную модель, впервые изложенную в работе Фриша, Хасслахера и Помо (ФНР) [1]. Рассматривается газ, состоящий из одинаковых «атомов» — частиц, способных двигаться по жестко заданной плоской решетке. За единицу времени атом перемещается на единичное расстояние — из одного узла решетки в соседний. В узлах атомы могут взаимодействовать, рассеиваясь друг на друге. Так происходит передача импульса. Полный цикл расчета состоит из перемещения атомов по связям между узлами и рассеяния в узлах.

На первый взгляд естественно рассматривать квадратную решетку. Но она имеет существенный недостаток — отсутствие в среднем вращательной изотропии. По-видимому, по этой причине более ранние работы [2] с квадратной решеткой не привлекли заметного интереса.

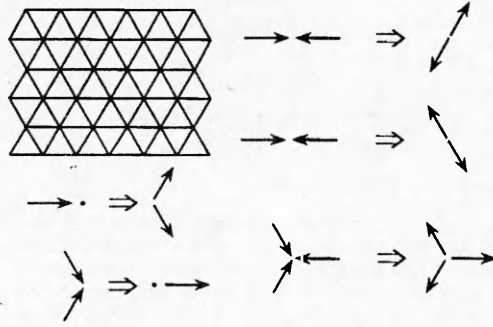


Рис. 1. Геометрия решетки и правила рассеяния.

Как показано в [1], более разумный вариант — покрытие плоскости равносторонними треугольниками, так что из одного узла выходит шесть связей (рис. 1). В каждом узле может находиться до шести атомов с различными направлениями скорости. Более одного атома с данной скоростью не допускается (принцип Паули). Возможно наличие также одного неподвижного атома. На рис. 1 показаны также правила рассеяния для конфигураций, которые изменяются при взаимодействии в узлах. Остальные конфигурации не взаимодействуют. Разумеется, аналогичные правила применяются для конфигураций, повернутых на угол, кратный  $\pi/3$ . При лобовом столкновении результат выбирается из возможных случайным образом. Так в расчет вносится стохастичность. На первый взгляд кажется странным, что не взаимодействуют встречные частицы на связях. Однако их упругое столкновение приводило бы к тому же результату — обращению скоростей, как и пролет без взаимодействия.

Правила, определяемые рис. 1, не единственно возможные. Вообще, допустимы любые конечные состояния при условии сохранения числа частиц и импульса при рассеянии. От набора взаимодействующих конфигураций зависит скорость обмена информацией между подсистемами частиц, имеющими разные направления скорости. Рассеяние «зацепляет» между собой эти подсистемы и таким образом приводит к установлению локального равновесия.

Как показано в ряде работ [1, 3], в среднем описанная система обладает свойствами, близкими к свойствам газа. Обозначим единичный вектор вдоль каждого направления  $e^j$ . Верхний индекс  $j = 1 + 6$  нумерует направления на решетке,  $e^j$  — также вектор скорости каждого типа частиц. Введем средние плотности частиц каждого вида  $n^j$ . Определим усредненные параметры: плотность  $n = \langle \sum n^j \rangle$  и скорость  $u = \langle \sum n^j e^j \rangle / n$ , где суммирование подразумевается по всем шести направлениям  $j$  в узле. Усреднение производится по физически бесконечно малому объему, включающему большое число ячеек. Если  $n$  и  $u$  меняются достаточно медленно (континуальный предел), то для простейшей 6-битовой модели [1] выполняются уравнения

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial (nu_k)}{\partial x_k} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial (nu_i)}{\partial t} + \frac{\partial [ng(n)(u_i u_k - (u^2/2)\delta_{ik})]}{\partial x_k} + \frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}$$

с точностью до членов, содержащих  $u^2$ , включительно. Нижние индексы обозначают декартовы направления. Система (1) напоминает уравнения неразрывности и Навье — Стокса для сжимаемого газа. Давление  $p$  равно  $n/2$ , т. е. решеточный газ моделирует изотермическую среду со скоростью звука  $c = 1/\sqrt{2}$ . Вязкие силы в правой части уравнения импульса здесь явно не выписываем. Они имеют в общем стандартный вид, а коэффициент вязкости порядка единицы. Однако плотность потока импульса содержит «паразитный» множитель  $g(n) = (3 - n)/(6 - n)$ , а также слагаемое  $-ng(n)(u^2/2)\delta_{ik}$ , которое иногда включают в давление. Фактор  $g(n)$  нарушает галилееву инвариантность, что связано с наличием преимущественной системы отсчета (решетки). В общем, шести состояний оказывается достаточно, чтобы сделать поток импульса инвариантным относительно вращений, но мало для того, чтобы полностью воспроизвести механику газа.

Авторы [1] предназначали модель для имитации практически несжимаемых течений. В этом случае первое уравнение не нужно, а во втором при постоянной плотности возможно масштабирование скорости:  $v = g(n)u$ . Это

улучшает форму уравнения движения, хотя нефизическая «скоростная» составляющая давления остается.

Наметим путь, которым можно прийти к системе (1). Первое уравнение отражает сохранение числа атомов (массы) и следует из определений  $n$  и  $u$  точно. Уравнение импульса связывает изменение импульса в объеме с потоком через границы:

$$\partial (nu_i)/\partial t = -\partial \Pi_{ik}/\partial x_k,$$

где тензор плотности потока импульса  $\Pi_{ik} = \sum n^j (e_i e_k)$ .

В равновесии, очевидно, все  $n^j = n/6$ , а  $u = 0$ . При малых отклонениях от равновесия, т. е. для плавного, медленно меняющегося течения, к которому только и применим континуальный предел (1), плотности  $n^j$  будут мало отличаться от  $n/6$ , а величина  $u$  мала (по сравнению со скоростью звука  $c$ ). Скорость есть мера отклонения от равновесия. Запишем  $n^j$  в виде разложения с точностью до второго порядка по  $u$

$$n^j = \frac{n}{6} \left[ 1 + \beta (e^j u) + \gamma \left( (e^j u)^2 - \frac{u^2}{2} \right) \right]. \quad (2)$$

Структура этого выражения обеспечивает равенство  $\sum n^j = n$  при любых коэффициентах  $\beta$  и  $\gamma$ . Из определения  $u = (\sum n^j e^j)/n$  следует  $\beta = 2$ ;  $\gamma$  определяется из принципа детального равновесия. Например, частота лобовых соударений частиц типов 1 и 4 пропорциональна  $n^1 n^4 (1 - n^2)(1 - n^3)(1 - n^5)(1 - n^6)$ , т. е. необходимо присутствие интересующих нас частиц и отсутствие всех других. Это выражение дает скорость исчезновения рассматриваемых частиц. Компенсировать этот процесс должны столкновения типов 2, 5 и 3, 6, частоты которых выражаются аналогично. Учитывая, что нужные нам частицы с направлениями 1 и 4 получаются в половине таких соударений, и деля на симметричное произведение всех  $(1 - n^j)$ , получаем

$$\frac{n^1 n^4}{(1 - n^1)(1 - n^4)} = \frac{1}{2} \left( \frac{n^2 n^5}{(1 - n^2)(1 - n^5)} + \frac{n^3 n^6}{(1 - n^3)(1 - n^6)} \right). \quad (3)$$

Считая малыми отклонения  $n^j$  от  $n/6$  в (2) и раскладывая равенство (3) до второго порядка по этим отклонениям, можно получить  $\gamma = \beta^2 (3 - n)/(6 - n) = 4(3 - n)/(6 - n)$ .

Используя разложение (2) для  $n^j$ , имеем

$$\Pi_{ik} = \frac{n}{2} \delta_{ik} + \frac{n\gamma}{4} \left( u_i u_k - \frac{u^2}{2} \delta_{ik} \right),$$

откуда и следует второе уравнение системы (1). Заметим, что  $\gamma$  не зависит от правил рассеяния (т. е. другие правила и возможные процессы не изменяют полученное значение [3]). В следующих приближениях по скорости вращательная инвариантность нарушается.

Для квадратной решетки  $\Pi_{ik}$  приводится к виду

$$\Pi_{ik} = \frac{n}{2} \delta_{ik} + \frac{n\gamma}{4} \begin{pmatrix} u_x^2 - u_y^2 & 0 \\ 0 & u_y^2 - u_x^2 \end{pmatrix},$$

мало похожему на гидродинамический. Рассмотрим простой пример. Зададим начальные населенности  $n^j$  ( $j = 1 \div 4$ ) на квадратной решетке в виде

$$\begin{aligned} n^1 &\equiv n_x = \frac{n}{4} (1 + 2v), & n^2 &\equiv n_y = n^1, \\ n^3 &\equiv n_{-x} = \frac{n}{4} (1 - 2v), & n^4 &\equiv n_{-y} = n^3. \end{aligned}$$

Легко видеть, что это состояние равновесно. На квадратной решетке рассеяние происходит при лобовых столкновениях, причем состояния 1, 3 переходят

в 2, 4 и наоборот. Но такие процессы из симметрии не меняют заданного распределения по направлениям.

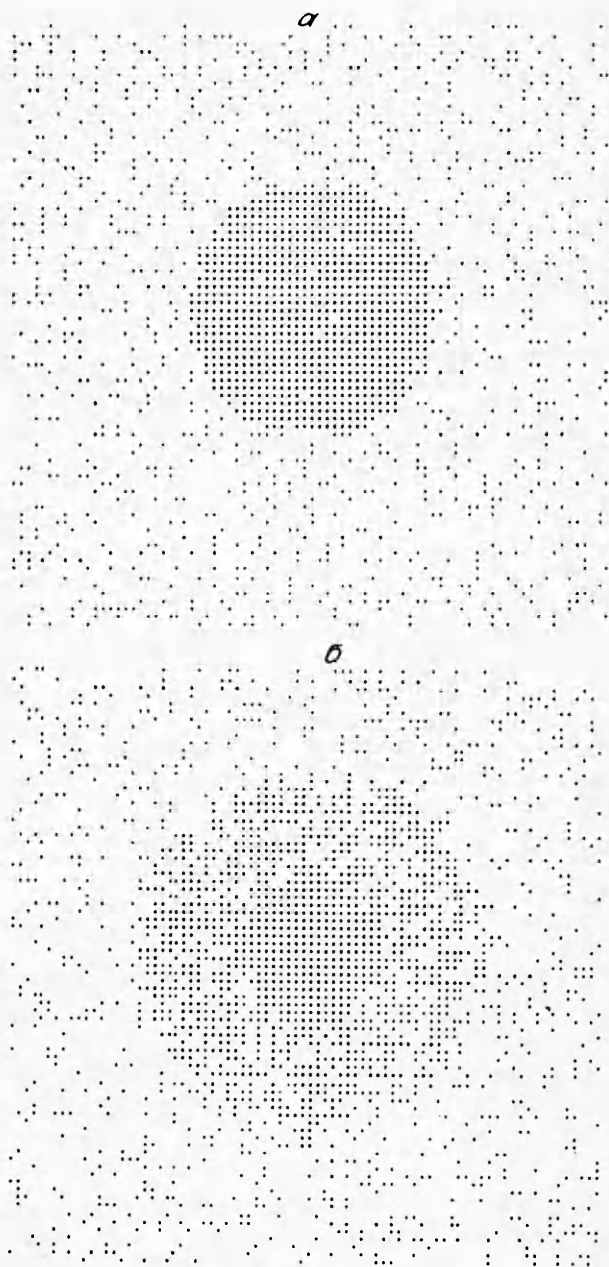
Компоненты средней скорости  $u_x = u_y = v$ , поэтому динамическая часть потока импульса обращается в нуль. В этом можно убедиться, рассмотрев поток импульса, скажем, в направлении  $x$ . Частицы типа 1 уносят положительный импульс  $n^1$  через единичную площадку, а частицы типа 3 приносят отрицательный импульс  $(-n^3)$ . В результате полное изменение импульса пропорционально  $n^1 + n^3 = n/2$  за единицу времени. Действует только давление  $p = n/2$ , а от скорости поток импульса вообще не зависит. Это и показывает неудовлетворительность квадратной решетки.

Подобно тому как в «настоящем» классическом газе после небольшого числа соударений устанавливается локально равновесное распределение по энергиям, в решеточном газе вырабатывается распределение типа Ферми — Дирака (поскольку возможны заполнения состояний только 0 и 1) [1, 3]. В вероятности столкновений входят произведения множителей вида  $f^i = n^i / (1 - n^i)$ . В равновесии такие произведения должны быть равны для начальных и конечных состояний. Это выполняется, когда логарифм  $f^i$  является линейной функцией сохраняющихся при столкновении величин, т. е. числа частиц и импульса. Отсюда

$$n^i = (1 + \exp(a + b(e^i u)))^{-1}.$$

Из этого распределения также можно получить уравнения (1) разложением по степеням скорости.

В качестве численного примера рассмотрим расширение сферического объема повышенной плотности в среде с противодавлением. На рис. 2, а показано начальное состояние ( $t = 1$ ), а на рис. 2, б и в — моменты  $t = 10$  и 20 для квадратной решетки. (Постановка аналогична [4], за исключением того, что область повышенного давления — круг, а не квадрат.) Несмотря на



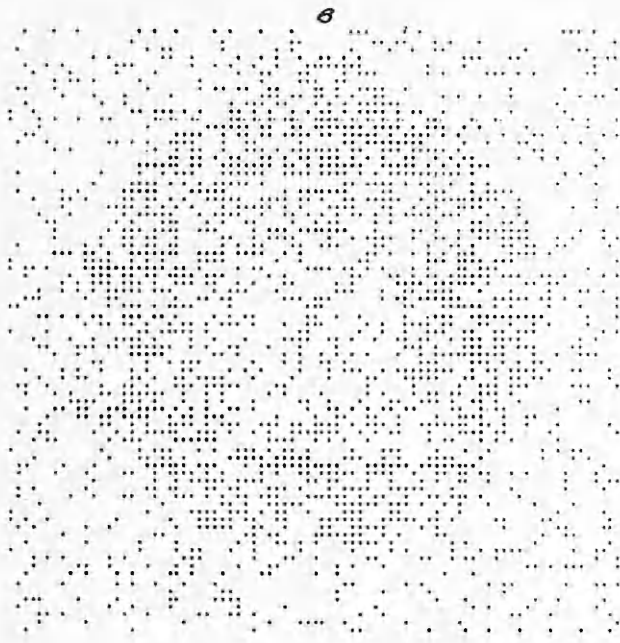


Рис. 2. Расширение двумерной сферы радиуса 16 с плотностью 2, окруженной газом с плотностью 1, на квадратной решетке. Приведен усредненный результат десяти расчетов. Показаны точки со средней заселенностью, превышающей 1,3.

симметричность начальных условий, прослеживается анизотропия расширения в виде ромбовидной области с повышенной плотностью в начале расширения и крестообразной области в центре при  $t = 20$ . Очевидно, что расширение вдоль направлений типа  $\pi/4$  отличается от расширения вдоль осей координат. На более поздних стадиях расширения анизотропия менее заметна [4].

На рис. 3 показаны результаты расчета того же процесса по гексагональной 7-битовой модели с одной покоящейся частицей. Относительные заполнения выбранными близкими. Здесь не наблюдается заметной анизотропии, дефекты картины носят случайный характер.

В трех измерениях не существует подходящей решетки, обеспечивающей одновременно заполнение пространства и вращательную инвариантность уравнений даже в квадратичном по скорости приближении. Однако изотропность достигается для трехмерной проекции четырехмерной гранецентрированной решетки (face-centered hypercubic, FCHC [5]).

#### Сравнительная характеристика модели КА

Очевидна чрезвычайная простота расчетного алгоритма. Исключительно экономно расходится память компьютера: в простых вариантах, аналогичных рассмотренному выше, состояние узла занимает менее одного байта.

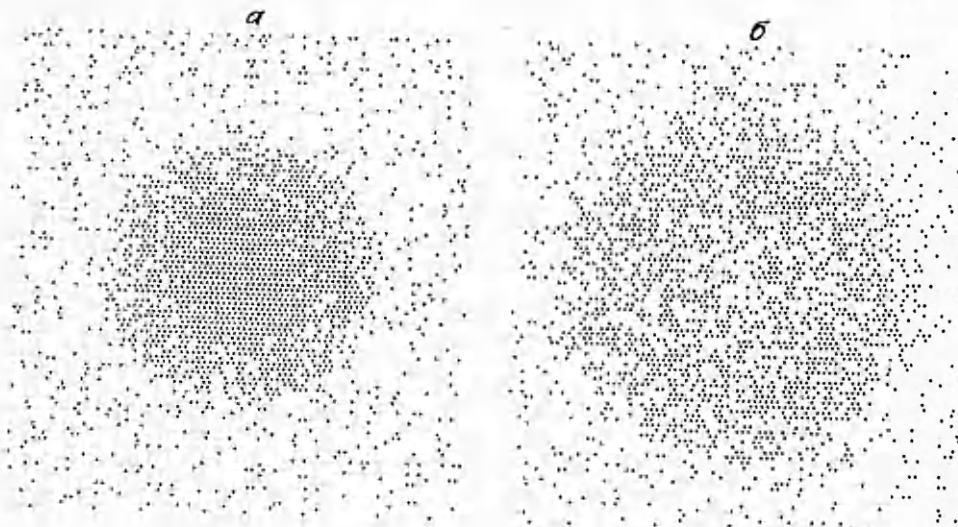


Рис. 3. Расширение сферы на гексагональной решетке в момент  $t = 10$  (а) и  $20$  (б). Начальные плотности 4 и 2, радиус плотной области 16, уровень заселенности изображаемых точек  $> 2,3$ .

Велика скорость вычислений, так как все операции проводятся с небольшими целыми числами. Легко достигается распараллеливание задачи. Могут применяться процессы специальной архитектуры [4].

Перечисленные удобства можно назвать техническими. Кроме них важны и физические преимущества подхода, вытекающие из простоты его физической основы; если пренебрегать трением, то такую модель вполне можно понимать как реальный механический автомат. Именно модель совершенно нечувствительна к счетным неустойчивостям, которые в разностных вычислениях приводят к переполнению разрядной сетки. Поэтому она незаменима при расчете принципиально неустойчивых задач. Далее, модель естественным образом содержит стохастичность, свойственную реальным физическим системам.

Недостатки подхода являются «продолжением» достоинств. Сравнительная грубость модели приводит к тому, что она аппроксимирует не точные уравнения газодинамики, а несколько искаженную систему (1). Не только фактор  $g(n)$ , но и нефизическое давление, пропорциональное квадрату скорости, проявляется в расчетах [6]. В простейшей модели, по существу, отсутствует понятие температуры.

Дискретность скачков частиц приводит к появлению нефизических интегралов движения (staggered momenta), связанных с возможностью разбиения среды на две подрешетки [7]. Например, легко убедиться, что на квадратной решетке разность  $u$ -импульсов в точках с четными и нечетными  $u$ -координатами на каждом шаге меняет знак. Следовательно, эта величина, умноженная на  $(-1)^j$ , сохраняется. При специально подобранных начальных условиях возможно влияние таких инвариантов на гидродинамические моды. В несколько усложненных вариантах метода (скажем, при допущении хотя бы двух величин скорости частиц) эти недостатки значительно ослаблены. Вязкость накладывает ограничения на число Рейнольдса  $Re$ , достигаемое в реальных расчетах (см. ниже).

Статистический шум, свойственный модели, нельзя однозначно отнести к достоинствам или недостаткам. Он мешает, скажем, при расчете течения Пуазейля, но необходим в задачах, учитывающих флуктуации. Интерес может представлять не только усредненное течение, но и отдельные реализации.

Разумеется, результаты подхода будут в основном качественными. Но это же относится к гораздо более рафинированной молекулярной динамике Леннарда — Джонса и во многих случаях к детерминированным разностным методам. Как указывают авторы [1], часто для получения результатов весьма скромной точности ведутся масштабные промежуточные вычисления с большим числом знаков. Резюмируя, можно сказать, что клеточные автоматы имеют свою область применимости, в которой традиционные методы мало полезны.

### Применения решеточных моделей

В этом разделе излагаются некоторые результаты расчетов, основанных на модели КА. Среди большого числа работ (библиография в [8] на начало 1990 г. содержит около 300 наименований) выбраны те, в которых подход выглядит наиболее продуктивным. Изложение не претендует на полноту, на историческую последовательность и не затрагивает чисто теоретических работ. Разнообразие приложений одновременно позволяет иллюстрировать гибкость модели и возможность ее модификации.

Первые применения модели касались несжимаемых течений в каналах и задач двумерного обтекания. Не останавливаясь на этой группе работ, отметим расчеты трехмерного обтекания плоского диска, расположенного поперек течения [5]. При  $Re = 190$  на сетке  $128 \times 128 \times 256$  наблюдалось возникновение вихрей, срывающихся с кромки, и развитие существенно трехмерного течения. Картина близко согласуется с классическими результатами экспериментов.

В работе [9] авторы рассмотрели две несмешивающиеся решеточные жидкости, которые можно назвать «красной» и «синей». Чтобы поверхность раздела между ними не размывалась со временем, введено поверхностное натяжение. Оно моделируется модификацией правил рассеяния так, что частицы данного цвета посылаются в направлении, где этот цвет преобладает, при сохранении импульса и числа частиц. Кроме того, предложен способ восстановления галилеевой инвариантности введением большого числа  $M$  покоящихся частиц, что приближает фактор  $g(n)$  к единице. К сожалению, оптимальное число  $M$  зависит от плотности, что ограничивает этот рецепт несжимаемыми течениями. Учитывалась также плавучесть: с некоторой вероятностью частицы одного цвета приобретали импульс вниз, а другого — вверх.

В результате в [9] решена задача о неустойчивости Рэлея—Тейлора. Начиная с неравновесного состояния (тяжелая жидкость выше легкой), прослежено развитие неустойчивости с образованием характерных грибообразных струй, распадом их на капли и, наконец, достижением устойчивой стратификации.

В [10] моделируется фазовый переход жидкость — газ. Жидкая фаза в основном состоит из связанных пар частиц, эквивалентных одной покоящейся частице двойной массы. В это состояние частицы газа могут перейти при лобовом соударении. Связанные пары в соседних узлах решетки взаимодействуют между собой с потенциальной энергией, равной  $-1$ . Распад пары происходит с вероятностью, зависящей от энергии  $\Delta E$  ее взаимодействия с окружением, и от температуры. Температура задается независимо и входит через функцию  $\exp(-\Delta E/T)$  в вероятность.

Изотермы в описанной среде демонстрируют критическое состояние и двухфазную область. Зародыши жидкой фазы в области сосуществования сливаются в капли, а затем образуют сплошную жидкость. В [11] рассмотрена трехфазная система.

Различные течения со свободными границами рассмотрены в [12]. Здесь также введен цвет частиц и изучен ряд модификаций модели. Прежде всего моделировалось турбулентное перемешивание жидкостей в сдвиговом течении, подверженном неустойчивости Кельвина — Гельмгольца. Прослеживается развитие гидродинамических возмущений, усиливающее взаимную диффузию.

Чтобы иметь возможность представлять границу раздела несмешивающихся жидкостей, необходимо подавить диффузию. Для этого в [12] применен «химический» подход. Тройные соударения с участием разноцветных частиц приводили к реакции изменения цвета. В результате возникает тонкий переходной слой между жидкостями, так как частица, углубившаяся в чужую область, меняет цвет. Моделирование на решетке  $1024 \times 256$  точек при  $Re \approx 330$  демонстрирует развитие типичных волновых и нелинейных вихревых структур. Исследовалась также рэлей-тейлоровская неустойчивость (о моделировании фронтов горения, предпринятом в [12], см. ниже). В общем, результаты работ [9—12] иллюстрируют перспективность КА в неустойчивых проблемах.

Заметная часть работ посвящена применению КА к течению в пористой среде. В [13] изложены результаты масштабных двух- и трехмерных вычислений. Прежде всего на моделях каналов воспроизводилось течение Пуазейля. Отсюда определялась вязкость решеточного газа. На твердых границах задавалось отсутствие проскальзывания, т. е. частица, попавшая в граничный узел, рассеивалась назад. На регулярных пористых средах хорошо подтверждается закон трения Дарси. Затем численно генерировалась сложная поровая структура. В объеме случайным образом распределялись элементы среды (зерна или поры) с заданной функцией распределения по размерам так, чтобы добиться нужной пористости. В такой искусственной среде с фрактальными свойствами изучена зависимость проницаемости от пористости и фрактальной размерности. Моделировался также реальный эксперимент — задавалась та же геометрия, как в реальном пористом образце, полученном травлением стекла. Вычисленная и экспериментально измерен-

ная проницаемости совпали с точностью  $\sim 10\%$ . Вычисления требовали обычно 90 000 шагов по времени, из которых за первые 50 000 устанавливалось стационарное состояние, а затем дважды по 20 000 шагов усреднялись поля течения. В трехмерных расчетах использовалась решетка  $126 \times 63 \times 63$  узла.

В [14] рассмотрена неустойчивость Саффмена — Тейлора, возникающая при вытеснении из порового пространства вязкой жидкостью. Если вязкая жидкость (например, нефть) выталкивается закачиваемой в поры невязкой жидкостью (водой), то на границе раздела возникают так называемые вязкие пальцы (viscous fingers). Вводилось случайное распределение узлов — рассеивателей, размещенных с небольшой плотностью в расчетной области. Рассеиватели моделировали трение, заменяя скорости частиц на обратные. В невязкой жидкости можно задавать отсутствие рассеивателей, но в [14] вместо этого вводилась компенсирующая трение массовая сила, что уменьшает градиенты плотности. Граница раздела задавалась явным образом как «цепь» узлов, способная деформироваться в результате ударов частиц каждой жидкости. Моделирование на решетке  $600 \times 200$  узлов качественно воспроизводит известные экспериментальные результаты, включая разветвление пальцев при малом поверхностном натяжении.

В [15] моделировались диффузионные и химические процессы, происходящие при фильтрационном течении в пористой среде. Кроме скоростей частиц в каждом узле задавалась концентрация примеси (целое число, лежащее в интервале 0—32). Эту концентрацию частицы переносят в другие узлы, где после каждого перемещения результат получается усреднением. Реакции на поверхности пор изменяли концентрацию, переносимую отскокшими частицами. После некоторого числа таких отскоков граничный узел становился внутренним, т. е. увеличивался объем поры. Модель демонстрирует течение в довольно сложной области, сопровождающееся растворением стенок.

В [12] моделировался фронт горения в газе. Для представления исходной смеси и продуктов горения введены два типа частиц. Несгоревшие частицы имеют двойную массу и единичную скорость. Продукты горения состоят из частиц единичной массы с двойной скоростью. Следовательно, величины импульсов одинаковы, что позволяет пользоваться теми же правилами соударений. Температуры таких газов отличаются в 2, а массовые плотности — в 4 раза (при равенстве давлений).

В присутствии значительного числа сгоревших легких частиц тяжелые могут расщепляться на легкие с сохранением полного импульса. Энергия, разумеется, растет, что изображает тепловыделение при реакции. Вероятность реакции должна быть невелика, чтобы фронт реакции был значительно шире постоянной решетки, т. е. длины свободного пробега, как это имеет место и в реальном пламени.

Рассчитывалось горение в проточном канале с подачей смеси с одного конца. Скорость подачи подбиралась так, чтобы плоский фронт горения был стационарным. Первоначально плоский фронт искривляется, и развивается неустойчивость Ландау. Численный эксперимент дает хорошее совпадение с теорией по длине волны возмущения. В расчетах пламени в закрытом сосуде наблюдались генерация звуковых и ударных волн и переход к детонации.

### Волны в решеточном газе

Описанные результаты преимущественно относились к почти несжимаемым течениям. Уже на уровне акустики создаются некоторые новые проблемы. Например, в [16] отмечается анизотропия скорости звука в движущемся решеточном газе. При этом различны как эффективная сжимаемость, так и снос течением для разных направлений распространения волны.

Ударные волны с резким изменением плотности не рассматриваются обычно как подходящая область применимости КА. Это мнение имеет



определенные основания, вытекающие из формы континуального аналога (1).

Рассмотрим одномерную волну, распространяющуюся с постоянной скоростью  $D$ . Считая все переменные зависящими от  $z = (x - Dt)$ , получаем из (1)

$$-D \frac{dn}{dz} + \frac{d(nu)}{dz} = 0,$$

$$-D \frac{d(nu)}{dz} + \frac{d(ng(n)u^2/2)}{dz} + c^2 \frac{dn}{dz} = \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial z}.$$

Из этих уравнений следуют условия на разрыве для волны, идущей по покоящейся среде с начальной плотностью  $n_0$ :

$$n(D - u) = n_0 D, \quad c^2(n - n_0) = n \left( Du - g(n) \frac{u^2}{2} \right).$$

Вязкие члены, имеющие дивергентный вид, выпадают из условий на разрыве. Исключая  $u$ , имеем уравнение ударной адиабаты

$$f(n) \equiv g(n)(n - n_0)/2n = 1 - \frac{c^2}{D^2}.$$

Левая часть, как функция плотности для  $g(n) = (3 - n)/(6 - n)$ , т. е. в 6-битовой модели ГНР и для начальной плотности  $n_0 = 1$  показана на рис. 4, 1. Правая часть уравнения адиабаты при заданной скорости волны — горизонтальная прямая, ордината которой положительна.

На рис. 4 видно различие между классической и решеточной газодинамикой. Допустимы значения скорости волны в довольно ограниченном интервале, для условий рис. 4:  $1 < D/c < 1,034$ . Это связано с обращением  $g$  в нуль при  $n \approx 3$ . Вблизи этого значения имеем приблизительно акустику, а при произвольной плотности — небольшие отклонения от звуковой скорости. Заметим, что имеется два пересечения адиабаты и прямой, т. е. возможны два скачка с одной и той же скоростью.

Кривая 2 на рис. 4 соответствует начальной плотности  $n_0 = 5$ , большей значения, при котором  $g(n)$  обращается в нуль. Сверхзвуковыми здесь будут волны разрежения.

Описанные явно нефизические режимы частично могут наблюдаться в численном эксперименте. На рис. 5 показаны расчеты распада разрыва при малой и большой плотности в секции высокого давления. При соотношении плотностей 3/1 (рис. 5, а) течение имеет в общем обычный газодинамический вид с ударной волной, идущей вправо, и плавной волной разрежения, распространяющейся влево. Расчет проводился на сетке  $100 \times 181$  без усреднения. Совсем другая картина (см. рис. 5, б) получается при соотношении плотностей 6/1 (поскольку использована 7-битовая модель с покоящейся частицей, плотность 6 еще не является предельной). Здесь влево идет лидирующая ударная волна разрежения. От нее отстает (из-за сноса течением) вторая подобная волна. Можно сделать вывод, что волновые движения в плотных решеточных газах отклоняются от газодинамики даже качественно.

Изложенное касалось наиболее ранней, простейшей модификации метода. Несколько лучшие результаты получены в [10], где фактор  $g$  остается приблизительно постоянным в заметном диапазоне плотностей. Достигнута качественно разумная форма ударной адиабаты.

Из общих соображений ясно, что характер волновых дви-

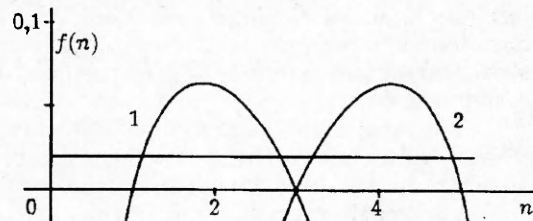


Рис. 4. Ударная адиабата решеточного газа ГНР.

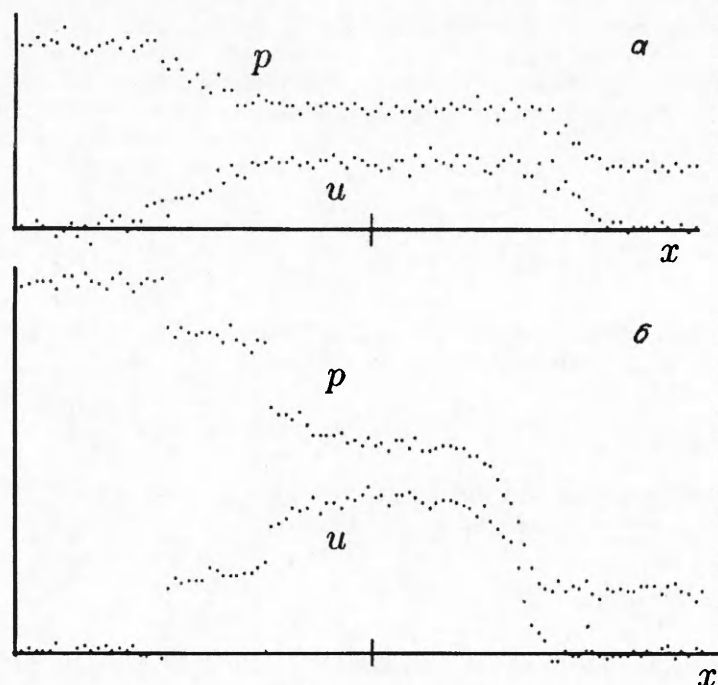


Рис. 5. Распад разрыва в 7-битовой модели ФНР. Метка на оси  $x$  — начальное положение разрыва.

$a - t = 40; b - t = 30.$

жений может быть заметно приближен к реальности некоторым усложнением модели. Уже введение двух скоростей значительно уменьшает описанные неприятности [17, 18].

### Перспективы КА в физике горения и взрыва

Простейшие варианты решеточных методов типа ФНР можно применять к реагирующим течениям в пористой среде. Выделенность системы отсчета, связанной с пористым скелетом, до некоторой степени ослабляет роль нарушения галилеевской инвариантности. Скорость течения из-за трения невелика, так что плохое описание динамической части потока импульса также не критично. Легко внести, например в духе [15], рождение частиц, описывающее горение на поверхности. Сложнее учесть изменения температуры, для чего необходима модель хотя бы с несколькими скоростями частиц и уровнями энергии [17—19]. Однако в некоторых постановках, например в задаче о детонации в пористой среде из гранул унитарного топлива, горящих с поверхности, изменения температуры малосущественны. Автор предполагает продемонстрировать результаты моделирования в специальной работе. Пока можно отметить, что неоднородность фронта реакции и распространение его в виде «язычков» получаются сами собой. Учет случайности характеристик среды также происходит автоматически.

Неожиданно, что более простые и раньше поставленные задачи хуже поддаются такого рода моделированию. Например, для применения в задачах типа газовой детонации с большими скоростями течения простейший метод ФНР не выглядит подходящим. Но некоторое рафинирование модели, не приводящее к заметным потерям производительности, может заметно улучшить положение. Работа [12] как раз показывает такой эффект минимальных модификаций.

Сейчас неформальной оценкой состояния вопроса является то, что работы, касающиеся КА, в основном сосредоточены в физических журналах. Пока что метод имеет довольно ограниченное применение среди механиков и не рассматривается как стандартный. Отметим, что традиционная вычис-

лительная гидродинамика развивается уже более 50 лет. Решеточные же методы пока находятся в начале своего развития. Можно ожидать, что модификация подхода существенно расширяет круг решаемых задач.

Вместе с тем уже в нынешнем состоянии метод имеет уникальные особенности, позволяющие применять его для качественного описания стохастической «компоненты» сложных процессов. В сочетании с детерминированными методами можно надеяться на лучшее понимание многих явлений.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Frish U., Hasslacher B., Pomeau Y. Lattice-gas automata for the Navier-Stokes Equation // Phys. Rev. Letters.— 1986.— 56, N 14.— P. 1505—1508.
2. Hargy J., de Pazzis O., Pomeau Y. Molecular dynamics of a classical lattice gas: transport properties and time correlation functions // Phys. Rev. A.— 1976.— 13, N 5.— P. 1949—1961.
3. Wolfram S. Cellular Automaton Fluids 1: Basic Theory // Journ. Stat. Phys.— 1986.— 45, N 3/4.— P. 471—526.
4. Toffoli T., Margolus N. Cellular automata supercomputers for fluid-dynamics modeling // Phys. Rev. Letters.— 1986.— 56, N 16.— P. 1694—1696.
5. Rivet J.-P., Hénon M., Frish U., D'Humières D. Simulating fully three-dimensional flow by lattice-gas methods // Europhysics Letters.— 1988.— 7(3).— P. 231—236.
6. Dahlburg J. P., Montgomery D., Doolen G. D. Noise and compressibility in lattice-gas fluids // Phys. Rev. A.— 1987.— 36, N 5.— P. 2471—2474.
7. Zanetti G. The hydrodynamics of lattice gas automata // Ibid.— 1989.— 40.— P. 1539—1548.
8. Bibliography for NATO workshop on lattice gas methods for PDE's: theory, applications and hardware // Physica D.— 1991.— 47.— P. 299—337.
9. Gunstensen A. K., Rotman D. H. A Galilean-invariant immiscible lattice gas // Ibid.— P. 53—63.
10. Chen S., Chen H., Doolen G. D. et al. Lattice gas models for monideal gas fluids // Ibid.— P. 97—111.
11. Gunstensen A. K., Rotman D. H. A lattice-gas model for three immiscible fluids // Ibid.— P. 47—52.
12. Clavin P., Lallemand P., Pomeau Y., Searby G. Simulation of free boundaries in flow systems by lattice-gas model // Journ. Fluid Mech.— 1988.— 188.— P. 437—464.
13. Chen S., Diemer K., Doolen G. D. et al. Lattice gas automata for flow through porous media // Physica D.— 1991.— 47.— P. 72—84.
14. Hayot F. Fingering instability in a lattice gas // Ibid.— P. 64—71.
15. Wells J. T., Janesku D. R., Travis B. J. A lattice gas automata model for heterogeneous chemical reactions at mineral surfaces and in pore networks // Ibid.— P. 115—123.
16. Chen H., Chen S., Doolen G. D. Sound wave propagation in FHP lattice gas automata // Phys. Lett. A.— 1989.— 140, N 4.— P. 161—165.
17. Chen S., Chen H., Doolen G. D. How the lattice gas model for the Navier-Stokes equation improves when a new speed is added // Complex Systems.— 1989.— 3.— P. 243—251.
18. Bernardin D., Sero-Guillaume O. E., Sun C. H. Multispecies 2D lattice gas with energy levels: diffusive properties // Physica D.— 1991.— 47.— P. 169—188.
19. Chen S., Lee M., Zhao K. H., Doolen G. D. A lattice gas model with temperature // Ibid.— 37.— P. 42—59.

630090, Новосибирск,  
Институт гидродинамики  
им. М. А. Лаврентьева  
СО РАН

Поступила в редакцию 3/VI 1993

УДК 550.834.4:622.235

С. П. Соловьев, В. В. Сурков

### ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ВОЗМУЩЕНИЯ В ПРИЗЕМНОМ СЛОЕ АТМОСФЕРЫ, ОБУСЛОВЛЕННЫЕ ВОЗДУШНОЙ УДАРНОЙ ВОЛНОЙ

Экспериментально и теоретически исследовано низкочастотное электрическое поле, связанное с распространением воздушной ударной волны в приземном слое атмосферы. В эксперименте регистрировались вариации вертикальной составляющей  $E_z$  напряженности электрического поля в атмосфере при помощи электростатических флюксометров и штыревых антенн,

© С. П. Соловьев, В. В. Сурков, 1994.