

**Для цитирования:**

Бобков С.П., Соколов В.Л. Дискретное моделирование течения газа при пониженном давлении. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2017. Т. 60. Вып. 2. С. 79–84.

**For citation:**

Bobkov S.P., Sokolov V.L. Discrete simulation of gas flows under reduced pressure. *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.* 2017. V. 60. N 2. P. 79–84.

УДК: 519.688

**С.П. Бобков, В.Л. Соколов**

Сергей Петрович Бобков (✉), Владимир Леонидович Соколов  
Кафедра информационных технологий, Ивановский государственный химико-технологический университет, пр. Шереметевский, 7, Иваново, Российская Федерация, 153000  
E-mail: bsp@isuct.ru (✉), sokolov2211@gmail.com

## ДИСКРЕТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ ГАЗА ПРИ ПОНИЖЕННОМ ДАВЛЕНИИ

*В статье изучена модель, которая использует общепринятые правила поведения частиц решеточных газов при их движении, а также особые правила столкновений в узлах решетки, характерные для НРР-газа. Кроме основных узлов, которые описывают процесс внутри моделируемой области, в рассмотрение введены узлы-стенки. В статье приведены результаты численных экспериментов по изучению поведения решеточного НРР-газа при его движении между параллельными стенками. Для оценки адекватности предложенной модели рассмотрена возможность перехода от виртуальных модельных переменных к действительным физическим величинам. Результаты численных экспериментов показывают, что проведенные модельные эксперименты соответствуют течениям реальных газов в ламинарном режиме. Кроме того, давление газа в опытах соответствовало области среднего вакуума. Полученные модельные данные вполне согласуются с общепринятыми взглядами на поведение газов. Учитывая, что данная модель чрезвычайно проста и эффективна при компьютерной реализации, можно рекомендовать ее для описания течений реального газа в условиях среднего вакуума. Исследована возможность применения двухмерной модели решеточного газа с ортогональной решеткой для анализа течения газов. Показано, что используемую модель можно рекомендовать для компьютерного моделирования течений реальных газов при пониженном давлении.*

**Ключевые слова:** дискретные модели, клеточный автомат, решеточный газ, НРР-модель

UDC: 519.688

**S.P. Bobkov, V.L. Sokolov**

Sergey P. Bobkov (✉), Vladimir L. Sokolov  
Department of Information Technologies, Ivanovo State University of Chemistry and Technology,  
Sheremetevsky ave., 7, Ivanovo, 153000, Russia  
E-mail: bsp@isuct.ru (✉), sokolov2211@gmail.com

## DISCRETE SIMULATION OF GAS FLOWS UNDER REDUCED PRESSURE

*A model using the standard rules of behavior of the particles of the lattice gas at their motion, and special rules for collisions in the lattice nodes was studied. The rules mentioned above are typical for HPP-gas. Beside the main components that describe the process within the simulated field, the nodes of wall were introduced in consideration. Also, to simulate the gas flow in the model the sources of particles located at the border area were introduced. The results of numerical experiments on the behavior of the lattice HPP-gas at his movement between the parallel walls are presented. We considered the cases of absence or presence of obstacles in the flow. To assess the adequacy of the proposed model the transition possibility from the virtual model variables to the actual physical quantities was considered. The results of numerical experiments show that the model experiments carried out correspond to flow of real gases in laminar mode. In addition, the gas pressure at the experiments corresponded to medium vacuum mode. The obtained model data are quite match with the generally accepted views on the behavior of gases. Taking into account that given model is extremely simple and effective at the computer implementation, we can recommend it to describe a real gas flows in a medium vacuum. The possibility of application of 1-D model of lattice gas with orthogonal space lattice was studied for gas flow analysis. It was shown that proposed model can be recommended for computer simulation of real gas flow at lower pressure.*

**Key words:** discrete models, cellular automata, lattice gas, HPP model

Для исследования проблем переноса энергии и массы классическими считаются подходы, использующие уравнения математической физики. Последние представляют собой системы дифференциальных уравнений с частными производными, в которых в качестве искомых функций используются макроскопические параметры изучаемых процессов – температура, давление, плотность и пр. Непрерывность (континуальность) времени и пространства при данном подходе обеспечивается использованием математически бесконечно малых величин. Однако, существует противоположный по сути взгляд на физику процессов переноса – рассмотрение явлений в дискретном пространстве. Дискретные подходы предполагают, что изучаемая среда состоит из отдельных частиц или их совокупностей. Эволюция процессов в такой среде обеспечивается взаимодействием движущихся частиц.

До недавнего времени основными моделями этой группы являлись уравнения статистической физики, использующие функции плотности вероятности и математически бесконечно малые. Внедрение современных средств компьютерной техники в практику исследований не только позволило резко увеличить эффективность математического моделирования в целом, но и значительно повысило интерес исследователей к дискретным моделям и подходам. Отдельным классом дискретных моделей для исследования процессов переноса, получившим широкое распространение в последние годы, являются математические модели в виде систем клеточных автоматов [1].

Клеточный автомат, по определению, является динамической моделью, в которой пространство и время рассматриваются дискретными. Клеточный автомат представляет собой совокупность (систему) отдельных элементов (клеток), которые в каждый из моментов дискретного времени могут находиться в каком-либо одном из возможных состояний. Обновление состояний элементов происходит синхронно на каждом шаге модельного времени в соответствии с локальными правилами перехода, т.е. подобно функционированию абстрактного автомата. Причем, новое состояние элемента определяется как его предыдущими состояниями, так и состояниями его ближайших соседей [2]. Разновидностями клеточных автоматов для исследования аэро- и гидродинамических процессов являются модели решеточных газов.

В настоящее время существует несколько разновидностей моделей решеточных газов, однако все они строятся по следующим общим принципам. В частности, моделируемая среда представляется гипотетическими частицами, обычно единичной массы, которые могут двигаться между узлами некоторой пространственной решетки. При этом должны выполняться следующие правила:

- в каждый момент модельного времени частицы могут находиться только в узлах решетки;
- вектор скорости каждой частицы может быть направлен только в сторону одного из соседних узлов решетки;

- в один и тот же момент времени в каждом узле решетки не может находиться более одной частицы с одинаковыми векторами скорости;

- вид пространственной решетки, а также правила перемещения и взаимодействия частиц на ней определяются конкретной принятой моделью.

Наиболее простой из предложенных моделей решеточных газов можно считать модель НРР [3], в которой рассматривается двухмерное течение газа на ортогональной пространственной решетке с постоянным шагом  $h$ . В соответствии с общими свойствами решеточных газов в узлах решетки могут находиться частицы, каждая из которых может иметь скорость  $c_i$ , направленную в один из соседних узлов, причем такую, что за один шаг по времени  $\Delta t$ , она может переместиться, только в данный соседний узел. Схема решетки и возможные направления скорости частиц в НРР модели представлены на рис. 1.

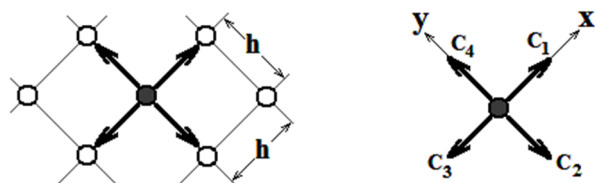


Рис. 1. Схема решетки и векторы скорости модели НРР  
Fig. 1. The scheme of lattice and velocity vectors of HPP model

Векторы скорости частиц модели НРР можно определить следующим образом:

$$\begin{aligned} c_{1,3} &= (\pm 1, 0) \\ c_{2,4} &= (0, \pm 1) \end{aligned} \quad (1)$$

Развитие процесса поведения газа на каждом шаге по времени происходит в два этапа. Первый этап – перемещение частицы в соседние узлы (этап сдвига). Второй этап – соударение частиц в узлах (этап столкновения).

Для НРР модели принимаются следующие правила столкновений частиц в узлах:

1. Если в какой-либо узел решетки одновременно попадают две частицы с разных сторон, то они сталкиваются.

2. При столкновении должно сохраняться количество частиц и их полный импульс.

Нетрудно показать, что для выполнения этих правил столкновения частиц должны происходить «лоб в лоб». При этом после столкновения скорости частиц должны развернуться на  $90^\circ$ . В остальных случаях можно считать, что столкновения не происходит, т.е. частицы пролетают мимо друга.

Направления векторов скорости частиц до и после столкновений показаны на рис. 2.

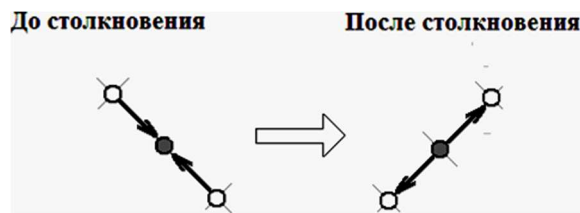


Рис. 2. Столкновения частиц в модели НРР  
Fig. 2. Particle collisions in HPP model

Кроме основных узлов, которые описывают процесс внутри моделируемой области, в рассмотрение можно вводить узлы-стенки. Их поведение отличается от поведения внутренних узлов, но только на этапе столкновения частиц. При попадании частицы в узел-стенку происходит либо ее отражение в исходный узел (рис.3а), либо отскок частицы в соседний узел пространственной решетки (рис. 3б).

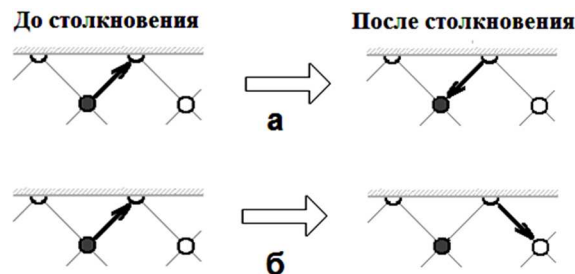


Рис. 3. Столкновения частицы со стенкой  
Fig. 3. Particle collisions with the wall

Помимо узлов-стенок, в модели можно рассматривать и узлы-источники частиц. В них с некоторой вероятностью могут появляться частицы с определенными направлениями вектора скорости. Такой прием позволяет моделировать источники потока газа. Изменение давления можно моделировать, меняя среднюю концентрацию частиц в исследуемом пространстве.

Процесс моделирования эволюции газовой системы представляет собой получение последовательности массивов наличия частиц в узлах решетки в конкретный момент дискретного времени.

Рассмотрим представление НРР модели в терминах теории клеточных автоматов.

Классический клеточный автомат представляет собой множество клеток (ячеек, узлов), заполняющих дискретное  $D$ -мерное пространство. Каждая клетка является конечным автоматом, входами которого являются выходы граничащих, соседних клеток. В соответствии с теорией конечных автоматов они определяются следующим кортежем:

$$A = \langle X, S, \phi \rangle, \quad (2)$$

где  $X = \{x_1, x_2, \dots, x_m\}$  – множество входных сигналов;

$S = \{s_1, s_2, \dots, s_j\}$  – множество состояний;  $\varphi$  – функция переходов, которая некоторым парам «состояние – входной сигнал» ставит в соответствие новые состояния автомата.

Переход всех клеток (элементарных автоматов) в новое состояние происходит одновременно с переходом клеточной системы в новое глобальное состояние.

В рассматриваемом случае газ представлен клеточным массивом, в котором состояние  $S$  каждой клетки (узла) представлено булевым вектором длиной 4, поскольку каждая клетка (узел) имеет 4 соседей:  $S = \{s_1, \dots, s_4\}$ . Каждый разряд вектора определяет наличие ( $s_i = 1$ ) или отсутствие ( $s_i = 0$ ) в клетке частицы, которая движется со скоростью  $c_i$  в сторону  $i$ -го соседа.

Функция переходов  $\varphi(X, S)$  для автоматов, моделирующих внутренние клетки, строится, исходя из следующих соображений.

На этапе сдвига происходит изменение одного из разрядов вектора состояний, то есть перемещение частицы. На этапе столкновения происходит изменение нескольких разрядов вектора состояний, чтобы направление движения частицы изменилось в соответствии с правилами функционирования модели. То есть при этом происходит замена одного состояния клетки  $S = \{s_1, \dots, s_4\}$  на другое  $S' = \{s'_1, \dots, s'_4\}$ . Режим работы системы – синхронный.

Для стенок и источников можно также соответствующим образом построить функции переходов. Чтобы эти требования выполнялись, нужно, чтобы, во-первых, булевы векторы состояний  $S$  и  $S'$  имели равное число единиц и, во-вторых, суммы векторов скоростей частиц, соответствующих единицам в  $S$  и  $S'$ , были равны. То есть:

$$\sum_{i=1}^4 s_i = \sum_{i=1}^4 s'_i \quad \sum_{i=1}^4 c_i = \sum_{i=1}^4 c'_i \quad (3)$$

Следует иметь в виду, что в узлах-стенках происходит нарушение закона сохранения импульса из-за взаимодействия частицы со стенкой, а наличие узлов-источников нарушает закон сохранения количества частиц (массы). Последнее, впрочем, можно нивелировать путем введения узлов-стоков, в которых частицы могут исчезать.

Процесс моделирования поведения газа можно представить, как эволюцию клеточного поля пространственной решетки в дискретном времени  $t = \{t_0, t_1, \dots\}$ :

$$\Omega(t_0), \Omega(t_1), \Omega(t_2), \dots, \Omega(t_{end}) \quad (4)$$

Функция переходов  $\varphi$  состоит из композиции функций столкновения  $\varphi_1$  и сдвига  $\varphi_2$ , то есть:

$$\varphi(S) = \varphi_2 \cdot \varphi_1(S) \quad (5)$$

Технически моделирование начинается с инициализации начальных параметров. В момент времени  $t_0$  пространственная решетка заполняется частицами либо детерминировано, либо случайным образом.

На каждом такте моделирования в фазе сдвига все частицы перемещаются в соседние узлы в направлении соответствующих векторов скоростей. В фазе столкновения происходит изменение векторов состояний узлов по указанным выше правилам столкновений. В данной модели есть две локальные конфигурации узла, при которых осуществляется столкновение:

$$S_m = \{1, 0, 1, 0\} \text{ и } S_n = \{0, 1, 0, 1\}$$

При столкновении конфигурации изменяются следующим образом:

$$S_m = \{1, 0, 1, 0\} \rightarrow S_m' = \{0, 1, 0, 1\}$$

или

$$S_n = \{0, 1, 0, 1\} \rightarrow S_n' = \{1, 0, 1, 0\} \quad (6)$$

На этом такт заканчивается, и модельное время увеличивается на величину шага.

Ранее в качестве примера возможностей НРР-модели решеточного газа нами рассматривался процесс простой диффузии – выравнивания концентрации вещества в пространстве путем хаотического движения частиц [4]. Был взят клеточный массив достаточно больших размеров, где в исходном состоянии имелась область, насыщенная частицами. На периферии массива частицы отсутствовали. Эволюция системы проходила в соответствии с изложенными выше правилами. Было показано, что с течением времени область высокой концентрации частиц размывается, а затем частицы заполняют клеточный массив достаточно равномерно. То есть полученная картина вполне соответствует физическим представлениям о реальном процессе диффузии.

В развитие исследований было принято решение провести анализ применимости рассматриваемого подхода для моделирования течений газа. С этой целью были проведены численные эксперименты по изучению поведения решеточного НРР-газа при его движении между параллельными стенками. Результаты представлены на рис. 4, 5. Здесь показаны векторы скоростей в установившемся режиме в отдельных узлах решетки. Во всех рассмотренных случаях для моделирования использовалась ортогональная решетка размером 800 на 200, узлы-источники располагались на левой границе, узлы-стоки – на правой. Плотность среды (а в конечном итоге и давление) моделировалась изменением исходной концентрации виртуальных частиц,

которая варьировалась от 0,025 до 0,16. Для устранения статистического шума проводилось усреднение значений скорости в узлах по окрестности, размером 10 узлов. Рисунки показывают, что в целом картина течения во всех случаях достаточно адекватна реальным представлениям. Однако для более корректной проверки результатов следовало бы указать привычные (макроскопические) параметры рассматриваемых потоков.

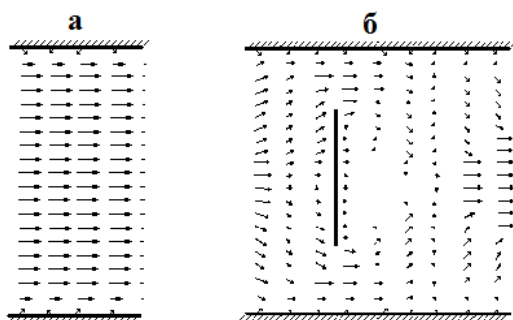


Рис. 4. Фрагменты потока НРР-газа между параллельными стенками: а – без препятствия; б – с препятствием  
 Fig. 4. Fragments of HPP-gas flow between the parallel walls: а – no obstacles, б – with obstacles

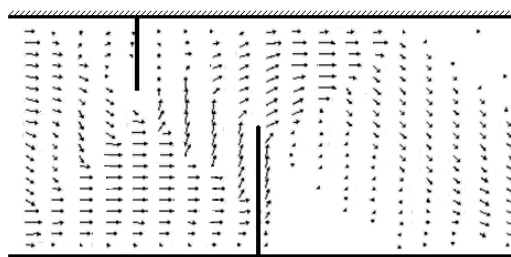


Рис. 5. Поток НРР-газа между параллельными стенками при наличии двух препятствий  
 Fig. 5. HPP-gas flow between two parallel walls at an existence of two obstacles

Модели решеточных газов рассматривают процессы, протекающие с гипотетическими частицами в идеализированном дискретном пространстве. Для рассмотрения поведения изучаемой среды в реальных условиях необходимо найти возможность перехода от виртуальных переменных решеточного мира к действительным физическим величинам, которые имеют смысл в макроскопических объемах реальных веществ.

Основную сложность при установлении связи между модельными параметрами процесса и их реальными аналогами вызывает тот факт, что в реальном мире рассматриваемые физические величины (длина, скорость и пр.) имеют размерность. В то же время в решеточном дискретном пространстве мы имеем дело с единичной длиной решетки

и единичной скоростью, которые безразмерны. Переход от безразмерных модельных значений параметров к размерным физическим значениям можно осуществить, используя соответствующие масштабные коэффициенты перехода. Их получение с использованием идей, предложенных рядом авторов [5], было подробно описано нами ранее [4]. Коротко суть процесса перехода к макроскопическим величинам основывалась на следующем. Программа, имитирующая процесс, позволяла подсчитывать модельную длину свободного пробега частиц и число их столкновений в течение шага дискретного времени. Далее по заданному характерному линейному размеру определялась реальная (физическая) длина свободного пробега, которая позволяла по справочным данным определить реальное давление газа и кинематическую вязкость. Данные величины впоследствии использовались для вычисления реальных значений скорости и времени.

Обобщая результаты модельных экспериментов, можно указать, что во всех сериях опытов значение числа Рейнольдса лежало в диапазоне от 4 до 45, что для сплошной среды должно указывать на ламинарный режим течения. При этом давление газа в опытах составляло 8-80 Па, что соответствует области среднего вакуума.

Последнее обстоятельство требует привлечения для анализа течения газа не только числа Рейнольдса, но и числа Кнудсена ( $Kn$ ), которое рассчитывается, как отношение средней длины свободного пробега частиц молекул между столкновениями к характерному размеру пространства. Во всех рассмотренных случаях значение данного показателя составляло от 0,14 до 0,01. В то же время известно, что при  $Kn \ll 1$  справедливо основное предположение гидроаэромеханики о сплошности среды, и режимы течения определяются числом Рейнольдса. Но если  $Kn \gg 1$ , поведение газа можно исследовать, не рассматривая столкновений частиц между собой, а лишь учитывая их удары о поверхность стенок. В наших опытах  $10^{-3} < Kn < 1$ , то есть реализуются различные промежуточные режимы между свободномолекулярным и континуальным поведением газа. Рассматривая именно промежуточный режим течения, можно утверждать, что использованная в вычислительных экспериментах НРР модель решеточного газа может давать достаточно адекватные результаты, по крайней мере для газов при пониженном давлении. Полученные модельные данные вполне согласуются с общепринятыми взглядами на пове-

дение газов. Учитывая, что данная модель чрезвычайно проста и эффективна при компьютерной ре-

ализации, можно рекомендовать ее для описания течений реального газа в условиях среднего вакуума.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **Бобков С.П.** Моделирование основных процессов переноса с использованием клеточных автоматов. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2009. Т. 52. Вып. 3. С. 109–114.
2. **Toffoli T., Margolus N.** Cellular Automata Machines. Cambridge, Massachusetts: The MIT Press. 1987. 80 p.
3. **Hardy J., de Pazzis O., Pomeau Y.** Molecular dynamics of a classical lattice gas: transport properties and time correlation functions. *Physical Review*. 1976. V. 13. N 5. P. 1949–1961.
4. **Бобков С.П., Соколов В.Л.** Анализ возможностей применения решеточных моделей для исследования процессов в газах при пониженном давлении. *Вестник ИГЭУ*. 2015. Вып. 4. С. 58–63.
5. **Бандман О.Л.** Клеточно-автоматные модели пространственной динамики. Системная информатика: Сб. науч. тр.: Новосибирск: Изд-во СО РАН. 2006. Вып. 10. С. 59–111.

#### REFERENCES

1. **Bobkov S.P.** Modeling of basic transfer processes by cellular automata. *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.* 2009. V. 52. N 3. P. 109–114 (in Russian).
2. **Toffoli T., Margolus N.** Cellular Automata Machines. Cambridge, Massachusetts: The MIT Press. 1987. 280 p.
3. **Hardy J., de Pazzis O., Pomeau Y.** Molecular dynamics of a classical lattice gas: transport properties and time correlation functions. *Physical Review*. 1976. V. 13. N 5. P. 1949–1961. DOI: 10.1103/PhysRevA.13.1949.
4. **Bobkov S.P., Sokolov V.L.** Analysis of lattice gas models applicability for the investigation of processes in gases under reduced pressure. *Vestnik ISPU*. 2015. V. 4. P. 58–63 (in Russian).
5. **Bandman O.L.** Cellular automata models of spatial dynamics. Scientific Collection of Papers «System informatics» Novosibirsk: SO RAN. 2006. N 10. P. 59–111 (in Russian).

*Поступила в редакцию 20.10.2016  
Принята к опубликованию 30.01.2016*

*Received 20.10.2016  
Accepted 30.01.2016*