

ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ РЕАЛИЗАЦИИ КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНОЙ МОДЕЛИ КУМУЛЯТИВНОЙ СТРУИ

Ю.Г. Медведев

ВВЕДЕНИЕ

При взрыве кумулятивных зарядов возникают кумулятивные течения, в которых происходят структурные превращения входящих в облицовку компонентов, если облицовка состоит из нанокристаллических порошков. Получившиеся в результате продукты синтеза в последнее время активно изучаются [1-2]. Их экспериментальное исследование достаточно дорого и требует сложных установок, тщательного подбора взрывчатого вещества и состава порошков. Поэтому численное моделирование этих процессов является актуальной задачей. Первой и самой важной частью модели кумулятивного синтеза является кумулятивная струя, несущая в себе участвующие в синтезе порошки. В работе предпринимается попытка промоделировать кумулятивную струю клеточным автоматом. Клеточно-автоматные модели потоков, называемые решеточными газами (Lattice Gas), были предложены в 70-х годах прошлого века и с тех пор стремительно развиваются. Эти модели дискретны, в их основе лежит булева алгебра, что позволяет создавать эффективные программные реализации как последовательные, так и параллельные и минимизировать использование машинного времени.

Особенностью кумулятивного эффекта является перемещение облицовки, обусловленное взрывной волной. Облицовка толкает воздух внутри конуса, в результате чего образуется кумулятивная струя, состоящая из воздуха, порошков, входящих в состав облицовки, и синтезированных в результате этого процесса продуктов. Моделирование движения стенок резервуара и твердых препятствий булевым клеточным автоматом невозможно. Движущаяся стенка толкает впереди себя частицы, а сложение частиц, уже имевшихся в клетке, и перемещенных туда стенкой приведет к одновременному присутствию в клетке нескольких частиц, имеющих одинаковый вектор скорости, а это при использовании булевой алгебры недопустимо. Наиболее естественным способом наделить модель способностью принимать перемещаемые стенкой частицы представляется замена булевых значений разрядов вектора состояния на целочисленные. В этом случае количества имевшихся в клетке и перемещенных стенкой частиц будут суммироваться.

В статье описана новая клеточно-автоматная модель потока FHP-MP (multi-particle), в которой допускается более одной частицы в клетке с равными векторами скорости. Она является обобщением классической модели на булевых векторах FHP (Frish, Hasslacher, Pomeau) [3]. Приведены результаты ее экспериментального исследования, а именно двумерная аппроксимация потока между двумя плоскостями и поток с препятствием. На первом примере показана корреляция модели FHP-MP с моделью FHP-I в соответствующем диапазоне скорости потока и давления. Получена парабола Пуазейля для новой модели. При наличии препятствия получены завихрения и видна дорожка Кармана, что указывает на возможность моделирования турбулентных свойств потока кумулятивной струи. Также приведены замеры времени работы параллельной реализации новой модели и выработаны рекомендации по ее применению. Следует заметить, что механизм перемещения стенок пока не отлажен, в работе отражено исследование модели только со статическими препятствиями с учетом реализации движущихся препятствий в дальнейшем.

МОДЕЛЬ FHP-MP

Под клеточным автоматом CA модели FHP-MP будем понимать тройку объектов (W, A, N) , где $W = \{w_1, w_2, \dots, w_i, \dots\}$ – множество клеток, заданное их координатами в некотором дискретном пространстве. Каждой клетке $w \in W$ поставлен в соответствие конечный автомат A , называемый элементарным автоматом. Его внутреннее состояние — целочисленный вектор, а не булев вектор как в классической модели FHP. Каждой клетке $w \in W$ сопоставлены некоторые координаты $x(w)$ и $y(w)$ на Декартовой плоскости. Следовательно, между любыми двумя клетками $w_1 \in W$ и $w_2 \in W$ с легкостью можно подсчитать расстояние $d(w_1, w_2)$.

Для каждой клетки $w \in W$ определено некоторое упорядоченное множество $N(w) = \{N_i(w) : N_0(w) = w, N_i(w) \in W \text{ \& } d(w, N_i(w)) = 1, (i = 1, 2, \dots,$

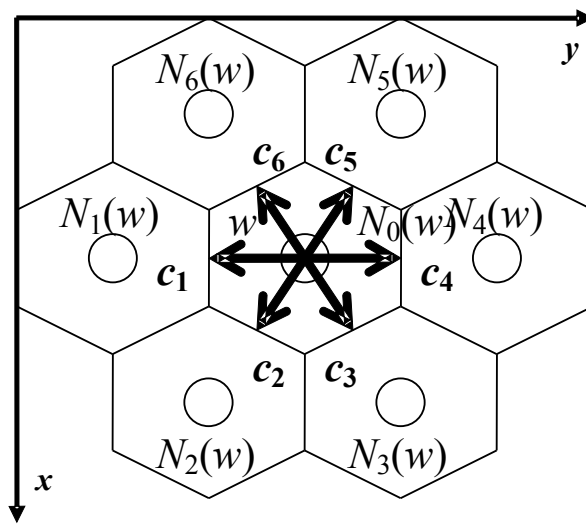


Рис. 1. Векторы скорости частиц. Нумерация соседей

b }), элементы которого находятся в *отношении соседства* с клеткой w и называются ее *соседними клетками* или *соседями*. Константа b определяет количество нетождественных соседей каждой клетки $w \in W$. Клетки являются соседями сами себе. Входное состояние элементарного автомата A в клетке $w \in W$ поставлено в соответствие внутренним состояниям соседей этой клетки. Таким образом, структура множества клеток W клеточного автомата представляется графом, в котором вершинами являются клетки, а ребрами — отношения соседства. Этот граф имеет регулярную структуру и степени вершин равные b . Состояние клетки $w \in W$ представлено вектором $s(w)$ с целочисленными компонентами $s_0(w), s_1(w), \dots, s_b(w)$. Множество состояний $s(w)$ всех клеток $w \in W$ в один и тот же момент времени t называется *глобальным состоянием* $\sigma(t) = \{s(w_1), s(w_2), \dots, s(w_i), \dots\}$ клеточного автомата CA .

Каждая клетка в классической модели ГНР имеет 6 соседей ($b = 6$). В некоторых модификациях этой модели каждая клетка является соседней также и самой себе (возможно несколько раз), что обуславливает возможность наличия частиц покоя. В основу модели ГНР-МР легла модель ГНР с одной частицей покоя. На рис. 1 изображена клетка w , векторы скорости c_i находящихся в ней частиц и ее соседи $N_i(w)$, $i = 0, 1, \dots, 6$. Таким образом, количество соседей каждой клетки w модели ГНР-МР равно семи, одним из соседей является сама клетка w , т.е. $N_0(w) = w$.

Состояние клетки w в каждый момент дискретного времени t однозначно определяется набором находящихся в ней частиц. Вектор скорости c_i каждой из них либо направлен в сторону одной из соседних клеток $N_i(w)$ (при $i = 1, \dots, 6$), либо равен нулю (при $i = 0$).

В отличие от ГНР, в модели ГНР-МР компоненты $s_0(w), s_1(w), \dots, s_b(w)$ вектора состояния $s(w)$ клетки w принимают не булевы, а целочисленные значения. Таким образом, масса частиц в клетке w равна

$$m(w) = \sum_{i=0}^b s_i(w) \quad , \quad (1)$$

где $b = 6$ — количество возможных направлений вектора скорости, s_i — i -й компонент вектора состояний s . Физическая интерпретация значений компонентов вектора $s(w)$ следующая: s_i определяет количество частиц с единичной массой в клетке w , векторы скорости c_i которых направлены в сторону соседа $N_i(w)$.

Модельный импульс p в клетке $w \in W$ есть сумма всех импульсов $p_i = s_i c_i$, направленных к соседям $N_i(w)$, где $i = 0, 1, \dots, b$, а $b = 6$:

$$p = \sum_{i=1}^b s_i c_i \quad , \quad (2)$$

Из (1), учитывая рис. 1, легко подсчитать проекции p_x и p_y импульса p на Декартовы оси Ox и Oy .

$$p_x = \frac{\sqrt{3}}{2} (s_2 + s_3 - s_5 - s_6) \quad , \quad (3)$$

$$p_y = s_4 - s_1 + \frac{1}{2} (s_3 + s_5 - s_2 - s_6) \quad , \quad (4)$$

где s_i — сумма векторов скорости всех частиц в клетке w , направленных к соседу $N_i(w)$.

Определим разбиение клеток $w \in W$ на типы. Клетками *среды* $w_{cp} \in W_{cp}$ назовем клетки, в которых выполняются законы сохранения массы и импульса. Клетки *стенок* $w_{cm} \in W_{cm}$ — это клетки, в которых выполняется закон сохранения массы, но может нарушаться закон сохранения импульса. И, наконец, *источники* $w_{ucm} \in W_{ucm}$ — клетки, в которых могут нарушаться как закон сохранения массы, так и закон сохранения импульса. Множества клеток среды W_{cp} , стенок W_{cm} и источников W_{ucm} попарно не пересекаются ($W_{cp} \cap W_{cm} = \emptyset$, $W_{cp} \cap W_{ucm} = \emptyset$, $W_{cm} \cap W_{ucm} = \emptyset$). Объединение этих множеств совпадает с множеством всех клеток автомата ($W_{cp} \cup W_{cm} \cup W_{ucm} = W$). Поведение стенок и источников задает граничные условия клеточного автомата.

В модели ГНР-МР используется клеточный автомат с синхронным режимом функционирования. На каждом такте происходит смена состояний $s(t)$ элементарных автоматов A во всех клетках $w \in W$, на состояния $s(t+1) = \delta(s(t))$, где $\delta(s(t))$ — функция переходов элементарного автомата A . Клеточный автомат CA при этом переходит из глобального состояния $\sigma(t)$ в новое глобальное состояние $\sigma(t+1)$.

Каждый такт работы клеточного автомата выполняется в две фазы: *сдвиг* и *столкновение*. Функция переходов δ элементарного автомата A состоит, таким образом, из композиции функций δ_1 (сдвиг) и δ_2 (столкновение):

$$\delta(s) = \delta_2(\delta_1(s)) \quad (5)$$

Каждая из функций δ_1 и δ_2 должна удовлетворять законам сохранения массы

$$\sum_{w \in W} \sum_{i=1}^b \delta_j(s_i(w)) = \sum_{w \in W} \sum_{i=1}^b s_i(w) \quad , \quad j \in \{1, 2\} \quad (6)$$

и импульса

$$\sum_{w \in W} \sum_{i=1}^b \delta_j(s_i(w) \mathbf{c}_i(w)) = \sum_{w \in W} \sum_{i=1}^b s_i(w) \mathbf{c}_i(w) \quad , \quad j \in \{1, 2\}. \quad (7)$$

С точки зрения динамики потока жидкости наличие этих двух фаз интерпретируется следующим образом. Столкновения реализуют диффузию в жидкости, а сдвиг — процесс переноса вещества в потоке. Далее подробно описаны эти две фазы.

В фазе сдвига в каждой клетке $w \in W$ каждая частица, учтенная в компонентах $s_i(w)$, при $i = 1, \dots, b$, вектора состояния $\mathbf{s}(w)$, перемещается в соседнюю клетку $N_i(w)$, соответствующую ее вектору скорости \mathbf{c}_i . Частицы, учтенные в компоненте s_0 , остаются в клетке w . Таким образом, i -й компонент $s_i(w)$ вектора состояния $\mathbf{s}(w)$ клетки w после сдвига принимает значение

$$\delta_1(s_i(w)) = \begin{cases} s_i(N_{((i+2) \bmod 6)+1}(w)), & \text{для } i=1, 2, \dots, b; \\ s_i(w), & \text{для } i=0. \end{cases} \quad (8)$$

Несмотря на то, что при сдвиге масса и импульс частиц в клетке изменяются, в пределах всего клеточного автомата они сохраняются, т.е. условия (6) и (7) выполняются.

В фазе столкновения происходит изменение направления движения частиц согласно некоторым правилам столкновения, не зависящим от состояний соседних клеток, т.е. δ_2 зависит только от внутреннего состояния своего элементарного автомата. В модели ГНР-МР функция δ_2 вероятностная. Ниже описаны правила столкновения для клеток разных типов: среды, стенок и источников.

Среда. В клетках среды $w_{cp} \in W_{cp}$ функция δ_2 выбирается такой, чтобы сохранялись масса $m(w)$

$$\sum_{i=0}^b \delta_2(s_i(w_{cp})) = \sum_{i=0}^b s_i(w_{cp}) \quad , \quad \forall w_{cp} \in W \quad (9)$$

и импульс $\mathbf{p}(w)$

$$\sum_{i=0}^b \delta_2(\mathbf{c}_i(w_{cp})) = \sum_{i=0}^b s_i(w_{cp}) \mathbf{c}_i(w_{cp}) \quad , \quad \forall w_{cp} \in W \quad (10)$$

частиц в клетке. Значением функции δ_2 будет равновероятно выбранное одно из всевозможных значений, удовлетворяющих условиям (9) и (10). При выполнении этих условий условия (6) и (7) тем более выполняются.

В клетках $w_{cm} \in W_{cm}$, являющихся стенками, частицы «отражаются» в обратном направлении, нарушая при этом закон сохранения импульса.

$$\delta_2(s_i(w_{cm})) = \begin{cases} s_{((i+2) \bmod 6)+1}(w_{cm}), & \text{для } i=1, 2, \dots, b; \\ s_i(w_{cm}), & \text{для } i=0. \end{cases} \quad (11)$$

Из-за того, что количество частиц в клетке не меняется, условия (9), а, следовательно, и (6) выполняются. Условие (7) может нарушаться, т.к. меняются направления векторов скорости \mathbf{c} частиц, но это допускается граничными условиями. Такое поведение частиц в клетках-стенках моделирует условие нулевой скорости потока на границах препятствий.

Каждая клетка-источник $w_{ucm} \in W_{ucm}$ поддерживает заданную концентрацию частиц $n_0(w_{ucm})$. Для этого она генерирует частицы со всевозможными направлениями вектора скорости в случае, если текущая концентрация частиц $n(w_{ucm}) < n_0(w_{ucm})$. Количество генерируемых частиц равно разнице заданной и текущей концентраций $n_0(w_{ucm}) - n(w_{ucm})$. Из клеток-источников можно создавать различные объекты. Например, установив их в пространстве в одну линию (как правило, у границы клеточного массива), можно получить источник равномерного потока частиц заданной концентрации. Отдельно установленный источник будет моделировать форсунку. Естественно, при генерации новых частиц ни масса $m(w_{ucm})$, ни импульс $\mathbf{p}(w_{ucm})$ не сохраняются. Граничные условия в клетках-источниках допускают нарушение условий (6) и (7).

При моделировании потоков практический интерес представляют не столько значения параметров автомата на *микроуровне*, т.е. масса $m(w)$ и скорость $\mathbf{c}_i(w)$ частиц в каждой клетке $w \in W$, сколько *осредненные значения* их скоростей $\langle \mathbf{u} \rangle$ и концентраций $\langle n \rangle$ по некоторой окрестности $Av(w)$, которая включает все клетки $w_j \in W$, удаленные от клетки w не более, чем на некоторую величину r , называемую *радиусом осреднения*.

Осредненная скорость вычисляется как сумма всех векторов частиц, попадающих в окрестность осреднения $Av(w)$, деленная на мощность окрестности осреднения:

$$\langle \mathbf{u} \rangle(w) = \frac{1}{|Av(w)|} \sum_{w_j \in Av(w)} \sum_{i=0}^b s_i \mathbf{c}_i \quad , \quad (12)$$

где $|Av(w)|$ – количество клеток, попадающих в окрестность осреднения $Av(w)$, \mathbf{c}_i – единичный вектор скорости, соответствующий i -му разряду вектора состояния $\mathbf{s}(w_j)$, а s_i – значение i -го разряда вектора состояния $\mathbf{s}(w_j)$ клетки $w_j \in Av(w)$.

Осредненная концентрация частиц $\langle n \rangle$ подсчитывается в той же окрестности $Av(w)$ следующим образом.

$$\langle n \rangle(w) = \frac{1}{|Av(w)|} \sum_{w_j \in Av(w)} \sum_{i=0}^b s_i \quad (13)$$

Осредненные значения скорости и концентрация частиц, являющиеся модельными значениями скорости и давления, соответствуют значениям *скорости* и *давления* моделируемой жидкости и являются параметрами *макроуровня*.

Заметим, что осредненные значения модельных скорости и концентрации будут соответствовать их физическим аналогам только в том случае, когда окрестность осреднения $Av(w)$ состоит исключительно из клеток среды $w \in W$. В противном случае будем полагать значения $\langle \mathbf{u} \rangle$ и $\langle n \rangle$ неопределенными. Это условие не позволяет определять значения $\langle \mathbf{u} \rangle$ и $\langle n \rangle$ на расстоянии ближе, чем радиус осреднения r от границ (стенок и источников), в том числе и находящихся внутри моделируемого объекта.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

Для проверки свойств предложенной модели была создана ее программная реализация, позволяющая проводить вычислительные эксперименты как на однопроцессорных компьютерах, так и на многопроцессорных и многомашинных вычислительных комплексах. Код программ написан на языке Си, параллелизм реализован с помощью библиотеки MPI. Ниже описаны вычислительные эксперименты, проведенные с моделью FHP-MP. Получены качественные характеристики моделируемого потока.

Первый эксперимент, проведенный с новой моделью, заключался в двумерной аппроксимации потока жидкости между двумя параллельными плоскостями. Этот эксперимент, ставший уже классическим, позволяет проверить модель на соответствие физике. Суть его в том, что продольная скорость потока $\langle \mathbf{u} \rangle_y$ (поток движется вдоль Oy в положительном направлении) при скорости на границах $\langle \mathbf{u} \rangle_{zp} = 0$ должна быть распределена вдоль направления Ox по параболическому закону.

Клеточный автомат, использующийся в этом вычислительном эксперименте, имеет размеры 100×2000 клеток (вдоль Декартовых осей Ox и Oy соответственно). Множество клеток с координатами в интервале $[(2, 1), (99, 1)]$ — источники. Множество клеток с координатами в интервалах $[(1, 1), (1, 2000)]$ и $[(100, 1), (100, 2000)]$ — стенки. Остальные — клетки среды. Такая двумерная конструкция является сечением параллелепипеда бесконечной ширины (вдоль оси Oz) и аппроксимирует трехмерный поток между двумя параллельными плоскостями.

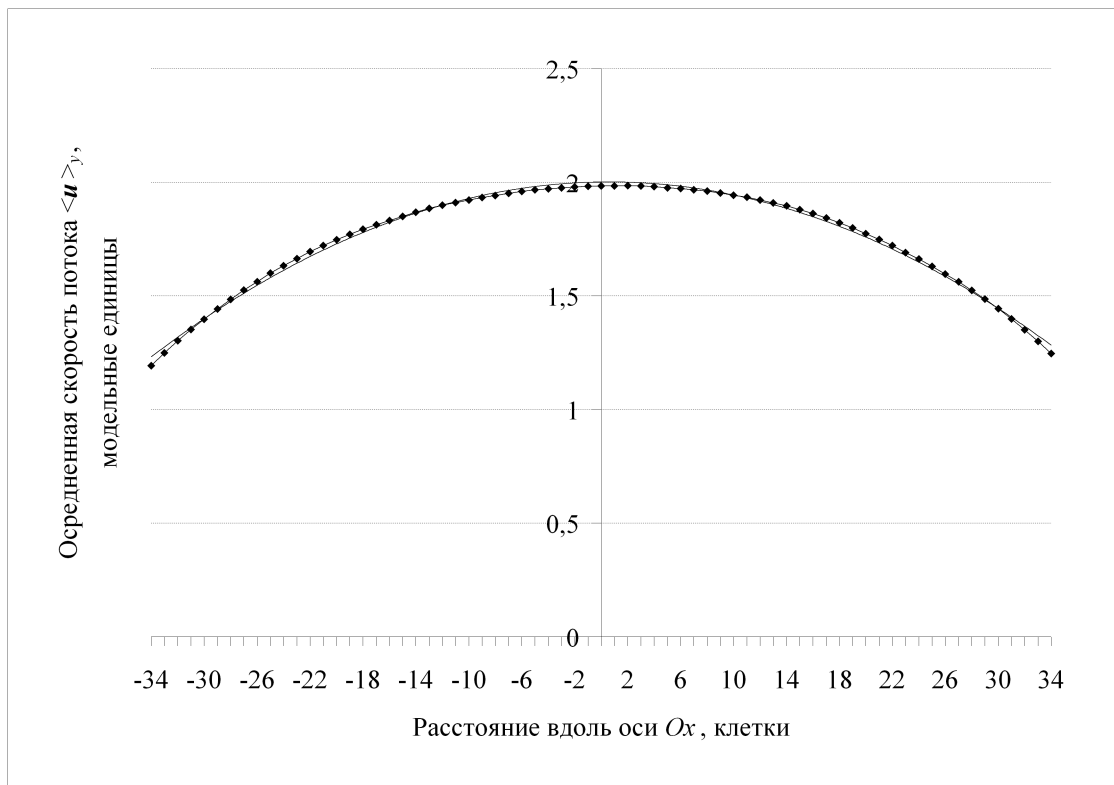


Рис. 2. Парабола Пуазейля и экспериментальная скорость потока.

На рис. 2 изображена проекция скорости потока $\langle \mathbf{u} \rangle_y$ на ось Oy в поперечном сечении потока (вдоль Ox). Кривая с маркерами построена исходя из результатов численного моделирования. Она аппроксимирована уравнением параболы (на рис. 2 — кривая без маркеров):

$$\langle \mathbf{u} \rangle_y (r) = -0.0008r^2 + 2, \quad (14)$$

где r — расстояние от середины до рассматриваемой точки поперечного сечения.

Кривая (14) — теоретически обоснованная парабола Пуазейля — одно из немногих аналитических решений уравнения Навье-Стокса, имеющее вид:

$$\langle \mathbf{u} \rangle_y (r) = \frac{dP}{4\eta l} (R^2 - r^2), \quad (15)$$

где dP — падение давления на участке трубы длиной l , η — динамическая вязкость жидкости, R — радиус трубы (в двумерном случае — расстояние между плоскостями).

Количество итераций, после которого проведено осреднение, $T = 20000$. Радиус осреднения $r = 15$ клеток. Согласно условию, налагаемому на (12) и (13), осредненные значения не могут быть получены на расстоянии до стенок ближе, чем $r = 15$ клеток. Следовательно, теоретическая и экспериментальная кривые в диапазоне, изображенном на рисунке, не опускаются до нуля.

Максимальная скорость потока в проведенном эксперименте, как видно из рис. 2, получилась равной двум, что несколько больше, чем в классической модели FHP. Но это не предельная скорость, в новой модели можно увеличивать концентрацию, вырабатываемую источниками, получая скорость потока, значительно превосходящую полученную. Следовательно, новая модель позволяет моделировать турбулентные потоки.

Результаты этого эксперимента показывают, что модель FHP-MP адекватно отражает процессы в потоках и соответствует физике.

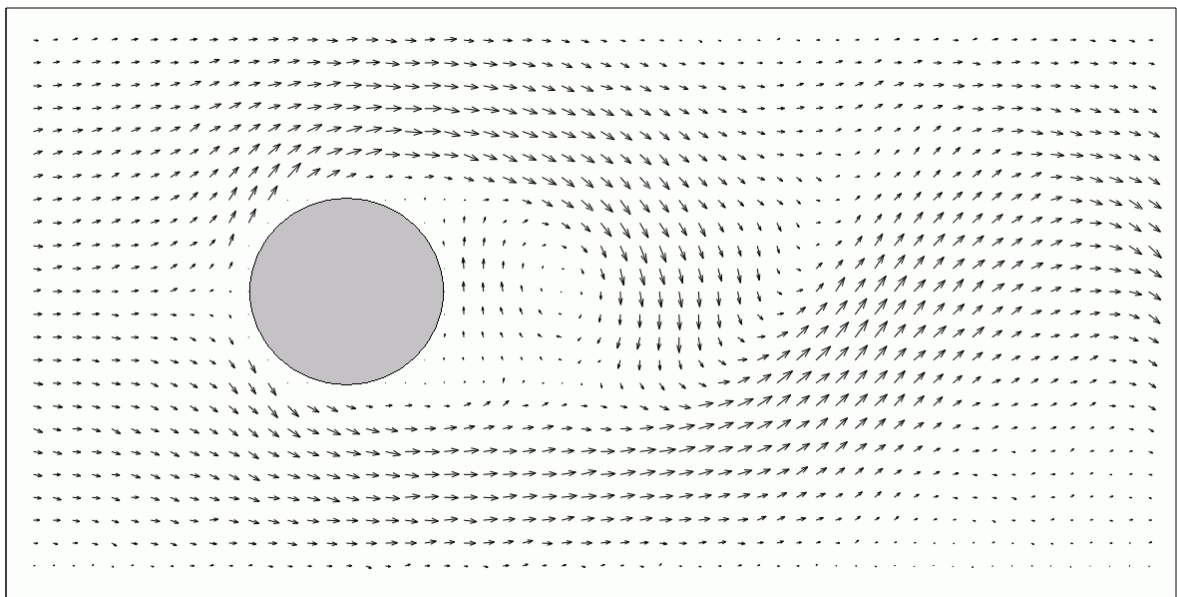


Рис. 3. Поле скорости потока с круглым препятствием.

Следующий вычислительный эксперимент был проведен с целью исследования обтекания препятствий. Для этого в клеточный автомат, использовавшийся в предыдущем эксперименте, были добавлены граничные условия в виде препятствия, имеющего форму круга. Препятствие было установлено на расстоянии трети длины трубы от источников на оси трубы и имело диаметр равный трети диаметра трубы. Поле скорости этого автомата изображено на рис. 3. Направление каждой стрелки на рисунке совпадает с направлением потока в ее основании, а длина пропорциональна скорости потока в соответствующей точке. Получившееся поле скорости походит на обтекание препятствия потоком, движущимся слева направо. За препятствием присутствуют оторвавшийся вихрь и «змейка», очевидно являющаяся вариантом дорожки Кармана для слишком малого расстояния до ограничивающих поток плоскостей. Таким образом, модель FHP-MP представляется пригодной для моделирования кумулятивной струи.

Еще два эксперимента с большими размерами клеточного массива были проведены для исследования эффективности распараллеливания программной реализации новой модели. В первом из них размер автомата составил 10000×10000 клеток. Распределение массива по процессорам осуществлялось разрезанием

его вдоль длинной стороны на полосы равной ширины. Было измерено время выполнения программы на разном числе процессоров (от 1 до 2048 по степеням двойки). Для более точного определения времени количество итераций при каждом запуске зависело от количества процессоров и выбиралось таким, чтобы время работы алгоритма моделирования составляло несколько десятков секунд. Ввод-вывод данных при замере времени не учитывался. Время выполнения одной итерации, количество итераций в секунду, ускорение по сравнению с последовательным выполнением и эффективность распараллеливания приведены на рис. 4. Из рисунка видно, что задача показывает хорошее ускорение только на нескольких десятках процессоров, а после 512 процессоров время выполнения и вовсе начинает увеличиваться. Это несвойственно для клеточно-автоматных алгоритмов и объясняется двумя причинами. Во-первых, конечно, небольшим размером автомата, на полосу, выделяемую каждому из 2048 процессоров, приходилось в среднем около 5 столбцов клеточного массива. Во-вторых, концентрация частиц при движении от источников к выходу уменьшается, что сказывается на времени обработки клеток. При равной ширине полос процессорам с большими порядковыми номерами достаются клетки с меньшей концентрацией, так что они вынуждены часть времени простаивать и ждать окончания обработки процессорами с меньшими порядковыми номерами своих клеток с большими концентрациями. Чем больше количество процессоров, тем уже полосы массива и тем больше разница между временем обработки первой и последней полосы.

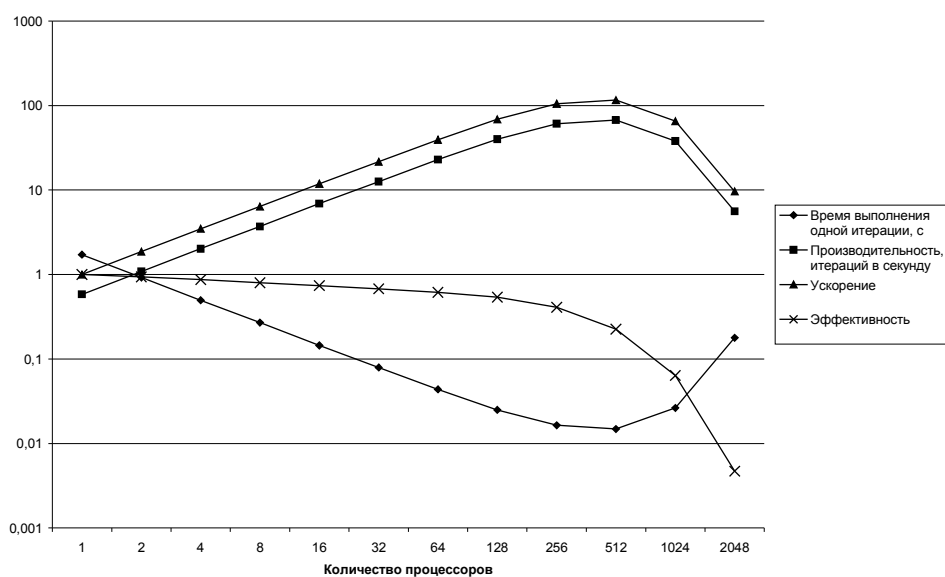


Рис. 4. Замеры времени выполнения на задаче размером 10000×10000 клеток.

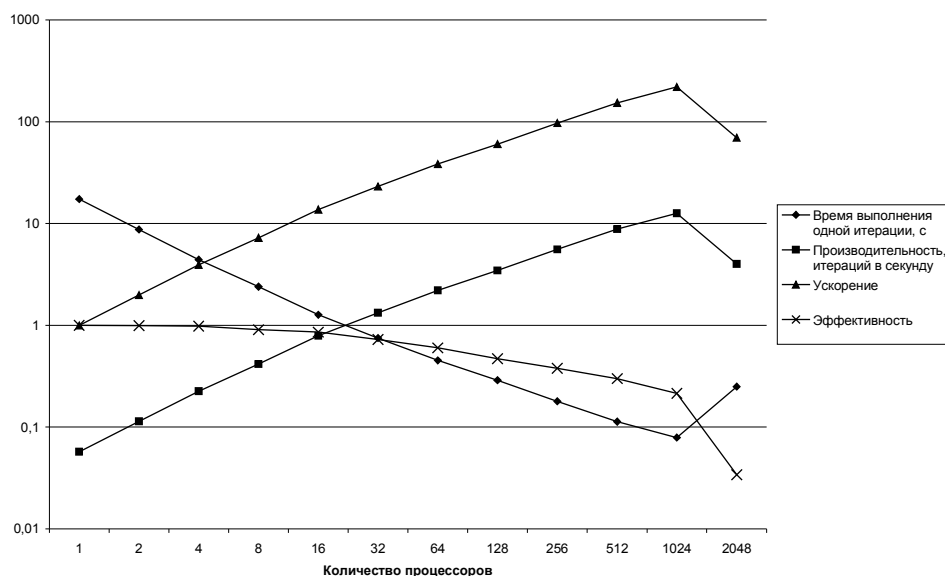


Рис. 5. Замеры времени выполнения на задаче размером 10000×10000 клеток.

Для уменьшения влияния первой причины был проведен еще один эксперимент с размерами клеточного массива 10000×10000 клеток. Полосы остались той же ширины, но количество клеток и, следовательно, вычислений возросло на порядок, а время пересылки выросло незначительно, т.к. все равно передача границ осуществляется одним куском. На рис. 5 приведены время выполнения одной итерации, количество итераций в секунду, ускорение по сравнению с последовательным выполнением и эффективность распараллеливания для этого клеточного автомата. Пики графиков сместились с отметки 512 на отметку 1024 процессора. Это указывает на хорошую масштабируемость алгоритма и дает основание предполагать, что эффективное использование тысяч процессоров возможно на двумерных задачах с линейными размерами автомата в десятки или сотни тысяч клеток, а на трехмерных задачах с размерами автомата в тысячи или десятки тысяч клеток.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предлагается новый подход к моделированию кумулятивного течения, возникающего при взрыве с порошковой облицовкой. Создана клеточно-автоматная модель потока FHP-MP, моделирующая потоки с вихрями и позволяющая использовать движущиеся стенки. Проведены эксперименты со статическими стенками. Оценена возможность запуска на тысячах процессоров.

ЛИТЕРАТУРА:

1. С.А. Громилов, С.А. Кинеловский. Рентгенографическое исследование карбидов вольфрама, полученных в условиях кумулятивного взрыва // Журнал структурной химии, — 2003, том 44, № 3, Новосибирск — 2003, с. 486 – 493.
2. С.Н. Кульков, С.А. Кинеловский. Превращения в диоксиде циркония в условиях кумулятивного взрыва // Письма в Журнал технической физики, — 2008, том 34, вып. 7, Москва — 2008, с. 7 – 13.
3. U. Frisch, B. Hasslacher, and Y. Pomeau. Lattice-Gas automata for Navier-Stokes equations // Phys. Rev. Lett. 1986. N 56. P.1505.