

Клеточно-автоматное моделирование процесса просачивания жидкости через пористый материал *

О.Л. Бандман

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН

В статье излагаются результаты исследования клеточно-автоматной модели просачивания жидкости (или газа) через трехмерную пористую среду с заданной морфологией. Клеточно-автоматная модель представлена в виде композиции двух клеточных автоматов, моделирующих 1) конвекцию под действием внешнего давления или гравитации, и 2) диффузию, выравнивающую плотность вещества в порах. Тестирование модели проводилось на примере просачивания воды через трехмерный образец почвы ¹ размером 2 см³ при линейном размере клетки 15 мкм и разных типах взаимодействий влаги со стенками пор. Параллельная версия реализована на кластере ССКЦ СО РАН.

1. Введение

В связи с развитием новых технологий производства и использования пористых материалов возникают новые требования к компьютерному моделированию процессов в них. Рассмотрение пористых материалов как сплошных сред, характеризуемых определенным коэффициентом пористости, теперь не удовлетворяет ни разработчиков новых композитных материалов, ни исследователей плодородия почвы. Во многих случаях необходимо учитывать внутренние свойства материала, среди которых главные - морфология среды и характер взаимодействия стенок пор с проходящим через них газом или жидкостью. Поскольку вычислительные мощности современных суперкомпьютеров позволяют представлять морфологию материала на микро-уровне, то становится возможным имитировать прохождение газа или влаги через все извилины и преграды в толще материала [1, 2]. Использовать для этого традиционные математические модели, основанные на дифференциальных уравнениях в частных производных, невозможно из-за трудно описываемых непрерывными функциями границ пор. Поэтому появились попытки применить дискретные модели типа "решеточный газ" (Lattice-Gas) [3] и "решеточную модель Больцмана" (Lattice-Boltzman) [4], а также клеточные автоматы [5, 6], которые "не боятся сложных граничных условий" и допускают эффективную параллельную реализацию. Модели, основанные на принципах решеточного газа, имитируют стационарные ламинарные потоки. Их можно использовать в случаях, когда жидкость или газ проходит сквозь пластину из пористого материала, как это, например, происходит в полимерных мембранах водородных энергетических элементов [1]. Нестационарные процессы, такие как проникание в материал, наполнение его влагой или, наоборот, высыхание, решеточные модели не берут. Кроме того, трехмерная их реализация имеет очень высокую сложность и трудна для распараллеливания [7]. Здесь необходима более гибкая имитация движения частиц и их взаимодействий со стенками пор.

В статье предлагается простая версия вероятностного клеточного автомата, минимальная конфигурация которой имитирует три вида движений абстрактных частиц: конвекцию под действием внешней силы, диффузию (растекание) и взаимодействие со стенками. Эту модель можно считать аналогичной диффузионно-конвекционной модели пористой среды, основанной на системе дифференциальных уравнений конвекция-диффузия [8], которая, однако, работает только в прямых пористых каналах. При всей своей простоте предлагае-

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 11-01-00567а, а также по Программе Президиума РАН (проект № 15-9,2012).

¹Томографическое представление образца почвы любезно предоставлено проф.В.Корнелисом, prof. Wim Cornelis, SoPHu, Department Soil Management, Ghent University, Coupure links 653, 9000 Gent, Belgium.

мая модель обладает большой гибкостью. Модификации функций переходов КА позволяют моделировать высыхание материала, а также учитывать свойства взаимодействий влаги со стенками пор, например, набухание стенок в гидрофильных пористых материалах. Возможности модели иллюстрируются результатами моделирования процесса увлажнения и высыхания почвы.

Статья состоит из Введения, четырех разделов и Заключения. Во Введении обоснована актуальность проведенного исследования. Во втором разделе даны необходимые определения и формальное представление предлагаемой модели. В третьем разделе приводится алгоритм моделирования. Четвертый и пятый разделы посвящены результатам моделирования процессов увлажнения и высыхания образца почвы в последовательной и параллельной версиях, соответственно. В Заключении обсуждаются возможности совершенствования и применения модели.

2. Формальное представление клеточно-автоматной модели

КА — это множество одинаковых простых вычислителей, которые в модели представлены парами (u, x) , называемыми *клетками*, где $u \in A$ — *состояние клетки* из алфавита A , $\mathbf{x} \in X$ — имя клетки, часто задаваемое вектором $\mathbf{x} = (i, j, k)$ из конечного множества координат d -мерного дискретного пространства X . В пространстве X определены подмножества, называемые *шаблонами*,

$$T(\mathbf{x}) = \{\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{x} + \mathbf{a}_{n-1}\}, \quad (1)$$

где \mathbf{a}_j вектор смещения координат \mathbf{x} , $n = |T(\mathbf{x})|$. Клетки с именами из $T(\mathbf{x})$ образуют *локальную конфигурацию*

$$S(\mathbf{x}) = \{(u_0, \mathbf{x}), (u_1, \mathbf{x} + \mathbf{a}_1), \dots, (u_{n-1}, \mathbf{x} + \mathbf{a}_{n-1})\}. \quad (2)$$

Множество клеток $\Omega = \{(u_i, \mathbf{x}_i) | u_i \in A, \mathbf{x}_i \in X, \mathbf{x}_i \neq \mathbf{x}_j\}$ называется *клеточным массивом*, а перечень состояний клеток $\Omega_A = (u_1, u_2, \dots, u_{|X|})$ — *глобальным состоянием* КА.

Функционирование КА задается *локальным оператором* и режимом его применения к клеткам из Ω . Локальный оператор

$$\Theta(\mathbf{x}) = \Phi(\Theta_1(\mathbf{x}), \dots, \Theta_n(\mathbf{x})) \quad (3)$$

может быть композицией более простых локальных операторов, которые, в свою очередь, являются композицией подстановок $\theta(\mathbf{x})$ [9]. Подстановки выражаются через локальные конфигурации следующим образом.

$$\theta(\mathbf{x}) : S(\mathbf{x}) \rightarrow S'(\mathbf{x}), \quad (4)$$

где $|S(\mathbf{x})| \geq |S'(\mathbf{x})|$, т.е. $T'(\mathbf{x}) \subseteq T(\mathbf{x})$ причем первые $m' = |T'(\mathbf{x})|$ клеток в локальной конфигурации составляют *базу* подстановки, а остальные $(m - m')$ клеток играют роль *контекста*.

Подстановка применима к клетке $(u, \mathbf{x}) \in \Omega$, если $S(\mathbf{x}) \in \Omega$, причем клетка с переменным состоянием (u, \mathbf{x}) считается принадлежащей Ω , если область значений u включена в алфавит A . Применение подстановки $\theta(\mathbf{x})$ сводится к замене состояний базовых клеток $(u_j, \mathbf{x} + \mathbf{a}_j) \in S(\mathbf{x})$ на значения

$$u'_j = f_j(u_1, \dots, u_n), \quad n = |S(\mathbf{x})|, \quad j = 0, \dots, |S'(\mathbf{x})|, \quad (5)$$

где $f_j(u_1, \dots, u_n)$ — *функция перехода*. Контекстные клетки не меняют своих состояний при применении подстановки (4).

В локальном операторе обычно используются следующие способы композиции подстановок: суперпозиция, случайный выбор одной из подстановок, применение подстановок в случайном порядке [9].

Применение $\Theta(\mathbf{x})$ ко всем $\mathbf{x} \in X$ называется *глобальным оператором* и обозначается $\Theta(X)$. Применение $\Theta(X)$ изменяет глобальное состояние $\Omega(t)$ на новое $\Omega(t+1)$. Такое изменение составляет *итерацию*. Итерация может выполняться разными способами, которые называются *режимами функционирования КА*. Основными из них являются: синхронный и асинхронный.

При *синхронном режиме* на каждой t -й итерации выполняется следующее:

- 1) для всех $(u, \mathbf{x}) \in \Omega(t)$ вычисляются новые состояния $u'(\mathbf{x})$ путем применения к ним функции перехода (4);
- 2) во всех клетках $(u, \mathbf{x}) \in \Omega(t)$ производится замена состояний $u(\mathbf{x})$ на новые $u'(x)$;
- 3) $\Omega(t) \rightarrow \Omega(t+1)$.

Локальные операторы синхронных КА ограничены тем, что их подстановки (4) должны иметь одноклеточную базовую локальную конфигурацию,

$$|S'_i(\mathbf{x})| = 1 \quad \forall \theta_i \in \Theta(\mathbf{x}), \quad (6)$$

что следует из условий корректности вычислений [12]:

$$T_k(\mathbf{x}) \cap T_m(\mathbf{y}) = \emptyset, \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in X, \quad \forall k, m \in \{1, \dots, l\}, \quad l = |\Theta(\mathbf{x})|. \quad (7)$$

Асинхронный режим предполагает следующий порядок применений локального оператора:

- 1) с вероятностью $p = 1/|X|$ выбирается клетка $(u, \mathbf{x}) \in \Omega$;
- 2) к выбранной клетке применяется локальный оператор $\Theta(\mathbf{x})$, и состояния клеток базовых локальных конфигураций $(u', \mathbf{x}) \in S'(\mathbf{x})$ немедленно меняются на новые значения;
- 3) условно принимается, что $|X|$ повторений пп.1 и 2 составляет одну итерацию, такое соглашение удобно для сравнения синхронного и асинхронного режимов и соответствует понятию одного шага *кинетического метода Монте-Карло* [10].

Поскольку в асинхронных КА локальный оператор применяется последовательно к выбранным клеткам, условие (7) всегда выполняется, т.е. вычисление эволюции КА всегда корректно. Это значит, что не может произойти потери данных (в одну клетку одновременно записаться два разных значения). Проблема корректности возникает только тогда, когда алгоритм асинхронного КА реализуется параллельно на нескольких процессорах [11, 13].

Кроме основных режимов возможны их сочетания, а также любой другой порядок применения подстановок, если он соответствует моделируемому явлению и удовлетворяет условию (6).

Режим функционирования КА является его существенным параметром, т.е. если два КА различаются только режимами функционирования, то они являются представлениями двух разных КА. Чтобы определить однозначно КА надо задать четыре параметра: A, X, Θ, ρ , где $\rho \in \{\alpha, \sigma\}$, α обозначает асинхронный режим, σ — синхронный, а КА \aleph_α и \aleph_σ обозначают асинхронный и синхронный КА, соответственно.

Задание КА в общем случае не определяет характера его поведения. Эволюции одного и того же КА с разными исходными массивами Ω_0 могут кардинально различаться. Ярким примером является всем известный КА “Игра жизнь”, который при разных начальных массивах порождает самые разные эволюции. Таким образом, КА-модель определяется пятью понятиями,

$$\mathbf{A} = \langle A, X, \Theta, \rho, \Omega(0) \rangle. \quad (8)$$

3. КА-модель процесса увлажнения пористого материала

В предлагаемой далее КА-модели просачивания жидкости сквозь пористый материал символы в (8) имеют следующие значения.

Алфавит состояний клеток $A = \{0, 1, 2, 3\}$, причем 0 интерпретируется как пустое пространство поры, 1 — как твердый материал стенки поры, 2 — как частица влаги, 3 — разбухшее от влаги твердое вещество, характерное для гидрофильных материалов.

Дискретное пространство X — прямоугольная решетка

$$X = \{(i, j, k) : i = 0, \dots, I; j = 0, \dots, J; k = 0, \dots, K\}. \quad (9)$$

Оператор Θ является суперпозицией [14] двух глобальных операторов:

$$\Theta(X) = \Theta_C(\Theta_D(X)), \quad (10)$$

$\Theta_C(X)$ — конвекционный глобальный оператор, и $\Theta_D(X)$ — диффузионный глобальный оператор. Суперпозиция глобальных операторов предполагает применение локального оператора $\Theta_D(i, j, k)$ на каждой итерации t ко всем $(i, j, k) \in X$, а затем применение локального оператора $\Theta_C(i, j, k)$ ко всем клеткам результирующего массива (рис.1).

Конвекционный локальный оператор $\Theta_C(i, j, k)$ имитирует движение абстрактных частиц вдоль направления внешней силы. Например, если сила направлена вдоль координаты k , то его действие состоит из K последовательных шагов. На каждом шаге подстановка $\theta_C(i, j, k)$ применяется синхронно ко всем клеткам массива с координатой k , начиная от $k = K - 1$ до $k = 0$.

$$\theta_C(i, j, k) : \{(1, (i, j, k))(2, (i, j, k - 1))\} \xrightarrow{p_c} \{(2, (i, j, k))(1, (i, j, k - 1))\} \quad \forall (i, j, k) \in X. \quad (11)$$

Вероятность p_c принимается равной или близкой к 1. так как это самое быстрое действие.

Диффузионный локальный оператор $\Theta_D(i, j, k)$ имитирует разлив жидкости, т.е. процесс выравнивания плотности жидкости, который совместно с конвекцией, приводит к выравниванию свободной поверхности жидкости в кавернах, порах, а также на внешней (верхней) поверхности. Таким образом, в каждой k -й плоскости массива используется двумерный вариант асинхронной *наивной диффузии* [15]. Ее локальный оператор содержит одну подстановку, основанную на 5-точечной локальной конфигурации:

$$\begin{aligned} S(i, j, k) &= \{(u_0, (i, j, k)), (u_1, (i - 1, j, k)), (u_2, (i, j + 1, k)), (u_3, (i + 1, j, k)), (u_4, (i, j - 1, k))\} \\ &= \{(u_l(i, j, k))_l : l = 0, \dots, 4\}, \end{aligned} \quad (12)$$

выполняя обмен состояниями между центральной клеткой и одним, выбираемым равновероятно соседом, у которого $u_l \neq 0$ (не твердое вещество).

$$\theta_D(i, j, k) : \{(u_0, (i, j, k))_0(u_l, (i, j, k))_l\} \xrightarrow{p} \{(u_l, (i, j, k))_0(u_0, (i, j, k))_l\}, \quad l = 1, 2, 3, 4; \quad (13)$$

при условии, что $u_l, u_0 \in \{1, 2\}$. Если стенки пор гладкие, то вероятность выбирается равной $p = 1/(1 - m)$, где m — число твердых клеток в $S(i, j, k)$. Если стенки не гладкие, то вероятность применения (13) выбирается более низкой.

Поскольку диффузия — процесс более сложный чем конвекция, то чтобы согласовать скорости конвекционной итерации с диффузионной, глобальный оператор диффузии $\Theta_D(X)$ должен содержать несколько итераций применения $\theta_D(i, j, k)$ ко всем $(i, j, k) \in X$ (рис.1), т.е.

$$\Theta_D(X) = (\theta_D(X))^n. \quad (14)$$

Величина n зависит от свойств вещества и конкретных условий. В рамках модельных величин ее можно подобрать в процессе тестового моделирования, определив путем визуального наблюдения на мониторе, или включив в программу моделирования проверку, при какой величине n свободная поверхность воды остается абсолютно гладкой.

Операторы конвекции и диффузии составляют базовую часть модели, которая допускает разные расширения. Наиболее полезными для случая увлажнения почвы являются учет процесса испарения и учет гидрофильных включений.

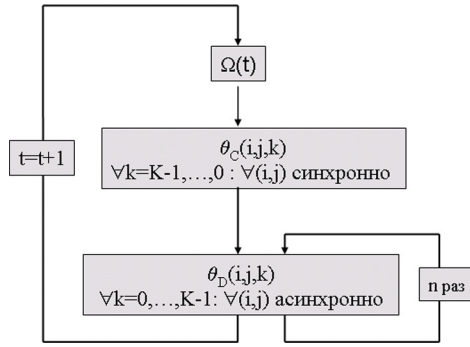


Рис. 1. Алгоритм моделирования процесса просачивания влаги через пористую среду

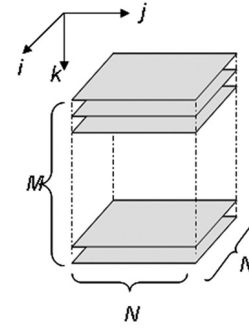


Рис. 2. Структура трехмерного клеточного массива.

Локальный оператор испарения моделирует превращение частицы жидкости в пар (пустое пространство):

$$\theta_E(i, j, k) : \{(2, (i, j, k))(1, (i, j, k - l))\} \xrightarrow{pE} \{(1, (i, j, k))(1, (i, j, k - 1))\}, \quad \forall(i, j, k) \in X. \quad (15)$$

Подстановка применяется синхронно ко всем клеткам массива с координатой k , начиная от $k = 0$ до $k = K - 1$ на каждом шаге.

Локальный оператор гидрофильности моделирует разбухание стенки поры, которая становится препятствием на пути влаги.

$$\theta_H(i, j, k) : \{(1, (i, j, k)_0)(2, (i, j, k)_l)\} \xrightarrow{pH} \{(1, (i, j, k)_0)(3, (i, j, k)_l)\} \quad l = 1, 2, 3, 4; \quad (16)$$

Режим применения (16) такой же, как для (15). Состояние разбухшей клетки $u = 3$ в процессе увлажнения материала ведет себя так же, как твердая клетка, но в процессе высыхания может снова принять состояние $u = 2$. Для описания процесса высыхания разбухшей стенки следует применить подстановку (16), в которой состояния $u = 3$ и $u = 2$ следует поменять местами и поставить нужное значение вероятности.

Исходный клеточный массив $\Omega(0)$ — трехмерный булев массив размером $I \times J \times K$ (рис.2), в котором клетки $(0, (i, j, k))$ имитируют твердое вещество, а клетки $(1, (i, j, k))$ — пустое пространство поры. Обычно $\Omega(0)$ задается текстовым файлом, который является оцифрованным представлением морфологии пористой среды. Получение этого файла — самостоятельная проблема. Если речь идет о конкретном материале, образцы которого имеются у исследователя, то его оцифрованное представление может быть получено с помощью томографа. Если в распоряжении исследователя (например, разработчика новых материалов или устройств с их использованием) нет реальных образцов, то оцифрованное представление приходится синтезировать по заданным характеристикам. Существует несколько методов такого синтеза (в [16] имеется довольно полный их обзор). В частности, известен метод синтеза пористого массива с помощью КА [1].

Основной особенностью предлагаемой трехмерной КА-модели является то, что его конвекционная и диффузионная составляющие разделены в пространстве таким образом, что конвекционная составляющая в нем одномерная, а диффузионная — двумерная. По сути, здесь применен прием "разделяй и властвуй", который резко упрощает программирование и распараллеливание алгоритма моделирования. Оценить, насколько такое упрощение уменьшает точность моделирования, практически невозможно, поскольку сам объект "не точен": морфология пористых сред разнится от образца к образцу и часто зависит от ряда внешних факторов, как-то влажность, температура и др.

Исследование вычислительных характеристик предложенной КА-модели выполнялось в два этапа. На первом этапе проводились вычислительные эксперименты в соответствии с последовательной версией алгоритма (рис.1). На втором этапе исследовались возможности и характеристики параллельной версии.

4. Испытание последовательной версии алгоритма моделирования

Экспериментальное моделирование производилось на примере процесса увлажнения и высыхания почвы. Испытанию подвергалось оцифрованное томографическое представление образца почвы размером $10,304 \times 10,304 \times 21,88892$ мм³ любезно присланное проф. В.Корнелли (Университет г. Гент, Бельгия) в виде 1480 текстовых файлов, каждый размером 700×700 байт (рис.2). Таким образом, линейный размер клетки $h = 14,72$ микрон, и мощность клеточного массива $|X| = 725.2 \cdot 10^6$. Морфология исследуемого образца почвы показана в разрезе ($j=400$) на рис.3. Последовательная версия алгоритма тестировалась на компьютере Intel Core-i7 (2,66 ГГц). Исследовался фрагмент клеточного пространства размером $200 \times 200 \times 500$ клеток, обозначенный красным прямоугольником на рис.3. Время одной итерации $\Delta t = 0,4$ сек.

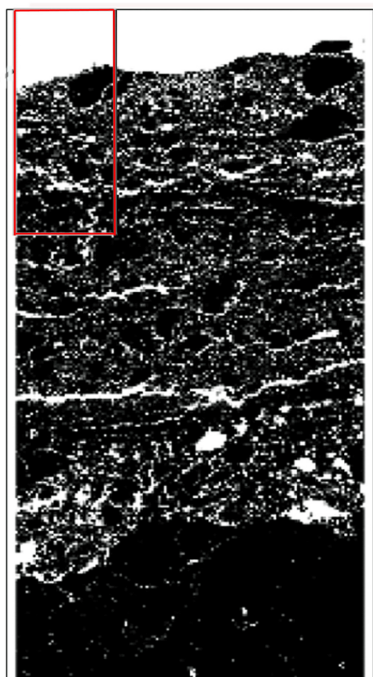


Рис. 3. Вид исследуемого образца в разрезе $j = 400$. В левом верхнем углу обозначен размер тестируемого фрагмента

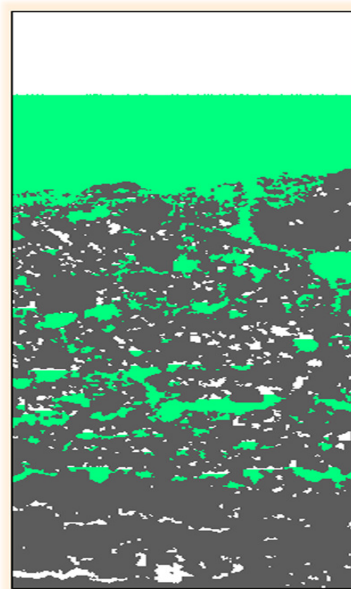


Рис. 4. Тестируемый фрагмент клеточного массива в разрезе ($j = 50$) после длительного увлажнения

Реализация последовательного алгоритма выполнялась для отладки самой модели, т.е. получения оценочных значений скорости проникания влаги в почву (рис.4), а также подбора диапазонов значений тех ее параметров, которые заранее неизвестны, и могут быть подобраны только путем вычислительного экспериментирования. Такими параметрами в исследуемой модели являются следующие величины.

1) Коэффициент n в (14), представляющий соотношение

интенсивностей конвекции и диффузии. Он определяется путем выполнения многих реализаций алгоритма (рис.1) с разными n до тех пор, пока свободная поверхность воды не станет полностью гладкой на каждой итерации. Коэффициент n является инвариантом КА-модели конкретного явления [17], и для новой модели должен быть снова экспериментально определен. На рис. 5 показаны выводимые при моделировании изображения разреза $j = 50$ исследуемого фрагмента при $n = 5$ и при $n = 20$. Хорошо видно, что при $n = 5$ поверхность воды не успевает полностью сгладиться, а при $n = 20$ условие достаточно хорошего растекания выполнено. Этот параметр оказывает существенное влияние на время моделирования. Поэтому следует стремиться к тому, чтобы его величина была как можно меньше. Но, с другой стороны, не следует брать его слишком малым, так как это может привести к искажению результата моделирования. Аналитически рассчитать значение n невозможно, так как оно зависит от морфологии пористого материала. Поэтому, единственно приемлемым способом его определения является подбор путем моделирования.

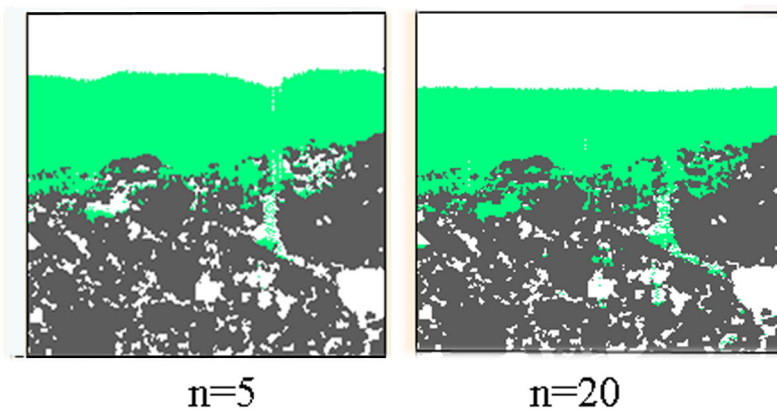


Рис. 5. Вид верхней части фрагмента образца в разрезе при $T = 1000$ при разных коэффициентах n .

2) *Возможный диапазон значений вероятности применения оператора высыхания* при моделировании процесса увлажнения с учетом испарения влаги. Хотя скорость высыхания, наверное, может быть оценена на основе физических соображений, рассчитать модельную вероятность для конкретной модели не представляется возможным. Поэтому её также необходимо определять путем проведения вычислительных экспериментов. Результаты вычислений показаны на рис.6 в виде зависимости количества влаги в порах от времени при увлажнении при разных интенсивностях испарения. Интенсивность испарения выражается в значении вероятности p_d . Из рис. 6 видно, что даже при $p_d = 0,01$ процесс увлажнения быстро заканчивается.

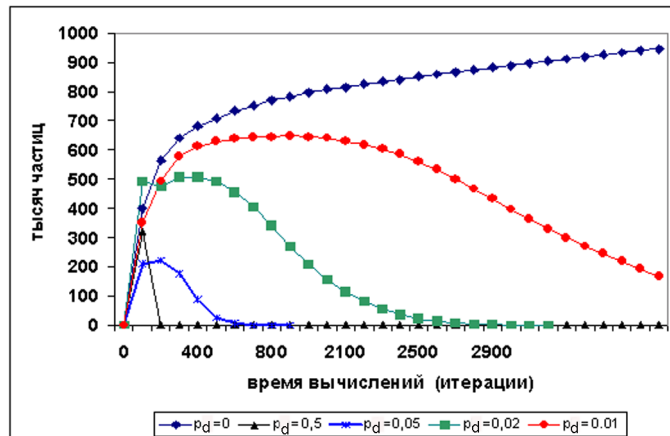


Рис. 6. Зависимость количества влаги, проникшей в почву, от времени при разных значениях интенсивности испарения

5. Результаты параллельной реализации алгоритма моделирования

Предлагаемый здесь алгоритм имеет архитектуру, которая предопределяет способ размещения обрабатываемых данных по процессорам для параллельной реализации. Конвекция, направленная сверху вниз по оси k , задает способ разрезания области вычислений плоскостями параллельными этой оси так, чтобы весь объем клеточного автомата был разделен на n частей: *доменов*. Каждый домен обрабатывается своим процессом. Межпроцессные

обмены происходят через плоскости раздела по горизонтальным направлениям. Известная проблема распараллеливания асинхронных взаимодействий, состоящая в том, что передача новых значений состояний граничных клеток должна производиться немедленно после изменения их состояний, чтобы не нарушить условия корректности (7), решается путем преобразования асинхронного режима в блочно-синхронный [11].

Процедура такого преобразования состоит в следующем.

1) Каждая k -ая плоскость клеточного массива подвергается разбиению на $|T| = 9$ непересекающихся подмножеств таким образом, чтобы согласно условию (7), соседства входящих в них клеток не пересекались.

2) На каждой итерации диффузионный оператор Θ_D применяется 9 раз подряд (за 9 стадий), каждый раз к одному из подмножеств.

3) Обмен граничными состояниями между доменами производится после каждой стадии синхронно.

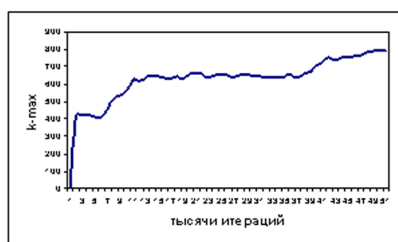


Рис. 7. Глубина проникания влаги от времени при отсутствии испарения и гидрофильных включений.

состоит из трех частей:

1) считывание исходного цифрового представления образца исследуемого материала и разделение его на домены;

2) выполнение $T = 50000$ итераций оператора Θ (10) с выводом через каждые 1000 итераций достигнутой влажной глубины (рис.7) без учета испарения и гидрофильности;

3) выполнение начальных $T = 100$ и $T = 1000$ итераций проникания влаги в почву с учетом испарения и гидрофильности (рис.8).

Реализация параллельного алгоритма с блочно-синхронным режимом выполнена на кластере НКС-30Т Сибирского суперкомпьютерного центра с использованием библиотеки MPI. Клеточный массив размером $700 \times 700 \times 1480$ разделен на 14 доменов, каждый размером $350 \times 100 \times 1480$, размещенных на двух восьмиядерных узлах Nehalem E5540 (2.53 GHz) кластера.

Были приняты следующие начальные условия: в почве поры пусты, на поверхности находится определенное количество воды. Граничные условия по осям i и j периодические. Программа

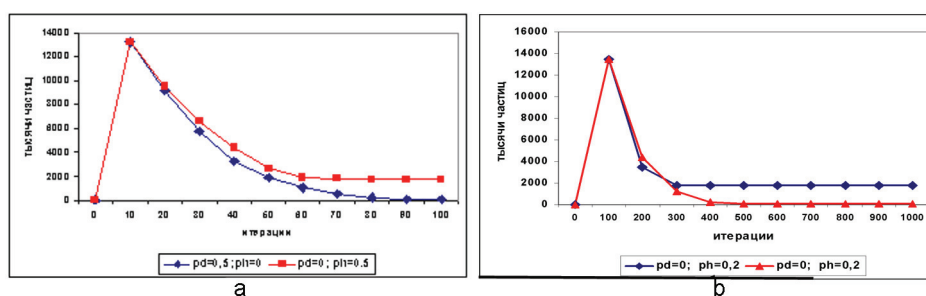


Рис. 8. Результаты моделирования увлажнения образца почвы при разных интенсивностях гидрофильности и испарения: а) в самом начале процесса до $T = 100$ итераций, и б) до $T = 1000$ итераций

В таблице 1 даны максимальные глубины проникания влаги для всех исследуемых случаев.

Анализ результатов показывает, что

1) скорость проникания влаги в почву резко уменьшается со временем (рис.7),

2) испарение влаги как с поверхности, так и из слоев почвы существенно влияет на

Таблица 1. Максимальная глубина проникания влаги в почву при разных интенсивностях испарения и гидрофильности

$T = 50000$	$T = 1000$		$T = 100$	
$p_d = 0, p_h = 0$	$p_d = 0, 2, p_h = 0$	$p_d = 0, p_h = 0, 2$	$p_d = 0, 5, p_h = 0$	$p_d = 0, p_h = 0.5$
798	218	175	206	173

возможность увлажнения,

3) наличие в почве гидрофильных включений может не допустить влагу на нужную глубину.

6. Заключение

Предложенная конвекционно-диффузионная КА-модель прохождения жидкости через пористый материал отличается тем, что в ней конвекционная и диффузионная составляющие разделены как по времени (на каждой итерации выполняется их суперпозиция), так и по пространственным направлениям. Последнее обстоятельство существенно упрощает распараллеливание вычислений, поскольку позволяет свести асинхронные обмены данными к двумерному случаю. Вероятностный характер представления движений влаги в порах позволяет учитывать разную природу взаимодействия влаги со стенками: прилипание частиц влаги к стенкам и даже разбухание стенок от длительного соседства с водой. Результаты тестирования на примере увлажнения и высыхания почвы, заданной ее томографическим представлением, показали качественно соответствие с тем, что должно быть в природе. Для получения количественных характеристик не хватает коэффициента масштабирования времени, т.е. реального времени, соответствующего одной модельной итерации. Этот коэффициент зависит от материала и может быть получен только путем сравнения результатов моделирования с натурными испытаниями этой же самой почвы.

Литература

1. О.Л.Бандман. Клеточно-автоматный метод исследования свойств пористых сред // Сиб.ЖВМ. 2010. -Том 13, № 1. С. 1–13.
2. L.M.Keller, et al., 3D geometry and topology of pore pathways in Opalinus clay: Implications for mass transport //Applied Clay Science. 2011. Vol. 52. P. 85–95.
3. Rothman B.H., Zaleski S. Lattice-Gas Cellular Automata. Simple Models of Complex Hydrodynamics. London: Cambridge Univ. Press, 1997. 480 p.
4. Hidemitsu Hayashi. Lattice Boltzmann Method and its Application to Flow Analysis in Porous Media //R&D Review of Toyota CRDL. 2007. Vol. 38, N 1. P. 17–25.
5. Complex Systems by Cellular Automata. Understanding complex Systems (A.G.Hoekstra et al., eds). Berlin: Springer, 2010. 450 p.
6. О.Л.Бандман. Клеточно-автоматные модели пространственной динамики // Системная информатика: Сб.научн. тр. / ИСИ СО РАН. Новосибирск: СО РАН, 2006. Вып. 10. С. 58–16.
7. Frish U., Hasslacher B., Pomeau Y. Lattice-gas Automata for Navier-Stokes equation // Physical Review Letter, 1986. Vol. 56. P. 1505-1508.

8. M.Sahimi. Flow phenomena in rocks: from continuum models to fractals, percolation, cellular automata, and simulation annealing // Review in Modern Physics, 1993. Vol. 65, N 4. P. 1393–1534.
9. Domain Specific Language and Translator for Cellular Automata Models of Physico-Chemical Processes // Proceedings of PaCT-2011, Lecture Notes in Computer Science 6873, 2011. Berlin: Springer, P. 172–177.
10. Jansen A.P.J. An Introduction to Monte-Carlo Simulation of Surface Reactions [arXiv:cond-mat/0303028v1\[stst-mech\]](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0303028v1). 2003. 51 p.
11. Bandman O. Parallel Simulation of Asynchronous Cellular Automata Evolution // Proceedings of ACRI-2006, Lecture Notes in Computer Science 4173, 2006. Berlin: Springer. P. 41–48.
12. Ачасова С.М., Бандман О.Л. Корректность параллельных процессов. Новосибирск: Наука. 1999. 280 с.
13. Калгин К.В. Параллельная реализация асинхронных клеточных автоматов на 32-ядерной вычислительной системе. // Сиб. журн. вычисл. матем. 2012, № 1. С. 55–63.
14. О.Л.Бандман. Методы композиции клеточных автоматов для моделирования пространственной динамики. Вестник Томского государственного университета. № 9(1). С.183–193.
15. Toffoli T., and Margolus N. Cellular Automata Machines: A new Environment for Modeling. USA: MIT Press, 1987. 297 p.
16. A.Ramirez, D.E.Jaramillo. Porous media generated by using an immiscible Lattice-Gas model // Computational Material Science. Elsevier (in press)
17. О.Л.Бандман. Инварианты клеточно-автоматных моделей реакционно-диффузионных процессов // Прикладная дискретная математика, 2012. N 3. С. 55–64.