

ресуют в первую очередь, однако в случае асимметрии спектральных линий их прямое определение становится невозможным. Асимметричные полосы представляются в виде суммы нескольких функций, на этапе разделения трактуемых как отдельные спектральные линии. Затем производится объединение нужных полос, выбираемых исходя из общего вида спектральной кривой с учетом уже известных сведений о веществе и условиях эксперимента. Искомые характеристики для объединенных линий находятся из соответствующих моментов.

По итогам работы можно сделать следующие выводы:

- Создана компьютеризированная автоматическая система регистрации инфракрасных спектров поглощения на основе спектрофотометра SPECORD-75IR.
- Разработаны программы для первичной обработки сигнала и расчета спектральных моментов, а также программа автоматического деления спектральных полос, адаптированные для работы совместно со спектрофотометром SPECORD-75IR.
- Данная система обеспечивает автоматическую регистрацию спектрограммы и приемлемое время ее обработки. От начала регистрации до получения выходных данных проходит порядка 15 минут (10 из них занимает измерение), в то время как при ручной обработке требуется нескольких часов. При этом какие-либо изменения в конструкцию самого спектрофотометра не вносились.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Тарасов К. И. Спектральные приборы. Л., 1968.
2. Большаков В. Д. Теория ошибок наблюдений. М., 1983.
3. Лукьянец В. М. Программы обработки спектроскопических измерений на ЭВМ «Наири-К». Львов, 1980.
4. Терушкин Б. А. Оптимизация спектральных методов определения термодинамических параметров равновесия и спектров участвующих в них форм: Дис. ... канд. ф.-м. наук. Л., 1983.
5. Зайдель А. Н., Островская Г. В., Островский Ю. И. Техника и практика спектроскопии. М., 1976.
6. Казаченко Л. П. Молекулярная спектроскопия жидкостей. Минск, 1978.
7. Бахвалов Н. С., Лапин А. В., Чижонков Е. В. Численные методы в задачах и упражнениях. М., 2000.
8. Бахвалов Н. С. Численные методы. М., 1973.
9. Щепкин Д. И. Ангармонические эффекты в спектрах комплексов с водородной связью. Л., 1987. Деп. ВИНТИ №7511-В87.

*Павел Иванович РЮМИН —  
аспирант кафедры моделирования  
физических процессов и систем  
физического факультета*

УДК 519.7

### **ТРЕХМЕРНОЕ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ С ПОМОЩЬЮ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ**

*АННОТАЦИЯ. Построена трехмерная модель течения жидкости на основе клеточных автоматов. Рассмотрен вариант взаимодействия частиц. Предложено описание некоторых граничных условий.*

*Three-dimensional fluid flow model has been built. We consider a variant of particles interaction and some boundary conditions.*

В настоящее время большое внимание уделяется моделированию гидродинамических задач со сложными граничными условиями. При использовании разностных схем для таких задач трудно добиться сходимости и устойчивости. С появлением специализированных компьютеров, для моделирования используются клеточные автоматы [1].

Существующие модели решетчатого газа на макроскопическом уровне приближенно или точно описывают плоские течения жидкости [1]. Одна из них — FHP газ, которая в точности удовлетворяет уравнению Навье–Р.Р.Стокса. Модель представляет собой гексагональную решетку и содержит в каждом узле до шести частиц, по одной на каждое направление. Преимущество такой решетки перед другими в том, что на ней полностью отсутствует ориентационный эффект. Столкновение частиц в узле реализуется поворотом всех частиц. В настоящей работе предлагаем обобщить эту модель на трехмерный случай и определить для нее некоторые граничные условия.

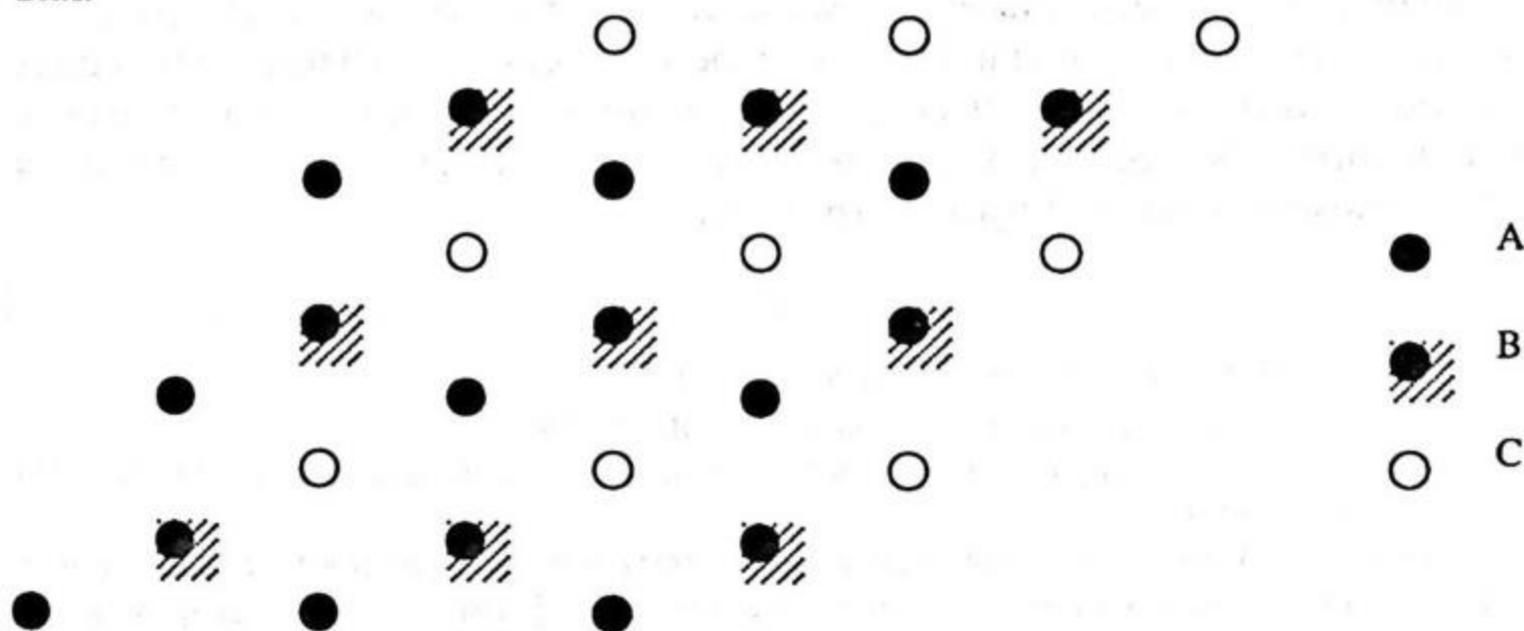


Рис. 1. Ориентация слоев в плотных упаковках

Построим трехмерную решетку по аналогии с плоской гексагональной. Расположение узлов будет соответствовать плотной упаковке. Существует два основных способа плотной упаковки [2]: кубическая и гексагональная. В первом случае получим последовательность слоев ABCABC, во втором — АВАВАВ (рис. 1). Для любой плотной упаковки каждый узел окружен двенадцатью ближайшими равноотстоящими от него узлами.

Для построения трехмерной модели газа выберем кубическую плотную упаковку. Расположим координатные оси вдоль рядов узлов так, чтобы углы между осями были равны  $60^\circ$  (рис. 2)

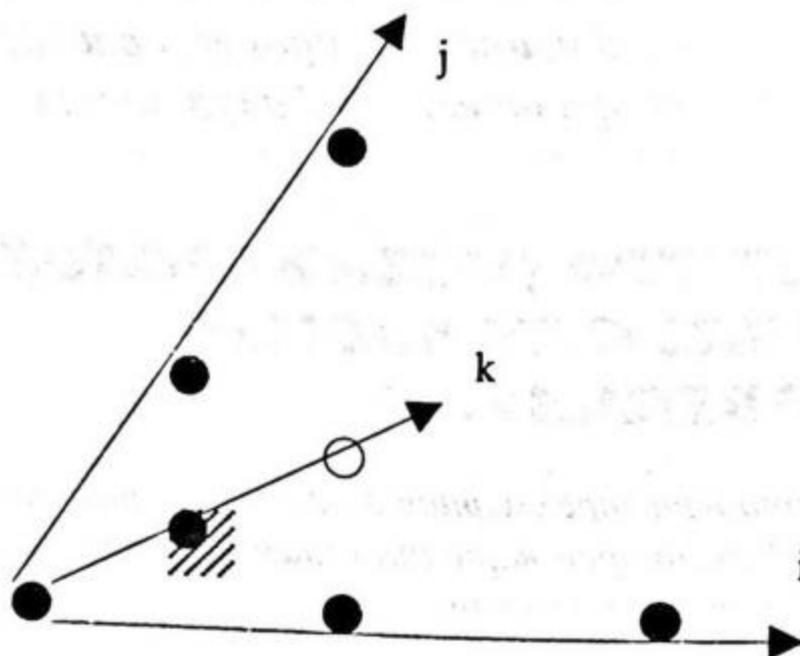


Рис. 2. Координатные оси

Сопоставим каждому узлу тройку индексов в соответствии с принятой системой координат. Координаты ближайших соседей узла  $(i, j, k)$  равны:  $(i+1, j, k)$ ,  $(i, j+1, k)$ ,  $(i-1, j+1, k)$ ,  $(i-1, j, k)$ ,  $(i, j-1, k)$ ,  $(i+1, j-1, k)$ ,  $(i+1, j, k-1)$ ,  $(i, j+1, k-1)$ ,  $(i, j, k-1)$ ,  $(i, j, k+1)$ ,  $(i-1, j, k+1)$ ,  $(i, j-1, k+1)$ . Первые шесть лежат в одном слое с рассматриваемой позицией, следующие три — в прилегающем сверху слое, последние — в прилегающем снизу слое (рис. 3).

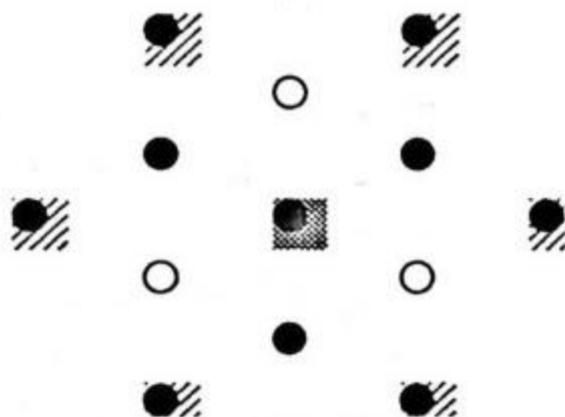


Рис. 3. Расположение ближайших соседей

На такой решетке в каждом узле возможны 12 направлений движения до каждого ближайшего соседа. Узел может содержать по одной частице на каждое направление. При отсутствии столкновений частицы движутся прямолинейно, переходя от узла к узлу за один временной шаг.

Столкновение частиц должно удовлетворять законам сохранения энергии и импульса. Будем считать столкновением ситуацию, когда импульс в узле равен нулю. При возникновении столкновения частицы разлетаются под некоторым углом к своим исходным направлениям. Таким образом, новые направления получаются из исходных путем поворота частиц вокруг некоторой оси. Каждый шаг по времени состоит из сдвига частиц вдоль их направлений и выполнения поворота при столкновении, которые можно совместить в одну операцию [1] — «сдвиг-поворот». На двухмерной решетке возможна одна ось, на трехмерной ортогональной [3] — три оси, в текущей модели возможны четыре оси [2]. Повороты вокруг каждой оси составят  $120^\circ$  по часовой стрелке или против. Всего будет 8 вариантов поворота частиц в узле, каждый вариант задает фазу временного шага. Для достижения однородности необходимо выбрать конкретную последовательность фаз и на последовательных шагах по времени циклически ее повторять.

Моделирование непроницаемых границ выполняется следующим образом. Часть узлов отмечаются как стенки. Частица, движущаяся по направлению к стенке, остается в исходной позиции и меняет направление движения на противоположное. Для повышения эффективности реализации определим эквивалентный способ отражения частиц от твердой стенки. Если около стенки оказывается частица с импульсом, направленным на стенку, то внутри стенки создается ее зеркальное отображение — частица с противоположно направленным импульсом. В следующий момент времени исходная частица уничтожается, а созданная выходит из стенки и заменяет собой первую. Создание зеркальных отображений производится перед операцией «сдвиг-поворот».

Построенную модель можно применить не только для решения гидродинамических задач. Для получения модели, описывающей диффузию, необходимо для каждого узла случайно выбирать фазу на каждом временном шаге.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Тоффоли Т., Марголус Н. Машины клеточных автоматов. М., 1991. 280с.
2. Уэллс А. Ф. Строение неорганических веществ. М., 1948. 690 с.
3. Малинецкий Г. Г., Степанцов М. Е. // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1998. Т. 38. № 6. С. 1017-1020.