

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI
BOLOGNA

SCUOLA DI SCIENZE

Corso di Laurea Magistrale in Informatica

**Lattice Gas Automata:
i modelli HPP e FHP a confronto**

Presentata da:

Natale Vadalà

Matricola:0000819531

Anno Accademico 2016 - 2017

Abstract

Il presente progetto è uno studio sui *Lattice Gas Automata*, automi cellulari basati su un reticolo, utili poichè attraverso la simulazione attraverso di essi si possono derivare le equazioni di *Navier-Stokes* sul comportamento dei fluidi. In particolare, sono analizzati i due modelli più comuni per LGA: il modello HPP, il primo ad essere stato formalizzato storicamente, e il modello FHP, evoluzione del precedente, con evidenti differenze nella simulazione (maggiore accuratezza e realistica). Vengono fornite, inoltre, le implementazioni prodotte dei predetti modelli (HPP, FHP) per *NetLogo*, le stesse su cui sono state testate le simulazioni.

Keyword: hpp, fhp, lga, cellular automata, lattice, netlogo

Indice

| | |
|--|-----------|
| Abstract | i |
| 1 Introduzione | 1 |
| 1.1 Cellular automata e Lattice Gas | 2 |
| 2 Stato dell'arte | 3 |
| 2.1 Lattice Gas Automata | 3 |
| 2.2 HPP model | 3 |
| 2.3 FHP model | 4 |
| 2.3.1 FHP I | 6 |
| 2.3.2 FHP II | 6 |
| 2.3.3 FHP III | 6 |
| 3 Modello FHP: un' estensione per NetLogo | 9 |
| 3.1 Progettazione | 10 |
| 3.2 Realizzazione | 11 |
| 4 Simulazioni considerate | 15 |
| 4.1 Chaos | 15 |
| 4.2 Materiali porosi | 16 |
| 4.3 Aerodinamica | 17 |
| Conclusioni | 19 |
| Bibliografia | 21 |

Elenco delle figure

| | | |
|-----|--|----|
| 2.1 | Modello HPP su NetLogo | 4 |
| 2.2 | Collisione HPP | 5 |
| 2.3 | Modello FHP su NetLogo | 7 |
| 2.4 | Collisioni FHP | 7 |
| 3.1 | Screenshot HPP | 12 |
| 3.2 | Screenshot FHP | 12 |
| 3.3 | Confronto collisioni fra i due modelli | 12 |
| 3.4 | Confronto chaos fra i due modelli | 13 |
| 3.5 | Screenshot di particelle su ostacoli e materiali porosi. | 13 |
| 4.1 | Screenshot del modello FHP su materiale poroso regolare . . . | 16 |
| 4.2 | Screenshot del modello FHP su materiale poroso regolare . . . | 16 |
| 4.3 | Screenshot del modello FHP su materiale poroso regolare . . . | 16 |
| 4.4 | Screenshot del modello FHP su materiale poroso casuale . . . | 17 |
| 4.5 | Screenshot del modello FHP su materiale poroso reale (spugna) . | 17 |
| 4.6 | Screenshot del modello FHP con ostacolo al centro | 17 |
| 4.7 | Screenshot del modello FHP con ostacolo in basso | 18 |
| 4.8 | Screenshot del modello FHP popolando il reticolo dal basso . . | 18 |

Capitolo 1

Introduzione

Il presente progetto consiste nello studio e nella simulazione di *Cellular Automata* (automi cellulari, CA), con particolare enfasi sui *Lattice Gas Automata*, utilizzati per simulare il flusso dei fluidi.

Con questo lavoro si è voluto fornire l'implementazione di due modelli per poter simulare vari fenomeni riconducibili alle leggi dei fluidi.

Tale implementazioni sono “interessanti” poichè partendo da un modello chiamato HPP (presente in maniera modestissima su NetLogo¹) pensato negli anni '70 per la rappresentazione di *Lattice Gas Automata*, si è arrivati a sviluppare la naturale estensione (formalizzata 10 anni dopo, chiamata FHP) che esso meritava: ciò per compensare all'assenza, su *NetLogo* e sulle sue librerie di modelli online, di completezza in tale ambito. Proprio per questo motivo il presente lavoro non vuole essere tanto uno studio su un particolare fenomeno, quanto una ricerca sui *Lattice Gas Automata*, i modelli di rappresentazione, la loro implementazione e, ovviamente, anche la verifica di essi con qualche fenomeno nell'ambito dei fluidi, quali la percolazione attraverso materiali porosi, il comportamento di particelle nel vuoto e con ostacoli, la propagazione di particelle per generare situazioni di chaos. Inoltre può esse-

¹NetLogo è un linguaggio di programmazione agent-based oltre che un IDE (Integrated Development Environment), il quale fornisce un ambiente completo per lo sviluppo NetLogo, dall'implementazione del modello simulativo alla creazione dell'interfaccia grafica di supporto alla simulazione.

re di rilievo poter mettere a confronto i due modelli attraverso il medesimo software.

1.1 Cellular automata e Lattice Gas

I CA sono dei modelli matematici, costituiti da una griglia composta da celle, utilizzati per descrivere l'evoluzione di sistemi complessi discreti. Ad ogni istante t lo stato di ogni cella può cambiare rispetto allo stato $t-1$ (tempo discreto), in base alle regole definite per l'automa.

Detto questo, possiamo ora parlare dei *Lattice Gas Automata*. Essi sono un tipo di CA basati su un reticolo (Lattice), e la loro importanza può essere considerata solo se diciamo che da essi possono essere derivate le equazioni di *Navier-Stokes*, “un sistema di equazioni differenziali alle derivate parziali che descrivono il comportamento di un fluido dal punto di vista macroscopico. L'ipotesi di base è che il fluido possa essere modellato come un continuo deformabile. Esse presuppongono perciò la continuità del fluido in esame, ovverosia il sistema perde di validità nello studio di un gas rarefatto.”² Fondamentalmente queste equazioni si basano su tre principi fisici (dato il fluido come continuo indeformabile):

1. Principio di conservazione della massa;
2. Legge di conservazione della quantità di moto;
3. Legge di conservazione dell'energia.

In effetti, ciò che viene rappresentato dai *Lattice Gas Automata* è la ripetizione di due procedure: una di propagazione, in cui ogni particella indica la locazione in cui si sposterà al prossimo istante $t+1$, ed una di collisione, che prevede la gestione di situazioni in cui più particelle arrivino sulla stessa cella, assegnando loro una nuova locazione per il prossimo step e, nello stesso tempo, rispettando i principi pocanzi citati.

²https://it.wikipedia.org/wiki/Equazioni_di_Navier-Stokes

Capitolo 2

Stato dell'arte

2.1 Lattice Gas Automata

I LGA, come già detto, sono un modello semplificato di dinamiche molecolari fittizie nel quale spazio, tempo, e velocità delle particelle sono tutti valori discreti. Il primo LGA è stato realizzato da *L. P. •* e *J. Swift* prima degli anni '70 per rappresentare le onde sonore. [1] Da allora, si sono sviluppati più modelli, via via più complessi e precisi, per rappresentare i fluidi attraverso automi cellulari e rendere questa rappresentazione, oltre che graficamente gradevole, anche scientificamente (matematicamente-fisicamente) rilevante, e cioè raffinando le regole che governano questi automi.

2.2 HPP model

Il modello HPP (formalizzato da *Hardy, Pomeau* e de *Pazzis*, da cui il nome), descritto tra il 1973 e il 1976, è il primo modello di LGA. Consiste in una griglia a base quadrata, in cui in ogni cella vi è al massimo una particella, a cui è associata una direzione (N, S, E, W).

L'interesse riservato a tale modello è più storico che altro, in quanto esso, a livello macroscopico, non raggiunge nemmeno l'equazione di *Navier-Stokes*. Oltre alle classiche due fasi di propagazione e collisione, che sono alla base

della dinamica dei fluidi, possiamo notare come nel modello HPP governino delle semplici regole di movimento:

- Ogni cella si sposta sulla cella vicina fino ad una collisione;
- Una collisione frontale di due particelle le ruota entrambe di 90° ;
- Una collisione non frontale è irrilevante;
- Una collisione con il bordo del reticolo ruota la particella di 180° ;

Viene definito anisotropico, poichè non è simmetrico ma strettamente dipendente dalla direzione delle collisioni. Inoltre è un modello deterministico.

Tramite l'evoluzione dettata dalle regole del modello HPP, sia la massa della particella, che il momento totale, vengono conservati ma, nonostante ciò, tale modello non obbedisce, a livello macroscopico, all'equazione che regola l'idrodinamica (*Navier-Stokes*). Questo risultato è imputabile all'insufficiente simmetria rotazionale della griglia, condizione che risulta essere necessaria per la simulazione del moto dei fluidi.

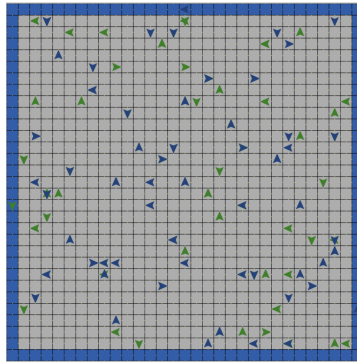


Figura 2.1: Modello HPP su NetLogo

2.3 FHP model

Nel 1986 [2], *Frish*, *Hasslacher* e lo stesso *Pomeau* hanno pubblicato un'evoluzione del precedente modello, che essendo anisotropico è affetto da



Figura 2.2: Collisione HPP

“invarianza rotazionale”, influenzando sulla realistica e veridicità del modello di calcolo.

Il nuovo modello, FHP, è basato su un reticolo a base triangolare, quindi ogni particella ha 6 celle vicine (non più 4).

È proprio questa struttura che modifica sostanzialmente quello precedentemente considerato, avendo 2 effetti collaterali:

1. Passaggio da un modello deterministico ad uno parzialmente deterministico, dovuto al fatto che ad ogni collisione la rotazione può avvenire in senso orario o antiorario. Questa scelta può essere fatta deterministicamente, non deterministicamente o pseudo-casualmente, valutando altri parametri del sistema;
2. Passaggio da un modello anisotropico ad un isotropico, poichè governato dalla simmetria che caratterizza le collisioni.

Inoltre, i vettori che collegano i nodi hanno tutti lunghezza unitaria

$$|c_i| = \sum_i \left(\cos \frac{\pi}{3} i, \sin \frac{\pi}{3} i \right) \quad (2.1)$$

per $i = 1 \dots 6$

Prima di spiegare le regole di propagazione e collisione, bisogna dire che esistono più varianti di tale modello.

2.3.1 FHP I

Il più semplice, considera solo collisioni tra due o tre particelle. Le regole di movimento delle particelle sono:

- Ogni particella si sposta sulla cella vicina fino ad una collisione;
- Una collisione frontale di due particelle le ruota entrambe di 60° ;
- Una collisione frontale di due particelle ed una terza ruota le prime di 60° , il resto invariato ;
- Una collisione frontale (equidistante) di tre particelle ruota tutte di 60° ;
- Una collisione con il bordo del reticolo ruota la particella di 60° ;

2.3.2 FHP II

In aggiunta al FHP I, considera anche particelle a velocità 0 (*rest particles*) Si aggiungono ora:

- Una collisione con una *rest particle* ruota questa verso una direzione, la particella collidente in quella opposta (scarto di 60°);
- Una collisione non frontale di due particelle ruota una di 60° , mentre trasforma l'altra in *rest particle*.

2.3.3 FHP III

Il più completo, satura le collisioni del FHP II prevedendo una particella in più nelle collisioni con quelle elencate prima.

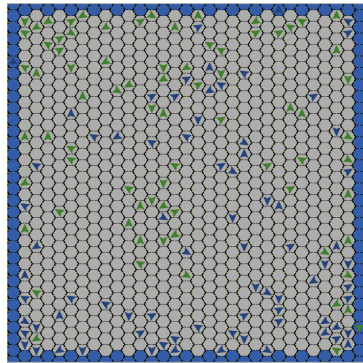


Figura 2.3: Modello FHP su NetLogo

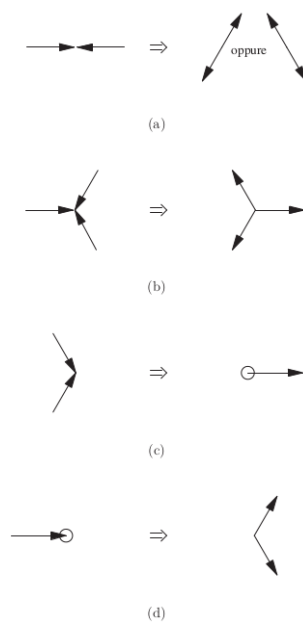


Figura 2.4: Collisioni FHP

Capitolo 3

Modello FHP: un' estensione per NetLogo

Il processo di sviluppo di un'estensione per *NetLogo*[3] parte, ovviamente, dalla presa visione dei modelli che *NetLogo* offre inerenti al nostro caso.

Per quanto riguarda i LGA, possiamo dire che una prima idea è stata abbozzata grazie al modello *LatticeGasAutomaton* [5], un modello HPP di LGA. Lo stesso suggerisce all'utente, come potenziale sviluppo futuro, l'implementazione di un LGA basato su FHP. È proprio da qui che nasce l'esigenza, in primis, e la curiosità poi, di seguire tale suggerimento. Inoltre, il modello citato pocanzi è stato preso solamente come “linea guida”, poichè sono stati implementati ex novo sia quello HPP che FHP, cercando di trovare miglioramenti grafici, oltre che *features* in modo che le simulazioni possano avere un senso scientifico o anche solo maggiormente esplicativo e descrittivo del comportamento di particelle.

A livello implementativo, il codice dei due ha la stessa struttura, quindi per semplicità verrà trattato solo il caso FHP.

3.1 Progettazione

La fase di progettazione è iniziata nel mese di Giugno 2017, è stata preceduta dall'analisi del preesistente modello, già citato. Esso applica la logica HPP e non costruisce nessun reticolo (tutto su *patches*): la logica, infatti, viene calcolata semplicemente discriminando i quadrati 2x2 pari da quelli dispari e applicandovi una regola di *swap* alle celle in base alla posizione che occupano all'interno di questi quadrati.

Così, mossi dall'esigenza di avere un reticolo più complesso rispetto a quello precedente (e anche un potere di manipolazione maggiore rispetto a lavorare solo su *patches*), si è iniziato creando un reticolo a base triangolare di *turtles*, chiamate *nodes*, a base esagonale. Questo assetto ha portato a dover fare attenzione nella manipolazione delle coordinate, non più tutte intere, del nostro mondo.

In seguito si è deciso di creare delle *turtles*, chiamate *walkers*, che sono le particelle nel modello considerato. Tali *walkers* si spostano sui *nodes*, ragion per cui si è deciso che ognuno di essi memorizzi come *agent-variable* sia il node su cui si trova (fondamentalmente la cella), sia la posizione prima dell'ultimo step.

Il core del modello sta nell'implementazione della **do-rule**, procedura per aggiornare la posizione di ogni *walker*, che valuta la presenza di conflitti e si comporta adeguatamente: nel caso la direzione del *walker* gli permetta di continuare senza conflitti, allora la posizione assunta è quella del vicino raggiunto seguendo la propria direzione, altrimenti viene ruotata la particella (*walker*) di 60°.

In termini di complessità, poichè sarebbe stato troppo pesante valutare a priori la direzione che sarà presa da ogni particella all'istante di tempo $t+1$, la procedura di conflitto scatta quando due o più particelle sono sulla stessa cella, non prima che queste collidano (andando contro il principio secondo cui ci deve essere solo una particella per cella, ma ciò avviene solo per un adattamento implementativo, poichè comunque il parallelismo su *NetLogo* è emulato e una particella viene sempre valutata prima di un'altra).

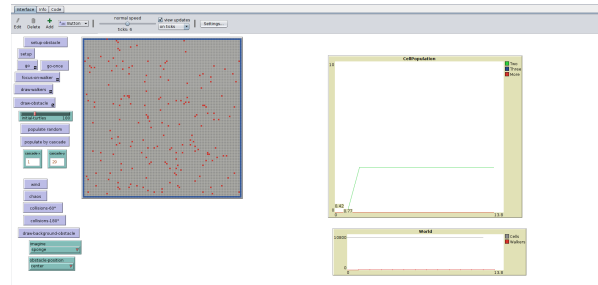
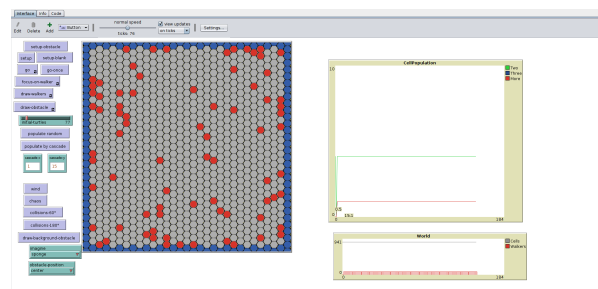
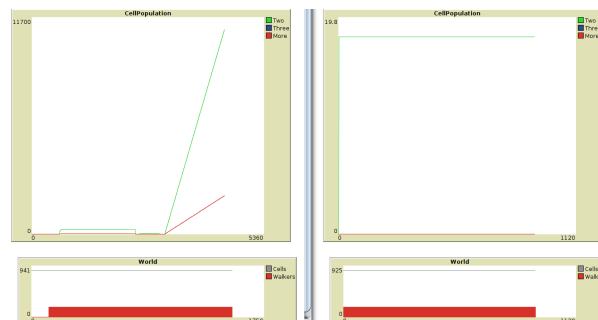
3.2 Realizzazione

Entrambi i modelli realizzati sono stati sviluppati su *NetLogo* 6.0. Il mondo è costituito da:

- Nodes, (*turtles*) che compongono la griglia
- Walkers, (*turtles*) che costituiscono le particelle

Inoltre vi sono i grafici denominati *World* e *CellCollision*, che rappresentano, rispettivamente, il numero di particelle e di celle nel mondo, e il numero di collisioni nel nostro modello all'istante t. Le *features* implementate sono:

- Popolare il sistema
- Popolare il sistema da un punto
- Simulare chaos
- Colorare una particella
- Popolare “a mano libera”
- Settare ostacoli “a mano libera”
- Resettare l'ostacolo
- Caricare ostacoli per simulazione di particelle in materiali porosi o su veicoli in sistemi aerodinamici.

Figura 3.1: *Screenshot* del modello HPPFigura 3.2: *Screenshot* del modello FHPFigura 3.3: *Screenshot* delle collisioni dei due modelli.

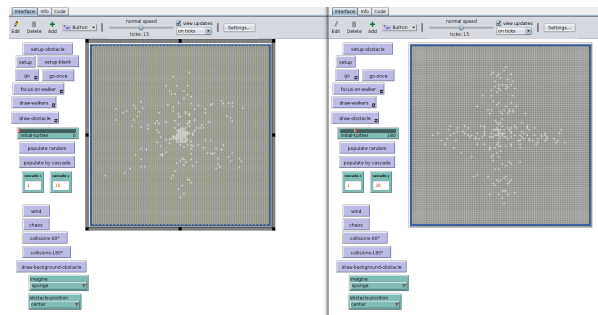


Figura 3.4: *Screenshot* del chaos dei due modelli.

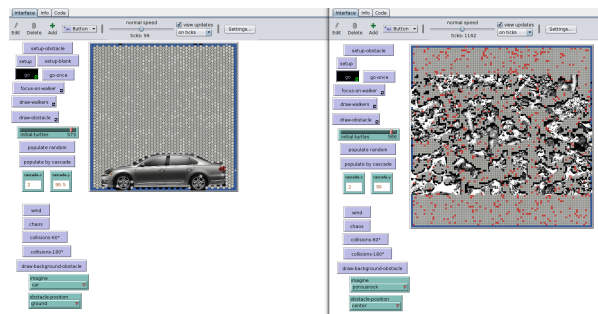


Figura 3.5: *Screenshot* di particelle su ostacoli e materiali porosi.

Capitolo 4

Simulazioni considerate

Dopo aver implementato i modelli, è stato interessante mettere a confronto e, per quanto possibile, lanciali in parallelo sullo stesso problema per studiarne il comportamento o anche solo verificare la reale superiorità del modello FHP.

4.1 Chaos

Per quanto riguarda il riguarda il chaos , si è voluto mettere a confronto entrambi i modelli sulla propapagazione di fluido partendo da una situazione stazionaria per arrivare ad una di chaos. L'idea della simulazione è partita da una pagina web ¹ ²che mostrava la simulazione di chaos su entrambi i modelli considerati partendo dal centro del reticolo verso l'esterno.

Inoltre è stata presa visione di ciò che è reperibile sull'argomento, sebbene molto tecnico. Tale studio è stato condotto sulla base di una pubblicazione su *Entropy and Chaos in a Lattice Gas Cellular Automata* [4], che tratta l'entropia in un modello leggermente differente, il D2Q9 (2 dimensioni e 9 velocità/direzioni).

¹<http://softology.com.au/tutorials/latticegas/hpplga.htm>

²<http://softology.com.au/tutorials/latticegas/fhplga.htm>

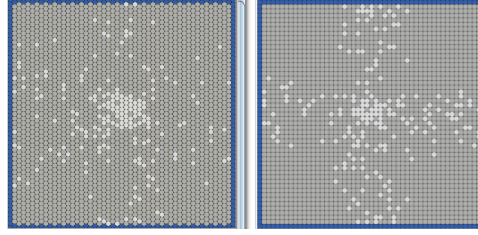


Figura 4.1: *Screenshot* del modello FHP su materiale poroso regolare

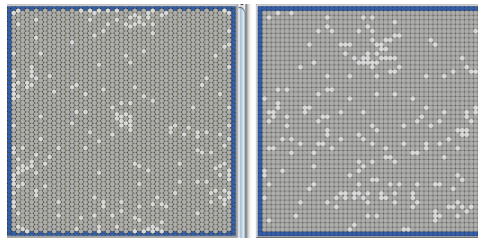


Figura 4.2: *Screenshot* del modello FHP su materiale poroso regolare

4.2 Materiali porosi

Partendo dalle conclusioni di uno studio di *Wells, Janecky e Travis* del 1991 [6], in cui si evinceva la buona resa del modello FHP a simulare un fluido in un materiale poroso, si è voluto creare una un ambiente per poter ripetere graficamente tali simulazioni su entrambi i modelli.

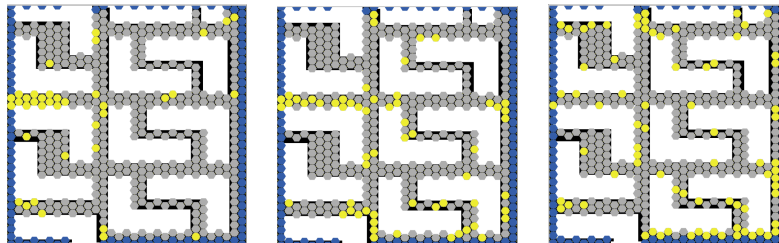


Figura 4.3: *Screenshot* del modello FHP su materiale poroso regolare

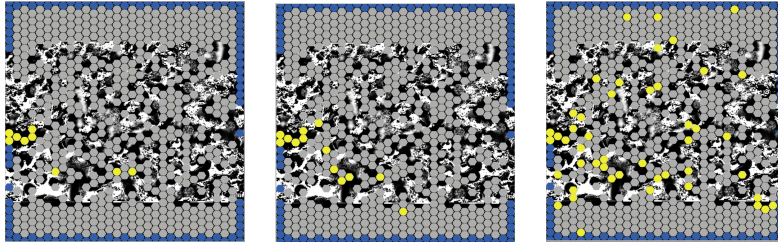


Figura 4.4: *Screenshot* del modello FHP su materiale poroso casuale

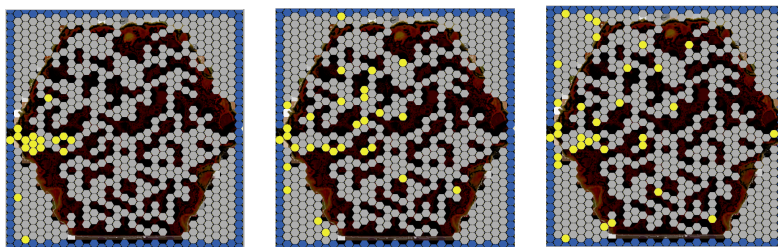


Figura 4.5: *Screenshot* del modello FHP su materiale poroso reale (spugna)

4.3 Aerodinamica

La simulazione nel campo dell'aerodinamica è stata condotta creando degli ostacoli con forme diverse da poter inserire nel mondo, così da poter verificare l'effettiva reattività dei modelli alle collisioni subentrate con l'inserimento di oggetti nel vuoto.

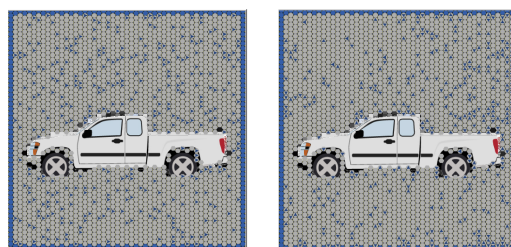


Figura 4.6: *Screenshot* del modello FHP con ostacolo al centro

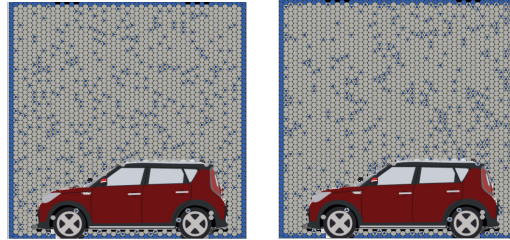


Figura 4.7: *Screenshot* del modello FHP con ostacolo in basso

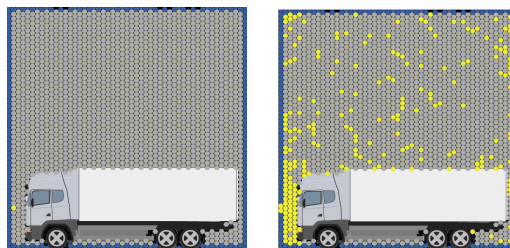


Figura 4.8: *Screenshot* del modello FHP popolando il reticolo dal basso

Conclusioni

Le varie simulazioni hanno portato a concludere, o meglio, a confermare, quanto dimostrato da [2] e [6]:

- Il modello FHP è ben più potente del precursore HPP;
- Il numero di collisioni è (ovviamente) più alto in simulazioni su un modello FHP;
- Nelle simulazioni relative ai materiali porosi si nota che in un modello FHP il fluido tende a visitare tutta la struttura del sistema, mentre in uno HPP si può vedere come l’“invarianza rotazionale” porti il sistema spesso a situazioni da “flipper” (stallo fra due pareti parallele che fanno ruotare continuamente la particella);
- Il modello FHP rende la simulazione di un fluido più realistica anche nella generazione di chaos, infatti le particelle tendono a schiacciarsi sui bordi del reticolo, a differenza del modello HPP in cui si nota la ripetizione di pattern (le particelle si propagano e si riincontrano);
- Per quanto riguarda l’aerodinamicità, il modello FHP sembra rappresentare abbastanza fedelmente ciò che accade nella realtà (ne è la prova che da questo si possono derivare le eq. di Navier-Stokes), mentre il modello antecedente risulta irrealistico in questa simulazione, motivato dal fatto che allo scontro con un ostacolo, una particella in questa simulazione si ruota di 180° (cosa che non accade in realtà e che falsifica il modello).

In conclusione, i modelli implementati su NetLogo sicuramente sono migliorabili, ma possono dare un'idea di come i due agiscono sugli LGA.

Si spera che per qualcuno in futuro possano essere utili e che possano essere usati come punto di partenza per simulazioni su LGA, visto che in precedenza il materiale implementativo (in NetLogo) in questo campo da cui attingere era veramente modesto.

Bibliografia

- [1] L. P. Kadanolf and J . Swift, Phys. Rev., 165 (1968) 310.
- [2] U. Frisch, B. Hasslacher, and Y. Pomeau, Phys. Rev. Lett., 56 (1986) 1505.
- [3] Wilensky, U. (1999). NetLogo. <http://ccl.northwestern.edu/netlogo/>. Center for Connected Learning and Computer-Based Modeling, Northwestern University, Evanston, IL.
- [4] F.Bagnoli, R. Rechtman, 2008, Entropy and Chaos in a Lattice Gas Cellular Automata, DOI:10.1007/978-3-540-79992-4_16
- [5] Wilensky, U. (2002). NetLogo Lattice Gas Automaton model. <http://ccl.northwestern.edu/netlogo/models/LatticeGasAutomaton>. Center for Connected Learning and Computer-Based Modeling, Northwestern University, Evanston, IL.
- [6] J.T.Well, D.R.Janecky, B.J.Travisc, A lattice gas automata model for heterogeneous chemical reactions at mineral surfaces and in pore networks, Physica D: Nonlinear Phenomena, Volume 47, Issues 1–2, 1 January 1991, Pages 115-123