
КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНЫЕ МОДЕЛИ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ДИНАМИКИ

О.Л. Бандман

В статье приводятся результаты исследований, проводимых в ИВиМГ СО РАН по клеточно-автоматному (КА) моделированию пространственной динамики. Основному содержанию предшествует подробный анализ состояния дел в этой новой области информатики. Затем вводится формальный аппарат представления КА-алгоритмов (Алгоритм Параллельных Подстановок) и рассматриваются изучаемые КА-модели и их применения. Подробно изложены методы композиции КА и рассмотрены вычислительные свойства КА-моделей. Изложение иллюстрируется примерами компьютерного КА-моделирования физических, химических и биологических процессов.

Ключевые слова. Клеточный автомат, мелкозернистый параллелизм, пространственная динамика, решеточный газ, диффузионно-реакционные процессы, диссипативные структуры.

1. КЛЕТОЧНЫЙ АВТОМАТ И МЕЛКОЗЕРНИСТЫЙ ПАРАЛЛЕЛИЗМ

1.1. Классический клеточный автомат

Клеточный автомат (КА) был предложен фон-Нейманом в середине прошлого века [1]. На основе этой модели подтверждалась мысль о том, что человек может создать устройство, обладающее присущими ему самому свойствами, в частности, способностью воспроизводить себе подобного. Поэтому КА долгое время рассматривался как модель самовоспроизведения и толковался как упрощенная модель некоторого биологического сообщества, состоящего из множества клеток. Каждой клетке ставится в соответствие конечный автомат, называемый *элементарным автоматом*, который может находиться в одном из двух состояний: 0 и 1 (черное или белое) и изменять это состояние $0 \rightarrow 1$ или $1 \rightarrow 0$ в зависимости от состояний клеток некоторого своего окружения, называемого

*Поддержано Программой фундаментальных исследований Президиума РАН №17-6 (2004г.)

соседством. Алгоритм вычисления следующего состояния в зависимости от состояний соседей (функция переходов элементарного автомата) у всех клеток одинаковый. Все клетки выполняют переход в новое состояние одновременно, т.е. синхронно и параллельно. При этом наблюдается изменение *глобальной* черно-белой картины распределения состояний по пространству КА. Такая картина называется *конфигурацией* КА.

В более строгом виде основные свойства КА формулируются в следующем виде [2].

- Дискретность пространства, времени и состояний.
- Однородность (все клетки организованы в регулярную пространственную структуру).
- Синхронный режим изменения состояний.
- Пространственная локальность (аргументами функции переходов каждого элементарного автомата являются состояния элементарных автоматов из его ограниченной окрестности).
- Временная локальность (аргументами функции переходов являются состояния соседних автоматов только на ограниченном числе предыдущих итераций).

Итеративная смена конфигурации при переходах всех элементарных состояний в новые состояния называется *эволюцией* КА. Эволюционируя КА моделирует пространственную динамику, которая может иметь завершение, повторяться периодически или изменяться хаотично. Исследования этой "модели мира" показали, что несмотря на простоту каждой клетки, их кооперативная работа моделирует очень сложные и разнообразные процессы, которые иногда невозможно (или по крайней мере, неизвестно как) описать другим способом. В таком понимании КА теперь называется *классическим КА*.

Первое время КА оставался объектом для игры ума. Сначала эта игра происходила на бумаге. Потом она была перенесена на компьютер. Самой известной из таких "игрушек" для начинающих программистов до сих пор является так называемая "Игра Жизнь" [3]. Клеточный автомат, клетки которого расположены в ячейках двумерной декартовой решетки и имеют только по восемь соседей, может иметь бесконечное множество эволюций, воспроизводящих разные картины: движение пули по какой-либо траектории, распространение волны, раскрутку спирали, рисовать причудливые орнаменты и т.д., то есть строить самые различные черно-белые меняющиеся во времени образы. Задача в этой игре состоит в том, чтобы найти такую начальную конфигурацию, при которой КА, эволюционировал бы желаемым образом. Все попытки решить эту задачу формально не увенчались успехом. Только опыт, навыки и терпение при испытаниях множества проб могут помочь в этом деле.

Когда начала бурно развиваться микроэлектроника (70-ые годы про-

шлого века) и появилась потребность в быстродействующих электронных схемах на многих элементарных автоматах, действующих параллельно, то КА приобрел важный практический смысл. Заложенные в его идее принципы параллельности и близкодействия межклеточных взаимодействий как нельзя лучше соответствуют требованиям технологии больших интегральных схем. Аппаратурная реализация КА помогала решить сразу две насущные проблемы: сокращение связей на кристалле и увеличение производительности. Это пробудило новую волну интереса и сильно продвинуло теорию КА: было предложено несколько модификаций [2,4,5] и формальных моделей КА [6–8], позволяющих разрабатывать параллельные алгоритмы и отображать их на схемотехнику СБИС [9,10]. В результате было создано множество параллельных высокопроизводительных устройств таких, как параллельные сумматоры, умножители, кодеры и декодеры, распознаватели сигналов и т.д.. Появились быстрые алгоритмы, ориентированные на воплощение в СБИС клеточной архитектуры. Некоторые из предложений нашли свое применение и получили долгую жизнь, другие не были реализованы из-за каких-то недостатков, но не погибли бесполезно, побудив развитие заложенных в них идей.

1.2. Клеточно-автоматная пространственная динамика

Новый всплеск интереса к КА был связан уже не с построением параллельных устройств, а с построением новых моделей вычислений [11, 29]. Это произошло в середине 80-х годов прошлого века, когда были предложены КА, эволюция которых моделирует процессы диффузии [7, 13, 14], разделения фаз [2, 13], реакционно-диффузионные процессы [15–17], знаменитую реакцию Белоусова-Жаботинского [19], движения солитонов [20], образование диссипативных структур [21, 22]. Переход от булевых пространств к привычным непрерывным пространственным функциям (макроевеличинам) производится путем осреднения значений состояний клеток по некоторой заданной окрестности.

Настоящим потрясением основ в моделировании пространственной динамики стало появление клеточно-автоматной газовой динамики, названной "Gas-Lattice", что в переводе на русский звучит как "решеточный газ". Очень важен тот факт, что было строго математически доказано соответствие Gas-Lattice моделей уравнению Навье-стокса [23, 24]. Сначала полагали, что решеточный газ имеет более широкие возможности, чем уравнение Навье-Стокса и сможет моделировать также турбулентные потоки. Эти надежды, к сожалению, не оправдались [23], но чрезвычайно простым и алгоритмичным оказалось применение модели к моделированию потоков в пористых средах [25, 46]. Более того, идея решеточного газа легла в основу более изощренной модели, так называе-

мой Gas-Lattice-Boltzmann (решеточный газ Больцмана) [25,26], которая моделирует турбулентные потоки и активно для этого используется. К разряду КА Gas-Lattice-Boltzmann модель относится условно, так как в ней применяется алфавит вещественных чисел.

Предполагается, что этот новый подход к моделированию природных явлений станет дополнением к традиционным моделям математической физики, основанным на дифференциальных уравнениях в частных производных и хорошо развитым численным методам их решения на компьютерах, вычислительная мощность и архитектура которых меняется быстрее, чем создается необходимое математическое обеспечение. Наряду с ростом производительности, стимулирующей развитие вычислительных методов, происходят также качественные изменения в архитектуре компьютеров, ориентированные на углубление параллелизма и специализации процессоров. Таким образом, мотивацией к развитию и распространению КА-моделей послужили два фактора: технический и математический.

Технический фактор, в свою очередь имеет два аспекта. Во-первых, было подсчитано что КА-алгоритмы, воплощенные в "железо" могут увеличить производительность на 3 порядка и выше [7] по отношению к решению аналогичных задач традиционными методами, например, решению дифференциальных уравнений в частных производных. Для подтверждения этого тезиса была построена КА-машина (САМ-8) [13], на которой производились испытания КА-моделей, в частности, испытывались алгоритмы решеточной гидро- и газодинамики. Второй технический фактор состоит в том, что появились высокопроизводительные многопроцессорные суперкомпьютеры и сетевые вычислительные технологии, которые позволили эмулировать эволюцию КА очень больших размеров достаточно быстро, благо КА-алгоритмы чрезвычайно легко распараллеливаются на любое число процессоров из-за присущего им естественного параллелизма. И, хотя в этих случаях больших ускорений вычислений не наблюдается, КА-моделирование на многопроцессорных системах выдерживает конкуренцию с традиционным моделированием.

Второй фактор, вызвавший к жизни КА-моделирование, составляют трудности численного моделирования на основе решения дифференциальных уравнений, возникшие в связи с ростом размеров и сложности решаемых задач, а также необходимостью их размещения на многих процессорах. Основная проблема состоит в том, что решение стационарных задач математической физики обычно выполняется неявными методами, которые не накладывают ограничений на вычислительную устойчивость, что делает их более быстрыми, чем явные. Однако, параллельная реализация этих методов требует дополнительных усилий как математиков, так и программистов, и всегда связана с деградацией эффектив-

ности распараллеливания при увеличении количества процессоров. При решении нестационарных задач предпочтение отдается явным методам, которые легко и эффективно распараллеливаются, но ограничены условиями вычислительной устойчивости (требуют применения малого шага по времени). Явные методы обладают многими свойствами КА, иногда рассматриваются как "непрерывные клеточные автоматы".

Сравнение КА-моделирования с традиционными методами численного моделирования может быть сделано сколько-нибудь корректно только для конкретных задач. В тех случаях, для которых известны дифференциальные уравнения, но неизвестна их КА-модель или наоборот, КА-модель известна, а дифференциальное уравнение не существует, выбора нет и сравнение не имеет смысла. Более того, для процессов с сильно выраженной нелинейностью, численные методы могут оказаться слишком сложны и КА предпочтительнее. И наоборот, для известных хорошо проработанных численных методов, а иногда и имеющегося программного обеспечения, предпочтение отдается численному методу. Кроме того, сравнение не может считаться корректным еще и потому, что традиционный численный анализ – хорошо разработанная наука, а КА-моделирование находится в стадии начального развития. Самый главный тезис при сравнении КА-моделирования с традиционным моделированием состоит в том, что КА не аппроксимируют (упрощают) дифференциальные уравнения, а являются альтернативной моделью. Этот тезис высказан в замечательной работе [27], положившей начало КА-моделированию пространственной динамики.

Впоследствии появились и физические обоснования правомерности КА-моделей. Например, очень важная мысль высказывается в [28, 29], которая состоит в том, что Ньютонова механика описывает обратимые процессы, тогда как для природных явлений в которых взаимодействия нелинейны, характерна необратимость. Дифференциальные уравнения иногда оказываются бессильны когда необходимо моделировать явления необратимые и далекие от равновесных состояний, например, диссипативные структуры [21], турбулентные газы. Кроме того, дифференциальные уравнения при сильных нелинейностях и больших размерах пространств решать сложно. Отсюда возникло желание вернуться к истокам выводов дифференциальных соотношений в физике, т.е. к описанию явлений на микроскопическом уровне. Но, поскольку моделировать поведение реальных молекул невозможно из-за их огромных количеств даже в самых малых объемах, то в моделях используется понятие абстрактных (модельных) частиц и скоростей их движения в дискретном пространстве, которые легко выражаются в терминах клеточных автоматов. Такие модели в [28] называются "стилизованными под молекулярную динамику". В них, также как и в их физических прототипах,

необратимое поведение является базовым свойством, сочетаясь при этом со вторым законом термодинамики (законы сохранения). Состояния таких КА представлены булевыми векторами, в которых наличие частицы в клетке соответствует "единице", отсутствие "нулю". Наличие момента движения частицы в определенном направлении движения у частицы моделируется "единицей" в соответствующем разряде булева вектора состояния клетки. Таким образом, в КА-моделях сохраняется наименьшее количество кинетической информации при восстановлении макроскопических свойств.

По своим поведенческим свойствам КА разбиваются на 4 класса [2, 29], различающиеся типами конфигураций, к которым эволюционирует КА.

- *Класс 1.* КА, эволюционирующие к пространственно однородному глобальному состоянию. Например, все клетки КА приходят в состояние 1 или все клетки приходят в состояние 0. Небольшие локальные возмущения начальной конфигурации не изменяют терминального состояния КА.
- *Класс 2.* КА, эволюционирующие к простым устойчивым или периодически расположенным структурам. Небольшие локальные изменения начальных конфигураций могут изменить терминальное состояние на ограниченном участке КА.
- *Класс 3.* КА, поведение которых хаотично, т. е. бесконечно меняется непредсказуемым образом. Любое локальное изменение начального состояния распространяется на постепенно увеличивающееся пространство в КА.
- *Класс 4.* КА, эволюционирующие к довольно сложным локальным фигурам, иногда движущимся (распространение волны). Изменения начальных состояний влекут за собой сложные нерегулярные изменения поведения.

Некоторые количественные характеристики поведенческих свойств были получены [2, 30, 32] с использованием качественных методов анализа нелинейных систем. Поведение первых трех классов связывается с наличием на фазовой плоскости особых точек (устойчивые образы), предельных циклов (периодическое поведение) и "странных аттракторов" (хаотическое поведение). Четвертый класс является самым важным для моделирования пространственной динамики, его поведение пока никакому математическому анализу не поддается. Отсюда появившееся для него названия *сложных систем*, что в оригинале [12] звучит как "complex systems". Интерес к КА этого класса оказался столь большим, что в США появился научный журнал, называемый "Complex systems", а также стали проводиться международные конференции с таким названием. Именно этот класс КА имеет вычислительную мощность машины Тью-

ринга [12], т.е. обладает универсальной вычислительной способностью. Активно развиваются также и чисто теоретические исследования клеточных автоматов. КА изучается как математическая модель процессов с ярко выраженной нелинейностью, которая способна объяснить механизмы возникновения диссипативных структур (*emergency problem* [31, 32]). КА изучается как модель физических процессов, с точки зрения соответствия КА законам термодинамики [7, 33]. В этом направлении наиболее интересны работы по реверсивным и нереверсивным КА [7, 12]. КА изучаются как информационный объект [34], т.е. исследуются их вычислительные и моделирующие способности для разных классов КА, описывающие их языки [35] и проблемы алгоритмической разрешимости разных свойств [37, 38]. КА изучается также как динамическая система и рассматривается как непрерывное отображение на компактное метрическое пространство [35].

Поскольку КА нас интересует как модель пространственной динамики и наши помыслы направлены на создание методов конструирования КА-моделей, то мы не будем подробно рассматривать теоретические результаты их исследования, а сосредоточим внимание на перспективы их практического использования. С этой точки зрения полезно сравнить свойства КА с традиционными методами, основанными на решении дифференциальных уравнений в частных производных, имея в виду только те случаи, когда существует альтернатива выбора, т.е. моделируемый процесс может быть представлен и той и другой моделью. Безусловно, при этом следует иметь в виду тот факт, что сравнения имеют качественный характер, а количественные сравнения могут быть получены только путем вычислительного эксперимента.

Основные достоинства КА-моделей.

1. *Отсутствие ошибок округления.* Поскольку состояния клеток представлены булевыми векторами, и вычисления ведутся над ними, все разряды в них равноправны, округления не производится. При итеративных вычислениях это бывает важно.

2. *Экономия памяти* при больших объемах данных, так как булевы данные размещаются во всех разрядах машинных ячеек.

3. *Виртуальная неограниченность параллелизма.* Допускается разрезание области моделирования любым образом. Распараллеливание на любое количество процессоров не приводит к деградации эффективности распараллеливания.

4. *Простота задания граничных условий.* Границы областей моделирования представлены особыми клетками, которые имеют граничные правила переходов. Даже при очень сложных формах границ (пористые среды, изогнутые трубки) алгоритм моделирования практически не усложняется по сравнению с тем, когда препятствий нет.

Несомненно, КА-модели и основанные на них алгоритмы имеют и недостатки, с которыми приходится бороться. Главными из них являются следующие.

1. *Автоматный шум*, связанный с дискретным представлением данных. Избежать его невозможно, но при достаточно большом радиусе осреднения, он становится незаметным.

2. *Отсутствие формальных методов "предсказания" поведения КА*, по заданным функциям перехода. Отсюда отсутствие методов синтеза функции перехода КА по заданным свойствам его эволюции.

1.3. Мелкозернистый параллелизм

Большое разнообразие модификаций КА, предназначенных для моделирования пространственной динамики привело к появлению понятия *мелкозернистого параллелизма* [36], который объединил в себе все модели вычислений, обладающие двумя главными свойствами КА.

1) *Итерационный процесс* вычисления глобальных конфигураций при неограниченном виртуальном параллелизме вычисления новых состояний клеток.

2) *Локальность* межклеточных взаимодействий, когда каждая клетка вычисляет функцию перехода, используя в качестве переменных состояния ограниченное число близлежащих клеток.

При этом на алфавит состояний клеток не накладывается ограничений. Он может быть булевым, целочисленным, вещественным и символьным. Более того, мелкозернистый параллелизм допускает не только синхронный режим смены состояний клеток, но и асинхронный. Асинхронный режим предполагает, что смена состояний клеток происходит не "сразу все" по тактовому сигналу, а в любом порядке. Этот порядок может быть случайным или заранее заданным. Для моделирования пространственной динамики во многих случаях используются вероятностные КА, а также КА с самыми разными функциями переходов. Такое расширенное понятие КА-моделирования включает в себя также явные численные методы решения дифференциальных уравнений в частных производных, которые иногда рассматриваются как "непрерывные КА". В современной литературе термин *мелкозернистый параллелизм* используется реже, чем термин *клеточный автомат* даже если имеется в виду его расширенное понимание. В соответствии с целью нашего исследования КА как модели пространственной динамики, мы тоже будем пользоваться термином КА, имея в виду тот факт, что КА и все его разновидности составляют ядро мелкозернистого параллелизма. Отношения между типами КА, различающимися алфавитами, типами функций переходов и режимами синхронизации представлены на рис.1.

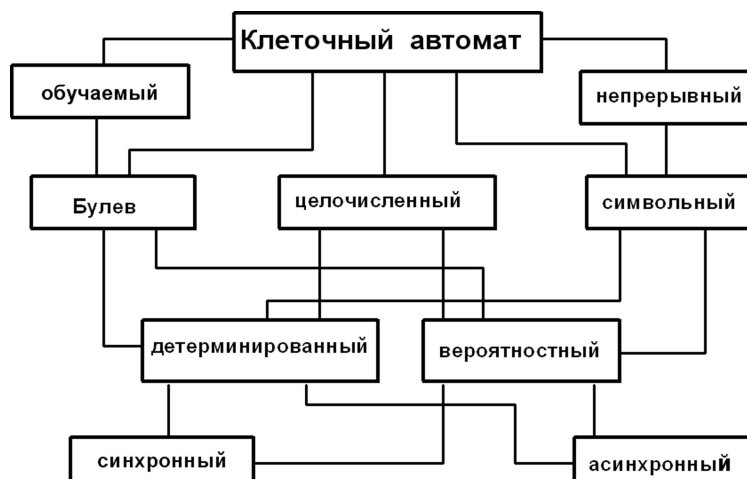


Рис. 1. Типы клеточных автоматов и отношения между ними

Цель этой статьи состоит в том, чтобы продемонстрировать возможности использования КА в задачах математической физики путем обсуждения пока еще разрозненных и мало доступных результатов. Мы не будем касаться таких сфер применений КА как обработка изображений, моделирование социальных процессов, которые также интенсивно исследуются, но лежат вне предмета статьи. Далее будет представлена обобщенная формальная модель (раздел 2). Затем будут рассмотрены наиболее разработанные и известные КА, применяемые в газовой динамике (раздел 3). Четвертый раздел посвящен методам синтеза (композиции) сложных КА из более простых. Наконец, в последнем разделе дан анализ вычислительных свойств КА-моделей.

2. ФОРМАЛЬНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ КА-МОДЕЛЕЙ

2.1. Параллельные подстановки

Классический клеточный автомат обычно определяется множеством клеток, плотно заполняющих дискретное D -мерное пространство. Расстояние между центрами клеток $d = 1$. Каждой клетке поставлен в соответствие конечный автомат, входами которого являются выходы клеток, расположенных от него не далее чем на расстоянии r , т.е. в некотором ограниченном соседстве. Все конечные автоматы одинаковы. В соответствии с теорией конечных автоматов они определяются тройкой $\langle Q, S, \delta \rangle$, где Q – множество входных состояний, S – множество внутренних состояний, $\delta : Q \times S \rightarrow S$ – функция переходов, значение которой рав-

но новому внутреннему состоянию элементарного автомата. Переход в новое состояние всех элементарных автоматов, входящих в КА, происходит одновременно, синхронно переводя КА в новое глобальное состояние. Итеративный процесс переходов из состояния в состояние называется *эволюцией КА*. Таким образом, для задания классического КА достаточно определить структуру дискретного пространства (Декартова решетка, n -мерный куб, гексагональная структура и т.д.) и конечный автомат. Большинство формальных моделей КА и основанных на них языков их описания ограничиваются этими двумя понятиями. Этого достаточно для теоретических исследования классического КА, как математического объекта. Однако, когда понятие КА расширилось до понятия мелкозернистого параллелизма, и появилась необходимость в конструировании алгоритмов, моделирующих сложные процессы, такие представления КА оказались слишком слабыми. Понадобились введение в формальную модель средств, управляющих функционированием КА как во времени (включение, выключение, изменение шага по времени), так и пространстве (изменение области применения функций переходов, изменение размеров соседства, обеспечение совместной работы нескольких КА). Кроме того, появилась необходимость использования вероятностных функций. Таким образом, возникла потребность в новых формализмах, среди которых наилучшим образом отвечает перечисленным требованиям так называемый Алгоритм параллельных подстановок [8] (АПП). Хотя его разработка имела целью создание формального аппарата для проектирования арифметических мелкозернистых параллельных алгоритмов и реализующих их архитектур спецвычислителей, богатые выразительные возможности АПП делают его вполне достаточным для представления КА разных типов и всевозможных манипуляций с ними. Поэтому далее процедуры КА-моделирования пространственной динамики будут выражены в терминах АПП, что позволит все изложение провести в едином формальном русле.

Клеткой называется пара $(x, m) \in A \times M$, где $x \in A$ – символ алфавита A , обозначающий *состояние клетки*, а $m \in M$ – имя клетки из множества имен M , обозначающее местоположение клетки в дискретном пространстве. Алфавит может быть булевым, $A_B = \{0, 1\}$, вещественным, $A_R = [0, 1]$, и символьным $A_s = \{a, b, c, d, \dots\}$. Состояния могут быть заданы переменными, определенными на одном из этих алфавитов.

Множество имен может быть любым (не более чем счетным) множеством. При моделировании пространственной динамики его элементами обычно являются наборы пространственных координат точек дискретного пространства конечных размеров.

Определение 1. Множество клеток $\Omega = \{(x, m)\}$, в котором нет клеток с одинаковыми именами, называется *клеточным массивом*. Кле-

точные массивы, в которых состояния определены на множестве A , а имена на множестве M , составляют *класс клеточных массивов*, обозначаемый $\Omega(A, M)$. На множестве имен определены именующие функции $\phi : M \rightarrow M$, которые определяют пары взаимодействующих клеток.

Множество имен в общем случае является счетным, но при моделировании пространственной динамики его основную часть M' составляет дискретное пространство конечных размеров, имеющее регулярную структуру, образованную узлами (или клетками), например, декартовой D -мерной или гексагональной двумерной решетки. Именами в таких массивах служат наборы координат, так что для конечного двумерного декартова клеточного массива $M = \{(i, j) : i = 0, \dots, I, j = 0, \dots, J\}$, $M'' = \{m''_k : k = 1, \dots, n\} \subset M$. Когда речь идет о любой структуре множества имен, его элементы обозначаются одним символом m , возможно с индексом. В соответствии с множеством имен клеточный массив тоже подразделяется на две части $\Omega = \Omega' \cup \Omega''$, в котором Ω' называется *базовым* а Ω'' - *контекстом*. Алфавиты в Ω' и в Ω'' могут различаться.

На множестве имен определены именующие функции $\phi : M \rightarrow M$. Именующая функция $\phi(m)$ определяет для любой клетки m одного из ее соседей. Для декартовых клеточных массивов именующие функции имеют вид сдвига, $\phi(i, j) = (i+a, j+b)$, a, b – константы, которые определяют пары взаимодействующих клеток.

Определение 2. Конечное множество именующих функций называется *шаблоном соседства*.

$$T(m) = \{\phi_0(m), \phi_1(m), \dots, \phi_q(m)\}. \quad (1)$$

Для каждой клетки $m \in M$ шаблон $T(m)$ определяет множество ее соседей. Нумерация клеток в $T(m)$ может быть любой. При этом принято считать, что $\phi_0(m) = m$.

Определение 3. Выражение вида

$$S(m) = \{(x_0, \phi_0(m)), (x_1, \phi_1(m)), \dots, (x_q, \phi_q(m))\} \quad (2)$$

называется *локальной конфигурацией*, если существует такое r , что расстояние от m до любого $\phi_k(m) \in T(m)$, $d(m, \phi_k(m)) < r$, где $T(m)$ – множество входящих в $S(m)$ именующих функций, называемое *определяющим шаблоном* локальной конфигурации.

Определение 4. *Параллельной подстановкой* (далее просто подстановкой) называется выражение вида

$$\theta(m) : S(m) \star S''(m) \rightarrow S'(m), \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} S(m) &= \{(x_0, \phi_0(m)), (x_1, \phi_1(m)), \dots, (x_q, \phi_q(m))\}, \\ S'(m) &= \{(f_0, \phi_0(m)), (f_1, \phi_1(m)), \dots, (f_q, \phi_q(m))\}, \\ S''(m) &= \{(g_0, \psi_0(m)), (g_1, \psi_1(m)), \dots, (g_n, \psi_n(m))\}. \end{aligned} \quad (4)$$

В (4) $S(m)$ называется *базовой конфигурацией* (или базой), $S''(m)$ – *контекстом*, а $S'(m)$ – *правой частью* параллельной подстановки. База и правая часть подстановки имеют один и тот же определяющий шаблон. Шаблон контекста от них отличается. Символы f_k в клетках правой части обозначают функции от значений состояний в клетках базы и контекста, т.е.

$$f_k = F(x_0, x_1, \dots, x_q, g_0, \dots, g_n). \quad (5)$$

Они называются *функциями переходов* и могут быть булевыми, вещественными, а также простыми заменами символов в соответствии с используемым алфавитом. Локальная конфигурация $S(m)$ с переменными состояниями считается *совместимой* с клеточным массивом $\Omega \in \Omega(A \times M)$, что обозначается как $S(m) \sqsubseteq \Omega$, если

1) для всех $(x_k, \phi_k(m)) \in S(m)$, $k = 0, 1, \dots, q$, переменные x_k определены на том же алфавите, что и состояние одноименной клетки $(a_k, \phi_k(m)) \in \Omega$;

2) одноименные клетки в $S(m)$ и Ω с константными состояниями равны, т.е. если $x_k = a$, то $(a, \phi_k(m)) \in \Omega$.

Параллельная подстановка $\theta(m)$ применима к клеточному массиву $\Omega \in A \times M$, если в нем найдется подмножество клеток $M' \subseteq M$ с именами $m' \in M'$, для которых удовлетворяется условие

$$S(m') \star S''(m') \sqsubseteq \Omega. \quad (6)$$

Если $M' = \emptyset$, то подстановка не применима. Применение подстановки $\theta(m)$ к Ω в клетке $m' \in M'$ состоит в замене состояний в клетках $(a_k, \phi_k(m'))$, на значения функций f_k , вычисленных по (5).

Параллельная подстановка является *локальным оператором* КА-модели.

Определение 5. Результат применения локального оператора ко всем клеткам массива Ω называется *глобальным оператором* $\theta(\Omega)$.

Существует два основных режима применения глобального оператора вычисления следующего глобального состояния $\Omega(t+1)$: *синхронный* и *асинхронный*.

Синхронный режим предполагает, что аргументы функции переходов – это состояния клеток-соседей на текущей итерации t . На каждой итерации клетки вычисляют значения нового состояния и, затем, все клетки вместе синхронно заменяют старые состояния на новые. Результатом

применения параллельной подстановки к клеточному массиву Ω может быть представлен как вычитание из Ω базовых клеток всех применимых подстановок и добавление их правых частей.

$$\theta(\Omega) = \left(\Omega \setminus \cup_{M'} S(m') \right) \cup \left(\cup_{M'} S'(m') \right). \quad (7)$$

Пример 1. Если налить в плоский сосуд хорошо перемешанную смесь из двух жидкостей, имеющих разные коэффициенты поверхностного натяжения, то начинается процесс разделения фаз: каждая жидкость начинает собираться в крупные пятна. Этот процесс моделируется очень простым КА. Клетки его расположены в узлах декартовой двумерной решетки, множество имен для которой $M = \{(i, j) : i = 0, \dots, I, j = 0, \dots, J\}$. Алфавит состояний $A = \{0, 1\}$. Соседство каждого элементарного автомата ограничивается радиусом $r = 1$. Таким образом, мощность множества соседства $q = (2r + 1)^2 = 9$. Функция перехода элементарного автомата состоит в подсчете суммы состояний соседей s . Если $s > 5$ или $s = 4$, то клетка переходит в состояние $x = 1$, иначе $x = 0$. В терминах АПП этот процесс может быть представлен одной подстановкой вида (3), в которой

$$\begin{aligned} S(i, j) &= \{(x_0, (i, j))\}, \\ S'(i, j) &= \{(f_0, (i, j))\}, \\ S''(i, j) &= \{(x_1, (i - 1, j)), (x_2, (i - 1, j + 1)), \\ &\quad (x_3, (i, j + 1)), (x_4, (i + 1, j + 1)), (x_5, (i + 1, j)), \\ &\quad (x_6, (i + 1, j - 1)), (x_7, (i, j - 1)), (x_8, (i - 1, j - 1))\}, \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$f_0(i, j) = \begin{cases} 1, & \text{если } s = 4 \text{ или } s > 5, \\ 0, & \text{если } s = 5 \text{ или } s < 4, \end{cases} \quad \text{где } s = \sum_{k=0}^8 x_k. \quad (9)$$

На рис. 2 показаны три глобальных состояния из эволюции процесса разделения фаз. Моделирование проводилось при $I = 200, J = 200$ и начальном распределении "единиц" (черный цвет) с вероятностью $p = 0.5$. Краевые условия – периодические, что означает отождествление клеток с именами $(200, j)$ и $(0, j)$ для всех $i = 0, \dots, I$, и с именами $(i, 200)$ и $(i, 0)$ для всех $j = 0, \dots, J$. Режим выполнения подстановки – синхронный.

При асинхронном режиме каждая клетка вычисляет функцию перехода от тех значений состояний соседей, которые на данный момент имеют место и сразу меняет свое состояние. Таким образом, каждая итерация КА состоит из $|\Omega|$ шагов, на которых только одна клетка меняет свое состояние.



Рис. 2. Эволюция КА, моделирующего процесс разделения фаз. Глобальные состояния при $t = 0, t = 5, t = 10$

$$\theta(\Omega) = \left(\left(\left(\Omega \setminus S(m_1) \cup S'(m_1) \right) \setminus S(m_2) \cup S'(m_2) \right) \dots \setminus S(m_{|M|}) \cup S'(m_{|M|}) \right). \quad (10)$$

Порядок выбора клеток $m_1, m_2, \dots, m_{|M|}$ в Ω может быть случайным, но может быть и упорядоченным. Это определяется требованиями моделируемого процесса. Например, поверхностные химические реакции [53] моделируются в случайном асинхронном режиме, а распространение волн – в упорядоченном [20].

Пример 2. Движение солитонов [20] в одномерном пространстве может быть представлено подстановкой $\theta_1 : S(i) \star S''(i) \rightarrow S'(i)$ с алфавитом A_B и множеством имен $M = \{0, 1, \dots, N\}$, где

$$\begin{aligned} S(i) &= (u_i, i), \\ S''(i) &= (u_{i-r}, i-r), \dots, (u_{i-1}, i-1), (u_{i+1}, i+1), \dots, (u_{i+r}, i+r), \\ S'(i) &= (u'_i, i). \end{aligned} \quad (11)$$

Функция переходов

$$u'_i = \begin{cases} 1, & \text{если } (s = 0_{\text{mod } 2} \ \& \ s \neq 0) \\ 0, & \text{в иных случаях} \end{cases}, \quad \text{где } s = \sum_{k=-r}^r u_{i+k}. \quad (12)$$

КА, моделирующий движение солитонов, функционирует в упорядоченном асинхронном режиме следующего вида. Подстановка (11) применяется последовательно к клеткам в порядке $0, 1, \dots, i_{\text{mod } N}, \dots$. Таким образом, в момент t первые $(r+1)$ слагаемых в (12) уже находятся в следующем состоянии. Начальное состояние клеточного массива должно удовлетворять следующим условиям. Каждая волна представлена некоторым одномерным образом из нулей и единиц, называемым "частицей".

В нашем примере использованы частицы вида "11011" и "10001001". Первая частица через каждые $p = 2$ итерации оказывается смещенной на $d = 7$ клеток влево. Вторая частица через $p = 6$ смещается на $d = 12$. Таким образом, через каждые 6 итераций расстояние между частицами уменьшается на 9 клеток. Если в начальном состоянии расстояние между ними было 18 клеток, то через 12 тактов частицы оказываются наложенными друг на друга, а на 30-м такте первая частица окажется левее.

```

t = 0 :    000000000000000000 ... 00100010010000000000000000001101100
t = 6 :    000000000 ... 0010001001000000001101100000000000000000000
t = 30 :   0000000000000000000011011000010001001 ... 00000000000000
t = 36 :   011011000000000000100010010000000 ... 000000000000000000
    
```

Определение 6. Конечное множество параллельных подстановок $\Phi = \{\theta_1, \dots, \theta_l\}$, определенных на одном и том же классе клеточных массивов $\Omega(A, M)$, называется *системой параллельных подстановок*. Система параллельных подстановок Φ применима к клеточному массиву Ω , если хотя бы одна из подстановок $\theta_k \in \Phi$ к нему применима. Одной итерацией эволюции системы Φ к Ω является применение всех его подстановок ко всем клеткам массива. Для синхронного режима результат получается в виде

$$\Phi(\Omega) = \bigcup_{k=1}^l \theta_k(\Omega). \tag{13}$$

2.2. Контекст в параллельных подстановках

Разделение левой части параллельной подстановки (3) на две части: базу и контекст, сделано для того, чтобы при применении ее к любой конкретной клетке $m_k \in M$ отделить множества клеток $S(m_k)$, состояния которых она изменяет, от множества клеток $S''(m_k)$, состояния которых она не меняет. При этом состояния клеток из контекста $S''(m_k)$ могут быть изменены на той же итерации применением этой же подстановки к другой клетке m_g , если $S''(m_k) \cap S(m_g) \neq \emptyset$ или другой подстановкой θ' из системы $\Phi = \{\theta, \theta'\}$.

Контексты параллельных подстановок играют двоякую роль, различающуюся своим влиянием на эволюцию. Соответственно, они подразделяются на контексты первого рода и контексты второго рода.

- *Контексты первого рода* содержат клетки вида $(x_k, \psi_k(m))$, в которых $\psi_k(m)$ определены на базовом множестве имен, т.е. в области эволюции КА. Такие контексты характерны для классических КА,

типичными примерами является $S''(m)$ из примеров 1 и 2.

- *Контексты второго рода* выполняют управляющие функции. Локальная конфигурация контекста второго рода имеет вид

$$S''(m) = \{(\alpha_1, m_1), \dots, (\alpha_n, m_n)\},$$

где $\alpha_k = \xi_k(x_1, \dots, x_n)$ - функция, значения которой играют роль предиката, делающего подстановку применимой. Для вычисления значений функции ξ_k необходимы дополнительные *контекстные подстановки* θ'' , определенные на $\Omega''(A'' \times M'')$. Переменные x_k могут быть внешними переменными, например, случайными числами от генератора случайных чисел, или значениями тактирующих импульсов, или указателями области значений имен клеток и др.

Следующие контексты второго рода считаются типовыми:

Вероятностный контекст $S''_p(m) = (\alpha_p, m_p)$, применяемый в вероятностных КА. Его контекстная подстановка имеет вид:

$$\theta''_p : (x, m_p) \rightarrow (\alpha_p, m_p), \quad \alpha_p = \begin{cases} 1 & \text{если } rand < p, \\ 0 & \text{если } rand \geq p, \end{cases} \quad (14)$$

где $m_p \in M''$, $rand$ - случайное число в интервале $[0,1]$, p - вероятность применимости подстановки.

Тактирующий контекст $S''_t(m) = (\alpha_t, m_t)$ применяется для организации n -тактного синхронного режима применения подстановок.

$$\theta''_t : (x, m_t) \rightarrow (\alpha_t, m_t), \quad \alpha_t = \begin{cases} 1 & \text{если } t_{mod_n} = 0, \\ 0 & \text{если } t_{mod_n} = 1. \end{cases} \quad (15)$$

где $m_t \in M''$.

Пространственный контекст $S''_s(m) = (\alpha_s, m_s)$ применяется для выделения тех областей клеточного массива, где подстановка должна быть применима.

$$\theta''_s : (x, m_s) \rightarrow (\alpha_s, m_s), \quad \alpha_s = \begin{cases} 1 & \text{если } a < m < b, \\ 0 & \text{если } 0 < m < a. \end{cases} \quad (16)$$

где $a, b \in M$.

Контексты второго рода применяются также для композиции двух или более подстановок в систему подстановок.

2.3. Режимы применения параллельных подстановок

. Параллельная подстановка θ , определенная на $\Omega(A, M)$, называется *непротиворечивой*, если результат ее $\theta(\Omega)$ над любым $\Omega \in \Omega(A, M)$

является клеточным массивом, т.е. не содержит двух разных клеток с одним и тем же именем. Проще говоря, непротиворечивая подстановка при одновременном применении в разных клетках никогда не пытается записать разные состояния в клетку с одним и тем же именем, т.е.

$$((x_1, m_1) \in S'(m) \ \& \ (x_2, m_1) \in S'(m)) \Rightarrow (x_1 = x_2).$$

Ясно, что если правая часть подстановки содержит только одну клетку, как это имеет место у классического КА или в примере 1, то она всегда непротиворечива. Если же $|S'(m)| > 1$, то существует опасность коллизии при синхронном режиме. Установить заранее противоречивость очень сложно, поскольку это NP-полная задача [8]. Поэтому, обычно удовлетворяются достаточным *условием непротиворечивости*, которое для одной подстановки имеет следующий вид

$$T'(m_g) \cap T'(m_h) = \emptyset \quad \forall (m_g, m_h) \in M \times M, \quad (17)$$

где $T'(m_g)$ и $T'(m_h)$ – шаблоны локальной конфигурации $S'(m)$ при $m = m_g$ и $m = m_h$, соответственно.

Противоречивая подстановка не может выполняться синхронно. Однако, ее можно заменить на систему непротиворечивых подстановок, применимых на разных подтактах итерации, используя тактирующий контекст (15). При асинхронном режиме коллизии невозможны, так как никакие две клетки одновременно не меняют своих состояний. Представленные одной и той же системой параллельных подстановок КА при синхронном, многотактном синхронном и асинхронном режимах функционирования имеют различные эволюции и, следовательно, не могут быть моделями одного и того же явления.

Пример 3. Простейший механизм одномерной диффузии. Пусть $M = 0, 1, 2, \dots, i, \dots, 14$. Алфавит состояний $A = 0, 1$. Плотность вещества моделируется распределением единиц по длине массива. Самая простая КА-модель одномерной диффузии состоит в том, что на каждой итерации происходит обмен состояниями между двумя соседними клетками, что можно представить в виде следующей бесконтекстной параллельной подстановки.

$$\theta : \{(u, i), (v, i + 1)\} \rightarrow \{(v, i), (u, i + 1)\}. \quad (18)$$

Подстановка θ противоречива, поскольку для любой пары соседних имен $(i, i+1)$ условие (17) не выполняется. Следовательно, синхронный режим для нее невозможен. Диффузию, т.е. процесс приводящий к равномерному распределению концентрации вещества обеспечивает только

асинхронный режим. Это легко проверить взяв в качестве начального клеточного массива

$$\Omega(0) = \{(1, i) : i = 1, \dots, 4\} \cup \{(0, i) : i = 5, \dots, 14\}$$

и добавив к нему контекстную клетку $(x, 15)$. При асинхронном режиме подстановка θ применяется на каждой итерации ко всем клеткам последовательно в случайном порядке. Это выражается путем введением пространственного контекста: клетки $(1, 15)$ в подстановку (18) и добавлением подстановки θ''_s . Система подстановок получает следующий вид.

$$\begin{aligned} \theta_1 : \quad & \{(u, i), (v, i + 1)\} \star \{(1, 15)\} \rightarrow \{(v, i), (u, i + 1)\}, i = 0, \dots, 14, \\ \theta''_s : \quad & (x, 15) \rightarrow (\alpha(i), 15), \end{aligned} \tag{19}$$

где

$$\alpha(i) = \begin{cases} 1 & \text{если } i = rand \times 14, \\ 0 & \text{если } i \neq rand \times 14. \end{cases}$$

Вектор состояний $U(\Omega)$ может иметь следующую эволюцию

$$\begin{aligned} t = 0 & \quad 1, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0 \\ t = 1 & \quad 1, 1, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0 \\ t = 2 & \quad 1, 1, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0 \\ t = 3 & \quad 1, 1, 0, 1, 1, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0 \\ & \quad \dots \\ t = 7 & \quad 1, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 1, 0, 1, 0, 0, 0, 1, 0 \\ & \quad \dots \\ t = 10 & \quad 1, 0, 0, 1, 0, 0, 1, 0, 0, 1, 0, 0, 1, 0, 0 \end{aligned}$$

Если применить синхронный режим, заменив θ (18) двумя подстановками θ_1, θ_2 с тактирующими контекстами, обеспечивающими поочередность их применения, и добавив контекстную подстановку θ''_t , то получится следующая система подстановок.

$$\begin{aligned} \theta_1 : \quad & \{(u, i), (v, i + 1)\} \star (1, 15) \rightarrow \{(v, i), (u, i + 1)\} \\ \theta_2 : \quad & \{(u, i), (v, i - 1)\} \star (0, 15) \rightarrow \{(v, i), (u, i - 1)\} \\ \theta''_t : \quad & (x, 15) \rightarrow (\alpha(t), 15), \end{aligned} \tag{20}$$

где

$$\alpha(t) = t_{mod 2}. \tag{21}$$

Эволюция КА заданного системой (20)

$t = 0$	1, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0
$t = 1$	1, 1, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0
$t = 2$	1, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0
$t = 3$	0, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 0, 0
\dots	
$t = 7$	0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 1, 1, 1
\dots	
$t = 10$	0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 1

отличается от асинхронного варианта и не моделирует процесс диффузии.

2.4. Алгоритм параллельных подстановок

Определение 7. Непротиворечивая система подстановок $\Phi = \{\theta_1, \dots, \theta_l\}$, совместно с режимом их применения, который может задаваться с помощью контекстов второго рода, называется *Алгоритмом Параллельных Подстановок* (АПП).

Свойства АПП изучены подробно и изложены в [8]. Для нас важен тот факт, что любой клеточный автомат и все его известные модификации могут быть описаны в терминах АПП, поскольку эта формальная система обладает вычислительной универсальностью. Кроме того, для конструирования сложных клеточно-автоматных моделей очень важно наличие такого средства как контекст второго рода. Далее для иллюстрации КА-алгоритмов будут использоваться выразительные средства АПП. Хотя, в тех случаях когда важно продемонстрировать эволюцию КА, моделирующую пространственную динамику, исследованию будет подлежать только базовая часть системы подстановок.

Пример 4. Для того, чтобы солитоны из примера 2 наблюдать в виде привычных движущихся волн, следует произвести так называемое осреднение булевых значений. Для этого следует ввести еще один клеточный массив $\Omega_1 = \{(z, i_1) : i_1 \in M_1, z \in A_R\}$, где $M_1 = \{0_1, 1_1, \dots, N_1\}$, к клеткам которого через каждые 6 итераций применяется действующая в синхронном режиме *параллельная подстановка осреднения* следующего вида.

$$\theta_{Av} : \{(z, i_1)\} \star \{(u_{-r}, i-r), \dots, (u_i, i), \dots, (u_r, i+r)\}, \rightarrow \{(z'_i, i_1)\}, \quad (22)$$

Функция переходов в (21) представляет вычисление среднего значения состояний клеток в окрестности осреднения $Av(i)$, размер которой опре-

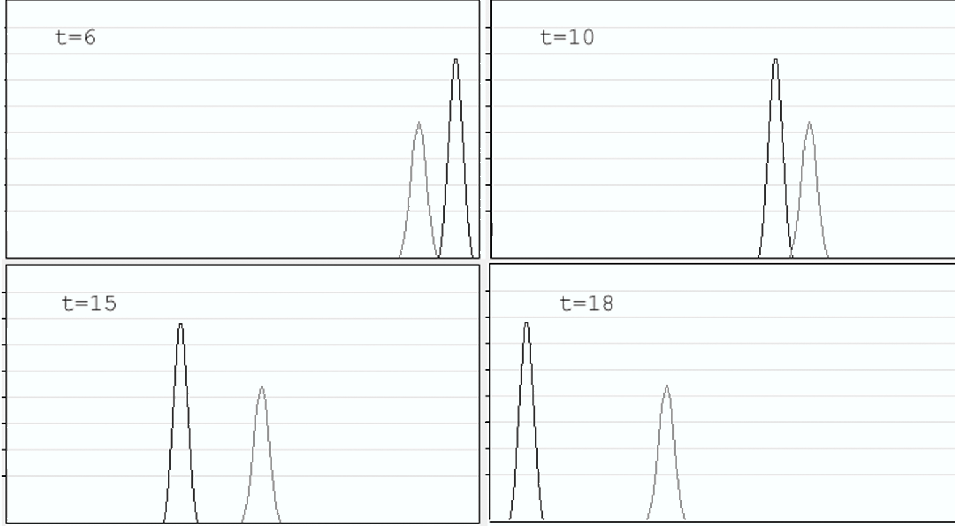


Рис. 3. Эволюция КА, моделирующего движение солитонов

деляется радиусом осреднения R .

$$z'_i = \frac{1}{|Av|} \sum_{k=-r}^r u_k.$$

Объединение подстановок (11) и (21) можно выполнить при помощи контекстов второго рода. Для этого множество имен нужно дополнить контекстным подмножеством $M'' = \{m_1, m_2\}$ и алфавитом $A'' = \{0, 1, \dots, N - 1\}$. Контекстная клетка (i, m_1) разрешает применить θ к клетке с именем $i \in M'$, а контекстная клетка $(0, m_2)$ управляет применением θ_{Av} через каждые 6 итераций. Таким образом, алгоритм параллельных подстановок для движения солитонов содержит 4 подстановки $\Phi = \{\theta', \theta'_{Av}, \theta''_1, \theta''_2\}$, где θ' и θ'_{Av} — подстановки, дополненные контекстами второго рода (i, m_1) и (x, m_2) , состояния которых меняются в соответствии с подстановками

$$\begin{aligned} \theta''_1 &: (i, m_1) \rightarrow (\alpha_1, m), \\ \theta''_2 &: (x, m_2) \rightarrow (\alpha_2, m_2), \end{aligned} \quad \text{где } \alpha_1 = (i + 1)_{\text{mod } N}, \alpha_2 = i_{\text{mod } 6}.$$

При периодических граничных условиях и $r = 4$ в клеточном массиве Ω_2 можно наблюдать движение двух волн (осредненных "частиц") справа налево, причем первая движется быстрее, обгоняя вторую.

3. КА-МОДЕЛИ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ

3.1. КА-модели двумерной диффузия

Идея клеточно-автоматного подхода к моделированию процессов газовой динамики состоит в следующем. Вводится понятие *частицы*. Это абстрактная сущность, которая характеризует наличие в каждой точке исследуемого пространства единицы массы, иногда обладающей единичной скоростью.

Если моделируется поток жидкости или газа, то частицам придается единичный вектор скорости. Частицы движутся в направлении, заданном вектором скорости и меняют направление своего движения при столкновениях между собой или с препятствиями. Правила столкновения и перемещения частиц составлены так, чтобы не нарушались законы сохранения массы, импульса и энергии. Набор этих правил составляет таблицу переходов элементарного конечного автомата, называемого *клеткой*. Состояние клетки определяет наличие или отсутствие составляющей скорости в данный момент в данной точке. Поведение каждой клетки представляется булевыми функциями, называемыми *микроскопическими уравнениями*.

Переход от физического представления какого-нибудь явления к его клеточно-автоматной модели и обратно, выполняется путем сопоставления физических характеристик со средним количеством частиц, входящим на определенное количество клеток. Так, например, физическая скорость газа в точке (i, j) исследуемого пространства равна векторной сумме скоростей частиц, находящихся в некоторой окрестности этой клетки, деленной на количество клеток в окрестности. Такое соотношение "микро" и "макро" характеристик соответствует непосредственному отображению физического объекта в математическую модель, поскольку любая физическая величина (плотность, температура, скорость и др.) получается измерением именно таким способом.

Наиболее простыми и хорошо изученными КА моделями газовой динамики являются модели процесса диффузии. В моделях диффузии состояния клеток (0 или 1) определяют наличие или отсутствие единицы массы, которая не наделена скоростью. Диффузия – процесс беспорядочного блуждания частиц, который приводит к выравниванию концентрации вещества в пространстве. В двумерном случае при постоянном коэффициенте диффузии d процесс описывается уравнением Лапласа

$$u_{t'} = d(u_{xx} + u_{yy}), \quad (23)$$

где $u(x, y, t')$ – концентрация вещества в точке Декартова пространства с координатами x, y в момент времени t' . После дискретизации по времени

и пространству путем замены переменных $x = hi, y = hj, t' = t\tau, i, j, \tau$ – целые положительные числа, уравнение (23) приобретает вид

$$u_{i,j}(t+1) = u_{i,j}(t) + D_e(u_{i-1,j}(t) + u_{i+1,j}(t) + u_{i,j+1}(t) + u_{i,j-1}(t) - 4u_{i,j}(t)), \quad (24)$$

где $D_e = \tau d/h^2$.

Такое конечно-разностное представление уравнения (23) иногда называют *непрерывным КА*, поскольку оно отличается от классического КА только алфавитом. Настоящие классические КА-модели диффузии имеют булев алфавит и эволюцию – в виде последовательности булевых массивов. А если нужно выразить значение концентрации в любой точке массива в привычном виде, то производят осреднение булевых значений, т.е. вычисление среднего значения по некоторой окрестности каждой клетки. Проверить факт того, что КА действительно моделирует диффузию можно двумя путями: аналитически и экспериментально. Аналитическое доказательство построено только для одной КА-модели, называемой в [39] *КА с окрестностью Марголуca*, в [14] *КА с поворотом блоков*. Экспериментальное доказательство состоит в выполнении процесса моделирования и сравнении эволюции КА с решением уравнения (23) на некотором наборе итераций. Пусть

$$u(i, j, t_e) = \langle v_{i,j}(t_a) \rangle \quad \forall (i, j) \in M,$$

где t_e и t_a – номера итераций в явном решении (23) и в эволюции КА, соответственно. И пусть соотношение выполняется для всех $t_a/t_e = const$. Тогда приведенный коэффициент диффузии в уравнении (24) D_e находится в следующем соотношении с соответствующим коэффициентом КА-модели D_a ,

$$D_a = D_e \frac{t_a}{t_e}. \quad (25)$$

Если для всех итераций D_a одинаковы, то можно сделать заключение, что КА моделирует диффузию с постоянным приведенным коэффициентом, равным D_a .

Все КА-модели диффузии – стохастические. Далее будут приведены две КА-модели двумерной диффузии: наивная диффузия и КА-диффузия с окрестностью Марголуca.

Наивная КА-диффузия – наиболее примитивная модель диффузии, которая непосредственным образом отображает представление о процессе, как о блуждании частиц в стремлении выровнять концентрацию вещества в пространстве. В примере 2 был показан вариант одномерной

наивной диффузии при двух режимах функционирования КА: асинхронном и двухтактном синхронном. Здесь мы покажем двумерную наивную диффузию при асинхронном режиме применения подстановок и вероятностном выборе соседа для обмена состояниями. Алгоритм моделирования определен на клеточном массиве с алфавитом $A = A_B \cup A''$, где $A'' = \{0, 1, \dots, N\}$ - алфавит контекстных клеток, и множеством имен

$$M = M' \cup M'', \quad M' = \{i, j : i, j = 0, \dots, N\}, \quad M'' = \{m_i, m_j, m_k\}.$$

Алгоритм КА-диффузии представлен одной основной подстановкой

$$\theta : \{(u, (i, j)), (u_k, \phi_k(i, j))\} \star \{(i, m_i), (j, m_j), (k, m_k)\} \rightarrow \{(u_k, (i, j)), (u, \phi_k(i, j))\} \quad (26)$$

и тремя контекстными подстановками

$$\begin{aligned} \theta''_i : (x, m_i) &\rightarrow (i, m_i), & i &= rand_1 \times N, \\ \theta''_j : (x, m_j) &\rightarrow (j, m_j), & j &= rand_2 \times N, \end{aligned} \quad (27)$$

$$\theta''_k : (x, m_k) \rightarrow (k, m_k). \quad \begin{cases} 1 & \text{если } 0 < rand_3 \leq 0,25, \\ 2 & \text{если } 0,25 < rand_3 \leq 0,5, \\ 3 & \text{если } 0,5 < rand_3 \leq 0,75, \\ 4 & \text{если } 0,75 < rand_3 \leq 1, \end{cases}$$

где $rand_1, rand_2, rand_3$ - случайные числа в интервале $[0,1]$.

На рис.3 показан результат тестирования наивной КА-диффузии. Моделировался двумерный диффузионный процесс. Исходным состоянием служил заполненный нулями клеточный массив, размерами 200×200 , в центральной части которого имеется квадратная область Ω' высокой концентрации,

$$\Omega' = \{(1, (i, j)) : i, j = 80, \dots, 120\}.$$

Из рис.3 видно, что процесс диффузии постепенно превращает плотный квадрат в круг с уменьшающейся от центра концентрацией. Для получения коэффициента диффузии наивной модели производилось осреднение концентрации в каждой точке по окрестности размером с радиусом $r = 8$ клеток. Осредненные клеточные массивы для $t_a = 50, 100, 200, 500$ сравнивались с решением уравнения (24) при $D = 0,2$. Совпадения с погрешностью $\epsilon < 3\%$ отмечены для $t_e = 105, 218, 408, 2760$, соответственно. Это означает, согласно (25), что при радиусе осреднения $r = 8$

$$\frac{t_a}{t_e} \approx 2,1, \quad D_a \approx 0,2 \times 2,1 = 0,42.$$

Для разных радиусов осреднения D_a различно. Оно слабо увеличивается с ростом r , так как процедура осреднения тоже имеет эффект диффузии. Так при $r = 16$ отношение $t_a/t_e = 2,3$. Следовательно $D_a \approx 0,46$.



Рис. 4. Наивная асинхронная КА-диффузия: глобальные состояния клеточного массива при $t=0$, $t=100$, $t=250$

При этом погрешность при сравнении D_a с D_e при увеличении r уменьшается. Следовательно, если необходимо, чтобы приближение к непрерывному решению было лучшим, следует выбирать массивы больших размеров при малых значениях h . Тогда радиус осреднения может быть выбран достаточно большим. К сожалению, для наивной диффузии нет ни формулы, ни таблицы, по которым можно было бы заранее узнать коэффициент диффузии D_a по заданному радиусу осреднения.

КА-диффузия с окрестностью Марголуса подробно описана в [13]. Для краткости будем называть ее ТМ-диффузией по первым буквам ее авторов, как это принято в западной литературе по КА-моделям газовой динамики. ТМ-диффузия является более популярной, чем наивная диффузия, по двум причинам. Во-первых, потому что она обладает свойством, который в математике называют "эlegantностью", то есть сочетанием простоты и эффективности. Во-вторых, существует строгое математическое доказательство, что она аппроксимирует оператор Лапласа [39]. Клеточный массив $\Omega = \Omega' \cup \Omega''$ имеет базовую часть с булевым алфавитом состояний A_B и множеством имен $M' = \{(i, j) : i, j = 0, \dots, N\}$, а также контекстную часть тоже с булевым алфавитом и множеством имен $M'' = \{m_p, m_t\}$. В M' выделяются два подмножества имен: $Even = \{(i, j) : i_{mod_2} = j_{mod_2} = 0\}$ и $Odd = \{(i, j) : i_{mod_2} = j_{mod_2} = 1\}$.
Шаблон

$$T(i, j) = \{(i, j), (i, j + 1), (i + 1, j + 1), (i + 1, j)\}$$

определяет для каждого имени $(i, j) \in M'$ локальную конфигурацию, представляющую собой блок из четырех клеток

$$S(i, j) = \{(u_1, (i, j)), (u_2, (i, j + 1)), (u_3, (i + 1, j + 1)), (u_4, (i + 1, j))\}. \quad (28)$$

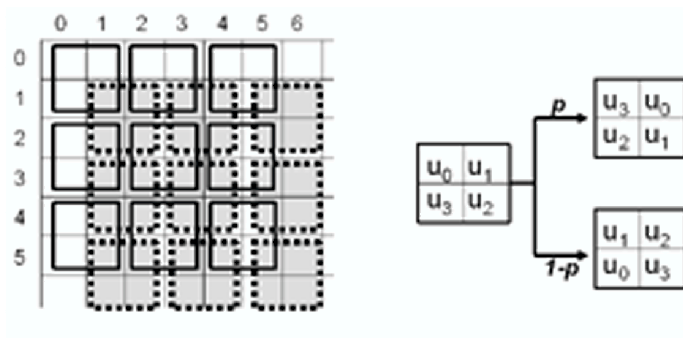


Рис. 5. ТМ-диффузия: а) покрытия блоками (четные блоки очерчены серым квадратом, нечетные - черным), б) графическое представление базовой подстановки

Таким образом, для любой пары $(T(i_1, j_1), T(i_2, j_2))$ справедливо

$$\begin{aligned} T(i_1, j_1) \cup T(i_2, j_2) &= \emptyset, \text{ если } (i_1, i_2, j_1, j_2 \in \text{Even}) \ \& \ (i_1 \neq i_2, j_1 \neq j_2), \\ T(i_1, j_1) \cup T(i_2, j_2) &= \emptyset, \text{ если } (i_1, i_2, j_1, j_2 \in \text{Odd}) \ \& \ (i_1 \neq i_2, j_1 \neq j_2). \end{aligned} \quad (29)$$

Множество локальных конфигураций $P_{\text{even}} = \{S(i, j) : (i, j) \in \text{Even}\}$ составляет *четное разбиение* клеточного множества Ω , а $P_{\text{odd}} = \{S(i, j) : (i, j) \in \text{Odd}\}$ – его *нечетное разбиение*, т.е.

$$\bigcup_{(i,j) \in \text{Even}} S(i, j) = \bigcup_{(i,j) \in \text{odd}} S(i, j) = \Omega. \quad (30)$$

Функционирование КА происходит в двухтактном синхронном режиме. Каждая итерация делится на два такта. На четных тактах базовая подстановка применяется к четным блокам, на нечетных - к нечетным. Подстановка выполняет сдвиг состояний в клетках блока в вероятностью p по часовой стрелке и с вероятностью $(1 - p)$ – против часовой стрелки.

Для вычисления направления поворота блока состояний в каждую подстановку вводится контекстная клетка (x_p, m_p) , а для управления чередованием четного и нечетного тактов – контекстная клетка (x_t, m_t) .

Полная система подстановок имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
\theta_1 : & \{(u_1, (i, j)), (u_2, (i, j + 1)), (u_3, (i + 1, j + 1)), (u_4, (i + 1, j))\} \\
& \star \{(0, m_p), (0, m_t)\} \rightarrow \\
& \{(u_4, (i, j)), (u_1, (i, j + 1)), (u_2, (i + 1, j + 1)), (u_3, (i + 1, j))\}, \\
\theta_2 : & \{(u_1, (i, j)), (u_2, (i, j + 1)), (u_3, (i + 1, j + 1)), (u_4, (i + 1, j))\} \\
& \star \{(1, m_p), (0, m_t)\} \rightarrow \\
& \{(u_2, (i, j)), (u_3, (i, j + 1)), (u_4, (i + 1, j + 1)), (u_1, (i + 1, j))\}, \\
\theta_3 : & \{(u_1, (i, j)), (u_2, (i, j + 1)), (u_3, (i + 1, j + 1)), (u_4, (i + 1, j))\} \\
& \star \{(0, m_p), (1, m_t)\} \rightarrow \\
& \{(u_4, (i, j)), (u_1, (i, j + 1)), (u_2, (i + 1, j + 1)), (u_3, (i + 1, j))\}, \\
\theta_4 : & \{(u_1, (i, j)), (u_2, (i, j + 1)), (u_3, (i + 1, j + 1)), (u_4, (i + 1, j))\} \\
& \star \{(1, m_p), (1, m_t)\} \rightarrow \\
& \{(u_2, (i, j)), (u_3, (i, j + 1)), (u_4, (i + 1, j + 1)), (u_1, (i + 1, j))\}, \\
\theta_p'' : & (x_p, m_p) \rightarrow (\alpha_p(rand), m_p), \\
\theta_t'' : & (x_t, m_t) \rightarrow (\alpha_t(i, j), m_t),
\end{aligned} \tag{31}$$

где

$$\alpha_p = \begin{cases} 1, & \text{если } rand \leq p, \\ 0, & \text{если } rand > 1 - p, \end{cases}$$

$$\alpha_t = \begin{cases} 1, & \text{если } (i, j) \in Even, \\ 0, & \text{если } (i, j) \in Odd. \end{cases}$$

В [39] доказано, что при равной вероятности выбора направления поворотов блоков ($p=0,5$), коэффициент диффузии для этой модели $D_a = 3/2$. Уменьшая p и манипулируя значениями шагов по времени и пространству τ и h , можно моделировать процесс диффузии с любым коэффициентом.

На рис.6 показаны три глобальных состояния КА, моделирующего ТМ-диффузию, начинающуюся из состояния, в котором плотная концентрация одного вещества распределена в виде пятен в другом веществе. Размеры клеточного массива равны 200×200 .

3.2. КА-модели потоков жидкости

КА-моделирование потоков жидкости составляет собственное направление в газовой динамике, которое получило название Gas-Lattice [23,25], что на русский язык не очень удачно переводится как "решеточный газ". Это направление объединяет целую группу моделей, в основе которой лежит понятие классического КА. Развиваясь самостоятельно решеточный газ пополняется новыми вариантами, использующими разного типа алфавиты и вещественные функции переходов к локальным равновесным

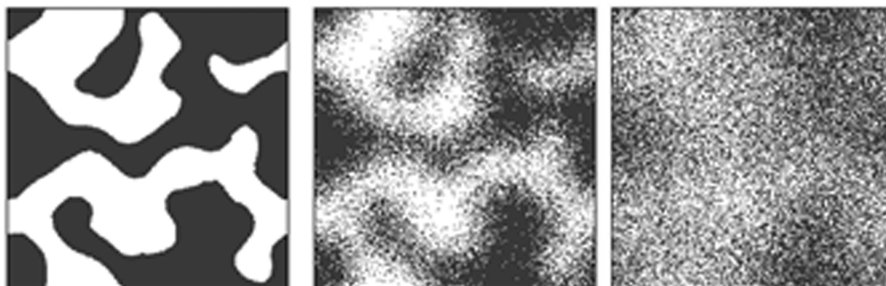


Рис. 6. ТМ-диффузия: Три глобальных состояния процесса ТМ-диффузии: $t = 0, t = 10, t = 50$.

состояниям, такие как (Gas-Lattice-Boltzmann) [25, 26], кинетические модели [28] и другие, обладающие более широкими моделирующими возможностями, чем уравнения Больцмана и Навье-Стокса.

Принципы построения клеточно-автоматных моделей исходят из общих законов физики, действующих в некотором "дискретном мире", стилизованном под молекулярную динамику. Газ представлен некоторыми гипотетическими частицами, движущимися в свободном пространстве и сталкивающимися друг с другом. В каждой клетке одновременно может находиться несколько движущихся частиц (не более чем число соседних клеток) и несколько частиц, находящихся в покое. Соседство клетки определяется шаблоном соседства, содержащим только клетки, находящиеся на расстоянии равном единице. Движущаяся частица снабжена вектором скорости, направленным в сторону одного из соседей. Частицы обладают следующими свойствами.

- Масса частицы равна единице.
- Модуль вектора скорости частицы либо равен нулю (частица покоя) либо равен единице.
- Координаты местоположения частиц могут принимать значения только равные именам клеток из клеточного массива.
- Вектор скорости частицы может быть направлен только в сторону одной из соседних клеток.
- В один и тот же момент времени в одной клетке не может находиться более одной частицы с одинаковыми векторами скорости.

Таким образом, в каждый момент времени состояние клетки представлено булевым вектором $s = (s_1, \dots, s_b)$ длины $b = b_n + b_r$, где b_n - количество соседних клеток, b_r - количество частиц покоя. Каждый разряд вектора определяет наличие ($s_l = 1$) или отсутствие ($s_l = 0$) частицы

с определенным вектором скорости \mathbf{c}_l , направленным к l -му соседу. Частицы покоя имеют нулевую скорость.

Алфавитом состояний КА является множество булевых векторов, $A = \{(s_1, \dots, s_b) : s_l \in \{0, 1\}\}$, мощность алфавита $|A| = 2^b$. Множество имен $M = \{m : m = (i, j, k)\}$ содержит множество наборов координат дискретного пространства. Шаблон соседства $T(m) = \{m, \phi_1(m), \phi_2(m), \dots, \phi_{b_n}(m)\}$. Режим работы КА - синхронный.

Функция переходов элементарного автомата строится согласно следующим правилам.

Каждая итерация состоит из двух тактов, называемых *фазой сдвига* и *фазой столкновения*. Чередование фаз регулируется тактирующей контекстной клеткой m_t , состояния которой $x = 0$ и $x = 1$ разрешают применение подстановок фазы сдвига и столкновения, соответственно.

Фаза сдвига моделирует составляющую переноса, т.е. происходит перемещение всех движущихся частиц на одну клетку в направлении указанном ее вектором скорости. Параллельная подстановка, описывающая фазу сдвига имеет контекст первого рода. Базовая часть подстановки содержит только одну клетку. Функция перехода фазы сдвига детерминирована даже в вероятностных моделях. Формально фазу сдвига удобно представлять в виде системы подстановок, каждая из которых определяет изменения одного компонента вектора состояний, то есть перемещение одной частицы.

$$\theta_l : \{(s_l, m)\} * \{(s'_l, \phi_l, m), (m_t, 0)\} \rightarrow \{(s'_l, m)\}, \quad l = 1, \dots, b_n. \quad (32)$$

В фазе столкновения происходит изменение направления движения частиц, когда они появляются в одной и той же клетке. Фаза столкновения описывается одноклеточной подстановкой, не имеющей контекста первого рода,

$$\theta(m) : \{(s, m)\} \rightarrow \{(s', m)\}, \quad (33)$$

в которой производится замена одного состояния $s = (s_1, \dots, s_b)$ клетки на другое $s' = (s'_1, \dots, s'_b)$. Функция переходов фазы столкновения может быть как детерминированной, так и вероятностной. Обычно эти функции задаются в виде булевых таблиц с числом строк, равным 2^b . При этом в каждой строке содержится несколько равновероятных выходных состояний.

Главное условие, которому должна удовлетворять функция переходов: обеспечение выполнения законов сохранения массы и импульса. Чтобы эти требования выполнялись, нужно чтобы 1) булевы векторы состояний s и s' имели равное число единиц, и 2) сумма векторов скоростей частиц, соответствующих единицам в s и s' были равны, т.е.

$$\sum_{l=1}^b s_l = \sum_{l=1}^b s'_l, \quad \sum_{l=1}^b c_l = \sum_{l=1}^b c'_l. \quad (34)$$

Кроме законов сохранения, которые нетрудно выполнить в соответствии с (34), на КА-модель газовой динамики накладывается требование обеспечения *изотропии* процесса, которая определяется в случае дискретного пространства и фиксированных направлений движения частиц, структурой пространства. Условие изотропии накладывает на дискретное пространства требования к тензорам, характеризующим отношения симметрии между векторами скоростей движущихся частиц. В теории КА газовой динамики условия изотропии определяются как тензоры отображения дискретного пространства КА в декартову решетку. Векторы скоростей, вдоль которых может двигаться частица из каждой клетки образуют "звезду" $\{c_1, \dots, c_{b_m}\}$. Направления декартовых осей обозначаются $\alpha, \beta, \gamma, \epsilon$, причем каждый из этих символов может обозначать любую из трех осей. Пусть проекция скорости c_l на ось α равна $c_{l\alpha}$. Тогда условия изотропии имеют следующий вид.

1. Для тензоров первого ранга

$$\sum_l c_{l\alpha} = 0, \quad (35)$$

т.е. сумма векторов "звезды" равна 0.

2. Для тензоров второго ранга

$$\sum_l c_{l\alpha} c_{l\beta} = \frac{b_m c^2}{D} \delta_{\alpha\beta}, \quad (36)$$

где $D \in \{1, 2, 3\}$ - размерность пространства моделирования, c - модуль вектора скорости. $\delta_{\alpha\beta}$ - символ Кронеккера

$$\delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1 & \text{если } \alpha = \beta \\ 0 & \text{если } \alpha \neq \beta. \end{cases}$$

3. Для тензоров третьего ранга

$$\sum_l c_{l\alpha} c_{l\beta} c_{l\gamma} = 0. \quad (37)$$

4. Для тензоров четвертого ранга

$$\sum_l c_{l\alpha} c_{l\beta} c_{l\gamma} c_{l\epsilon} = \frac{b_m c^4}{D(D+2)} (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\epsilon} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\epsilon} + \delta_{\alpha\epsilon} \delta_{\beta\gamma}). \quad (38)$$

В [23, 25] структура дискретного пространства считается изотропной, если все четыре условия выполнены. Для двумерного случая этим условиям удовлетворяет гексагональная решетка, и только она. Для трехмерного пространства такой структуры не существует вовсе, была найдена четырехмерная структура, проекция которой на трехмерное пространство удовлетворяет всем четырем условиям, но обладает чрезмерной сложностью вычисления функции переходов (2^{27} строк таблицы переходов). Однако, модели для которых удовлетворяются только три первых условия тоже изучаются и во многих случаях оказываются вполне пригодными для моделирования.

Каждая конкретная КА-модель характеризуется двумя модельными параметрами, зависящими от средней концентрации частиц в клетках: *модельной вязкостью* ν_{mod} и *корректирующим коэффициентом* g . Способы вычисления этих величин для КА-модели любой структуры выведены в [23]. Модельная вязкость зависит от структуры пространства и вычисляется исходя из функции переходов путем учета градиентов векторов скоростей влияющих на величину внутреннего трения. Для разных вероятностных моделей модельная вязкость получается равной от 0.1 до 0.3. Коэффициент $g(n)$, вносящий коррекцию на дискретность, зависит от средней концентрации, т.е. от среднего числа частиц в клетках

$$n = \frac{1}{|\Omega|} \sum_{\Omega} \sum_{l=0}^{b_m} s_l.$$

Он выражается простой формулой

$$g(n) = \frac{b}{2b_m} \left(\frac{b-2n}{b-n} \right). \quad (39)$$

Эволюция КА, которая получается в результате моделирования в виде последовательности булевых массивов не привычна для восприятия. От нее необходимо перейти к вещественным значениям физических величин. Это выполняется в два этапа. На первом этапе вычисляются две "модельные величины". Это осредненные значения концентрации частиц $\langle \rho(m) \rangle$ и скорости потока $\langle u(m) \rangle$ в каждой клетке. Осреднение числа частиц по некоторой окрестности осреднения $Av(m)$ следующим образом.

$$\langle \rho(m) \rangle = \sum_{Av} \sum_{l=0}^b s_l, \quad \langle u(m) \rangle = \sum_{Av} \sum_{l=0}^b c_l. \quad (40)$$

Так, например, на рис. 7 показана сумма скоростей в области осреднения в клеточном массиве с гексагональной структурой дискретного пространства.

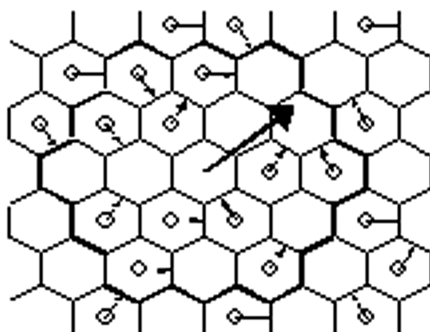


Рис. 7. Суммирование векторов скорости в области осреднения

На втором этапе осуществляется переход от модельных значений к физическим простым умножением на соответствующие коэффициенты перехода. Например, пусть моделируемый процесс имеет следующие физические параметры: характерный линейный размер - l метров, кинематическая вязкость жидкости - ν м²/сек. В результате моделирования на клеточном массиве с линейным размером l_{mod} клеток получены осредненные скорости $\langle u(m) \rangle_{mod}$ и осредненные концентрации $\langle rho(m) \rangle_{mod}$. Тогда соотношения между физическими и модельными величинами длин, вязкости, времени, скорости и падения давления получаются равными, соответственно

$$f_l = l/l_{mod}, \quad f_\nu = \nu/\nu_{mod}, \quad f_t = f_l^2/f_\nu, \quad f_u = g f_\nu / f_l, \quad f_p = \Delta p / \rho_{mod}. \quad (41)$$

Соотношения (41) позволяют легко вычислить физические значения скорости $u = f_u \langle u \rangle_{mod}$ и падения давления $\Delta = f_p \langle \rho \rangle_{mod}$.

Граничные условия в КА-моделях пространственной динамики задаются введением в модель дополнительных клеток, функции переходов которых отличаются от описанных выше. Кроме основных клеток, функционирование которых описывает процесс в моделируемом пространстве вводятся клетки двух типов: *клетки-стенки* и *клетки-источники частиц* [40]. Фаза сдвига в клетках всех типов происходит одинаково, различия в поведении есть только на фазе столкновения. На этой фазе в клетках стенки происходит "отражение" частиц. Правила отражения зависят от свойств стенки. Для стенок с трением законом отражения является изменение всех направлений скоростей на противоположные. Следует отметить, что при этом может нарушаться закон сохранения импульса, что соответствует физике трения о стенку. В клетках-источниках происходит генерация частиц, нарушая закон сохранения массы. В каждой клетке-источнике с некоторой вероятностью появляются частицы со

всевозможными направлениями вектора скорости. Выстроив такие клетки в пространстве в одной плоскости, можно получить источник равномерного потока частиц. Изменяя вероятность рождения частиц, можно изменять среднюю концентрацию частиц в потоке, что соответствует изменению давления. Важным является тот факт, что такое определение граничных условий приводит к тому, что объем вычислений при моделировании зависит только от общего количества клеток в автомате, но не зависит от их типов. Поэтому сколь сложными бы ни были граничные условия, время моделирования от этого не увеличивается [46].

Детерминированная модель газовой динамики. Первая КА-модель газовой динамики получила свое название "НРР-газ" по первым буквам ее трех авторов (Hardy, Pazzis, Reauman) [5]. В этой модели газ представлен клеточным массивом $\Omega = \{v, (i, j)\}$, в котором алфавит состояний $A = \{v : v = (s_1, s_2, s_3, s_4), s_l \in \{1, 0\}, l = 1, 2, 3, 4\}$, – множество векторов длиной 4, поскольку каждая клетка имеет 4 соседа. Множество имен $M = \{(i, j) : i, j = 0, \dots, N\}$. Значение компонента $s_l = 1$ в векторе состояния v клетки $(v, (i, j))$ означает, что в ней находится частица, движущаяся с единичной скоростью по направлению к l -му соседу. Соседи пронумерованы в соответствии с порядком именуемых функций в шаблоне

$$T(i, j) = \{(i - 1, j), (i, j + 1), (i + 1, j), (i, j - 1)\}, \quad (42)$$

который обычно называется шаблоном *крест*.

Режим функционирования НРР-газа – синхронный двухтактный, регулируемый тактирующим контекстом. На фазе сдвига все частицы перемещаются на одну клетку в направлении векторов их скоростей. На фазе столкновения две частицы с противоположными скоростями, попавшие в одну и ту же клетку, изменяют направления движения на 90 градусов (рис. 8). Для тактирования в основные подстановки добавляется контекстная клетка (x, m) , и изменяющая ее подстановка θ'' . Система подстановок НРР-газа имеет следующий вид.

$$\begin{aligned} \theta_1 &: \{(s_l, (i, j))\} * \{(s'_l, \phi_l(i, j)), (0, m_l)\} \rightarrow \{(s'_l, (i, j))\} \quad \forall l \in \{1, 2, 3, 4\} \\ \theta_2 &: \{(0, 1, 0, 1), (i, j)\} * (1, m) \rightarrow \{(1, 0, 1, 0), (i, j)\}, \\ \theta_3 &: \{(1, 0, 1, 0), (i, j)\} * (1, m) \rightarrow \{(0, 1, 0, 1), (i, j)\}, \\ \theta'' &: (x, m) \rightarrow (\bar{x}, m). \end{aligned} \quad (43)$$

НРР-газ очень простая модель, удовлетворяющая требованиям сохранения массы и импульса, поскольку суммарная масса и скорости не изменяются функциями переходов. Условие изотропии удовлетворяется

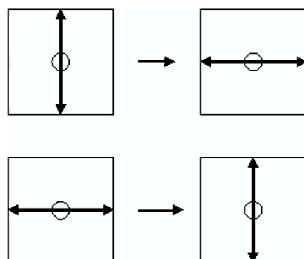


Рис. 8. НРР-газ: правила переходов КА на фазе столкновения

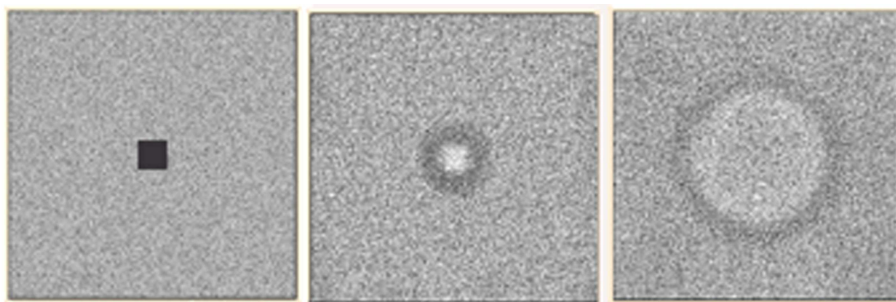


Рис. 9. НРР-газ: распространение круговой волны в газовой среде. Глобальные состояния при $t = 0, t = 10, t = 50$

для тензоров до третьего ранга, что тоже вполне приемлемо. Это подтверждается экспериментом, показанным на рис.9, где начальный удар в форме плотного квадрата вызывает круговое распространение волны. Недостатком модели является тот факт, что она имеет "лишние" законы сохранения - суммарная масса и импульс сохраняются вдоль каждой оси пространства по отдельности. Такова плата за детерминированность. Именно этот недостаток является причиной того, что НРР-газ не получил распространения как модель потока жидкости, хотя есть попытки использовать ее для моделирования звуковых волн и электромагнитных полей [41, 42].

Стохастические КА-модели потоков жидкости. Поиск КА-моделей, удовлетворяющих всем условиям изотропии, привел к появлению КА с гексагональной структурой клеточного пространства, который получил название FHP-модели (по именам авторов Frish, Hasslacher, Romeau) [24] и оказался мощным стимулом для дальнейшего развития исследований решеточного газа.

Гексагональная структура клеточного массива определяет число со-

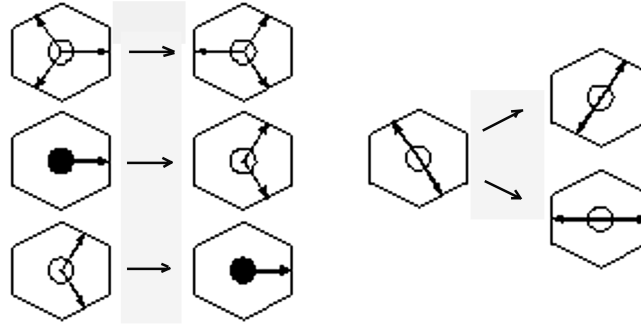


Рис. 10. FHP-модель. Графическое изображение функций переходов FHP-модели потока жидкости. Слева детерминированные, справа вероятностная

седей каждой клетки $b_m = 6$ и, следовательно, размеры ее таблицы переходов. Примеры функций переходов в графическом виде показаны на рис.10.

Формально FHP-алгоритм выражается системой подстановок, содержащей 6 подстановок вида (32), одной подстановки вида (33), в которой функция переходов задана таблицей с $2^b * \alpha$ строками (α – среднее число вероятностных исходов), а также контекстной и вероятностной подстановками.

Вычислительные эксперименты над FHP-моделью показали очень близкое сходство с результатами решения уравнения Навье-Стокса при числах Рейнольдса $Re < 100$, а при моделировании потоков жидкости в трубах при $Re < 3000$. Важнейшим научным результатом исследования этой модели стало строгое доказательство того, что она аппроксимирует уравнение Навье-Стокса со вторым порядком точности. Стремление увеличить число Рейнольдса привело к появлению нескольких вариантов FHP-моделей, различающихся числом частиц покоя [23], поскольку их наличие увеличивает число степеней свободы движения частиц, способствуя расширению возможности модели. Некоторый успех в этом был достигнут, однако турбулентных течений моделировать не удалось.

В [44] предложена интересная модификация FHP-модели. Она состоит в том, что добавлена одна частица покоя, которая с заданной вероятностью превращается в движущуюся частицу, причем направление ее движения случайное равновероятное. Функция переходов для такой частицы не сохраняет импульс, однако статистически суммарный импульс остается неизменным.

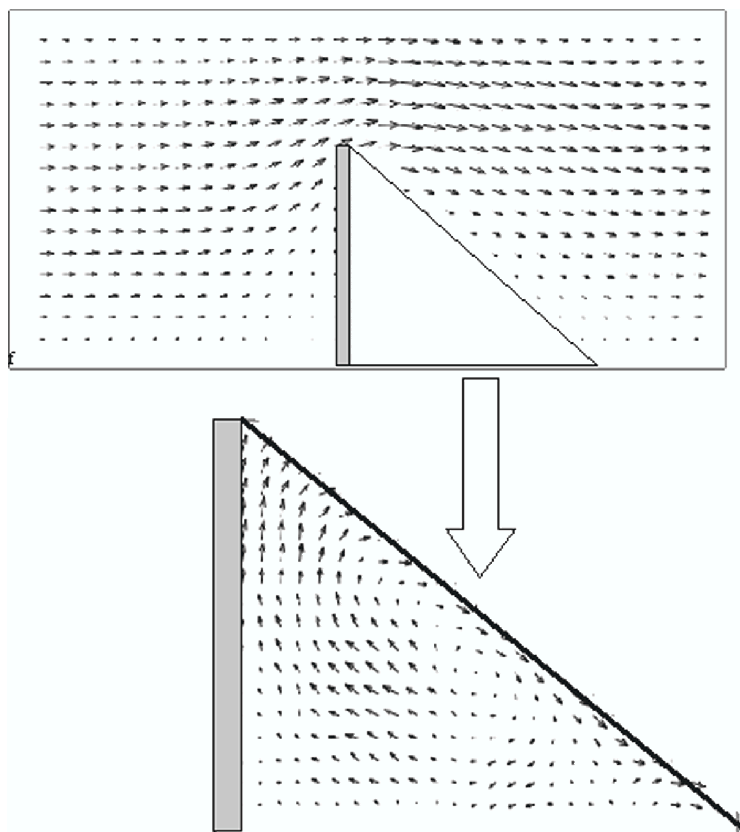


Рис. 11. КА-модель RD-1: Проекция поля скоростей потока вязкой жидкости в трубе с задвижкой

Эксперименты, описанные в [44], показали, что введение таких свободно движущихся частиц расширяет моделирующие возможности модели в сторону увеличения числа Рейнольдса.

Успех двумерной ФНР-модели стимулировал поиск аналогичных моделей для трехмерных потоков. К сожалению, эти разработки не оказались столь же плодотворными. Было обнаружено, что трехмерной структуры, удовлетворяющей всем четырем условиям изотропии не существует. Взамен была предложена структура в виде четырехмерного "гранецентрического гиперкуба", которая некоторым образом проектировалась на трехмерное декартово пространство. Каждая клетка построенного на основе такой структуры клеточного массива имеет 24 соседа. Это значит, что вектор состояния с учетом трех введенных в модель частиц покоя

имеет длину $b = 27$, и, следовательно, число состояний равно 2^{27} . С учетом того, что каждое состояние имеет несколько равновероятных последователей, вычислительная сложность становится неприемлемой даже для многопроцессорных мощных компьютеров. Решение проблемы было найдено путем ослабления требований к изотропии. В [45, 46] предложена трехмерная КА-модель, для которой условия изотропии выполняются для тензоров до третьего порядка. Клетки в этой модели имеют форму ромбических додекаэдров, которые заполняют трехмерное пространство без промежутков. По названию этого многогранника было дано название модели - RD-1. Центрам додекаэдров ставится в соответствие множество наборов координат, составляющих множество имен клеточного массива. Расстояния между центрами принимаются равным модельным "единицам" длины. Векторы скорости направлены к центрам соседних додекаэдров, проходя через центры его граней. Поскольку граней 12, то и соседство составляют 12 клеток. В декартовой системе координат клеточный автомат расположен таким образом, что углы между направлениями векторов скорости частиц и координатными осями составляют либо 90° , либо 45° . Поэтому проекции единичных векторов на декартовы оси равны либо 0, либо 0.707 соответственно.

В различных модификациях модели возможны различные варианты правил столкновения, но во всех случаях, разумеется, должны выполняться законы сохранения массы и импульса. В исследованиях [46] использовался полный набор правил переходов, удовлетворяющий законам сохранения, и вводилась одна частица покоя (отсюда в названии модели появилась 1). Так как в структуре решетки модели 12 соседей и одна частица покоя, то число входных состояний равно 2^{13} . Каждому i -му из этих 8192 входных состояний таблицы переходов автомата соответствуют все такие выходные состояния, у которых суммарные масса и импульс частиц в клетке не изменяются при столкновении. Эти наборы из n_i выходных состояний ($i = 1, 2, \dots, 8192, n_i = 1, 2, \dots, 56$) и приняты за правила столкновения с вероятностью срабатывания каждого варианта $p = 1/n_i$. В [45] путем сравнения результата вычислительного эксперимента с аналитическим решением (закон Пуазейля) для потока нефти в трубе показано, что анизотропия не проявляет себя при требованиях на точность вычислений, не превышающей третьего десятичного знака. Значения модельного и физического чисел Рейнольдса различаются только в четвертом десятичном знаке, что свидетельствует о пригодности и работоспособности модели RD-1 для практического моделирования. На рис.11 приведена проекция трехмерного поля скоростей потока в трубе с полужакрытой задвижкой. Картинка получена с помощью КА-модели RD-1. На увеличенном фрагменте пространства за задвижкой видны завихрения потока.

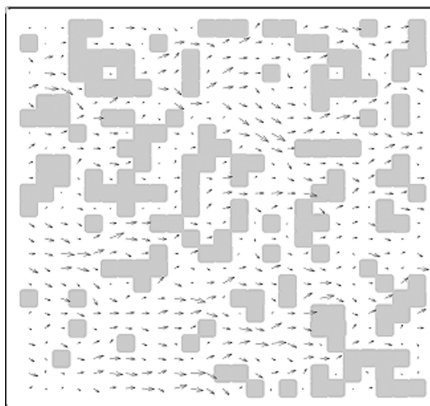


Рис. 12. КА-модель RD-1. Проекция поля скоростей в пористой среде

Простые граничные условия делают модель RD-1 удобным инструментом для моделирования потоков в пористых средах. На рис.12 показан фрагмент проекции поля скоростей в пористой среде. Серым цветом показаны участки твердой породы.

4. КОМПОЗИЦИЯ КА-АЛГОРИТМОВ

4.1. Преобразования клеточных массивов

В настоящее время известно и изучено достаточно много КА, эволюция которых имитирует простые физические, химические, биологические и др. явления. Однако, в реальной жизни обычно возникают задачи моделирования сложных процессов, состоящих из нескольких более простых. При этом составные части сложного явления могут быть заданы несколькими КА, имеющими разные алфавиты. Так, например, хорошо известна клеточно-автоматная модель кристаллизации (образования снежинок) [2]. Но если снежинки образуются в активной среде, то в модель необходимо ввести влияние химической реакции, которая, чаще всего, бывает задана в виде вещественной нелинейной функции. Возникает задача "сложения" двух пространственно распределенных процессов, один из которых представлен булевым массивом, а второй - вещественной пространственной функцией. Кроме того, исходные данные обычно задаются в вещественном виде, и, чтобы выполнить КА-моделирование, необходимо перейти к булевым представлениям. А после получения результатов - требуется обратный переход к вещественным функциям. В традиционной математической физике таких проблем нет. Там известные составляющие

процессов (диффузия, перенос, вихрь) моделируются соответствующими дифференциальными операторами, значения которых можно арифметически складывать, умножать, составлять в системы уравнений и т.д. В КА-моделировании простая арифметика не работает. Нельзя арифметически складывать булев массив с вещественным. Более того, если нужно получить в результате пространственную функцию, равную сумме значений функций, выраженных в виде булевых массивов, их нельзя складывать ни арифметически, ни логически. Возникает необходимость в математических операциях над клеточными массивами [48, 49], а также в преобразованиях булевых массивов в вещественные пространственные функции и обратно.

Операции над клеточными массивами, как в любой алгебре, подразделяются на унарные и бинарные [50, 51].

Унарные операции – это операции преобразований над клеточным массивом, которые могут быть представлены одной параллельной подстановкой. Из всего множества унарных операций следует выделить две: *осреднение* и *булева дискретизация*, которые необходимы для определения бинарных операций.

Осреднение $Av(\Omega_B)$ булева массива $\Omega_B = \{(v_m, m)\}$ представлено подстановкой вида

$$\theta_{Av} : \{(v_0, m)\} \star Av(m) \rightarrow \{(u_0, m)\}, \quad \forall m \in M, \quad (44)$$

где

$$Av(m) = \{(v_1, \phi_1(m)), \dots, (v_q, \phi_q(m))\} \quad (45)$$

- контекст первого рода в θ_{Av} , а функция переходов в правой части равна

$$u = \langle v \rangle = \frac{1}{q} \sum_{k=0}^q v_k, \quad v_k \in \{0, 1\}, \quad u \in [0.1]. \quad (46)$$

Булева дискретизация $Disc(\Omega_R)$ вещественного клеточного массива Ω_R представлена одноклеточной параллельной подстановкой

$$\theta_{Av} : \{(u, m)\} \rightarrow \{(v, m)\}, \quad \forall m \in M, \quad (47)$$

с функцией перехода

$$v = \begin{cases} 1 & \text{если } rand < u, \\ 0 & \text{если } rand \geq u. \end{cases}$$

Унарные операции осреднения и булевой дискретизации находятся в следующем отношении.

$$\begin{aligned}
 Disc(\Omega_B) &= \Omega_B, \\
 Av(\Omega_R) &= \Omega_R, \\
 Disc(Av(\Omega_B)) &= \Omega_B, \\
 Av(Disc(\Omega_R)) &= \Omega_R.
 \end{aligned} \tag{48}$$

Бинарные операции над клеточными массивами определены таким образом, чтобы соответствующие правила обычной арифметики выполнялись над их осредненными значениями.

$$\begin{aligned}
 \Omega_1 \Delta \Omega_2 &\Leftrightarrow Av(\Omega_1) \Delta Av(\Omega_2), \\
 u_1(m) \diamond u_2(m) &\Leftrightarrow \langle u_1(m) \rangle \diamond \langle u_2(m) \rangle \quad \forall m \in M,
 \end{aligned} \tag{49}$$

где Δ обозначает одну из операций над клеточными массивами: сложение \oplus , вычитание \ominus , умножение \otimes , а \diamond - обозначает одну из арифметических операций $+$, $-$, \times , соответственно, угловые скобки обозначают осредненные значения.

Осредненные значения приняты в качестве обобщенного алфавита по следующим соображениям. Во-первых, это облегчает физическую интерпретацию данных. Во-вторых, это позволяет использовать обычную арифметику для моделирования взаимодействий процессов в разнотипных массивах. Размер окрестности осреднения выбирается исходя из требования точности моделирования.

Из (49) ясно, что когда оба операнда имеют вещественные алфавиты, то арифметические правила над клеточными массивами совпадают с соответствующими правилами обычной арифметики. Однако, если один или оба операнда имеют булев алфавит, то поклеточные операции становятся более сложными. Так, если Ω_1 имеет булев алфавит, а Ω_2 - вещественный, и нужен булев результат $\Omega_3 = \Omega_1 \oplus \Omega_2$, то такой оператор задается одноклеточной подстановкой с функцией перехода [52]

$$v_3(m) = \begin{cases} 1 & \text{if } v_1(m) = 0 \ \& \ rand < \frac{u_2(m)}{(1-\langle v_1(m) \rangle)}, \\ v_1(m) & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \tag{50}$$

Когда необходимо вычислить $\Omega_3 = \Omega_1 \ominus \Omega_2$, то функция переходов равна

$$v_3(m) = \begin{cases} 0 & \text{if } v_1(m) = 1 \ \& \ rand < \frac{u_2(m)}{\langle v_1(m) \rangle}, \\ v_1(m) & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \tag{51}$$

Если оба операнда имеют булев алфавит и нужен булев клеточный массив в результате, то значения u_2 в (51) и (52) следует заменить на $\langle u_2 \rangle$. При выполнении операций над клеточными массивами следует также

иметь в виду, что вещественные значения должны оставаться в интервале $[0, 1]$. Если этого не получается, то алфавиты следует перенормировать.

Методы композиции КА имеют двухуровневую иерархию. Нижний уровень, называемый *локальной композицией*, состоит в построении одной системы параллельных подстановок из нескольких локальных операторов. Верхний уровень, называемый *глобальной композицией*, предназначен для построения сложного КА-алгоритма из нескольких глобальных операторов [16].

4.2. Локальная композиция

Локальная композиция $\lambda_s(\theta_1(m), \dots, \theta_l(m))$ представляет совместное функционирование нескольких простых локальных операторов. Есть две формы локальной композиции: *последовательная* и *параллельная*.

Последовательная локальная композиция предполагает применение локальных операторов к каждой клетке последовательно и требует l временных тактов для выполнения одного глобального шага. Результат локальной последовательной композиции – это локальный оператор, выраженный в виде локальной суперпозиции ее компонентов.

$$\theta(m) = \theta_l(\theta_{l-1}(\dots(\theta_1(m))))). \quad (52)$$

В общем случае операция локальной суперпозиции не коммутативна и не ассоциативна, т.е. если $\theta_1 \neq \theta_2 \neq \theta_3$, то

$$\begin{aligned} \theta_1(\theta_2(m)) &\neq \theta_2(\theta_1(m)), \\ \theta_3(\theta_2(\theta_1(m))) &\neq (\theta_3(\theta_2))(\theta_1(m)). \end{aligned} \quad (53)$$

Эти два свойства очень важны, т.к. результаты моделирования могут существенно различаться если изменить порядок применения локальных операторов, хотя, в случае длительной эволюции $\theta_1(\theta_2(\theta_1(\theta_2(m) \dots)))$ результат становится нечувствительным к тому, какой оператор был первым. Локальная суперпозиция может быть синхронной и асинхронной. В первом случае все компонентные подстановки применяются к одной и той же клетке. Во втором случае для каждой компонентной подстановки выбор значений (i, j) производится случайно.

Пример 5. Химическая реакция окисления окиси углерода на катализаторе, которая исследовалась с помощью нескольких кинетических моделей [53], представляется асинхронной локальной суперпозицией элементарных подстановок следующим образом.

Клеточный массив $\Omega(A, M)$ соответствует поверхности катализатора, которым служит металл платиновой группы. Каждой малой клетке поверхности катализатора ставится в соответствие имя $(i, j) \in$

$M, |M| = N \times N$. Алфавит содержит три символа: $A = \{a, b, \emptyset\}$, так что $(a, (i, j))$, $(b, (i, j))$ и $(\emptyset, (i, j))$ обозначают клетки, в которых находятся молекулы CO, O, или клетка пуста, соответственно.

В исходном состоянии все клетки пусты. Механизм реакции состоит из следующих элементарных действий в каждой клетке (i, j) .

1) Адсорбция CO из газа: если клетка (i, j) пуста, ее занимает молекула CO с вероятностью p_a , равной парциальному давлению CO в газовой среде.

2) Адсорбция O₂ из газа: если клетка (i, j) пуста и имеет пустого соседа, то в каждой из них оказывается молекула кислорода. Это происходит с вероятностью p_b . Один из четырех соседей клетки (i, j) выбирается с вероятностью $p_n = 0.25$.

3) Реакция окисления CO ($\text{CO} + \text{O} \rightarrow \text{CO}_2$): если в клетке (i, j) находится молекула CO и в соседней клетке находится молекула кислорода, то между ними происходит реакция. В результате получается молекула CO₂, которая переходит в газ. Обе клетки опустошаются. Соседняя клетка выбирается с вероятностью $p_n = 0.25$.

4) Та же самая реакция окисления CO ($\text{O} + \text{CO} \rightarrow \text{CO}_2$) происходит, если в клетке (i, j) находится молекула кислорода, а в соседней клетке – молекула CO.

Такой химический процесс моделируется локальной суперпозицией подстановок $\theta(i, j) = \theta_4(\theta_3(\theta_2(\theta_1(i, j))))$, где

$$\begin{aligned} \theta_1(i, j) &: \{(\emptyset, (i, j))\} \star (1, m_a) \rightarrow \{(a, (i, j))\}, \\ \theta_2(i, j) &: \{(\emptyset, (i, j))(\emptyset, \phi_k(i, j))\} \star (1, m_b), (k, m_n) \rightarrow \{(b, (i, j)), (b, (\phi_k(i, j)))\}, \\ \theta_3(i, j) &: \{(a, (i, j))(\emptyset, \phi_k(i, j))\} \star (k, m_h) \rightarrow \{(\emptyset, (i, j)), (\emptyset, (\phi_k(i, j)))\}, \\ \theta_4(i, j) &: \{(b, (i, j))(a, \phi_k(i, j))\} \star (k, m_g) \{(\emptyset, (i, j)), (\emptyset, (\phi_k(i, j)))\}. \end{aligned} \quad (54)$$

В (54) каждая l -ая подстановка ($l = 1, 2, 3, 4$) моделирует молекулярное действие из l -ого пункта приведенного выше описания механизма реакции. Именуемые функции $\phi_k(i, j)$, $k \in \{1, 2, 3, 4\}$, указывают на одного из четырех соседей клетки (i, j) , а именно, $\phi_1(i, j) = (i, j + 1)$, $\phi_2(i, j) = (i + 1, j)$, $\phi_3(i, j) = (i, j - 1)$, $\phi_4(i, j) = (i - 1, j)$.

Алгоритм моделирования включает в себя также тактирующие и вероятностные контексты, для чего к клеточному массиву добавляются клетки $\{(x, m_a), (x, m_b), (x, m_h), (x, m_g)\}$ и подстановки, изменяющие их состояния.

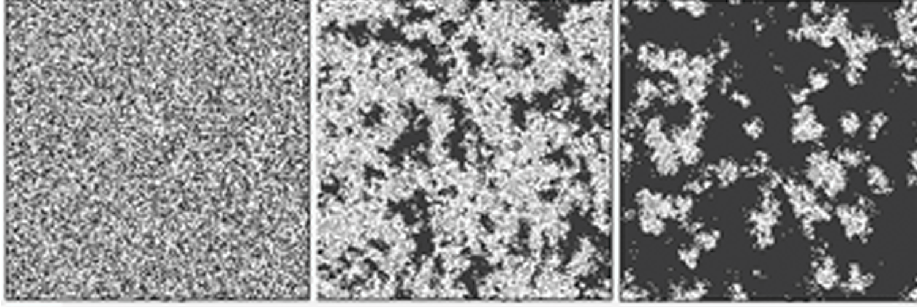


Рис. 13. Три глобальных состояния эволюции КА, моделирующего химическую реакцию, заданную системами постановок (54), (55). Черные пиксели обозначают CO, серые – O, белые – пустые места

$$\begin{aligned}
 \theta''_a &: (x, m_a) \rightarrow (\alpha_a, m_a), & \alpha_a &= 1, \text{ если } rand < p_a \\
 \theta''_b &: (x, m_b) \rightarrow (\alpha_b, m_b), & \alpha_b &= 1, \text{ если } rand < p_b \\
 \theta''_n &: (x, m_n) \rightarrow (\alpha_n, m_n), & \alpha_n &= k, \text{ если } (n-1)p_n < rand < np_n, \\
 \theta''_h &: (x, m_h) \rightarrow (\alpha_h, m_h), & \alpha_h &= k, \text{ если } (h-1)bp_n < rand < hp_n \\
 \theta''_g &: (x, m_g) \rightarrow (\alpha_g, m_g), & \alpha_g &= k, \text{ если } (g-1)p_n < rand < gp_n,
 \end{aligned}
 \tag{55}$$

где $n, h, g \in \{1, 2, 3, 4\}$. На рис.13 показаны 3 глобальных состояния, полученных при моделировании реакции на клеточном массиве размером 200×200 с периодическими граничными условиями.

Параллельная локальная композиция $\lambda_p(\theta_1(m), \dots, \theta_l(m))$ предполагает, что входящие в нее подстановки должны применяться одновременно. Следовательно, каждая подстановка (или система подстановок) должна действовать на своем клеточном массиве. Таким образом, в отличие от последовательного случая, результатом параллельной локальной композиции является несколько параллельно функционирующих КА.

$$\lambda(\theta_1(m), \dots, \theta_l(m)) = \{\theta_1(m), \dots, \theta_l(m)\}. \tag{56}$$

Если эти подстановки полностью независимы, т.е.

$$T_k(m) \cap T_g(m) = \emptyset \quad \forall g, k, \in \{1, \dots, l\}, \quad \forall m \in M, \tag{57}$$

то композиция называется *тривиальной*. Это значит, что каждый компонентный КА работает на своем клеточном массиве, и взаимодействие между ними возможно только после завершения их эволюций.

Если локальная параллельная композиция не тривиальна, т.е. участвующие в ней подстановки взаимодействуют между собой, то они долж-

ны иметь общие переменные. Это значит, что их функции переходов могут зависеть от состояний клеток во всех участвующих в композиции клеточных массивах.

$$u_k(t+1) = f_k(U_1(m) \cup U_2(m) \cup \dots \cup U_l(m)) \quad \forall k = 1, \dots, l, \quad (58)$$

где $U_k(m), k \in \{1, \dots, l\}$ - множество состояний в левых частях локальных конфигураций $\theta_1(m), \dots, \theta_l(m)$. Следовательно, их левые части должны иметь непустые пересечения, т.е. $\forall m \in M$

$$\begin{aligned} (S_k(m) \cup S_k''(m)) \cap (S_g(m) \cup S_g''(m)) &\neq \emptyset \\ (T_k(m) \cup T_k''(m)) \cap (T_g(m) \cup T_g''(m)) &\neq \emptyset \quad \forall k, g \in \{1, \dots, l\}. \end{aligned} \quad (59)$$

Кроме того, параллельное функционирование требует выполнения условий непротиворечивости (17), что означает, что базовые конфигурации не должны пересекаться. Отсюда вытекает условие корректности локальной параллельной композиции: *компонентные подстановки могут пересекаться только по контекстам.*

$$\begin{aligned} T_k'(m) \cap T_g'(m) &= \emptyset \\ T_k''(m) \cap T_g''(m) &\neq \emptyset \quad \forall k, g \in \{1, \dots, l\}, \end{aligned} \quad (60)$$

т.е. для каждого $\theta_k : S_k(m) \star S_k''(m) \rightarrow S_k'(m), k = 1, \dots, l$, имеют место следующие соотношения

$$S_k'(m) \in \Omega_k, \quad S_k(m) \in \Omega, \quad \Omega = \bigcup_{k=1}^l \Omega_k.$$

Пример 6. Одномерный процесс, относящийся к типу "жертва-хищник" в [43] исследован путем решения системы дифференциальных уравнений вида

$$\begin{aligned} u_t &= d_u u_{xx} + f_u(u, w) \\ w_t &= d_w w_{xx} + f_w(w, u), \end{aligned} \quad (61)$$

где d_u, d_w - коэффициенты диффузии,

$$f_u(u, w) = \left(\frac{35 + 16u - u^2}{9} - w \right) u, \quad f_w(u, w) = \left(u - \frac{5 + 2w}{5} \right) w. \quad (62)$$

В (61) u обозначает концентрацию хищников (рыб) а w - концентрацию жертвы (планктона) в какой-то области океана. Если применить к (61)

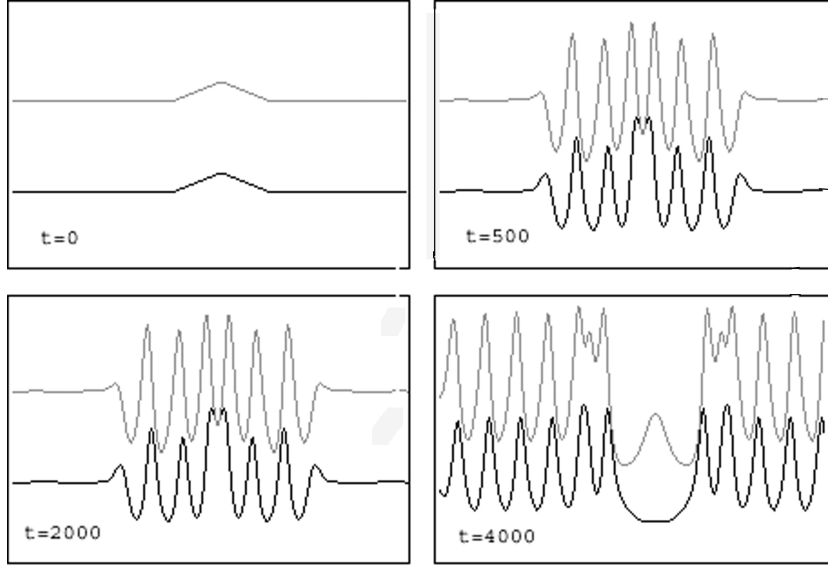


Рис. 14. Эволюция процесса "жертва-хищник", заданного локальной параллельной композицией (63). Четыре глобальных состояния: черная кривая показывает значения $u(i_u)$, серая - значения $w(i_w)$

явную схему пространственной дискретизации, то эта система окажется выраженной в виде параллельной локальной композиции двух КА с вещественными алфавитами. Множества имен клеточных массивов этих КА изоморфны, $M_u = \{i_u\}$ and $M_w = \{i_w\}$, $i_u, i_w = 0, 1, \dots, N$. Пространственные и временные шаги в обоих клеточных массивах одинаковы $h_u = h_w = h$, $\tau_u = \tau_w = \tau$. Локальные конфигурации в обеих подстановках имеют одноклеточные базы, и два соседа к ним образуют контексты первого рода.

Параллельная композиция этих КА состоит из двух подстановок

$$\begin{aligned} \theta_u &: \{(u_i, i)\} \star \{(u_{i-1}, i_u - 1), (u_{i+1}, i_u + 1), (w, i_w)\} \rightarrow \{(u_i(t+1), i_u)\}, \\ \theta_w &: \{(u_i, i)\} \star \{(w_{i-1}, i_w - 1), (w_{i+1}, i_w + 1), (u, i_u)\} \rightarrow \{(w_i(t+1), i_w)\}, \end{aligned} \quad (63)$$

в которых функции перехода имеют следующий вид.

$$\begin{aligned} u(t+1) &= u + D_u(u_{i-1} - 2u + u_{i+1}) + \tau f_u(u, w), \\ w(t+1) &= w + D_w(w_{i-1} - 2w + w_{i+1}) + \tau f_w(u, w), \end{aligned} \quad (64)$$

где $D_u = \tau d_u / h^2$ and $D_w = \tau d_w / h^2$.

Из (62) видно, что в начальном состоянии $u(i_u) = 5, w(i_w) = 10, i_u, i_w = 0, 1, \dots, N$, система находится в равновесии и ничего не происходит. Однако если равновесие нарушить, например, как показано на рис.14. ($t = 0$), то начинается перераспределение концентраций, приводящее к расширяющимся осцилляциям, Кривые, приведенные на рис. 14 - результат моделирования (63) со следующими параметрами: $\tau=0.03$ сек., $h=120$ см., $d_u = 0.0125\text{см}^2/\text{сек}$, $d_v = 0.1d_u$, что соответствует $D_u = (\tau d_u/h^2) = 0.05, D_w = 0.005$.

4.3. Глобальная композиция

Глобальная композиция $\theta(\Omega) = \gamma(\theta_1(\Omega), \dots, \theta_l(\Omega))$ моделирует совместное функционирование нескольких глобальных операторов. Как в случае локальной композиции в ней различают последовательную и параллельную глобальную композицию.

Последовательная глобальная композиция

$$\theta(\Omega) = \gamma_s(\theta_1(\Omega), \dots, \theta_l(\Omega))$$

представлена в виде суперпозиции глобальных операторов. Каждая итерация $\theta(\Omega)$ состоит из l последовательно применяемых параллельных подстановок, причем каждая следующая применяется к клеточному массиву, полученному от применения предыдущей. Шаги по времени τ_1, \dots, τ_l , также как и режимы функционирования компонентных КА могут различаться.

Применяемая в последовательной композиции операция, называемая *глобальной суперпозицией*

$$\theta(\Omega) = \theta_l(\theta_{l-1}(\dots(\theta_1(\Omega)))) \tag{65}$$

также как в локальном случае не коммутативна и не ассоциативна.

Пример 7. Двумерный процесс разделения фаз (8), приведенный в примере 1, происходит в активной среде, в которой имеет место еще и диффузия (31). Активность среды выражается нелинейной вещественной функцией реакции $f(u) = 0.5u(1 - u)$. Процесс может быть представлен в виде композиции трех глобальных операторов: разделения фаз $\theta_1(\Omega)$, содержащего подстановки (8), ТМ-диффузии $\theta_2(\theta_1(\Omega))$, содержащего подстановки (31) и глобального оператора, отражающего активность среды $\theta_3(\theta_2(\theta_1(\Omega)))$. Пусть $\theta_2(\theta_1(\Omega)) = \Omega_3, \Omega_3 = \{(v, (i, j))\}$. Тогда

$$\theta_3(\Omega_2) : \{(\langle v_{ij} \rangle, (i, j))\} \rightarrow \{(v'_{ij}, (i, j))\}, \quad \forall (i, j) \in M, \tag{66}$$

где

$$v'_{ij} = 0.5\langle v_{ij} \rangle(1 - \langle v_{ij} \rangle).$$

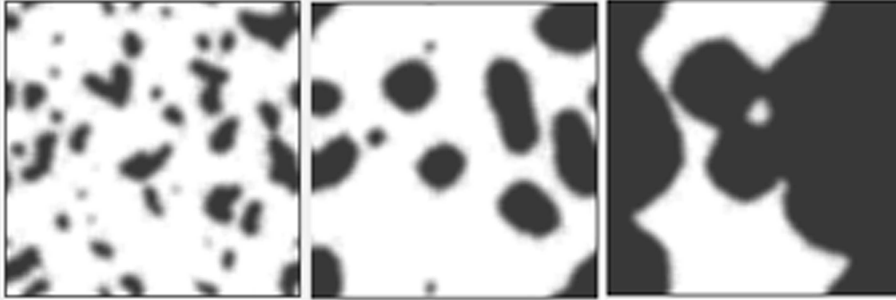


Рис. 15. Три глобальных состояния КА, моделирующего разделение фаз в активной среде с диффузией при $t = 5, t = 25, t = 70$

Если результат желателен в виде булева клеточного массива, то $\Omega_3 = \{(v', (i, j))\}$ следует дискретизировать в соответствии с (47).

Полученная композиция была применена к булеву клеточному массиву размером 200×200 с начальным глобальным состоянием $\Omega(0)$, в котором плотность распределения "единиц" $Av(i, j) \approx 0.5$ для всех $(v, (i, j)) \in \Omega(0)$, и с периодическими граничными условиями. На рис. 15 показаны три глобальных состояния процесса эволюции. Из рисунка видно, что на первых итерациях общее количество вещества (черный цвет) уменьшилось. Но, если все же остаются достаточно крупные плотные пятна, то химическая активность среды стимулирует их рост вплоть до полного насыщения.

Параллельная глобальная композиция $\gamma_p(\theta_1(\Omega), \dots, \theta_l(\Omega))$ предполагает, что все входящие в нее КА применяются параллельно. Результатом композиции является набор из l глобальных операторов, действующих каждый на своем клеточном массиве.

$$\gamma_p(\theta_1(\Omega_1), \dots, \theta_l(\Omega_l)) = \{\theta_1(\Omega), \dots, \theta_l(\Omega)\}. \quad (67)$$

Если при этом они не взаимодействуют, то композиция называется *тривиальной параллельной композицией*. Если же компонентные КА используют общие переменные, то должны выполняться условия непротиворечивости, которые в случае глобальной композиции выражаются теми же соотношениями (60), что и в случае локальной параллельной композиции.

Пример 8. Процесс разделения фаз, представленный в примере 1 подстановкой (8), действует на $\Omega_1 = \{(v, (i_1, j_1))\}$. Этот же процесс может быть описан дифференциальным уравнением в частных производных следующего вида [54].

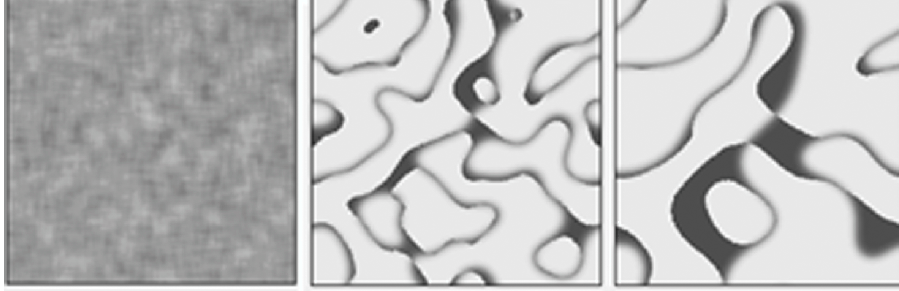


Рис. 16. Три состояния из эволюции параллельной глобальной композиции, моделирующей разность между КА и дифференциальным уравнением процесса разделения фаз, $t = 0, t = 20, t = 70$)

$$u_t = 0, 2(u_{xx} + u_{yy}) - 0.2(u - 0.1)(u - 0.5)(u - 0.9). \quad (68)$$

После применения явной схемы дискретизации, уравнение (68) принимает вид подстановки, действующей на $\Omega_2 = \{(u, (i_2, j_2))\}$, где

$$u' = u_{i,j} + 0.2(u_{i_1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1} - 4u_{i,j}) - 0.2\tau(u_{i,j} - 0.1)(u_{i,j} - 0.5)(u_{i,j} - 0.9).$$

Сравнить эволюции обоих вариантов КА можно путем построения параллельной глобальной композиции $\gamma_p(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$, в которой $\theta_1(\Omega_1)$ и $\theta_2(\Omega_2)$ функционируют независимо, а третий оператор $\theta_3(\Omega_3)$ вычисляет на каждой итерации абсолютное значение их разности

$$\Omega_3(t) = |\Omega_2(t) \ominus \Omega_1(t)|,$$

где $\Omega_3(t) = \{(w, (i_3, j_3))\}$ – клеточный массив с вещественным алфавитом. Глобальный оператор θ_3 функционирует на клеточном массиве $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Omega_3$, причем базовая локальная конфигурация $S_3(i, j)$ и правая часть $S'_3(i, j)$ входят в Ω_3 , а контекст первого рода - в $\Omega_1 \cup \Omega_2$, т.е. $\forall (i_3, j_3) \in M_3$

$$\theta_3 : \{(w, (i_3, j_3))\} \star \{(v, (i_1, j_1)), (u, (i_2, j_2))\} \rightarrow \{(w', (i_3, j_3))\}, \quad (69)$$

где

$$w' = \frac{1}{q} \sum_{k=0}^q |v_k - u|, \quad q = |Av(i, j)|.$$

На рис. 16 показаны разности глобальных состояний двух процессов на итерациях: $t = 0, t = 20, t = 70$. Видно, что эволюции различаются в местах переходов от одной фазы к другой.

5. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА КА-МОДЕЛИРОВАНИЯ

Главными характеристиками методов и алгоритмов моделирования считаются их сложность, точность, устойчивость и эффективность распараллеливания. Для КА-моделей перечисленные характеристики имеют несколько иной смысл, чем в них вкладывается в численном анализе. Более того, эти свойства КА, как модели пространственной динамики изучены очень слабо. Однако, поскольку КА-модели играют в этой области их применения ту же роль, что и дифференциальные уравнения в частных производных, а иногда и конкурируют с ними, то оценки вычислительных характеристик необходимы, хотя сравнения с аналогичными оценками для традиционных методов не всегда корректны. Очевидно, что из предлагаемого анализа вычислительных свойств выпадает класс непрерывных КА, поскольку он совпадает с классом решений дифференциальных уравнений явными методами, о которых все давно известно. Речь пойдет только о КА, в которых полностью или частично используются дискретные алфавиты.

5.1. Точность КА-моделирования

Насколько точно модель отражает то или иное моделируемое явление можно судить только накопив богатый опыт сравнений с натурными экспериментами. Сравнение с другими моделями можно считать корректным только в тех случаях, когда для "эталонной" модели такой опыт имеется.

Если придерживаться тезиса о том что КА-модель не есть аппроксимация дифференциального уравнения в частных производных, а является альтернативой к нему [27], то не следует рассматривать точность аппроксимации непрерывных уравнений дискретными выражениями. Поэтому далее рассматриваются только те нарушения точности, которые привносятся уже построенным КА в процессе его эволюции.

Основное свойство вычислений на булевых или символьных клеточных массивах состоит в том, что при их использовании в представлениях данных не существует "младших" и "старших" разрядов. Это свойство называется *бит-демократией* [24]. Ни один бит не теряется при счете, что немаловажно при итеративных вычислениях. Иными словами, операции над данными производятся абсолютно точно. Так, например, при моделировании поверхностных химических реакций (пример 5) вопроса о точности вычислений не возникает. Возникает вопрос о соответствии модели исследуемой реакции.

Ошибки при КА-моделировании привносятся, в основном, при переходах от дискретных алфавитов к непрерывным и обратно. Эти ошибки

становятся существенными, когда такие переходы выполняются на каждой итерации, что имеет место при композиции булевого и непрерывного КА.

Ошибки e_{Av} , вносимые осреднением, зависят от размеров окрестности осреднения $q = |Av(m)|$,

$$e_{Av} \leq 1/q. \quad (70)$$

Ошибки, вносимые булевой дискретизацией, зависят от характера (гладкости) дискретизируемой функции. Пусть

$$\Omega_B(A_B, M) = Disc(\Omega_R(A_R, M)), \quad \Omega_B = \{(v, m)\}, \quad \Omega_R = \{(u, m)\}.$$

Осредненное значение дискретизированного массива

$$Av(Disc(\Omega_R)) = \Omega_{BR} = \{(z, m)\}$$

. Математическое ожидание $\mu(u(m))$ можно определить как среднее значение $\langle u(m) \rangle$ в окрестности осреднения

$$\mu(u(m)) = \frac{1}{q} \sum_{k=0}^{q-1} v(\phi_k(m)) P_{v(\phi_k(m))=1} = \frac{1}{q} \sum_{k=0}^{q-1} u(\phi_k(m)) = z(m), \quad (71)$$

где $P_{v(\phi_k(m))=1}$ – вероятность того, что в клетке с именем $\phi_k(m)$ состояние $v_k(m) = 1$. Из (71) следует, что ошибка дискретизации $e_{Disc}(m) = u(m) - z(m)$ исчезает, если

$$u(m) = z(m) = \frac{1}{q} \sum_{k=0}^{q-1} u(\phi_k(m)). \quad (72)$$

Множество случаев, когда соотношение (72) имеет место, включает в себя линейные функции, параболы нечетных степеней и синусы с нулем в клетке m . Величиной обобщенной ошибки дискретизации для характеристики конкретной модели в [55] принята *средняя ошибка дискретизации*, равная

$$E = \frac{1}{M} \sum_M |u(m) - z(m)|. \quad (73)$$

Методы повышения точности. Как было показано, ошибки дискретизации зависят от двух факторов: 1) размеров окрестности осреднения и 2) от гладкости функции $u(m)$. Оба эти фактора обусловлены пространственным шагом h , который должен быть достаточно мал, во-первых, чтобы позволить выбирать большую окрестность осреднения, и, во-вторых, чтобы сгладить экстремумы пространственной функции.

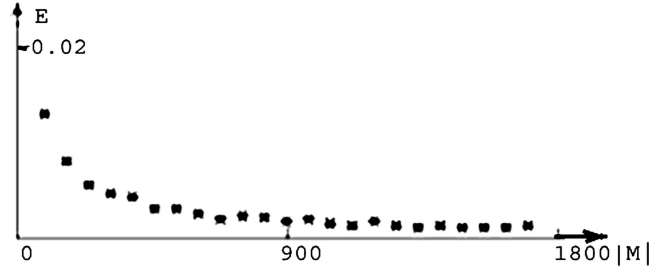


Рис. 17. Зависимость средней ошибки дискретизации $E(|M|)$ от размеров клеточного массива при $|Av(m)| = 0.2|M|$

Аналитических оценок влияния значения h на точность пока не существует, но экспериментальные зависимости могут дать о них некоторое представление [55, 56].

Пример 9. Для исследования ошибок булевой дискретизации выбрана функция в виде полуволны синусоиды, которая представлена одномерным клеточным массивом следующим образом.

$$\Omega_R = \{(u, m)\}, \quad u(m) = \sin\left(\frac{\pi}{|M|}m\right), \quad m = 0, 1, \dots, |M|. \quad (74)$$

Для получения зависимости $E(|M|)$ было выполнено 30 процедур "дискретизация-осреднение" функции (75) на клеточных массивах размерами $60 < |M| < 1800$ при $|M_k| = c \times k$, $c = 60$, что соответствует $2^\circ < h < 0.1^\circ$. Для каждого M_k , область осреднения выбиралась размером $|Av_k| = 0.2|M_k|$. Процедура "дискретизация-осреднение" состояла из булевой дискретизации Ω_R по (54) с последующим осреднением по (55), и вычислением разности $Av(Disc(\Omega_R)) - \Omega_R$ и средней ошибки $E(|M|)$ по (74). Полученная зависимость изображена на рис.17. Из полученных данных видно, что для $h < 1^\circ$ средняя погрешность не превышает 0.1%.

Для получения зависимости $E(q)$, $q = |Av|$, было выполнено 30 процедур "дискретизация-осреднение" для клеточного массива размерами $|M| = 360$ для $5 < q < 150$. Полученная в результате зависимость (рис.18) показывает, что для функции вида (74) наилучшая область осреднения имеет размер $\approx 35^\circ$.

Когда исходная пространственная функция имеет "острый экстремум" или разрыв, для уменьшения ошибки дискретизации используется так называемый *компенсационный метод*, заключающийся в следующем. Клетка, в которой функция имеет особенность, обозначается m^* . На рис. 19 показан клеточный массив $\Omega_R = \{(u, m)\}$, представляющий функцию с разрывом в клетке m^* , и клеточный массив $Av(Disc(\Omega_R)) =$

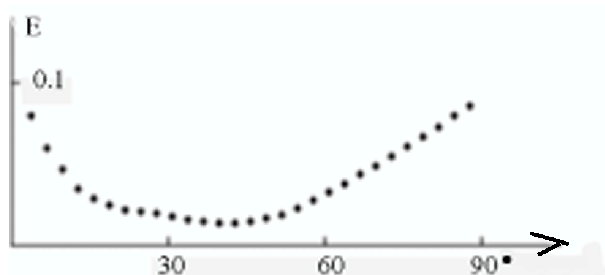


Рис. 18. Зависимость средней ошибки дискретизации от размеров области осреднения $|Av(m)|$

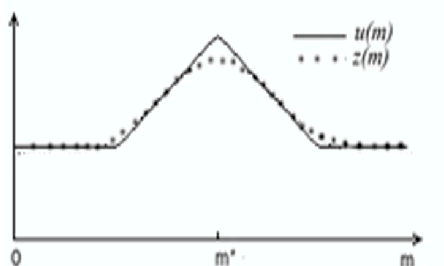


Рис. 19. Пространственная функция с острым экстремумом (сплошная линия) и ее осреднение (пунктир)

$\{(z, m)\}$. Из рис. 19 видно, что наибольшие ошибки булевой дискретизации имеют место в клетках $(u, \phi_k(m)) \in Av(m^*)$. Компенсационный метод заключается в том, что состояния этих клеток заменяются на

$$u^*(\phi_k(m^*)) = \frac{1}{2}(u(\phi_k(m^*)) + u'(\phi_k(m^*))), \quad (75)$$

где

$$u'(\phi_k(m^*)) = 2u(m^*) - u(\phi_k(m^*)) \quad \text{при} \quad \phi_0(m) = m^*. \quad (76)$$

Из рис.20 легко видеть, что если исходная функция кусочно-линейная, то после применения компенсационного метода некоторые ее отрезки становятся кусочно-постоянными.

5.2. Устойчивость и сложность КА-моделирования

Проблема *вычислительной устойчивости* КА с булевым алфавитом может возникнуть только на стадии его конструирования, если функция перехода окажется такой, что КА попадет в третий класс КА по класси-

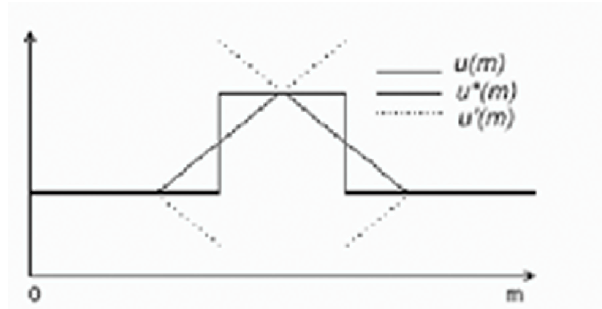


Рис. 20. Компенсационный метод повышения точности осреднения-дискретизации путем замены линейных участков постоянными

фикации Вольфрама (хаос) [2]. Во всех остальных случаях в смысле вычислительной устойчивости, булев КА можно считать абсолютно устойчивым. Ценность этого свойства КА может быть оценена путем сравнения решения дифференциального уравнения Лапласа явным методом с КА-алгоритмом диффузии с окрестностью Марголуса. Известно, что явный метод решения требует выполнения условия Куранта, которое для двумерного случая ограничивает шаг по времени величиной

$$\tau < \frac{h^2}{4d},$$

где h -шаг по пространству, d - коэффициент диффузии. Для КА-диффузии таких ограничений нет, модель определяет шаг τ исходя из того что $D = 3/2$ [39], т.е.

$$\tau < \frac{3h^2}{2d},$$

что дает большую свободу выбора τ . Учитывая тот факт, что оператор Лапласа присутствует в подавляющем большинстве дифференциальных уравнений, моделирующих пространственную динамику, этот факт имеет существенное значение.

Если моделирование производится с помощью композиции КА, то ее вычислительная устойчивость обеспечивается устойчивостью всех ее компонентов. Если при этом все компоненты имеют булев алфавит, то проблем с устойчивостью нет. Если среди компонент присутствуют вещественные члены, то их устойчивость должна проверяться традиционными способами.

Сложность КА-моделирования оценить объективно очень трудно. Это связано, в основном, с тем, что само понятие сложности многогранно. При исследовании новых алгоритмов принято оценивать их сложность по

размерам памяти и времени счета в зависимости от главных параметров алгоритма. При этом обычно не учитывают интеллектуальные усилия программистов затрачиваемые на написание, отладку и сопровождение программ. А между тем, доля стоимости этих затрат непрерывно растет. Особенно это ощущается в такой области применений, как научные исследования, где программы не тиражируются серийно.

Тем не менее, некоторые приближенные оценки можно сделать, если принять ряд следующих допущений.

1) Все элементарные операции (арифметические сложение и умножение, вычисление логических функций) выполняются за одну единицу времени (такт).

2) Генератор случайных чисел выдает одно число за g тактов.

3) Функция переходов элементарного автомата может быть в среднем оценена как cn , где n - число переменных в функции перехода, $c \leq 3$ - константа, если функция вычисляется арифметически. Если она вычисляется как логическая функция, то ее оценка равна 2^n .

4) Осреднение требует $q = |Av|$ тактов.

5) Сложность вычисления вещественных функций, которыми обычно бывают функции реакции, заданные полиномами, равна $2(m+1)$, где m - сумма степеней всех входящих в КА-модель полиномов.

Исходя из этих допущений можно вычислить приближенную алгоритмическую оценку по времени для любого КА-алгоритма и любой их композиции.

Так, например, для КА-алгоритма, моделирующего процесс разделения фаз в активной среде с диффузией (пример 7) число элементарных операций, необходимое для перехода одной клетки в следующее состояние можно подсчитать по следующей формуле

$$Q_{КА} \approx cn_1 + cn_2 + g + q + 2(m+1),$$

где $n_1 = 8, n_2 = 4$ - числа операций в (8) и (31), соответственно, $g = 10, c = 1, q = 25, m = 2$ это составит $Q_{КА} = 53$. Для сравнения при решении соответствующего дифференциального уравнения (68) с функцией активности среды (66) уравнения в частных производных вычисление значения функции в узле сетки для явного метода при тех же предположениях составит $Q_{ДУ} \approx 5 + 2(m+1) = 21$. В обоих случаях суммарная сложность моделирования

$$Q_k = Q_k |M|T, \quad k = КА, ДУ.$$

Полученные таким образом оценки в практическом моделировании могут показать совершенно иные соотношения из-за различных требований к выбору τ и h .

Определяющим параметром для оценки необходимой памяти является суммарная мощность клеточных массивов. Она же является определяющим фактором для принятия решения о необходимости распараллеливания вычислительного процесса.

Присущая КА внутренняя параллельность модели практически снимает проблему размещения задачи на многих процессорах. Имеющийся опыт параллельной реализации КА на десятках и сотнях процессоров показал, что эффективность параллельной реализации на кластере составляет более 90%. Деградация эффективности определяется только свойствами коммуникационной сети многопроцессорной системы [57].

И, наконец, последний немаловажный аспект оценки сложности КА-моделирования заключается в том, что большинство КА имеют очень простые функции переходов, особенно, если они булевы или имеют дискретный алфавит. В этих случаях используется их табличное представление, что упрощает программирование и ускоряет процесс вычислений.

Очевидно, что все перечисленные факторы, влияющие на сложность КА-моделирования могут находиться в противоречии друг с другом, которое разрешается для каждого конкретного случая по своему.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Клеточно-автоматное моделирование пространственной динамики находится в ранней стадии своего развития. Для того, чтобы сформировалась технология КА-вычислений, необходимо решение многих теоретических проблем из области КА-динамики, а также накопление опыта экспериментального моделирования. Еще не совсем четко определилась область применения КА-моделирования, хотя уже ясно, что существует ряд явлений, для которых альтернативы КА-моделированию нет. К ним относятся существенно нелинейные процессы, которые либо не имеют описаний в виде дифференциальных уравнений, либо эти уравнения трудно решаются (пространственные химические реакции, гидродинамика смесей и гранул, формирование устойчивых образцов, фазовые переходы, перенос электрических зарядов, разрушение твердых материалов, рост растений и др.). Потребность в исследовании такого рода процессов и растущий интерес к методам моделирования явлений на микроскопическом уровне позволяет надеяться на то, что КА-моделирование станет полезным инструментом в научных исследованиях и технических разработках.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **von Neumann J.** Theory of self reproducing automata.- University of Illinois, Urbana. USA. 1966.
2. **Wolfram S.** A new kind of science. - Wolfram Media Inc., Champaign, Ill., USA. 2002.
3. **Gardner M.** Wheels, Life and Other Mathematical Amusements. Sanfrancisco: Freeman. 1983.
4. **Weimar J., Tyson J., Watson T.** Third Generation Cellular Automaton for Modeling Excitable Media // Physica D. Vol.55.1992. 328-339.
5. **Hardy J., Pomeau Y., de Pazzis O.** Time evolution of a two-dimensional model system // Journal of Math. Physics. Vol.14. 1973. 1746-1759.
6. **Culik K., Hurd L.P., Yu S.** Formal languages and global cellular automaton behavior // Physica D. 1990. 396-403.
7. **Toffoli T.** Computation and construction universality of reversible automata. // Journ. of Computer System Science. Vol.15. 1987. 1-6.
8. **Achasova S., Bandman O., Markova V., Piskunov S.** Parallel Substitution Algorithm. Theory and Application. - Singapore: World Scientific. 1994.
9. **Hoffmann R., Voelkman K.-P.** Hardware support for 3D cellular processing // Lecture Notes in Computer Science (V.Malyshkin, ed). Vol. 1297. 322-329.
10. **Pogudin Yu.** Simulation of Fine-Grained Parallel Algorithms with the ALT System. In: Proceedings of First International Workshop on Distributed Interactive Simulation and Real Time Applications, 9-10 Jan. 1997, Eilat // IEEE Computer Society. 1997. 22-27.
11. **Vichniac G.** Simulating Physics by Cellular Automata // Physica D, Vol.10.1984, 86-112.
12. **Wolfram S.** Universality and complexity in cellular automata // Physica D. Vol.1. 1984. 91-125.
13. **Toffoli T., Margolus N.** Cellular Automata Machines. - USA: MIT Press: 1987.
14. **Bandman O.** Comparative Study of Cellular automata Diffusion Models // Lecture Notes in Computer Science. Vol. 1662 (V.Malyshkin, ed.). 1999. 395-399.
15. **Weimar J.** Cellular Automata for Reaction-Diffusion Systems // Parallel Computing. Vol.23, N 11. 1997. 1699-1715.
16. **Bandman O.** Simulation Spatial Dynamics by Probabilistic Cellular Automata // Fifth International Conference ACRI-2202, Geneva, 2002.- Lecture Notes in Computer Science.-Spriger:Berlin.-2002.-Vol.2493 (Ed. B.Chopard)..-10-19.
17. **Бандман О.** Клеточно-автоматное моделирование диффузионно-реакционных процессов // Автометрия № 3, том 39, 2003.- 1-16.
18. **Bode M, Liehr A.W., Schenk C.P., Purwins H.-G.** Interaction of Dissipative Solitons: Particle-Like Behavior of Localized structures in a Three-Component Reaction-Diffusion System // Physica D. Vol.161, 2002. 45-66.
19. **Madore B., Freedman W.** Computer simulation of the Belousov-Zhabotinski reaction // Science. Vol. 222. 1983. 615-618.
20. **Park J.K., Steiglitz K., Thurston W.P.** Soliton-like behavior in automata // Physica D. Vol.19.1986. 423-432.
21. **Пригожин И.** От существующего к возникающему. Время и сложность в физических науках. - Москва: Наука, Физматгиз. 1985.
22. **Schenk C.P., Schutz P., Bode M., Purwin H.-G.** Interaction of selforganized quaziparticles in a two dimensional reaction diffusion system: The formation of molecules // Physical review E. Vol.5, N 6. 1998. 6481-6486.
23. **Frish U.,Crutchfield J.P., Hasslacher B., Lallemand P. Rivet L.-P.** Lattice Gas hydrodynamics in two and three dimensions // Complex Systems. Vol. 1,1987. 649-707
24. **Frish U., Hasslacher B., Pomeau Y.** Lattice-gas Automata for Navier-Stokes

- equation // Physical Review Letter. Vol.56, 1986. 1505-1508.
25. **Rothman B.H., Zaleski S.** Lattice-Gas Cellular Automata. Simple Models of Complex Hydrodynamics - London: Cambridge Univ. Press. 1997.
 26. **Succi S.** The Lattice Boltzmann equation. - Oxford Univ. Press. - 2001.
 27. **Toffoli T.** Cellular Automata as an Alternative to (rather than Approximation of) Differential Equations in Modeling Physics // Physica D. Vol.10, 1984, 117-127
 28. **Succi S.** Kinetic approach to lattice quantum mechanics // [http: www.iac.rm.cnr.it](http://www.iac.rm.cnr.it)
 29. **Wolfram S.** Statistical mechanics of Cellular automata // Review of Modern Physics. Vol.55. 1993. 607-640.
 30. **Roska P.** Languages, equicontinuity and attractors in cellular automata // Ergodicity. Theory and Dynamic Systems. Vol.17. 1997. 417-433.
 31. **Turing A.M.** The chemical basis of morphogenesis // Trans. of Royal Society, series B. Vol. 237. 5- 51.
 32. **Crutchfield J.P.** The calculi of emergence: computation, dynamics and induction // Physica D. Vol.75. 1994. 11-54.
 33. **Wolfram S.** Computation Theory of Cellular Automata. In: Theory and Application of Cellular Automata. World Scientific: Singapore. 1984. 189-230.
 34. **Mitchell M., Crutchfield J.P., Harber P.T.** Evolving cellular automata to perform computation: mechanisms and impediments // Physica D. Vol.75. 1994. 361-391.
 35. **Hurd L.** Formal language characterization of cellular automaton limit sets // Complex Systems. Vol.1. 1987. 69-79.
 36. **О.Л.Бандман.** Мелкозернистый параллелизм в вычислительной математике // Программирование.- 2001.- №4, 1-18
 37. **Green F.** NP-complete problems in cellular automata // Complex systems. Vol.1. 1987. 453 -461.
 38. **Culik K., Hurd L.P., Yu S.** Computation theoretic aspects of cellular automata // Physica D. Vol. 45. 1990. 357-378.
 39. **Малинецкий Г.Г., Степанцов М.Е.** Моделирование диффузионных процессов клеточными автоматами с окрестностью Марголуса. Журнал вычислительной математики и математической физики. Том 36, № 6, 1998ю 1017-1021.
 40. **Medvedev Yu.G.** The Wall Cells in the Cellular Automaton Fluid Flow Simulation. // Bulletin of the Novosibirsk Computing Center. Series: Computer Science. Vol. 19. 2003. NCC Publisher: Novosibirsk. 2003. 51-59.
 41. **Zhang M.,Cule D.,Bridges G.,Simons N.** Computing Electromagnetic Fields in Inhomogeneous Media Using Lattice Gas Automata. In: Proceedings of 1998 Symposium on Antenna Technology and Applied Electromagnetics, Aug.14-16, Ottawa, Canada.
 42. **Simons N.R.S., Bridges G.E., Cuhachi M.** A Lattice Gas Automaton Capable of Modeling Three-Dimensional Electromagnetic Fields // Journal of Computational Physics, Vol.151. 1999. 816-835.
 43. **Свирижев Ю.М.** Нелинейные волны, диссипативные структуры и катастрофы в экологии. - Москва: Наука. 1987
 44. **Медведев Ю.Г.** Модификация клеточно-автоматной модели потока жидкости. // Труды конференции "Новые информационные технологии в исследовании дискретных структур. Томск, ТИЦ СО РАН, 2000. 84-90.
 45. **Медведев Ю.Г.** Моделирование трехмерных потоков клеточными автоматами // Доклады IV Всероссийской конференции "Новые информационные технологии в исследовании сложных структур"Томск, ТГУ, 10 - 13 сентября 2002 г. Вестник Томского Государственного университета N1(II), Приложение, Сентябрь 2002. Томск, изд-во ТГУ, 2002. С. 236-240.

46. **Медведев Ю.Г.** Трехмерная клеточно-автоматная модель потока вязкой жидкости. // Автометрия. т.39. N 3. 2003. 43 - 50.
47. **Medvedev Yu.G.** Gas-Lattice Simulation of High Viscous Fluid Flows. // Bulletin of the Novosibirsk Computing Center. Series: Computer Science. Vol. 17. 2002, NCC Publisher: Novosibirsk, 2002. 63-73.
48. **Бандман О.Л.** Методы композиции клеточных автоматов для моделирования пространственной динамики // Вестник Томского университета. - №9(1). 2002. 188-192.
49. **Bandman O.** Simulation of Complex phenomena by Cellular Automata composition // Bulletin of the Novosibirsk Computing Center, issue Computer Science. Vol.21. 2004. 9-20.
50. **Bandman O.** Spatial Functions Approximation by Boolean Arrays // Bulletin of Novosibirsk Computer Center, series Computer Science, Vol. 19., NCC Publisher: Novosibirsk. 2003. 10-19.
51. **Bandman O.** Algebraic Properties of Cellular Automata: the Basis for Composition Technique // Lecture Notes in Computer Science. Vol. 3305 (Sloot P.M.A., Chopard B., Hoekstra A.G., eds.) 2004. 688-698.
52. **O.Bandman.** A Hybrid Approach to Reaction-Diffusion Processes Simulation // Lecture Notes in Computer Science. Vol.2127 (V.Malyshkin, ed.). 1-16.
53. **Latkin E.I., Elokhin V.I., Gorodetskii V.V.** Spiral concentration waves in the Monte-Carlo model of CO oxidation over Pd(110) caused by synchronization via CO_{ads} diffusion between separate parts of catalytic surface // Chemical Engineering Journal. Vol. 91. 2003. 123-131.
54. **Schlogl F.** Chemical reaction models for non-equilibrium phase transitions // Zh. Physik. Vol. 253. 1972. 147-161.
55. **Bandman O.** Accuracy and Stability of Spatial dynamics Simulation by Cellular Automata Evolution // Lecture Notes in Computer Science. Vol. 2763 (V.Malyshkin, ed.) 2003. 20-34.
56. **Bandman O.** Computation properties of spatial dynamics simulation by probabilistic cellular automata // Future Generation Computer Systems. Vol.21.2005.633-64.
57. **Медведев Ю.Г.** Параллельная реализация трехмерной клеточно-автоматной модели потока жидкости // Материалы международного семинара "Вычислительные методы и решение оптимизационных задач". ИВМиМГ: Новосибирск. 2004. 107-112.