

МЕЛКОЗЕРНИСТЫЙ ПАРАЛЛЕЛИЗМ

УДК 539.2, 536.1

О. Л. Бандман

(Новосибирск)

КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ДИФФУЗИОННО-РЕАКЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ

Предлагается метод построения вероятностного клеточного автомата, эволюция которого моделирует пространственно распределенный процесс реакционно-диффузионного типа. Метод основан на том, что диффузионная и реакционная составляющие процесса, традиционно задаваемые оператором Лапласа и нелинейной функцией, представлены операциями над булевыми массивами. Ядро операций составляет преобразование вещественной пространственной функции в булев массив, осредненная форма которого аппроксимирует исходную функцию. Правила перехода результирующего клеточного автомата являются комбинацией функции перехода клеточного автомата, моделирующей диффузионную часть, и вероятностной пороговой функции, зависящей от реакционной части. Приведены оценки ошибок аппроксимации и результаты моделирования.

Введение. Диффузионно-реакционные процессы (называемые также процессами «реакции-диффузии») – это обобщенное представление пространственно распределенных явлений разной природы, таких, как химические реакции, кристаллизация в переохлажденной жидкости, распространение нервного импульса, взаимодействие популяций, распространение эпидемий и т. д. Их объединяет тот факт, что все они происходят в активных средах, поддерживающих их развитие на всем пространстве, что приводит к возникновению в них либо устойчивых состояний (диссипативных структур), либо автоволновых или автоколебательных процессов, характер которых определяется параметрами среды и слабо зависит от исходных состояний [1, 2]. Такие процессы обладают свойствами самоорганизации и изучаются в разделе математики «Синергетика» [3]. Традиционно синергетические процессы описываются системами дифференциальных уравнений (ДУ) с частными производными, содержащими оператор Лапласа (диффузионная часть) и нелинейные функции активации среды (реакционная часть). Известно, что получить аналитические решения таких уравнений практически невозможно (исключая тривиальные случаи). Необходимо применять численные методы решения ДУ на компьютерах. Несмотря на то, что численный анализ активно развивается, его практическое использование встречает большие трудности. В частности, популярные в настоящее время неявные схемы дискретизации пространства и времени приводят к алгоритмам, кото-

рые не допускают эффективной параллельной реализации, а использование явных схем требует больших затрат времени счета, чтобы обеспечить вычислительную устойчивость.

Эти трудности, а также быстро растущие возможности создания алгоритмически ориентированных процессоров стимулируют поиск новых моделей нелинейной пространственной динамики. Особое внимание уделяется моделям со свойствами мелкозернистого параллелизма из-за присущей им гибкости при размещении вычислений на многих процессорах. Активизируются исследования клеточных автоматов (КА) как альтернативы ДУ [4]. Мотивировали эти исследования вычислительные свойства КА-моделей. Они привлекают абсолютной вычислительной устойчивостью и отсутствием ошибок округления. Кроме того, граничные условия в них выражаются чрезвычайно просто, что и делает их привлекательными для исследователей явлений в пористых средах. Безусловно, КА-модели имеют свои собственные проблемы, которые требуют решения. Среди них наиболее важными являются проблемы «автоматного шума» и учета физических величин (концентрации, вязкости, температуры, давления и т. д.) при построении правил переходов автомата. Более того, не существует формализованной процедуры для построения КА-моделей. Каждая новая модель есть плод глубокого изучения природы процесса в сочетании с большим опытом работы с клеточными автоматами. Несмотря на это, уже известно и исследовано много КА, моделирующих пространственную динамику как явлений, имеющих ДУ-представление, так и тех, для которых ДУ-описание неизвестно. Наиболее изученными КА-моделями пространственной динамики являются КА-диффузия [5, 6] и потоки вязкой жидкости [7, 8], для которых математически доказана их эквивалентность соответствующим ДУ.

Наличие простой математически обоснованной КА-модели диффузионной части процесса «реакции-диффузии» вызывает естественное стремление использовать эту модель для построения моделирующего их КА. При этом возникает необходимость поиска способа построения КА, который суммировал бы результаты шага КА-диффузии и вычисления нелинейной непрерывной функции. Предлагаемый в работе способ основывается на аппроксимации непрерывной пространственной функции булевыми массивами и выполнении арифметических операций над ними. В результате получен метод перехода от диффузионно-реакционного ДУ к вероятностному КА, эволюция которого моделирует его нестационарное решение. Под этим моделированием понимается соответствие осредненных (по пространству и/или времени) значений состояний клеток значениям решений ДУ.

Статья состоит из четырех разделов. В первом даны определения используемых понятий и формальное представление клеточных алгоритмов. Вторым раздел посвящен булевой дискретизации пространственных функций. В третьем приведены клеточные автоматы, моделирующие диффузию. В четвертом представлен алгоритм построения КА-модели диффузионно-реакционного процесса и приведен пример его применения.

Клеточное представление диффузионно-реакционного процесса. Традиционная форма представления диффузионно-реакционных процессов – это системы ДУ с частными производными вида

$$\frac{\partial u^{(k)}}{\partial t'} = d^{(k)} \Delta u^{(k)} + F^{(k)}(u^{(1)}, \dots, u^{(l)}), \quad k = 1, \dots, l, \quad (1)$$

где $u^{(k)}(x_1, x_2, t')$ – концентрация k -го вещества, участвующего в моделируемом процессе; t' – время; x_1, x_2 – пространственные координаты; $F^{(k)}(u^{(1)}, \dots, u^{(l)})$ – функции реакции; $d^{(k)}$ – коэффициент диффузии в k -м уравнении; Δu – оператор Лапласа:

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2}.$$

Далее для простоты рассматривается двумерное декартово пространство. Такое упрощение допустимо, так как переход к пространству другого типа – обычная техническая процедура и не меняет существа дела. После дискретизации пространства и времени при $x_1 = ih$, $x_2 = jh$ и $t' = t\tau$ (где i, j, t – целые числа; h, τ – шаги по пространству и времени соответственно) уравнение (1) принимает вид

$$u_{i,j}^{(k)}(t+1) = u_{i,j}^{(k)}(t) + \frac{\tau}{h^2} d^{(k)} (u_{i-1,j}^{(k)}(t) + u_{i,j-1}^{(k)}(t) + u_{i+1,j}^{(k)}(t) + u_{i,j+1}^{(k)}(t) - 4u_{i,j}^{(k)}(t)) + \tau F^{(k)}(u^{(1)}, \dots, u^{(l)}). \quad (2)$$

Уравнение (2) получено с использованием явной схемы дискретизации пространства и времени. Оно определяет итерационный алгоритм моделирования заданного уравнениями (1) процесса в вещественной ограниченной области значений функций $u^{(k)}(i, j, t)$, которая обычно принимается равной интервалу $(0, 1)$.

Далее используем понятия и терминологию из теории клеточных автоматов [9] и их обобщенной формальной модели – алгоритма параллельных подстановок [10]. Верхний индекс при $u(i, j, t)$ опускается, если в нем нет необходимости. Также опускается переменная t , если она обозначает настоящий момент времени.

Функция $u(i, j)$ может рассматриваться как клеточный массив $\Omega = \{(u_m, m)\}$, в котором клетка – это пара символов (u_m, m) , где u_m – переменная состояний, а $m \in M$ – имя клетки из множества имен M , обозначенных парой координат (i, j) в случае $2D$ -декартова пространства, а в общем случае – одним символом m . Область значений переменных состояний в случае уравнения (2) $u_m \in R$, где R – множество вещественных чисел.

В уравнении (2) два первых слагаемых правой части ответственны за диффузию, а третье слагаемое – за реакцию. Считая, что результаты применения диффузионной и реакционной составляющих к клеточному массиву $\Omega(t)$ равны соответственно клеточным массивам $\Phi(\Omega(t))$ и $F(\Omega(t))$, можно выразить реакционно-диффузионный процесс в следующем виде:

$$\Omega(t+1) = \Phi(\Omega(t)) \oplus F(\Omega(t)). \quad (3)$$

Уравнение (3) является обобщенным клеточным представлением диффузионно-реакционного процесса. Если оно соответствует решению ДУ (1), то знак \oplus обозначает обычное арифметическое сложение. Если же диффузионная часть моделируется клеточным автоматом, где состояния клеток принад-

лежат булеву алфавиту, знак \oplus приобретает несколько иной смысл, который будет раскрыт далее.

Структура межклеточных взаимодействий в клеточных массивах задается набором именуемых функций, называемым шаблоном взаимодействий:

$$T(m) = \{\phi_0(m), \phi_1(m), \dots, \phi_g(m), \dots, \phi_n(m)\}. \quad (4)$$

Значения именуемых функций $\phi_g(m)$, $g = 0, 1, \dots, n$, равны именам g -х соседей клетки $m \in M$, причем условно считается, что $\phi_0(m) = m$. В случае, когда множество имен $M = \{(i, j)\}$, именуемые функции имеют вид сдвигов $\phi_g(i, j) = i + a, j + b$, где a, b – целые числа. Если необходимо учитывать силу межклеточных взаимодействий, то используется шаблон весов $W(m) = \{(w_g, \phi_g(m)) : g = 0, 1, \dots, n\}$, который с каждой именуемой функцией $\phi_g(m)$ связывает некоторое число w_g . Подмножество клеток

$$N_W(m) = \{(w_g u_{\phi_g(m)}, \phi_g(m)) : g = 0, 1, \dots, n\} \quad (5)$$

образует взвешенное соседство клетки (u_m, m) . Если $w_g = 1$ для всех $g = 0, 1, \dots, n$, что часто имеет место в клеточно-автоматных моделях, то соседство клетки обозначается как

$$N(m) = \{(u_{\phi_g(m)}, \phi_g(m)) : g = 0, 1, \dots, n\}, \quad N(m) \subseteq \Omega.$$

Диффузионная составляющая в каждой клетке вычисляется как функция состояний клеток из $N_W(m)$:

$$u_{m, \text{diff}}(t+1) = \Phi(u_0, u_{\phi_1(m)}, \dots, u_{\phi_n(m)}), \quad (6)$$

где $\Phi(\cdot)$ – диффузионный оператор (в (2) он равен сумме двух первых членов правой части, в случае клеточных автоматов выражен в виде набора булевых функций).

Если моделируется многокомпонентный процесс, то клеточный массив имеет многослойную структуру, в каждом слое которого моделируется эволюция своего компонента. Пусть k – номер слоя. Тогда $M = \bigcup M^{(k)}$, $\Omega = \bigcup_k \Omega^{(k)}$, $\Omega^{(k)} = \{(u_m^{(k)}, m^{(k)})\}$, $m^{(k)} \in M^{(k)}$, причем $|M^{(k)}| = |M^{(j)}|$ для всех $k, j \in \{1, \dots, l\}$. Нумерация имен во всех слоях одинакова, так что $m_i^{(k)} = m_i^{(j)}$ для всех $m_i \in M$, $k, j \in \{1, \dots, l\}$. Каждый диффузионный слой вычисляет свою собственную диффузионную часть $\Phi(\Omega^{(k)})$, которая зависит от соседства $N_W^{(k)}(m^{(k)})$ только в своем слое. А реакционная часть есть функция от состояний в одноименных клетках всех слоев. Взаимодействие этих клеток задается реакционным шаблоном

$$R(m) = \{m^{(1)}, \dots, m^{(l)}\} \quad (7)$$

и соответствующим соседством $N_R(m) = \{(u_m^{(k)}, m^{(k)}) : k = 1, \dots, l\}$. Реакционная составляющая в каждой клетке вычисляется как функция от состояний

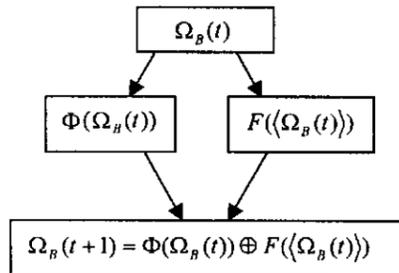


Рис. 1. Обобщенная схема клеточного алгоритма диффузионно-реакционного процесса

клеток из $N_R(m)$, т. е.

$$u_{m, \text{reac}}^{(k)}(t+1) = F^{(k)}(u_m^{(1)}, \dots, u_m^{(l)}). \quad (8)$$

Теперь запишем обобщенную форму многокомпонентного реакционно-диффузионного процесса:

$$u_m^{(k)}(t+1) = \Phi(u_0^{(k)}, u_{\phi_1(m)}^{(k)}, \dots, u_{\phi_n(m)}^{(k)}) \oplus F^{(k)}(u_m^{(1)}, \dots, u_m^{(l)}), \quad (9)$$

что соответствует (3) в терминах клеточных массивов.

Уравнения (9) совместно с множествами Ω и M составляют клеточную систему диффузионно-реакционных уравнений. Если установить клеточный массив Ω в исходное состояние $\Omega(0)$, то клеточная структура начинает функционировать. Алгоритм функционирования итерационный. Одной итерацией считается вычисление следующих состояний всех клеток массива. Последовательность клеточных массивов $\{\Omega(0), \dots, \Omega(t_s)\}$, полученная в процессе исполнения алгоритма, называется «эволюцией клеточного алгоритма». Эволюция заканчивается, когда достигается устойчивое состояние $\Omega(t_s)$ такое, что $\Omega(t_s) = \Omega(t_s + 1)$.

Будем говорить, что клеточный алгоритм моделирует пространственную динамику, заданную ДУ, если клеточные массивы его эволюции равны решениям ДУ при соответствующих $t' = \tau t$. На рис. 1 изображена обобщенная схема клеточного алгоритма моделирования диффузионно-реакционного процесса.

Ясно, что конечно-разностное представление (2) есть частный случай (9). При $l=1$ соответствующая клеточная система (9) принимает следующий вид. Для всех $(i, j) \in M$

$$u_{ij, \text{diff}}(t+1) = \tau d / h^2 (u_{i-1, j} + u_{i, j-1} + u_{i, j+1} + u_{i+1, j} + (-4 + h^2 / \tau d) u_{i, j}),$$

$$u_{ij, \text{reac}}(t+1) = (F(u_{i, j}), (i, j)),$$

$$u_{ij}(t+1) = u_{ij, \text{diff}}(t+1) + u_{ij, \text{reac}}(t+1).$$

Булева дискретизация пространственных функций. В КА-моделях пространственные функции представлены булевыми массивами $\Omega_B = \{(v_m, m): v_m \in B\}$, $B = \{0, 1\}$. Чтобы определить соответствие между веще-

ственным массивом $\tilde{\Omega}_B = \{(u_m, m)\}$ и представляющим ту же пространственную функцию булевым массивом Ω_B , необходимо ввести понятия окрестности осреднения клеток булева массива

$$Av(m) = \{m, \psi_1(m), \dots, \psi_q(m)\} \quad (10)$$

и соседства осреднения

$$N_{Av}(m) = \{(v_{\psi_g(m)}, \psi_g(m)) : g = 0, \dots, q-1\}, \quad (11)$$

где $\psi_j(m) : M \rightarrow M$ – именуемые функции, определяющие имена клеток окрестности осреднения для каждой $m \in M$. Осреднение производится путем вычисления для каждой клетки (v_m, m) осредненного состояния:

$$\langle v_m \rangle = \frac{1}{q} \sum_{g=1}^q v_{\psi_g(m)}. \quad (12)$$

В результате применения (12) к каждой клетке булева массива Ω_B получается осредненный массив $\langle \tilde{\Omega}_B \rangle = \{(\langle v_m \rangle, m)\}$ с дискретным алфавитом $Q = \{0, 1/q, 2/q, \dots, 1\}$, где $q = |Av(m)|$. Иными словами, булев массив представляет пространственную функцию через распределение единиц на нем, а осреднение есть вычисление плотности этого распределения. Очевидно, что ошибка осреднения $e_1 = 1/q$ должна быть ограничена

$$\frac{1}{q} \leq \varepsilon_1, \quad (13)$$

где ε_1 – допустимая ошибка осреднения.

Процедура, обратная осреднению и преобразующая вещественный клеточный массив $\Omega_R = \{(u_m, m) : u_m \in R\}$ в булев массив $\tilde{\Omega}_B = \{(v_m, m) : v_m \in B\}$, осредненная форма которого $\langle \tilde{\Omega}_B \rangle$ аппроксимирует Ω_R , называется булевой дискретизацией и обозначается $\Omega_B = \lceil \Omega_R \rceil$. Очевидно, что ошибка такой аппроксимации ограничена некоторой допустимой величиной $\varepsilon_2 \ll q$. т. е.

$$u_m - \langle v_m \rangle < \varepsilon_2 \quad \text{для всех } m \in M. \quad (14)$$

Процедура булевой дискретизации основана на том факте, что для любого $m \in M$ вероятность того, что $v_m = 1$, равна u_m , т. е.

$$P(v_m = 1) = u_m. \quad (15)$$

Простое правило (15) вытекает непосредственно из определения вероятности, если предположить, что $u(m)$ постоянно в окрестности осреднения. В общем же случае математическое ожидание

$$\langle v_m \rangle = \frac{1}{q} \sum_{j=0}^q v_{\psi_j(m)} P(v_{\psi_j(m)} = 1) = \frac{1}{q} \sum_{j=0}^q u_{\psi_j(m)} \quad (16)$$

равно среднему значению состояния на окрестности осреднения. Таким образом, ε_2 может стать равным нулю только в тех случаях, когда

$$u_m = \frac{1}{q} \sum_{j=0}^q u_{\psi_j(m)} = \langle u_m \rangle. \quad (17)$$

Множество таких случаев содержит, например, функции, которые на окрестности осреднения линейны или являются параболой нечетной степени.

Из (17) видно, что ошибка булевой дискретизации зависит от формы пространственной функции в окрестности осреднения. Она имеет наибольшую величину в тех клетках, где функция $u(m)$ имеет ярко выраженные экстремумы. Из (17) также вытекает требование, которому должен удовлетворять точный метод булевой дискретизации. Его результатом должен стать булев массив, в котором для всех клеток удовлетворяется условие (17). Этот метод требует решения системы $|M|$ алгебраических уравнений, и, поскольку они решаются в формате с плавающей запятой, точность все равно не гарантирована.

Клеточно-автоматная модель пространственной динамики. Возможность перехода от вещественных клеточных массивов к аппроксимирующим их булевым и обратно позволяет формально поставить задачу построения такого клеточного алгоритма решения системы ДУ, в котором перерабатываемые данные представлены в виде булевых массивов. Такой алгоритм не подпадает под строгое определение клеточного автомата в его классическом виде, поскольку является композицией КА-диффузии и булевой дискретизации реакционной функции. Поэтому правильнее называть его КА-моделью пространственной динамики, заданной системой ДУ.

Более конкретно задача построения КА-модели ставится следующим образом. Пусть диффузионно-реакционный процесс задан системой ДУ вида (1), которая после дискретизации пространства и времени, а также булевой дискретизации исходного состояния выражена в виде (9). Следует построить такой клеточный алгоритм над булевыми массивами, у которого осредненные массивы эволюции $\{\langle \Omega_B(0) \rangle, \langle \Omega_B(1) \rangle, \dots, \langle \Omega_B(t) \rangle, \dots\}$ моделируют пространственную динамику, заданную системой ДУ. Поскольку клеточный алгоритм описывается системой уравнений (9), задача сводится к нахождению оператора диффузии $\Phi(\Omega_B)$, вычисляющего диффузионную составляющую, и оператора реакции $F(\Omega_B)$, вычисляющего реакционную составляющую, а также операции \oplus над булевыми переменными v_m в клетках массива $\Omega_B(t)$ таким образом, чтобы осредненная форма результирующего массива $\langle \Omega_B(t+1) \rangle$ аппроксимировала решение ДУ при $t' = \tau(t+1)$.

В качестве оператора диффузии $\Phi(\Omega_B)$, вычисляющего диффузионную составляющую, может быть использован любой из известных КА [5, 6]. Наиболее известный из них представлен далее.

Для вычисления реакционной составляющей КА-выражений не существует. Поэтому функция $F(\Omega_B)$ вычисляется от осредненных состояний клеток $(\langle v_m \rangle, t) \in \langle \Omega_B \rangle$, т. е.

$$f_m^{(k)} = F^{(k)}(\langle v_m^{(1)} \rangle, \dots, \langle v_m^{(l)} \rangle). \quad (18)$$

Полученный таким образом массив

$$F(\Omega_B) = \{(f_m^{(k)}, m) : f_m^{(k)} \in R, m \in M\} \quad (19)$$

представляет реакционную составляющую.

Операция \oplus называется сложением клеточных массивов. Она определена на множестве клеточных массивов, принадлежащих к одному и тому же структурному классу $K(M, Av)$, т. е. к множеству, элементами которого являются массивы с одинаковыми множествами имен и одинаковыми шаблонами осреднения. При этом алфавиты состояний могут быть разными. В нашем случае в соответствии с (3) слагаемыми массивами являются булев массив $\Phi(\Omega_B) = \{(v_m, m) : v_m \in B, m \in M\}$ и вещественный массив $F(\Omega_R) = \{(f_m, m) : f_m \in R, m \in M\}$. Результатом применения операции \oplus будет булев массив $\Omega'_B = \{(v'_m, m) : v'_m \in B, m \in M\}$ из класса, осредненная форма которого равна «поклеточной сумме» состояний осредненной формы булева массива $\langle \Phi(\Omega_B) \rangle$ и вещественного $F(\Omega_R)$, т. е. согласно (12) состояния клеток результирующего массива Ω'_B удовлетворяют условию

$$\frac{1}{q} \sum_{k=0}^q v'_{\psi_k(m)} = \frac{1}{q} \sum_{k=0}^q v_{\psi_k(m)} + f_m, \quad (20)$$

или, что то же самое,

$$\langle v'_m \rangle = \langle v_m \rangle + f_m. \quad (21)$$

Используя (15) и (21), можно получить Ω'_B , размещая единицы в пустом массиве $\Omega_0 = \{(0, m) : m \in M\}$ с вероятностью

$$P(v'_m = 1) = \langle v'_m \rangle. \quad (22)$$

На практике для сокращения памяти и времени вычислений следующих состояний операцию \oplus удобно выполнять путем изменения состояний булева слагаемого. Иными словами, в массиве $\Phi(\Omega_B)$ производятся изменения состояний некоторых клеток таким образом, чтобы он стал равен Ω'_B . Изменение состояний клетки производится (как и булева дискретизация (15)) с вероятностью, равной отношению величины добавляемой к величине изменяемой. Это значит, что если $f_m > 0$, т. е. $\langle v_m \rangle$ должно быть увеличено, то состояния некоторых клеток $(0, m) \in \Omega_B$ должны быть инвертированы с вероятностью

$$P(v'_m : 0 \rightarrow 1) = \frac{f_m}{1 - \langle v_m \rangle}. \quad (23)$$

Если $f_m < 0$, то инвертироваться должны состояния $v_m = 1$, и вероятность инвертирования равна отношению количества убираемых единиц к количеству единиц, имеющих в окрестности осреднения, т. е.

$$P(v'_m : 1 \rightarrow 0) = \frac{f_m}{v_m}. \quad (24)$$

Клеточно-автоматная диффузия. Ряд наиболее известных КА-моделей диффузии описан в [6]. Строгое доказательство соответствия КА-представления диффузии дифференциальному уравнению Лапласа дано в [5] для КА-модели, названной там клеточным автоматом с окрестностью Марголуса. Там же впервые получена величина коэффициента диффузии $D = \tau d / h^2$ для этой КА-модели, который для двумерного случая определен как $D_{2D} = 3/2$, для трехмерного – $D_{3D} = 23/18$. Для одномерного случая эта величина получена экспериментально: $D_{1D} = 1$. Далее именно эта модель будет описана и использована в примерах диффузионно-реакционных процессов.

КА-модель одномерной диффузии – это клеточный автомат, в котором множество имен клеток $M = \{0, 1, 2, \dots, |M|\}$ – целые неотрицательные числа, алфавит $B = \{0, 1\}$, шаблон соседства $T = \{i, i-1, i+1\}$. Функции перехода клеток из состояния в состояние вероятностные. Для клеток, имеющих соседей справа и слева, они записываются в виде следующих правил-подстановок:

$$\{(v_1, i-1), (v_0, i), (v_2, i+1)\} = \begin{cases} \{(v_0, i-1), (v_1, i), (v_2, i+1)\}, & \text{если } \text{rand} < p, \\ \{(v_1, i-1), (v_2, i), (v_0, i+1)\}, & \text{если } \text{rand} \geq p, \end{cases} \quad (25)$$

где rand – случайное число в интервале $(0, 1)$; $p \leq 1/2$ – вероятность взаимодействия клетки (v_0, i) с правой или с левой клеткой. При $p = 1/2$ коэффициент диффузии $D = 1$, при уменьшении p коэффициент D пропорционально уменьшается. Режим работы синхронный трехтактный. Это значит, что каждая итерация состоит из трех последовательно выполняемых шагов. На первом шаге подстановка (25) выполняется клетками с именами $i = 1, 4, 7, 10, \dots$, на втором такте та же подстановка выполняется клетками с именами $i = 2, 5, 8, \dots$, на третьем шаге – с именами $i = 3, 6, 9, \dots$.

Для представления клеток на краях или клеток, непроницаемых для диффузии, вводится дополнительное состояние, обычно обозначаемое символом w (англ. wall). Для учета краевых условий система подстановок (25) дополняется еще двумя, в которых соседство клетки (v_0, i) содержит клетку-стенку $(w, i+1)$ или $(w, i-1)$. Эти подстановки отличаются от (25) тем, что взаимодействие таких соседей не происходит. Например, краевые условия, соответствующие условиям Дирихле (на границах значения переменной постоянны) для границы слева, выражаются следующими подстановками:

$$\{(w, i-1), (v_0, i), (v_2, i+1)\} = \begin{cases} \{(w, i-1), (v_0, i), (v_2, i+1)\}, & \text{если } \text{rand} < p, \\ \{(w, i-1), (v_2, i), (v_0, i+1)\}, & \text{если } \text{rand} \geq p. \end{cases} \quad (26)$$

При краевых условиях фон Неймана (на границах производная функции вдоль нормали к границе равна нулю) клетки $(v_1, i-1)$, соседствующие с клетками-стенками $(w_2, i-2)$, не меняют своих состояний совсем, а клетки

(v_0, i) , находящиеся на расстоянии 2 от стенок, выполняют следующие подстановки:

$$\{(v_1, i-1), (v_0, i), (v_2, i+1)\} = \begin{cases} \{(v_1, i-1), (v_0, i), (v_2, i+1)\}, & \text{если } \text{rand} < p, \\ \{(v_1, i-1), (v_2, i), (v_0, i+1)\}, & \text{если } \text{rand} \geq p. \end{cases}$$

КА-модель двумерной диффузии – клеточный автомат с множеством имен $M = \{(i, j): i=0,1,\dots,g; j=0,1,\dots,l\}$ и с шаблоном соседства $T(i, j) = \{(i, j), (i+1, j), (i+1, j+1), (i, j+1)\}$. Алфавит состояний $B = \{(0, 1)\}$ дополняется символом «стенки», если в области диффузии имеются непроницаемые для диффузии «твердые» препятствия. Правила перехода из состояния в состояние вероятностные. Для клеток, не имеющих в своем соседстве клеток-стенок, они имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} & \{(v_0, (i, j)), (v_1, (i+1, j)), (v_2, (i+1, j+1)), (v_3, (i, j+1))\} = \\ & = \begin{cases} \{(v_1, (i, j)), (v_2, (i+1, j)), (v_3, (i+1, j+1)), (v_0, (i, j+1))\}, & \text{если } \text{rand} < p, \\ \{(v_3, (i, j)), (v_0, (i+1, j)), (v_1, (i+1, j+1)), (v_2, (i, j+1))\}, & \text{если } \text{rand} \geq p. \end{cases} \end{aligned} \quad (27)$$

Режим работы КА синхронный двухтактный. На первом такте подстановка (27) выполняется всеми клетками, у которых имена удовлетворяют условию: $i + j$ – четное число. На втором такте ту же подстановку выполняют клетки, у которых $i + j$ – нечетное число. Краевые условия Дирихле выполняются следующим образом. Если в соседстве с клеткой имеется хотя бы одна клетка-стенка, то клетка подстановку не выполняет. При условиях фон Неймана неизменными остаются также состояния клеток, соседних с клетками-стенками. Изменяя величину вероятности p , можно получить КА-модель с любым D .

Аналогичный КА трехмерной диффузии имеет в качестве шаблона соседства не квадрат 2×2 клетки, как в нашем случае, а куб размером $2 \times 2 \times 2$ клеток и три возможности поворота.

На рис. 2 показаны три состояния эволюции процесса диффузии плотного облака в замкнутом объеме с пористыми стенками с трех сторон. Использована $2D$ -модель с окрестностью Марголуса. Размеры массива 200×200 клеток. На границах массива применялись условия фон Неймана, на непроницаемых включениях – условия Дирихле.

Построение КА-модели диффузионно-реакционного процесса. Пусть задана система ДУ вида (1) и исходные функции $u_k(t)$, $k=1,\dots,l$. Для построения КА-модели следует проделать следующее.

1. Выбрать параметры дискретизации: τ , h и $A\nu(t)$.
2. Построить вещественный исходный клеточный массив $\Omega_p(0)$ и выполнить его булеву дискретизацию.
3. Выбрать КА-модель диффузии и построить правила переходов.

Наиболее ответственным пунктом является выбор параметров дискретизации, которые так же, как во всех численных методах, определяются с уче-

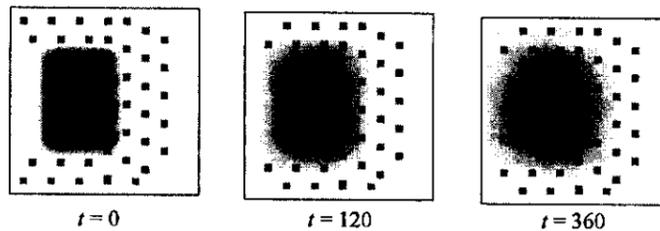


Рис. 2. Осредненные состояния эволюции при моделировании процесса диффузии

том условий обеспечения вычислительной устойчивости, точности и производительности.

Шаг по времени τ определяется, прежде всего, на основании требований, предъявляемых к точности моделирования. К сожалению, кроме этого естественного условия величина τ ограничена условиями вычислительной (нефизической) устойчивости. В отличие от численных методов решений ДУ явными методами, где условия устойчивости ограничивают коэффициент диффузии ($D_{1D} \leq 1/2$, $D_{2D} \leq 1/4$, $D_{3D} \leq 1/6$) [11], вычислительная устойчивость КА-моделей зависит только от реакционной составляющей, которая вследствие своей нелинейности может внести как физическую, так и вычислительную неустойчивость. Физическую неустойчивость нельзя погасить никаким выбором параметров дискретизации. Она исследуется методами нелинейной динамики [12] для определения области значений, в которой процесс устойчив и моделирование имеет смысл. Вычислительная устойчивость реакционной функции зависит от τ . Способы определения величины τ_F , такой, что при $\tau < \tau_F$ $F(\Omega(t))$ устойчива, не отличаются от тех, которые используются в классической нелинейной динамике.

Хотя диффузионная составляющая всегда устойчива, она все же ограничивает выбор величины τ значениями коэффициента D , который в КА-моделях является внутренним свойством клеточного автомата и не может быть увеличен за счет выбора влияющих на него параметров. Как показано ранее, для модели с окрестностью Марголуса эти значения в несколько раз больше, чем допустимые по соображениям устойчивости, что дает большую свободу выбора. Таким образом, на выбор пространственного шага накладываются следующие ограничения:

$$\tau < \tau_F, \quad \tau < D \frac{h^2}{d_{\max}}, \quad (28)$$

где d_{\max} – наибольший физический коэффициент диффузии среди всех участвующих в процессе компонентов, а h – пространственный шаг.

Пространственный шаг h и окрестность осреднения $\Delta v(m)$ определяются исходя из требований точности вычислений, которая задается допустимой ошибкой ε аппроксимации непрерывных функций дискретными. Такую ошибку, помимо дискретизации времени и пространства, вносит булева дискретизация пространственной функции. Эта ошибка (e_2) согласно (14) зависит от размеров окрестности осреднения и гладкости функции в этой окрестности. Более того, дискретный характер области значений осредненных функций является причиной так называемого «автоматного шума», т. е.

наличия мелких колебаний значений осредненных функций с ошибкой (e_1) согласно (13) в пределах ε_1 . Требования уменьшить оба типа неточности противоречивы. Автоматный шум тем меньше, чем больше размеры области осреднения, тогда как ошибки булевой дискретизации с увеличением $q = |Av(m)|$ увеличиваются в опасных точках экстремумов дискретизации. Единственный путь удовлетворить обоим требованиям лежит через увеличение мощности именуемого множества M , или, что то же самое, уменьшение размеров h .

Булева дискретизация исходного массива $\Omega_R(0)$ выполняется по (15). При этом только на этом этапе возможно более или менее точно оценить ошибку типа e_2 , поскольку только в исходном массиве $\Omega_R(0)$ экстремумы и разрывы заданы явно. Если условие (14) не удовлетворяется, то, кроме уменьшения величины h , можно использовать метод компенсации экстремальных участков. Этот метод состоит в замене состояний клеток $Av(m) \in \Omega_R(m^*)$ (точка экстремума) так называемыми виртуальными состояниями:

$$u_{\psi_k(m^*)}^* = \frac{1}{2}(u_{\psi_k(m^*)} + \tilde{u}_{\psi_k(m^*)}),$$

где $\tilde{u}_{\psi_k(m^*)} = 2u_m - u_{\psi_k(m^*)}$ — компенсирующее значение состояния.

Объединяя все перечисленные выше условия, можно получить набор ограничений, которым должны удовлетворять параметры дискретизации при построении КА-модели диффузионно-реакционного процесса:

$$\tau \leq \tau_F, \quad \frac{\tau}{h^2} \leq \frac{D}{d_{\max}}, \quad \frac{1}{q} \leq \varepsilon_1, \quad \forall m \in M: u_m(0) - \langle v_m(0) \rangle \leq \varepsilon_2. \quad (29)$$

Построение правил переходов КА-модели выполняется по схеме рис. 1 путем составления правил переходов для выбранного клеточного автомата диффузии и формул (23) и (24) для заданных реакционных функций.

Клеточно-автоматная технология вычислений предусматривает возможность выполнить эти операции одновременно во всех клетках. Ясно, что такая возможность может быть выполнена только при наличии специального устройства с $|M|$ процессорными элементами. Моделирование на одном компьютере производится в квазипараллельном режиме. При моделировании на многопроцессорной системе клеточные массивы могут быть разделены на любое число параллельно обрабатываемых фрагментов.

На рис. 3 показаны исходное, промежуточное ($t = 500$) и устойчивое ($t = 1000$) состояния реакционно-диффузионного процесса, заданного системой ДУ, вида

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_1}{\partial t} &= \left(\frac{35 + 16u_1 - u_1^2}{9} - u_2 \right) u_1, \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} &= \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} + \left(u_2 - \frac{5 - 2u_1}{5} \right) u_1, \end{aligned} \quad (30)$$

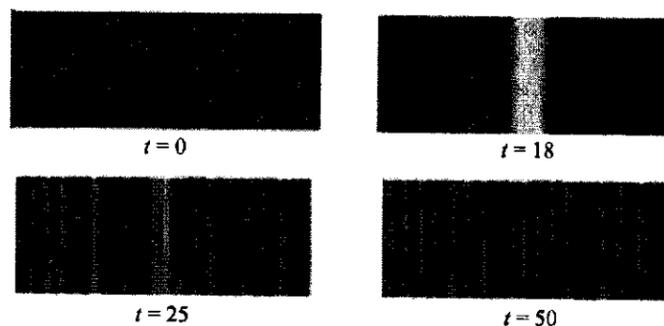


Рис. 3. Осредненные состояния эволюции процесса «жертва-хищник» (30)

при граничных условиях фон Неймана

$$\frac{\partial u_1}{\partial x} = \frac{\partial u_2}{\partial x} = 0 \quad \text{при } t > 0, \quad x = 0, \quad x = 60.$$

Уравнения (30) описывают процесс, называемый в экологии «жертва-хищник» [1]. В данном случае имеется в виду распределение планктона – жертвы (u_2) в океане при наличии рыб – хищников (u_1). Из уравнений видно, что при $u_1(x) = 5$ и $u_2(x) = 10$ состояние системы устойчиво и ничего не происходит. Если же в каком-то месте это равновесие нарушится, например, распределение планктона и/или рыб стало таким, как показано на рис. 3 ($t = 0$), то начинается их перераспределение по пространству, которое приводит к полосатому виду. На самом деле функция $\langle v_2 \rangle(t)$ при $t > 1000$ имеет вид синусоиды с амплитудой $A \approx 2,5$ и периодом $T \approx 6h$. Следует отметить, что устойчивое состояние этого процесса представляет собой диссипативную структуру: с какого бы возмущения не начался процесс, он закончится синусоидальным распределением плотности (u_2) с теми же амплитудой и периодом. Переход от уравнений (30) к КА-модели выполнялся при следующих параметрах: $M = \{(i, j): i = 0, \dots, 250; j = 0, \dots, 250\}$, шаг по x $h = 1$. Поскольку пространство одномерное, вдоль координаты j процесс не изменяется. Шаблон осреднения $Av(i, j) = \{(i + k, j + l): k = -10, \dots, 0, \dots, +10, l = 0, \dots, 250\}$. В каждом подмассиве с именами $\{j = \text{const}, i = 0, \dots, 250\}$ выполнялась одномерная КА-диффузия по правилам (25), (26).

Заключение. Предложенная в статье КА-модель предназначена для моделирования диффузионно-реакционных процессов. Метод построения модели изложен в предположении, что моделируемый процесс задан системой дифференциальных уравнений в частных производных типа (1). Такое предположение обусловлено двумя причинами. Во-первых, процессы этого типа в математической физике ассоциируются с уравнениями типа (1). Во-вторых, хорошо изученные клеточные автоматы, моделирующие диффузию, облегчают обоснование КА-модели. При этом очевидно, что несмотря на некоторые хорошие свойства КА-модель не всегда окажется предпочтительной по отношению к численному методу решения ДУ. В действительности суть модели в том, что она позволяет расширить область применения клеточных автоматов в физике, показывая, как изменить клеточный автомат какого-либо процесса, если процесс усложняется за счет дополнительных нелинейных воздействий. Эти воздействия могут быть заданы как нелинейными функци-

ями, так и клеточными автоматами. Предложенная КА-модель позволит соединить их в единый вероятностный автомат. При этом дифференциальные уравнения процесса могут и не существовать вовсе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Свирежев Ю. М. Нелинейные волны, диссипативные структуры и катастрофы в экологии. М.: Наука, 1987.
2. Пригожин И. От существующего к возникающему. Время и сложность в физических науках. М.: Наука, 1985.
3. Хакен Г. Синергетика. Иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах. М.: Мир, 1985.
4. Toffoli T. Cellular automata as an alternative to (rather than approximation) to differential equations in modeling physics // *Physica D*. 1984. 10. P. 117.
5. Малинецкий Г. Г., Степанов М. Е. Моделирование диффузионных процессов клеточными автоматами с окрестностью Марголуса // *Журн. вычисл. математики и мат. физики*. 1998. 36, № 6. С. 1017.
6. Bandman O. Comparative study of cellular automata diffusion models // *Lecture Notes in Computer Science*. Berlin: Springer, 1999. P. 395.
7. Wolfram S. Cellular automata fluids I: Basic theory // *Journ. of Stat. Phys.* 1986. 45, N 3–4. P. 471.
8. Rothman D. H., Zaleski S. Lattice-Gas Cellular Automata. Simple Models of Complex Hydrodynamics. London: Cambridge University Press, 1997.
9. Von-Neumann J. Theory of self-reproducing automata. Urbana, USA: University of Illinois, 1966.
10. Achasova S., Bandman O., Markova V., Piskunov S. Parallel Substitution Algorithm. Theory and Application. Singapore: World Scientific, 1994.
11. Годунов С. К. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1971.
12. Андронов А. А., Витт А. А., Хайкин С. Э. Теория колебания. М.: Наука, 1959.

*Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН,
E-mail: bandman@ssd.sccc.ru*

*Поступила в редакцию
25 марта 2003 г.*