

УДК УДК 621.391.1:004.7

**ИНВАРИАНТЫ КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНЫХ МОДЕЛЕЙ ТИПА
"РЕАКЦИЯ+ДИФфуЗИЯ"¹**

О. Л. Бандман

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

Вводится понятие инварианта клеточно-автоматной модели (КА-модели). Оно обозначает величину некоторой характеристики моделируемого процесса, которая не зависит от его математического описания и может быть выражена как в модельных, так и в физических величинах. Знание значений инварианта важно для практического моделирования, поскольку без него невозможен пересчет модельных параметров в физические и физические в модельные. Для процессов типа "реакция-диффузия" инвариантами являются, например, коэффициент диффузии, нормированное значение скорости распространения фронта, амплитуда и частота колебаний концентрации, характеристики устойчивых состояний. В статье приводятся примеры инвариантов для нескольких типовых КА-моделей процессов типа "реакция-диффузия", а также предлагается общий подход к определению масштабирующих коэффициентов для перехода от модельных величин к реальным и обратно.

1. Введение

Современные компьютерные системы позволяют моделировать сложные физико-химические явления, имитируя превращения и движения реальных или абстрактных частиц в дискретных времени и пространстве. Широкий класс таких явлений составляют процессы типа "реакция-диффузия" (РД процессы). В них перемещения веществ представляются подчиняющимися законам диффузии, а их превращения (химические, фазовые, биологические) – нелинейными или пороговыми функциями, а также простыми подстановками вида "было-стало". Нелинейность и разрывность реакционной составляющей в такого рода явлениях делают затруднительным или совсем невозможным использование традиционных математических моделей, основанных на дифференциальных уравнениях. Поиски альтернативы привели к развитию дискретного моделирования, в частности, к использованию идеи клеточного автомата (КА) фон-Неймана [1].

Клеточно-автоматные модели РД процессов вызывают большой интерес [2, 3], поскольку позволяют представить сложный нелинейный процесс с помощью простых функций перехода одного конечного автомата. В теории динамических систем такие модели относятся к так называемым *сложным системам* (complex systems). Термин

¹Работа поддержана грантами (1) Президиума РАН (Проект 15.9, 2011). (2) Сибирского Отделения РАН, (Интеграционный проект ИП-326 2009). (3) РФФИ грант 11-01-0567а

сложные системы введены в [4]. Его содержательный смысл состоит в том, что много простых вычислителей, функционируя совместно, проявляют себя как единый сложный процесс со свойствами самоорганизации, имитируя разного рода автоволновые процессы, процессы образования устойчивых структур и другие диссипативные явления [7]

В настоящее время КА моделирование РД процессов развивается интенсивно [2, 3] как в плане исследований [7] так и в плане применений. При этом для построения КА модели требуется найти способ перехода от физико-химического описания моделируемого явления к КА представлению, и, после получения результата моделирования необходимо его интерпретировать в привычных для исследователя физических или химических терминах. В ряде случаев это удается сделать исходя из опыта, иногда приходится ограничиваться качественным сходством с предполагаемым процессом. Хотя некоторые попытки решить эту задачу уже были предприняты [8, 9], систематического метода построения КА моделей по заданным параметрам процесса пока не существует. Чтобы заполнить этот пробел в статье предлагается новый подход, основанный на понятии *инварианта КА модели*.

Инвариантом далее называется безразмерная величина процесса, не зависящая от способа его математического представления, которая позволяет определить масштабирующие коэффициенты между реальными и модельными величинами. Поскольку КА моделируют пространственную динамику, то характеризующий его инвариант связывает величину пространственного (размер клетки в м) и временного (τ в с) масштабов. Отсюда следует, что в общем случае эти масштабы независимо выбираться не могут. Кроме того, КА модели РД процессов имеют по крайней мере две составляющих: диффузия и реакция (их может быть несколько), каждая из которых характеризуется своим инвариантом. Инварианты таких сложных процессов не всегда возможно выразить в виде функции от инвариантов его составляющих, и масштабирующие функции невозможно выразить через инвариант. В этих сложных случаях единственным путем определения масштабов остается вычислительный эксперимент и построение таблиц и кривых.

2. Клеточный автомат

КА представляет собой множество одинаковых простых вычислителей, называемых *клетками*, которые формально являются парами (u, x) , где $u \in A$ – *состояние клетки* из алфавита A , $x \in X$ – имя клетки, часто задаваемое вектором из конечно-го множества координат d -мерного дискретного пространства X . В пространстве X определены подмножества, называемые *шаблонами*,

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

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

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

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

Функционирование КА задается *локальным оператором* и режимом его применения к клеткам из Ω . Локальный оператор $\Theta(\mathbf{x})$ есть композиция подстановок:

$\Theta(\mathbf{x}) = \Phi(\theta_1(\mathbf{x}), \dots, \theta_l(\mathbf{x}))$. При этом любая $\theta_k(\mathbf{x})$, в свою очередь, может быть либо элементарной подстановкой, либо композицией подстановок. Элементарная подстановка выражается через локальные конфигурации следующим образом.

$$\theta_k(\mathbf{x}) : S_k(\mathbf{x}) \rightarrow S'_k(\mathbf{x}), \quad (3)$$

где $|S_k(\mathbf{x})| \geq |S'_k(\mathbf{x})|$, причем $T'_k \subseteq T_k$ таким образом, что первые k' клеток в локальной конфигурации составляют базу подстановки, а остальные $k - k'$ клеток играют роль контекста.

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

$$u'_j = f_j(u_1, \dots, u_n), \quad j = 0, \dots, k', \quad (4)$$

где $f_j(u_1, \dots, u_n)$ – функция переходов. Контекстные клетки не меняют своих состояний при применении подстановки (3). Их состояния служат переменными для функции переходов (4).

В локальном операторе обычно используются следующие способы композиции подстановок: суперпозиция, случайный выбор одной из l подстановок, применение l подстановок в случайном порядке [12].

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

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

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

Синхронные КА-модели РД-процессов более известны, чем асинхронные. Однако, они отображают моделируемое явление либо косвенным образом либо путем преобразования дифференциального уравнения в частных производных к клеточно-автоматному виду [5, 6]. Локальные операторы синхронных КА ограничены тем, что их подстановки (3) должны иметь одноклеточную базовую локальную конфигурацию,

$$|S'_i(\mathbf{x})| = 1 \quad \forall \theta_i \in \Theta(\mathbf{x}), \quad (5)$$

что следует из условий корректности вычислений [16]:

$$T_k(\mathbf{x}) \cap T_m(\mathbf{y}) = \emptyset, \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in X, \quad \forall k, m \in \{1, \dots, l\}, \quad l = |\Theta(\mathbf{x})|. \quad (6)$$

Ограничение (5) затрудняет имитацию явления химических или биологических взаимодействий веществ по двум причинам. Во-первых, взаимодействия предполагают участие в них двух или более веществ, что требует изменений состояний двух или более клеток одновременно. Во-вторых, синхронное обновление состояний клеток не естественно, т.к. в моделируемом микромире нет синхронизации. Поэтому асинхронные КА оказываются часто более подходящими моделями.

Асинхронный режим предполагает следующий порядок применений локального оператора:

- 1) с вероятностью $p = 1/|X|$ выбирается клетка $(u, \mathbf{x}) \in \Omega$;
- 2) к выбранной клетке применяется локальный оператор $\Theta(\mathbf{x})$, и состояния клеток базовых локальных конфигураций $(u', \mathbf{x}) \in S'(\mathbf{x})$ сразу же меняются на новые значения;
- 3) условно принимается, что $|X|$ повторений пп.1 и 2 составляет одну итерацию, такое соглашение удобно для сравнения синхронного и асинхронного режима и соответствует понятию одного шага метода, называемого *кинетическим методом Монте-Карло* [11, 10].

Поскольку в асинхронных КА локальный оператор применяется последовательно к выбранным клеткам, условие (6) всегда выполняется, т.е. вычисление эволюции КА всегда корректно. Это значит, что не может произойти потери данных (в одну клетку одновременно записаться два разных значения). Проблема корректности возникает только тогда, когда алгоритм асинхронного КА реализуется параллельно на нескольких процессорах [12, 13].

Режим функционирования КА является его существенным параметром, т.е. если два КА различаются только режимами функционирования, то они являются представлениями двух разных КА процессов. Чтобы определить однозначно КА надо задать четыре параметра: A, X, Θ, ρ , где $\rho \in \{\alpha, \sigma\}$ или обозначить клеточный автомат как $\aleph_\alpha = \langle A, X, \Theta \rangle$, если он асинхронный, или $\aleph_\sigma = \langle A, X, \Theta \rangle$, если он синхронный.

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

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

Инвариант является характеристикой КА-модели. В общем случае один и тот же КА при разных начальных условиях имеет разные инварианты.

КА-модели РД процессов с явно заданными подстановками диффузии и реакции характеризуются инвариантами, которые зависят от свойств обеих составляющих, и, следовательно, имеет смысл каждую из них рассмотреть отдельно.

3. Инварианты КА моделей диффузии

Процесс диффузии — один из немногих, имеющих два математических представления: дискретное (КА), и непрерывное (уравнение Лапласа), и характеризующийся безразмерным коэффициентом $D = d \cdot \tau/h^2$, где d — коэффициент диффузии, выраженный в $\text{м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$, τ — шаг по времени в секундах, h — шаг по пространству в метрах. Поскольку коэффициент D не зависит от начальных условий, то КА диффузии можно отождествлять с КА-моделью, инвариант которой равен соответствующему D .

3.1. Инварианты КА модели диффузии с булевым алфавитом

Из содержаельного определения коэффициента диффузии, как массы вещества, продиффундировавшего за единицу времени через единицу площади при градиенте

концентрации, равною единице, (первый закон Фика для диффузии в изотропной среде) простым рассуждением можно получить число D следующим образом. В булевом клеточном массиве на границе между областью, в которой все клетки имеют состояние $u = 1$, и областью, в которой состояния клеток $u = 0$, градиент концентрации равен 1. Следовательно, масса вещества (количество частиц), продиффундировавшая за $\Delta t = 1$, равна вероятности того, что смежные пограничные клетки обмениваются состояниями. Однако, поскольку такое рассуждение нельзя считать доказательством, далее приводятся его подтверждение результатами вычислительных экспериментов.

Наиболее известны два КА с булевым алфавитом, моделирующих процесс диффузии: 1) синхронный КА, названный в [17] *КА с окрестностью Марголуса*, 2) асинхронный КА, получивший название *наивная диффузия* [19].

Синхронный КА диффузии $\aleph_\sigma = \langle A, X, \Theta \rangle$, $A = \{0, 1\}$, $X = \{\mathbf{x} : \mathbf{x} = (i, j)\}$, функционирует следующим образом. На множестве X выделяются два подмножества: $X_0 = \{(i, j) : i_{\text{mod}2} = 0, j_{\text{mod}2} = 0\}$ — чётное, и $X_1 = \{(i, j) : i_{\text{mod}2} = 1, j_{\text{mod}2} = 1\}$ — нечётное. Вводится шаблон $T_{2 \times 2} = \{(i, j), (i, j + 1), (i + 1, j + 1), (i + 1, j)\}$, который определяет локальную конфигурацию

$$S(i, j) = \{(u_0, (i, j)), (u_1, (i, j + 1)), (u_2, (i + 1, j + 1)), (u_3, (i + 1, j))\}.$$

Вероятностный локальный оператор $\Theta(i, j)$ перемещает состояния клеток таким образом, что новые состояния u'_k , $k = 0, 1, 2, 3$, равны

$$u'_k = \begin{cases} u_{(k+1)(\text{mod}4)}, & \text{если } \text{rand} < p, \\ u_{(k-1)(\text{mod}4)}, & \text{если } \text{rand} \geq (1 - p), \end{cases} \quad (7)$$

где p - вероятность применения $\Theta(i, j)$. Итерация подразделена на две стадии: на первой стадии $\Theta(i, j)$ применяется синхронно к клеткам $(i, j) \in X_0$, на второй — к клеткам $(i, j) \in X_1$. В [17] сделана попытка доказать, что при $p = 0.5$ безразмерный коэффициент диффузии $D_{2\sigma} = 1, 5$. Эта величина была поставлена под сомнение в [18], где утверждается, что в [17] не учитывалась разница в вероятности перемещения частицы в противоположных направлениях на четных и нечетных стадиях, и показано, что при $p = 0, 5$ $D_{2\sigma} = 1$, что согласуется с приведенным выше рассуждением. При $p < 0, 5$ $D_{2\sigma} = p$.

Одномерный вариант синхронной диффузии функционирует в пространстве $X = \{i = 0, 1, 2, \dots, N\}$, подразделенном на три подмножества: $X = X_0 \cup X_1 \cup X_2$, где $X_k = \{i : i_{\text{mod}3} = k\}$, $k = 0, 1, 2$. Локальный оператор $\Theta(i)$ производит обмен состояниями клетки (u_0, i) со случайно выбранным соседом из $S(i) = \{(u_0, i), (u_1, i - 1), (u_2, i + 1)\}$,

$$\begin{cases} (u'_0 = u_1) \& (u'_1 = u_0) & \text{если } \text{rand} < p, \\ (u'_0 = u_2) \& (u'_2 = u_0) & \text{если } \text{rand} \geq (1 - p), \end{cases} \quad (8)$$

Итерация подразделена на 3 стадии: на первой стадии $\Theta(i)$ применяется синхронно к клеткам $i \in X_0$, на второй — к $i \in X_1$, на третьей — к $i \in X_2$, коэффициент диффузии $D_{1\sigma} = p$.

Асинхронный КА диффузии $\aleph_\alpha = \langle A, X, \Theta \rangle$, $A = \{0, 1\}$, $X = \{\mathbf{x} : \mathbf{x} = (i, j)\}$ (наивная диффузия) предполагает, что выбранная согласно асинхронному режиму равновероятно клетка из X обменивается состоянием с одним из своих соседей, тоже выбранным с равной вероятностью.

В двумерном случае используется 5-точечный шаблон с локальной конфигурацией

$$S(\mathbf{x}) = \{(u_0, \mathbf{x}), (u_1, \mathbf{x} + \mathbf{a}_1), (u_2, \mathbf{x} + \mathbf{a}_2), (u_3, \mathbf{x} + \mathbf{a}_3), (u_4, \mathbf{x} + \mathbf{a}_4)\}.$$

Локальный оператор $\Theta(\mathbf{x})$ применяется к клеткам (u_0, \mathbf{x}) и выполняет обмен состояниями с одной из соседних клеток из $(u_k, \mathbf{x} + \mathbf{a}_k) \in S(\mathbf{x})$ выбранных равновероятно.

$$(u'_0 = u_k) \ \& \ (u'_k = u_0) \text{ если } (k-1)/4 < \text{rand} < k/4 \ \& \ \text{rand} < p, \quad k = 1, 2, 3, 4. \quad (9)$$

Из (9) следует, что средняя вероятность того, что за одну итерацию частица переместится из клетки $(1, \mathbf{x})$ в одну из соседних клеток $(0, \mathbf{x} + \mathbf{a}_k)$ равна 0.5, т.е. при $p = 1$ $D_{2\alpha} = 0, 5$, при $p < 1$ $D_{2\alpha} = 0, 5 \cdot p$.

В одномерном варианте $X = \{i : i = 0, 1, \dots, N\}$ случайно выбранная клетка (u_0, i) производит обмен состояниями со случайно выбранным соседом из $S(i) = \{(v_0, i), (v_1, i-1), (v_2, i+1)\}$. Функция переходов, и, следовательно, коэффициент диффузии, при этом такие же как в синхронном случае, $D_{1\sigma} = 1$, но разделения на стадии не производится.

3.2. Инварианты КА моделей диффузии с целочисленным алфавитом

Целочисленные КА модели диффузии предложены в [20], где они названы “многочастичными”. В [20] даны две версии целочисленной КА диффузии, соответствующие синхронной и асинхронной булевым моделям, соответственно. Состояние клетки выражается в виде суммы двух частей: $v = \gamma \cdot v + (1-\gamma) \cdot v$, $\gamma \in (0, 1]$, из которых только одна совершает перемещение в соседнюю клетку. Такой принцип позволяет уменьшить или даже совсем избавиться от “автоматного шума”, и, следовательно, от необходимости осреднения булевого массива.

Синхронная целочисленная 2D КА диффузия \aleph_σ использует алфавит $A = \{0, 1, 2, \dots, M\}$, дискретное пространство $X = \{\mathbf{x} : \mathbf{x} = (i, j)\}$, подразделенное на два подмножества клеток: четное X_0 и нечетное X_1 , как и в булевом случае. Оператор перехода $\Theta(i, j)$ выполняет следующую функцию переходов.

$$v'_k = \begin{cases} (1-\gamma) \cdot v_k + \gamma \cdot v_{(k+1) \bmod 4}, & \text{если } \text{rand} < p, \\ (1-\gamma) \cdot v_k + \gamma \cdot v_{(k-1) \bmod 4}, & \text{если } \text{rand} \geq (1-p), \end{cases} \quad (10)$$

где p - вероятность применения $\Theta(i, j)$, $\gamma \in (0, 1]$ — перемещаемая часть v , $k=0,1,2,3$. Как и в булевом варианте итерация подразделена на две синхронные стадии: на первой стадии $\Theta(\mathbf{x})$ применяется к клеткам $\mathbf{x} \in X_0$, на второй — к клеткам $\mathbf{x} \in X_1$.

Одномерный вариант синхронной целочисленной КА диффузии функционирует в пространстве $X = \{i = 0, 1, 2, \dots, N\}$, подразделенном на три подмножества: $X = X_0 \cup X_1 \cup X_2$, где $X_k = \{i : i \bmod 3 = k\}$, $k = 0, 1, 2$. Локальный оператор $\Theta(i)$ производит обмен частью состояния $\gamma \cdot v_0$ со случайно выбранным соседом из $S(i) = \{(v_0, i), (v_1, i-1), (v_2, i+1)\}$,

$$\begin{cases} (v'_0 = (1-\gamma) \cdot v_0 + \gamma \cdot v_1) \ \& \ (v'_1 = (1-\gamma) \cdot v_1 + \gamma \cdot v_0) & \text{если } \text{rand} < p, \\ (v'_0 = (1-\gamma) \cdot v_0 + \gamma \cdot v_2) \ \& \ (v'_2 = (1-\gamma) \cdot v_2 + \gamma \cdot v_0) & \text{если } \text{rand} \geq (1-p), \end{cases} \quad (11)$$

Как и в синхронном одномерном КА итерация подразделена на три стадии: на k -й стадии $\Theta(i)$ применяется к X_k .

Асинхронная целочисленная диффузия работает аналогично наивной диффузии. Отличие как в двумерном, так и в одномерном случаях состоит в том, что межклеточный обмен происходит частью от значения состояния. Таким образом в двумерном

случае функция переходов переводит состояния (v_0, \mathbf{x}) и $(v_k, \mathbf{x} + \mathbf{a}_k)$ в (v'_0, \mathbf{x}) и $(v'_k, \mathbf{x} + \mathbf{a}_k)$ следующим образом

$$\begin{cases} v'_0 = (1 - \gamma) \cdot v_0 + \gamma \cdot v_k, \\ v'_k = (1 - \gamma) \cdot v_k + \gamma \cdot v_0, \end{cases} \quad (k - 1)/4 < \text{rand} < k/4; \quad (12)$$

В одномерном случае применяется та же функция переходов (11), что и в синхронном случае, но без разделения итерации на стадии.

Коэффициенты диффузии целочисленных КА равны соответствующим коэффициентам булевых КА, умноженных на γ .

Знание инварианта позволяет определить масштабы параметров КА-модели, т.е. длину h стороны клетки в метрах и время итерации τ в секундах. При этом один из этих масштабов может быть выбран из условий задачи, а второй вычисляется из соотношения

$$D = \frac{d \cdot \tau}{h^2}, \quad (13)$$

где d – коэффициент диффузии среды в $\text{м}^2\text{с}^{-1}$. Например, h может быть выбран равным размеру реальных или абстрактных частиц. Тогда $\tau = (D \cdot h^2)/d$ с.

3.3. Вычислительные эксперименты с КА-моделями диффузии

Для подтверждения правильности предположений о значениях коэффициентов диффузии были выполнены следующие вычислительные эксперименты. Для каждого случая выполнялось моделирование процесса диффузии двумя методами: 1) клеточным автоматом при предполагаемом значении D_{CA} и 2) численным решением уравнения Лапласа при $D_L = D_{CA}$. Одинаковыми были также размеры $I \times J$ клеточного и сеточного пространств, а также начальные условия: $\langle v(0, \mathbf{x}) \rangle = u(0, \mathbf{y})$ для всех $\mathbf{x} \in X$ и всех $\mathbf{y} \in Y$, где Y – множество узлов в численном решении уравнения Лапласа. Производилось сравнение значений $\langle v(t, (I/2, j)) \rangle$ с $u(t, (I/2, j))$ для $j = 0, \dots, J$ и $t = 0, \dots, T$, где $T = 300$ – число итераций, в течение которых процесс практически завершился. Если значения $\langle v(t, (I/2, j)) \rangle$ и $u(t, (I/2, j))$ совпадали (с точностью до ошибки осреднения состояний КА), то считалось, что $D_{CA} = D_L$ – инвариант соответствующей КА модели.

Результаты вычислительного моделирования подтвердили предполагаемые значения инвариантов для всех КА моделей диффузии, для которых $D = 1$ для одномерной и двумерной синхронной КА-модели, а также для одномерной асинхронной, $D = 0,5$ для двумерной наивной КА-модели. Все коэффициенты диффузии целочисленных КА равны соответствующим коэффициентам булевых КА, умноженных на γ .

4. Инварианты КА-моделей процессов "реакция+диффузия"

4.1. Инварианты КА-моделей реакции

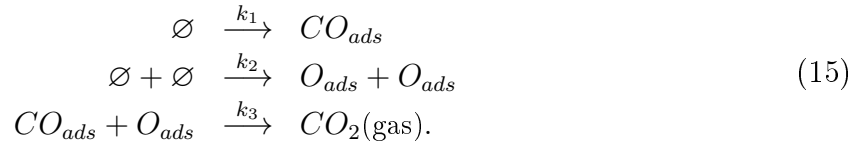
В КА-моделях химических реакций за инвариант можно принять безразмерный коэффициент $R = k \cdot \tau$. В нем k – константа скорости реакции с размерностью $[\text{с}^{-1}]$, которая для большинства изученных реакций известна или рассчитывается по известной методике, τ – длительность итерации клеточного автомата в [с] (шаг по времени). Следует отметить, что инвариант КА-модели химической реакции не зависит от размеров клетки, и следовательно, размер клетки h модели может быть выбран исходя

из размеров молекул (реальных или абстрактных). Физический смысл коэффициента R — относительное изменение концентрации ($\Delta C/C$) реактанта за время одной итерации τ . Это время и является тем значением, которое связывает модельные величины с реальными. Если в модели участвует только одна реакция, то τ естественно выбирать равным длительности этой реакции. Если в моделируемом процессе участвует несколько реакций, и возможно, другие действия (адсорбция, диффузия), то соотношения скоростей регулируются вероятностями применения соответствующих локальных операторов. Так, если в процессе участвует n действий, описываемых n подстановками, т.е. $\Theta(\mathbf{x}) = \{\theta_1(\mathbf{x}), \dots, \theta_n(\mathbf{x})\}$, то вероятность выполнения каждой $\theta_i(\mathbf{x})$

$$p_i = \frac{R_i}{\sum_{j=1}^n R_j} = \frac{k_i}{\sum_{j=1}^n k_j}. \quad (14)$$

В этом случае инвариантом процесса следует считать набор $R = \{R_1, \dots, R_n\}$, в котором $R_i = p_i \cdot \tau$, а итерации τ выбирается таким, чтобы самое медленное действие закончилось.

Например, реакция, которая получила название ZGB-реакции по фамилиям авторов [21] и положила начало широкому применению асинхронных вероятностных КА (кинетического метода Монте-Карло) представлена тремя химическими формулами:



На поверхность катализатора из газа адсорбируются диссоциированный кислород и моноокись углерода, которые, реагируя, образуют углекислый газ. Моноокись углерода диффундирует на пустые клетки, углекислый газ освобождает поверхность катализатора. Значения констант адсорбции (k_1) и десорбции (k_2) зависят от начальных условий процесса, они пропорциональны парциальным давлениям соответствующих газов, значение константы реакции k_3 от начальных условий не зависит.

КА-модель этого процесса $\mathfrak{A}_\alpha = \langle A, X, \Theta, \Omega(0) \rangle$ определяется значениями $A = \{\emptyset, O, CO\}$, $X = \{\mathbf{x} : x = (i, j)\}$, $\Omega(0) = \{(\emptyset, \mathbf{x}) : \forall \mathbf{x} \in X\}$, $\Theta(\mathbf{x}) = \Phi_r(\theta_1(\mathbf{x}), \theta_2(\mathbf{x}), \theta_3(\mathbf{x}), \theta_4(\mathbf{x}))$, где Φ_r — локальный оператор случайного выбора одной из трех подстановок:

$$\begin{aligned} \theta_1(\mathbf{x}) &: (\emptyset, x) \xrightarrow{p_1} (CO, x), \\ \theta_2(\mathbf{x}) &: (\emptyset, x), (\emptyset, x + a_l) \xrightarrow{p_2} \{(O, (i, j)), (O, (x + a_l))\}, \\ \theta_3(\mathbf{x}) &: (CO, x), (O, (x + a_l)) \xrightarrow{p_3} \{(\emptyset, x), (\emptyset, (x + a_l))\}, \end{aligned}$$

Инвариант этой модели равен $R = \langle R_1, R_2, R_3 \rangle$, где $R_i = p_i \cdot \tau$, $i = 1, 2, 3$. Масштаб времени τ следует выбрать равным времени адсорбции, так как адсорбция наиболее медленное действие. Масштаб длины h не зависит от инварианта, его можно принять равным размеру молекулы CO . Результаты моделирования легко перевести в физических величины: например, количество образующегося углекислого газа за секунду равно

$$M(CO_2) = \frac{N(CO_2) \cdot m(CO_2)}{\tau} \text{ кг} \cdot \text{с}^{-1},$$

где $N(CO_2)$ — количество применений θ_3 за одну итерацию, $m(CO_2)$ — масса молекулы CO_2 .

4.2. Инвариант КА модели “распространение фронта”

К классу процессов “реакция-диффузия” относятся также явления, в которых реакционный член представлен нелинейной функцией (чаще всего полиномом). В традиционной математике эти явления описываются дифференциальными уравнениями вида

$$u_t = Du_{xx} + F(u), \quad (16)$$

где правая часть содержит оператор диффузии (Лапласиан) и нелинейную функцию $F(u)$, отображающую реакцию составляющую процесса.

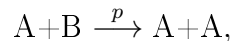
Типичным примером является уравнение “диффузии, соединенной с возрастанием количества вещества” [23, 24] с нелинейной функцией вида

$$F(u) = \alpha u(1 - u), \quad (17)$$

и начальными условиями:

$$F(0) = F(1) = 0, \quad 0 < \alpha \leq 1, \quad 0 \leq u \leq 1. \quad (18)$$

В химии это уравнение моделирует реакцию превращения вещества А в вещество В с вероятностью, пропорциональной плотности А при условии, что $A+B=\text{const}$, т.е.



В экологии уравнение (16) моделирует распространение эпидемий, сорняков, животных. В социологии – распространение слухов, привычек и т.д. Во всех случаях уравнение вида (16) моделирует пространственную экспансию, и процесс называется *распространением фронта*. Инвариантом процесса является *скорость распространения фронта*.

Так как в [23] даны аналитические оценки для одномерного случая, то далее исследуется одномерный аналог уравнения (16) $\mathfrak{A}_\sigma = \langle A, X, \Theta, \Omega(0) \rangle$, который построен как композиция КА диффузии и КА реакции [14] при $A = \{0, 1\}$, $X = \{i : i = 0, \dots, N\}$ и

$$\Theta(i) = \Phi_{sum}(\Theta_1(i), \Theta_2(i)). \quad (19)$$

Композиционный локальный оператор Φ_{sum} выполняет покопонентное арифметическое суммирование глобальных состояний с преобразованием булева алфавита в вещественный и обратно [15]. В (19)

$\Theta_1(i)$ – локальный оператор КА-модели диффузии,

$\Theta_2(i) : (u, i) \rightarrow (u', 1)$ – одноклеточный бесконтекстный локальный оператор с функцией перехода $u' = F(u)$.

Таким образом, состояния клеток $(w, i) \in \Omega(t + 1)$, результата применения $\Theta(i)$ к $(v, i) \in \Omega(t)$

$$w(i) = \text{Disc}(\langle v'(i) \rangle + F(\langle v'(i) \rangle)), \quad (20)$$

где $v'(i)$ – результат применения $\Theta_1(i)$ к $(v, i) \in \Omega(t)$,

$\text{Disc}(x)$ – операция, преобразующая состояния $x \in \{0, 1\}$ в $y = (0, 1)$ следующим образом [15]:

$$x = \text{Disc}(y) = \begin{cases} 1, & \text{если } \text{rand} < y, \\ 0, & \text{в иных случаях} \end{cases} \quad (21)$$

В [23] аналитически доказано, что скорость распространения фронта при $t \rightarrow \infty$ зависит от коэффициентов диффузии (D) и реакции (α) следующим образом:

$$V_0 = 2\sqrt{D \cdot \alpha}, \quad (22)$$

Много позднее, в [25, 26] было обнаружено, что дискретный характер компьютерного моделирования, влияет на скорость распространения фронта в сторону её уменьшения. Отсюда вытекает необходимость проведение экспериментального моделирования. Для сравнения результатов моделирование проводилось также для непрерывного случая (22). Вычислялась скорость распространения фронта для трех значений коэффициента диффузии наивной диффузии $D = 0.2$, $D = 0.5$ и $D = 1$ в зависимости от значений α . Для преодоления ограничения Куранта при решении уравнения (16) с $D = 0,5$ и $D = 1$ каждая итерация составлялась из пяти временных шагов, в которых прибавление реакционной части выполнялось с вероятностью $p = 0,1$ и $p = 0,2$, соответственно.

Размер клеточного массива для всех испытаний равен $I \times J = 200 \times 800$ Начальные значения клеточного массива $v(i, j) = 1$ при $0 < i < 200$, $j > 40$, в остальных случаях $v(i, j) = 0$.

Скорость распространения фронта V вычислялась в процессе моделирования на участке между $j_1 = 500$ и $j_2 = 700$ для $0.01 < \alpha \leq 1$ следующим образом: $V = (j_2 - j_1)/(t_2 - t_1)$ при t_2, t_1 таких, что $u(j_2, t_2) = u(j_1, t_1) = 0,5$.

Эксперименты показали, что скорость фронта при его движении перестает изменяться уже после $t = 200$ при всех $0,01 < \alpha \leq 1$. Поэтому измеренные при $j > 500$ значения можно считать установившимися.

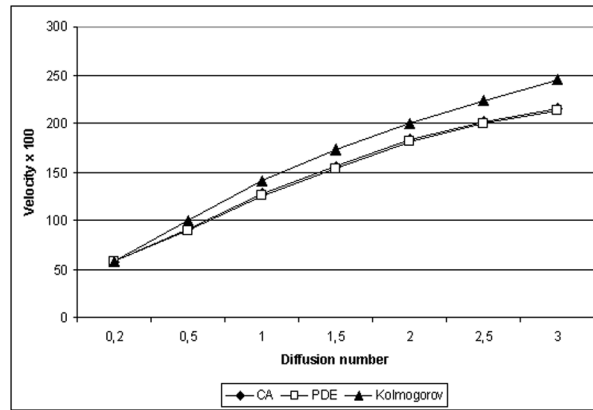


Рис. 1. Полученные путем моделирования зависимости скорости распространения фронта от α при разных значениях коэффициента диффузии

5. Инвариант КА модели “агрегация ограниченная диффузией”

Эта КА модель (*diffusion limited aggregation*) отображает целый ряд явлений, связанных с фазовыми переходами [27]. Например, кристаллизация в растворах, образование льда, снежных хлопьев, рост кораллов и др. Наиболее известны асинхронные КА модели, в которых диффузионная составляющая описывает случайное блуждание частиц в пространстве, а реакционная составляющая преобразует блуждающую частицу в неподвижную, если она касается другой неподвижной. Процессу соответствует КА модель $\mathfrak{A}_\alpha = \langle A, X, \Theta, \Omega(0) \rangle$, где $A = \{a, b, c\}$, $X = \{(i, j)\}$, $\Omega_V(0) -$

исходное глобальное состояние, в котором $> 90\%$ составляют состояния b , $< 10\%$ — состояния a и несколько клеток-зародышей в состоянии c . Локальный оператор $\Theta(i, j) = \Phi_r(\theta_1(i, j), \theta_2)$, где $\theta_1(i, j)$ — оператор наивной диффузии (9), а

$$\theta_2(i, j) : \{c, (i, j), (a, (i + k, j + l))\} \xrightarrow{p} \{c, (i, j), (c, (i + k, j + l))\}, \quad (23)$$

где $(k, l) \in \{(0, 1), (1, 0), (-1, 0), (0, -1)\}$, p — коэффициент прилипания. В процессе эволюции вокруг зародышей образуется растущая структура (Рис.2).

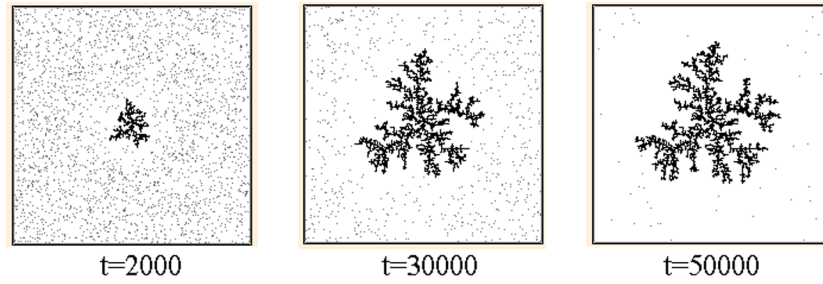


Рис. 2. Эволюция КА, моделирующего процесс “агрегации ограниченной диффузией”.
Размер клеточного массива 400×400 . Коэффициент прилипания $p = 1$, $\delta = 1,64$.

Коэффициент прилипания p определяет однозначно эволюцию КА при заданном $\Omega(0)$, и, следовательно ее главную характеристику — фрактальную размерность (плотность),

$$\delta = \log(N(R))/\log(\pi R^2), \quad (24)$$

где R — радиус круга с центром в зародышевой клетке, $N(R)$ — число клеток в состоянии c в этом круге.

Однако, установить аналитические соответствия между p и δ пока не удалось. Известны только полученные путем моделирования таблицы этих соответствий [27]. Таким образом, чтобы построить КА -модель \mathfrak{A}_α процесса агрегации вещества a из раствора b с заданной фрактальной размерностью δ необходимо выполнить следующее:

1. выбрать размер клетки h равным размеру частицы (молекулы, гранулы) агрегируемого вещества, и определить исходный клеточный массив;
2. по (13) определить шаг по времени τ в сек. исходя из инварианта наивной диффузии $D = 0,5$ и физического коэффициента диффузии вещества d ;
3. по заданной величине δ определить по таблице из [27] соответствующее значения коэффициента прилипания p ;
4. записать θ_1 (9) и θ_2 (23) и задать $\Omega(0)$.

6. Заключение

Проблему определения масштабирующих коэффициентов, позволяющих построить КА модель по заданному физическому описанию процесса, а также выразить результаты моделирования в привычных физических понятиях (метрах секундах, килограммах) предлагается решить с помощью понятия инварианта модели. В статье рассмотрены инварианты для КА моделей ограниченного клавсса явлений, называемых РД-процессами, хотя предлагаемый подход может быть применен для любых КА моделей (гидродинамических КА, КА формирования устойчивых структур, процессов

роста и др.). Подобный подход используется и в традиционном моделировании путем введения безразмерных величин типа числа Рейнольдса, числа Маха и др.

Приведенные примеры показывают, что для сложных КА моделей, в которых, диффузия и реакция заданы явно, инварианты могут быть определены исходя из известных инвариантов диффузии и известных инвариантов реакций. В более сложных КА моделях инварианты могут быть получены путем накопления опыта моделирования, и затем хранения в виде таблиц и кривых, подобно тому, как это делалось при определении физических и химических величин в традиционном моделировании.

ЛИТЕРАТУРА

1. фон-Нейман Дж. Теория самовоспроизводящихся автоматов // М.: Мир. 1971. .
2. Ванга В. К. Диссипативные структуры в реакционно-диффузионных системах. Эксперимент и теория // Ижевск: ИКИ. 2008 . 300 с.
3. Vossara N. Reaction-Difusion complex systems Berlin: Springer. 2004. 397 p.
4. Wolfram S. Statiatical machanics in cellular automata // Rev. Mod. Phys. 1983 . Vol.55, P. 601–642.
5. Weimar J. Cellular Automata for reaction-diffusion systems // Parallel Computing. 1997. Vol. 23, N 11. P. 1699–1715.
6. Vandman O. A hybrid Approach to Reaction-Diffusion Simulation. // Proc. of PaCT-2001. LNCS. vol.2122 . Berlin: Springer,. P. 1–16.
7. Ванга В. К. Исследование пространственно-распределенных динамических систем методами вероятностного клеточного автомата // Успехи физических наук. 1999. Т. 169, N 5. С. 481 – 504.
8. Vandman O. Mapping physical phenomena onto CA-models // In: AUTOMATA-2008. Theory and Aplications of Cellular Automata. — Luniver Press. 2008. P. 381–397
9. Бандман О. Л. Отображение физических процессов на их клеточно-автоматные модели // Вестник Томского государственного университета, серия «Математика. Кибернетика. Информатика». 2008. №3. С. 345-356.
10. Metropolis N, Ulam S. The Monte Carlo Method // Amer. statistical assoc. 1949. Т. 44 . № 247. С. 335-341.
11. Jansen A.P.J. An Introduction to Monte Carlo Simulations of Surface Reactions //arXiv:cond-mat/0303028v1[stst-mech]. 2003 51 p.
12. Kalgin K. Comparative study of Parallel Algorithms for Asynchronous Cellular Automata Simulation on Different computer Architectures // Proc. of ACRI-2010. LNCS, vol.6350. Berlin: Springer,. P. 399–408.
13. Vandman O. Parallel Simulation of Asynchronous Cellular Automata Evolution. // Proc.ACRI-2006. LNCS, vol. 4173. Berlin: Springer. P.41-47.
14. Бандман О. Методы композиции клеточных автоматов для моделирования пространственной динамики. //Вестник Томского Гос. университета. 2004. № 9(1) . С. 183-193
15. Vandman O. Synchronous versus Asynchronous Cellular Automata for Simulating Nano-Kinetics // Bul.Nov.Comp.Center. 21, 2004 ,Novosibirsk: NCC Publisher. , P. 9-21.
16. Ачасова С. М. Бандман О. Л. Корректность параллельных процессов. // Новосибирск: Наука, 1998. С. 260.
17. Малинецкий Г. Г. Степанцов А. Моделирование диффузионных процессов клеточными автоматами с окрестностью Марголуса. // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1998. Т. 36. № 6. С. 1017- 1031.

18. *Калгин К. В.* Клеточно-автоматные модели процесса диффузии // частное сообщение.
19. *Toffoli T. Margolus N.* Cellular Automata Machines: A New Environment for Modeling // USA: MIT Press. 1987. 260 p.
20. *Medvedev Yu. G.* Multiparticle Cellular Automata for Diffusion Simulation. // MTPP Proceedings. LNCS, vol.6083. 2011. Berlin: Springer. P. 204-211.
21. *Ziff R. M. Gulari E. Barshad Y.* Kinetic phase transition in an irreversible surface-reaction model // Phys. Rev. Lett. 1986. Vol. 56(24). P. 2553-2556 / .
22. *Matveev A. V. Latkin E. I. Elokhin V. I Gorodetskii V. V.* Turbulent and stripes wave patterns caused by limited CO_{ads} diffusion during CO oxidation over Pd(110) surface: kinetic Monte Carlo studies. // Chemical Engineering Journal, 2005, vol. 107. P. 181-189
23. *Колмогоров А. Н. Петровский И. Г. Пискунов И. С.* Исследование уравнения диффузии, соединенной с возрасиантем количества вещества и его применение к одной биологической проблеме. Бюллетень МГУ, Секция А, 1937. вып. 6. С. 1-25.
24. *Fisher R. A.* The genetical theory of natural selection Oxford: Univ. Press, 1930
25. *Warren C. Somfai E. and Sander L. M.* Velocity of front propagation in 1-dimensional autocatalytic reactions. // Braz. J. Phys. v.30 N 1, 2000. — P. 157-162.
26. *Brunet E. and Derrida B.* Effect of Microscopic Noise on Front Propagation Velocity. // Journal of Statistical Physics. 2001 Vol. 103 N. 1-2, P. 269-282.
27. *Ackland G. J. Tweedie E. S.* Microscopic model of diffusion limited aggregation and electrodeposition in the presence of leveling molecules // Phys. Rev. E 73. 011606 (2006)