Построение таблицы переходов клеточного автомата, моделирующего волновой процесс

В.П. Маркова

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

Рассматривается класс клеточных автоматов HPPrp, эволюция которых моделирует волновой процесс. Каждая клетка автомата содержит частицы двух типов: движущиеся частицы и частицы покоя. Взаимодействие частиц на этапе столкновения определяет функционирование недетерминированного конечного автомата, который реализует клетки HPPrp автомата. Предложена процедура построения правил перехода. Она сформулирована в терминах задачи линейного программирования. В качестве условия, которое гарантирует существование равновесного состояния, используется условие обобщенного детального баланса.

Введение

Lattice-Gas Cellular Automata [1–3] («решеточные газы», далее просто клеточные автоматы (КА)) описывают природные явления множеством гипотетических частиц. Они движутся в решеточном дискретном пространстве по некоторым правилам. Эти правила представляют моделируемый процесс на мезоуровне, исходя из общих законов физики. В [2] доказано, что они соответствуют волновому уравнению. Интерес к КА-моделированию объясняется рядом достоинств. Во-первых, отсутствие ошибок округления и способность моделировать нелинейные и разрывные процессы. Во-вторых, простота задания граничных условий. И, наконец, неограниченные возможности параллельной реализации задач на современных суперкомпьютерах.

Первым решеточным автоматом был так называемый HPP-автомат [2]. Он определен на квадратной решетке. Каждый узел решетки (клетка) имеет четырех соседей. В данный момент времени в клетке может находиться не более одной движущейся частицы с единичной массой и единичной скоростью, направленной в сторону соседнего узла. Состояние клетки однозначно определяется булевым вектором. Эволюция HPP-автомата состоит из двух последовательных фаз: столкновение и сдвиг. Столкновение реализуется одним правилом (лобовое столкновение): две частицы прилетают в клетку из противоположных направлений, сталкиваются и меняют направление

вектора скорости на 90 градусов. На фазе сдвига все частицы сдвигаются в сторону ближайшего соседа. Все клетки HPP-автомата вычисляют новое состояние синхронно и параллельно, в результате чего происходит изменение глобального состояния автомата. Итеративная смена глобальных состояний HPP-автомата описывает динамику волнового процесса. Каждой клетке HPP-автомата ставится в соответствие конечный автомат, состояние которого определяется находящимися в нем частицами. Таблица переходов автомата описывает его работу на этапе столкновения.

В [2] предложен клеточный автомат HPPrp (rest particles) для моделирования волновых процессов в неоднородных средах. Этот автомат, кроме движущихся частиц, содержит частицы покоя. Они имеют различную массу и нулевую скорость. В результате в HPPrp-клетке к правилу лобового столкновения движущихся частиц добавились правила создания (разрушения) частиц покоя с некоторой вероятностью. Формальная процедура построения недетерминированных правил перехода конечного автомата для разработки новых HPPrp-автоматов с произвольным количеством частиц покоя отсутствует. Более того, динамика частиц в существующих HPPrp-автоматах не всегда удовлетворяет необходимому условию полудетального баланса. Поэтому встает задача поиска более общего условия, которое гарантирует существование равновесного состояния клеточного автомата по сравнению с полудетальным балансом, и разработки на его основе процедуры построения таблицы переходов конечного автомата, реализующего этап столкновения в HPPrp-автоматах.

HPPrp модель волновых процессов

Формально HPPrp клеточный автомат определяется множеством $N = \langle M, S, \Theta \rangle$, где M – дискретное пространство, S – множество состояний клеток, Θ – множество функций переходов. Дискретное пространство представляет собой $2D$ решетку: $M = \{(i, j) : i = 0,1,...,I, j = 0,1,...,J\}$, где пара $(i, j) = r -$ *имя* клетки. Каждая клетка имеет четыре соседа и может содержать не более четырех *движущихся* частиц и несколько частиц *покоя*. Движущиеся частицы имеют единичную массу и единичную скорость, частицы покоя имеют разную массу (2, 4, 8, …) и нулевую скорость.

Множество состояний – множество булевых векторов $\boldsymbol{s} = (s_{b+4},...,s_4,s_3,s_2,s_1)$, где b – количество частиц покоя. Вектор $\boldsymbol{s}$ содержит информацию о частицах, находящихся в данный момент времени в данной клетке. Значения первых четырех компонент вектора $\boldsymbol{s}$ характеризуют движущиеся частицы: $s_k = 0$ (отсутствие), $s_k = 1$ (наличие) движущейся частицы, направленной в сторону *k*-го соседа. Значения остальных компонент вектора $\boldsymbol{s}$ характеризуют частицы покоя: $s_k = 0$ (отсутствие), $s_k = 1$ (присутствие) частицы покоя с массой 2^{k-4}, $k = 5,6,...,b+4$. Например, если клетка имеет состояние (11011), это означает, что она содержит три движущиеся частицы, направленные в сторону первого, второго и четвертого соседей, и одну частицу покоя массой 4. Пара (s,r) называется *клеткой*. Сумма масс всех частиц в клетке с именем r называется *модельной плотностью*. Множество клеток, в котором все клетки имеют уникальные имена, образует *клеточный массив* $\Omega = \{(s,r)\}$. Множество состояний всех клеток массива в момент времени *t* называется *глобальным* состоянием $\Omega(t)$ клеточного массива.

Множество функций переходов $\Theta = \{\theta_p\}$, $p = 1,2,...,g$ определяется правилами функционирования клеточного автомата. Автомат работает синхронно. Итерационный шаг состоит из двух фаз: *столкновения* и *сдвига*. Это означает, что функция перехода состоит из композиции функций столкновения и сдвига.

Столкновение выполняется локально для каждой клетки массива. Фаза столкновения состоит из следующих правил: лобовое столкновение и правила создания (разрушения) частиц покоя с некоторой вероятностью. Сдвиг выполняется перемещением движущихся частиц на одну клетку в направлении ее соседей. Правила сдвига и столкновения строятся таким образом, чтобы при каждом сдвиге и столкновении частиц суммарные масса и импульс всех частиц клеточного массива оставались неизменными.

На рис. 1 показан итерационный шаг HPPrp КА с двумя частицами покоя массой 2 и 4. В результате столкновения клетка из исходного состояния $\boldsymbol{s} = (010101)\,(21)$ (21 – десятичное представление состояния (010101)) меняется на состояния $\boldsymbol{s}'_1 = (011010)\,(26)$, $\boldsymbol{s}'_2 = (001111)(15)$, $\boldsymbol{s}'_3 = (100000)(32)$ и $\boldsymbol{s}'_4 = \boldsymbol{s}$ в общем случае с разными вероятностями, но при соблюдении равенства $\sum_1^4 p_i = 1$ (условия нормализации).

Состояния 26, 21, 15, 32 образуют *класс эквивалентности* Ψ_4, нижний индекс указывает модельную плотность клеток класса.

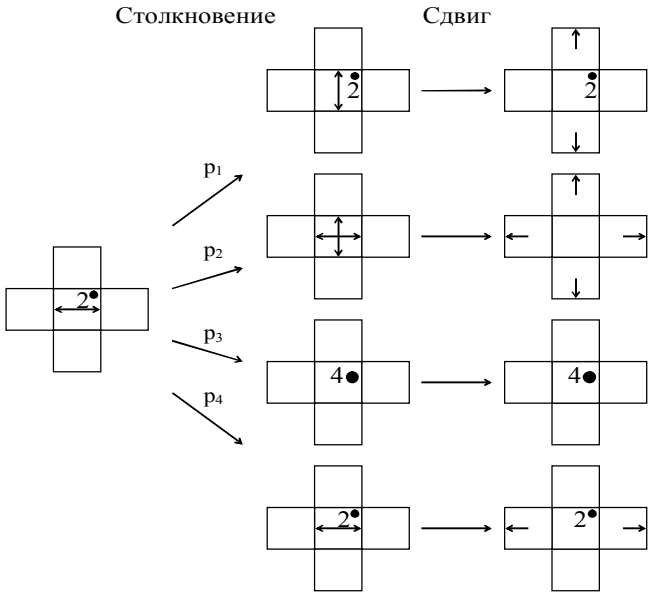


Рис.1. Итерационный шаг HPPrp с частицами покоя массой 2 и 4

В результате выполнения итерационного шага HPPrp автомат из одного глобального состояния переходит в другое глобальное состояние. Итеративная смена глобальных состояний клеточного автомата (*эволюция* клеточного автомата) описывает динамику волнового процесса.

Пример 1. Моделирование HPPrp-волнового процесса [4]. В эксперименте волновой процесс представляется эволюцией HPPrp КА с частицами покоя массой 2 и 4. Размер массива составляет 600x300 клеток (рис. 2). Источник генерации внешнего возмущения расположен в центре и представляет собой массив размером 20x300 клеток. Исходное состояние клеток массива (модельная плотность) задается генератором случайных чисел в течение одного такта. Модельная плотность источника возмущения равна 4: генератор с вероятностью 1 генерирует движущиеся частицы. Модельная плотность клеток остальной части массива равна 2: генератор с вероятностью 0,25

генерирует движущиеся частицы, с вероятностями 0,5 (0,25) генерирует частицы покоя с массой 2 (4). Граничные условия – периодические. В результате эволюции HPPгр КА в массиве образуются две плотные области, которые движутся от источника в противоположные стороны с конечной скоростью, имитируя распространение одиночной продольной волны.

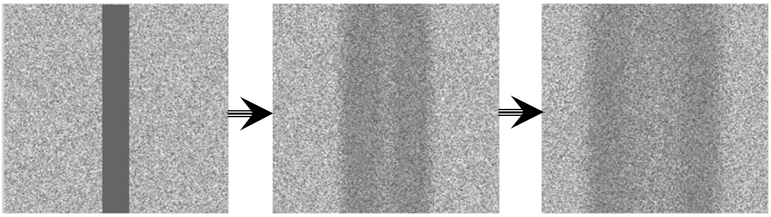


Рис.2. Эволюция клеточного автомата на разных итерациях

Для того чтобы наблюдать волновой процесс в привычном представлении физического явления, глобальные состояния КА в определенные моменты времени усредняются. На рис. 3 показаны профили одиночной КА-волны, полученные осреднением трех глобальных состояний клеточного массива на рис. 2. (Здесь в качестве области осреднения используется столбец клеточного массива.) Из рис. 3 видно, что профиль КА-волны со временем размывается, при этом суммарные масса и импульс всех частиц клеточного массива сохраняются. Такое явление указывает на то, что правила взаимодействия частиц, кроме процесса распространения волны, моделируют диффузионный процесс.

Построение таблицы переходов конечного автомата

Каждой клетке массива поставлен в соответствие конечный автомат: входами автомата являются четыре соседние клетки, выходом – текущее состояние. Новое состояние конечного автомата определяется по функции перехода. Таблица переходов конечного автомата представляет собой матрицу $\boldsymbol{P}$ размером $2^{4+b} \times 2^{4+b}$. Элементом таблицы является вероятность перехода $p_{ij} = p(\boldsymbol{s} \to \boldsymbol{s}')$ клетки из состояния $\boldsymbol{s} = (s_{b+4}, ..., s_4, s_3, s_2, s_1)$ в состояние $\boldsymbol{s}' = (s'_{b+4}, ..., s'_4, s'_3, s'_2, s'_1)$ (i и j десятичное представление двоичных векторов $\boldsymbol{s}$ и $\boldsymbol{s}'$).

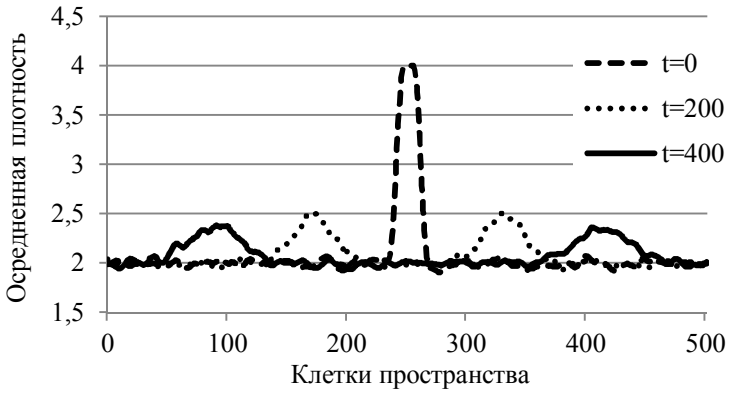


Рис.3. Изменение профиля КА-волны на разных итерациях

Элементы таблицы переходов должны удовлетворять следующим свойствам:

- закону сохранения массы и импульса,
- условию нормализации: $\forall \boldsymbol{s} \sum_{\boldsymbol{s}'} p(\boldsymbol{s} \to \boldsymbol{s}') = 1$ **,**
- детальному балансу: $\forall \boldsymbol{s}, \boldsymbol{s}'\ p(\boldsymbol{s} \to \boldsymbol{s}') = p(\boldsymbol{s}' \to \boldsymbol{s})$,
- полудетальному балансу: $\forall \boldsymbol{s}, \boldsymbol{s}' \sum_{\boldsymbol{s}} p(\boldsymbol{s} \to \boldsymbol{s}') = 1$ **.**

Для моделей с частицами покоя, где правила переходов являются недетерминированными, полудетальный баланс удовлетворяется не всегда. В [4] предложены условия, которые гарантируют существование равновесного состояния. Здесь будем использовать условие обобщенного детального баланса:

$$\forall \boldsymbol{s}, \boldsymbol{s}' \quad r(s)\, p(\boldsymbol{s} \to \boldsymbol{s}') = r(\boldsymbol{s}')\, p(\mathbf{s}' \to \mathbf{s}),$$

$$\forall \boldsymbol{s} \quad r(\boldsymbol{s}) = \prod_{k=1}^{b+4} F_k^{-s_k},$$

где F_k может быть любой положительной ограниченной функцией, которая не меняется после столкновения. Пусть $F_k = e^{-a_k}$, где a_k – произвольные числа, характеризующие движущиеся частицы и частицы покоя, и пусть $a_1 = a_2 = a_3 = a_4 = a$.

Основная идея процедуры формирования таблицы переходов сводится к составлению и решению задачи линейного

программирования. Переменными для задачи являются элементы таблицы переходов, ограничениями – свойства, которым должны удовлетворять элементы таблицы и набор чисел $a_1, a_{2,}, a_3, a_4, a_5, \ ..., a_{4+b}$.

Выбор целевой функции в рамках клеточных автоматов – задача довольно сложная, но будет разумным минимизировать (максимизировать) вероятность клетки остаться в прежнем состоянии после столкновения.

Пример 2. Построение таблицы переходов для HPPrp с двумя частицами покоя (2, 4). Поскольку классы эквивалентности состояний КА не пересекаются, то построение таблицы переходов конечного автомата можно свести к построению таблиц переходов для каждого класса эквивалентности. Сформулируем задачу линейного программирования для состояний из класса (15, 21, 26, 32).

1. $f = p(15 \to 15) + p(21 \to 21) + p(26 \to 26) + p(32 \to 32) \to \min$
2. Набор чисел: $a = 0.25, a_5 = 0.9, a_6 = 0.4.$
3. Нормализация:

$$p(15 \to 15) + p(15 \to 21) + p(15 \to 26) + p(15 \to 32) = 1,$$
$$p(21 \to 15) + p(21 \to 21) + p(21 \to 26) + p(21 \to 32) = 1,$$
$$p(26 \to 15) + p(26 \to 21) + p(26 \to 26) + p(26 \to 32) = 1,$$
$$p(32 \to 15) + p(32 \to 21) + p(32 \to 26) + p(32 \to 32) = 1.$$

4. Обобщенный детальный баланс:

$$p(15 \to 21) - e^{a_5 - 2a} p(21 \to 15) = 0,$$
$$p(15 \to 26) - e^{a_5 - 2a} p(26 \to 15) = 0,$$
$$p(15 \to 32) - e^{a_5 - 4a} p(32 \to 15) = 0,$$
$$p(21 \to 26) - p(26 \to 21) = 0,$$
$$p(21 \to 32) - e^{a_6 - a_5 - 2a} p(32 \to 21) = 0,$$
$$p(26 \to 32) - e^{a_6 - a_5 - 2a} p(32 \to 26) = 0.$$

В результате решения задачи линейного программирования таблица переходов для рассматриваемого класса эквивалентности состояний имеет следующий вид:

Таблица переходов для класса эквивалентности (15, 21, 26, 32)

	15	**21**	**26**	**32**
15	0	0,25	0	0,75
21	0,11	0	0	0,89
26	0	0	0	1
32	0,15	0,4	0,45	0

Заключение

В работе предложена формальная процедура построения правил переходов конечного автомата, реализующего HPPrp клеточного автомата. Процедура сформулирована в терминах задачи линейного программирования. В качестве условия, которое гарантирует существование равновесного состояния, используется условие обобщенного детального баланса. В дальнейшем предполагается установить соответствие между параметрами функции $F_k = e^{-a_k}$ и характеристиками волнового процесса.

Литература

1. *Dieter A.* Wolf-Gladrow. Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models – An Introduction. Springer, 2005. 308 p.

2. *Hardy J., Pomean Y., de Pazzis O.* Time evolution of a two-dimensional model system // Journal of Math. Physics. 1973. Vol.14. P.1746–1759.

3. *Zhang M., Cule D., Shafai L., Bridges G. and Simons N.* Computing Electromagnetic Fields in Inhomogeneous Media Using Lattice Gas Automata // Proceedings of 1998 Symposium on Antenna Technology and Applied Electromagnetics, Aug.14–16, Ottawa, Canada.

4. *Chen H.* H-Theorem and Generalized Semi-Detailed Balance Condition for Lattice Gas Systems // J. of Statistical Physics. 1995. V.81. P. 347–357.