КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ 2015 Т. 7 № 4 С. 1155−1175

Ки&М

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И ОСНОВЫ ИХ РЕАЛИЗАЦИИ

УДК: 519.713

Статистический анализ блочно-поворотного механизма Марголуса в клеточно-автоматной модели диффузии в среде с дискретными особенностями

С. В. Гаврилов, И. В. Матюшкин[a]

Институт проблем проектирования в микроэлектронике РАН,
Россия, 124365, г. Москва, Зеленоград, ул. Советская, д. 3
E-mail: [a] imatyushkin@ippm.ru

Получено 02 сентября 2015 г.,
после доработки 10 ноября 2015 г.

Предложено обобщение блочного клеточного автомата Марголуса на гексагональную сетку. Проведена статистическая обработка результатов вероятностных клеточно-автоматных вычислений для ряда модификаций схемы, решающей тестовую задачу диффузии вещества. Показано, что выбор блоков в виде гексагонов на 25% эффективнее, чем в виде Y-блоков. Показано, что алгоритмы имеют полиномиальную сложность, причем степень полинома для параллельных вычислителей лежит в пределах 0.6÷0.8, а для последовательных — в пределах 1.5÷1.7. Исследовалось влияние внедренных в поле клеточного автомата дефектных ячеек на скорость сходимости.

Ключевые слова: диффузия, метод моделирования, дискретные особенности, блочные клеточные автоматы, окрестность Марголуса, гексагональная сетка

Работа проводилась в рамках Программы фундаментальных научных исследований Президиума РАН, НИР «Исследование перспективных моделей вычислений и реализующих их архитектур высокопроизводительных информационно-вычислительных комплексов нового поколения».

Statistical analysis of Margolus's block-rotating mechanism cellular automation modeling the diffusion in a medium with discrete singularities

S. V. Gavrilov, **I. V. Matyushkin**

Institute for Design Problems in Microelectronics RAS, 3 Sovetskaya st., Moscow, 124365, Russia

Abstract. — The generalization of Margolus's block cellular automaton on a hexagonal grid is formulated. Statistical analysis of the results of probabilistic cellular automation for vast variety of this scheme solving the test task of diffusion is done. It is shown that the choice of the hexagon blocks is 25 % more efficient than Y-blocks. It is shown that the algorithms have polynomial complexity, and the polynom degree lies within 0.6÷0.8 for parallel computer, and in the range 1.5÷1.7 for serial computer. The effects of embedded into automaton's field defective cells on the rate of convergence are studied also.

Keywords: diffusion, method of modeling, discrete singularities, block cellular automata, Margolus neighborhood, hexagonal grid

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2015, vol. 7, no. 6, pp. 1155–1175 (Russian).

© 2015 Сергей Витальевич Гаврилов, Игорь Валерьевич Матюшкин

Введение

Экспансия метаматериалов в области нанотехнологий приводит к необходимости моделировать процессы в средах с локальными неоднородностями или, если эти неоднородности должны считаться малыми по сравнению с характерным размером системы, дискретными особенностями. Решение таких задач классическими численными методами неэффективно, хотя и породило так называемые методы дискретных особенностей [Гахов, 2008] в математической физике. Одним из исторически первых примеров была задача по исследованию дифракции акустических волн в трехмерном пространстве для зондирования неоднородных включений (в частности, рассматривался [Гахов, 2008] случай тонких плоскопараллельных 2D-экранов). Другие практически значимые примеры: атом примеси в канале нанотранзистора, нанокристалл в аморфной матрице диэлектрика, локальное сильное нарушение стехиометрии состава пленки или, если повысить уровень абстракции, дефектный элемент в микросхеме высокой степени интеграции.

С другой стороны, при исследовании возможностей клеточных автоматов (КА) оказалось, что они очень удобны [Toffolli, 1984] для описания диффузии и других процессов переноса и взаимопревращений химических веществ. Так, например, средствами КА исследовалась [Demontis, Pazzona, Suffritti, 2005] диффузия в цеолитах, которые благодаря пористости сейчас рассматриваются как перспективный материал для low-K-диэлектрика в СБИС. Процессы диффузии в пористом материале средствами двух КА на кубической сетке исследовались в [Киреева, 2015]. Систематизация КА-моделей диффузии приведена в [Киреева, 2015]. Меньшая их часть представляет собой модификацию модели Ооно–Кохомото [Oono, Kohomoto, 1985], отражает макроскопический подход к диффузии и рассматривает КА как численный метод уравнения диффузии $\partial c / \partial t = D\Delta c$. Большинство из них основано на том, что модельный коэффициент диффузии является функцией от вероятности применения локального оператора перехода (ЛФП). Таким образом, реализуется статистический подход к диффузии, сформулированный в отношении КА в старой полузабытой статье С. Улама [Ulam, 1952]. В рамках этого подхода развиты блочно-синхронные КА-модели, сущность которых мы будем называть блочно-поворотным механизмом Марголуса (БПМ). Авторы [Малинецкий, Степанцов, 1998] рассматривали КА с БПМ для двух- и трехмерного пространства и аналитически показали, что кривая гладкой функции, аппроксимирующей распределение частиц, с очень хорошей точностью совпадает с аналитическим решением уравнения диффузии. Однако сейчас все большую популярность приобретают треугольные и гексагональные сетки. Поэтому решению актуальных задач моделирования переноса вещества в средах с локальными неоднородностями должно предшествовать исследование эффективности БПМ КА-методов, реализованных на таких сетках.

Цель статьи — обобщить БПМ на непрерывное число состояний ячейки КА и гексагональную сетку, рассмотреть различные способы разбиения поля КА и режимы поворота, статистически проанализировать получающиеся результаты КА-вычислений. Путем сравнения результатов для однородной среды (поля КА) и для среды с локальными неоднородностями мы сделаем ряд выводов в отношении влияния искусственно введенных «дефектов» КА-симулятора на скорость и сходимость вычислительного процесса. Вычисления проводились в оригинальной программе SoftCAM [Матюшкин, Хамухин, 2010].

Блочно-поворотный механизм Марголуса

В 1984 году Норман Морголус [Margolus, 1984] впервые предложил блочный КА с целью достижения обратимости, ввел особую окрестность и рассмотрел модель бильярдного шара Фредкина в качестве связующего звена между классической механикой и вычислениями. Первоначально предназначенный для бильярдных, а значит обратимых, вычислений и вытекавший из более ранних работ [Wolf-Gladrow, 2005; Pomeau, Pazzis, 1973] по моделированию кинематики частиц газа (lattice gas, HPP/FHP-GAS) БПМ был затем перенесен в область диффузионно-

кинетических задач. В отличие от классического КА автомат на разбиении имеет перечисленные ниже особенности [Тоффоли, Марголус, 1991]:

P1. Массив клеток разбит на множество конечных, отдельных однородных частей — блоков.
P2. Задается ЛФП для обновления всего блока. Блоки при этом не перекрываются, и нет обмена информацией между соседними блоками.
P3. Разбиение блоков меняется каждый шаг, чтобы было перекрытие блоков на соседних шагах.

Важно отметить, что по КА-БПМ можно построить эквивалентный ему классический КА путем добавления к состоянию ячейки флага {0,1}. Простейшее разбиение на квадратные блоки размером 2×2 и с правилом для блоков, использующих поочередно четную и нечетную решетку (рис. 1), называется окрестностью Марголуса.

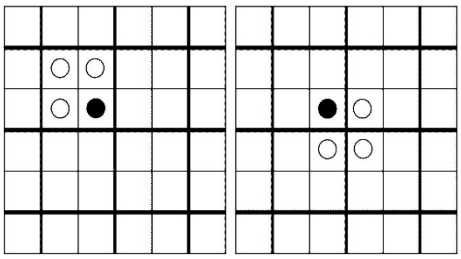


Рис. 1. Блоки 2×2 окрестности Марголуса, показанные четырьмя кружками. На последовательных шагах чередуется четная (жирные линии) и нечетная решетки (тонкие линии)

В стилизованном газе HPP [Pomeau, Pazzis, 1973] частицы имеют массу и кинетическую энергию, которые одинаковы для всех частиц вследствие их идентичности. Клетка может находиться в одном из двух состояний: быть пустой или содержать в себе частицу. Взаимодействие, при котором сохраняется энергия и импульс, возможно только в одном случае: когда две частицы, движущиеся по диагонали в разных направлениях, сталкиваются лоб в лоб и разбегаются в противоположных направлениях по другой диагонали (рис. 2).

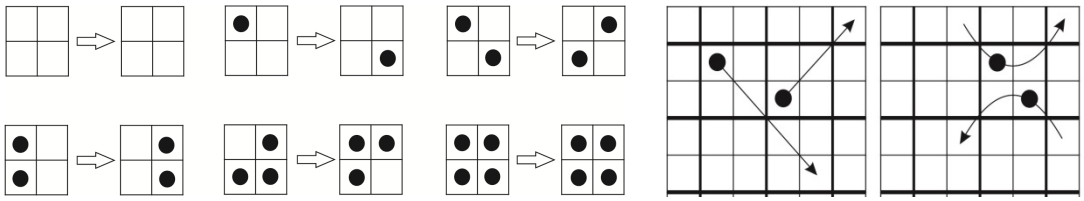


Рис. 2. Правила HPP-GAS: (a) для блока в графическом представлении; (b) равномерное движение изолированной частицы; (c) частицы после лобового столкновения разлетаются вдоль другой диагонали

Несмотря на то что положения частиц ограничены дискретным набором позиций и движение происходит с постоянной скоростью в одном из четырех направлений, макроскопические свойства газа HPP-GAS идентичны свойствам физических газов.

КА с БПМ предполагает, что ЛФП можно выразить вращением блока вокруг его центра. Разумеется, под вращением, которое может быть случайным или фиксированным на ±900 и/или ±1800, понимается циклическое изменение состояний ячеек блока. Таким образом, по сравнению с автоматом на разбиении в КА-БПМ налагается условие.

P4. ЛФП блока выражается его поворотом, т. е. циклическим обменом состояниями между его ячейками.

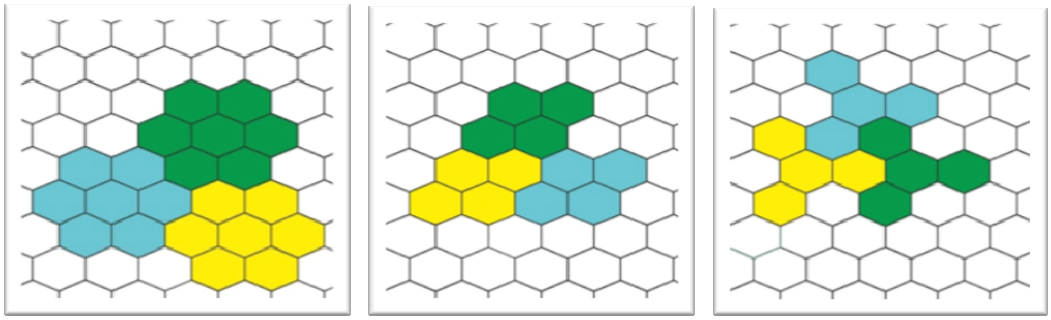
Такого рода задание правил, как легко видеть, гарантирует сохранение вещества и при случайности поворотов применимо для описания диффузии, например диффузии в пористой

среде [Малинецкий, Степанцов, 1998], когда традиционные численные методы испытывают затруднения. Для реализации в КА-БПМ непроницаемых стенок был установлен запрет на повороты соответствующих блоков клеток, т. е. каждой клетке поля КА ставилось в соответствие число 0 (стенок нет) или 1 (стенка есть). Если в блок попадала хотя бы одна клетка со значением 1, то операция поворота блока не производилась. В работе [Medvedev, 2010] рассматривалась многочастичная модель диффузии с окрестностью Марголуса, где состояние ячейки было целым числом. Преимуществом модели являлись малый шум, вызванный дискретизацией концентрации вещества, и возможность использовать различные коэффициенты диффузии. Авторы [Евсеев, Нечаева, 2010] рассматривали композиционный КА (однако без применения БПМ), моделирующий диффузию на триангуляционной сетке, аппроксимирующей криволинейную поверхность.

Часто отождествляют блочные (block) и так называемые разделенные (partitioned/partitioning, КА на разбиении) КА, ссылаясь на эквивалентность отношений «блок–ячейка» и «ячейка–субъячейка». Поэтому заметим, что сделанное нами обобщение отличается от окрестности Q*Bert [Tyler, 2002] разделенного КА, где берется за основу гексагональная сетка (при этом гексагон разделен на три ромба). КА с окрестностью Q*Bert также применяется как для решения уравнения диффузии, так и для решения уравнения Навье–Стокса в гидродинамике.

Обобщенный БПМ

По крайней мере в двумерном случае принципы P1–P4 могут быть обобщены на заданный на гексагональной сетке КА с непрерывными значениями. Преимущество гексагональной сетки в изотропности. На такой сетке выделяются разбиения (замощение плоскости, вообще говоря, может быть сложным: мозаики Пенроуза) по трем типам блока: гексагон, Y-блок, ромб (рис. 3). Причем в последнем случае может быть несколько подтипов и отсутствует центр. В англоязычной литературе для двух последних типов встречается термин trigon. Кроме того, обобщенный БПМ (ОБПМ) предлагает более гибкий информационный обмен соседними блоками, поэтому целесообразно выделять не четный/нечетный глобальные ходы, а несколько условных полуходов (их число может быть больше 2-х и, возможно, связано с общим числом ячеек в блоке), циклически повторяемых в пределах одного глобального хода. ЛФП блока КА с обобщенным БПМ представляется композицией нескольких парных взаимодействий «центр – периферийная ячейка», выполняющихся последовательно в определенном порядке, и поворота блока по значениям ячеек (или по всем компонентам, или лишь по некоторым) на угол из некоторого диапазона (рис. 4).



(a) (b) (c)

Рис. 3. Пример замощения поля КА разными типами блоков: гексагональными, ромбическими, Y (слева направо соответственно)

Поскольку задачи вычислительной практики конечны и предполагают наличие внешних и даже внутренних границ, то необходимо ввести два правила в обобщенный БПМ.

P5. Неполные блоки не изменяют своего состояния.

P6. Для каждой ячейки поля КА в обязательном порядке найдется полуход, в присущем которому замощении (tiling) эта ячейка принадлежит полному блоку.

Рис. 4. Принцип работы ОБПМ-КА на гексагональной сетке с блоками-гексагонами

Также необходимо модифицировать правило P4 с учетом двухтактности ЛФП: парные взаимодействия, которые в случае ромбического разбиения имеют тип «периферия–периферия» вместо «центр–периферия», и поворот.

С целью фиксации БПМ-автомата и условий вычислительного эксперимента сконструируем нотацию и шаблон-структуру.

A. Размер поля $X \times Y$, число ячеек в блоке $m + 1$, число полуходов p, число тактов $\tau + 1$.
B. Координатная сетка, нумерация блоков в виртуальном замощении, нумерация ячеек в блоке
C. Алгоритм/траектория смещения центров блоков, задаваемая векторами смещения (совокупность векторов смещения, по определению, образует шаблон окрестности смещения; окрестность смещения, возможно, совпадает с окрестностью клетки; ее мощность равна числу полуходов).
D. Алгоритм/временная траектория для парных взаимодействий (в случае гексагонов и Y-блоков формируется векторами смещения, ее мощность на единицу меньше числа тактов).
E. Вид поворота (0 — его отсутствие, +1 — против часовой, –1 — по часовой стрелке; если смещение больше, чем на одну клетку, что реже оправдано, то ±2; формулой [+1/–1] будем описывать случайный поворот, т. е. знаком «слэш» разделяем все принимаемые случайной величиной значения).

Такое задание ОБПМ-КА объединяет в себе черты, по терминологии [Demontis et al, 2005], КА-синх- и КА-наив-моделей диффузии, поскольку при синхронизме на уровне блоков реализуется внутриблочный асинхронизм (см. модификацию P4 и формулировку D).

Дадим формальное определение КА с обобщенным БМП, предполагая все блоки однородными. Определение обычного КА, взятое за основу, — это четверка $\langle \mathbb{Z}^d, S, T, F \rangle$, где перечислены соответственно d-мерная целочисленная решетка, множество состояний, шаблон окрестности и ЛФП. С учетом конечности поля и свойств нумерации примем, что идентификатору каждой ячейки на гексагональной решетке каким-либо правилом ставится в соответствие d-мерный целочисленный вектор, а все такие векторы образуют множество имен $Z \subset \mathbb{Z}^d$, составляющее конечную решетку. Вместо шаблона окрестности вводятся шаблон смещения и шаблон блока:

$$T_{sh} \equiv \{h_1, \ldots, h_P\}, \quad T_{bl} \equiv \{b_0, b_1, \ldots, b_m\}.$$

Введем также виртуальное разбиение поля на блоки через множество центров блоков:

$$Z_c \equiv \{\forall z, zz \in Z_c \subset \mathrm{Z} : (z + T_{bl}) \cap (zz + T_{bl}) = \varnothing\}, \quad z + T_{bl} \equiv \{z + b_0, z + b_1, \ldots, z + b_m\}.$$

На базе виртуального разбиения введем дополнительно реальное разбиение k-го полухода:

$$Z_c^k = \left\{ z : \left(\left(z - h_k \right) \in Z_c \right) \wedge \left(\forall e \in \left(z + T_{bl} \right) \quad e \in Z \right) \right\}, \quad k = \overline{1, p}.$$

Как и для обычного автомата, удобно ввести глобальную конфигурацию в момент времени t $Conf_t : Z \to S$. Тогда конфигурация блока будет задаваться как

$$z_{bl} \in Z_c^k, S_{bl} \equiv \left\{ s_0, s_1, \ldots, s_m \right\} = g\left(z_{bl} \right) \in S^{m+1} \quad \forall z \in \left(z_{bl} + T_{bl} \right) Conf_t\left(z \right) \in S_{bl}.$$

Вместо ЛФП ячейки вводится ЛФП блока, где R — оператор поворота, f_k — операторы парных взаимодействий «центр–периферия», $\circ$ — знак композиции:

$$F_{bl}, R, f_k : S^{m+1} \to S^{m+1}, \quad F_{bl}(S_{bl}) = R \circ \left(f_\tau \circ \ldots \circ f_1 \right)\left(S_{bl} \right), S_{bl}^{t+1} = F_{bl}\left(S_{bl}^t \right), \quad k = \overline{1, \tau}.$$

Таким образом, ОБМП-КА формализуется шестеркой $\left\langle Z, S, T_{sh}, T_{bl}, Z_c, F_{bl} \right\rangle$. Заметим, что для более аккуратного определения нужно определить нумерацию внутри блока и лучше использовать кортежи вместо множеств, например $S_{bl} = \left\langle s_0, \ldots \right\rangle, T_{bl} = \left\langle \ldots \right\rangle$.

Описание тестовой задачи и методики анализа

В качестве тестовой задачи рассмотрим растворение вещества в некотором растворителе конечного объема (двумерный вариант), что формализуется примерно так:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_0 \left(\frac{\partial^2 c}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2 c}{\partial^2 y} \right), \quad (x, y) \in W = [0;1]^2, \quad t \in [0;\infty),$$

$$\left(\frac{\partial c}{\partial \mathbf{n}} \right)_{(x,y) \in \partial W} = \mathbf{0}, \quad c\big|_{t=0} = \begin{cases} C, (x, y) \in \left[½ - a; ½ + a \right]^2, \\ 0, \text{ otherwise.} \end{cases}$$

Поле КА, если не оговорено иное, представляет из себя гексагональную сетку размера $V \times V$ ячеек, а константы равны: $V = 50, C = 6, a = 0.1$. Краевые условия взяты 2-го рода (Неймана). Вещество из центрального квадрата 10×10 диффундирует из центра и постепенно заполняет все поле КА (рис. 5) до равномерного заполнения им микрообъемов растворителя, т. е. $c(t = \infty) = \text{const}$. Состояние ячейки программировалось типом double, т. е. было непрерывным $s \in [0; C]$. С целью моделирования дискретных особенностей некоторые ячейки считались дефектами, т. е. наряду с правилом P5 применялось аналогичное правило P7.

P7. Если в пределы блока попала дефектная ячейка, то он считается неполным и не изменяет своего состояния

Пусть выполнены P1–P3, P5–P7. Для решения тестовой задачи нужно специфицировать парное взаимодействие и поэтому необходимо переписать P4 как P8.

P8. ЛФП блока является суперпозицией:

$$S \equiv \text{col}\left(s_0, s_1, \ldots s_m \right), \quad K = \left\{ 1, 2, \ldots, m \right\}, \quad J \equiv \left\langle j_1, \ldots, j_m \right\rangle \doteq \text{perm}\left(1, 2, \ldots, m \right),$$

$$f_k\left(\sigma_0, \sigma_1 \ldots, \sigma_m \right) = \left(\sigma_0 + D\left(\sigma_k - \sigma_0 \right), \ldots, \sigma_{k-1}, \sigma_k - D\left(\sigma_k - \sigma_0 \right), \sigma_{k+1}, \ldots \sigma_m \right),$$

$$S^{t+1} = R \circ \left(f_{j_m} \circ \ldots \circ f_{j_1} \right)\left(S^t \right), k \in K, 0 \le D \le 1.$$

Здесь S — вектор-столбец, perm — оператор сложной перестановки, $\circ$ — знак композиции (первой применяется функция, справа от знака). Далее мы считаем D = 1/3 для определенности

вычислений. Нетрудно видеть, что так введенная ЛФП суть линейная операция над векторами, поскольку каждая из функций композиции сводится к умножению вектора на матрицу. В частности, для функции $f_k, k \in K$, и вращения по часовой стрелке R_-

$$f_k(S) = D_k S,\ D_k \equiv \left\| d_k^{ij} \right\|_{i,j=0,1,\ldots,m},\ d_k^{ij} \doteq \begin{cases} 1-D, (i,j)=(0,0) \vee (k,k), \\ D, (i,j)=(0,k) \vee (k,0), \\ (i=j), \text{otherwise}, \end{cases} \quad R_- \equiv \left\| r_{ij} \right\|,\ r_{ij} \doteq \begin{cases} 1, (i,j)=(0,0) \vee (1,m), \\ 1, (i>1) \wedge (j-i=-1), \\ 0, \text{otherwise}. \end{cases}$$

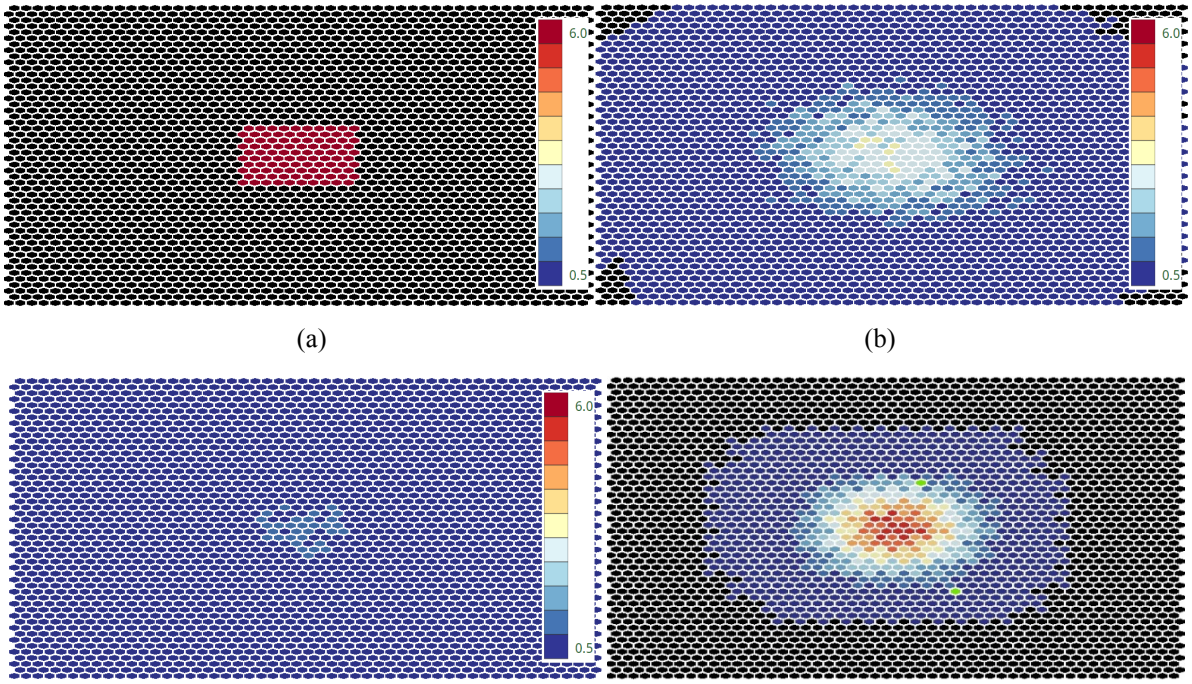


Рис. 5. Глобальная конфигурация КА с ОБПМ на 1 (a), 20 (b) и 120 (c) ходах (сверху вниз) для блоков-гексагонов с поворотом +1/–1; (d) показана типовая ситуация с дефектными ячейками (выделены зеленым цветом)

В отсутствие вращения для Y-блоков при прямом (1–2–3) и обратном (3–2–1) обходе (соответствующие индексы «+» и «–»), т.к. умножение матриц некоммутативно, результаты будут различными:

$$D_+ \equiv \left\| d_+^{ij} \right\| = \begin{pmatrix} (1-D)^3 & D(1-D)^2 & D(1-D) & D \\ D & 1-D & 0 & 0 \\ D(1-D) & D^2 & 1-D & 0 \\ D(1-D)^2 & D^2(1-D) & D^2 & 1-D \end{pmatrix},$$

$$D_- = \left(D_+\right)^T,\ \sum_{i=0}^{m} d_+^{ij} = \sum_{j=0}^{m} d_+^{ij} = 1 - \text{magic square},\ S_{+,-}^{t+1} = \left(f_m \circ f_{m-1} \circ \ldots \circ f_1\right)\left(S^t\right) = D_{+,-} S^t.$$

Последнее равенство можно трактовать как запись разностной схемы, аппроксимирующий оператор диффузии, и тогда нужно связать макроскопический коэффициент D_0 и параметр ЛФП КА D. Интересно, что требование сохранения вещества при диффузии отражается тем, что результирующая матрица ЛФП представляет собой магический квадрат (если не учитывать главные диагонали). Кроме того, равновесное состояние среды для любого D выражается собственным вектором $s_0 = s_k = 1$, отвечающим собственному значению матрицы ЛФП $\lambda_0 = 1$.

Приведем также матрицу ЛФП для блоков-гексагонов при прямом обходе «центр–периферия»:

$$D_+^{hex} = \begin{pmatrix} (1-D)^6 & D(1-D)^5 & D(1-D)^4 & D(1-D)^3 & D(1-D)^2 & D(1-D) & D \\ D & 1-D & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ D(1-D) & D^2 & 1-D & 0 & 0 & 0 & 0 \\ D(1-D)^2 & D^2(1-D) & D^2 & 1-D & 0 & 0 & 0 \\ D(1-D)^3 & D^2(1-D)^2 & D^2(1-D) & D^2 & 1-D & 0 & 0 \\ D(1-D)^4 & D^2(1-D)^3 & D^2(1-D)^2 & D^2(1-D) & D^2 & 1-D & 0 \\ D(1-D)^5 & D^2(1-D)^4 & D^2(1-D)^3 & D^2(1-D)^2 & D^2(1-D) & D^2 & 1-D \end{pmatrix}.$$

Легко получить, что $\det D_+ = \left(1-2D\right)^3$, $\det D_+^{hex} = (1-2D)^6$, и значение D = 1/2 особое как нуль определителя. Кроме того, оно формально совпадает с числом Куранта для явной схемы «крест» решения уравнения диффузии как критерия устойчивости численного метода.

На поле КА случайно равновероятным образом «бросаются» точечные дефекты. Поле КА разделено на три зоны: вещества $0.4V \le (x,y) \le 0.6V$, центральную (кольцо $0.2V \le \frac{x}{y} < 0.4V$, $0.6V < \frac{x}{y} \le 0.8V$) и периферийную (кольцо $0 \le \frac{x}{y} < 0.2V$, $0.8V < \frac{x}{y} \le V$. На попадание дефекта в зону вещества налагаем запрет и предполагаем гипотезу, что центральные дефекты окажут большее влияние на вычислительный процесс, чем периферийные.

Показателем сходимости вычислительного процесса мы взяли «среднеквадратическое отклонение» (СО):

$$CO \doteq \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(s_j - \overline{s})^2}, \quad \overline{s} \doteq \frac{1}{n}\sum_j s_j,$$

где s_j — состояние j-й ячейки, $n \le V^2$ — общее количество бездефектных ячеек поля КА, $\overline{s}$ — среднее арифметическое состояний всех ячеек в данный момент времени. Таким образом, динамика итерационного процесса может быть описана двояко на каждой имплементации:

- кривой $\lg CO = \lg CO\left(N\right)$, где N — номер итерации;
- номером итерации N_ε, при которой впервые достигается $CO < \varepsilon, 0.1 \le \varepsilon \le 10^{-5}$.

Поскольку диффузия есть стохастический процесс, а к ОБПМ-КА естественно применить метод Монте-Карло, то статистические испытания характеризуются математическим ожиданием, дисперсией, медианой, коэффициентами асимметрии и эксцесса и т. д. Для каждого шаблона-структуры, если не оговорено иное, по умолчанию мы будем проводить I = 300 имплементаций, которые и формируют выборку, и на их основе апостериори будем рассчитывать:

- среднее $\overline{N_\varepsilon} \doteq \frac{1}{I}\sum_{i=1}^{I} N_\varepsilon^{(i)}$;
- отклонение (абсолютное и относительное); относительная погрешность δ считалась по следующей формуле: $\delta = \frac{1}{\overline{N_\varepsilon}}\sqrt{\frac{1}{I}\sum_i\left(N_\varepsilon^{(i)} - \overline{N_\varepsilon}\right)^2}$, абсолютная — $\delta \cdot \overline{N_\varepsilon}$ (правильнее было бы использовать смещенную дисперсию и делить не на I, а на $I-1$);
- гистограмму $h_\Delta\left(N_\varepsilon\right)$, т.к. она дает хорошее визуальное представление по агрегированной динамике (Δ — шаг накопления по абсциссе N_ε).

Результаты моделирования: Y-блоки

Разбиение гексагональной сетки через Y-блоки близко по смыслу к обычной треугольной сетке. Будем именовать шаблон-структуру вычислительного эксперимента как EY, а ее поля — как EY.*, где * — номер поля. Введем понятие виртуального замощения, при котором центр каждого блока получает номер ноль, а сам блок как бы закрепляется над разбитой на гексагоны плоскостью (при этом нумерация периферийных ячеек фиксирована, рис 6.). Тогда, чтобы задать алгоритм смещения блока в EY.C, можно, например, записать 1–3–5, т. е. на 1-м полуходе центр блока совпадает с 1, на 2-м полуходе — с 3 и т. д.; иначе говоря, на каждом полуходе центры всех блоков, а значит и все ячейки блоков, испытывают параллельный сдвиг на вектор смещения относительно виртуального замощения. Шаблон смещения определяется шестью возможными направлениями (рис. 11), а не тремя. Смещение также может быть и нулевым.

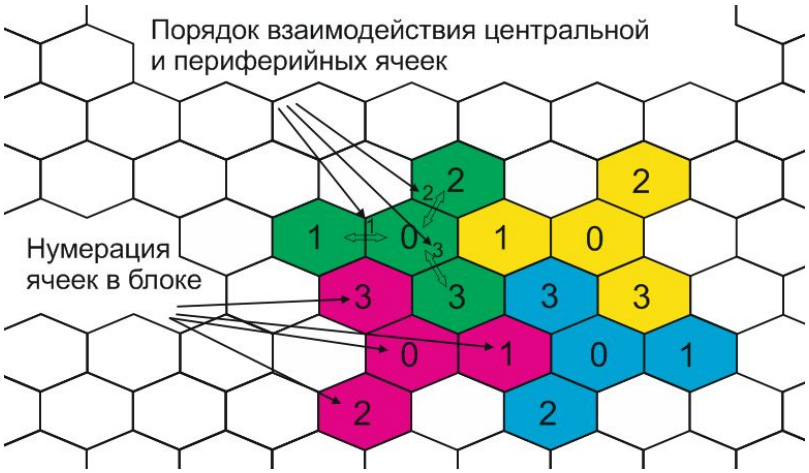


Рис. 6. Графическое представление EY.B. Глобальная сетка (x, y) отвечает движению слева направо (по x) и снизу вверх (по y). Y-блоки направлены противоположно (сравни с рис. 3*c*, где дан другой вариант замощения, где для любого блока вектор «0–1» одинаков). Показана реализация взаимодействий «центр-периферия» по часовой стрелке, т. е. вначале 0–1, затем 0–2 и 0–3, и таким образом можно записывать EY.D = 1–2–3 в уже локальных координатах блока

Шаблон окрестности ячейки КА совпадает с шаблоном блока и входит в данном случае в шаблон смещения блока. В общем случае они совпадать не обязаны. Всего на поле 50×50 номинально размещаются 625 Y-блоков, а реально — 588 полных и 74 (75) неполных блоков. Обратим внимание на выполнение P6; если оно не выполняется, то остаются неизмененные ячейки, что влечет за собой формальное отсутствие сходимости КА после $\varepsilon < \varepsilon_1 \simeq \frac{aC}{V^2}$. Не все схемы смещения блоков являются в этом смысле правильными, что зависит иногда от размера поля V. Так, например, естественная схема EY.C = 1–3–5 (а также смежные, вида 0–1/3/5) для поля 50×50 неправильна, но становится правильной для поля 57×57, а схема EY.C = 0–(1/3/6) неправильная для большинства полей, но работает на поле 51×51. Или, схема 0-(2/4/6) является правильной, а схема (2/4/6) — неправильной. Полные схемы вида (1/2/3/4/5/6) или 0–1–2–3–4–5–6, очевидно, всегда правильны.

Более подробно рассмотрим эксперимент EY1. Его шаблон-структура: EY1.A=50×50,4,2,4; EY1.B = рис. 6, EY1.C = 0–(2/4/6); EY1.D = 1–2–3; EY1.E = 0. Иначе говоря, на поле 50×50 реализуются Y-блоки, 4 такта (3 такта «центр-периферия» и затем номинальный поворот), два полухода, причем на первом замощение совпадает с виртуальным, а на втором либо не смещено, либо смещено равновероятно в одном из направлений (1/2/3 при внутренней нумерации блоков, стоящих в нечетных строках, или 2/4/6 шаблона смещения, рис. 11). Нумерация ячеек внутри блока происходит из крайней левой или крайней правой ячейки с привязкой на номер полухода. В итоге создается регулярное поле с ориентацией блоков, чередующейся построчно (строка

по часовой стрелке, строка — против). Порядок обхода ячеек блока при парных переходах по часовой стрелке, т. е. по возрастанию номера. Поворот блока отсутствует.

Остальные эксперименты отличаются от EY1 значениями полей. Их результаты суммированы в таблице 1.

Таблица 1. Сводка результатов вычислительных экспериментов EY1-EY16

Формула эксперимента	Среднее числа полуходов $\overline{N_\varepsilon}$, $\varepsilon = 10^{-4}$, и длительности одной имплементации, мс	Отклонения, абс. и отн. для числа полуходов и длительности одной имплементации	Качественные описания для гистограмм полуходов и длительности одной имплементации (даны через знак «;»)
EY1: .A = 50×50,4,2,4; .C = 0–(2/4/6); .D = 1–2–3 .E = 0	4796.01 9427.29 мс	2.36 %, ±113 7.26 %, ±684 мс	Узкая симметричная гауссиана с небольшими случайными всплесками; распределение Пуассона с небольшим локальным максимумом в правой части
EY2: [EY1] .E = +1	4284.63 8990.43 мс	0.56 %, ±24 12.71 %, ±1142 мс	Очень узкое распределение между гауссовым и равномерным; тоже распределение Пуассона
EY3: [EY1] .E = –1	1323.40 2747.25 мс	17.25 %, ±228 18.61 %, ±511 мс	Распределение с двумя максимумами: узким левым и широким, расположенным правее; сильно асимметричная гауссиана с узким левым плечом, схожее с распределением Пуассона с локальным максимумом справа
EY4: [EY1] .E = +1/–1	1890.59 3918.41 мс	10.15 %, ±192 14.28 %, ±559 мс	Асимметричная гауссиана с коротким левым и широким правым плечами; асимметричная гауссиана с коротким левым и широким правым плечами
EY5: [EY1] .D = perm; .E = 0	3519.68 6975.29 мс	13.50 %,± 475 15.69 %,± 1094 мс	То же, но скорее напоминает распределение Пуассона
EY6: [EY1] .D = perm; .E = +1/–1*	1773.10 6125.01 мс	18.63 %,±330 21.35 %, ±1308 мс	Узкий левый край отвечает Пуассону, а широкий правый низкий отвечает равномерному распределению; в целом линейно убывающая функция
EY7: [EY1] .C = 0–1–2–3–4–5–6; .D = 1–2–3; .E = 0*	4361 13718 мс	–	Детерминированный
EY8: [EY7] .C = 0–6–5–4–3–2–1*	4192 13270 мс	–	Детерминированный
EY8: [EY7] .D = 3–2–1*	4403 13980 мс	–	Детерминированный
EY10: [EY7] .C = 1–2–3–4–5–6*	4473 14258 мс	–	Детерминированный
EY11: [EY5] .C = 0–(1/2/3/4/5/6)*	3556.27 10470 мс	14.34 %, ±510 14.47 %, ±1515	Узкий левый край отвечает Пуассону, далее плато и затем справа хвост; узкий левый край отвечает Пуассону, далее плато и затем справа хвост
EY12: [EY11] .E = +1/–1*	1760.25 5144.74 мс	19.22 %, ±338 19.62 %, ±1009	То же; то же
EY13: [EY5] .C = (1/3/5)–(2/4/6)*	3034.95 8553.27 мс	12.45 %, ±378 13.93 %, ±1191	Сильно асимметричная гауссиана с узким левым плечом и почти линейным правым хвостом; распределение Пуассона

Формула эксперимента	Среднее числа полуходов $\overline{N_\varepsilon}$, $\varepsilon = 10^{-4}$, и длительности одной имплементации, мс	Отклонения, абс. и отн. для числа полуходов и длительности одной имплементации	Качественные описания для гистограмм полуходов и длительности одной имплементации (даны через знак «;»)
EY14: [EY13] .E = +1/–1*	1850.77 5530.2 мс	15.18 %, ±281 15.47 %, ±855	Вполне симметричная широкая гауссиана с впадиной на левом плече; в правой части — равномерное распределение, а в левой — распределение Пуассона
EY15: [EY5] .C = 0–(1/2/5)*	4687.05 13034 мс	3.13 %, ±147 3.28 %, ±428	Ярко выраженная симметричная гауссиана с длинным хвостом справа; ярко выражен пик симметричной гауссианы и длинный хвост справа
EY16: [EY15] .E = +1/–1*	2347.8 9610.39 мс	7.71 %, ±180 29.82 %, ±2866	Сильно асимметричная гауссиана с широким правым хвостом и резким узким левым плечом; распределение Пуассона с четко выраженным дополнительным пиком в середине

Примечание. В каждом эксперименте делалось примерно 300 запусков (имплементаций). Значения полей по умолчанию соотносятся с шаблоном эксперимента, указанного в квадратных скобках. Значение perm соответствует случайной перестановке вектора (1, 2, 3). Знаком «*» отмечены расчеты, произведенные на другом компьютере. Термины «гауссиана», «распределение Пуассона» понимаются нами в нестрогом смысле для передачи общей формы гистограммы.

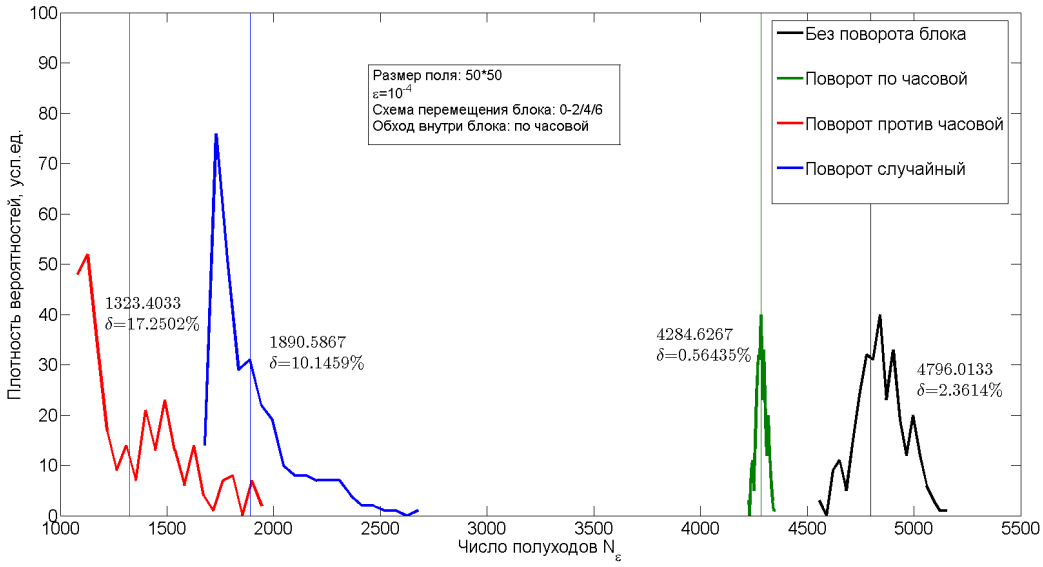


Рис. 7. Влияние поворота на скорость сходимости, измеряемую числом полуходов, и ее гистограмму (шаг Δ = 1/20, т. е. 20 отрезков на весь интервал изменения координаты). Вычислительный эксперимент — по шаблонам EY1–EY4 (I = 300). Вертикальными линиями показаны положения средних, также подписаны относительные отклонения

Наличие поворота ускоряет вычисления, но по-разному: так, если направление поворота совпадает с направлением обхода, то изменение всего ≤10 % и дисперсия даже снижается, а если направления поворота и обхода различны, то выигрыш — более чем в 3 раза (рис. 10), хотя одновременно и дисперсия возрастает в 5–8 раз. Типичная форма распределения — асимметричная гауссиана с более резким левым плечом и достаточно плавно спадающим правым плечом, переходящим в довольно длинный хвост (синяя кривая на рис. 7). Так, при номиналь-

ном отклонении в 5 % оно может уходить на 50 % от области пика. Иногда на правом хвосте появляется дополнительный максимум, а иногда хвост вырождается в почти линейную зависимость. Возможны и другие экзотические варианты (рис. 8), причем увеличение числа испытаний (рис. 13) не приводит к приближению к классическим формам (распределение Гаусса и Пуассона), а вариация порога СО с 10^{-4} до 10^{-5} не приводит к наследованию формы (рис. 9).

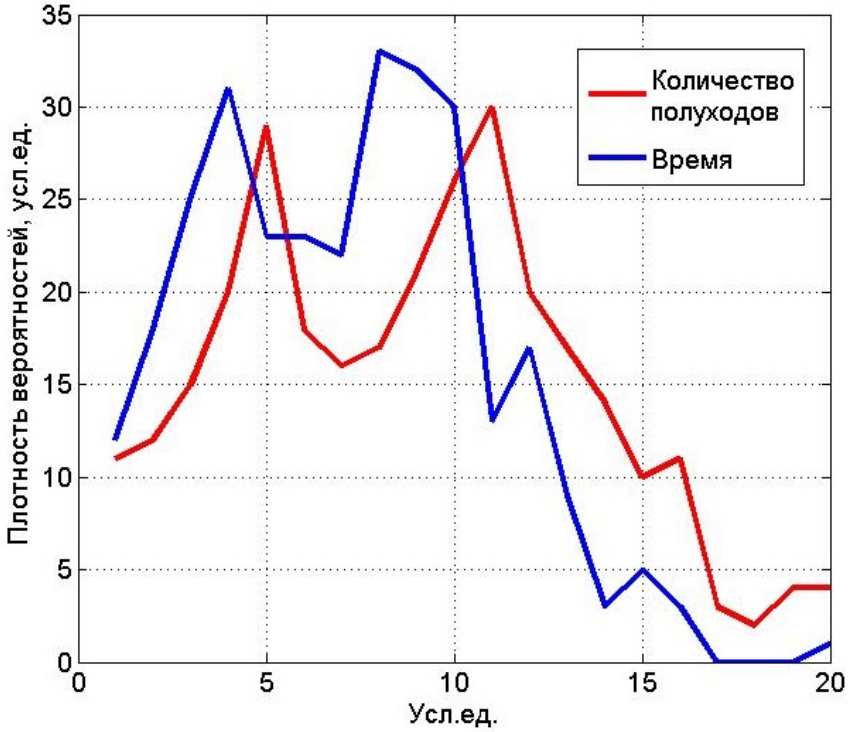


Рис. 8. Атипичная форма распределения вероятностей в эксперименте EY14. Расположение экстремумов двух кривых не совпадает из-за различных диапазонов изменения времени (синяя кривая) и полуходов (красная)

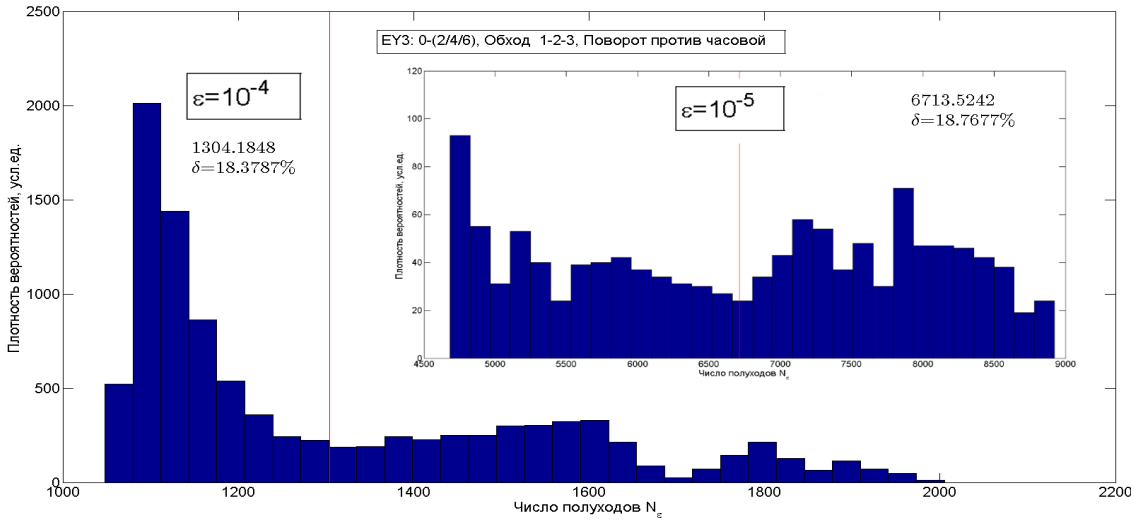


Рис. 9. Отсутствие наследования формы кривой распределения на примере EY3. Первая гистограмма относится к $V = 50$, $I = 10000$, $\varepsilon = 10^{-4}$, а вложенная — к $V = 100$, $I = 1238$, $\varepsilon = 10^{-5}$. Однако общие черты можно заметить: первый пик и далее три пика меньшей высоты

Таблица 2.Оценка порядка полиномиальной ($\sim N^b$) сложности алгоритма EY7

Размер поля	$\varepsilon = 10^{-4}$			$\varepsilon = 10^{-5}$			$\varepsilon = 10^{-6}$		
	без поворота	поворот по час.	против час.	без поворота	поворот по час.	против час.	без поворота	поворот по час.	против час.
50×50	4361/ 10079	4067/ 9770	2490/ 5014	6607/ 12929	6666/ 13016	4271/ 9093	10443/ 19757	9557/ 19280	6052/ 12512
80×80	9503/ 39421	8629/ 38891	4023/ 18445	13612/ 58234	11747/ 63649	5340/ 25245	19726/ 81931	17067/ 88855	7158/ 33589
100×100	13679/ 94815	12560/ 90163	5916/ 41108	20076/ 139823	17348/ 124601	9218/ 64007	29155/ 197178	25130/ 181712	16141/ 120217
150×150	26032/ 374908	24481/ 414952	11642/ 184740	39995/ 596200	35061/ 538017	17476/ 283814	56178/ 797803	51455/ 816624	32171/ 623802
180×180	34513/ 769003	32953/ 778548	15621/ 385401	54277/ 1197923	47686/ 1139654	22339/ 535389	75154/- 2487228*	63289/ 2424902*	34612/ 819331*
200×200	40546/ 1100629	38997/ 1129455	18523/ 543096	64698/ 1738227	57125/ 1596345	26600/ 770752	89796/ 3915351*	75618/ 3490105*	34654/ 1751984*
Доверительный интервал по *b* по количеству полушагов	0.8011–0.8325	0.8146–0.8172	0.6948–0.7372	0.8173–0.8262	0.7514–0.7851	0.615–0.6822	0.7342–0.7883	0.7632–0.7808	0.7299–0.7601
Лучшее *b*	0.8086	0.8159	0.716	0.8217	0.7682	0.6486	0.7613	0.772	0.745
Доверительный интервал по *b* по времени запуска	1.677–1.703	1.706–1.717	1.760–1.773	1.729–1.756	1.722–1.749	1.581–1.611	1.666–1.698*	1.848–1.939*	1.833–1.909*
Лучшее *b*	1.69	1.711	1.766	1.743	1.735	1.596	1.682*	1.893*	1.871*

Примечание. Числа левее знака дроби — число полуходов до останова N_ε, а правее — суммарное время выполнения одной имплементации (запуска) в миллисекундах. Знаком «*» отмечены результаты расчетов, полученных на другом компьютере. Использовалась утилита MATLAB Curve Fitting Toolbox, рассчитывающая доверительный интервал из порога 95 %.

Мы исследовали влияние на скорость сходимости размера поля и порога СО в предположении полиномиальной сложности алгоритма EY7 — $N_\varepsilon = N_0\left(V^2\right)^{b(\varepsilon)}$. Если сходимость измерять в полуходах, то это соответствует исполнению алгоритма на параллельном вычислителе. Если сходимость измерять в миллисекундах процессорного времени, затраченного на исполнение алгоритма, то эта оценка дается для классического последовательного вычислителя и более уязвима при измерении, поскольку во время исполнения программы на обычном компьютере случайные процессы, например автосохранение, могут тормозить КА-расчет. Параметры $\left\langle V^2, \varepsilon \right\rangle$ оба отвечают за размер условных начальных данных, хотя второй и более опосредованно. Приведенные в таблице 2 значения показателя полинома *b* показывают, что с ростом точности вычислений имеется тенденция к небольшому, в пределах 0.05, снижению *b*. Сама величина *b* во всех экспериментах лежала в диапазоне 0.82÷0.65 (по полуходам), а за ее среднее удобно принять $b \simeq \log_4 3 \approx 0.7925$. Для миллисекунд значение *b* около 1.7, т. е. алгоритм эффективнее квадратичного. Если сравнить вариации EY7 для разных поворотов, то чем быстрее алгоритм сходится, тем ниже в целом значение *b*. Зави-

симость от ε представляется логарифмической, хотя в нашем распоряжении немного точек — $N_\varepsilon\big|_{V=\text{const}} \simeq \mathrm{a}_1 \lg \varepsilon + a_2, a_1 \simeq 0.5 \div 0.7$. В этой связи см. далее рис. 10 для гексагональных блоков, где в подобной ситуации коэффициент a_1 претерпевает скачок.

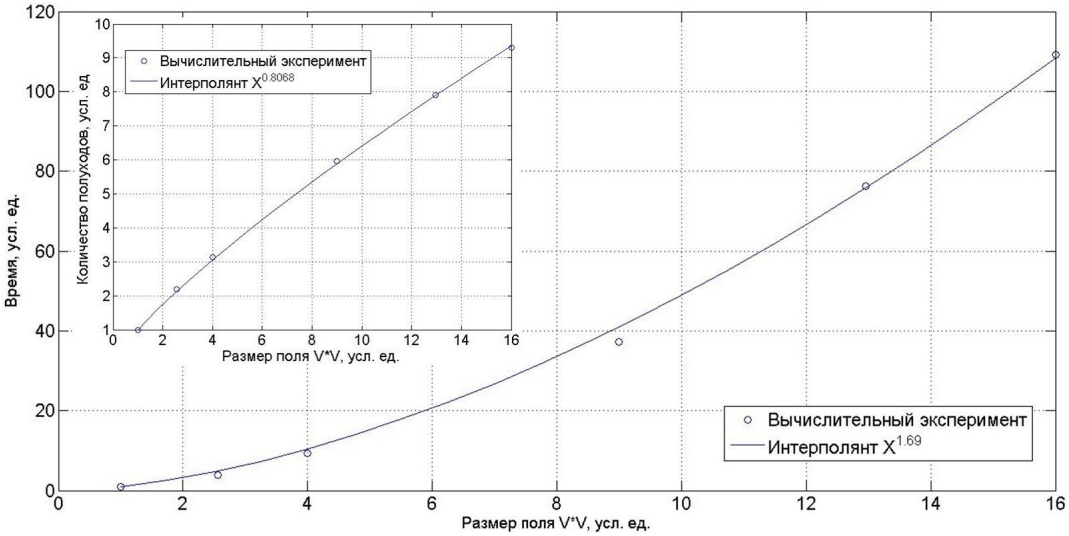


Рис. 10. Оценка порядка сходимости алгоритма EY7 (схема детерминированная, $\varepsilon = 10^{-4}$) по общему времени имплементации и по числу полуходов (врезка) при изменении размера поля. Координаты всех точек нормированы на координаты первой точки (см. также таблице 2)

Результаты моделирования: блоки-гексагоны

Будем именовать шаблон-структуру вычислительного эксперимента как EH, а ее поля — как EH.*, где * — номер поля. Все три шаблона (окрестности, блока и смещения) совпадают (рис. 11).

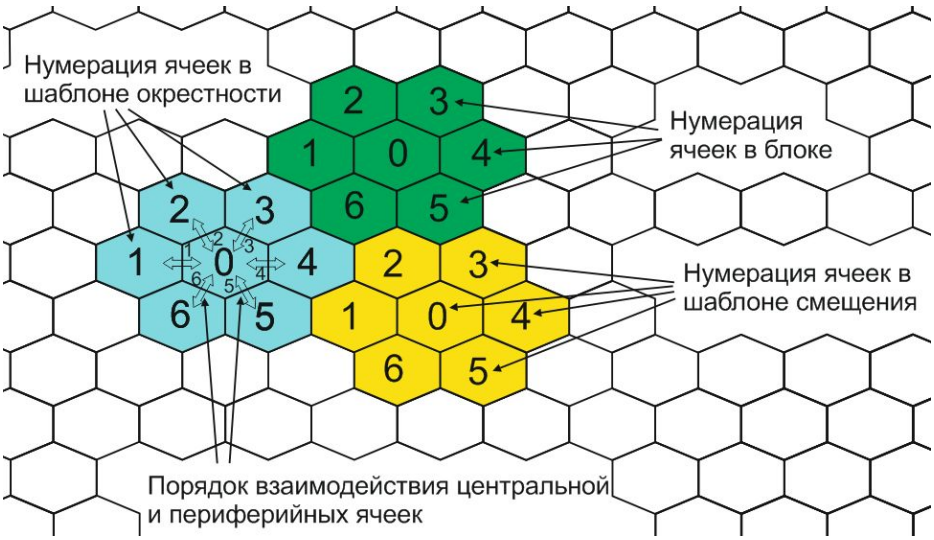


Рис. 11. Графическое представление EH.B и соотношения трех шаблонов. Показан правильный, без нарушений, порядок в EH.D = 1–2–3–4–5–6. Шаблон окрестности имеет только номинальное значение, подчеркивая происхождение ОБПМ-КА из обычного КА

Опишем формулу эксперимента EH2: .A=50×50,7,6,7; .B = рис. 11; .C = 1–2–3–4–5–6; .D = perm(1,2,…,6); .E = +1. Глобальный ход состоит из 6 полуходов, смещение блока проходит

по возрастанию номеров по часовой стрелке (рис. 11). ЛФП перехода содержит 7 тактов (6 последовательных и один поворот), при этом для парных взаимодействий обход случаен и поворот — по часовой стрелке. Рассматривались модификации EH2, отличающиеся полем .E (EH1.E = 0, EH2.E = +1, EH3.E = –1, EH4.E = +1/–1, EH5.E = +2). На рис. 12 показана динамика каждого эксперимента $\lg CO = \lg CO(N)$, выполнено по две имплементации. В отсутствие поворота визуально наблюдается экспоненциальное снижение CO, причем наблюдается смена показателя экспоненты, что мы связываем с достижением концентрационной волной пределов поля КА. Введение поворота приводит к повышению скорости расчета в 1.5–2 раза для всех вариаций поворота, что отличает от случая Y-блоков (EY1–EY4), где направление поворота имело существенное значение (хотя в EH1–EH4 принят случайный обход ячеек внутри блока). Поворот на 1200 вместо 600 может немного улучшить или ухудшить сходимость, примерно на 15 %. При этом кривые по-прежнему имеют вид «клюшки».

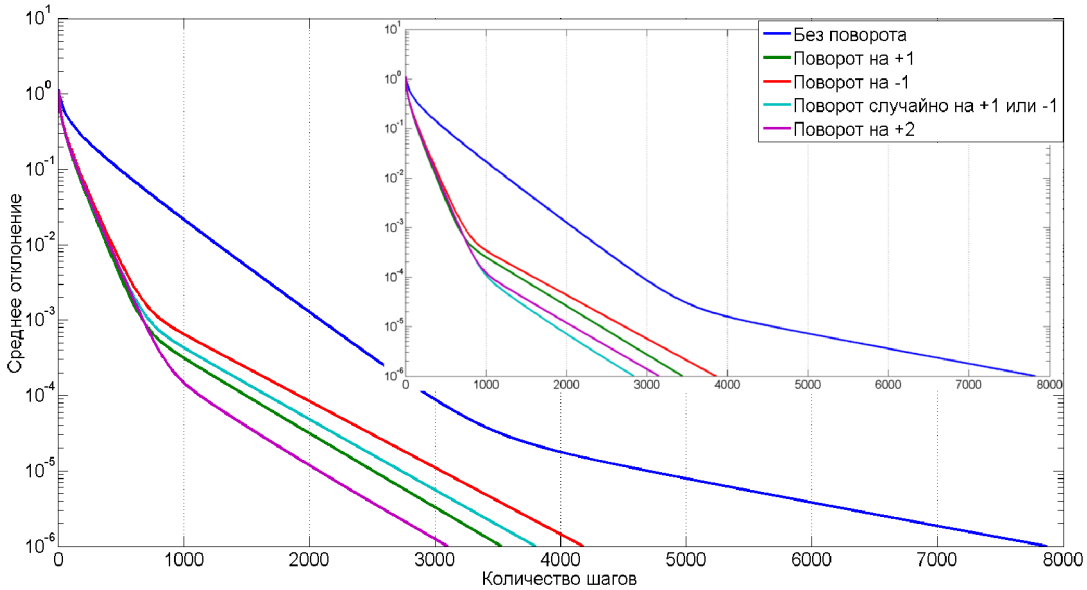


Рис. 12. Динамика вычислительного процесса в экспериментах EH1–EH4. Ось ординат представлена в логарифмической шкале. В верхнем углу показана еще одна имплементация

Для статистической оценки введения поворота сделаем несколько имплементаций экспериментов EH1–EH4 (таблица 3). Для наглядности мы оставили данные по 10 имплементациям по каждой формуле.

Случайный поворот в несколько раз, как видно из таблица 4, повышает значение дисперсии, что объясняется общим размытием распределения при повышении числа случайных величин, влияние которых суммируется. Направление поворота не влияет существенно на среднее по числу ходов (рис. 12), но само его наличие резко повышает скорость сходимости, в пределах 2÷3 раз. С другой стороны, для детерминированных шаблонов фактор направления может быть значимым, см. EH14 и EH15 (здесь даже по времени имплементации разница в 2 раза). Вообще говоря, у нас может быть три «поворота»: по смещению, по обходу «центр–периферия», внутри блока; игра их направлений определяет динамику КА. Наличие случайности в обходе блока также ускоряет вычисления: например, EH6 и EH1 отличаются примерно на 50 %. Однако ценой ускорения (максимально в 3.5 раза) является существенное размытие распределения. По совокупности факторов наилучшей схемой можно считать EH9, где смещение блока происходит попеременно по окрестности смещения из центральной ячейки (с заходом в нее), обход блока случаен, поворот случаен на ±1 ячейку, а распределение вероятностей равномерное. Итак, в целом за счет изменения шаблон-структуры можно добиться улучшения сходимости примерно в 5 раз, с 4600 до 900 полуходов (по отсечке 10^{-4}).

Таблица 3. Влияние поворота на среднее и дисперсию в экспериментах EH1–EH4

Поворот на +1 (EH2)			Поворот на –1 (EH3)		
СО через 1000 ходов	СО через 2000 ходов	Количество ходов N_ε до СО < $\varepsilon = 10^{-5}$	СО через 1000 ходов	СО через 2000 ходов	Количество ходов N_ε до СО < $\varepsilon = 10^{-5}$
0.000201465	0.000020666	2322	0.000338451	0.000038574	2653
0.000055832	0.000003347	1549	0.000121701	0.000005298	1765
0.000159941	0.000012307	2085	0.000545391	0.000069556	2952
0.000168442	0.000008078	1929	0.000138864	0.000011866	2082
0.000280495	0.000027495	2444	0.000235458	0.000021755	2359
0.000239119	0.000019946	2292	0.000321406	0.000040059	2682
0.000064024	0.000004562	1656	0.000552284	0.000071273	2963
0.000130486	0.000009352	1974	0.000232556	0.000027165	2489
0.000038644	0.000000512	1168	0.000373835	0.000044031	2720
0.000053115	0.000003441	1541	0.000443781	0.000056474	2850
0.000200	0.000018	2149	0.000260	0.000027	2354
$\delta = 52.34$ %	$\delta = 65.90$ %	$\delta = 14.90$ %	$\delta = 46.27$ %	$\delta = 65.04$ %	$\delta = 15.47$ %
Поворот случайно на +1/–1 (EH4)			Без поворота (EH1)		
СО через 1000 ходов	СО через 2000 ходов	Количество ходов N_ε до СО < $\varepsilon = 10^{-5}$	СО через 1000 ходов	СО через 2000 ходов	Количество ходов N_ε до СО < $\varepsilon = 10^{-5}$
0.000450141	0.000051666	2763	0.02149266	0.001272349	4417
0.000183936	0.000013823	2137	0.0214821	0.001271444	4505
0.000160056	0.000017213	2253	0.02150513	0.001270361	4413
0.000089586	0.000006958	1836	0.02149778	0.001275341	5325
0.000273368	0.000017602	2218	0.02148882	0.001271594	4698
0.000414121	0.000046909	2720	0.02149888	0.001273323	5093
0.000256480	0.000020156	2298	0.02148802	0.001270545	4714
0.000175136	0.000017185	2246	0.02148118	0.001268419	4352
0.000117896	0.000009849	1994	0.02150079	0.001275562	5295
0.000391202	0.000041526	2656	0.02148377	0.001270177	4049
0.000220	0.000021	2232	0.021493	0.001271	4449
$\delta = 53.25$ %	$\delta = 69.33$ %	$\delta = 15.20$ %	$\delta = 0.09$ %	$\delta = 0.22$ %	$\delta = 12.61$ %
Поворот случайно на +2			Поворот случайно на -2		
СО через 1000 ходов	СО через 2000 ходов	Количество ходов N_ε до СО < $\varepsilon = 10^{-5}$	СО через 1000 ходов	СО через 2000 ходов	Количество ходов N_ε до СО < $\varepsilon = 10^{-5}$
0.000245364	0.000023406	2385	0.000261693	0.000026421	2433
0.000138395	0.000012655	2107	0.000176360	0.000015201	2180
0.000066995	0.000003323	1503	0.000270419	0.000026972	2441
0.000185221	0.000018917	2293	0.000271598	0.000028512	2468
0.000084070	0.000005267	1722	0.000190779	0.000019295	2292
0.000180588	0.000019454	2310	0.000158996	0.000016260	2217
0.000178385	0.000013205	2116	0.000272025	0.000026433	2428
0.000141915	0.000007652	1905	0.000164516	0.000016390	2219
0.000259959	0.000026864	2455	0.000302900	0.000025111	2395
0.000211073	0.000023567	2400	0.000127534	0.000006100	1835
0.000207	0.000019	2179	0.000219	0.000021	2237
$\delta = 51.55$ %	$\delta = 64.80$ %	$\delta = 14.60$ %	$\delta = 55.13$ %	$\delta = 70.81$ %	$\delta = 14.58$ %

Примечание. Жирным шрифтом показаны средние значения после 300 имплементаций. СО показано с точностью до шести знаков.

Таблица 4. Сводка результатов вычислительных экспериментов EH1, EH5-EH10 ($\varepsilon = 10^{-4}$)

Формула эксперимента	Средние числа полуходов $\overline{N_\varepsilon}$, $\varepsilon = 10^{-4}$ и длительности одного запуска, мс	Отклонения, абс. и отн. для числа полуходов и длительности одной имплементации	Качественное описание гистограммы для полуходов и длительности одной имплементации
EH1:.A=50×50,7,6,7; .B=рис.12; .C = 1–2–3–4–5–6; .D = perm; .E = 0.	2942.03 4892 мс	0.87 %, ±25 3.39 %, ±166мс	Распределение Пуассона весьма узкое
EH5:[EH1] .E=+2	1293.52 2567 мс	16.82 %, ± 217 19.57 %, ± 502 мс	Очень широкое распределение с двумя слабовыраженными пиками слева и в центре
EH6: [EH1] .D = 1–2–3–4–5–6;.E = 0	4666 7853 мс		Детерминировано
EH7: [EH1] .D = 1–2–3–4–5–6; .E = +1	1740 2891 мс		Детерминировано
EH8: [EH1] .C = 6–5–4–3–2–1; .D = perm; .E = +1/–1	1312,75 2224мс	17.52%, ±230 18.02%, ±400	Почти равномерное распределение с плавно убывающим правым краем и «зазубринами»
EH9: [EH8] .C = 0–1–0–2–0–3–0–4–0–5–0–6	1236,44 2110мс	17.70%, ±219 18.93%, ±399	Почти равномерное распределение с затухающими осцилляциями на правом крае
EH10: [EH8] .C = 1/3/5–2/4/6	1271.56 2227 мс	16.97%, ±215 19.37%, ±431	Широкое, почти равномерное распределение с более крутым левым краем и менее крутым правым
EH11: [EH8] .C = 0–(1/2/3/4/5/6)	1335.32 2409 мс	10.80%, ±144 17.66%, ±425	Асимметричная гауссиана с типично удлиненным правым хвостом
EH12: [EH6] .E = +1/–1	2355.44 3859 мс	13.02%, ±306 13.93%, ±538	Линейно убывающая кривая
EH13: [EH6] .D = 6–5–4–3–2–1	4542 7076 мс		Детерминировано
EH14: [EH13] .E = +1	2440 5032 мс		Детерминировано
EH15: [EH13] .E = –1	1437 2366 мс		Детерминировано
EH16: .A = 50×50, 7, 6, 4; .B = рис. 12; .C = 1–3–5–2–4–6; .D = 6–5–4–3–2–1; .E = +2	1884 3427 мс		Детерминировано

Примечание: наклонная черта в формуле означает «или», разделяя вероятностные события.

На рис. 13 представлена гистограмма для EH9, снимались значения количества ходов до CO < 10^{-5} для 10000 запусков. В этих условиях $\overline{N_\varepsilon} \approx 3000$ (по числу полуходов). Вид гистограммы отражает гауссово распределение с удлиненным левым хвостом, хотя и присутствуют локальные возмущения, связанные, по-видимому, с чрезмерной детализацией по оси абсцисс. По сравнению с экспериментами с Y-блоками нет резко выраженного левого максимума (рис. 7, синяя кривая) и аллюзий с распределением Пуассона и, напротив, правое плечо обладает большей крутизной, чем левое. С другой стороны, устойчивое наличие двух узких максимумов (рис. 13) вряд ли стоит объяснять малым объемом выборки; по-видимому, вмешиваются факторы достижения концентрационной волной вертикальной и горизонтальной границ поля, а также возможной асимметрией динамики, присущей самой схеме.

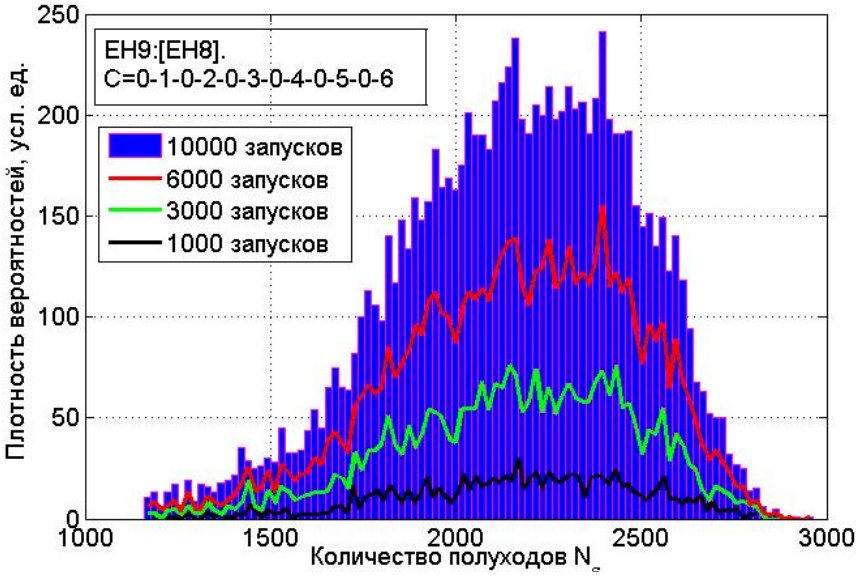


Рис. 13. Гистограмма числа полуходов до СО < 10^{-5} для 10000 запусков EH9. Для оценки сходимости также показаны в относительном по вертикальной оси масштабе контуры гистограмм для 1000, 3000, 6000 запусков

Нами оценивался порядок сложности алгоритма для блоков-гексагонов. Процедура и результаты (таблица 5) аналогичны использованным для тригонов, хотя отметим чуть меньшие значения по параметру b в сравнении с тригонами.

Таблица 5. Оценка порядка полиномиальной ($\sim N^b$) сложности алгоритма EH6

Размер поля	$\varepsilon = 10^{-4}$			$\varepsilon = 10^{-5}$			$\varepsilon = 10^{-6}$		
	+2	+1	–1	+2	+1	–1	+2	+1	–1
50×50	1453/ 2979	1740/ 2746	2186/ 4454	2498/ 4056	2850/ 5804	3685/ 7648	3503/ 7394	4155/ 8457	5365/ 10132
80×80	2455/ 9626	3171/ 12050	4202/ 19795	4241/ 18094	5469/ 23244	7151/ 30487	6840/ 27570	8254/ 34773	11489/ 44951
100×100	3595/ 20970	4558/ 26878	6057/ 47561	5611/ 33429	7112/ 39187	9599/ 53854	9613/ 60302	11597/ 73414	15827/ 89211
150×150	7289/ 92840	8792/ 113410	11883/ 165897	10177/ 151510	12771/ 155594	16431/ 199439	18009/ 243409	21142/ 259102	26600/ 346099
180×180	9955/ 187769	11732/ 226854	16018/ 315436	13231/ 270452	17252/ 328582	22470/ 426640	20755/ 404964	26547/ 498774	35100/ 677315
200×200	11905/ 298091	13839/ 327009	18987/ 431027	15907/ 405317	20653/ 476316	26926/ 610474	23809/ 593973	30174 /690325	40514/ 895244
Доверительный интервал по b по количеству полушагов	0.73–0.7713	0.7333–0.7552	0.7682–0.7854	0.6375–0.6744	0.6911–0.7193	0.6936–0.7223	0.6787–0.7236	0.7117–0.7325	0.7217–0.7416
Лучшее b	0.7506	0.7442	0.7768	0.656	0.7052	0.7079	0.7012	0.7221	0.7317
Доверительный интервал по b по времени запуска	1.611–1.676	1.713–1.731	1.645–1.661	1.642–1.666	1.554–1.606	1.545–1.597	1.566–1.588	1.578–1.596	1.609–1.636
Лучшее b	1.643	1.722	1.653	1.654	1.58	1.571	1.577	1.587	1.623

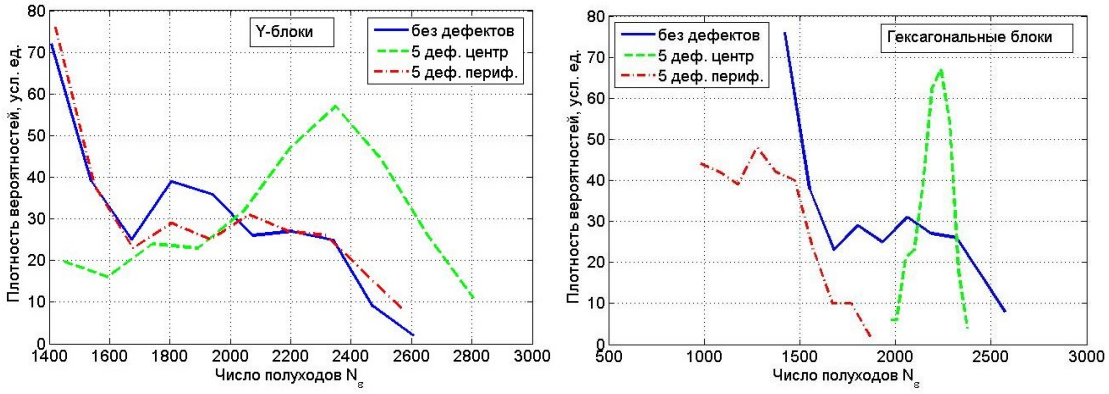
Примечание. Цифры в шапке таблицы означают: –1 — поворот внутри блока на 600 против часовой стрелки, +1 — на 600 по часовой стрелке, +2 — на 1200 по часовой стрелке.

Влияние искусственных дефектов на скорость сходимости

Рассмотрим теперь влияние дефектов на ход вычислений. Под «дефектом» можно понимать как физический «точечный дефект» в моделируемом объекте, например в принятом в физике твердого тела значении, так и дефект физической структуры вычислителя, поскольку КА-модели эффективнее рассчитывать на массивно-параллельных ЭВМ. В первом смысле допустимо говорить о дефекте как о дискретной особенности и тогда при масштабировании сетки/поля последнюю нужно моделировать несколькими смежными ячейками. При нашем огрубленном подходе мы не будем учитывать различие двух семантик и также примем, что дефектность элемента проявляется только в том, что связанные с ним блоки «выпадают» из процесса вычислений (P7).

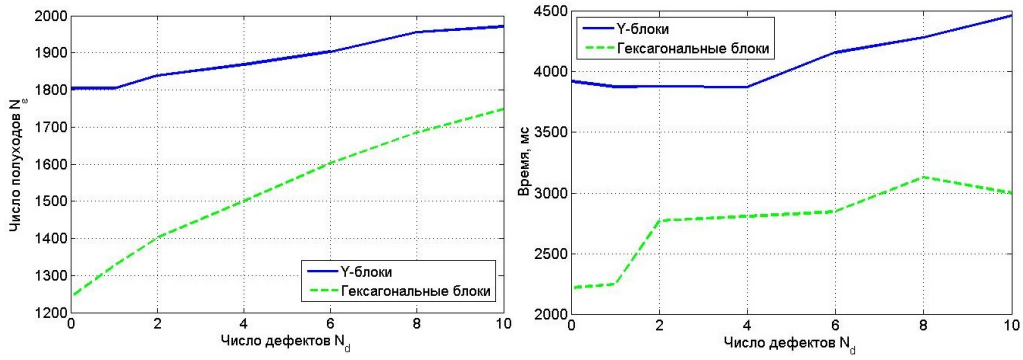
Влияние дефектов оценивалось для шаблона EY12, т. е. блок смещается с возвратом в нулевое положение на произвольный вектор смещения, обход блока случаен, поворот внутри блока также случаен, что обеспечивает наиболее быструю сходимость. В поле КА вне области вещества равномерно случайно бросим несколько дефектов и рассчитаем среднее и отклонение, проведя по 300 имплементаций. Наибольшее число внедренных дефектов 10, т. е. 0.4 % от общего числа ячеек поля. В каждой имплементации положение дефектов различное. Однако вначале мы исследовали влияние дефектов, находящихся в фиксированных позициях. Если количество дефектов $N_d = 1$, то местоположение дефекта сказывается на скорости сходимости незначительно (это относится и к форме кривой распределения, и с обеим шкалам — полуходы и миллисекунды), однако при $N_d = 5$ это влияние становится заметным, скорость сходимости падает для центральных дефектов на ~23 %, а гистограмма при этом симметризуется, а для периферийных — всего на ~2 %.

Влияние дефектов рассматривалось на примере шаблона EH9, т. е. смещение блока по 0–1–0–2–0–3–0–4–0–5–0–6, случайный обход «центр–периферия» и случайный поворот на ±1. Общая картина примерно такая же, как и для Y-блоков, однако более выражено различие центральных и периферийных дефектов — скорости сходимости различаются между собой примерно на 80 % и по полуходам, и по шкале времени. На дисперсию δ наличие дефектов почти не влияет ($\delta = 17 \div 20\%$). Как показано на рис. 14 и рис. 15, присутствие дефектов может даже немного ускорить сходимость, но тренд все равно направлен в сторону повышения длительности одного запуска (имплементации). Надо учитывать, что измерения в миллисекундах по процессорному времени могут искажать реальную картину за счет одновременного исполнения ЭВМ других служебных задач (это, по-видимому, объясняет резкий переход на рис. 15*b*).



(a) (b)

Рис. 14. Влияние местоположения фиксированных дефектов на профиль распределения скорости сходимости (по полуходам, $\varepsilon = 10^{-4}$). (a) для Y-блоков по шаблону EY12; (b) для блоков-гексагонов по шаблону EH9. Координаты дефектов: центральных — (28, 32), (33, 29), (29, 16), (19, 31), (31, 19); периферийных — (9, 7), (42, 10), (7, 25), (14, 38), (34, 49). Число имплементаций $I = 300$



(a) (b)

Рис. 15. Влияние количества случайных дефектов на среднюю скорость сходимости, измеренную (a) в полуходах (b) в миллисекундах

Заключение

В данной работе мы впервые обобщили блочно-поворотный механизм Марголуса на гексагональную сетку для двумерного клеточного автомата с непрерывными значениями, дали некоторые формальные определения и показали, что локальная функция перехода в этом случае зависит от порядка взаимодействия центральной ячейки блока с периферийными и может быть описана как матричное умножение. Рассмотрены два типа замощений плоскости: Y-блоки (тригоны) и блоки-гексагоны, а также различные вариации вычислительного эксперимента.

Объем проведенных статистических испытаний достаточно велик и позволяет оценить те или иные достоинства методов реализации ОБПМ-КА. Заметим, что обычно практические цели математического моделирования не позволяют исследователям сосредоточиться на изучении самого метода, и в этом мы видим практическую ценность работы.

Для случая Y-блоков нами проведена оценка порядка сходимости алгоритма. По признаку достижения необходимой погрешности результата ε число итераций пропорционально $\lg\varepsilon$, причем выделяют два участка, вместе напоминающих форму «клюшки». По признаку зависимости от начальных данных, т. е. числа ячеек поля КА $V \times V$, число итераций пропорционально $\sim \left(V^2\right)^{\simeq \log_4 3}$. Иными словами, сложность алгоритма при исполнении на массивно-параллельной ЭВМ будет меньше, чем линейная. При исполнении же обычной последовательностной ЭВМ сложность алгоритма будет меньше, чем квадратичная. Аналогичные выводы верны и для блоков-гексагонов, показатель полиномиальной сложности лежит в пределах 0.6÷0.8 (по числу полуходов).

Введение поворота блока примерно в два раза повышает скорость вычислений как для блоков-гексагонов, так и для Y-блоков. Влияние направление поворота блока проявляется поразному для многих исследованных вариантов смещения Y-блоков, но в целом немного, в пределах статистической погрешности, увеличивает среднее по числу полуходов $\overline{N_\varepsilon}$ и делает более симметричным распределение (при росте дисперсии). Типичное распределение имеет вид гауссианы с утяжеленным правым плечом, которое может вырождаться в распределение Пуассона (особенно для блоков-гексагонов). Иногда, наоборот, левое плечо гауссианы более длинное. Что касается блоков-гексагонов, то в отличие от Y-блоков направление поворота для детерминированных схем достаточно сильно влияет на скорость сходимости. Форма распределения вероятностей, если брать типичный случай, близка к равновероятному или очень широкой гауссиане, возможно двухгорбой.

Исследовано влияние дискретных особенностей — в виде дефектных ячеек, которые по определнию не участвуют в расчете, — на ход вычислений. Выявлено различное влияние на скорость сходимости центральных и периферийных дефектов: первые, как и следовало ожидать, влияют сильнее. В целом скорость вычислений падает примерно на 8 %, даже если на по-

ле присутствуют до 10 дефектов. При случайном забросе дефектов на поле КА наблюдаются существенные изменения формы распределения величины N_ε, обычно сопровождающиеся «утяжелением» правой части.

Из проведенных нами вычислительных экспериментов следует, что при моделировании наиболее быстрая схема для блоков-гексагонов предпочтительнее наиболее быстрой схемы для Y-блоков (отношение скоростей между примерно 4:3). Исследованный нами на тестовой задаче обобщенный БПМ-метод решения диффузионных задач позволит в дальнейшем с большей уверенностью применять его для более сложных задач прикладного значения. Эти задачи, например, могут быть связаны с расчетами электростатического потенциала, так как краевая задача для оператора диффузии переходит в задачу для оператора Лапласа, если гарантировано существование стационарного решения.

Список литературы

Бандман О. Л. Отображение физических процессов на их клеточно-автоматные модели // Вестник Томского государственного университета. Управление, вычислительная техника и информатика. — 2008. — № 2. — С. 5–17.

Гахов А. В. Метод дискретных особенностей и компьютерный инструментарий для моделирования дифракции акустических волн на трехмерных плоскопараллельных структурах: Диссертация на соискание ученой степени кандидата наук. Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина. — 2008. — 185 с.

Евсеев А. А., Нечаева О. И. Клеточно-автоматное моделирование диффузионных процессов на триангуляционных сетках // Прикладная дискретная математика. — 2009. — № 4. — С. 72–83.

Киреева А. Е. Генерация компьютерного представления пористой структуры с помощью тоталистического клеточного автомата // Прикладная дискретная математика. Дискретные модели реальных процессов. — 2015. — № 1 (27). — С. 120–128.

Малинецкий Г. Г., Степанцов М. Е. Моделирование диффузионных процессов с помощью клеточных автоматов с окрестностью Марголуса // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1998. — 38:6. — С. 1017–1020.

Матюшкин И. В., Хамухин А. В. Применение языка UML при проектировании машин клеточных автоматов // Известия высших учебных заведений. Электроника. — 2010. — № 6(86). — С. 39–48.

Тоффоли Т., Марголус Н. Машины клеточных автоматов. — М.: Мир, 1991.

Demontis P., Pazzona F. G., Suffritti G. B. A "coarse-grained" model based on a cellular automaton for the study of diffusion in microporous materials // Diffusion Fundamentals. — 2005. — № 3. — 2.1–2.2. http://diffusion.uni-leipzig.de/pdf/volume3/diff_fund_3%282005%292.pdf.

Hardy J., Pomeau Y. and de Pazzis O. Time evolution of a two dimensional model system. I. Invariant states and time correlation functions // J. Math. Phys. — 1973. — 14 (12). — P. 1746–1759.

Margolus N. Physics-like models of computation // Physica D. — 1984. — Vol. 10. — P. 81–95.

Medvedev Y. G. Multi-particle cellular automata models for diffusion simulation // Lecture Notes in Computer Science. — 2010. — Vol. 6083. — P. 204–211.

Oono Y., Kohomoto M. Discrete model of chemical turbulence// Physical Review Letters. — 1985. — Vol. 55(27). — P. 2927–2931.

Toffolli T. Cellular automata as an alternative to (rather than approximation of) differential equations in modeling physics // Physica D. — 1984. — Vol. 10. — P. 117–127.

Tyler Tim. The Q*Bert neighbourhood. http://www.cell-auto.com/neighbourhood/qbert/index.html

Ulam S. Random processes and transformations // Proceedings of the International Congress of Mathematicians (Cambridge, Massachusetts, August 30 – September 6, 1950). — Vol. 2. — P. 264–75. Providence, Rhode Island: American Mathematical Society, 1952.

Wolf-Gladrow D. Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models. An Introduction. — Springer, 2005. 302 P.