

УДК: 519.63:621.382

Клеточно-автоматные методы решения классических задач математической физики на гексагональной сетке. Часть 1

И. В. Матюшкин

Институт проблем проектирования в микроэлектронике РАН,
Россия, 124681, г. Москва, г. Зеленоград, ул. Советская, д. 3

АО «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники»,
Россия, 124460, г. Москва, г. Зеленоград, 1-ый Западный проезд, д. 12/1

E-mail: imatyushkin@mikron.ru

Получено 30.08.2016, после доработки — 06.03.2017.

Принято к публикации 17.03.2017.

Статья носит методический характер и посвящена решению трех классических уравнений математической физики (Лапласа, диффузии и волнового) простейшими численными схемами в формулировке клеточных автоматов (КА). Особое внимание уделяется законам сохранения вещества и неприятному эффекту избыточной гексагональной симметрии (ИГС).

Делается вывод о том, что по сравнению с классическими конечно-разностными методами, хотя локальная функция перехода (ЛФП) КА терминологически эквивалентна шаблону вычислительной двух-слоевой явной схемы, различие состоит в замене матричных (direct) методов (например, метода прогонки для трехдиагональной матрицы) итерационными. Из этого следуют более жесткие требования к дискретизации условий для граничных КА-ячеек.

Для гексагональной сетки и консервативных граничных условий записана корректная ЛФП для граничных ячеек, справедливая, по крайней мере, для границ прямоугольной и круговой формы. Предложена идея разделения ЛФП на internal, boundary и postfix. На примере этой задачи заново осмыслено значение числа Куранта–Леви как соотношения скорости сходимости КА к решению задачи, данному на фиксированный момент времени, и скорости изменения самого решения в динамике.

Ключевые слова: клеточные автоматы с непрерывными значениями, гексагональная сетка, конечно-разностные методы, уравнения в частных производных

Работа была выполнена в рамках НИР «Исследование перспективных моделей вычислений и реализующих их архитектур высокопроизводительных информационно-вычислительных комплексов нового поколения» по Программе фундаментальных исследований ОНТИ РАН «Архитектурно-программные решения и обеспечение безопасности суперкомпьютерных информационно-вычислительных комплексов новых поколений» в ИППМ РАН.

UDC: 519.63:621.382

Cellular automata methods in mathematical physics classical problems solving on hexagonal grid. Part 1

I. V. Matyushkin

Institute for Design Problems in Microelectronics of Russian Academy of Sciences,
3 Sovetskaya st., Zelenograd, Moscow, 124681, Russia

Molecular Electronics Research Institute,
12/1 1-y Zapadny Proezd, Zelenograd, Moscow, 124460, Russia

E-mail: imatyushkin@mikron.ru

Received 30.08.2016, after completion — 06.03.2017.

Accepted for publication 17.03.2017.

The paper has methodical character; it is devoted to three classic partial differential equations (Laplace, Diffusion and Wave) solution using simple numerical methods in terms of Cellular Automata. Special attention was paid to the matter conservation law and the offensive effect of excessive hexagonal symmetry.

It has been shown that in contrary to finite-difference approach, in spite of terminological equivalence of CA local transition function to the pattern of computing double layer explicit method, CA approach contains the replacement of matrix technique by iterative ones (for instance, sweep method for three diagonal matrixes). This suggests that discretization of boundary conditions for CA-cells needs more rigid conditions.

The correct local transition function (LTF) of the boundary cells, which is valid at least for the boundaries of the rectangular and circular shapes have been firstly proposed and empirically given for the hexagonal grid and the conservative boundary conditions. The idea of LTF separation into «internal», «boundary» and «postfix» have been proposed. By the example of this problem the value of the Courant-Levy constant was re-evaluated as the CA convergence speed ratio to the solution, which is given at a fixed time, and to the rate of the solution change over time.

Keywords: cellular automata with continuous values, hexagonal grid, finite-difference methods, partial differential equations, PDEs

The work was performed as part of research work “Research of perspective computing models and high-performance Information and Computing systems architectures of new generation, based on them” within The Program of fundamental research of DNIT RAS “Architecture and software solutions and security of supercomputer Information and Computing systems of new generation” in IPPM RAS.

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2017, vol. 9, no. 2, pp. 167–186 (Russian).

© 2017 Igor V. Matyushkin

С развитием нанотехнологий появилась потребность моделировать такие физические объекты, которые включают в себя элементы гексагональной симметрии [Ефимов, 2005], т. е. имеют ось симметрии 6-го порядка. Примерами могут служить графеновый лист, самоорганизация в ячейки Бенара (даже в геологических объектах [Сунгатуллин, Кадыров, 2012]), фрагменты карты активности нейронов головного мозга [Mathis et al., 2015], волны Фарадея [Perinet et al., 2006], оптоволокно со сложной микроструктурой [Zamani-Aghaie et al., 2010], антенна для электромагнитных волн в форме ковра шестиугольников [Agraval, 2013]. В частности, графическое изображение может не только моделироваться гексагональными пикселями, но и проектироваться таковым [Allen, 2003; Jiang, 2008].

Для численного моделирования таких объектов естественно применять гексагональную сетку (ГС). Так, например, поступили авторы [Аристова, Байдин, 2011], используя метод квазидиффузии при моделировании транспортных процессов в ядерном реакторе (исток задачи см. в [Кагаа, 2006]). Конечно, и другие физические объекты могут быть смоделированы на гексагональной, а не на обычной прямоугольной сетке. Для решения уравнений математической физики, прежде всего содержащих в своей записи оператор Лапласа, гексагональную сетку впервые рассмотрели Канторович и Крылов в 1958 г., чуть позже — В. И. Лебедев [Лебедев, 1961]. При построении климатических моделей для земного шара сетки, основанные на гексагонах, пользуются популярностью уже полвека [Collins et al., 2013]. С середины 70-х гг. и особенно с конца 80-х гг. они вошли в вычислительную гидродинамику [Кагаа, 2006; Роуч, 1980], стали применяться при описании кинетических явлений [Andallah, 2005] и связанных с этим методами частиц (particles-in-cell) [Andallah, 2004; Кондаков, 2014]. С середины 90-х гг. и по настоящее время они стали активно применяться при решении уравнений Максвелла FDTD-методами (finite-difference-time-domain methods) [Brio et al., 2010; Fei et al., 2005; Hamilton, Bilbao, 2013; Hamilton, Bilbao, 2014] и некоторыми FDFD-методами [Zhou, Fulton, 2009]. В этой области отмечается [Hamilton, Bilbao, 2013] по сравнению с прямоугольными сетками: 1) лучшая численная дисперсия (dispersion), особенно для волн, распространяющихся вдоль осей координат, и для явных численных схем; 2) большее число Куранта (для 9-точечной прямоугольной схемы $\sqrt{1/2}$, для 7-точечной гексагональной — $\sqrt{2/3}$). В последние годы гексагональные сетки востребованы разработчиками компьютерных игр, программ машинного зрения и электронной аппаратуры [Allen, 2003]. Тем не менее конечно-разностные схемы на гексагональной сетке стали всерьез (так как первые работы относятся к концу 60-х гг. [Sadourny, Morel, 1997]) рассматриваться [Макаров, 1995; Hamilton, Torin, 2014] в вычислительной математике сравнительно поздно — с 90-х гг., а работы по данной тематике по-прежнему актуальны. Однородные прямоугольные сетки сейчас уже мало кого удовлетворяют. Так, например, в контексте оператора Лапласа рассматривались полигональные [Sukumar, Bolander, 2003] и полиэдральные [Робенков и др., 2013] сетки, востребованные практикой проектирования. Конечно-разностные схемы для лапласиана на гексагональной сетке исследовались в недавних работах Досиева и Целикера [Dosiyeu, Celiker, 2014, 2015] (причем авторы использовали блочную сетку), а также применялись при решении уравнения Гельмгольца [Carlson et al., 2003].

Однако до сих пор в клеточно-автоматной формулировке поведение этих схем на ГС почти никем не исследовалось. Фундаментальные идеи о такой применимости клеточных автоматов (КА) высказаны в работах Цузе [Zuse, 1969] (прежде всего для волнового уравнения), Улама [Ulam, 1952] и Тоффоли [Toffoli, 1984]. Например, в [Vick, 2007] ставится вопрос о решении задач мультифизики с помощью КА, а не конечных элементов или разностей; авторы, однако, приводят мало деталей. Для прямоугольной сетки такие задачи решались в [Toffoli, 1984; Лобанов, 2010; Губарев и др., 2013]. Попытка классификации бинарных КА на гексагональной сетке сделана в [Jahangir, Sudhakar, 2011]. Известен также цикл работ Вунше по КА с дискретными значениями на ГС (<http://www.ddlab.com/>), однако эти работы носят довольно отвлеченный от инженерной практики характер. Из совсем недавних работ можно отметить [Waghee et al., 2015], несмотря на специфичность объекта (тепловыделение в городе).

Целью работы является анализ поведения клеточных автоматов с непрерывными значениями, заданных на гексагональной сетке и решающих классические задачи математической физики (прежде всего задачи Неймана и Дирихле для уравнения диффузии). Практическая значимость работы связана с опережающим [Stempkovsky et al., 1990; Красников, 2004] проектированием объектов, например интегральных микросхем, с гексагональной симметрией.

1. Особенности гексагональной геометрии

Существует два типа расположения гексагонов на сетке: вертикальное (далее будет нами использоваться, рис. 1) и горизонтальное; одно переходит в другое при повороте на 90° . С точки зрения зрительного восприятия (в компьютерных играх) эти разновидности неэквивалентны. Горизонтальное расположение, а именно центры и вершины гексагонов, нумеруется числами Эйзенштейна (Eisenstein) на комплексной плоскости: $z = (a, b) = a + b\omega$, $\omega = \frac{1}{2}(-1 + i\sqrt{3})$. Легко сообразить, что гексагональная сетка топологически эквивалентна прямоугольной, у которой нечетные строки сдвинуты на половину длины блока, что можно использовать для нумерации ячеек при программировании. На базе гексагональной сетки можно воспроизвести треугольную (обе сетки находятся в отношении двойственности центров и вершин); на рис. 1, а показана другая, недualная сетка. Можно создавать и блоки (рис. 1, с), формируя цепочки тригонов (triangle). С точки зрения КА на разбиении (partitioned) гексагон является изометрической проекцией куба, и его можно разбить на три ромба; отсюда игра Q*bert [Tyler, 2016] и одноименная схема (рис. 1, d) блочного КА. Мы не будем касаться различий между КА на разбиении и блочными КА, но такие КА будем представлять именно блочными.

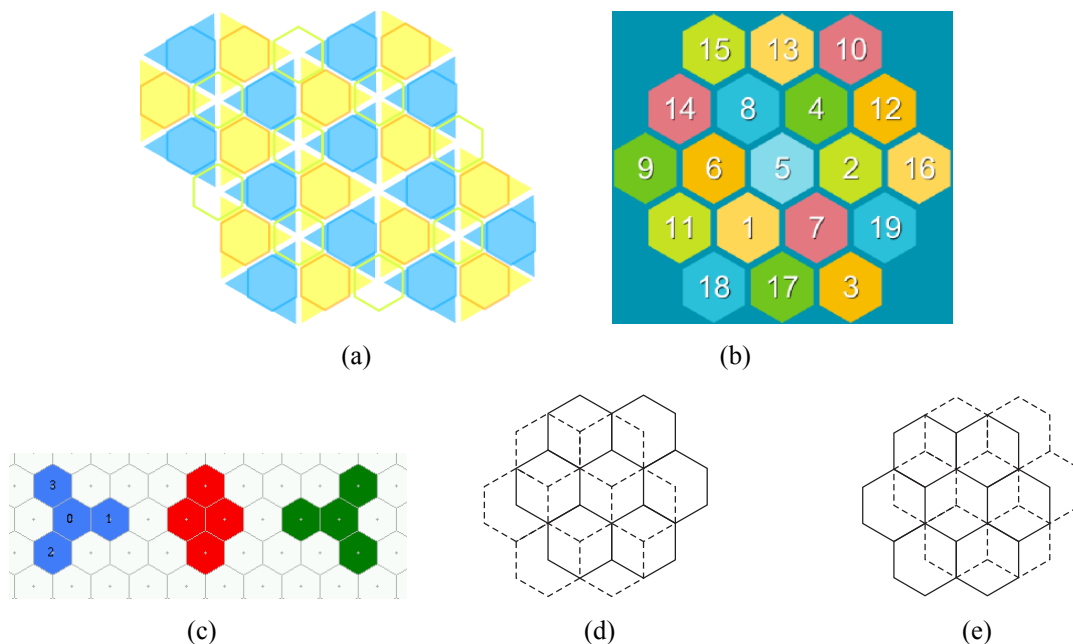


Рис. 1. Геометрия гексагонов: (а) недualная треугольная сетка; (б) магический гексагон; (с) простейшие блочные фигуры на гексагонах: три типа тригонов [Allen, 2003] (слева направо) — R-тригон, ромб, L-тригон; (d, e) окрестность Q*bert для 2-тактового КА на ромбическом замощении

Гексагональную сетку можно несколькими способами свернуть по поверхности тора и даже заполнить ленту Мебиуса, однако замостить сферу одними правильными гексагонами невозможно: из теоремы Эйлера следует, что по крайней мере нужно еще 12 пентагонов или 6 квадратов [Cameron's Antipode page, 2004] (при этом гексагонов может быть достаточно мно-

го). Аналогично замощению (без промежутков) плоскости гексагонами в трехмерном пространстве фигурой замощения, наряду с ромбододекаэдром, является обрезанный октаэдр, грани которого представлены перемежающимися квадратами и гексагонами. Интересное площадное свойство [Tulleken, 2014], выводимое из свойств векторного произведения: любой параллелограмм с вершинами в центрах ячеек имеет целочисленную площадь (в единицах площади одной ячейки). Существует только один магический гексагон (сумма чисел равна 38 по любым трем направлениям симметрии, всего 19 ячеек, см. рис. 1, с). Можно раскрасить сетку только в три и более цвета так, чтобы соседние ячейки имели разный цвет.

Если квадратная сетка задается множеством пар $G_c = h \cdot \mathbb{Z}^2$, то вертикальная гексагональная сетка, т. е. центры гексагонов, задается так:

$$G_H = \{h \cdot Hz \in \mathbb{R}^2 : z \in \mathbb{Z}^2\}, \quad H \doteq \begin{pmatrix} 1 & -1/2 \\ 0 & \sqrt{3}/2 \end{pmatrix}, \quad h = l\sqrt{3},$$

где l — длина ребра гексагона.

2. Оператор Лапласа. Типы шаблонов вычислительных схем и веса

Сеточная функция обычно задана в узлах решетки, но состояние КА задается в центрах ячеек; можно вполне пренебречь этим различием, сделав параллельный сдвиг на l по диагонали. Поэтому известные шаблоны разностных схем легко трансформируются в локальные функции перехода (ЛФП) КА, которые преимущественно являются тоталистичными (с некоторыми весовыми коэффициентами). Можно выделить два шаблона для 4-го порядка точности и два шаблона для 6-го порядка (по параметру l), см. рис. 2.

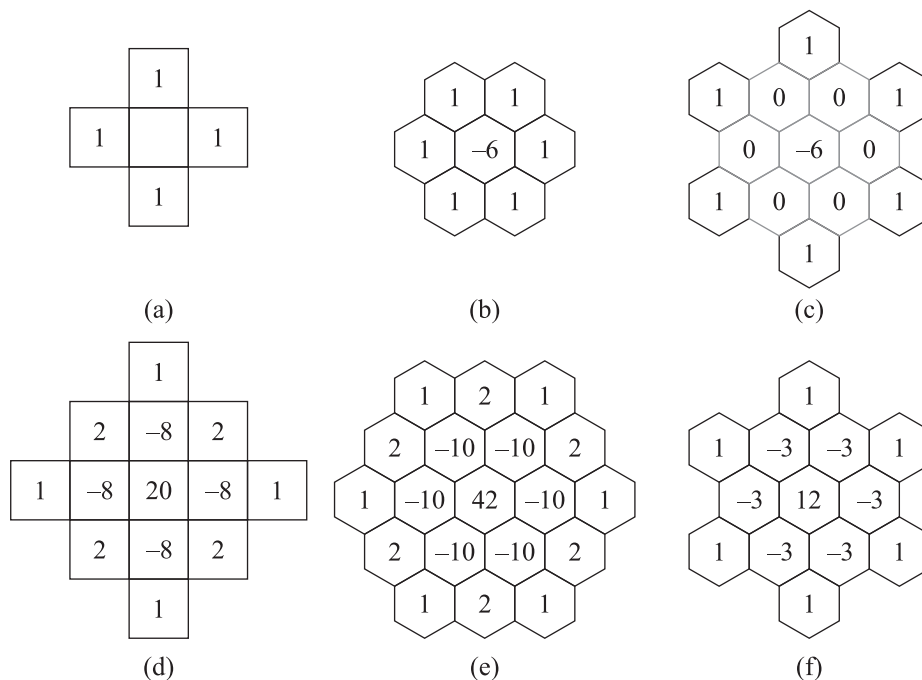


Рис. 2. Вычислительные шаблоны для оператора Лапласа: шаблоны окрестности КА и весовые коэффициенты. (a, d) — прямоугольная сетка; (b, c, e, f) — гексагональная сетка; (a, b, c) — схемы 4-го порядка; (d, e, f) — схемы 6-го порядка. Внутри ячейки указан весовой коэффициент, с которым значение сеточной функции (оно же — значение состояния ячейки КА) входит в суммирующее выражение Σ для лапласиана, т. е. $\Sigma = k\Delta$. Для классической схемы «крест» (a) $k = 1$. Для остальных 5 случаев k соответственно равно $9/2$, $27/2$, 1 , $81/4$, $81/16$ [Hamilton, Torin, 2014]

Рассмотрим гексагональную сетку с длиной ребра l , центр координат совместим с центром одного из гексагонов, а сеточную функцию, аппроксимирующую искомое непрерывное решение, будем задавать естественным образом в центрах гексагонов. Таким образом, начальный узел с координатами $(0,0)$ и значением функции u_0 окружен шестью узлами со следующими координатами:

$$1: (-l\sqrt{3}, 0); 2: \left(-l\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3l}{2}\right); 3: \left(l\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3l}{2}\right); 4: (l\sqrt{3}, 0); 5: \left(l\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{3l}{2}\right); 6: \left(-l\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{3l}{2}\right). \quad (1)$$

Для полноты изложения восстановим вывод простейшей разностной схемы с учетом КА-терминологии. Исследование порядка аппроксимации на гладких функциях проведем, подставив проекцию точного решения в разностное представление и разложив след точного решения в ряд Тейлора. Будем сохранять члены 4-го порядка. Просуммировав значения на этих шести узлах, получаем, что производные нечетных порядков исчезают:

$$u_1 + \dots + u_6 = 6u_0 + \frac{9l^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) u + \frac{27l^4}{32} \left(\frac{\partial^4}{\partial x^4} + 2\frac{\partial^4}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4}{\partial y^4} \right) u + \dots \quad (2)$$

Если функция $u(x, y)$ удовлетворяет уравнению Лапласа в точке $(0, 0)$ (что можно распространить на всю область определения без ограничения общности), то в пренебрежении членами 4-го порядка сеточная функция удовлетворяет простому соотношению, что порождает тоталитичный автомат, итерационно сходящийся к следующему решению (верхний индекс означает номер итерации):

$$u_1 + \dots + u_6 \cong 6u_0 \Rightarrow u_0^{t+1} = \frac{1}{6}(u_1^t + \dots + u_6^t), \quad (3)$$

$$u_1 + \dots + u_6 + 2u_0 \cong 6u_0 + 2u_0 \Rightarrow u_0^{t+1} = \frac{1}{6}(u_1^t + \dots + u_6^t)\alpha + (1-\alpha)u_0^t, \quad \alpha \equiv \frac{3}{4}. \quad (4)$$

Переход от (2) к формулам (3) или (4) *принципиально неформален*. Перед его обсуждением приведем некоторые известные результаты для КА на прямоугольных сетках.

Следуя [Rucker, 2003], рассмотрим представление оператора Лапласа на прямоугольной сетке, где ячейка (нет индекса) имеет 4 соседа с общей стороной (индексы s, n, e, w по сторонам света) и 4 соседа с общей точкой (индексы nw, ne, se, sw). В шаблонах Неймана и Мура лапласиан представляется соответственно как

$$\Delta u \rightarrow (u_n + u_s + u_e + u_w) / 4 - u \quad (\text{Нейман}), \quad \Delta u \rightarrow \delta u - u \quad (\text{Мур}),$$

$$\delta u \equiv \frac{1}{7}(0.75(u_n + u_s + u_e + u_w) + (u_{ne} + u_{se} + u_{nw} + u_{sw})). \quad (5)$$

Происхождение коэффициентов в шаблоне Мура авторами никак не поясняется, из чего можно сделать вывод об их эмпиричности. Также авторы [Rucker, 2003] решают проблему граничных условий введением поправочного коэффициента, зависящего от числа соседей n :

$$u^{t+1} := (1-p)u^t + p \cdot \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n u_i^t, \quad p \doteq \frac{n}{n+1}. \quad (6)$$

Заметим, что оператор Лапласа, записанный [Hamilton, Bilbao, 2014] по трем осям симметрии гексагона, выглядит так:

$$\Delta = \frac{2}{3} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right).$$

Вернемся к (3), (4). Введенная таким образом ЛФП для синхронного автомата (тоталитичный, окрестность не включает саму ячейку) гарантирует его сходимость во всей области к решению уравнения Лапласа. Формально можно трактовать (3) как численную схему явного метода, если ввести дополнительную координату времени. Следует заметить, что в большинст-

ве традиционных численных методов соотношение (3) рассматривается как генератор линейных алгебраических уравнений, что порождает решаемую обычно методом прогонки систему. Клеточно-автоматная формулировка подразумевает другую стратегию, а именно итерационную процедуру, или метод последовательных приближений. Подчеркнем, что переход (3) неформален, поскольку из конечно-разностного соотношения не следует точный вид итерационной формулы, тем более описывающей ЛФП КА. Так, например, с целью потенциального улучшения сходимости можно принять (4).

Чтобы применить (2) и (3) для уравнения диффузии, примем во внимание систему (7):

$$\begin{cases} \frac{u^{t+1} - u^t}{\tau} = D \cdot \Delta u^t \\ \frac{u_1^t + \dots + u_6^t}{6} = u^t + \frac{3l^2}{4} \Delta u^t \end{cases} \Rightarrow \left[D' \equiv \frac{4}{3} D \frac{\tau}{l^2} \right] \Rightarrow u^{t+1} = (1 - D')u^t + D' \frac{u_1^t + \dots + u_6^t}{6}, \quad (7)$$

где D — размерный коэффициент диффузии (традиционно измеряемый в $\text{см}^2/\text{с}$) в классическом уравнении $\partial u / \partial t = D \Delta u$; τ , l — кванты КА по времени и пространству. Выражение $D_m = D \frac{\tau}{l^2}$ представляет собой параболический аналог числа Куранта.

ЛФП (7) как численная схема может быть отнесена к числу явных, она «смешивает» состояния самой ячейки и ее соседей в определенной пропорции. Значения $0 < D' < 1$ будут «хорошими», а при $D' \geq 1$ имеет место неустойчивость. Чтобы избавиться от нее, возьмем второе уравнение (4) и лапласиан в момент $(t + 1)$, но предположим, что среднее по соседям неизменно. Тогда мы воспроизведем известную схему Алена–Чена и придем к (8):

$$u^{t+1} = (1 - D'')u^t + D'' \frac{u_1^t + \dots + u_6^t}{6}, \quad D'' \equiv \frac{D'}{1 + D'}. \quad (8)$$

Обращает на себя внимание формальная общность вида формул (4), (7), (8). Отсюда следует, что решение уравнения Лапласа (или Пуассона) получается финальным (т. е. в котором глобальная конфигурация не изменяется) результатом КА-вычисления, в целом имитирующего решение уравнения диффузии, в котором коэффициент диффузии вводится искусственно и играет роль внутреннего параметра численного метода. Несмотря на формальную общность (3)–(8), принципиальное отличие КА-стратегии решения диффузионных задач, в частности с заданными краевыми условиями, от традиционной стратегии, связанной с решением системы линейных уравнений с трехдиагональной матрицей, состоит в использовании итерационного подхода. Использование же более развитых вычислительных шаблонов и методов сдерживается требованием простоты ЛФП КА.

При реализации итерационной КА-стратегии на обычных ЭВМ возможен даже проигрыш в длительности расчета, однако при реализации на вычислительном кластере с параллелизмом вычислений будет ощущаться уже выигрыш в быстродействии.

3. Аппроксимация первых производных.

Пример задачи «диффузия–конвекция» и его обобщение

Решаемое уравнение, помимо лапласиана, может содержать члены с производными 1-го порядка, как в случае диффузии–реакции–конвекции. При этом их уничтожение путем замены переменных может быть нежелательным. В общем виде 2D-уравнение диффузии–конвекции для стационарного случая выглядит так:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + p(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} + q(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} = f(x, y), \quad (9)$$

где p, q, f — непрерывно дифференцируемые функции двух переменных. Встает вопрос корректной аппроксимации первых производных, хотя бы в предположении простейшей схемы (1) вычислительного шаблона (тождественного шаблону окрестности КА). К сожалению, не удастся избавиться от остаточных членов 3-го порядка, а именно, если рассуждать аналогично (2),

$$\begin{aligned} u_4 - u_1 &= \frac{\partial u}{\partial x} \cdot 2l\sqrt{3} + u_{xxx} \cdot l^3\sqrt{3} + O(l^4), \\ u_5 - u_2 &= \frac{\partial u}{\partial x} \cdot l\sqrt{3} - \frac{\partial u}{\partial y} \cdot 3l + \frac{l^3}{8} (\sqrt{3}u_{xxx} - 9u_{yyy} + 9\sqrt{3}u_{xyy} - 9u_{xxy}) + O(l^4), \\ u_3 - u_6 &= \frac{\partial u}{\partial x} \cdot l\sqrt{3} + \frac{\partial u}{\partial y} \cdot 3l + \frac{l^3}{8} (\sqrt{3}u_{xxx} + 9u_{yyy} + 9\sqrt{3}u_{xyy} + 9u_{xxy}) + O(l^4). \end{aligned} \quad (10)$$

Поэтому можно выделить по крайней мере три аппроксимации для $\partial u / \partial x$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} &\cong \frac{1}{2l\sqrt{3}}(u_4 - u_1), \quad \frac{\partial u}{\partial x} \cong \frac{1}{2l\sqrt{3}}((u_5 - u_2) + (u_3 - u_6)), \\ \frac{\partial u}{\partial x} &= \frac{1}{6l\sqrt{3}}((u_5 - u_2) + (u_3 - u_6) + 2(u_4 - u_1)) - \frac{3}{8}l^2 \frac{\partial}{\partial x}(\Delta u) \Big|_{(0,0)} + O(l^3). \end{aligned} \quad (11)$$

Для $\partial u / \partial y$ очевидных аппроксимаций меньше:

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{1}{6l}((u_2 + u_3) - (u_5 + u_6)) - \frac{3}{8}l^2(u_{yyy} + \sqrt{3}u_{xyy}) + O(l^3). \quad (12)$$

Пусть в центре ячейки КА значения внешних параметров равны (p_0, q_0, f_0) . Тогда с учетом (2), третьего из выражений (10) и (11) запишем условие (13), налагаемое на неизвестную функцию:

$$\begin{aligned} u_0 &= (\vec{a}, \vec{u}) + b, \quad \vec{u} = (u_1, \dots, u_6), \quad \vec{a} = (a_1, \dots, a_6), \\ b &\equiv -\frac{3l^2}{4}f_0, \quad a_1 \equiv \frac{1}{6} - \frac{p_0 l}{4\sqrt{3}}, \quad a_2 \equiv \frac{1}{6} + \frac{l}{8} \left(-\frac{p_0}{\sqrt{3}} + q_0 \right), \quad a_3 \equiv \frac{1}{6} + \frac{l}{8} \left(\frac{p_0}{\sqrt{3}} + q_0 \right), \\ a_4 &\equiv \frac{1}{6} + \frac{p_0 l}{4\sqrt{3}}, \quad a_5 \equiv \frac{1}{6} + \frac{l}{8} \left(\frac{p_0}{\sqrt{3}} - q_0 \right), \quad a_6 \equiv \frac{1}{6} - \frac{l}{8} \left(-\frac{p_0}{\sqrt{3}} + q_0 \right). \end{aligned} \quad (13)$$

Таким образом, первым шагом к конструированию ЛФП является составление наследуемого из уравнения математической физики условия, которому должна удовлетворять искомая сеточная функция (с учетом шаблона окрестности). Здесь u_0 — целевое значение сеточной функции в (текущей) центральной ячейке.

Это условие может быть как линейным (13), так и нелинейным, например (14) для стационарных задач типа «диффузия–конвекция–реакция»:

$$u_0 - (\vec{a}, \vec{u}) + F(u_0) = 0. \quad (14)$$

Здесь F — нелинейная функция, обусловленная записью закона действующих масс химической кинетики. Эффекты дискретизации и присутствия нелинейностей для задачи «диффузия–реакция» рассмотрены в [Weimar, 1997], численные схемы на ГС высокого порядка приведены в [Кагаа, 2006]. Сходный с КА «игра «Жизнь» автомат, допускающий адаптацию на ГС, был сконструирован авторами [Martinez et al., 2010] и использован для демонстрации как диффузионного поведения паттернов, так и для вычислительного универсализма.

Нестационарность задачи «диффузия–реакция», выраженная (15), где векторная форма u уже относится к концентрациям веществ, как и в случае, например, транспортного уравне-

ния (16), почти ничего не меняет в сказанном, хотя наряду со слагаемыми вида u_0^t в формуле присутствуют члены вида u_0^{t+1} :

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + P(x, y) \frac{\partial \vec{u}}{\partial x} + Q(x, y) \frac{\partial \vec{u}}{\partial y} = \vec{a} \cdot \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial x^2} + \vec{b} \cdot \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial y^2} + f(u), \quad (15)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = A(\vec{x}, t) \cdot \nabla u + b(\vec{x}, t) \cdot u + c(\vec{x}, t). \quad (16)$$

Для текущего состояния КА, очевидно, равенство (14) еще не выполняется, зато его левая часть будет иметь смысл невязки. Поэтому, аналогично градиентным методам, ЛФП логично искать в виде (17):

$$u_0^{t+1} = u_0^t + \alpha(u^* - u_0^t), \quad u^*: u^* - (\vec{a}, \vec{u}^t) + F(u^*) = 0, \quad 0 < \alpha < 1. \quad (17)$$

Именно на таком пути было получено решение (4) для решения уравнения Лапласа. Коэффициент α , интуитивно определяющий области устойчивости (малые значения) или неустойчивости (большие значения) метода, назовем фактором релаксации. Наша практика показывает, что для стационарных задач приемлемо даже $\alpha \approx 1$ (например, в ЛФП (3)).

4. Задача А: диффузия из малого источника квадратной формы. Эффект избыточной гексагональной симметрии. Консервативность

Тестовая задача А типа «растворение рафинада в воде» формулируется так [Гаврилов, Матюшкин, 2015]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right), \quad (x, y) \in W = [0; 1]^2, \quad t \in [0; \infty), \\ \left(\frac{\partial c}{\partial \mathbf{n}} \right)_{(x, y) \in \partial W} &= \mathbf{0}, \quad c|_{t=0} = \begin{cases} C, & (x, y) \in [\frac{1}{2} - a; \frac{1}{2} + a]^2, \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases} \end{aligned} \quad (18)$$

Решением (18) будет стационарное однородное распределение концентрации $c(x, y) = \text{const}$, причем закрытость системы предполагает сохранение вещества, что отражается выбором краевого условия Неймана. Как же корректно задать ЛФП для граничных ячеек, чтобы выполнялся закон сохранения вещества?

Чтобы сохранить преемственность обозначений с §§ 1–3, здесь и далее будем считать физическую величину c и математическую безразмерную величину u тождественными и связанными нормировкой $c = c_m u$, $c \Leftrightarrow u$ на некий масштабный фактор c_m . Поле КА, если не оговорено иное, представляет собой гексагональную сетку размера $V \times V$ ячеек, а константы следующие: $V = 50$, $C = 6$, $a = 0.1$. Рассмотрим поведение детерминированной простой КА-схемы, заданной (3) и дополненной правилом для граничных ячеек:

$$u_0^{t+1} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n u_i^t, \quad n < 6 \quad (n \text{ — число соседей}). \quad (19)$$

Поведение этой простой схемы характеризуется двумя неприятными для потенциального ее использования в качестве инструмента моделирования эффектами:

- 1) нарушение радиальной симметрии и воспроизводства излишней гексагональной симметрии (ИГС);
- 2) приближенное выполнение закона сохранения вещества, особенно для полей малого размера.

Об этих эффектах ранее встречались только косвенные, неявные упоминания, причем прежние авторы разбирали более сложные примеры, где эти эффекты, по-видимому, не замечались или отсутствовали. До нас такое явление асимметрии отмечалось авторами [Губарев и др., 2013] и для КА, функционирующего по блочно-поворотному механизму Марголуса: «...Описанная математическая модель Марголуса обладает локальной неизотропностью». Первый ИГС-эффект имеет место и для автомата схемы (8), нацеленной на решение уже уравнения диффузии (рис. 3). Он не исчезает при увеличении размеров поля (измельчении сетки). Даже наличие случайности не служит гарантией от асимметрии в задаче. Причину явления мы видим в том, что тоталистичная ЛФП стремится выравнять состояния ячеек по любому из трех направлений симметрии. Судя по данным [Hamilton, Torin, 2014], лишь введение 19-точечной (вместо 6- и 13-точечной) конечно-разностной схемы спасает ситуацию. Однако подчеркнем, что эффект присущ скорее самой ГС, а не формулам КА-метода.

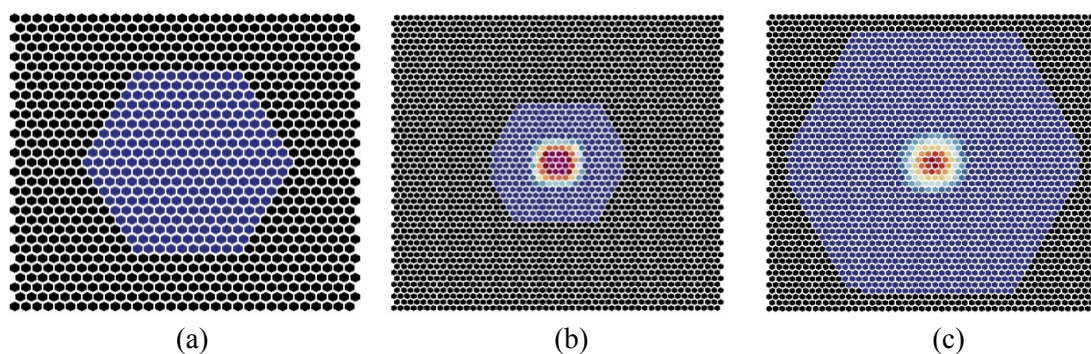


Рис. 3. Эффект избыточной гексагональной симметрии: (а) диффузия из точечного источника (одной ячейки) на поле 31×31 (показан 9-й ход симуляции КА); (б) диффузия из квадрата размером 6×6 на поле 50×50 для КА, заданного ЛФП (8) при $D'' = 0.25$ (показан 7-й ход симуляции); (с) то же для 19-го хода

Нами эмпирически получена корректная формула ЛФП граничных ячеек, практически с машинной точностью гарантирующая сохранение вещества (по крайней мере, для контуров в форме прямоугольника и окружности):

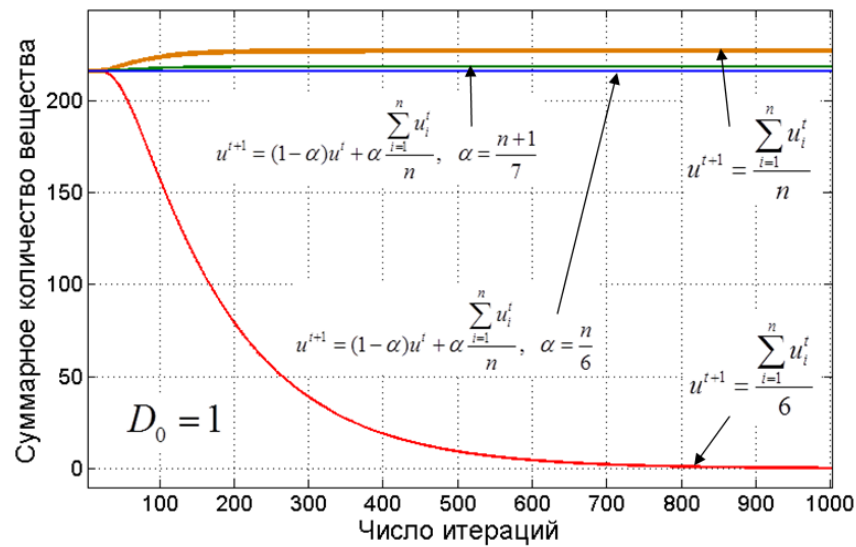
$$\text{boundary: } u^{t+1} = (1 - \alpha D_0) u^t + \alpha D_0 \frac{u_1^t + \dots + u_n^t}{n}, \quad \alpha \doteq \frac{n}{6}. \quad (20)$$

При подстановке $n = 6$ (20) переходит в формулу ЛФП внутренних ячеек (8), $D' \equiv D'' \equiv D_0$. Эта красивая формула (20) справедлива для любых выпуклых областей, а в приложении приведен ее вывод, следующий из физического смысла лапласиана как дивергенции потоков.

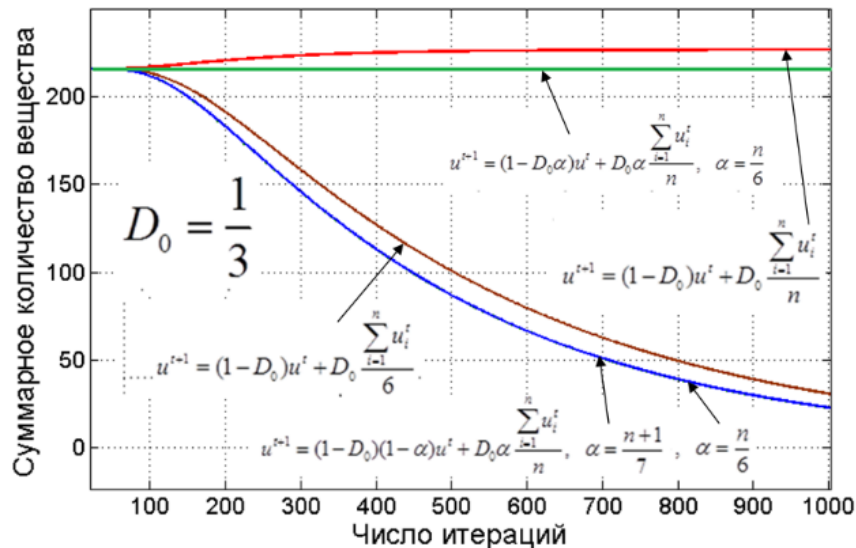
Итеративность КА-метода, как мы видим (рис. 4), по сравнению с прямыми численными методами, предъявляет повышенные требования к граничной ЛФП. Но это макроскопическая консервативность для всего поля КА, вытекающая из консервативности самого оператора Лапласа. На важность этого свойства указывалось уже давно [Lax et al., 1960]. Поскольку предлагаемые схемы наследованы из классических работ по численным методам [Курант и др., 1941], их устойчивость [Lax, 1956] доказывать не нужно.

5. Задача В: эмуляция решения одномерного уравнения диффузии двумерным КА

В качестве следующего примера рассмотрим решение одной довольно старой физической задачи, а именно модели диффузии из постоянного источника в полубесконечное тело, естественно возникающей, например, в технологии микроэлектроники в процессе легирования полупроводникового материала из газовой или паровой фазы. Этот процесс используется, например,



(a)



(b)

Рис. 4. Эффекты диссипации для «неправильных» вариантов граничной ЛФП и свойство консервативности для правильной ЛФП. Для внутренних ячеек применяем (7) при заданном аналоге числа Куранта $D_0 (\equiv D')$, равном 1 (a) или 1/3 (b)

при создании сильно легированных диффузионных слоев (в частности, эмиттерных) с поверхностными концентрациями C_s , близкими к значениям предельной твердотельной растворимости примеси в данном полупроводниковом материале. Твердое тело можно считать полубесконечным в том случае, если его размеры в направлении движения диффузанта много больше длины диффузии. Для классической задачи диффузии из постоянного источника в полубесконечное тело рассматривается уравнение диффузии при следующих краевых условиях Дирихле (21):

$$\begin{cases} \frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2}, & D = \text{const}, \\ C(0, t) = C_s, & C(\infty, t) = 0, \quad C(x > 0, t = 0) = 0. \end{cases} \quad (21)$$

Решение, как известно, имеет вид (22):

$$C(x, t) = C_s \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}}, \quad \xi \equiv \frac{x}{2\sqrt{Dt}}, \quad \operatorname{erfc}(\xi) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\xi}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi. \quad (22)$$

Поскольку одномерная задача решается двумерным автоматом, для повышения адекватности модели: 1) был выбран размер поля 20–24 на 240 ячеек с распространением вещества в направлении большего измерения (слева направо); 2) оператор Лапласа в (21) двумерный; 3) по оси Y решение однородно, бесконечную область ограничиваем конечным прямоугольником с консервативными условиями (20) по нижней и верхней границам (циклические условия на границах не стали использовать). Учет краевых условий достигается за счет дополнительной функции перехода `postfix`, применяемой к граничным ячейкам (левым и правым) поля после совершения глобальной (или локальной, так как КА синхронный) функции перехода.

В силу предположения 3 допустима некоторая вариация сеточной функции по оси ординат. Следует заметить, что в силу ограниченности поля КА решает в строгом смысле задачу (21) лишь до тех пор, пока концентрационная волна не достигнет правой границы поля. Таким образом, процесс КА-расчета проходит через три основных этапа: (а) начальная, удовлетворяющая (22), стадия; (б) переходные процессы; (в) состояние равновесия, которое соответствует переходу (21) в уравнение Лапласа (23) с появлением линейного решения:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 C(x, t = \infty)}{\partial x^2} = 0, \\ C(0, t) = C_s, \quad C(x = L, t) = 0. \end{cases} \quad (23)$$

Строго говоря, формулировка задачи (21) неточна при задании левых и правых краев. Для корректного учета краевых условий в КА-модели полезно обратиться к дискретному аналогу уравнения непрерывности (24), связывающему плотность j потока в малый объем, количество вещества ρ в нем и внутренние источники g (v — скорость движения частиц):

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} j = g, \\ \rho \approx u, \quad j \equiv \rho v \sim u, \quad v \doteq \text{const} \end{cases} \Rightarrow \frac{u^{t+1} - u^t}{\tau} - \frac{v}{l} (u_{ex}^t - u^t) \approx g. \quad (24)$$

Соотношение (24) можно одновременно трактовать и как запись краевых условий Коши (индекс ex означает принадлежность к внешней границе области), и как неявную запись `postfix`, выражаемую (25):

$$u^{t+1} := \alpha u^t + \beta, \quad \alpha \doteq 1 - \frac{v\tau}{l}, \quad \beta \doteq \tau g + \frac{v\tau}{l} u_{ex}^t. \quad (25)$$

Именно функцию перехода (25) следовало применять в задаче (21)–(23) вместо фактически подставляемых условий Дирихле. Напомним синонимичность $C \rightleftharpoons u$. В условиях левой и правой границ (индексы 0 и L соответственно), при сохранении общности для гетерогенных кинетик, функцию перехода можно было бы сделать более ясной физически (26):

$$C_{x=0}^{t+1} := \left(1 - \frac{v_0\tau}{l}\right) C_{x=0}^t + \frac{v_0\tau}{l} C_s, \quad C_{x=L}^{t+1} := \left(1 - \frac{v_L\tau}{l}\right) C_{x=L}^t. \quad (26)$$

Справедливости ради отметим, что при выводе (24) направление нормали лимитируется общей геометрией границ поля КА, поэтому слагаемое с дивергенцией должно быть специфицировано точнее. При подстановке условия (26) в (23) на третьей стадии КА-симуляции мы вновь получаем линейную (27) зависимость $C(x)$, но с другими коэффициентами, очевидно

вытекающими из соображения равенства потоков на границе (от коэффициента диффузии D , фигурирующего в локальной функции перехода, эти коэффициенты не зависят):

$$\begin{cases} C_L = \frac{v_L}{v_0}(C_s - C_0) \\ \frac{C_L - C_0}{L} = -\frac{C_L - 0}{l} \end{cases} \Rightarrow C_0 = \frac{C_s v_L \left(1 + \frac{L}{l}\right)}{v_0 \left(1 + \frac{v_L}{v_0} \left(1 + \frac{L}{l}\right)\right)}, \quad C_L = \frac{C_s v_L}{v_0 \left(1 + \frac{v_L}{v_0} \left(1 + \frac{L}{l}\right)\right)}. \quad (27)$$

При $v_L = v_0$ и $L/l = 240$ $C_0 = \frac{241}{242} C_s \approx C_s$, $C_L = \frac{1}{242} C_s \approx 0$, что почти не отличается от решения задачи Дирихле (23). Это показывает и КА-расчет с двумя разными postfix. Поэтому далее использовалась простая формула postfix: $u^{t+1}(x=0) = C_s = 6$, $u^{t+1}(x=L) = 0$.

Итак, решим ту же задачу с помощью простого автомата, заданного следующими условиями ($C_s \rightarrow 6$):

$$\begin{cases} \text{internal: } u^{t+1} = (1 - D_0)u^t + D_0 \frac{u_1^t + \dots + u_6^t}{6}, \\ \text{boundary: } u^{t+1} = (1 - \alpha D_0)u^t + \alpha D_0 \frac{u_1^t + \dots + u_n^t}{n}, \alpha \doteq \frac{n}{6}, \\ \text{postfix: } u^{t+1}(x=0) = 6, \quad u^{t+1}(x=L) = 0. \end{cases} \quad (28)$$

Здесь мы так же, как и в § 4, различаем ЛФП для внутренних и граничных (ячейка считается граничной, если в ее окрестности содержится $n < 6$ ячеек) ячеек, а также после каждого хода вводим для некоторых граничных ячеек postfix-процедуру.

Будем варьировать коэффициент D_0 и следить за экстрагированным коэффициентом D , который с точностью до пропорциональности должен быть ему равен. Как мы видим на рис. 5, чем меньше D_0 , тем короче переходный участок и тем меньше D , причем зависимость линейная: $D = \lambda D_0$, $\lambda = 0.7799$ ($0.7672 \div 0.7926$). Коэффициент наклона прямой брался с учетом дискретности поля КА и экстракции.

Уместно также рассмотреть динамику глобальной (по внутренним ячейкам, индексированным n) невязки, заданной по норме «бесконечность» формулой (29):

$$\nu(t) = \max_n \left| u^{t+1}(1 + D_0) - u^t - D_0 \frac{1}{6} \sum_i u_i^{t+1} \right|. \quad (29)$$

Мы видим (рис. 5), что при $D_0 \sim 0.1$ КА-решение успевает за динамикой реального решения, а вот уже при $D_0 \sim 0.3$ результаты искажаются. Невязка растет, по-видимому, экспоненциально с увеличением D_0 , а со временем она не падает до нуля, оставаясь на приемлемом для обычного вычислительного эксперимента уровне. Выбор порога связан с ожидаемой погрешностью КА-решения $\sim 1/240$.

Заключение

Сформулируем некоторые общие положения из нашей попытки рассмотреть КА (с непрерывными значениями) как метод вычислительной математики.

- *Функционирование КА с непрерывными значениями целиком и полностью лежит в области конечно-разностных методов.* Значение сеточной функции в узле тождественно состоянию ячейки, ассоциированному с ее геометрическим центром. Шаблон окрестности тождественен пространственной схеме/шаблону численного метода. ЛФП КА трактуется как связь между временными слоями задачи.

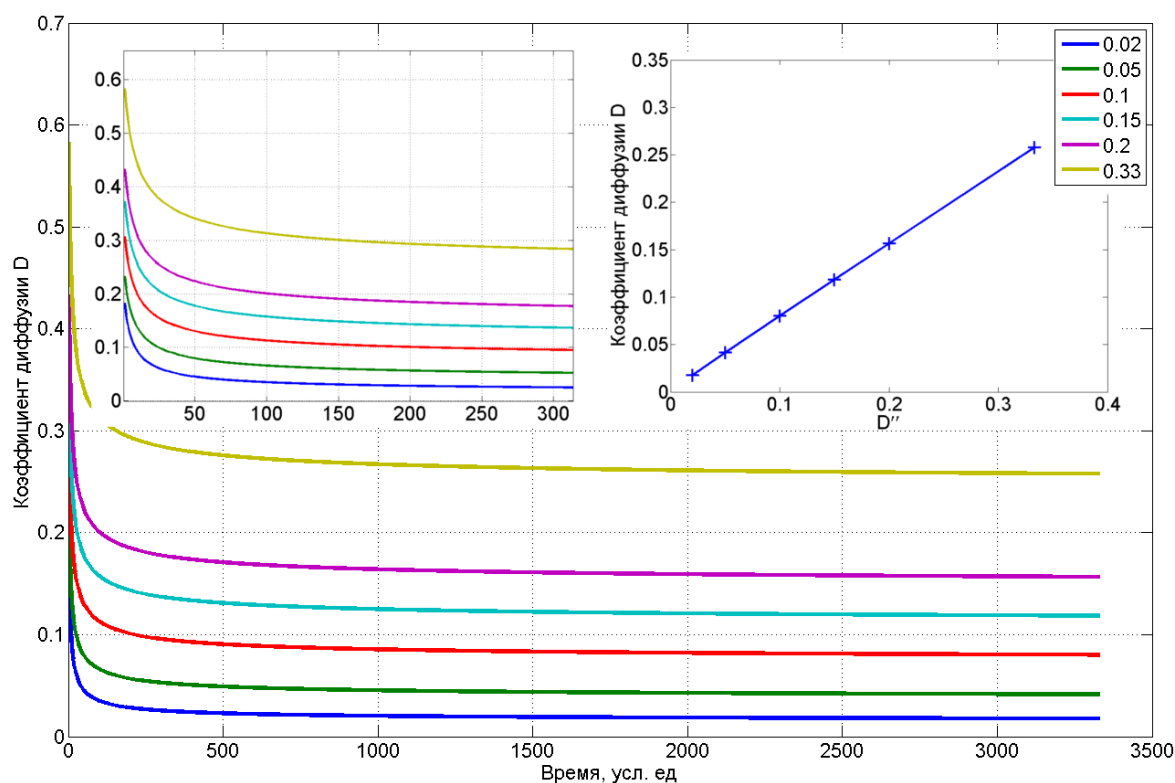


Рис. 5. Безразмерный коэффициент диффузии D , экстрагированный из данных КА-расчета (28) с учетом (22): параметрическая зависимость от $D_0 \equiv D''$. Вклейки: слева — начальный участок, справа — линейная связь D , экстрагированного из последней точки графика (она принадлежит стадии (а)), и D_0 . При идеальном решении мы должны получать горизонтальные линии (цветная версия рисунка доступна в электронной версии статьи на сайте журнала)

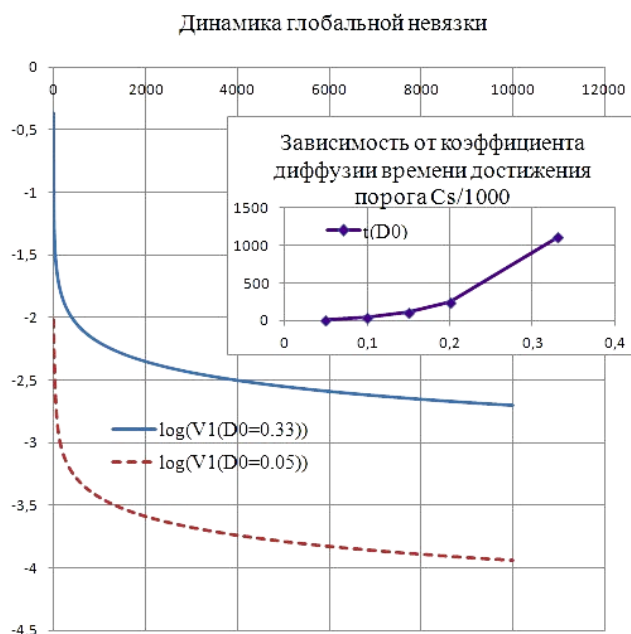


Рис. 6. Динамика изменения невязки для двух значений коэффициента D_0 в ходе КА-расчета (см. рис. 5). Построен десятичный логарифм. Вклейка: параметрическая зависимость от D_0 времени достижения некоторого порога ($C_s/1000$, $C_s = 6$)

- Существует как формальная, так и неформальная специфика КА-методов как численных. Эта специфика лежит вне магистральных направлений развития современных численных методов. КА-решение уравнений математической физики рассматривается нами как только прямое (не путать с прямыми численными методами); пример опосредованного решения — метод разделения переменных, где задача сводится к решению матричной задачи, которая теоретически разрешима с помощью КА. Если говорить об ограничениях, то, например, мы не можем сгущать или разрезать сетку, КА-сетка всегда однородна, в том числе и по форме ячеек. Используются преимущественно явные методы, а неявные методы допустимы, только если значение функции на следующем временном шаге достаточно просто выражается через значения на текущем шаге. С формальной точки зрения мы не можем использовать трехслойные схемы, т. е. классический КА определяется как КА без памяти (однако можно записать дифференциальное уравнение как систему векторных уравнений первого порядка). И самое главное различие: в обычной практике схема метода, записанная для каждой точки, приводит к решению системы линейных уравнений, а в КА та же схема задает итерационный процесс (что встречается гораздо реже). При этом класс используемых КА чаще всего оказывается полутоталистичным или тоталистичным; обратим внимание, что наиболее исследованные КА с дискретными значениями именно из этого класса, и этот факт должен быть осмыслен.
- Влияние граничных условий, обеспечение законов сохранения (если они отвечают физическому содержанию задачи), вид и смысл соотношения Куранта гораздо более значимы для КА-схем, хотя все эти вопросы и так стоят перед обычными численными методами. Большая часть статьи была посвящена этому. Если раньше мы подчеркнули сходство уравнений математической физики, то сейчас следует отделить краевую задачу для уравнения Лапласа (или уравнения Гельмгольца, порожденного разделением переменных в волновом уравнении и тесно связанного с так называемыми спектральными задачами) от динамических задач Коши для диффузионного и волнового уравнений с начальными условиями по времени (и краевыми по пространству). В первом случае стационарное распределение есть результат эволюции КА к неизменной конфигурации, а способ сходимости может варьироваться; самым простым КА-способом предполагается диффузионный путь. Во втором случае в уравнении присутствуют переменные величины (либо введенные извне, либо являющиеся производными по времени от самих фазовых переменных), и тогда характерное время сходимости КА к новому квазистационарному состоянию, даже если оно близко к предыдущему, должно быть меньше характерного времени изменения этих переменных. Специфика КА-схем, характерная для предыдущего случая, теряется, так как ЛФП, как и любая численная схема, обязана вычислять значение на следующем слое (однако отличие от неявных методов сохраняется — мы не можем, например, явным порядком ввести даже лапласиан узла на следующем слое и решать какие-то системы уравнений). Напомним, что физически критерий Куранта–Фридрихса–Леви означает, что частица жидкости за один шаг по времени не должна продвинуться больше чем на один пространственный шаг [Флетчер, 1991].
- Эффект избыточной гексагональной симметрии скорее есть свойство самой гексагональной решетки, чем свойство самого метода, конечно-разностного или клеточно-автоматного. ИГС возникает и там и там. В действительности иногда даже при хорошей схеме КА с блочно-поворотным механизмом в центре возникают изолинии в виде гексагональной формы и небольшого размера, которые, расширяясь, утрачивают эту форму и становятся окружностями. Иными словами, роль КА-схемы состоит в том, чтобы не дать развиваться всегда имеющему место ИГС, подавить его. В качестве пояснения в ИГС можно заметить, что гипотетический «зародыш» в какой-либо одной ячейки будет в случае квадратной решетки «скругляться» быстрее, чем на окаймляющих ее поясах гексагональной решетки. Возможно, объяснение связано с тем, что вер-

тикально расположенный гексагон порождает горизонтально расположенные блоки, и наоборот.

Проведенный анализ не является исчерпывающим, приводимые нами конкретные физические задачи и КА-алгоритмы их решения, которые мы брали наиболее простейшими (например, ограничивались схемами первого порядка и радиусом окрестности, меньшим 2), не покрывают всего многообразия вариантов.

Список литературы (References)

- Аристова Е. Н., Байдин Д. Ф.* Экономичный метод решения уравнения переноса в 2D цилиндрической и 3D гексагональной геометриях для метода квазидиффузии // Компьютерные исследования и моделирование. — 2011. — Т. 3, № 3. — С. 279–286.
Aristova E., Baidin D. Ekonomichnyi metod resheniya uravneniya perenosa v 2D cilindricheskoi i 3D geksagonalnoi geometriyah dlya metoda kvazidiffuzii // Computer Research and Modeling. — 2011. — Vol. 3, no. 3. — P. 279–286 (in Russian).
- Гаврилов С. В., Матюшкин И. В.* Статистический анализ блочно-поворотного механизма Марголуза в клеточно-автоматной модели диффузии в среде с дискретными особенностями // Компьютерные исследования и моделирование. — 2015. — Т. 7, № 6. — С. 1155–1177.
Gavrilov S., Matyushkin I. Statisticheskii analiz blochno-povorotnogo mehanizma Margolusa v kletочно-avtomatnoi modeli diffuzii v srede s diskretnymi osobennostyami // Computer Research and Modelling. — 2015. — Vol. 7, no. 6. — P. 1155–1177 (in Russian).
- Губарев С. В., Берг Д. Б., Добряк П. В.* Математическая модель и численный метод для решения задач диффузии и теплопроводности // Современные проблемы науки и образования. — 2013. — № 6.
Gubarev S., Berg D., Dobryak P. Matematicheskaya model' i chislennyi metod dlya reshenia zadach diffuzii i teploprovodnosti // Sovremennye problemy nauki i obrazovaniya. — 2013. — No. 6 (in Russian).
- Ефимов А. М.* Гексагональная система координат в конструкторско-технологическом проектировании электронных устройств // Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук: 05.12.04. КГТУ им. А. Н. Туполева. — Казань, 2005. — С. 139.
Efimov A. Geksagonal'naya sistema koordinat v konstruktorsko-tehnologicheskoy proektirovani elektronnykh ustroystv // Dissertatsiya na soiskanie stepeni kandidata tehnikeskikh nauk: 05.12.04. KG TU im. A. N. Tupoleva. — Kazan', 2005. — P. 139 (in Russian).
- Кондаков В. Г.* Обобщение схемы Кабаре на многомерные уравнения газовой динамики: Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук // М.: ВМК МГУ, 2014. — С. 20.
Kondakov V. Obobshchenie shemy Kabare na mnogomernye uravneniya gazovoi dinamiki: Avtoreferat dissertatsii na soiskanie uchenoi stepeni kandidata fiziko-matematicheskikh nauk // Moscow: VMK MGU, 2014. — P. 20 (in Russian).
- Красников Г. Я.* Конструктивно-технологические особенности субмикронных МОП-транзисторов. — В 2-х частях. — М.: Техносфера, 2004. — С. 510, 536.
Krasnikov G. Konstruktivno-tehnologicheskie osobennosti submikronnykh MOP-transistorov. — V 2-h chast'ah. — Moscow: Technosphere, 2004. — P. 510, 536 (in Russian).
- Красников Г. Я., Зайцев Н. А., Матюшкин И. В., Коробов С. В.* Особенности визуализации клеточных автоматов в области наноэлектроники // Компьютерные исследования и моделирование. — 2012. — Т. 4, № 4. — С. 735–756.
Krasnikov G., Zaicev N., Matyushkin I., Korobov S. Osobennosti vizualizatsii kletochnykh avtomatov v oblasti nanoelektroniki // Computer Research and Modelling. — 2012. — Vol. 4, no. 4. — PP. 735–756 (in Russian).
- Курант Р., Фридрихс К., Леви Г.* О разностных уравнениях математической физики / Пер. с немецкого В. И. Соболева // УМН. — 1941. — Вып. 8. — С. 125–160.
Courant R., Friedrichs K., Lewy H. Uber die partiellen Differentialgleichungen der mathematischen Physik // Math. Annalen. — 1928. — Vol. 100. — P. 32–74.
- Лебедев В. И.* О задачах Дирихле и Неймана на треугольных и шестиугольных сетках // Доклады Академии наук СССР. — 1961. — Т. 138, № 1. — С. 33–36.
Lebedev V. I. O zadachah Dirihle i Nejmana na treugol'nykh i shestiuhol'nykh setkah // Doklady Akademii nauk SSSR. — 1961. — Vol. 138, no. 4. — P. 33–36 (in Russian).

- Лобанов А. И. Модели клеточных автоматов // Компьютерные исследования и моделирование. — 2010. — Т. 2, № 3. — С. 273–293.
Lobanov A. Modeli kletochnyh avtomatov // Computer Research and Modelling. — 2010. — Vol. 2, no. 3. — P. 273–293 (in Russian).
- Малинецкий Г. Г., Степанцов М. Е. Моделирование диффузионных процессов с помощью клеточных автоматов с окрестностью Марголуса // Вычислительная математика и математическая физика. — 1998. — Т. 38.
Malineckii G., Stepanov M. Modelirovanie diffuzionnyh processov s pomoshch'u kletochnyh avtomatov s okrestnost'u Margolusa // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 1998. — Vol. 38.
- Ребенок Е. Н., Зуева Л. М., Могиленских Д. В., Фёдорова Т. Б. Методы и параллельная программа «ФРЕГАТ» распределения веществ в смешанных ячейках расчетных сеток // International Conference “Parallel and Distributed Computing Systems” (PDCS–2013). — Украина, Харьков. — 13–14 марта 2013 г. — С. 257–265.
Reb'onok E., Zueva L., Mogilenskih D., F'odorova T. Metody i parallel'naya programma “FREGAT” raspredeleniya veshchestv v smeshannyh yacheikah raschetnyh setok // International Conference “Parallel and Distributed Computing Systems” (PDCS–2013). — Ukraine, Kharkiv. — March 13–14, 2013. — P. 257–265 (in Russian).
- Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкостей. — М.: Мир, 1991.
Fletcher C. Computational Technics for Fluid Dynamics. — Moscow: Mir, 1991 (in Russian).
- Agraval S. Design and analysis of hexagonal shaped fractal Antennas // Master's thesis, National Institute of Technology, Rourkela (Deemed University), India. — 2013. — P. 82.
- Allen J. D. Filter Banks for Images on Hexagonal Grid, 1997, 2003 [Электронный ресурс]. URL: <http://fabpedigree.com/Tech/hexim1.htm> (дата обращения: 2.04.2016).
- Andallah L. S. On the Generation of a Hexagonal Collision Model for the Boltzmann Equation // Computational methods in applied mathematics. — 2004. — Vol. 4, no. 3. — P. 271–289.
- Andallah L. S. A hexagonal collision model for the numerical solution of the Boltzmann equation // Dissertation Technischen Universität Ilmenau. — April 2005. — P. 146.
- Bialynicki-Birula I. Weyl, Dirac, and Maxwell equations on a lattice as unitary cellular automata // Physical Review D. — 1994. — Vol. 49. — P. 6920–6927.
- Brio M., Zakharian A. R., Webb G. M. Numerical Time-Dependent Partial Differential Equations for Scientists and Engineers. — Elsevier Inc., 2010. — P. 306.
- Cameron's Antipode Page [Электронный ресурс]. URL: <http://www.cameronius.com/games/antipod/> (дата обращения: 10.03.2016).
- Carlson E. S., Sun H., Smith D. H., Zhang J. Second Order Accuracy of the 4-Point Hexagonal Net Grid Finite Difference Scheme for Solving the 2D Helmholtz Equation // University of Kentucky, Lexington, Department of Computer Science. — 2003. — Technical Report No. 378-03. — P. 12.
- Collins S. N., James R. S., Ray P., Chen K., Lassman A., Brownlee J. Grids in Numerical Weather and Climate Models // Climate Change and Regional/Local Responses. — 2013. — Ch. 4. — P. 111–128.
- Dosiyev A. A., Celiker E. Approximation on the hexagonal grid of the Dirichlet problem for Laplace's equation // Boundary Value Problems. — 2014. — P. 2014–2073.
- Dosiyev A. A., Celiker E. A fourth order block-hexagonal grid approximation for the solution of Laplace's equation with singularities // Advances in Difference Equations. — 2015. — Vol. 59. — P. 17.
- Fabero J. C., Bautista A., Casasús L. An explicit finite differences scheme over hexagonal tessellation // Applied Mathematics Letters. — 2001. — Vol. 14, issue 5. — P. 593–598.
- Fei X., Xiaohong T., Xianjing Zh. The Construction of Low-Dispersive FDTD on Hexagon // IEEE transactions on antennas and propagation. — 2005. — Vol. 53, no. 11. — P. 3697–3702.

- Hamilton B., Bilbao S.* Hexagonal vs. Rectilinear Grids for Explicit Finite Difference Schemes for the Two-dimensional Wave Equation // 21st International Congress on Acoustics, Montréal, Canada. — 2013. — P. 9.
- Hamilton B., Bilbao S.* On Finite Difference Schemes for the 3-D wave Equation Using non-cartesian grids // Proceedings of Stockholm Musical Acoustics Conference/Sound and Music Computing Conference, Stockholm, Sweden. — 16 January 2014. — P. 8.
- Hamilton B., Torin A.* Finite difference schemes on hexagonal grids for thin linear plates with finite volume boundaries // Proceedings of the 17th Int. Conference on Digital Audio Effects (DAFx-14), Erlangen, Germany. — September 1–5, 2014. — P. DAFX1-8.
- Jahangir M., Sudhakar S.* Design and Analysis of Matrices for Two Dimensional Cellular Automata Linear rules in Hexagonal Neighborhood // *Mathematica Aeterna*. — 2011. — Vol. 1, no. 08. — P. 537–545.
- Janowicz M. W., Ashbourn J. M. A., Orłowski A., Mostowski J.* Cellular automaton approach to electromagnetic wave propagation in dispersive media // Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, The Royal Society. — 2006. — Vol. 462, no. 2074. — P. 2927–2948.
- Jiang Q.* FIR Filter Banks for Hexagonal Data Processing // *IEEE Transactions on Image Processing*. — Sept. 2008. — Vol. 17, issue 9. — P. 1512–1521.
- Karaa S.* High-Order Approximation of 2D Convection-Diffusion Equation on Hexagonal Grids // *Wiley InterScience: Numerical Methods for Partial Differential Equations*. — 2006. — P. 1238–1246.
- Lax P. D.* A stability theorem for solutions of abstract differential equations, and its application to the study of the local behavior of solutions of elliptic equations // *Communications on Pure and Applied Mathematics*. — 1956. — Vol. 9, issue 4. — P. 747–766.
- Lax P. D., Wendroff B.* Systems of conservation laws // *Communications on Pure and Applied Mathematics*. — 1960. — Vol. 13, issue 2. — P. 217–237.
- Martinez G. J., Adamatzky A., McIntosh H. V.* Localization dynamics in a binary two-dimensional cellular automaton: the Diffusion Rule // *Journal of Cellular Automata*. — 2010. — Vol. 5. — P. 289–313.
- Mathis A., Stemmler M. B., Herz A. V. M.* Probable nature of higher-dimensional symmetries underlying mammalian gridcell activity patterns // *Computational and systems biology. Neuroscience*. — 24 April 2015. — P. 1–19.
- Ostrov D. N., Rucker R.* Continuous-valued cellular automata for nonlinear wave equations // *Complex systems*. — 1996. — Vol. 10, no. 2. — P. 91–120.
- Perinet N., Juric D., Tuckerman L. S.* Numerical simulation of Faraday waves // *Cambridge University Press, J. Fluid Mech.* — 2006. — Vol. 635. — P. 1–26.
- Rucker R.* Continuous-valued cellular automata in two dimensions // in book “New Constructions in Cellular Automata”, ed. by D. Griffeath, C. Moore Oxford University Press, Oxford. — 2003. — P. 295–316.
- Sadourny R., Morel P.* A finite-difference approximation of the primitive equations for a hexagonal grid on a plane // *Monthly Weather Review*. — June 1969. — Vol. 97, no. 6. — P. 439–445.
- Simons N., Bridges G. E., Cuhaci M.* A Lattice Gas Automaton Capable of Modeling Three-Dimensional Electromagnetic Fields // *Journal of Computational Physics*. — 20 May 1999. — Vol. 151, issue 2. — P. 816–835.
- Stempkovsky A. L., Vlasov P. A., Kozin G. V.* Algorithmic Environment for VLSI Design on Cellular Automata // Proceedings of a Joint Symposium : Information Processing and Software, Systems Design Automation, Academy of Sciences of the USSR, Siemens AG, FRG, Moscow, Springer-Verlag. — 5–6 June 1990. — P. 308–312.

- Sukumar N., Bolander J. E.* Numerical Computation of Discrete Differential Operators on Non-Uniform Grids // Computer Modeling in Engineering & Sciences. — 2003. — Vol. 4, no. 6. — P. 691–706.
- Toffoli T.* Cellular automata as an alternative to (rather than approximation of differential equations in modeling physics // Physica D. — 1984. — Vol. 10. — P. 117–127.
- Tulleken H.* Facts About Hex Grids [Электронный ресурс]. URL: http://www.gamasutra.com/blogs/HermanTulleken/20140912/225495/20_Fun_Grid_Facts_Hex_Grids.php (дата обращения: 13.04.2016).
- Tyler T.* The Q*Bert neighbourhood [Электронный ресурс]. URL: <http://www.cell-auto.com/neighbourhood/qbert/index.html> (дата обращения: 13.04.2016).
- Ulam S.* Random processes and transformations // In Proceedings of the International Congress of Mathematicians (Cambridge, Massachusetts, August 30–September 6, 1950): Providence, Rhode Island: American Mathematical Society, 1952. — Vol. 2. — P. 264–75.
- Vick B.* Multi-physics modeling using cellular automata // Complex Systems. — 2007. — No. 17. — P. 65–78.
- Wagner M., Viswanathan V., Pelzer D., Berger M., Aydt H.* Cellular Automata-based Anthropogenic Heat Simulation // Procedia Computer Science (ICCS 2015 International Conference On Computational Science). — 2015. — Vol. 51. — P. 2107–2116.
- Weimar J. R.* Cellular automata for reaction-diffusion systems // Parallel computing. — 1997. — Vol. 23, no. 11. — P. 1699–1715.
- Zamani-Aghaie K., Fan Sh., Dignonnet M. J. F.* Birefringence Analysis of Photonic-Bandgap Fibers Using the Hexagonal Yee's Cell // IEEE Journal of Quantum Electronics, June 2010. — Vol. 46, no. 6. — P. 920–930.
- Zhou G., Fulton S. R.* Fourier Analysis of multigrid methods on hexagonal grids // SIAM J. Sci. Comput. — 2009. — Vol. 31, no. 2. — P. 1518–1538.
- Zuse K.* Calculating Space // MIT Technical Translation, Cambridge. — 1969. — P. 74.

Приложение

Вывод формулы для граничной ЛФП (20)

Известно, что уравнение диффузии (без ограничения общности — уравнение переноса) является следствием двух математических выражений: 1) уравнения непрерывности; 2) предположения, что поток вещества пропорционален градиенту концентраций (закон Фика). Если выделить небольшой объем вещества, то первое выражение есть, по сути, закон сохранения вещества: «приращение/убыль количества вещества в объеме есть сумма входящих и выходящих потоков». Суммируются же потоки по каждой грани объема. Второе выражение есть частный случай вычитания из потока вовнутрь (+) потока вовне (–), каждый из которых пропорционален концентрации с некоторой константой, которая считается одинаковой в законе Фика для определенной грани. Таким образом, в привычных обозначениях (c — концентрация, i — номер соседа, или, точнее, номер интерфейса/грани, t — номер шага, оно же время) запишем (П1), рис. П1:

$$\begin{cases} c^{t+1} = c^t + \alpha \sum_{i=1}^n (j_+ - j_-)_i, \\ j_{+i} = a_i c_i^t, \quad j_{-i} = b_i c^t \end{cases} \Rightarrow c^{t+1} = c^t \left(1 - \alpha \sum_{i=1}^n b_i \right) + \alpha \sum_{i=1}^n a_i c_i^t. \quad (\text{П1})$$

В однородном пространстве, очевидно, $a_i \doteq b_i = a$, и, соответственно, ЛФП для внутренних ячеек имеет вид

$$\left\{ c^{t+1} = c^t (1 - \alpha n a) + \alpha n a \cdot \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n c_i^t, \quad D' \equiv \alpha n a \right\} \Rightarrow (7). \quad (\text{П2})$$

Для граничных ячеек на гексагональном поле имеется меньшее число соседей $m < n$, $n = 6$, и для каждой из $(n - m)$ ячеек полагается $a = b = 0$. Пусть $k = m / n$, тогда перепишем (П2) в виде (П3):

$$\left\{ c^{t+1} = c^t (1 - k D') + k D' \cdot \frac{1}{6} \sum_{i=1}^n c_i^t, \quad D' \equiv 6 \alpha a \right\} \Rightarrow (k \equiv \alpha) \Rightarrow (20). \quad (\text{П3})$$

Напомним только, что коэффициент переноса α должен быть мал по сравнению с единицей.

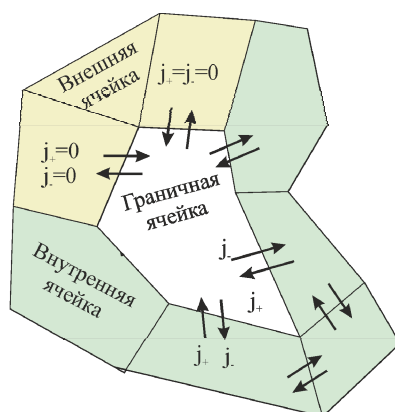


Рис. П1. Ячейки и потоки КА