

УДК: 519.63:621.382

## Клеточно-автоматные методы решения классических задач математической физики на гексагональной сетке. Часть 2

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 06.03.2017, после доработки — 07.07.2017.*

*Принято к публикации 14.07.2017.*

Во второй части статьи, носящей более прикладной характер, завершается рассмотрение трех классических уравнений математической физики (Лапласа, диффузии и волнового) простейшими численными схемами в формулировке клеточных автоматов (КА). На нескольких примерах, относящихся к гексагональной сетке, показана специфика такого решения и подтверждаются выводы первой части, в частности о выполнении свойства консервативности и эффекте избыточной гексагональной симметрии (ИГС).

При решении задачи Неймана для колебаний круглой мембраны показана критичность требований к дискретизации условий для граничных КА-ячеек. Для квазиодномерной задачи «диффузия в полупространство» сравниваются КА-расчеты, проводимые по простой схеме и с использованием обобщенного блочно-поворотного механизма Марголуca. При решении смешанной задачи для классического случая колебания круглой мембраны с закрепленными концами показано, что одновременное применение метода Кранка–Николсон и учет членов второго порядка позволяет избежать ИГС-эффекта, наблюдаемого нами для более простой схемы. С точки зрения КА центральное место занимает уравнение диффузии, на пути решения которого на бесконечных временах находится решение краевой задачи для уравнения Лапласа, а путем введения вектор-переменной становится разрешимо волновое уравнение (по крайней мере скалярное).

На примере центрально-симметричной задачи Неймана продемонстрирован новый способ введения пространственных производных в postfix-процедуру КА, отражающую временные производные (основанием является уравнение непрерывности). Для случая центральной симметрии эмпирически найдено значение константы, связывающее эти производные. Показано, что препятствием к применению КА-методов для таких задач являются низкая скорость сходимости и точность, лимитируемая точностью дискретизации границ, а не формальной точностью метода (4-й порядок); наша рекомендация состоит в использовании техники multigrid. При решении квазиодномерного уравнения диффузии (двумерным КА) показано, что блочно-поворотный КА (по механизму Марголуca) более эффективен, чем простой КА.

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

Работа выполнена в рамках НИР «Исследование перспективных моделей вычислений и реализующих их архитектур высокопроизводительных информационно-вычислительных комплексов нового поколения» по Программе фундаментальных исследований ОНИТ 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 2

I. V. Matyushkin

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

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

E-mail: imatyushkin@mikron.ru

*Received 06.03.2017, after completion — 07.07.2017.*

*Accepted for publication 14.07.2017.*

The second part of paper is devoted to final study of three classic partial differential equations (Laplace, Diffusion and Wave) solution using simple numerical methods in terms of Cellular Automata. Specificity of this solution has been shown by different examples, which are related to the hexagonal grid. Also the next statements that are mentioned in the first part have been proved: the matter conservation law and the offensive effect of excessive hexagonal symmetry.

From the point of CA view diffusion equation is the most important. While solving of diffusion equation at the infinite time interval we can find solution of boundary value problem of Laplace equation and if we introduce vector-variable we will solve wave equation (at least, for scalar). The critical requirement for the sampling of the boundary conditions for CA-cells has been shown during the solving of problem of circular membrane vibrations with Neumann boundary conditions. CA-calculations using the simple scheme and Margolus rotary-block mechanism were compared for the quasioone-dimensional problem “diffusion in the half-space”. During the solving of mixed task of circular membrane vibration with the fixed ends in a classical case it has been shown that the simultaneous application of the Crank–Nicholson method and taking into account of the second-order terms is allowed to avoid the effect of excessive hexagonal symmetry that was studied for a simple scheme.

By the example of the centrally symmetric Neumann problem a new method of spatial derivatives introducing into the postfix CA procedure, which is reflecting the time derivatives (on the base of the continuity equation) was demonstrated. The value of the constant that is related to these derivatives has been empirically found in the case of central symmetry. The low rate of convergence and accuracy that limited within the boundaries of the sample, in contrary to the formal precision of the method (4-th order), prevents the using of the CA-methods for such problems. We recommend using multigrid method. During the solving of the quasi-diffusion equations (two-dimensional CA) it was showing that the rotary-block mechanism of CA (Margolus mechanism) is more effective than simple CA.

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

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2017, vol. 9, no. 4, pp. 547–566 (Russian).

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.

В первой части статьи рассматривалось решение уравнения Лапласа и диффузии простым клеточным автоматом (КА). На ее базе мы рассмотрим другие тестовые задачи, прежде всего центрально-симметричные задачу Неймана и задачу о колебаниях мембраны с закрепленными концами. Кроме того, покажем преимущество КА с обобщенным блочно-поворотным механизмом (КА ОБПМ) Марголуса для задач первой части статьи.

## 1. КА ОБПМ в задачах диффузии (А и В)

Для решения диффузионных задач (точные формулировки задачи А и В даны в первой части) нами использовался обобщенный блочно-поворотный механизм Марголуса (ОБПМ) [Гаврилов, Матюшкин, 2015]. Напомним, что в нем поле КА разбивается на непересекающиеся блоки, разбиение зависит от номера хода с некоторым периодом, а локальная функция перехода (ЛФП) задается для всего блока и представляется композицией обменов между центральной и периферийной ячейками блока и поворота, т. е. циклической перестановкой состояний соседних периферийных ячеек. Если дать номер 0 центральной ячейке блока, а номера от 1 до 6 — другим ячейкам блока, то многообразие вариантов смещения разбиения и порядка взаимодействий «центр–периферия» можно задавать шаблоном-структурой. Интенсивность обмена «центр–периферия» в ЛФП представлена коэффициентом микродиффузии  $D_0$ :  $C_i^{t+1} := C_i^t + D_0 (C_0^t - C_i^t)$ ,  $i = 1, 2, \dots, 6$ . По умолчанию взято  $D_0 = 1/3$ . В обычных вариантах БПМ дискретных КА для отсылки к физическому коэффициенту диффузии используются вероятности поворотов и обменов. Параболический аналог числа Куранта  $D'$ , легко получающийся из размерного коэффициента диффузии, и коэффициент микродиффузии  $D_0$  для простого КА (см. (28) первой части) были практически тождественны. Однако для описания диффузии через КА ОБПМ недостаточно задать  $D_0$ , требуется задать режимы поворота и режимы обмена (через некоторую шаблон-структуру или формулу  $\gamma = \{A, \dots, E\}$  [Гаврилов, Матюшкин, 2015]), т. е.  $D' = D'(D_0, \gamma)$ . Для классического автомата Марголуса [Toffoli, 1984] с бинарными значениями и прямоугольной сеткой выполняется соотношение [Малинецкий, Степанцов, 1998]: для размерностей пространства 1, 2, 3 соответственно  $D' / D_0 \equiv \lambda = 1, 3/2, 23/18$  (в явном виде коэффициент микродиффузии не вводится, но можно считать его равным 1). Заметим, что в КА ОБПМ консервативность системы легко и естественно достигается следующим граничным условием: если ячейка не принадлежит блоку, то ее значение сохраняется.

Даже для достаточно «хороших» формул эффект избыточной гексагональной симметрии (ИГС), хотя подчас и в ослабленном виде, имеет место в задаче А (рис. 1). В задаче А требование свойства центральной симметрии задачи заставляет отбирать формулы  $\gamma$ . В задаче В требование однородности фронта диффузионной волны (по оси ординат возможна по краям выпуклость фронта вправо) является фильтром для подходящих вариантов. Так, из детерминированных шаблон-структур нам удалось найти только одну подходящую, с формулой  $.C = 0-1-0-2-0-3-0-4-0-5-0-6$  (смещение центра блока),  $.D = 0-6-4-2$  (обмен только с тремя из шести периферийных ячеек),  $.E = 0$  (поворот не происходит). Все подходящие шаблон-структуры имеют в поле  $.D$  случайность перестановки (рис. 2).

Рассмотрим одну из «хороших» ОБПМ-схем для поля  $Y \times L = 24 \times 240$  (см. подпись к рис. 2, *c*). Пусть нумерация  $(x, y)$  ячеек КА идет по строкам  $1 \leq y \leq Y$  и столбцам  $0 \leq x \leq L$  ( $l = 1, \tau = 1$ ) и значения аналитического решения для стадии (а) и для стадии (с) обозначаются как  $C_{diff}^t(x, y) \cong C_{diff}^t(x) \sim \text{erfc}(\bullet)$ ,  $C_{diff}^\infty(x, y) \cong C_{diff}^\infty(x) = C_s \left(1 - \frac{x}{L}\right)$  и не зависят, по предположению, от координаты  $y$ . Если бы размеры системы по ординате были бесконечными или, наоборот, составляли одну ячейку, тогда зависимость от  $y$  отсутствовала бы. Однако ОБПМ

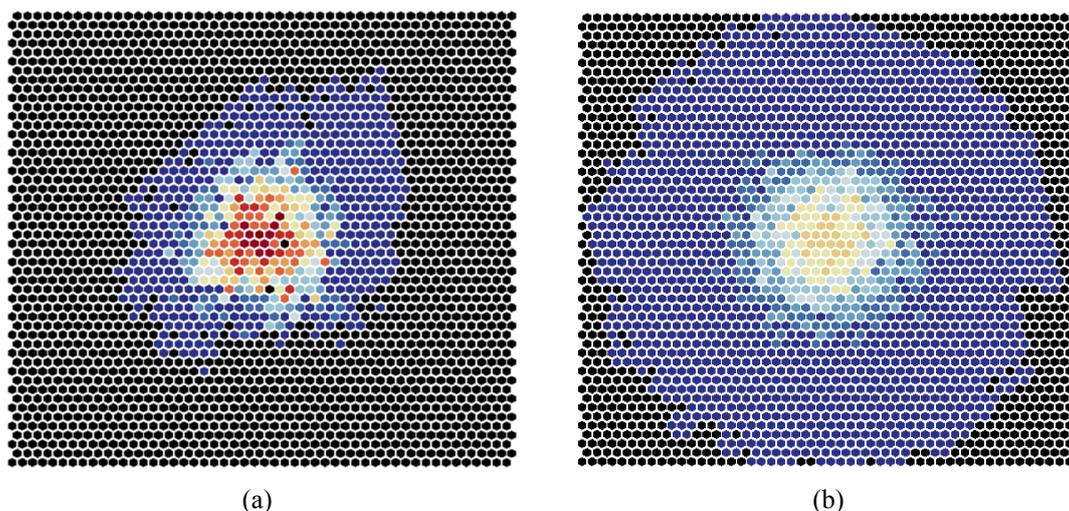


Рис. 1. Эффект избыточной гексагональной симметрии в задаче А: (а) КА ОБПМ размера  $50 \times 50$  с «плохой» формулой  $.C = 1-3-5-2-4-6$ ,  $.D = 0-6,4,5$ ,  $.E = +/-1$  (показан 15-й такт работы); (б) сохранение симметрии в КА ОБПМ размера  $50 \times 50$  с «хорошей» формулой  $.C = 1-2-3-4-5-6$ ,  $.D = 0-permut[1-6]$ ,  $.E = +/-1$  (показан 15-й такт работы)

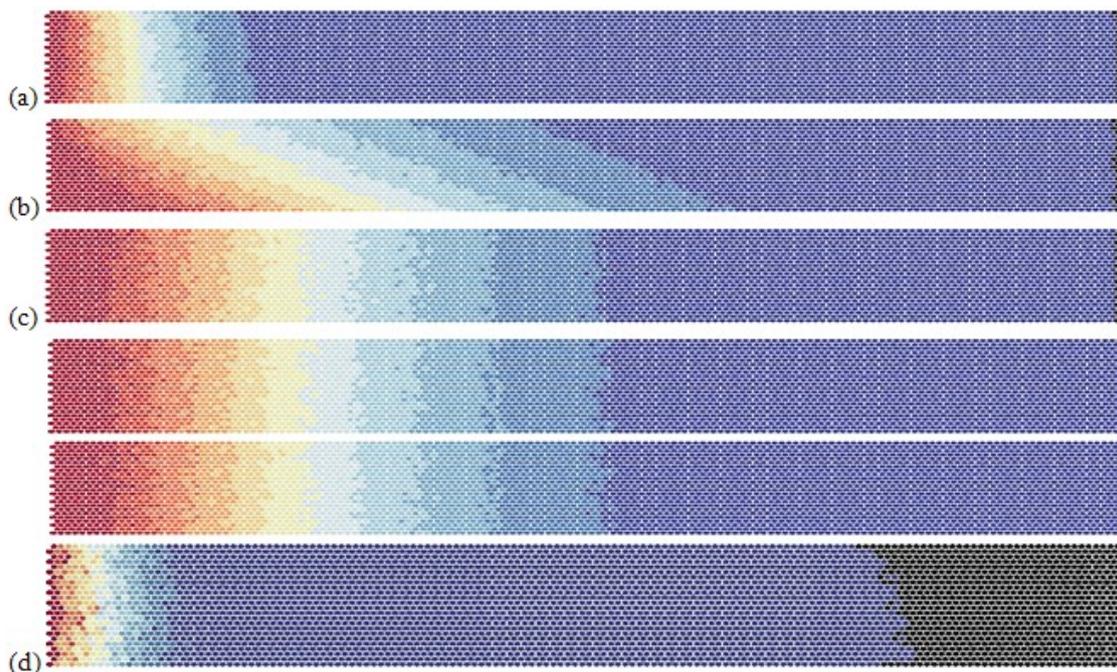


Рис. 2. Результаты применения разных формул ОБПМ в задаче В. Вещество диффундирует слева направо, состояние на 2000-й такт работы для поля  $24 \times 150$ . Коэффициент  $D_0 = 1/3$ . Цветная версия рисунка доступна в электронной версии статьи на сайте журнала. Большие концентрации показаны коричнево-красным (серым) цветом, средние — желтым (светлым), а меньшие — сине-черным (темным). а) Единственный подходящий детерминированный вариант; б) пример работы неудачной шаблон-структуры: смещение центра по схеме  $.C = 1/3/5-2/4/6$  (на нечетном шаге центр смещается случайно в 1, или 3, или 5, на четном — в 2/4/6); взаимодействие «центр–периферия» по схеме  $.D = 0-1-3-5$  (центр взаимодействует только с указанными тремя периферийными ячейками в указанном порядке);  $.E = -1$ ; в) три имплементации подходящей шаблон-структуры со случайностью:  $.C = 6-5-4-3-2-1$ ,  $.D = 0-permut[1-6]$  (центр реагирует с ячейками периферии в случайном порядке без повторов),  $.E = +/-1$  (поворот случайный на  $60^\circ$ ); д) после 100-го такта работы для шаблона:  $.C = 0-1-0-2-0-3-0-4-0-5-0-6$ ,  $.D = 0-permut[1-6]$ ,  $.E = +/-1$ , где видна начальная выпуклость фронта концентрационных волн

КА двумерный, моделирует диффузию в полосе, и слабая зависимость от  $y$  присутствует — из общезначимых соображений ожидается максимум концентрации в центре  $y \approx Y/2$  и минимум по краям; эти слабо выраженные экстремумы действительно различимы на рис. 2,  $d$ , но при наступлении стадии (с) они исчезают из-за стохастичности процесса. Поэтому примем, что такой КА моделирует одномерную задачу, введем среднюю концентрацию вещества по каждому столбцу  $C^t(x) = \frac{1}{Y} \sum_{y=1}^Y C^t(x, y)$  и за критерий останова возьмем выполнение неравенства

$$\max_x |C_{diff}^\infty(x) - C^t(x)| \leq \frac{C_s}{10Y}. \text{ Использование другого критерия — } \max_x |C^t(x) - C^{t-1}(x)| \leq \varepsilon, \text{ —}$$

не предполагающего знания о действительном решении, наталкивается на проблему останова, так как всегда существует разброс значений по столбцу, влияющий на среднее.

Основным вопросом исследования будет: а) хорошо ли аппроксимирует экспериментальная кривая теоретическую; б) какова связь при заданной формуле ОБПМ коэффициента обмена  $D_0$  и коэффициента  $D' \doteq D$ , экстрагируемого из расчетных кривых. Предлагаемая схема действительно (рис. 3) аппроксимирует одномерную диффузионную задачу. На рис. 3 показано мгновенное распределение концентрации вещества для стадии (а), когда концентрационный фронт еще не достиг конца поля. Мы видим хорошее совпадение (рис. 3) экспериментальной и теоретической ( $D = \text{const}$ ) кривых, хотя вправо были ожидать некоторого разброса из-за усреднения по координате  $y$ .

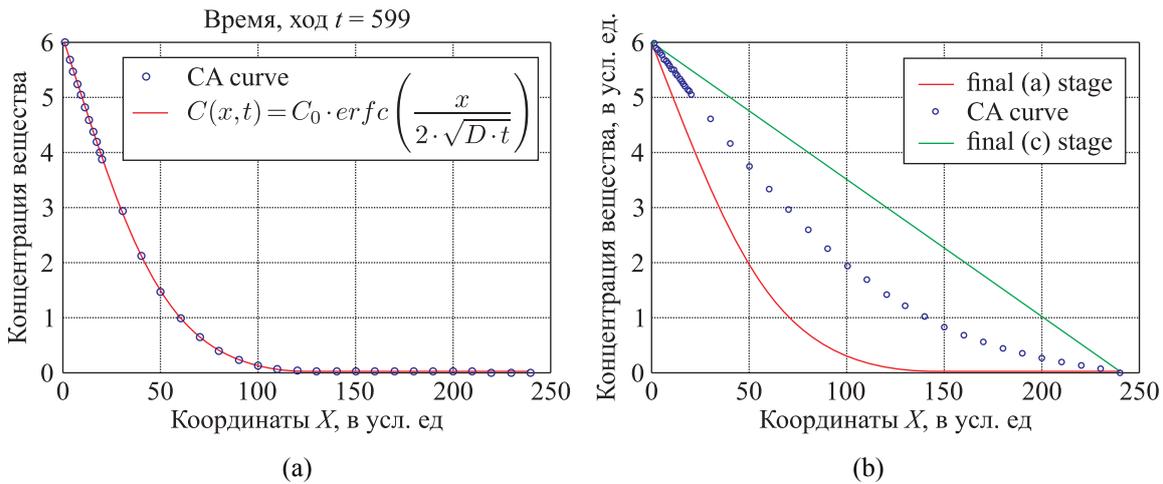


Рис. 3. Результаты тестовых расчетов КА ОБПМ на гексагональной сетке. Шаблон автомата:  $C = 1-2-3-4-5-6$ ,  $D = 0-\text{perm}[1-6]$ ,  $E = +/-1$ ,  $D_0 = 1/3$ . а) Для начальной стадии тестовой задачи; б) для конечной стадии перехода к линейной зависимости

На рис. 4 показана временная зависимость экстрагированного путем интерполяции из результатов КА-расчета коэффициента  $D$ . Для каждого мгновенного  $t = \text{const}$  состояния КА, выражаемого вектором  $C^t(0), \dots, C^t(L)$ , решалась оптимизационная задача на  $D$  для интерполянта в форме функции ошибок (22) с использованием MATLAB Curve Fitting Toolbox (при доверительной вероятности на уровне 95 % разброс значений  $D$  в узком диапазоне, например для момента достижения концентрационной волной правого конца поля, т. е.  $C^t(L = 240) > \varepsilon$ , рис. 7,  $b$ , при  $t \approx 2430 D = 1.549 \in [1.546; 1.552]$ ). Несмотря на непостоянство на начальном временном участке, далее  $D$  остается практически неизменным (отклонения не более  $\sim 1.5\%$ ).

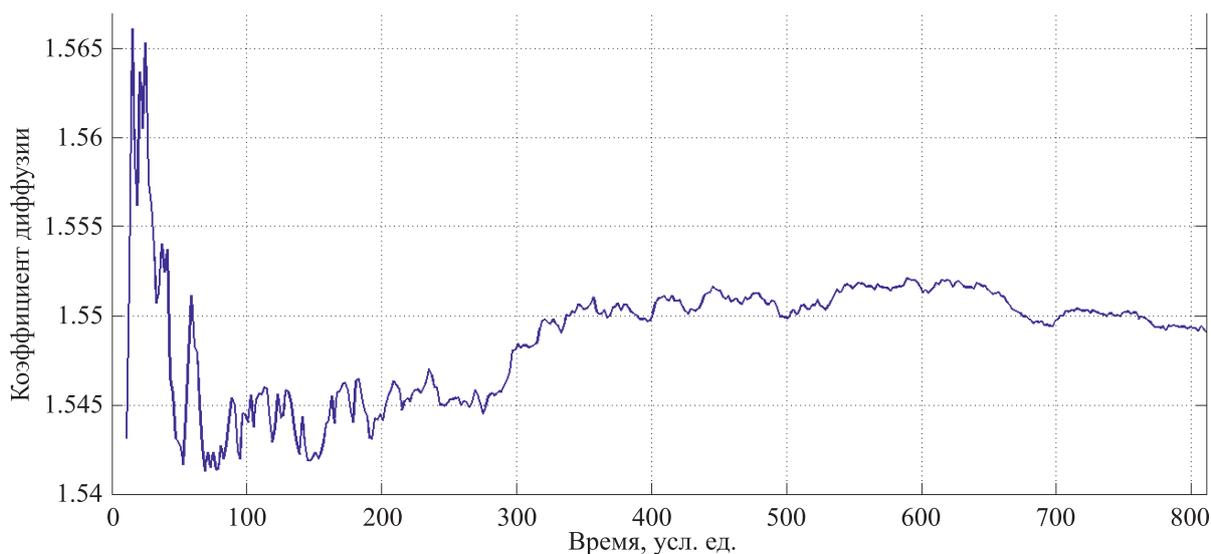


Рис. 4. Экстракция коэффициента диффузии  $D$  в условиях КА-симуляции рис. 3. Первые 5 измерений по времени (по тактам) исключены из рассмотрения. Конечная точка отвечает окончанию стадии (а). 1 усл. ед. соответствует 3 тактам работы КА

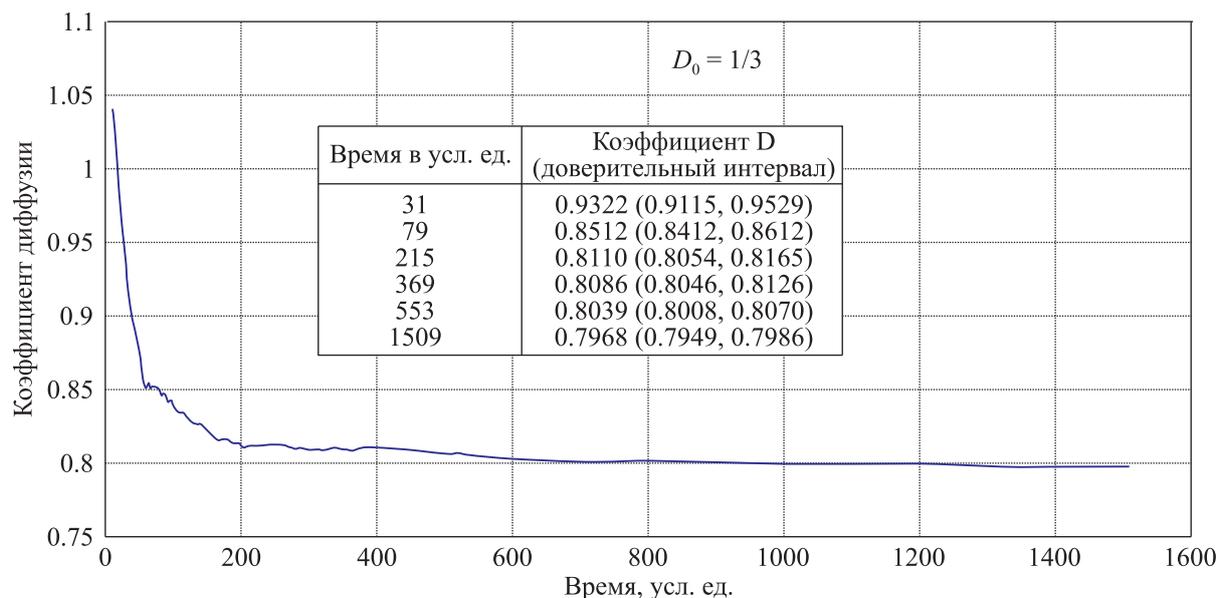


Рис. 5. Экстракция коэффициента диффузии  $D$  в условиях КА-расчета по шаблону  $C = 6-5-4-3-2-1$ ,  $D = 0 - (1/3/5)$ ,  $E = +1/-1$  и при коэффициенте  $D_0 = 1/3$ . Первые 5 измерений по времени (по тактам) исключены из рассмотрения. Конечная точка ( $t = 1509$  усл. ед.) отвечает окончанию стадии (а). 1 усл. ед. соответствует 3 тактам. Для некоторых точек показаны границы доверительного интервала для уровня 95 % (MATLAB Curve Fitting Toolbox)

Рассмотрим другую схему ОБПМ КА-симуляции, с более медленной диффузией (рис. 5). Отметим, что существует гораздо больший (ср. с рис. 4) по длине временной участок, где  $D$  определяется неверно (но даже при этом параметризация проводится с хорошей точностью, что указывает на правильность «диффузионного» вида интерполянта). И это выявляет общую проблему решения уравнения диффузии КА-методами. Ее причинами могут быть статистический разброс  $C'(x)$ , недостаточное число точек, где концентрация существенно отличается от нуля (что характерно для начального этапа расчета), а также, что, на наш взгляд, наиболее ве-

сомо, недостаточная скорость сходимости КА-итераций к точному решению. Не надо забывать, что макроскопическое уравнение диффузии и его классическое решение представляют ту кривую, которая меняется в физическом времени и которой старается достичь КА в своем итерационном времени, и важно соотношение этих характерных времен. Чем меньше квант времени КА, тем больше итераций дается КА, чтобы достичь искомого решения, и тем меньше значение  $D_0$ . Прослеживается явная связь с соотношением Куранта (1928), требующим также малости шага по времени для явных методов решения уравнения диффузии. Таким образом, смысл числа Куранта для КА-задач состоит в том, что скорость итерационного КА-процесса, в котором предшествующее значение состояния ячейки рассматривается как отклонение от действительного, должна превышать скорость обмена веществом между соседними ячейками. Если это условие не выполняется, то следует говорить об отсутствии аппроксимации КА-схемой решения нестационарной диффузионной задачи.

Сравним результаты КА ОБМП (рис. 2, *c*), наиболее очевидный и быстрый из всех вариантов «хороших» схем, с результатами [Малинецкий, Степанцов, 1998]. Значение  $\lambda = 1.55 \approx 3/2$ , т. е. квазиодномерная задача ближе к размерности 2. Если сравнить два КА-метода решения диффузионных задач, то блочный (-ые) автомат решает ее более быстро (по числу итераций), более точно (в отношении экстракции коэффициента макродиффузии), чем простой автомат. Однако связь коэффициентов  $D$  и  $D_0$  в первом случае неочевидна, тогда как для второго случая она линейна.

Это подкрепляют исследования КА ОБМП в условиях рис. 5 при коэффициентах обмена «центр–периферия»  $D_0 = 2/3$  и  $D_0 = 0.95$ . Выход на стационарное значение, которое оказывается меньшим в 2-3 раза, чем для  $D_0 = 1/3$ , происходит позднее, а на кривой наблюдается отчетливый шум. Как было показано в первой части, наиболее быстрая диффузия достигается при  $D_0 = 1/2$ , а при  $D_0 = 1$ , очевидно, невозможно получение промежуточных значений концентрации (только 0 или  $C_s$ ). Это и объясняет наблюдаемый шум на кривой для экстрагированного  $D$ .

## 2. Задача С: центрально-симметричная задача Неймана для двумерного уравнения Лапласа. Задание краевых условий

Напомним общую классификацию краевых условий для уравнений в частных производных:

- 1) условия Дирихле:  $u(x, y, t)|_{\partial\Omega} = f(x, y)$ ;
- 2) условия Неймана:  $\frac{\partial u}{\partial n}|_{\partial\Omega} = f(x, y)$ ,  $f \in C(\partial\Omega)$ ;
- 3) условия 3-го рода:  $\left(\frac{\partial u}{\partial n} + ku\right)|_{\partial\Omega} = f$ ,  $k = k(x, y, t)$ ,  $f = f(x, y, t)$ .

Здесь  $\Omega$  — пространственная область,  $n$  — внешняя единичная нормаль к границе области  $\Omega$ ,  $\partial\Omega$  — граница области  $\Omega$ . При аналитическом решении часто требуют непрерывности функции  $f$  на границе области, то есть  $f \in C(\partial\Omega)$ .

Краевые условия 1-го типа реализуются сравнительно простой postfix-процедурой. Краевые условия 2-го типа выглядят в реализации просто для прямоугольных областей, однако и здесь гексагональная сетка заставит ввести поправочные коэффициенты для  $\frac{\partial u}{\partial x}$ ,  $\frac{\partial u}{\partial y}$  (различ-

ные для вертикального и горизонтального расположения гексагонов). Для криволинейных областей с «рваными» краями, дискретизованными гексагонами, непосредственная аппроксимация градиентов затруднена. При рассмотрении краевых условий 3-го типа все усложняется,

следует учесть их физический смысл (см. приложение в первой части). Основная идея заключается в том, чтобы перевести с помощью уравнения непрерывности пространственные производные в производные по времени и усовершенствовать postfix-процедуру.

В качестве примера рассмотрим тестовую задачу, имеющую известное решение:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta u = 0, \\ \partial u / \partial r|_{r=R} = f(\varphi) = 2 \cos \varphi + 3 \sin 3\varphi \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{условие разрешимости: } \int_0^{2\pi} f(\varphi) d\varphi = 0, \\ u(r, \varphi) = 2r \cos \varphi + \frac{r^3}{R^2} \sin 3\varphi + \text{const.} \end{array} \right. \quad (2)$$

Данное краевое условие удовлетворяет требованиям разрешимости задачи Неймана. В задании краевого условия (2) через нормаль имеется ясный физический смысл, если вспомнить уравнение непрерывности: функция  $f(\varphi)$  показывает, сколько вещества утекает/втекает за пределы поля. Соответственно, и условие равенства нулю интеграла в (2) означает сохранение вещества внутри поля, а корректность задачи напрямую связана с ограниченностью значения функции  $u(r, \varphi)$ . Легко проверить, в том числе и КА-расчетом, что прямая подстановка  $f(\varphi) \doteq 1$  приводит к логарифмической неограниченности решения в окрестности нуля. И действительно, вещество все время втекает в конечную область пространства. Такая интерпретация, когда мы рассматриваем электростатический потенциал, для нахождения которого обычно и ставится уравнение Лапласа, как некое диффундирующее вещество, может показаться неожиданной для физиков. Но она показывает глубинное сродство обеих задач (А и С) и оправдывает введение postfix для ЛФП. Таким образом, схема решения приобретет вид

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{internal: } u^{t+1} = (1 - D_0)u^t + D_0 \frac{u_1^t + \dots + u_6^t}{6}, \\ \text{boundary: } u^{t+1} = (1 - \alpha D_0)u^t + \alpha D_0 \frac{u_1^t + \dots + u_n^t}{n}, \alpha \doteq \frac{n}{6}, \\ \text{postfix: } u^{t+1}(r = R, \varphi) = u^{t+1} + \varepsilon D_0 f(\varphi). \end{array} \right. \quad (3)$$

Коэффициент  $D_0$  вводится искусственно, является внутренним параметром схемы — фактором релаксации, и конечное решение не должно от него зависеть. При переводе краевого условия в динамическое postfix мы обязаны использовать присутствующий для внутренних (internal) ячеек коэффициент микродиффузии, а также поправочный коэффициент  $0 < \varepsilon \leq 1$ . Предполагается, что значение  $\varepsilon$  достаточно универсально, хотя и зависит от шага сетки. Чтобы найти это значение, учтем два очевидных свойства (2): решение определено с точностью до константы; если  $u_1, u_2$  — решения (2) с краевыми условиями  $f_1(\varphi) = \lambda f_2(\varphi)$ , то  $u_1 = \lambda u_2$  при  $u_1(0, 0) = u_2(0, 0) = 0$ . Примем  $R \doteq 1$ , фактор релаксации (он же коэффициент диффузии)  $D_0 \doteq 1$ , а  $\varepsilon \doteq 0.01$ .

Для сравнения приведем методику решения задачи средствами MATLAB R2014b PDE Toolbox. Удобно использовать инструментарий диалогового окна, предоставляющего пользователю возможность выбрать шаблон решаемого уравнения, геометрию поля и т. д. Запуск диалогового окна — команда pdeinit. На геометрии круга было задано эллиптическое уравнение вида  $-\text{div}(c \cdot \text{grad}(u)) + a \cdot u = f$  с коэффициентами  $c = 1$ ,  $a = 0$  и  $f = 0$ . Так как в PDE Toolbox используется декартова система координат, краевые условия в ней для единичной окружности выглядят следующим образом:  $f(x, y) = 2x + 9y - 12y^3$ . Поэтому для граничного условия Неймана вида  $n \cdot c \cdot \text{grad}(u) + qu = g$  ( $n$  — единичная нормаль, « $\cdot$ » — знак скалярного умножения, и, как нетрудно видеть,  $\vec{n} \cdot \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} = \frac{\partial u}{\partial r}$ ), коэффициенты  $q = 0$  и  $g = 2x + 9y - 12y^3$ .

Экспортируемые данные имеют трехколоночный вид координат узлов  $(x, y)$  треугольной сетки и значения функции  $u$  в них. В данном примере количество узлов составляло 33 281. Результаты PDE-расчета были интерполированы (линейным методом) с треугольной на общую прямоугольную сетку:  $x = -1:0.01:1$ ,  $y = -1:0.01:1$ . Для этого использовалась функция TriScatteredInterp:

```
N = 100; h = -1:1/N:1; [x, y] = meshgrid(h, h);
F = TriScatteredInterp(X,Y,U); U2 = F(x,y);
```

где  $x, y$  — координаты узлов прямоугольной сетки (40 000 узлов);  $X, Y$  — треугольной;  $U$  и  $U2$  — соответственно значения функции на начальной и новой сетках. Так как в решении уравнения присутствует константа, функция  $U2$  была приведена к 0 в точке  $(0, 0)$ :  $u \rightarrow u - u(0,0)$ . Затем численное PDE Toolbox и аналитическое решения были нормированы к единице, т. е.  $u \rightarrow u / \max|u(x,y)|$ , причем максимальные элементы соответственно равны 2.7709 и 2.7710. Абсолютная погрешность MATLAB-решения (рис. 6) не превышает  $6 \cdot 10^{-4}$ . Аналитическое решение, как следует из (2), задается формулой

$$u(x,y) = 2x + 3y(x^2 + y^2) - 4y^3. \tag{4}$$

Несмотря на наличие внутренних экстремумов на прямой  $y = -x$ , наибольшее по модулю значение достигается на границе (их два: симметрично отвечающих знакам  $\pm$  и углам, в сумме дающих  $\pi$ ).

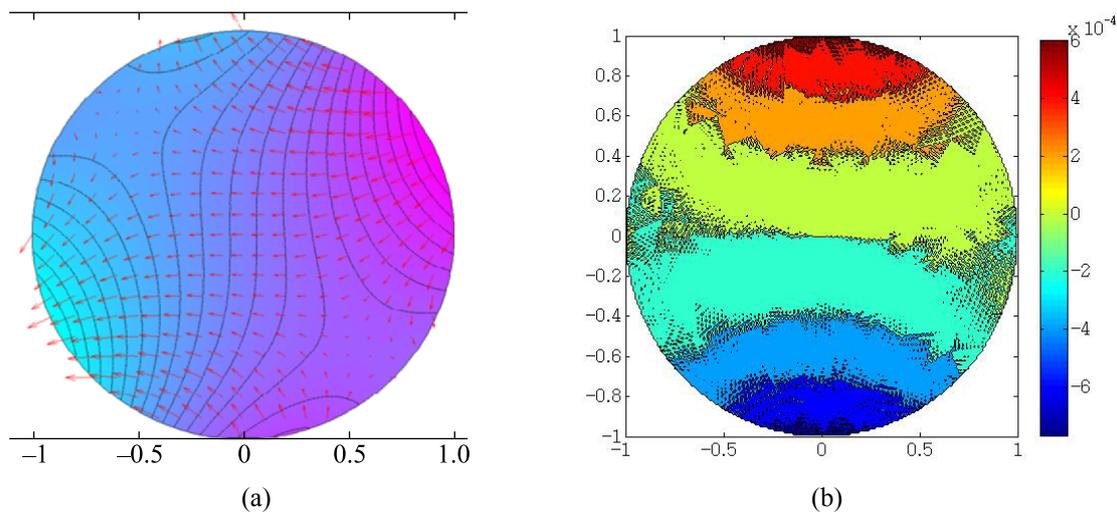


Рис. 6. (a) Контурный (с указанием градиентов) график решения (2), полученный в MATLAB PDE Toolbox, решение не нормализовано; (b) разность нормализованных аналитического решения и MATLAB-решения. Максимальная погрешность составляет  $6 \cdot 10^{-4}$  при шаге сетки 0.01

Клеточный автомат схемы (3), использованный для решения (2), описывается следующей схемой: размер поля  $2V \times 2V = 200 \times 200$  гексагонов, среди которых учитываются только те, координаты  $(x, y)$  центров которых удовлетворяют условию  $x^2 + y^2 \leq 1$ . Всего таких ячеек КА 27 206 (из 40 000); см. таблицу 1. Для вертикального расположения длина ребра гексагона  $l = 2/3 \cdot R/V$ . Переход от внутренних координат клеточного автомата  $(i, j)$ , вычисляемых из номера ячейки, к паре физических координат  $(x, y)$  проводился следующим образом (5):

$$x = \begin{cases} \sqrt{3}l(i - V + 0.5), & j \text{ четно,} \\ \sqrt{3}l(i - V + 1), & j \text{ нечетно,} \end{cases} \quad y = 0.5l + 1.5l(j - V). \tag{5}$$

На основе декартовых координат вычислялись полярные  $r$  и  $\varphi$ . За центр поля была принята точка, расположение которой иллюстрирует рис. 7.

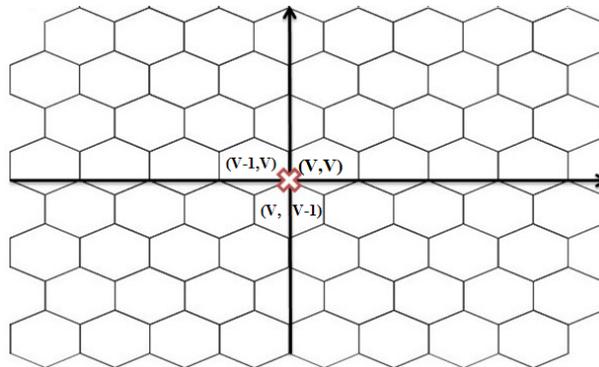


Рис. 7. Поле КА  $2V \times 2V = 200 \times 200$  (центральный фрагмент). Крестиком отмечено начало координат  $(0, 0)$ , показаны также оси абсцисс и ординат. Значение функции в точке  $(0, 0)$  вычислялось как  $u(0, 0) = \frac{1}{3}(u_{v-1, v} + u_{v, v} + u_{v, v-1})$ . Индексы неотрицательны

Таблица 1. Некоторые параметры КА-вычислений, проводимых по (3), в зависимости от шага сетки и искусственного коэффициента диффузии

$\varepsilon \doteq 1/2, R \equiv 1$		$D_0 = 1$	$D_0 = 1/2$	$D_0 = 1/3$
$l = 0.006667 = 1$ у. е. Число гексагонов в поле 27 206	$N_{\text{iter}}$	44230	68804	102728
	$u_{\text{max}}$	449.6262	446.0726	446.2594
	$u_{\text{min}}$	-447.8881	-444.3813	-444.3527
	$err$	0.0158	0.0137	0.0142
$l = 1/2$ у. е. Число гексагонов в поле 108 840	$N_{\text{iter}}$	149292	255636	251187*
	$u_{\text{max}}$	897.2226	890.9802	857.0603
	$u_{\text{min}}$	-893.6331	-887.3311	-853.1458
	$err$	0.0146	0.0144	0.0279

*Примечание.* Параметры вводятся по (8, 9). \*) помечен случай останова до приемлемого достижения сходимости за счет высокого уровня  $\varepsilon_1$ , поэтому число итераций  $N_{\text{iter}}$  меньше прогнозируемого, величина  $u_{\text{max}}$  не доходит до уровня асимптоты, а погрешность вдвое выше.

КА-решение подвергалось той же процедуре нормализации, что и MATLAB-решение. При этом значение в нуле было  $u(0, 0) = 0.2577$ , а нормировка делалась на 6.0294. Таким образом, корректное значение свободного параметра  $\varepsilon^* / l \cong \varepsilon \frac{2.7710}{6.0294}$ , и можно постулировать для (2) универсальную связь (6):

$$\sqrt{3}/4 < \varepsilon^* / l = 0.4643 < 1/2. \quad (6)$$

Пределы этой универсальности, по-видимому, ограничены геометрией окружности. Рассмотрим предлагаемый метод подробнее, варьируя значения  $l, D_0$ . Прежде всего следует внести уточнение в (3). Формула postfix, применяемая на каждом глобальном ходе, должна сохранять вещество, но свойство (2) теряется при дискретизации и влечет за собой дрейф решения; чтобы избежать эффекта накопления систематической погрешности, нужно внести поправку и применять postfix (3) в виде (7):

$$u_g^{t+1} := u_g^{t+1} + \varepsilon D_0 (f(\varphi_g) - \delta f), \quad \delta f = \frac{1}{G} \sum_{g=1, \dots, G} f(\varphi_g). \quad (7)$$

Здесь  $G, g, f(\varphi_g)$  — общее число граничных ячеек КА, их индекс и значение граничной функции в центре  $g$ -й ячейки (учитывается только одна координата из двух — полярная). Применяемые нами условия останова и расчета относительной погрешности нормализованного решения:

$$\begin{aligned} \max_{(i,j)} |u_{(i,j)}^{t+1} - u_{(i,j)}^t| < \varepsilon_1, \quad \varepsilon_1 = 10^{-3}, \\ err = \max_{(i,j)} |u_{(i,j)}^{norm} - u_{(i,j)}^{*norm}|. \end{aligned} \tag{8}$$

Индексом «\*» отмечено аналитическое нормализованное решение, для которого  $u_{max}^{*norm} = 1.0$  ( $u_{max}^* = 0.27710$ ). Напомним, что связь нормализованного и непосредственного решения определяется как (9):

$$u_{(i,j)}^{norm} = \frac{u_{(i,j)} - u(0,0)}{\max(u_{max}, -u_{min})}, \quad \begin{pmatrix} u_{max} \\ u_{min} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \max \\ \min \end{pmatrix} (u_{(i,j)} - u(0,0)). \tag{9}$$

Таким образом, мы предполагаем, что КА решает задачу с точностью до коэффициента пропорциональности, зависящего от  $u_{max}(\varepsilon, l, D_0) = u_{max}(\varepsilon, l) = u_{max}(\varepsilon / l)$ . Обратная зависимость от  $l$  оправдана физически, так как процедура postfix есть способ введения градиента для граничных ячеек. Подбором  $\varepsilon$  можно добиться обращения этого коэффициента в единицу, т. е.

$$\frac{\varepsilon}{\varepsilon^*} = \frac{u_{max}(\varepsilon)}{u_{max}^*}, \quad l = \text{const}. \tag{10}$$

Отсюда и вытекает (6), где появление  $\sqrt{3}$  можно связать с расстоянием между центрами соседних гексагонов.

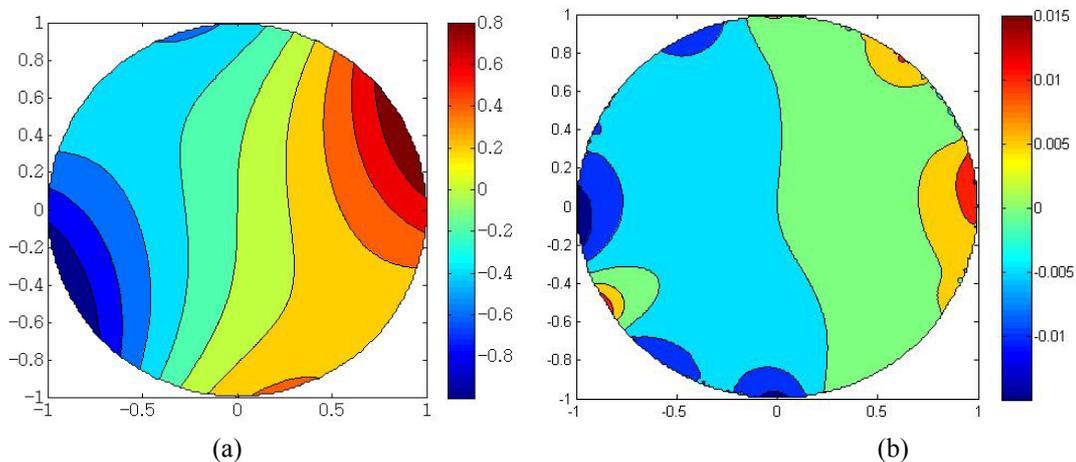


Рис. 8. (a) Нормализованное решение уравнения Лапласа, полученное КА-методом; (b) разность нормализованных аналитического решения и КА-решения. Максимальная погрешность равна 0.015. Параметры КА в обоих случаях: схема (3),  $\varepsilon = 0.01$ ,  $l = 0.006667$ ,  $D_0 = 1$ , через 44 230 тактов работы

Как видно из рис. 8, а, КА-решение задачи Неймана сходится к аналитическому решению, хотя и хуже на порядок, чем в испытанной процедуре MATLAB. Ухудшение порядка точности можно объяснить особенностями интерполяционной процедуры, трансформации краевых условий (3), хотя формальный порядок аппроксимации во внутренних точках (см. (3) в первой части статьи), равен 4, но для граничных точек (ячеек) имеем только первый порядок. Наибольшая погрешность (рис. 8, b) наблюдается у границ области вычислений. Конечное решение не зависит (см. таблицу 1) от искусственного коэффициента  $D_0$ , что оправданно физически, но математически

тически нетривиально, так как коэффициент входит в postfix-процедуру явным образом, однако это влияние нейтрализовано процедурой boundary (3). Уменьшение  $l$  приводит к пропорциональному увеличению  $u_{\max}$ , что также вполне объяснимо наличием градиента в крайних условиях (см. отсылку к уравнению непрерывности).

Если вернуться к пространственным производным, вместо postfix из (3) лучше взять postfix-условие в виде

$$\frac{\partial u}{\partial n} \sim \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{u_0 - u_i}{l\sqrt{3}}, \quad \langle f \rangle \sim \frac{1}{6-n} \sum_{j=1}^{6-n} \frac{f_0 + f_j}{2}, \quad u^* : \left( \frac{\partial u}{\partial n} - \langle f \rangle \right)_{u_0=u^*, u_i=u_i^*} = 0, \quad (11)$$

$$u^{t+1} = u^{t+1/2} + \beta(u^* - u^{t+1/2}), \quad 0 < \beta < 1.$$

Здесь  $u_0, u_i, u^{t+1/2}$  — значения сеточной функции соответственно в граничной ячейке, в соседней с ней ячейке шаблона и вычисляемое в граничной ячейке после применения ординарной процедуры boundary (3);  $f_0, f_j$  — значения краевого условия  $f(\varphi) \doteq f(\forall r, \varphi)$  в центре граничной ячейки и соответственно в центре соседнего гексагона, лежащего вне поля КА. Заметим, что схема (11) при  $f \equiv 0$  приводит к результирующей подстановке (12), изоморфной internal (3):

$$u^{t+1} = (1-\gamma)u^t + \gamma \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n u_i^t, \quad \gamma \equiv \beta + (1-\beta)\alpha D_0, \quad 0 \leq \gamma \leq 1. \quad (12)$$

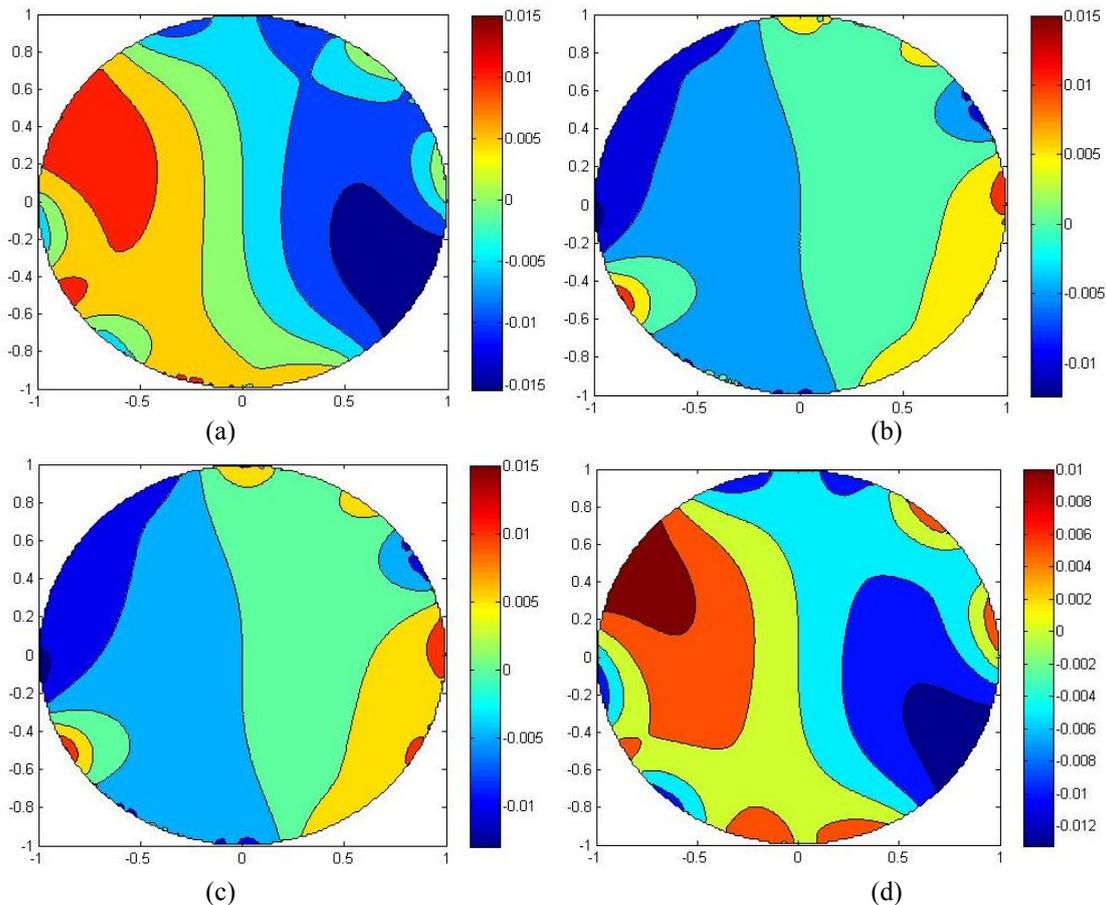


Рис. 9. Разность нормализованных аналитического решения и текущего КА-решения по схеме (11–12), начальное состояние внутри области нулевое,  $\varepsilon = 0.01$ ,  $D_0 = 1$ . (a)  $l = 1$ , 25 тыс. ходов; (b)  $l = 1$ , 50 тыс. ходов; (c)  $l = 1$ , 100 тыс. ходов — сходимость достигнута; (d)  $l = 0.5$ , 100 тыс. ходов — сходимость еще не достигнута

Для обеспечения консервативности в системе (3) + (11)–(12), приняв для внутренних ячеек internal (3) с коэффициентом  $D_0$ , для граничных ячеек в (3)-boundary нужно полагать  $D_0 := \frac{D_0 - \beta/\alpha}{1 - \beta}$  и вместо postfix (3) выполнять (11) (вторая строка). Отсюда вытекает условие на свободный вычислительный параметр:  $\beta < \alpha D_0$ .

Фрагмент динамики сходимости КА-расчета по схеме (11)–(12) показан на рис. 10.

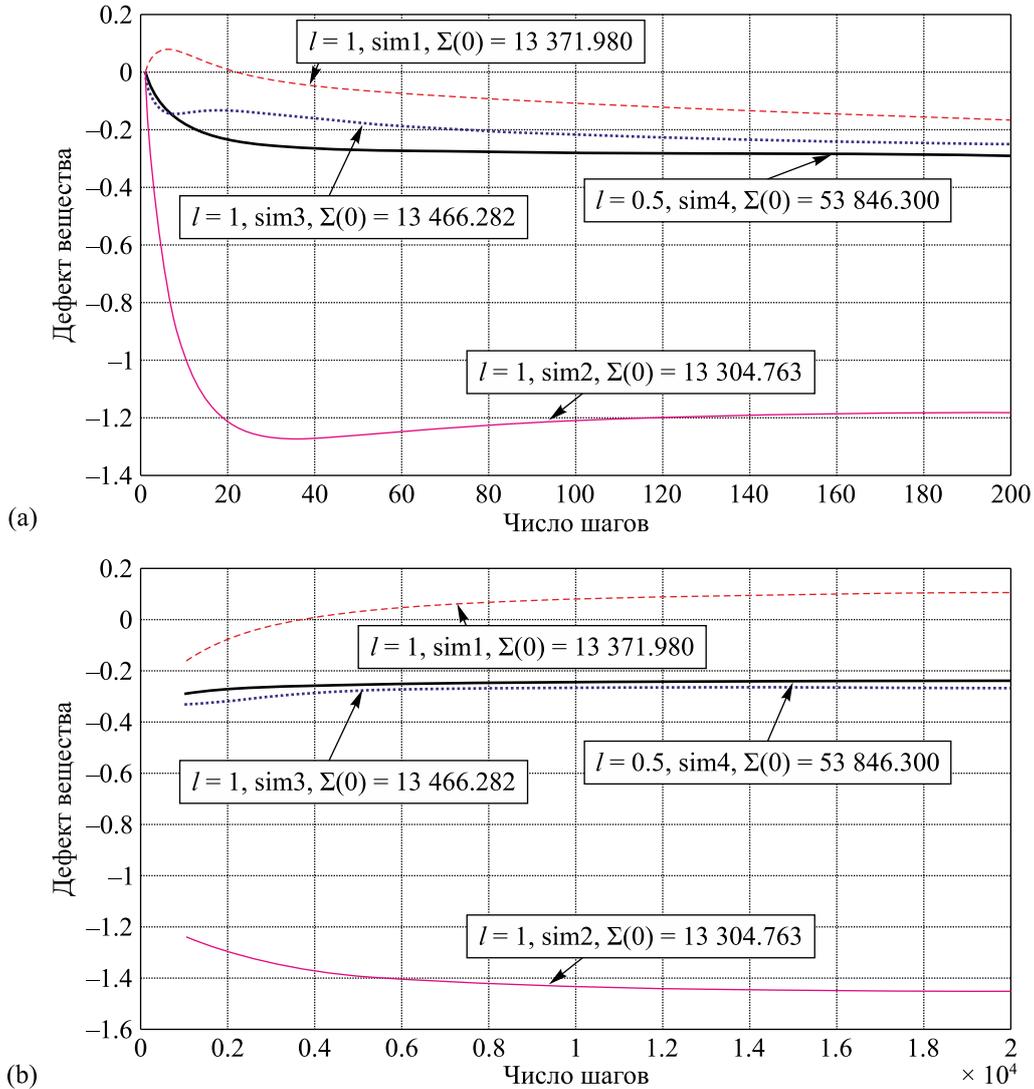


Рис. 10. Консервативность системы для КА схемы (3), (11), (12) при  $f = 0, D_0 = 1/30, \beta = 1/10$ . Начальное состояние — случайное равновероятное на отрезке  $u_i(t = 0) \in [0;1]$ . Показана величина дефекта вещества, т. е.  $\Sigma(t) - \Sigma(0), \Sigma = \sum_i u_i$ . (a) На коротком отрезке времени; (b) на длинном отрезке времени.

Для  $l = 1$  у. е. брались три симуляции: sim1, sim2, sim3, а для  $l = 0.5$  — sim4. Для 4-й симуляции для удобства отображения дефект вещества делился на 4

Свойство консервативности схемы (11)–(12) выполняется для  $f = 0$ , однако с худшей точностью  $\sim 1/N \approx 3/(4V^2)$  по сравнению со схемой (3)–(4) первой части статьи, что мы объясняем тем, что для каждой граничной ячейки нужно пересчитывать коэффициент диффузии в за-

висимости от данного  $\alpha$  (рис. 10). Наличие предельного значения вполне естественно коррелирует с выходом к стационарному решению.

В целом КА-процесс для задачи  $S$ , являющийся итерационным, сходится довольно тяжело (таблица 1); лишь постепенно локальные значения функции приходят к равновесным от первоначальных значениям. Поэтому целесообразно использовать две сетки: вначале получить грубые значения после расчета на крупной сетке, затем интерполировать их на мелкую и, используя их как начальную конфигурацию КА, провести более точную симуляцию. Таким образом, применение технологии multigrid (см., например, [Zhou, Fulton, 2009]) позволит существенно повысить скорость сходимости.

### 3. Решение волнового уравнения: замечания

Рассмотрев эллиптическое и параболическое уравнения, для полноты следует описать и КА-методы решения гиперболического уравнения в частных производных, оно же волновое —  $u_{tt} = a^2 \Delta u$ . Пример дискретных КА-методов (формализм решеточного газа) описан в [Simons et al., 1999]. Для решения двумерного волнового уравнения непрерывным КА в [Rucker, 2003] использовалась следующая ЛФП (шаблон Неймана, см. также (5) в первой части статьи), наследованная из схемы Ферми–Паста–Улама [Ostrov, Rucker, 1996]:

$$u^{t+1} := (2u - u^{t-1}) + 2a^2 \left( \delta u - u + b \left( (u_e - u)^2 - (u_w - u)^2 + (u_n - u)^2 - (u_s - u)^2 \right) \right), \quad (13)$$

$$\delta u \equiv (u_n + u_s + u_e + u_w) / 4.$$

Здесь  $b$  — коэффициент нелинейности, верхний индекс  $t$  у текущего состояния ячейки не представлен. Для гексагональной сетки аналогичная, но более простая схема (14) приведена в [Fabeiro et al., 2001]. Там же методом фон Неймана была исследована устойчивость (но без привязки к КА!) этой и более общей схемы, содержащей члены со смешанными производными (напомним,  $h = l\sqrt{3}$ ):

$$u^{t+1} = 2u - u^{t-1} + \left( a \frac{\tau}{h} \right)^2 \left( \frac{2}{3} \sum_{i=1}^6 u_i - 4u^t \right). \quad (14)$$

В [Janowicz et al., 2006] изложен, на наш взгляд, более «умный» метод решения волнового уравнения, восходящий к записи Бяльински-Бирулы [Bialynicki-Birula, 1994] уравнений Максвелла, где благодаря удвоению переменных при объединении векторов электрического и магнитного полей нет обращения к состоянию ячейки на прошлом ходу (что потребовало бы КА с памятью и отхода от классического определения КА). Суть метода показана на схеме (15):

$$u_{tt} = a^2 u_{xx} \Rightarrow \left\{ s = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial v}{\partial x}, \quad \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \frac{\partial u}{\partial x} \right\}, \quad a \doteq \frac{1}{\sqrt{\varepsilon\mu}}. \quad (15)$$

Здесь под парой  $\langle \varepsilon, \mu \rangle$  можно понимать электрическую и магнитную проницаемости среды или, в общем случае, просто коэффициенты. В привязке к электродинамике имеет место [Janowicz et al., 2006] следующий формализм для одномерной задачи:

$$\frac{\partial G}{\partial t} = c \left( \sigma_- + \frac{1}{n^2} \sigma_+ \right) \frac{\partial G}{\partial x}, \quad G \equiv (\vec{F}, \vec{B}), \quad \vec{F} = \frac{1}{c} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ E(x) \end{pmatrix}, \quad \vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ B(x) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (16)$$

$$\sigma_- \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_+ \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad c \doteq 1, \quad n = \sqrt{\varepsilon\mu}.$$

Здесь, очевидно,  $c$  — скорость света,  $(E, B)$  — электрическое и магнитное поле. И соответственно, численная, она же клеточно-автоматная (с учетом неформальности перехода, аналогичного (3) из первой части статьи), схема имеет вид

$$\begin{pmatrix} F \\ B \end{pmatrix}^{t+1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (F'_{+1} + F'_{-1}) + \frac{1}{n}(B'_{+1} - B'_{-1}) \\ n(F'_{+1} - F'_{-1}) + (B'_{+1} + B'_{-1}) \end{pmatrix}. \tag{17}$$

Индексом «+»/«-» помечена правая/левая ячейка одномерного КА радиусом 1.

В двумерном случае векторы  $(E, B)$  можно изначально раскладывать не в прямоугольном базисе, а в 2-х или даже 3-х направлениях симметрии [Fei et al., 2005], облегчая тем самым запись лапласиана или первых производных. Уравнения Максвелла в трехмерном случае (18) легко привести к цилиндрической геометрии и редуцировать к 1D-случаю, предполагая распространение волны (волновой вектор) вдоль оси аппликат  $u \equiv E_x, v \equiv H_y, u_{ii} = a^2 u_{zz}$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_x}{\partial t} &= \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right), & \frac{\partial E_y}{\partial t} &= \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right), & \frac{\partial E_z}{\partial t} &= \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right), \\ \frac{\partial H_x}{\partial t} &= \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right), & \frac{\partial H_y}{\partial t} &= \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right), & \frac{\partial H_z}{\partial t} &= \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right). \end{aligned} \tag{18}$$

Если ставится задача Коши (для бегущей волны), то в качестве граничных условий, наряду с (18), достаточно задать  $(u, v)^{t=0}$  и либо зациклить края  $u_{-1} \doteq u_L, u_{L+1} \doteq u_0$ , либо использовать на левом/правом краю  $\frac{\partial}{\partial z} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} u_1 \\ v_1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} u_L \\ v_L \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} u_{L-1} \\ v_{L-1} \end{pmatrix}$  для одномерной задачи  $z \in \{0, 1, \dots, L\}$ .

Для краевой задачи (например, о колебаниях струны с закрепленными концами) можно положить  $\text{postfix}$ -условие на компоненту  $u$ .

Аналогом (15) для двумерного случая будет запись (19) через комплекснозначный вектор  $(U, V) \in \mathbb{C}^2$  (авторы [Bialynicki-Birula, 1994] провели такие же рассуждения для 3D-случая и разных спинов электрона):

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) V, \quad \frac{\partial V}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) U, \quad U, V \in \mathbb{C}. \tag{19}$$

Здесь  $i$  — мнимая единица. Очевидно, что (19) может быть переписано четырьмя линейными связями на 4-мерный вещественнозначный вектор, подпадая под вид (16). Несмотря на простоту записи (и, соответственно, записи КА-схемы), она вдвое расточительнее (13) по затратам памяти.

#### 4. Задача D: классическая задача о колебаниях круглой мембраны

Следуя логике (15), очевидная схема решения скалярного волнового уравнения имеет вид

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = a\xi v, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{a}{\xi} \Delta u, \end{cases} \begin{matrix} \text{КА на ГС} \\ \xrightarrow{(2,3), \delta t = \tau} \end{matrix} \begin{cases} u^{t+1} = u^t + \tau a \xi v^t, \\ v^{t+1} = v^t + \frac{4}{3} \frac{\tau a}{\xi l^2} \left( \frac{1}{6} \sum_i u_i^t - u^t \right), \end{cases} \tag{20}$$

$\langle \tau, l \rangle$  — кванты КА,  $0 < \xi \sim l^{-1}$  — вычислительный параметр.

В качестве примера рассмотрим классическую задачу о колебаниях круглой мембраны радиусом  $R$  с закрепленными концами, например, формализуемую так:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \Delta u, \quad u(r=R, t) = 0, \quad u(r, t=0) = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial t}(r, t=0) = 1 - \frac{r}{R}, \quad R \doteq 1. \quad (21)$$

Как известно, аналитическое решение описывается (22) через функцию Бесселя нулевого порядка и ее нули:  $J_0(\lambda = \lambda_k) = 0, k = 1, 2, \dots, \lambda_1 \approx 2.40, \lambda_2 \approx 5.52, \lambda_3 \approx 8.65$ :

$$u(r, t) = \sum_{k=1}^{\infty} b_k \sin(\lambda_k a t) J_0(\lambda_k r), \quad b_k \equiv \frac{2}{a \lambda_k (J_0'(\lambda_k))^2} \int_0^1 r(1-r) J_0(\lambda_k r) dr. \quad (22)$$

Возможна более точная (см. (23)–(24)) по сравнению с (20) ЛФП, восходящая к явно-невной схеме Кранка–Николсон и учитывающая второй порядок по изменению  $u$ :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = a \xi v, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{a}{\xi} \Delta u, \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} u^{t+1} = u^t + \tau a \xi (\alpha v^{t+1} + (1-\alpha) v^t) + \frac{k}{2} \left( \frac{\tau a}{l} \right)^2 Lu, \\ v^{t+1} = v^t + k \frac{\tau a}{\xi l^2} Lu, \end{cases} \quad (23)$$

$$Lu \equiv \frac{1}{6} \sum_i u_i^t - u^t \equiv \bar{u}^t - u^t, \quad k \doteq \frac{4}{3}, \quad 0 \leq \alpha = \frac{1}{2} \leq 1,$$

$$\begin{cases} u^{t+1} = u^t (1-\gamma) + v^t \xi a \tau + \gamma \bar{u}^t, \\ v^{t+1} = -u^t \frac{2\gamma}{(1+2\alpha)} \frac{1}{\xi a \tau} + v^t + \frac{1}{\xi a \tau} \frac{2\gamma}{(1+2\alpha)} \bar{u}^t, \end{cases} \quad \gamma \equiv k (a \tau / l)^2 (\alpha + 1/2). \quad (24)$$

В качестве начальных условий берем, естественно,  $u^{t=0}(r) = 0, v^{t=0}(r) = (a\xi)^{-1}(1-r/R)$ . Коэффициент  $\gamma$  имеет для данной задачи смысл числа Куранта. ЛФП для граничных ячеек сделаем в виде  $u^{t+1} = 0, v^{t+1} = 0$ . Последнее условие вытекает из определения производной, так как на границе  $u$  не меняется. Иное задание, например наследованное из postfix (11), ошибочно и ведет к нарушению консервативности (энергии), приводящему к довольно быстрому уменьшению фазовых переменных до нуля. Также и смешение времен в лапласиане  $Lu$  (23) ведет к резкой диссипации энергии и занулению фазовых переменных, т. е. потере сходимости (к точному решению).

Решение волнового уравнения по схеме (24) на единичном круге для ребра гексагона  $l = 2/3 \cdot 10^{-2}$ , что примечательно, не приводит к ИГС-эффекту (рис. 11, *a*); при этом использование явной схемы (20) сопровождалось ИГС и другими интересными, но не физическими явлениями (см. рис. 11, *b*). Исследование ИГС-эффекта при различных квантах  $l$  представляет собственный интерес (без привязки к точному решению волнового уравнения), причем важно отметить, что ИГС наблюдается для КА не только с дискретными (что достаточно тривиально), но и с непрерывными значениями.

Рис. 12 указывает на аппроксимацию аналитического решения (22) КА-схемой (24).

Нетрудно видеть, что сумма квадратов по внутреннему полю компоненты  $u$  дает потенциальную энергию, а сумма квадратов компоненты  $v$  дает кинетическую энергию движения мембраны —  $\sum_{1 \leq i \leq l} (u_i^t)^2 / l, \sum_{1 \leq i \leq l} (v_i^t)^2 / l$ . Общее свойство консервативности сохраняется (рис. 13, *a*:

показана энергия по внутренним ячейкам), однако если брать значение в центре мембраны, то при общем колебательном характере поведения решения все-таки присутствуют нерегулярности (рис. 13, *b*). Причем их независимость от выбора шага и экземпляра расчета делает несо-

стоятельным предположение о какой-либо неустойчивости, тем более что MATLAB-решение аналитической формулы (22) также показывает такую же картину; мы объясняем это несколькими гармониками убывающей амплитуды, присутствующими в (22). Для радиально симметричной задачи требуется методика определения радиального распределения: мы разделили круг на концентрические кольца шириной  $h = 0.02$  ( $l \doteq 0.0067$ ) по радиусу, и если центр гексагона попадал в кольцо, то данный гексагон учитывался при расчете среднего арифметического по кольцу  $[r - h; r]$ . Разный характер кривых на рис. 14 обусловлен тем, что они взяты в разные фазы колебаний мембраны.

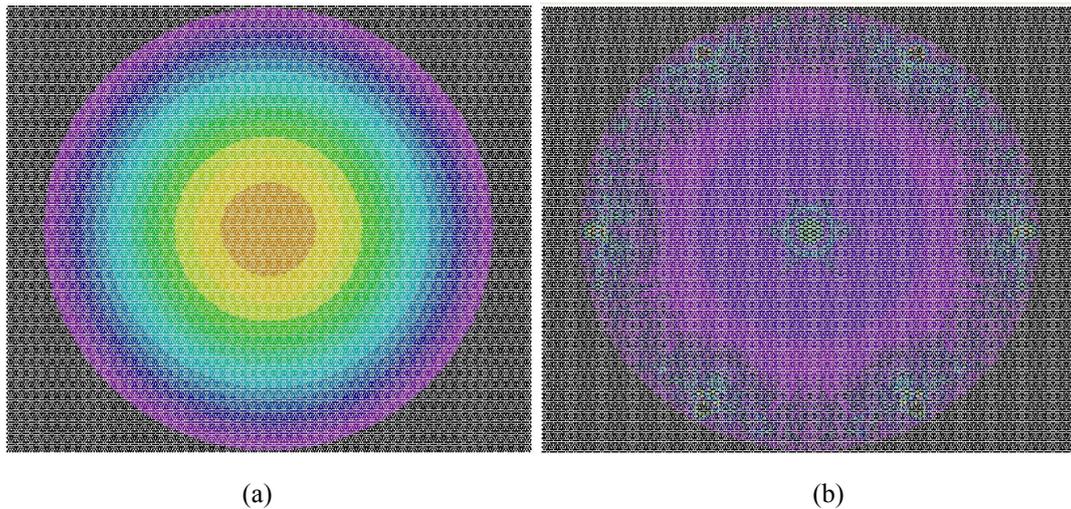


Рис. 11. ИГС-эффект для решения задачи о колебаниях круглой мембраны. Параметры расчета:  $R = 1$ ,  $a = 0.1$ ,  $l = 1$  у. е.,  $\tau = 0.01$ ,  $\xi = 1$ ,  $\alpha = 0.5$  ( $\gamma \approx 0.03$ ). (а) Отсутствие ИГС для схемы (24), 600-й ход; (б) наличие ИГС для схемы (20), 940-й ход. Цветовая карта для компоненты  $u$  взята из [Красников, 2012, приложение] — по цветам радуги: от красного (максимальное значение) до фиолетового (нулевое значение). Черным цветом показана область вне мембраны. Цветная версия рисунка доступна в электронной версии статьи на сайте журнала

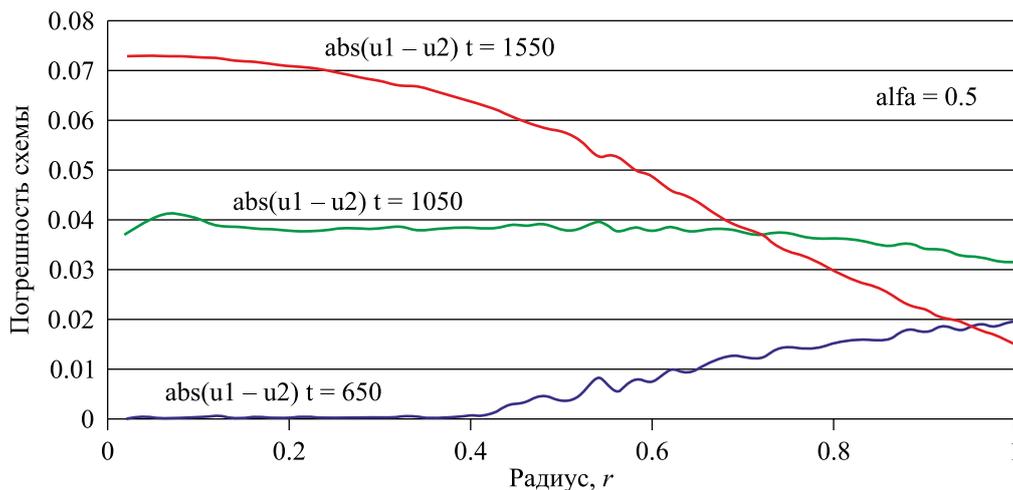


Рис. 12. Радиальное распределение погрешности схемы (24), взятой как разность  $|u(r)_{l_1} - u(r)_{l_2}|$  для двух сеток:  $l_1 = 2/3 \cdot 10^{-2}$ ,  $l_2 = 4/3 \cdot 10^{-2}$ . Выражение под знаком модуля берется по ячейкам для каждого концентрического кольца. Погрешность вычисляется как наибольшее из них

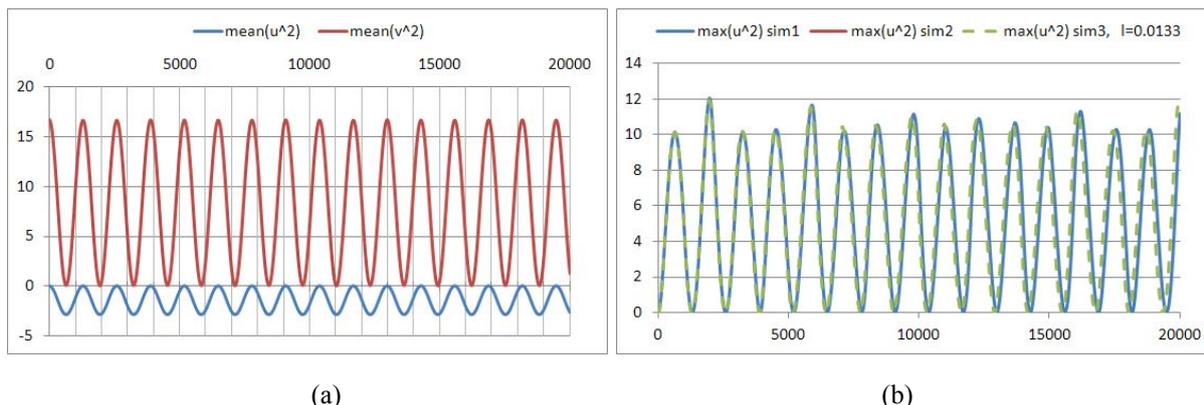


Рис. 13. Динамика потенциальной и кинетической энергии КА в схеме (24). По оси абсцисс указан номер хода. (а) По всем внутренним ячейкам, для удобства по компоненту  $v$  взято со знаком минус; (б) по центральной ячейке, где наблюдается максимум. Две кривые совпадают, будучи рассчитаны для симуляций sim1 и sim2, а третья (sim3) рассчитывалась для вдвое большего шага

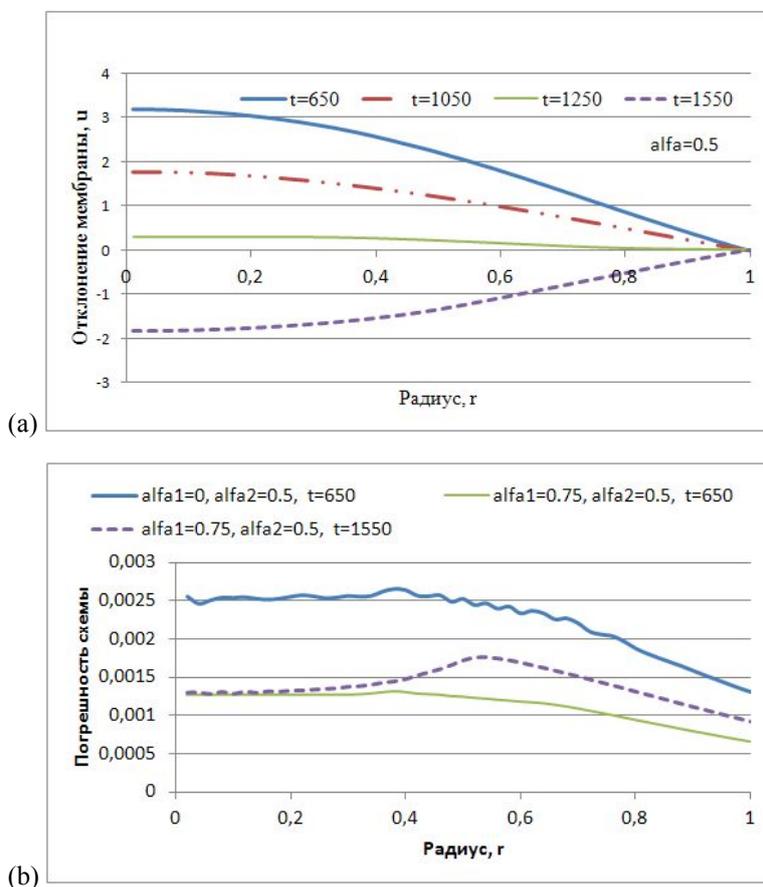


Рис. 14. Влияние параметра схемы (24)  $\alpha$  на радиальное распределение отклонения  $u$  мембраны от начального положения. (а)  $\alpha = 0.5$ ; (б) отложена погрешность двух КА-решений:  $|u(r)_{\alpha_1} - u(r)_{\alpha_2}|$ , см. подпись к рис. 13

Значение  $\alpha = 0$  в момент  $t = 1550$  дает сильное, на 2 порядка, возрастание погрешности (рис. 14, б) в центральной части мембраны, что делает КА-схему промежуточной между (24) и (20) и косвенно свидетельствует об ИГС-эффекте.

## 5. Заключение

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 двух), не покрывают всего многообразия вариантов. Сформулируем некоторые выводы.

- *С точки зрения линейности ЛФП все классические уравнения математической физики суть одно (непрерывности, транспорта, Пуассона, Гельмгольца, диффузии/теплопроводности, волновое).* Стандартные численные методы, разумеется, тоже говорят об этом (в силу линейности исходных математических уравнений). КА-записи численных схем позволяют понять это лучше (ср. (7), (28) в первой части, (24) во второй части статьи). И все-таки центральной является КА-схема для диффузии. Незначительным ее видоизменением получается КА-схема для уравнения Пуассона (как предельный переход к большим временам), а использование вектор-состояния, т. е. повышение размерности, дает нам ключ к волновому уравнению.
- *Роль граничных и начальных условий, свойство консервативности.* Традиционно о числе Куранта говорят при анализе устойчивости, но для КА более важно говорить вообще о сходимости к точному решению; в этой связи показательно решение задачи В, где резкость начального концентрационного профиля приводит к выпадению (ошибка с точным решением велика) начального участка (рис. 5 в первой части), и лишь позже динамика позволяет выполняться соотношению Куранта. Пример сверхважности граничных условий перехода (ЛФП граничных ячеек) демонстрирует переход от (3) до (7): формально (3) корректна, но поскольку даже известная нам функция на границе задана приближенно, то с каждой итерацией суммарное количество вещества немного, но однонаправленно изменяется, что приводит к потере сходимости и режиму с обострением (прежде всего «не срабатывает» естественное условие прерывания итераций  $\|u^{t+1} - u^t\| < \varepsilon$ ). В обычном матричном методе такой проблемы, естественно, не возникает.
- *В ситуации моделирования одномерной диффузии 2D-КА, основанный на обобщенном блочно-поворотном механизме Марголуза, работает быстрее и точнее, чем КА, основанный на простой конечно-разностной схеме.* Данный вариант ОБПМ КА дает приблизительное отношение коэффициентов диффузии  $\lambda$  с учетом вертикального расположения гексагонов, равное 1.55, что близко к теоретическому  $3/2$ . Уточнение и вывод точного значения  $\lambda$  для КА ОБПМ любой формулы  $\gamma$  представляют определенный интерес.
- *Метод замены в граничных условиях производной по пространству на производную по времени.* При КА-решении задачи Неймана для уравнения Лапласа для гексагональной сетки вычислено значение (с точностью до квантов КА) универсальной константы:  $\sqrt{3}/4 < \varepsilon^* / l \approx 0.4643 < 1/2$ . Ее значение тоже нуждается в уточнении и теоретическом оправдании. Универсальность ограничена, по-видимому, выпуклыми областями на плоскости.
- *Эффект избыточной гексагональной симметрии для волнового уравнения.* Показано, что реализация простой численной схемы для волнового уравнения порядка сопровождается паразитным эффектом ИГС, что неприемлемо для ее практического применения, но теоретически интересно с точки зрения поведения КА с непрерывными значениями. Более сложная, но на том же шаблоне, КА-схема (24) дает отсутствие ИГС и вполне приемлема для практики.

## Список литературы (References)

- Гаврилов С. В., Матюшкин И. В.* Статистический анализ блочно-поворотного механизма Марголуса в клеточно-автоматной модели диффузии в среде с дискретными особенностями // Компьютерные исследования и моделирование. — 2015. — Т. 7, № 6. — С. 1155–1177.  
*Gavrilov S. V., Matyushkin I. V.* Statisticheskii analiz blochno-povorotnogo mehanizma Margolusa v kletочно-avtomatnoi modeli diffuzii v srede s diskretnymi osobennostyami [Statistical analysis of Margolus's block-rotating mechanism cellular automation modeling the diffusion in a medium with discrete singularities] // Computer Research and Modelling. — 2015. — Vol. 7, no. 6. — P. 1155–1177 (in Russian).
- Красников Г. Я., Зайцев Н. А., Матюшкин И. В., Коробов С. В.* Особенности визуализации клеточных автоматов в области нанoeлектроники // Компьютерные исследования и моделирование. — 2012. — Т. 4, № 4. — С. 735–756.  
*Krasnikov G. Ya., Zaicev N. A., Matyushkin I. V., Korobov S. V.* Osobennosti vizualizacii kletочnyh avtomatov v oblasti nanoelektroniki [The peculiarities of cellular automata visualization in nanoelectronics] // Computer Research and Modelling. — 2012. — Vol. 4, no. 4. — P. 735–756 (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. G., Stepancov M. E.* Modelirovanie diffuzionnyh processov s pomoshch'yu kletочnyh avtomatov s okrestnost'yu Margolusa [Simulation of diffusion processes by means of cellular automata with Margolus neighborhood] // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 1998. — Vol. 38 (in Russian).
- Bialynicki-Birula I.* Weyl, Dirac, and Maxwell equations on a lattice as unitary cellular automata // Physical Review D. — 1994. — Vol. 49. — P. 6920–6927.
- 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. — November 2005. — Vol. 53, no. 11. — P. 3697–3702.
- Ostrov D. N., Rucker R.* Continuous-valued cellular automata for nonlinear wave equations // Complex systems. — 1996. — Vol. 10, no. 2. — P. 91–120.
- Rucker R.* Continuous-valued cellular automata in two dimensions // New Constructions in Cellular Automata / Ed. by D. Griffeath, C. Moore. — Oxford University Press, Oxford, 2003. — P. 295–316.
- 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.
- 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.
- 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.