物理系统的元胞自动机模拟

Cellular Automata Modeling of Physical Systems

Bastien Chopard, Michel Droz 著
祝玉学 赵学龙 译

清华大学出版社

物理系统的元胞自动机模拟

Cellular Automata Modeling of Physical Systems

Bastien Chopard, Michel Droz 著
祝玉学 赵学龙 译

清华大学出版社
北京

内 容 简 介

元胞自动机是一种时间、空间、状态都离散的动力学模型，是非线性科学的一种重要研究方法，特别适合于复杂系统时空演化过程的动态模拟研究。

本书共分7章。前两章对元胞自动机的发展历程、理论基础和基本演化规则做了概述；后5章从客观过程的并行性出发，以物理系统的守恒定律为基础，建立了宏观物理学与微观离散动力学之间的联系，构造了平衡和非平衡系统相关的元胞自动机模型。

本书论述深入浅出，并附有大量习题，非常适合于用作物理学领域的研究生教材，同时可供从事复杂系统模拟和计算机科学的研究人员参考。

Bastien Chopard, Michel Droz: Cellular Automata Modeling of Physical Systems.
ISBN: 0-521-46168-5

图书在版编目(CIP)数据

物理系统的元胞自动机模拟/[英]肖帕德，德罗斯著；祝玉学，赵学龙译. —北京：清华大学出版社，2003
书名原文：Cellular Automata Modeling of Physical Systems
ISBN 7-302-06625-6

Ⅰ. 物… Ⅱ. ① 肖… ② 德… ③ 祝… ④ 赵… Ⅲ. 自动机，元胞—模拟 Ⅳ. TP23

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 041516 号

出 版 者：清华大学出版社　　**地　址**：北京清华大学学研大厦
http://www.tup.com.cn　　**邮　编**：100084
社 总 机：010-62770175　　**客户服务**：010-62776969

组稿编辑：陈国新
文稿编辑：马幸兆
版式设计：肖　米
印 刷 者：北京鑫丰华彩印有限公司
发 行 者：新华书店总店北京发行所
开　本：175×245　**印张**：17　**字数**：330千字
版　次：2003年8月第1版　2003年8月第1次印刷
书　号：ISBN 7-302-06625-6/TP・4956
印　数：1～4000
定　价：38.00元

应当

尽可能简单

而不是

比较简单地

做每件事

——A.爱因斯坦

前言

元胞自动机方法和相关的建模技术是描述、认识和模拟复杂系统行为的强有力方法。本书旨在提供这个领域教学和自学用的入门教材，并介绍其最新进展情况，为物理学及其他科学领域中致力于先导性应用的研究人员提供必要的基础理论。

本书详细论述了元胞自动机在平衡和非平衡统计物理学构架中以及有关实用性问题中的应用，为了强调这种方法，本书通过简单的实例说明其基本思想和概念。为了使读者扩展知识领域，书后还罗列出精选的参考文献。

书中对几个相关应用领域是仅通过引用文献来陈述或肤浅论述的，这不是因为我们认为这些论题不重要，而是因为必须依照本书的范围略加主观选择。尽管如此，本书所涵盖的论题意义深远，足以表明如何将元胞自动机技术应用到其他系统的清晰思路。

本书可供从事统计物理学、固态物理学、化学物理学和计算机科学的研究人员，研究生以及所有对模拟复杂系统有兴趣的人参考。书末附有术语简释，给出了正文中常用技术术语的定义。在前 6 章末尾还备有习题集，这些习题将帮助读者熟练掌握相关章节引入的概念，或引导读者深入到正文中未提及的新论题中。有些习题相当容易，只不过做些编程工作而已；而另一些习题则比较棘手，需要用大量的时间去完成。

本书介绍的大多数元胞自动机模拟实验和结果都是在日内瓦大学的 8KB 内存连接机 CM-200 上完成的，另一些计算工作是在日内瓦大学的 IBM SP2 并行计算机上进行的。虽然并行巨型计算机很适用于大型模拟，但利用普通工作站，甚至现代个人机，除了人们总是期望的

在线显示以外，也能很好地进行元胞自动机计算。专用硬件也可以买到，但与通用计算机相比往往欠灵活。

尽管我们尽心尽力了，但仍可能有谬误，不妥之处（以及建议或批评）请转告我们：Bastien.Chopard@ cui.unige.ch 或 Michel.Droz@ physics.unige.ch。

我们要感谢所有使本书成为可能的人们，尤其是 Claude Godrèche，他给了我们写书的机会。特别致谢 Pascal Luthi 和 Alexandre Masselot，他们完成了本书介绍的几个原始的重要模拟实验。其他人也在原稿的准备中起了直接或间接的作用，我们感谢他们中的 Rodolphe Chatagny、Stephen Cornell、Laurent Frachebourg、Alan McKane、Zoltan Racz 和 Pierre-Antoine Rey。

最后，感谢瑞士国家科学基金委员会为我们发表的研究成果提供了资金，日内瓦大学计算机科学系和理论物理系为本项研究准备了必要的环境和设施。

目 录

第 1 章 导论

1.1 简要的发展历程

元胞自动机(cellular automata 或 cellular automaton,CA)是空间和时间都离散、物理参量只取有限数值集的物理系统的理想化模型。

虽然元胞自动机几经创造(往往称谓不同名字),而元胞自动机的概念可溯源至 20 世纪 40 年代末期。在这 50 年的历程中,元胞自动机不断发展,并应用于许多不同的领域,关于元胞自动机有大量的文献,包括许多会议论文集[1~8]、专门刊物[9,10]和论文。

本节并不详细介绍元胞自动机方法的发展史,而是突出叙述几个重要的发展阶段。

1.1.1 自繁殖系统

诱使人们详尽研究元胞自动机的理由是对它怀有极大的抱负且仍在实现中。首创者当然是 John Von Neumann,他在 20 世纪 40 年代末参与了第一台数字计算机的设计,尽管 Von Neumann 的名字确定地与当代串行计算机的体系结构联系在一起,但根据他的元胞自动机思想还建立了大型并行计算的第一个适用模型。

为了构造出能解决非常复杂问题的机器,Von Neumann 设想模仿人脑的行为,他的这一动机比当时仅仅考虑提高计算机性能的想法更富有雄心。他认为,像大脑这样复杂的机器亦应包含自控制和自维护机理。他的思想是要排除数据和处理机之间存在的差异,认为它们处在同样的基础上,这引导他设想一种可以超出现有素材、构造自身的机器。

很快，他从更加形式化的观点思考问题，并试图定义系统可以自复制的性质。他的主要兴趣是寻求在与生物过程无关情况下自繁殖机理的逻辑抽象。

依据 S. Ulam 的建议[11]，Von Neumann 在由元胞构成的完全离散域的构架下处理这个问题。每个元胞都具有其内在状态，并典型地由有限数量的信息位组成。Von Neumann 认为，这个元胞系统按离散时步演化，类似于简单的自动机，只要知道简单的诀窍，便可计算出元胞新的内在状态。决定这个系统演化的规则对所有的元胞都是相同的，并随邻近元胞的状态而变化，就像在生物系统中发生的过程一样，元胞的活动是同时进行的，同一时钟驱动每个元胞的演化，并且同步更新每个元胞的内在状态。Von Neumann 发明的这个完全离散的动力系统(元胞空间)现在称之为元胞自动机。

Von Neumann 提出的第一个自复制元胞自动机是由二维方形网格组成的，由数千个基本元胞构成自繁殖结构，每个元胞有多达 29 个可能状态[12]。演化规则依赖于每个元胞的状态及其最靠近的 4 个位于东、南、西、北方向的邻居的状态。由于其复杂性，只在计算机上部分地实现了 Von Neumann 规则[13]。

然而 Von Neumann 终于发现了元胞本身借助于一定的诀窍产生新的完全相同的个体的离散结构。尽管这一结果连极原始的生命形式也算不上，但却具有非常重大的意义。因为通常以为，机器只能构造比自身简单的客体，而采用自复制元胞自动机，却可以获得一种能产生新的、具有同样复杂性和功能的“机器”。

Von Neumann 规则具有所谓通用计算的性质，这就意味着，存在一种元胞自动机的初始构形，该元胞自动机能得出任何计算机算法的解。人们探询这个令人惊奇的论点：这样一个离散动力学系统如何帮助我们求解任意问题？结果是，这种性质只具有理论意义，而不具有实用意义。实际上，通用计算的性质指：用自动机演化规则能够模拟任何计算机流程(逻辑选择器开关)，这足以表明，由元胞自动机规则能显现出非常复杂且意想不到的行为。

继 Von Neumann 的研究之后，另一些学者也遵循同样的研究路线，继续研究这个问题[14]。尤其是 1968 年的 E. F. Codd[15] 以及以后的 C. G. Langton[16] 和 J. Bgl[17] 提出了能够自复制，且仅使用 8 种状态的简单得多的元胞自动机规则。这种简化是通过放弃计算的通用性，而仍保留指令(一种元胞 DNA，执行这些指令，可产生新的结构，然后再完全按这个新结构进行复制)的空间分布序列的思路使其成为可能的。

更一般地说，人工生命目前成为热门的研究领域，其目的是通过计算机模拟，更充分地认识真实生命和生存形式的特性。元胞自动机是朝着这个方向的早期尝试，一定能够进一步促进这个领域的发展[18,19]。

1.1.2 简单的动力系统

在相关的构架中，值得一提的是，正是一个简单的生态模型使元胞自动机的概

念引起广大读者的关注。1970年数学家John Conway提出了著名的生命游戏机的概念[20]，其动机是要寻找出能导致复杂行为的简单规则，他设想了一个类似于棋盘的二维方形网格，其中每个元胞可能是活的(状态1)或死的(状态0)。生命游戏机的更新规则如下：由3个活元胞包围的1个死元胞恢复成活元胞；而由两个以下或3个以上活元胞包围的1个活元胞因孤立或拥塞而死亡。这里周围的元胞相当于由4个最靠近的元胞(位于东南、西、北方位)加上沿对角线的4个次靠近的元胞组成。图1.1表示生命游戏机间隔10次迭代的3个构形。

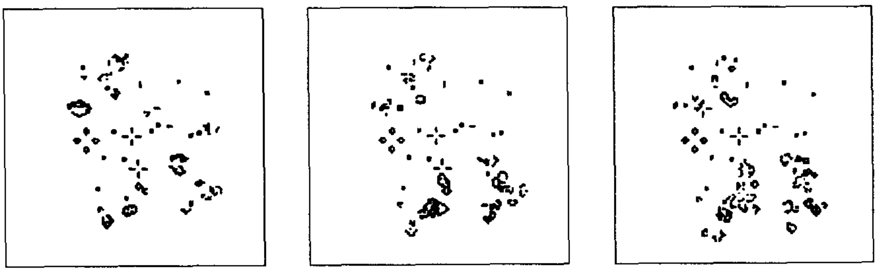

图1.1 生命游戏机

黑圆点代表活元胞，白色为死元胞。该图显示出某些随机初始构形的演变过程

结果表明，生命游戏机有出乎意料的丰富行为，从原"汤"中显现出的复杂结构，演变发展成某些特殊的技艺。例如，可能形成所谓滑翔机(参见习题1.3)，滑翔机相当于邻近元胞的特殊排列，这些元胞具有沿直线弹道穿过空间运动的特性，在大量的关于生命游戏机的文献[21,22]中，发现有许许多多这样的结构。根据Von Neumann规则，生命游戏机是一个具有计算通用性的元胞自动机。

除了这些理论方面的成果外，元胞自动机在20世纪50年代还应用于图像处理中[23]。早已得到公认的是，依据元胞自动机的计算模型，能够自动地进行冗长乏味的图像分析，即使用简单的局部运算，也可以同步地处理图像的像素。为用于噪音降低以及对从显微镜下观察到的图像的计数和尺寸估计，已研制出基于元胞自动机逻辑的专用计算机。

在20世纪80年代初，S. Wolfram详细地研究了一系列简单的一维元胞自动机规则(当今著名的Wolfram规则[24,25])。他注意到，元胞自动机是一个离散的动力系统，因而即使在非常简单的构架下，它亦显现出许多连续系统中遇到的行为。由于其布尔性质(即无数值误差，又无传统模型中的舍位)，故可根据精确数值计算的数学模型来研究像复杂性这样的概念。Wolfram的成果有力地证明，元胞自动机是统计力学研究的重大课题，当今，Wolfram规则仍然是很多学术研究的课题。

1.1.3 合成的论域总体

许多元胞自动机规则本身就是通用计算机，这种属性使某些作者认为，自然界

本身就是一个极大的元胞自动机。Tommaso Toffoli[26]将元胞自动机与论域总体的合成模型做了对比,在此总体中自然法则是用离散时空结构上简单的局部规则来表达的。

T. Toffoli,N. H. Margolus 和 E. Fredkin 认识到元胞自动机作为物理系统的模拟环境的重要性,他们对存在于描述计算机数值处理的信息论与物理法则之间的相似性很感兴趣。元胞自动机为发展这些思想提供了一个极好的构架。尤其是,他们说明了如何建立完全的时间可逆逻辑,依此逻辑可在不丢失任何信息的情况下执行数值运算。所谓弹子球[26]是一个元胞自动机规则,是可逆模型的计算例子。

在计算机屏幕上,对整个网格能以每秒钟更新几次的速率显示大型元胞自动机系统的时间演化过程,这就提供了一种依靠人工合成的论域总体进行试验的方法,人工合成总体的演化规则由操作人员制定。20 世纪 80 年代中期,Toffoli 和 Margolus 通过制造第一台通用元胞自动机计算机 CAM-6,提供了一个强有力的具有当时巨型计算机功能的元胞自动机环境,其价格可接受,并配备有极好的显示设备。这台计算机模拟出许多元胞自动机技术成果,并促使其主要思想扩展到广大科学家人群。

Toffoli 和 Margolus 的专著[26]《元胞自动机:模拟的新环境》(Cellular Automata Machines:a New Environment for Modeling)是元胞自动机领域中的灵感源,并提供了 CAM-6 硬件的完整说明。最近,Toffoli 和 Margolus 及其同事设计出计算机 CAM-8,它提供了功能更强的硬件环境,具有适用于元胞自动机试验的并行、均一、可伸缩体系机构[27]。这个硬件平台的性能高,有灵活的使用方法和显示设备,且自然适合于处理三维系统问题,已成功地应用于许多不同的领域。

1.1.4 模拟物理系统

20 世纪 80 年代也是元胞自动机理论成熟的重要阶段。一般公认,Hardy、Pomeau 和 Pazzis 于 20 世纪 70 年代建立的所谓 HPP 格子气模型[28]实际上是元胞自动机,这个模型是由简单、具有全离散动力特性的粒子构成,粒子以保持动量守恒和粒子数守恒的方式, 在二维方形网格上运动和碰撞。

HPP 动力学最初是作为研究气体交互作用粒子的基本统计性质的理论模型设计的。这个模型实际上是依照元胞自动机规则执行的、而且快速运动粒子是可视的, 这都在不同程度上阐明这种模型的潜在价值:元胞自动机规则难道不能模拟真实粒子(如液体或气体)系统的特性吗? 毕竟大家都知道,虽然液体、气体或粒状介质流动的微观性质不同,但在宏观尺度上都极其相似。只要在一个合适的观察尺度上考虑,全离散、简化的分子动力学也可以用元胞自动机规则来研究。

当然,已经对几个问题使用了离散系统的思路来模拟真实现象。自旋的 Ising

模型是一个极好的例子，在下一章将做更详尽的讨论。从流体方面考虑，早在19世纪末，Maxwell[29]曾提出，交互作用粒子的离散速度系统如同气体模型。实际上，像格子气这样的离散速度模型已独立于元胞自动机理论而独自发展了[30,31]。

然而，元胞自动机提出了一个新的概念上的构架以及有效的数值工具，其保留了微观物理法则的重要观点，诸如运动的同时性、交互作用的局部性和时间的可逆性等。

可以把元胞自动机规则看作微观现实的另一种形式，其具有预期的宏观行为。20世纪80年代末，从数值观点预计，全离散计算机模型能够替代风洞试验。使人确信这种可能性的第一个元胞自动机模型是1986年U. Frisch、B. Hasslacher，Y. Pomeau[32]以及S. Wolfram[33]几乎同时提出的著名的FHP模型。这些作者证明，他们的模型尽管属于全离散动力学，但都在一定范围内服从水力学中Navier-Stokes方程描述的特性。

像FHP或HPP这样的模型通常称之为格子气自动机(LGA)，以区别于专门的元胞自动机。显然，从数学观点看，格子气自动机是元胞自动机，但是人们却认为，像生命游戏机完全不同于FHP模型的基本原理。随着读者进一步熟悉本书下一章内容，这种区别将变得更清楚。尽管如此，在本书中，我们通常仍把LGA称为元胞自动机。

自从发现FHP规则以来，学者们深入细致地研究了格子气自动机或元胞自动机流体(目前通常称为粒子模型)，并修正了几个不恰当的初始模型。巴黎高等师范学校很积极，尤其是P. Lallemand和D. d'Humières，他们在这个领域起到了先导作用。

然而，出乎最初的预想结果，流体格子气模型并不优于水力学的传统数值方法，它不能解决计算高Reynolds数流体流动问题，只能用元胞自动机规则来确定的较高的粘滞性(因此是不可调节的)，是对许多这种流体进行实际研究的限制因素。元胞自动机网格的有限空间分辨力(物理现象必然在比网格空间大得多的范围内发生)是研究和模拟湍流的另一限制因素，如果系统的规模不够大，即使在当代最快速的计算机上，元胞自动机方法的优点也会化为乌有[38]。

但是格子气自动机在模拟复杂的和传统计算技术不适用的场合中获得了非常大的成功。孔隙介质中渗流[39~41]、非互溶流动和不稳定性[42~46]、液滴扩散和润湿现象[47]、微观乳胶液[48]侵蚀和迁移问题[49]等都是属于流体动力学的例子。

另一些物理问题，例如模式形成、反应-扩散过程[50]、聚核生长现象等，都可以用元胞自动机动力学得到很好的描述，本书将详细讨论。

1.1.5 格子Boltzmann方法与多粒子模型

通常，当存在复杂边界条件时，元胞自动机(或格子气)方法的优点最明显。根

据动力学的微观解释，可以按照比连续描述（如微分方程）自然得多的方式来考虑这些条件，因为在连续描述中，可能失去了对现象的基本的直觉认识。

另一方面，元胞自动机模型有几个与其全离散性质有关的缺点：统计噪音需要系统均化过程，为描述更广泛的物理系统进行的规则参数的调整欠灵活等。20 世纪 80 年代末，McNamara 和 Zanetti[51]、Higueras、Jimenez 和 Succi 等[52]证明了把自动机的布尔动力学扩展到直接处理实数（表示元胞具有指定状态概率的实数）的优点。

格子 Boltzmann 方法（LBM）在数值上比布尔动力学有效得多，它提供了一种新的计算模型，更适用于高 Reynolds 数流体流动和其他许多相关应用（例如冰川流[53]）的模拟。

格子 Boltzmann 模型保持元胞自动机方法的微观水平解释，但忽略了多体的相关函数。然而这种方法已成为目前模拟物理系统中最有前途的方法，本书将在几处讨论到这种方法。

在严格的元胞自动机方法与较灵活的格子 Boltzmann 方法之间，尚有中间描述的余地，即目前仍处于发展之中的多粒子模型。这些模型保留量化状态的概念，但接受无限数值集，因此既保证了数值稳定性（与 LBM 相反），又考虑了多体相关性。在模拟物理系统时，大量的可能状态提供更多的灵活性，并产生小的统计噪音。但是多粒子动力学更难以设计，且在数值计算上比格子 Boltzmann 模型更慢，本书将介绍这种方法的应用例子。

按我们的观点，元胞自动机方法不是一个刚性构架，而是一个从实用主义出发考虑的模拟思想体系。元胞自动机模拟的要点是捕捉指定现象的基本特性，并把这些基本特性转换成适当的形式，以获得有效的数值模型。为此，放宽元胞自动机原有的某些约束是可以接受的（甚至是有利的）。格子 Boltzmann 方法的引用正好说明这一点，关键是要保留这种方法的要旨及其相关特性，而不是它的缺点。这个注释特别适用，因为现有的并行计算机，在没有专用硬件施加限制条件的情况下，可以为执行元胞自动机模型提供理想的、极灵活的平台。

1.2 简单元胞自动机：奇偶规则

本节讨论简单元胞自动机的演化规则，以引入和说明演化规则的概念，使读者逐步熟识元胞自动机更精确的概念。在 1.3 节将对元胞自动机做出比较正式的定义。

这里所研究的演化规则虽然是基本的，却显现出异常多彩的行为。这个规则最初是在 20 世纪 70 年代由 Edward Fredkin[54]提出来的，它是定义在二维方形网格上的。