

三维元胞自动机及其在计算机上的实现

许 林 余 林

(江西蓝天学院制造系 江西 南昌 330098)

摘 要: 元胞自动机是一种时空、状态离散的数学模型, 适于计算机模拟实施。特别适合于处理那些难以用数学定量描述的复杂动态体系问题, 如材料微观组织的演变。以 Visual C++ 为编译平台, 运用 OpenGL 图形函数库建立一种三维元胞自动机模型。运用该模型进行了简化的枝晶生长模拟, 并与二维的模拟结果进行比较, 验证了该模拟的正确性。

关键词: 元胞自动机 三维建模 OpenGL

中图分类号: TP39

文献标识码: B

文章编号: 123(2007增)-028-03

0 引言

元胞自动机 (CA) 又称细胞自动机是建立于细胞发育演化基础上的时空离散、状态离散的并行数学模型^[1]。元胞自动机最早是由数学家、物理学家 John Von Neumann 和 Stanislaw Ulam 在 1940 年提出的^[2]。但从应用角度看, 直到 1960 年 John Horton Conway 运用元胞自动机建立了一种“生命游戏”后^[3 4 5], 元胞自动机才得到广泛的运用。20 世纪 80 年代, 由于元胞自动机这类简单模型能十分方便地复制出复杂的现象或动态演变过程中的吸引、自组织和混沌现象, 从而引起了物理学家、计算机科学家的极大兴趣, 并在许多领域得到了应用, 如混沌、分形的产生^[6], 模式分类^[7], 图像处理^[8], 智能材料^[9], 复杂现象^[1]等, 提出了许多变形的元胞自动机, 如以凝固理论为演化规则的元胞自动机^[10], 模糊元胞自动机^[11], 神经元胞自动机^[12]等。根据元胞自动机中元胞的空间展布, 可将元胞自动机分为一维和多维 (二维、三维) 等。

1 三维元胞自动机

1.1 元胞自动机的定义^[13]

1.1.1 物理学定义

元胞自动机最基本的组成部分包括元胞 (cell)、元胞空间 (lattice)、邻居 (neighbor) 及演变规则 (rule)。它是定义在一个具有离散、有限状态的元胞组成的元胞空间上, 并按照一定局部规则, 在离散的时间维上演化的动力学系统。具有如下属性:

- 构成元胞自动机的部件被称为“元胞”, 每个元胞的状态是离散有限的;
- 元胞规则地排列在被称为“元胞空间”的空间网格上;
- 元胞的状态随着时间变化, 根据一个“局部规则”进行更新, 也就是说, 一个元胞在某个时刻的状态值取决于且仅仅取决于上一个时刻该元胞的状态以及该元胞所有邻居元胞的状态;
- 元胞空间内的元胞按局部规则进行同步状态更新, 整个元胞空间则表现为在离散的时间维上的变化。

1.1.2 计算定义

用元胞自动机进行模拟计算时, 通常将其视为一类算法。因此可将其作为计算机程序代码按照如下步骤在计算机上运行:

- 定义存储元胞状态的元胞数组, 这里元胞数组对应于元胞空间, 数组元素对应于元胞, 数组元素的值对应于元胞的状态;
- 定义一系列根据局部规则改变元胞数组元素值的函数;

收稿日期: 2007-06-06

作者简介: 许林 (1980-), 男, 安徽宿松人, 江西蓝天学院, 硕士。研究方向: 机械制造。
余林 (1960-), 男, 江西安义人, 江西蓝天学院, 副教授。研究方向: 机械制造。

- 在每个时间步内,运用函数同步更新元胞数组元素的值。

1.2 三维元胞自动机在计算机上的实现

本程序中定义了节点类、元胞类用于空间元胞的产生,定义了邻居定义函数用于定义每个元胞的邻居,定义了局部规则函数用于实现元胞状态的改变。程序实现顺序如下:

- (1)在 X、Y、Z方向定义一系列节点对象,包括节点坐标、节点号等;
- (2)用这些节点对象定义一系列元胞对象(立方体和球),包括元胞号、包含的节点等;
- (3)定义这些元胞对象的邻居元胞,根据不同的邻居类型定义;
- (4)局部规则函数可以根据具体模拟情况进行定义,本模拟中定义了一种简化的枝晶生长规则函数。

1.3 计算机上用 OpenGL实现三维环境的关键技术

(1)重新设置窗口像素格式,使其符合 OpenGL对象素的需要,并 OpenGL的要求设置好窗口的属性和风格;

- (2)先获得 Windows设备描述表,然后将其与事先设置好的 OpenGL绘制描述表联系起来;
- (3)调用 OpenGL命令进行图形绘制和坐标变化实现三维效果;
- (4)退出程序,释放 OpenGL绘制描述表和 Windows设备描述表。

1.4 三维枝状构型元胞自动机

枝晶生长是非平衡态结构模式形成的典型实例。由于自身动力学的步稳定性,微观层面的简单行为可导致宏观上非常丰富和复杂的结构。最简单地表述过冷熔体中枝晶形貌演变地确定性三维元胞自动机模型可表述为:

- (1)元胞形状:立方体;
- (2)元胞状态:0代表液相(未凝固),1代表固相(以凝固);
- (3)邻居结构:6邻居(最近邻,类似与二维中的 Von_numann 邻居),18邻居(最近邻和次近邻,类似与二维中的 Moor 邻居),26邻居(元胞的最近一层邻居);
- (4)假定元胞凝固后始终保持固相,即不考虑固相的重熔;
- (5)演变规则:元胞状态由元胞本身的状态值与邻居元胞的状态值之和决定。即:

$$S_i^{t+1} = f(\sigma_i^t) \quad \sigma_i^t = \sum_{j \in NN} S_j^t$$

式中,映射 f 的定义域为 $[0, m]$, 值域为 0 或 1, m 为邻居状态值之和。

2 模拟结果及讨论

2.1 模拟结果

本文按上述三维枝状构型元胞自动机模型中提出的规则进行了模拟。当在模拟空间内设一个元胞的状态值为 1 时,可能出现四种生长行为:

- (1)无生长现象: $f(\sigma) = 0 \quad \sigma \in [0, m]$;
- (2)生长成平板状(三维为立方体)结构: $f(\sigma) = 1 \quad \sigma \in [0, m]$;
- (3)生长成非晶态: $f(\sigma) = 1 \quad \sigma = 2$;
- (4)呈枝状结构生长, $f(\sigma) = 1 \quad \sigma = 2$ 。

本文中按照第 4 种规则进行模拟,结果如下:

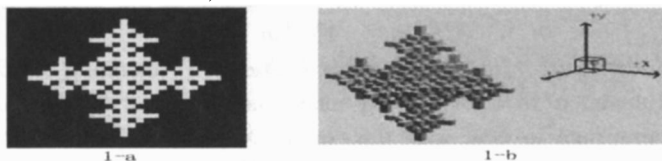


图 1 二维的 Von_numann 邻居与三维 6 邻居模拟的对比
1-a - 二维循环 14 次, 1-b - 三维循环 14 次

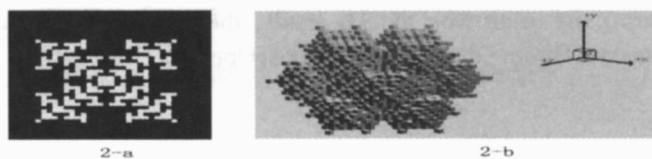


图 2 二维的 Moor 邻居与三维 18 邻居模拟的对比
2-a - 二维循环 14 次, 2-b - 三维循环 14 次

2.2 讨论

模拟结果中产生的枝状结构具有典型的自相似性。每 $2n$ 时间步后, 生长结构为立方体, 之后在各个顶角方向生出枝状臂, 然后所有分枝生长到彼此内部, 又形成立方体, 如此反复。从图 1、2 中可以明显看出这种现象。

从模拟结构可以看出, 演变规则 4 简单的局部作用可产生整体上的复杂枝晶结构。由于模拟没有考虑金属凝固的物理意义, 如凝固过程中的热传导、随机形核、结晶潜热的释放等因素, 所以与实际金属凝固枝晶组织存在比较大的差异。但本文的目的是建立一种模型框架, 可以根据具体研究内容, 加入相应的物理意义, 将此模型框架进行扩展。

3 结论

元胞自动机方法是处理微观组织演变过程的一种好的方法。如果与有限元、有限差分法与 CA 方法结合, 构造合理的物理模型, 则可以模拟实际工件的凝固过程、焊接过程及加工过程的组织演变, 预测晶粒度、相的分布等, 并通过宏观工艺参数来优化组织。

本文建立了一种三维元胞自动机。由于采用面向对象的编程方法以及 OpenGL 的与系统无关性, 所以该模型可以根据需要很容易的进行扩展和移植。运用简化的枝晶生长规则进行了模拟并与二维的模拟情况进行了对比。验证了该模型的正确性。

参考文献:

- [1] 赵松年. 非线性科学 - 它的内容、方法和意义 [M]. 科学出版社, 1994: 69-76
- [2] Neumann Von John Theory of Self- Reproducing Automata University of Illinois Press, Champaign IL
- [3] Gardner M. The Fantastic Combinations of John Conway's New Solitaire Game of "Life", Scientific American, 223: 4-120
- [4] Dewdney A. K. A cellular Universe of Debris, Droplets, Defects and Demons, Scientific American, 261: 2-102
- [5] Dewdney A. K. The Cellular Automata Programs That Create Wierworld, Rugworld and Other Diversions, Scientific American, 262: 1-146
- [6] Karel Culik, Simant Dube. Fractal and recurrent behavior of cellular automata. Computing and Information, 1989: 23
- [7] P G Tziouas, P G Tsalides, A Thanikakis. A new cellular automata- based nearest pattern classifier and its VLSI implementation. IEEE Trans Very Large Scale Integr(VLSI) syst, 1994, 2(3): 343
- [8] Ying Li. Pattern recognition using stochastic cellular automata. In Proc SPIE- Int Soc Opt Eng, 1993: 23
- [9] Ameniya Yoshito. Information processing using intelligent materials- information- processing architectures for material processors. Journal of Intelligent Material Systems and Structures, 1994, 5: 418
- [10] 郭洪民, 刘旭波, 杨湘杰. 元胞自动机法模拟微观组织演变的建模框架 [J]. 材料工程, 2003(8): 23
- [11] Andrew Adamatzky. Hierarchy of fuzzy cellular automata. Fuzzy Sets and Systems, 1994: 62-167
- [12] 姚国正等. 神经形态发生的一种细胞自动机 (CA) 模型 [J]. 科学通报, 1991, 19: 1496
- [13] 郭洪民. 元胞自动机法模拟铝合金凝固组织形态演变 [D]. 南昌大学, 2003: 6

(责任编辑: 潘振勇)

3D- Cellular Automata and Its Realization on Computer

XU Lin YU Lin

(Department of Manufacture, Jiangxi Bie Sky University, Nanchang 330098, China)

Abstract The Cellular Automaton is a dispersing mathematics model which is suitable for computer simulation. It is especially appropriate to deal with the complex dynamic system that cannot be described by mathematics such as the evolution of materials microstructures. This paper introduces using the OpenGL API to construct a three- dimensional cellular automaton model under the Visual C++, then simulating simplified branch growth. Through comparing the result with the 2D result, the validity of this model is verified.

Key Words Cellular Automata, Three- dimensional model, OpenGL