

Automaty komórkowe

Krzysztof Kułakowski

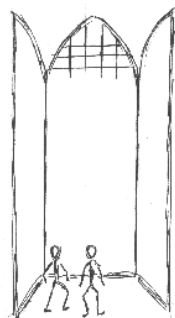
Moim Rodzicom

Spis treści

1. SKALA TRUDNOŚCI	8
2. DEFINICJE I PRZYKŁADY	11
2.1. Przykład: <i>Life</i>	11
2.2. Najprostsza notacja	12
2.3. Przykład: 256 automatów jednowymiarowych (2,1) . . .	12
2.4. Notacja automatów głosujących	14
3. KLASYFIKACJA AUTOMATÓW KOMÓRKOWYCH	15
3.1. Klasyfikacja na podstawie obserwacji	15
3.2. Klasyfikacja na podstawie reguł	19
4. METODY ŚREDNIEGO POLA	20
4.1. Równania ewolucji	20
4.2. Teoria struktury lokalnej	22
5. ODWRACALNOŚĆ	24
5.1. Przykład: (2,1/2)	25
5.2. Rajski ogród	27
5.3. Symetria T	29
6. AUTOMATY LINIOWE, LUB PRZYNAJMNIEJ INIEKTYWNE	31
6.1. Automaty liniowe	31
6.2. Automaty iniektywne	32
6.3. Sekwencje aperiodyczne	34
7. POCHODNA BOOLE'A	36
7.1. Zapis odwzorowań na zbiorach skończonych	36
7.2. Definicje i przykłady	38
7.3. Kilka twierdzeń.	40

8. MODEL PRZYPADKOWYCH ODWZOROWAŃ	42
8.1. Średnia długość cyklu	43
8.2. Model Kauffmana	46
9. SAMOZORGANIZOWANY STAN KRYTYCZNY	49
9.1. SOC w piasku	50
9.2. SOC w automacie <i>Life</i>	51
10. ZASTOSOWANIA NIE CAŁKIEM FIZYCZNE	55
10.1. Model Lotki-Volterry - dynamika populacji	55
10.2. Ewolucja reguł. Zastosowanie algorytmu genetycznego .	57
10.3. Model Penny starzenia biologicznego populacji genetycznej.	59
10.4. Model Baka-Sneppena	61
11. MODEL ISINGA	64
11.1. Dowód Derridy	65
11.2. Losowość w regułach automatu <i>Life</i>	66
11.3. Metody Monte Carlo	67
11.4. Rozprzestrzenianie się uszkodzeń	70
11.5. Ergodyczność	71
12. DYNAMICZNY DIAGRAM FAZOWY	74
12.1. Od automatu do funkcji pracy	74
12.2. Od energii do automatu	76
12.3. Konstrukcja dynamicznego diagramu fazowego	78
12.4. Magnetoelastyczne przejście fazowe. Dynamiczny niepo- rządek	79
13. FRAKTALE	82
13.1. Skalowanie skończonych rozmiarów	83
13.2. D. L. A.	84
13.3. Analiza R/S. Prawo Hursta	85
14. PROBLEMY TRANSPORTU	88
14.1. Podejście Eulera i podejście Lagrange'a	89
14.2. Gaz sieciowy	90
14.3. Ruch DNA w żelu	93
15. SIECI SPRZĘŻONYCH ODWZOROWAŃ	96

16. CZY TO ZABAWA ? ROLA AUTOMATÓW KOMÓRKOWYCH W FIZYCE	98
A. STABILNOŚĆ ROZWIĄZAŃ RÓWNANIA RÓŻNICZKOWEGO	101



WSTĘP

Automaty komórkowe (*cellular automata*) są wynalazkiem, z którego można korzystać na różne sposoby. Można w tym wynalazku widzieć coś w rodzaju alternatywnej matematyki, szczególnie przydatnej w obliczeniach równoległych, a przy tym wolnej od błędów zaokrągleń. Można widzieć narzędzie do symulacji procesów fizycznych, w których bierze udział wiele układów oddziałujących ze sobą. Można traktować automaty jako obiekty matematyczne, interesujące z punktu widzenia teorii procesów dynamicznych. Można widzieć w nich tylko zabawkę, sposób na produkowanie interesujących obrazków. Ten ostatni aspekt przywodzi na myśl fraktale, które również mają wiele zastosowań, głębokich i mniej głębokich. Rzeczywiście automaty mają coś wspólnego z fraktalami. Będzie tu o tym jeszcze mowa.

Za twórcę automatów komórkowych uważa się Janosa von Neumanna, Węgry pracującego w Princeton, autora "*Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*". Von Neumann znany jest także ekonomistom z prac nad teorią Keynesa. W końcu lat 40-tych zajmował się modelem "pierwotnej zupy", cieczy z której miało powstać życie. Jak wiadomo, wprowadził do swego modelu dyskretny czas i przestrzeń z inspiracji Stanisława Ulama, lwowskiego matematyka, który przebywał wtedy w Los Alamos. Ulam jest też autorem określenia automatów komórkowych jako "fizyki urojonej" - nazwa jest parafrazą pogardliwego kiedyś określenia liczby i .

Najsłynniejszym chyba automatem jest *Life* autorstwa angielskiego matematyka Johna H. Conwaya. Ten automat miał kiedyś swój klub fanów wśród naukowców i studentów USA. W konkursie na samodzielną konfigurację komórek zwyciężyła w listopadzie 1970 grupa z MIT, publikując "działo szybowcowe" i zgarniając nagrodę w wysokości 50 dolarów. W *Life* można widzieć model żyjącego środowiska; w użyciu

jest terminologia "żywych" i "martwych" komórek. Ale jest to automat uniwersalny, czyli zdolny do każdej operacji logicznej. Można w jego ramach otrzymać na przykład kolejne rozwiązania wielkiego twierdzenia Fermata.

Automaty komórkowe weszły do bibliotek fizyków na początku lat 80-tych. Jednym z głównych popularyzatorów tej idei był Stephen Wolfram, znany jako twórca pakietu *Mathematica*, wtedy profesor fizyki w Princeton, obecnie dyrektor Wolfram Research, Inc. Wolfram próbował też sklasyfikować automaty komórkowe - gdyby się ten zamiar powiodł, można by mówić o klasyfikacji wszystkich dyskretnych procesów dynamicznych.

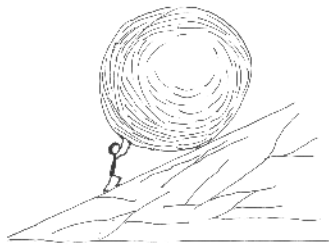
Automaty komórkowe nie spełniły wszystkich nadziei, jakie w nich pokładano. Nie udało się ich na przykład przetłumaczyć na równania różniczkowe. Ich dyskretny charakter jest nie do przyjęcia dla fizyków, którzy chcieliby symulować ciągłe procesy dynamiczne. Z kolei idealny automat do testowania twierdzeń probabilistycznych musiałby mieć nieskończony rozmiar sieci, czego nie chcą zaakceptować informatycy. Mimo to lista zastosowań automatów komórkowych w technice ciągle rośnie, a niektóre idee fizyki zostały przeniesione do innych nauk za pośrednictwem automatów. Przykładem może być model Reggego quasi-klasycznych cząstek, modny na początku lat 70-tych, a obecnie testowany metodami Monte Carlo pod nazwą *directed percolation*. Wydaje się, że związany z automatami zespół pojęć może być przydatny w formułowaniu całkiem współczesnych pytań.

Treścią tej publikacji są notatki do krótkiego, bo 30-godzinnego kursu wykładów, jakie prowadziłem dla studentów fizyki komputerowej Wydziału Fizyki i Techniki Jądrowej AGH w latach 1995-98. Stąd jesteśmy tu między drugim i trzecim z wymienionych punktów widzenia: będą nas interesować fizyczne i matematyczne aspekty automatów komórkowych.

A celem jest zapoznanie z tematem odrobinę większego grona, niż 30-osobowa grupa studentów raz na rok. O ile mi wiadomo, żaden z krakowskich skryptów nie podaje wstępnych wiadomości o automatach komórkowych. Może warto?

Z wdzięcznością myślę o Kolegach którzy przyczynili się do powstania tego tekstu. Marcin Antoniuk, Michał Grodecki, Przemysław Gawroń-

ski, Barbara Kawecka-Magiera, Mariusz Kopeć, Andrzej Maksymowicz, Krzysztof Malarz, Tomasz Sitkowski i Dietrich Stauffer byli współautorami niektórych prezentowanych tu wyników i/lub cennymi partnerami w dyskusji. P. Tomasz Bołd zaprojektował okładkę i włożył wiele godzin pracy, aby doprowadzić tekst i rysunki od szkicowych nieraz notatek do końcowej postaci. P. Tomasz Kajdrowicz i p. Jacek Szkutnik znaleźli błędy, które mogłem dzięki temu usunąć. Zaprojektowanie i wykonanie rysunków przy tytułach rozdziałów zawdzięczam pani Barbarze Grabowskiej. Jacek Tarasiuk bezinteresownie i wnikliwie zrecenzował całość. Im wszystkim bardzo serdecznie dziękuję.



Rozdział 1

SKALA TRUDNOŚCI

Mówiąc o automatach komórkowych, będziemy się stykać z problemami matematycznymi, których nie potrafimy rozwiązać. Będą wśród nich takie, których rozwiązanie być może nie istnieje. Będą i takie, których rozwiązanie nie istnieje na pewno. Warto te przypadki rozróżniać.

Wiadomo, że wszystkie możliwe algorytmy (a więc i dowody twierdzeń) tworzą zbiór przeliczalny [3]. Można więc je ustawić w ciąg i ponumerować. Swój numer ma również tzw. uniwersalna maszyna Turinga, czyli algorytm odczytujący i wykonujący dowolny zadany algorytm. Inna sprawa, że numer tej maszyny z trudem mieści się na stronie papieru. Swój numer ma również dowód, że niektórych algorytmów nie ma na liście - inaczej mówiąc, nie istnieją. Nie istnieją więc dowody niektórych twierdzeń. Można je wypowiedzieć, ale nie sposób udowodnić. Ta teza jest treścią słynnego twierdzenia Gödla, opublikowanego w 1931 roku. Inaczej mówiąc, w ramach każdego formalizmu można wypowiedzieć twierdzenia, których nie można udowodnić w ramach tego formalizmu.

Najbardziej znanym przykładem nieistniejącego algorytmu jest rozwiązanie tzw. problemu stopu (*halting problem*). Zadaniem tego algorytmu (nazwijmy go H) jest stwierdzenie, czy dowolny dany algorytm A pracujący na dowolnych zadanych danych zakończy obliczenia. Z twierdzenia Gödla wynika, że algorytm H nie istnieje. Problem stopu i inne problemy tej klasy nazywamy nierozwiązywalnymi (*undecidable*)[4].

Inną kategorię trudności stanowią problemy w zasadzie rozwiązywalne, których czas rozwiązywania jest jednak bardzo długi. Powszechnie znany jest przykład problemu wędrującego komiwojażera (*travelling salesman*): dane są mianowicie położenia N miast, które komiwojażer chce odwiedzić, a problem polega na wybraniu najkrótszej trasy. Najprostszym algorytmem jest porównanie wszystkich możliwych rozwią-

zań. Czas wykonania takiego algorytmu jest jednak proporcjonalny do $N!$, czyli rośnie z N szybciej, niż N^α , gdzie α - dowolna skończona liczba. Stąd biorą się nazwy: problem klasy P (*polynomial*), problem klasy NP (*non-polynomial*); różni je zależność czasu wykonania od rozmiaru N problemu. Problemy klasy NP są uważane za praktycznie nierozwiązywalne (*intractable*). Jeżeli jednak ktoś podałby nam rozwiązanie, możemy je sprawdzić w czasie rzędu N^α . W pracy [4] podano porównawczą tabelkę czasów rozwiązania problemów klas P i NP dla różnych wartości N , którą przytaczamy poniżej (Tablica:1.1). Chociaż dane pochodzą z 1979 roku, niektóre liczby trzeba uznać za przekonujące.

Zwykle nie wiadomo, czy dany problem jest rozwiązywalny, czy nie. Niektóre problemy potrafimy przetłumaczyć na inne problemy, co do których istnieje dowód nierozwiązywalności. Wtedy sytuacja jest w pewnym sensie komfortowa - wiadomo, że rozwiązanie nie istnieje. Jeżeli takiego dowodu brak, może zachodzić podejrzenie, że nasz problem jest praktycznie nierozwiązywalny. Jednak pewności nigdy nie ma. Istnieje cała lista [4] problemów NP wzajemnie równoważnych (NP -zupełnych, NP -complete), t.j. takich, które można przetłumaczyć jeden na drugi. Problem wędrującego komiwojażera też jest na tej liście. Jednak nie wiadomo, czy dziś rano ktoś nie znalazł dla niego algorytmu klasy P , rozwiązując tym samym wiele równoważnych mu problemów. Nie wiadomo nawet, czy problemy klasy NP istnieją w rzeczywistości. To ostatnie pytanie jest znane jako problem "czy $NP = P$?" [5].

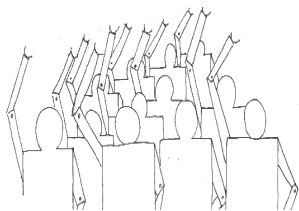
dane	czas obliczeń dla zadanej wielkości danych					
N	$N[s]$	$N^2[s]$	$N^3[s]$	$N^4[s]$	$2^N[s]$	$3^N[s]$
10	10^{-5}	10^{-4}	0.001	0.1	0.001	0.059
20	$2 \cdot 10^{-5}$	$4 \cdot 10^{-4}$	0.008	3.2	1	58 min
30	$3 \cdot 10^{-5}$	$9 \cdot 10^{-4}$	0.027	24.3	17.9 min	6.5 lat
40	$4 \cdot 10^{-5}$	0.0016	0.064	1.7 min	12.7 dni	385500 lat
50	$5 \cdot 10^{-5}$	0.0025	0.125	5.2 min	35.7 lat	$2 \cdot 10^{10}$ lat
60	$6 \cdot 10^{-5}$	0.0036	0.216	13 min	36600 lat	$1.2 \cdot 10^{15}$ lat

Tablica 1.1: Porównanie czasów obliczeń problemów klasy P i klasy NP [4].

Czasem problemy bardzo zbliżone do siebie różnią się klasą trudności. Przykładem jest problem znalezienia najkrótszej sieci połączeń między N miastami [6], który różni się od problemu wędrującego komiwojażera

tylko możliwością odrywania ołówka od papieru. Problem najkrótszej sieci jest klasy P .

Z pojęciem praktycznej nierozwiązywalności problemu wiążą się pojęcia złożoności (*complexity*), i nieredukowalności czy też nieprzewidywalności obliczeniowej [7]; użycie poszczególnych terminów zależy od kontekstu, a często od przyzwyczajień autorów. Złożoność problemu definiuje się jako minimalną długość algorytmu jego rozwiązania. O nieprzewidywalności obliczeniowej mówimy, gdy algorytmu nie można skrócić: jedyną drogą uzyskania wyniku jest wykonanie obliczeń krok po kroku.



Rozdział 2

DEFINICJE I PRZYKŁADY

Automat komórkowy jest pojęciem matematycznym. Jest to:

- *sieć* komórek $\{i\}$ przestrzeni D -wymiarowej,
- *zbiór* $\{s_i\}$ stanów pojedynczej komórki, zwykle ten sam dla wszystkich komórek, zawierający k elementów,
- *reguła* F określającą stan komórki w chwili $t + 1$ w zależności od stanu w chwili t tej komórki i komórek ją otaczających;
 $s_i(t + 1) = F(\{s_j(t)\}), j \in O(i)$
 gdzie $O(i)$ jest *otoczeniem* i -tej komórki.

Taka jest definicja automatu komórkowego tzw. *deterministycznego*. Jeśli ponadto funkcja F zależy od zmiennej losowej, to automat nazywamy *probabilistycznym*.

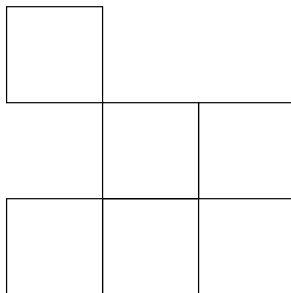
2.1. Przykład: *Life*

Automat *Life* jest zdefiniowany na dwuwymiarowej sieci kwadratowej, a więc $D = 2$. Można sobie tę sieć wyobrażać jak papier w kratkę. Każda kratka to pojedyncza komórka. Zbiór stanów każdej komórki zawiera tylko dwa elementy ($k = 2$), a mianowicie "0" i "1". Inaczej mówiąc, komórka jest "żywa" (1) lub "martwa" (0).

Otoczeniem i -tej komórki w automacie *Life* są wszystkie komórki z nią sąsiadujące, a więc stykające się z nią krawędziami lub rogami. Takie otoczenie nosi nazwę *otoczenia Moore'a*, i jest pokazane na rysunku 2.2b. Centralna, czyli i -ta komórka nie należy do swojego otoczenia - reguła automatu traktuje ją inaczej.

Reguła F automatu *Life* jest następująca: jeśli w otoczeniu komórki (nie licząc jej samej) są w czasie t trzy komórki żywe, to w czasie $t + 1$ ta komórka jest żywa ($F = 1$). Jeżeli w jej otoczeniu w czasie t są dwie

komórki żywe, a ona sama również jest żywa, to pozostaje żywa również w czasie $t + 1$ ($F = 1$). W pozostałych przypadkach jest ona martwa w czasie $t + 1$ ($F = 0$). Jak widać, *Life* jest automatem deterministycznym.



Rysunek 2.1: "Szybowiec" (*glider*) - ruchoma konfiguracja w automacie *Life*.

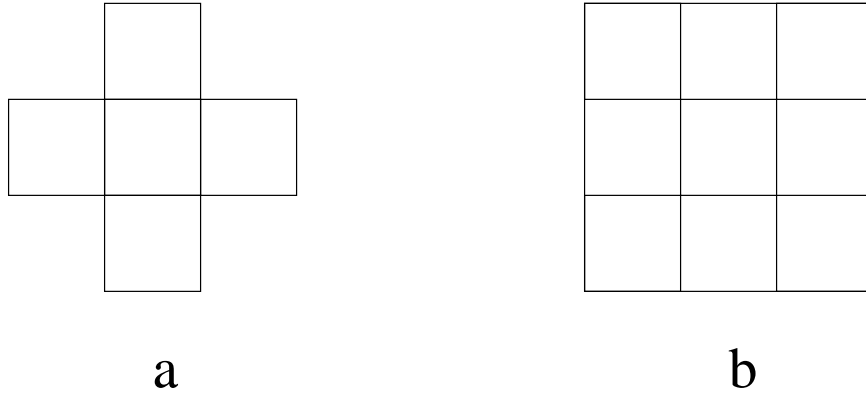
2.2. Najprostsza notacja

Jak widać, ważne parametry automatu to wymiar sieci D , ilość stanów pojedynczej komórki k oraz otoczenie. Często używanym parametrem jest promień r otoczenia. Dla automatu *Life* $r = 1$; argumentem funkcji F są tylko najbliżsi sąsiedzi danej komórki.

Często używaną notacją dla określenia całej rodziny automatów jest podanie dwóch liczb: (k, r) . W tej notacji automat *Life* jest zapisany jako $(2, 1)$. Notacja ta nie jest precyzyjna: nie podaje wymiaru sieci, w związku z czym nie musi być jasne, czy np. dla automatu dwuwymiarowego otoczenie jest *otoczeniem von Neumanna* (Rysunek 2.2 a) czy *otoczeniem Moore'a* (Rysunek 2.2 b). Niemniej często jej się używa zwłaszcza, gdy chodzi o automaty jednowymiarowe.

2.3. Przykład: 256 automatów jednowymiarowych (2,1)

Najdokładniej zbadaną rodziną automatów [1] są jednowymiarowe ($D = 1$) automaty deterministyczne o 2 stanach komórki ($k = 2$) i otoczeniu składającym się z najbliższych sąsiadów. Reguła tych automatów jest zależnością stanu komórki w czasie $t + 1$ od stanu tej komórki i jej dwóch najbliższych sąsiadów w czasie t . Promień r otoczenia jest więc równy 1. Zgodnie z powyższą notacją te automaty oznaczamy jako $(2, 1)$.



Rysunek 2.2: (a) otoczenie von Neumanna, (b) otoczenie Moore’a.

Można zapytać, ile jest automatów w tej rodzinie? Argumentem funkcji F jest stan $2r+1 = 3$ komórek, każda może być w $k = 2$ stanach; funkcja F musi więc być określona dla $2^3 = 8$ różnych konfiguracji. Dla każdej konfiguracji funkcja F może przyjmować $k = 2$ wartości. Można więc określić tę funkcję na $2^8 = 256$ sposobów. Otrzymujemy 256 automatów. Za Wolframem [1] nazywamy je *elementarnymi*.

Często określa się automat elementarny, podając wartości funkcji F stanów otoczenia w następującej kolejności:

111 110 101 100 011 010 001 000

Zgodnie z tą konwencją wystarczy podać ciąg ośmiu liczb, 0 lub 1. Wygodnie jest traktować ten ciąg jako numer kolejny automatu elementarnego, od 0 do 255, zapisany w postaci dwójkowej. Na przykład dla automatu 90 reguła F jest zdefiniowana następująco:

111	110	101	100	011	010	001	000
0	1	0	1	1	0	1	0

co oznacza, że konfiguracji 111 przypisuje się 0 itp. Automat 90 jest równoważny działaniu XOR (wyłączające "lub") na stanach sąsiadów komórki centralnej. Wyróżnia się on tym, że z jednej komórki produkuje fraktal: dywan Sierpińskiego.

Szczególne znaczenie przypisywał Wolfram automatom tzw. *legalnym*, które spełniają pewne żądania dodatkowe. Mianowicie stan próżni (*quiescent state*) jest zachowany, czyli ostatni bit w regule F jest równy 0, oraz funkcja F jest symetryczna, tj. $F(\alpha\beta\gamma) = F(\gamma\beta\alpha)$. Te warunki ograniczają zbiór do 32 automatów, których regułę można zapisać jako ciąg $\alpha\beta\gamma\delta\beta\epsilon\delta 0$.

Automaty elementarne są rodziną łatwą do badania, bo jest ich stosunkowo niewiele. W skład rodziny (3,1) wchodzi już 3^{27} automatów.

2.4. Notacja automatów głosujących

Od czasu do czasu spotyka się w literaturze próby wprowadzenia notacji, pozwalającej kodować reguły automatu w formie ich nazw. Takie nazwy trudno się przyjmują, i poza wyżej omówioną notacją Wolframa nie zyskały popularności. Za wyjątek należałoby być może uznać notację dwuwymiarowych automatów tzw. głosujących (*voting, counting, totalistic rules*) o liczbie stanów $k = 2$. Reguły automatów głosujących zależą tylko od ilości jedynek w danym otoczeniu, a nie rozróżniają takich czy innych rozkładów tych jedynek - stąd nazwa.

Omawiany sposób zapisu reguł polega na podaniu litery symbolizującej otoczenie oraz liczby, która oznacza ile jedynek powinno zawierać otoczenie, aby wartością reguły była jedynka. Otoczenia oznacza się, wykorzystując pierwsze litery francuskich liczebników: *deux, trois, quatre, huit* (2,3,4,8) oraz międzynarodowego słowa *centre* [2]. Tak więc w tej konwencji otoczenie von Neumanna zapisuje się jako Q+C (oznaczane również jako V), a otoczenie Moore'a jako H+C (oznaczane również jako M). Można również wyróżniać pojedyncze komórki, i tu na odmianę wykorzystuje się pierwsze litery angielskich nazw kierunków geograficznych: N,E,S,W.

Na przykład dwuwymiarowy automat, który zwraca jedynkę tylko wtedy, gdy wśród najbliższych sąsiadów dwie komórki mają wartość 1, nosi nazwę Q2.



Rozdział 3

KLASYFIKACJA AUTOMATÓW KOMÓRKOWYCH

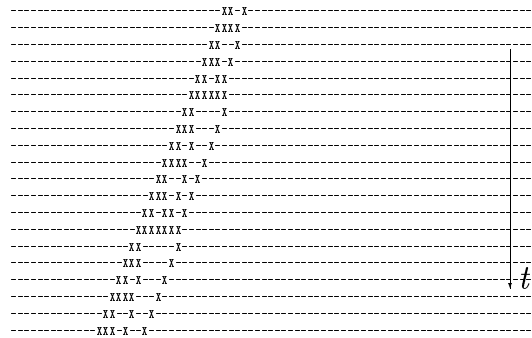
Jeżeli automaty komórkowe rozumieć jako modele czy też matematyczną realizację procesów dynamicznych w dyskretnym czasie i przestrzeni, to ich klasyfikacja mogłaby doprowadzić do klasyfikacji, i co za tym idzie - lepszego zrozumienia, wszystkich takich procesów. Jest to więc zadanie bardzo pociągające.

Ewolucja sieci rządzona regułami deterministycznego automatu komórkowego zależy od reguł automatu i od stanu początkowego sieci. Wszystkie znane próby klasyfikacji automatów komórkowych są próbami uwolnienia się od tej drugiej zależności i przypisania automатовi konkretnych cech jedynie na podstawie jego reguł.

3.1. Klasyfikacja na podstawie obserwacji

Pierwsza i dotąd najbardziej popularna jest klasyfikacja Wolframa [8]. Zgodnie z nią automaty komórkowe dzielą się na cztery klasy:

- I. Automaty prowadzące do jednorodnych konfiguracji sieci, w których stan wszystkich komórek jest taki sam i nie zmienia się w czasie. Rys (3.1)
- II. Automaty prowadzące do nie zmieniających się lub periodycznych prostych konfiguracji. Rys (3.2)
- III. Automaty prowadzące do konfiguracji chaotycznych. Rys (3.3)
- IV. Automaty prowadzące do złożonych konfiguracji lokalnych, często o długich czasach życia. Rys (3.4)



Rysunek 3.4: Automat klasy IV.

bogata? Te pytania będą nam towarzyszyły zawsze - są to największe problemy metody automatów komórkowych.

Można też pytać, czy czas obserwacji był wystarczająco długi? Na ogół uważa się, że można wychwycić prawidłowości zachowania się sieci dla asymptotycznie długiego czasu, jeżeli pominąć w obserwacji pewną ilość stanów na początku ewolucji. Mówi się o tzw. efekcie włączeniowym (*transient effect*) i o czasie włączeniowym (*transient time*). Z drugiej strony symulacja może być prowadzona z oczywistych względów tylko dla skończonej sieci. Jak łatwo zauważyć, ilość stanów skończonej sieci jest skończona. Wystarczająco długi czas obserwacji musi więc doprowadzić nas do wniosku, że każdy automat jest periodyczny. Co wobec tego znaczy klasa III, skoro za chaos uważamy stałe zwiększanie różnic między stanami sieci?

Problem teorii układów nieskończonych jest starszy, niż komputery - towarzyszy nam od czasów Poincare. Jedna z jego wersji [9] brzmi tak: jak można mówić o ciągłych przejściach fazowych dla układów skończonych? Cała teoria wskaźników krytycznych opiera się, jak wiadomo, na tzw. granicy termodynamicznej, czyli przejściu granicznym z rozmiarem układu do nieskończoności. Można na przykład łatwo udowodnić w ramach formalizmu sumy statystycznej, że spontaniczne namagnesowanie każdego skończonego układu wynosi zero. Przejście do granicy termodynamicznej nie zmieni tego wyniku, chyba że ... pole magnetyczne jest różne od zera. Rzeczywiście, w mechanice statystycznej radzimy sobie, przechodząc najpierw z rozmiarem układu do nieskończoności, a potem z polem magnetycznym do zera. Pierwsze z tych przejść granicznych eliminuje konfiguracje z namagnesowaniem skierowanym przeciwnie, niż pole. W tym momencie symetria kierunkowa zostaje złamana.

Podobną argumentację stosujemy, dyskutując klasyfikację Wolframa. Mamy tu do czynienia z dwoma przejściami granicznymi: z rozmiarem układu do nieskończoności i z czasem obserwacji do nieskończoności. Jeżeli najpierw wykonać drugie z nich, każdy automat okaże się periodyczny - i tego wyniku przejście do granicy termodynamicznej zmienić już nie może. Jeśli jednak wykonać je najpierw, przyjmując skończony czas obserwacji, to możemy zaobserwować chaotyczne zachowanie automatu: mała zmiana konfiguracji początkowej sieci prowadzi do narastających w czasie modyfikacji kolejnych stanów. Mierzymy je zwykle za pomocą tzw. odległości Hamminga między konfiguracjami σ_1, σ_2 , która dla stanów komórki 0 lub 1 da się zapisać jako

$$d(\sigma_1, \sigma_2) = \sum_{i=1}^N |s_i(\sigma_1) - s_i(\sigma_2)| \quad (3.1)$$

gdzie s_i oznacza stan i -tej komórki w konfiguracji σ .

Taka kolejność przejść granicznych znajduje potwierdzenie w praktyce fizyki eksperymentalnej. Mianowicie obserwowane obiekty zwykle zawierają liczbę atomów N rzędu liczby Avogadro, co nam specjalnie nie przeszkadza. Jak stwierdzono w pracy [10], "dla fizyka logarytm z nieskończoności jest mniejszy niż sto". Natomiast ilość stanów układu, która mogłaby służyć do oceny czasu powrotu Poincarego, rośnie jak $\exp(N)$. Jak widać, przybliżenie skończonego czasu obserwacji jest bardziej realistyczne.

Podsumowując, centralnym problemem dla klasyfikacji automatów jest problem wystarczająco bogatej statystyki stanów początkowych, co wiąże się jednocześnie z zależnością wyników od rozmiaru sieci. Sformułowanie "typowa konfiguracja" jest synonimem kłopotów. Można te kłopoty zilustrować [1] przykładem jednowymiarowego automatu nr 32 (=00100000) klasy (2,1), dla którego wartość funkcji F jest zero zawsze z wyjątkiem konfiguracji 101. Automat 32 jest ewidentnie klasy I. Gdyby jednak starać się to stwierdzić algorytmicznie, zawsze istnieje możliwość wylosowania sekwencji ...1010101010101... , którą automat będzie likwidował w czasie równym długości tej sekwencji. Inna sprawa, że taka sekwencja jest mało prawdopodobna, jeśli warunki początkowe są wybierane losowo.

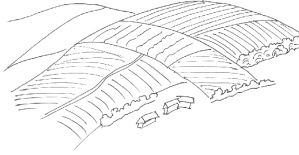
Należy dodać, że jak zostało udowodnione w pracy [11], problem klasyfikacji automatów na nieskończonej sieci jest nierozwiązywalny, tak samo jak problem stopu.

3.2. Klasyfikacja na podstawie reguł

Z nielicznymi wyjątkami [12], wszystkie inne (poza wolframowską) schematy klasyfikacji automatów komórkowych polegają na próbie zdefiniowania parametru (jednego lub kilku), którego wartość pozwoliłaby określić przynależność automatu do tej czy innej klasy. Te parametry są z reguły definiowane w sposób probabilistyczny, tj. z użyciem rachunku prawdopodobieństwa. Najprostszym takim parametrem dla automatów elementarnych (2,1) jest tzw. aktywność λ , czyli względna ilość jedynek w tabeli. Gdyby automat był probabilistyczny, aktywność można by określać jako prawdopodobieństwo otrzymania jedynki. Automat probabilistyczny o podanej aktywności generowałby jedynki z prawdopodobieństwem równym λ . Stany sąsiednich komórek takiego automatu byłyby nieskorelowane, i podanie aktywności byłoby podaniem całej informacji o automacie. Jednak traktowanie automatu deterministycznego za pomocą pojęć probabilistycznych jest równoznaczne z zaniedbaniem informacji o dalekozasięgowych korelacjach, czyli o tym co jest w automatach komórkowych najbardziej interesujące. W zasadzie więc można powiedzieć, że wszystkie metody probabilistyczne (które można określić wspólnym mianem metod średniego pola) są nieskuteczne.

Jednak poza nimi i poza metodami obserwacji, których słabe punkty wymieniliśmy wcześniej, nie dysponujemy żadnym innym narzędziem klasyfikacji automatów komórkowych.

Na parametrze aktywności oparta jest klasyfikacja Li i Packarda [13]. Klasyfikacja ta okazała się pomocna w dyskusji "przejścia fazowego" między klasą II i III, w miarę jak wartości λ zmieniają się od zera do 0.5. W obszarze przejścia autorzy znaleźli automaty klasy IV. Pojawiło się interesujące pytanie, czy przejście to może w pewnych warunkach być zredukowane do punktu? Wrócimy do tego pytania w dalszych rozdziałach.



Rozdział 4

METODY ŚREDNIEGO POLA

Poniżej omówimy kilka zastosowań metody średniego pola, tj. metody zaniedbującej korelację między komórkami, do parametryzacji deterministycznych automatów komórkowych. Zaczniemy od zastosowań najprostszych. Tam, gdzie to będzie możliwe, zilustrujemy dane zastosowanie przykładem elementarnego automatu 22 (00010110). Automat ten jest znany jako ”*Life* jednowymiarowy”. Zwraca on jedynekę wtedy i tylko wtedy, gdy w komórce lub w jej bezpośrednim sąsiedztwie znajdowała się jedna jedynka.

Jak wynika z reguły, parametr aktywności λ dla automatu 22 wynosi $3/8 = 0.375$. Można to zinterpretować w ten sposób: automat zachowuje w czasie średnią ilość jedynek o koncentracji $3/8$.

4.1. Równania ewolucji

Kolejną wersją metody średniego pola jest konstrukcja [14] równania iteracyjnego (tzw. uproszczonego równania ewolucji) na częstość występowania zer w kolejnych krokach czasowych. Ta metoda stosuje się do automatów, które zachowują stan próżni, tj. spełniają warunek: $000 \rightarrow 0$. Oznaczmy częstość zer w czasie t przez ν_t . Równanie iteracyjne ma postać

$$\nu_{t+1} = \nu_t^3 + (1 - \nu_t^3)(1 - \kappa) \quad (4.1)$$

gdzie κ jest zrenormalizowaną aktywnością, bez uwzględnienia stanu próżni który na pewno zwróci zero. Dla pozostałych konfiguracji otoczenia, które będą się zdarzać z częstością $1 - \nu_t^3$, prawdopodobieństwo wylosowania zera wynosi $1 - \kappa$. Równanie (4.1) można traktować jako równanie fundamentalne, czyli tzw. równanie M (*master equation*) [15].

Dla automatu 22 wartość κ wynosi $3/7 \approx 0.4286$. Średnią koncentrację jedynek, którą być może zachowuje automat, można badać za pomocą teorii stabilności (Dodatek A). Znajdujemy więc, że równanie (4.1) ma dwa punkty stałe ν^* . Istnienie pierwszego z nich, $\nu^* = 1$ (same zera) wynika z zachowania stanu próżni. Drugi punkt stały jest w punkcie

$$\nu^* = \frac{1}{6}\sqrt{57} - \frac{1}{2} \approx 0.758 \quad (4.2)$$

Stabilność tych punktów stałych badamy, sprawdzając czy $G'(\nu^*) > 1$, gdzie funkcja $G' = 3\kappa\nu_t^2$ jest pochodną funkcji G z prawej strony równania (4.1). W pierwszym punkcie stałym funkcja $G' = 9/7 > 1$ - stan próżni nie jest stabilny. W drugim punkcie stałym $G' \approx 0.739 < 1$. Oznacza to, że automat 22 zachowuje średnią koncentrację jedynek $1 - \nu^* \approx 0.242$.

Dokładniejsze przybliżenie [14] polega na wyseparowaniu w funkcji G konfiguracji o różnych ilościach zer. Otrzymujemy równanie ewolucji

$$\nu_{t+1} = \sum_{i=0}^3 b_i \nu_t^i (1 - \nu_t)^{3-i} \quad (4.3)$$

gdzie b_i jest ilością konfiguracji otoczenia o i zerach, które dają zero. Dla automatu 22 współczynniki b_i są następujące: $b_3 = 1$ (zachowanie stanu próżni), $b_2 = 0$ (każdy stan z dwoma zerami daje 1), $b_1 = 3$ (każdy stan z dwoma jedynekami daje 0) i $b_0 = 1$ (trzy jedynek dają zero).

Analogiczne równanie można napisać dla koncentracji jedynek. Takie równanie dla automatu 22 ma postać $\Psi_{t+1} = 3\Psi_t(1 - \Psi_t)^2$, co oznacza, że jedynkę otrzymujemy wtedy, gdy w otoczeniu jest jedna jedynka i dwa zera, przy czym są trzy takie konfiguracje. Równoważność równania na ν_t i równania na Ψ_t widać od razu, gdy dodamy te równania stronami. Oba te równania wydają się być wiernym sposobem opisu zwłaszcza dla automatów głosujących.

Podobnie jak poprzednio otrzymujemy dwa punkty stałe: $\Psi^* = 0$ (zachowany stan próżni) oraz $\Psi^* = 1 - 3^{-1/2} \approx 0.423$. Stan próżni jest znów niestabilny, ponieważ w tym punkcie wartość pochodnej odpowiedniej funkcji wynosi 3.0. Drugi punkt stały jest stabilny (wartość pochodnej wynosi ok. -0.464). Średnia koncentracja jedynek w tym przybliżeniu wynosi więc ok. 42 procent.

Symulacje komputerowe przeprowadzone dla automatu 22 pozwalają oszacować średnią ilość jedynek jako wartość bliską 0.35. Kolejne przybliżenia produkują, jak widać, wyniki tylko jakościowe.

4.2. Teoria struktury lokalnej

Najpoważniejszą próbą probabilistycznego opisu automatów komórkowych jest jak dotąd teoria struktury lokalnej (*local structure theory*) [16]. Zastępuje ona ewolucję konfiguracji sieci zgodną z regułą deterministycznego automatu przez ewolucję rozkładu prawdopodobieństwa lokalnych konfiguracji. Rozmiar n tych konfiguracji jest parametrem teorii. Praca [16] ogranicza się do badania automatów o $k = 2$, tj. o dwóch stanach komórki.

Podstawowym założeniem teorii jest zaniedbanie korelacji między odpowiednio dalekimi komórkami sieci. W tym sensie jest to uogólnieniem teorii średniego pola, które zaniedbuje korelacje w ogóle. Celem wprowadzenia teorii struktury lokalnej było otrzymanie dla danego automatu rozkładu prawdopodobieństwa lokalnych konfiguracji sieci, który nie zmieniałby się w czasie (*miara niezmiennicza*). Taki wynik można było porównać z wynikiem ewolucji sieci pod działaniem reguły automatu, uśrednionego po konfiguracjach wyjściowych.

Ewolucja rozkładu prawdopodobieństwa $P(\sigma)$ lokalnych konfiguracji σ jest otrzymywana w następujący sposób:

1. Dla danej konfiguracji $\sigma(n)$ o rozmiarze n znajdujemy wszystkie konfiguracje $\xi(m)$, które ją produkują zgodnie z deterministycznymi regułami automatu. Dla automatów jednowymiarowych $m = n + 2r$, gdzie r jest promieniem otoczenia. Przepis na m łatwo uogólnić na przypadek sieci o większym wymiarze.
2. Mając dany rozkład $P_n(\sigma)$, obliczamy rozkład prawdopodobieństwa $P_m(\xi)$, korzystając z formuły Bayesa na prawdopodobieństwo warunkowe. Wygodnie wyjaśnić użycie tej formuły na przykładzie automatu jednowymiarowego: prawdopodobieństwo $P_{n+1}(\xi)$ konfiguracji lokalnej $\xi(n+1)$, która powstała z konfiguracji $\sigma(n)$ przez dołączenie do niej z prawej strony jednej komórki w stanie s , otrzymujemy ze wzoru

$$\frac{P_{n+1}(\xi)}{P_n(\sigma)} = \frac{P_n(L\xi)}{P_{n-1}(L\sigma)} \quad (4.4)$$

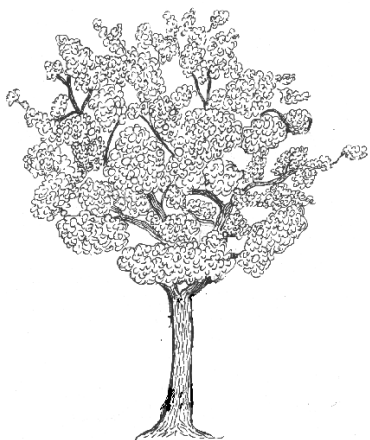
gdzie $L\pi$ jest konfiguracją otrzymaną z konfiguracji π przez odjęcie z lewej strony jednej komórki. Rozmiar konfiguracji $L\pi$ jest oczywiście o jeden mniejszy, niż rozmiar konfiguracji π . Rozkład P_n konfiguracji o rozmiarze n jest dany. Rozkład $P_{n-1}(L\sigma)$ łatwo otrzymać z rozkładu $P_n(\sigma)$ jako rozkład brzegowy, tj. sumując prawdopodobieństwa P_n po stanach odjętej komórki.

3. Obliczamy zmodyfikowane prawdopodobieństwo $P_n(\sigma)$ konfiguracji σ , sumując prawdopodobieństwa $P_m(\xi)$ wszystkich konfiguracji ξ , które ją produkowały.

Kolejne powtarzanie sekwencji kroków 1,2,3 powinno - jak mamy nadzieję - doprowadzić do ustalenia się pewnego rozkładu prawdopodobieństwa $P_n(\sigma)$, którego dalsze obliczenia już nie będą modyfikowały. Jak widać, przybliżenie kryje się we wzorze (4.4). Formuła Bayesa użyta w ten sposób prowadzi do zaniedbania korelacji między komórkami, oddalonymi o n .

Przewidywania teorii struktury lokalnej okazały się zgodne z wynikami obliczeń deterministycznych jedynie dla niektórych automatów, spełniających określone własności. Autorzy pracy [16] wymieniają tu automaty liniowe (o których mowa w rozdziale 6.1), automaty idempotentne, tj. takie, których stan ustala się po pierwszym kroku ($F^2 = F$, gdzie F jest funkcją określającą regułę automatu) oraz automaty tzw. przegubowe (*toggle rules*). Ta ostatnia klasa zawiera automaty, których reguła daje wyniki zmieniające się wraz ze stanem skrajnie lewej (lub skrajnie prawej) komórki otoczenia. Tak liniowe, jak przegubowe automaty dają zawsze tyle samo konfiguracji ξ , prowadzących do każdej konfiguracji σ .

Wymienione wyżej trzy klasy automatów nie są najbardziej interesujące. Liniowość automatów pozwala w pewnym sensie wyeliminować korelacje; w regułach zakodowana jest zasada superpozycji, a więc konfiguracje nakładają się na siebie, nie modyfikując się nawzajem. Automaty idempotentne należą do dwóch pierwszych klas Wolframa. Można powiedzieć, że najciekawsze cechy automatów wiążą się z korelacjami dalekozasięgowymi. Teoria struktury lokalnej takie właśnie korelacje zaniedbuje. W pewnym sensie jest więc ona skazana na niepowodzenie. A jednak jest chyba najlepszą znaną realizacją zastosowania metod probabilistycznych do badania deterministycznych automatów komórkowych.



Rozdział 5

ODWRACALNOŚĆ

Mając dany automat (patrz definicja w rozdziale 2), każdemu stanowi sieci (w czasie t) możemy przyporządkować stan sieci (w czasie $t + 1$). Można zapytać, czy dla takiej transformacji zbioru stanów sieci w siebie istnieje transformacja odwrotna? Czy ta transformacja da się zapisać jako automat komórkowy? Czy reguły tak otrzymanego automatu są jednoznacznie określone?

Ogólnie biorąc, to zagadnienie należy do klasy problemów nierozwiązywalnych (*undecidable*) ([17], dyskusja w rozdziale 1). Wyjątek stanowią automaty jednowymiarowe [18], o których wiadomo również, że jeżeli dla danego automatu o lokalnych regułach istnieje automat odwrotny, to jest on również automatem o lokalnych regułach [19]. Przegląd zagadnień związanych z odwracalnością automatów komórkowych można znaleźć w pracy [20].

Zasadnicza trudność w określeniu odwracalności automatu jest związana z faktem, że reguła automatu jest funkcją stanu kilku komórek, ale wartością jest stan tylko jednej komórki. Żeby zdefiniować funkcję odwrotną, funkcja wyjściowa musi być bijekcją. Trzeba więc użyć lokalnych reguł do zdefiniowania funkcji globalnej, zależnej od stanu całej sieci. Argumentem tej funkcji jest również stan całej sieci. Można to zilustrować następująco:

$$\begin{array}{ccc} \text{odwzorowanie lokalne} & \rightarrow & \text{odwzorowanie globalne} \\ & & \downarrow \\ \text{odwrotne odwzorowanie lokalne} & \rightarrow & \text{odwrotne odwzorowanie globalne} \end{array}$$

Nawet, jeśli takie postępowanie jest możliwe, jest możliwe tylko dla sieci skończonej. Nigdy jednak nie możemy być pewni, czy wybrany

Nr	Stany komórki	Nr	Stany komórki
0	0000	8	1000
1	0001	9	1001
2	0010	10	1010
3	0011	11	1011
4	0100	12	1100
5	0101	13	1101
6	0110	14	1110
7	0111	15	1111

Tablica 5.1: Lista automatów $(2, 1/2)$, podanych w postaci 4 stanów komórki w czasie $t + 1$, jeśli jej otoczenie w czasie t było w stanach: 11, 10, 01 i 00.

rozmiar sieci jest wystarczający.

Ponieważ jednak naszym zamiarem jest uzyskanie przez Czytelnika pewnego wglądu w zagadnienie, rozpatrzmy poniżej przykład prostej klasy automatów, na którym możemy prześledzić problem odwracalności. Uważamy, że warto to zrobić nawet, jeśli nie potrafimy zaproponować żadnego nowego algorytmu.

5.1. Przykład: $(2,1/2)$

Automaty wybranej dla przykładu klasy mają dwa stany komórki: 0 i 1 ($k = 2$), a otoczenie zawiera $2r + 1 = 2$ komórki ($r = 1/2$), tj. stan każdej komórki w czasie $t+1$ zależy od stanu tej komórki oraz jej sąsiada, powiedzmy, z lewej strony, w czasie t . Rozpatrywany układ składa się z $N = 3$ komórek tworzących jednowymiarowy układ z cyklicznymi warunkami brzegowymi, tj. na przykład komórka 1 ma z prawej strony komórkę 2 a z lewej - komórkę 3.

Jak widać, otoczenie może się znajdować w czterech stanach: 11, 10, 01 i 00. Każdemu stanowi otoczenia można przyporządkować 0 lub 1. Wszystkich automatów jest więc $2^4 = 16$ (Tablica 5.1). Stanów układu jest $2^N = 8$, a więc wszystkich przypadków mamy $8 \cdot 16 = 128$. Tak niewielką klasę automatów można zbadać w sposób "wyczerpujący" (*exhaustive, brute-force*), czyli automat po automacie. Celem tego zbadania, które można by określić jako "sprawdzenie", jest podział rozpatrywanej klasy automatów na odwracalne i nieodwracalne.

Tak sformułowane zagadnienie można jednak jeszcze nieco skrócić, ponieważ niektóre z rozpatrywanych 16 automatów można z góry zakwalifikować jako nieodwracalne. Są to te automaty, których reguły zapisane w postaci tabel zawierają więcej zer niż jedynek lub więcej jedynek niż zer. Możemy to zrozumieć intuicyjnie, jeśli zauważymy, że odwracalna transformacja zbioru stanów całej sieci w siebie musi być różnowartościowa. Zbiór stanów sieci otrzymanych w czasie $t + 1$ musi zawierać wszystkie możliwe stany. W zbiorze wszystkich możliwych stanów jest tyle samo zer, co jedynek. Gdyby tabela podająca reguły automatu zawierała więcej zer lub więcej jedynek, ta asymetria musiałaby być widoczna również w zbiorze stanów globalnych. Z tego wynika, że mamy do zbadania odwracalności jedynie sześć automatów z Tabeli 10.1: 3, 5, 6, 9, 10 i 12. Pozostałe dziesięć automatów można z góry określić jako nieodwracalne.

Z kolei niektóre z wyliczonych sześciu automatów są pozornie tylko określone na otoczeniu składającym się z dwóch komórek: naprawdę ich reguły zależą tylko od jednej komórki. Łatwo zauważyć, że w omawianym przykładzie znajdziemy cztery takie automaty. Stan komórki w czasie $t + 1$ może bowiem być określony jako stan tej samej komórki w czasie t lub stan przeciwny (zero zamiast jedynki), lub stan sąsiada tej komórki, lub stan do niego przeciwny. Oznaczając stan komórki jako y a stan jej sąsiada jako x , możemy określić automat zależny tylko od jednej komórki jako x (automat 12), $\sim x$ czyli "nie x " (automat 5), y (automat 10) lub $\sim y$ (automat 3). Otóż takie automaty muszą być odwracalne. Ich reguły są bowiem różnowartościowym odwzorowaniem zbioru stanów jednej komórki w siebie, a takie odwzorowanie jest jedno-jednoznaczne.

Jak widać, pozostały nam dwa automaty, których odwracalność trzeba po prostu sprawdzić. Są to automaty 6 i 9 (numeracja jak w tabeli 5.1). Metoda sprawdzania zależy od przyjętych warunków brzegowych, jakie narzucamy na układ. Dla periodycznych warunków brzegowych i układu skończonego można sobie wyobrazić sprawdzanie metodą wyczerpującą, która polega tu na zastosowaniu reguł tego automatu kolejno do wszystkich konfiguracji układu. Jeżeli znajdziemy dwie konfiguracje, które w następnym kroku czasowym dają ten sam wynik, możemy być pewni że automat jest nieodwracalny: zbiór stanów wyjściowych zawiera mniej stanów, niż zbiór stanów wejściowych czyli zbiór wszystkich stanów danego otoczenia. Pozostaje problem, jak duży układ powinniśmy wybrać do badania - i tu kryje się zasadnicza trudność. Jakikolwiek

bowiem układ wybierzemy, musi on być skończony, ponieważ możemy sprawdzić tylko skończoną ilość konfiguracji. Otóż jeśli nawet na podstawie takiego sprawdzenia dojdziemy do wniosku, że automat jest odwracalny, zawsze może się okazać, że ten sam automat jest nieodwracalny dla którejś z konfiguracji większego układu. Możemy być pewni tylko wyniku negatywnego: jeśli automat okaże się nieodwracalny dla danego układu, jest on nieodwracalny w ogóle.

Stan wyjściowy	111	110	101	100	011	010	001	000
Automat 6	000	101	011	110	110	011	101	000
Automat 9	111	010	100	001	001	100	010	111

Tablica 5.2: Lista wszystkich możliwych stanów układu 3 komórek oraz działanie automatów 6 i 9.

Tabela (5.2) zawiera listę stanów łańcucha trzech komórek z periodycznymi warunkami brzegowymi wraz ze stanami, które się z nich otrzymuje pod działaniem automatów 6 i 9. Jak widać, automaty 6 i 9 można otrzymać jeden z drugiego przez zamianę w regułach 0 i 1. Ta sama symetria jest widoczna w regułach automatów (tabela 5.1). Ogólnie można się spodziewać, że jeżeli lista stanów komórki zawiera k symboli, otrzymamy $k!$ równoważnych automatów - wszystkie odwracalne lub wszystkie nieodwracalne.

5.2. Rajski ogród

To samo pytanie o odwracalność można sformułować następująco: czy istnieją konfiguracje, które nigdy nie powstaną jako wynik działania danego automatu? Taka konfiguracja mogłaby być tylko stanem początkowym układu; ewolucja zgodna z regułami automatu nigdy do niej nie doprowadzi. Stąd nazwa (*Garden of Eden*) [21]: można z nich wyjść ale niepodobna wrócić. Problem stwierdzenia nieodwracalności automatu można więc przedstawić jako problem znalezienia konfiguracji nieosiągalnej w ramach działania reguł danego automatu, czyli znalezienia "rajskiego ogrodu".

W pracy [22] podano oszacowanie minimalnego rozmiaru układu, w którym dla automatu *Life* konfiguracja nieosiągalna istnieje. (Automat *Life* omawiamy w rozdziale 9.) Obliczenie oparte jest na fakcie, że zgodnie z regułami tego automatu izolowana żywa komórka ginie w następ-

nym kroku czasowym. Ponieważ układ martwych komórek pozostaje również martwy, mamy już dwa stany układu prowadzące w następnym kroku do tego samego stanu. Nawiasem mówiąc, sam ten fakt wystarczy, aby udowodnić nieodwracalność automatu *Life*.

Metoda szukania konfiguracji nieosiągalnej również zależy od przyjętych warunków brzegowych. Układ wyjściowy przyjęty w pracy [22] jest większy niż układ końcowy - ten ostatni nie zawiera komórek brzegowych. Układ wyjściowy jest więc kwadratem, którego bok jest o 2 komórki dłuższy, niż bok układu końcowego. Ilość stanów układu początkowego jest więc większa, niż ilość stanów układu po jednym kroku. Jednak obliczenie, o którym mowa, polega na porównaniu ilości wszystkich stanów wyjściowych N_t układu otwartego z ilością stanów N_{t+1} otrzymanych pod działaniem automatu *Life*. Jeśli udałooby się nam pokazać, że $N_t < N_{t+1}$, oznaczałoby to że niektóre spośród N_{t+1} stanów nie mogą być otrzymane w ramach reguły "*Life*". Brzmi to jednak paradoksalnie: jak ilość stanów większego układu może być mniejsza?

Trick polega na wyeliminowaniu niektórych stanów większego układu, których, jak się okazuje, nie musimy brać pod uwagę. Niech układ początkowy będzie złożony z M kwadratów 5×5 komórek. Stany takiego kwadratu, w których wszystkie komórki są martwe, są w pewien sposób równoważne stanom, w których martwe są wszystkie komórki z wyjątkiem środkowej. Równoważność ta polega na tym, że oba te stany prowadzą w następnym kroku czasowym do stanu, w którym wszystkie komórki są martwe. Rozmiar kwadratu (5×5) jest wystarczająco duży, aby można było być pewnym że stan centralnej komórki nie wpłynie na ewolucję komórek poza danym kwadratem. Dwóch wymienionych stanów nie musimy więc rozróżniać; prowadzą one do tego samego stanu. Ilość stanów początkowych N_t w nierówności z poprzedniego paragrafu możemy więc zastąpić przez coś mniejszego, a mianowicie

$$N'_t = (2^{25} - 1)^{M^2} = 2^{24.9999999957004337...M^2} \quad (5.1)$$

Tak więc nierówność, której spełnienie jest równoznaczne istnieniu konfiguracji nieosiągalnej w ramach *Life*, ma postać

$$(2^{25} - 1)^{M^2} = 2^{24.9999999957004337...M^2} < 2^{(5M-2)^2} \quad (5.2)$$

Jak sprawdzili autorzy pracy [22], nierówność ta jest spełniona, jeżeli M jest nie mniejsze niż 2325816000. W kwadracie o takim boku z pewnością istnieje więc konfiguracja, którą można określić jako

”rajski ogród”. Chociaż otrzymana liczba M może się wydawać nieco duża, zaprezentowana metoda dowodu jest wolna od wad metody wyczerpującej. Nie znamy jej uogólnienia na wszystkie automaty dwuwymiarowe. Łatwo jednak wyobrazić sobie zastosowanie tej metody do konkretnych automatów o lokalnych regułach.

5.3. Symetria T

Jak wiadomo, symetria T czyli symetria względem odbicia w czasie Newtonowskiego równania ruchu jest związana z przyspieszeniem - drugą pochodną czasową. Zależność siły od prędkości, czyli pierwszej pochodnej położenia, wprowadza dyssypację czyli straty energii. Takie równanie nie przejawia już symetrii T.

Coś podobnego można również napotkać w świecie automatów komórkowych. Istnieje prosty sposób konstrukcji odwracalnego automatu: bierzemy dowolny automat o k stanach pojedynczej komórki i rozszerzamy jego regułę f następująco [2]:

$$c_{t+1} = f(\{c_t\}) - c_{t-1}(\text{mod } k) \quad (5.3)$$

gdzie c_t jest stanem komórki, a $\{c_t\}$ - komórki i jej otoczenia w czasie t . Tak określony automat często zapisujemy symbolicznie, dodając do jego nazwy literę R (*reversible*). (Więcej o notacjach nazw automatów piszemy w rozdziale 2.) Jak widać, rozszerzona reguła automatu wymaga znajomości stanu komórek nie tylko w czasie t , ale także w czasie $t - 1$. Jest w tym pewna analogia z drugą pochodną po czasie. Dla szczególnego przypadku $k = 2$ różnica (5.3) jest równoważna działaniu XOR - wyłączającej alternatywy. Rozszerzoną zgodnie z równaniem (5.3) regułę f można zresztą sprowadzić do automatu, w którym pamięć o stanie w chwili $t - 1$ nie jest potrzebna. Ceną, którą trzeba zapłacić, jest zwiększenie ilości stanów pojedynczej komórki z k do $2k$.

Okazuje się, że tak skonstruowane automaty są nie tylko odwracalne, ale sekwencje stanów opisane ich regułami przejawiają symetrię względem odbicia w czasie. Wystarczy zamienić kolejnością dwa następujące po sobie stany całego układu, a dalszy rozwój układu opisany tymi samymi regułami będzie polegał na cofaniu się w czasie. Warunek symetrii T jest silniejszy, niż warunek odwracalności: istnieją automaty odwracalne, które tej symetrii nie wykazują.

	1		0		1		0		1		0		1		0
1	1	1	1	1	0	1	0	0	1	0	1	0	0	0	0
	1		0		0		1		0		1		1		0

Tablica 5.3: Działanie automatu 6R. Pierwszy wiersz podaje stan komórki w czasie $t - 1$, drugi - stan jej lewego sąsiada i jej samej w czasie t .

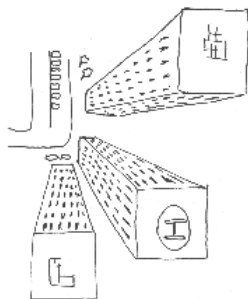
Te rozważania możemy zilustrować przykładem poprzednio omawianego automatu 6. Jego rozszerzoną wersję 6R podaje tabela 5.3. Już na podstawie tej tabeli można zaobserwować symetrię T automatu. Wystarczy zauważyć, że zamieniając jej pierwszy wiersz z trzecim otrzymujemy tę samą regułę.

Jak wspomniano wyżej, automat 6R można sprowadzić do automatu który nie wymaga pamięci o poprzednich stanach - w tym celu trzeba jednak wpisać informację o poprzednim stanie do danej komórki. Zbiór stanów pojedynczej komórki musi więc być rozszerzony, i będzie liczył cztery elementy: 11, 10, 01 i 00. Pierwszy z tych symboli zawiera informację o stanie danej komórki w poprzedniej chwili $t - 1$, a drugi - w chwili obecnej t . Zapisując powyższe cztery elementy jako 3, 2, 1 i 0, można zapisać automat 6R w postaci tabeli (5.4). Jak można było przewidzieć, automat wykazuje pewną nadmiarowość: mógłby być zapisany krócej. Jego reguła nie zależy od stanu komórki sąsiedniej w chwili $t - 1$, a więc nie odróżnia stanu 3X od stanu 1X, oraz stanu 2X od stanu 0X.

33	32	31	30	23	22	21	20	13	12	11	10	03	02	01	00
3	0	2	1	2	1	3	0	3	0	2	1	2	1	3	0

Tablica 5.4: Reguła automatu 6R, sprowadzonego do postaci o krótszej pamięci.

Tak przekształcony automat można porównać do układu równań Hamiltona. Równania ewolucji mogą być pierwszego rzędu, ale stan musi być opisany przez podanie dwóch wielkości - położenia i pędu. Analogia, od której zaczęliśmy omawianie symetrii odbicia w czasie, jest w ten sposób jeszcze przez chwilę podtrzymana.



Rozdział 6

AUTOMATY LINIOWE, LUB PRZYNAJMNIJ INIEKTYWNE

6.1. Automaty liniowe

Automaty liniowe należałoby może nazwać addytywnymi, ich reguły spełniają bowiem zasadę superpozycji. Dla wygody ograniczymy się tu do automatów elementarnych, tj. jednowymiarowych automatów $(k, r) = (2, 1)$.

Def. Automat nazywamy liniowym, jeżeli jego reguła spełnia warunek

$$f(xyz \oplus uvw) = f(xyz) \oplus f(uvw) \quad (6.1)$$

gdzie działanie \oplus oznacza wyłączające "lub" (exclusive OR, XOR). Przypomnijmy, że $0 \oplus 0 = 0$, $0 \oplus 1 = 1$, $1 \oplus 0 = 1$ oraz $1 \oplus 1 = 0$. Działanie \oplus można określić również jako dodawanie modulo 2.

Można zapytać, ile w danej klasie jest automatów liniowych? Jak sprawdzić, czy automat jest liniowy? Ponieważ warunek liniowości narzuca pewne ograniczenia na reguły, można zapytać również, dla ilu konfiguracji trzeba określić regułę, aby dodanie warunku liniowości wystarczyło do zdefiniowania automatu?

Zacznijmy od ostatniego pytania, ponieważ ułatwi ono odpowiedź na pozostałe. Okazuje się, że dla określenia liniowego automatu elementarnego wystarczy podać regułę dla trzech konfiguracji otoczenia, tworzących tzw. bazę. Nie każde trzy konfiguracje tworzą bazę; warunkiem jest, aby każdy stan otoczenia można było otrzymać ze stanów bazowych poprzez działanie \oplus . Tak więc np. stany (100), (010), (001) tworzą bazę. Oznaczając je przez α, β, γ mamy bowiem $111 = \alpha \oplus \beta \oplus \gamma$, $110 = \alpha \oplus \beta$ itd., aż do $(000) = \alpha \oplus \alpha$. Trzeba zastrzec, że nie każde

trzy konfiguracje tworzą bazę: np. nie można stworzyć stanu (100) ze stanów (010), (001) i (011).

Wartości reguły automatu liniowego dla trzech bazowych konfiguracji otoczenia można podać na $k^3 = 8$ sposobów. Klasa (2,1) zawiera więc 8 automatów liniowych. Łatwo je otrzymać jeden po drugim, podstawiając zera i jedynki za $f(100)$, $f(010)$ i $f(001)$, a następnie stosując formułę (6.1) do obliczenia wartości reguły f dla pozostałych konfiguracji otoczenia. Tą drogą stwierdzamy, że liniowe są następujące automaty: 0, 60, 90, 102, 150, 170, 204 oraz 240. Zanim przyjrzymy się dokładniej tym automatom, wróćmy na chwilę do pierwszego pytania: otóż wydaje się, że najłatwiej jest zbadać, czy automat jest liniowy, sprawdzając po prostu czy ten automat jest na liście automatów liniowych. Takie postępowanie jest łatwe przynajmniej dla automatów elementarnych.

Automat 0 jest oczywiście zerowy. Mówiąc "automat jest równy zero", mamy na myśli automat, który dla każdego stanu otoczenia produkuje stan próżni, czyli "0" we wszystkich komórkach. Automaty 60, 90 i 102 są równoznaczne regule XOR: odpowiednio $x \oplus y$, $x \oplus z$ oraz $y \oplus z$. Automat 150 to $x \oplus y \oplus z$, czyli suma modulo 2 z wszystkich komórek otoczenia. Działanie automatów 170 i 240 polega na przesunięciu w lewo i prawo całej sieci o jedną komórkę. Automat 204 to transformacja identycznościowa.

Jak pokazano powyżej, warunek liniowości narzuca silne ograniczenia na reguły i niewiele automatów ten warunek spełnia.

6.2. Automaty iniektywne

W poszukiwaniu szerszej klasy automatów, które spełniałyby warunek liniowości przynajmniej do pewnego stopnia, napotykamy automaty iniektywne [23]. Poniżej przekonamy się, że literacki zwrot "do pewnego stopnia" jest tu do pewnego stopnia uzasadniony. A oto definicja:

Reguła automatu jest iniektywna w $(i+k)$ -tej składowej (gdzie wskaźnik $k = -r, \dots, r$), jeśli dla każdego stanu otoczenia $(x_{i-r}, \dots, x_{i+r})$ reguła jest jedno-jednoznaczny odwzorowaniem

$$x_{i+k} \longleftrightarrow f(x_{i-r}, \dots, x_{i+r}) \quad (6.2)$$

gdzie pozostałe x_{i+j} ($j \neq k$) są stałe.

Poniżej podamy dwa przykłady z rodziny automatów elementarnych.

Zastosujemy przy tym prostą a bardzo w tym przypadku wygodną notację.

Automat 15 jest równoważny przesunięciu konfiguracji w prawo przy jednoczesnym odwróceniu. Przy odwróceniu 0 przechodzi w 1, a 1 w 0. Automat 15 może być zapisany jako

$$\begin{aligned} 100, 101, 110, 111 &\rightarrow 0 \\ 000, 001, 010, 011 &\rightarrow 1 \end{aligned} \quad (6.3)$$

Automat 15 jest iniektywny w $(i - 1)$ -wszej składowej. Informacja "1" oznacza tu lewego sąsiada centralnej, czyli i -tej komórki. Dwa wiersze (6.3) definiujące regułę różnią się właśnie wartością lewego sąsiada: wszystkie stany otoczenia, w których w tej komórce znajdujemy 1, produkują wartość 0, i odwrotnie. Własność iniektywności znaczy jednak coś mniej. Oznacza mianowicie, że zmiana stanu $(i - 1)$ -wszej komórki przy zachowaniu stanów komórek i -tej i $i + 1$ -wszej pociąga w następnym kroku zmianę stanu i -tej komórki.

Drugim przykładem jest automat 150, który może być przedstawiony w postaci

$$\begin{aligned} 000, 011, 101, 110 &\rightarrow 0 \\ 001, 010, 100, 111 &\rightarrow 1 \end{aligned} \quad (6.4)$$

Automat 150 jest iniektywny we wszystkich trzech składowych.

Związek między automatami liniowymi i automatami iniektywnymi określa następujące

Twierdzenie: Każdy liniowy automat jest iniektywny w przynajmniej jednej składowej, lub jest równy zero.

Dla automatów elementarnych można podać dowód nie wprost powyższego twierdzenia. Załóżmy mianowicie, że automat liniowy nie jest iniektywny w żadnej składowej. Musi więc w szczególności istnieć takie x, y , że $f(xy0) = f(xy1)$, takie z, v , że $f(z0v) = f(z1v)$, oraz takie q, r , że $f(0qr) = f(1qr)$. Ale liniowość automatu wymaga, by można było napisać

$$\begin{aligned} f(001) &= f(xy0 \oplus xy1) = f(xy0) \oplus f(xy1) = 0 \\ f(010) &= f(z0v \oplus z1v) = f(z0v) \oplus f(z1v) = 0 \\ f(100) &= f(0qr \oplus 1qr) = f(0qr) \oplus f(1qr) = 0 \end{aligned} \quad (6.5)$$

Ostatnie znaki równości wynikają z faktu, że $0 \oplus 0 = 1 \oplus 1 = 0$. Stany (001,010,100) są stanami bazy dla automatów liniowych (patrz poprzedni rozdział); jeżeli wartość reguły jest "0" dla wszystkich trzech

stanów bazy, automat jest tożsamościowo równy zero. *Quod erat demonstrandum.*

Dodajmy, że twierdzenie odwrotne nie jest prawdziwe. Jednym z kontrprzykładów jest automat 30, czyli

$$\begin{aligned} 000, 101, 110, 111 &\rightarrow 0 \\ 100, 001, 010, 011 &\rightarrow 1 \end{aligned} \quad (6.6)$$

Automat 30 jest iniektywny w $(i - 1)$ -wszej składowej. Ale nie jest liniowy, bo

$$0 = f(101) = f(110 \oplus 011) \neq f(110) \oplus f(011) = 0 \oplus 1 = 1. \quad (6.7)$$

6.3. Sekwencje aperiodyczne

Jedną z najbardziej fascynujących cech automatów komórkowych jest ich zdolność do produkowania ciągów $s_i(t)$ stanów pojedynczej komórki, w których nie potrafimy odkryć żadnej prawidłowości. Taki ciąg wygląda równie tajemniczo, jak wynik pomiaru wielkości fizycznej. Jak wiadomo [24], pomiar jest jedynym możliwym generatorem liczb prawdziwie losowych, w odróżnieniu od liczb pseudo- czy quasi-losowych, produkowanych przez komputery.

Szczególną, jak to się mówi, rolę będzie grał w tych wywodach automat 90, czyli reguła XOR zdefiniowana na stanach sąsiadów

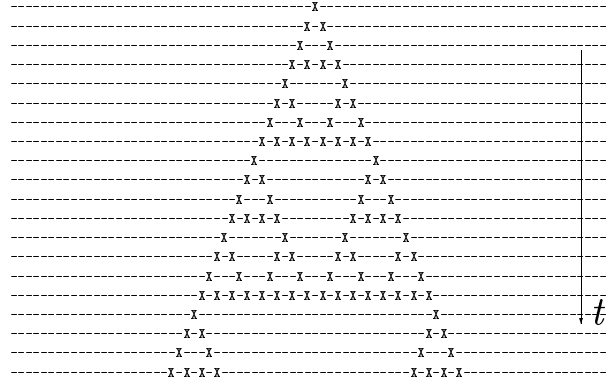
$$s_i(t + 1) = s_{i-1}(t) \oplus s_{i+1}(t) \quad (6.8)$$

Automat ten spełnia następującą relację:

$$s_i(t) = s_{i-t}(0) \oplus s_{i+t}(0) \quad (6.9)$$

co wiąże się z jego liniowością i jest rzadkim faktem w świecie automatów komórkowych. Relacja (6.9) oznacza, że stan i -tej komórki w chwili t jest określony przez stan w dowolnie dawnej chwili dwóch jego dowolnie dalekich sąsiadów - długość odcinków przestrzennych jest tu równa długości czasu.

Na rysunku 6.1 widzimy fraktal, znany jako dywan Sierpińskiego. Można go otrzymać za pomocą automatu 90, jeśli konfiguracją początkową jest pojedyncza komórka. Ten fraktal charakteryzuje się niezapełnionymi trójkątami komórek o dowolnie dużych rozmiarach. Rozpatrzmy teraz zależność od czasu stanu pojedynczej komórki. Taki ciąg



Rysunek 6.1: Liniowy automat 90 wytwarzający dywan Sierpińskiego.

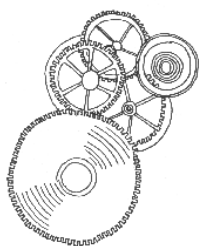
stanów będziemy nazywać sekwencją. Otóż z rysunku 6.1 widać, że np. sekwencja stanów centralnej komórki fraktala nie może być periodyczną funkcją czasu, ponieważ napotykamy w tej sekwencji dowolnie długie ciągi zer. Jest to tzw. sekwencja aperiodyczna.

Automat 90 jest więc zdolny do produkowania sekwencji, których zachowanie nie da się sprowadzić do żadnej cyklicznej formuły. Reguła 90 może być pod tym względem naśladowana przez niektóre automaty nieliniowe, jeśli pozabawimy stan początkowy niektórych skończonych konfiguracji. Taką operację nazywa się czasem "linearyzacją" automatu, chociaż powinno się mówić raczej o linearyzacji sieci. W pracy [23] wymienia się jako "naśladowców" automaty 18, 22, 122, 146 i 182. Ich działanie dla wielu stanów początkowych jest nieodróżnialne od działania automatu 90. Porównanie reguł tych automatów z regułą 90 prowadzi do wniosku, że czwarty, siódmy i ósmy bit we wszystkich tych regułach jest ustawiony tak samo. Skądinąd wiadomo, że ósmy bit decyduje o tym, czy automat zachowuje stan próżni. Ważność niektórych bitów podkreśla się czasem, określając je jako "gorące bity" (*hot bits*).

Ogólniej, zdolność automatów do produkowania sekwencji aperiodycznych określa następujące [23] twierdzenie :

Jeżeli reguła jest iniektywna w $(i + 1)$ -wszej składowej i konfiguracja (100) daje 1, lub jeśli reguła jest iniektywna w $(i - 1)$ -wszej składowej i konfiguracja (001) daje 1, to dla dowolnych skończonych warunków początkowych może istnieć najwyżej jedna sekwencja periodyczna.

Dodajmy, że przez skończone warunki początkowe rozumiemy dowolną konfigurację sieci, w której komórki o wartości różnej od zera są ograniczone do pewnej skończonej odległości od początku układu.



Rozdział 7

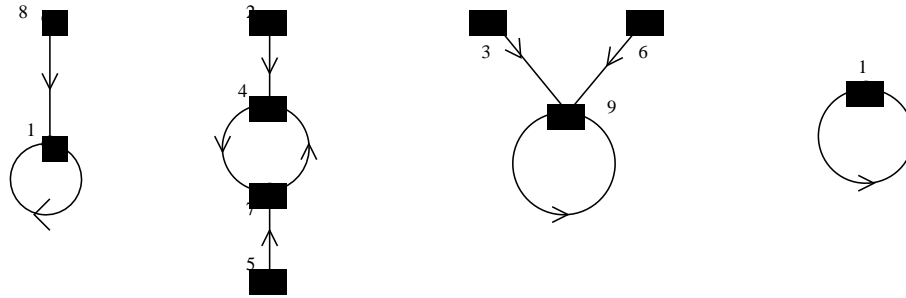
POCHODNA BOOLE'A

7.1. Zapis odwzorowań na zbiorach skończonych

Działanie automatów zdefiniowanych na skończonej sieci sprowadza się do operacji na stanach sieci. Ogólnie biorąc, odwzorowanie skończonego zbioru stanów na siebie można przedstawiać na rozmaite sposoby. Jednym z takich sposobów jest macierz przejścia złożona z zer i jedynek. W bazie, w której każdy stan jest opisany jednostkowym wektorem bazowym, taka macierz jest reprezentacją transformacji sieci na siebie. W każdej kolumnie tej macierzy jest jedna i tylko jedna jedynka, ponieważ pod działaniem odwzorowania każdy stan przechodzi w jeden i tylko jeden stan. W wierszu natomiast może być więcej jedynek lub może ich nie być wcale, bowiem ilość jedynek w k -tym wierszu to ilość stanów, które nasze odwzorowanie przerzuca w stan k -ty.

Innym sposobem przedstawienia odwzorowania jest metoda graficzna. Na rysunku (7.1) jest przedstawiony przykład odwzorowania zbioru dziesięciu punktów (od A do J lub od 0 do 9) na siebie. Obie metody (macierzy przejścia i grafów) są zawsze skuteczne, tj. można ich użyć do każdego odwzorowania. Żadna z nich jednak nie jest ekonomiczna; dla N stanów pierwsza wymaga określenia wskaźników N jedynek, druga - narysowania N skierowanych krawędzi grafu.

Do opisu odwzorowania można używać liczb, numerując stany i szukając przepisu funkcyjnego, który działałby tak jak zadane odwzorowanie. Przypisać stanom liczby można na $N!$ sposobów, ale struktura grafu powinna być zachowana. Tylko nieliczne odwzorowania można łatwo zapisać w postaci funkcyjnej. Problem znalezienia odpowiedniej funkcji jest NP-zupełny, a długość otrzymanego algorytmu funkcyjnego jest uważana za efektywną miarę złożoności danego odwzorowania. W przypadku odwzorowania z rysunku (7.1) odpowiednią okazuje się być



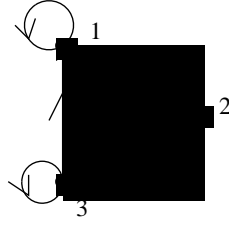
Rysunek 7.1: Przykładowe grafy odwzorowań.

operacja podniesienia numeru punktu do kwadratu i dodania do siebie cyfr otrzymanej liczby; jeśli wynik jest większy od 9, dodajemy cyfry jeszcze raz. Przypadki, kiedy dane odwzorowanie jest tak prosto określone, zdarzają się jednak niezwykle rzadko.

Sytuacja jest prostsza, jeśli chcemy określić przepis funkcyjny dla danego automatu komórkowego. Zilustrujemy procedurę znajdowania tego przepisu na przykładzie automatów elementarnych. Mianowicie należy w regule automatu znaleźć wszystkie konfiguracje otoczenia, które dają jedynekę. Następnie należy zapisać te konfiguracje w postaci iloczynów $b(x)b(y)b(z)$, gdzie $b(x) = x$ gdy $x = 1$, $b(x) = 1 - x$ gdy $x = 0$. Tak otrzymane iloczyny dodajemy logicznie do siebie, otrzymując przepis funkcyjny dla reguły danego automatu. Przykładowo automat $90 = 64 + 16 + 8 + 2$ daje jedynki dla następujących konfiguracji: 110, 100, 011 i 001. Iloczyny $b(x)b(y)b(z)$ mają dla tych konfiguracji postać: $xy(1 - z)$, $x(1 - y)(1 - z)$, $(1 - x)yz$ i $(1 - x)(1 - y)z$. Po dodaniu tych wyrażeń otrzymujemy $x + z - 2xz = (x - z)^2$, czyli regułę XOR(x, z). Nawiasem mówiąc, zgodnie z dodawaniem Boole'a $1 + 1 = 1$, a więc $2 * 1 = 1$; otrzymane wyrażenie można też więc zapisać jako $f = x + z - xz$.

Uogólniając automaty elementarne na automaty o sąsiedztwie obejmującym cały układ, widzimy że dla każdego odwzorowania zbioru skończonego na siebie istnieje równoważna funkcja $f(x_{i-r}, \dots, x_{i+r})$. Niestety podana wyżej konstrukcja tej funkcji jest dla większych zbiorów mało użyteczna.

Kończąc te uwagi ogólne, wspomnijmy jeszcze że w pewnych sytuacjach korzystne jest określenie stanu układu jako wierzchołka kubicznej bryły w przestrzeni N -wymiarowej, którą można by nazwać N -kostką (N -cube). Takie określenie jest intuicyjnie oczywiste, jeśli stanem układu jest ciąg zer i jedynek; każda z tych cyfr podaje jedno z dwóch możliwych położań wzdłuż jednej z N osi układu współrzędnych.



Rysunek 7.2: Graf odwzorowania.

7.2. Definicje i przykłady

Niech \mathbf{X} będzie zbiorem wektorów Boole'a $\mathbf{x}_i = (x_1, \dots, x_N)$, gdzie x_i wynosi 0 lub 1. Odwzorowanie $F : \mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}$ można zapisać w postaci

$$\begin{aligned} y_1 &= f_1(x_1, \dots, x_N), \\ y_2 &= f_2(x_1, \dots, x_N), \\ &\dots \\ y_N &= f_N(x_1, \dots, x_N). \end{aligned} \quad (7.1)$$

Df. Macierz zależności (*incidence matrix*) $B(F) = (b_{ij})$, gdzie $b_{ij} = 0$ jeżeli f_i nie zależy od x_j , $b_{ij} = 1$ jeżeli f_j zależy od x_i .

Ta macierz nie daje pełnej informacji o odwzorowaniu F . Ma jednak tę zaletę, że jest rzędu $N \times N$. Przypomnijmy, że macierz przejścia dla wektorów Boole'a jest rzędu $2^N \times 2^N$.

Macierz zależności jest równoważna tzw. grafowi połączeń (*connectivity graph*) o N wierzchołkach. Krawędzie tego grafu istnieją i są skierowane od wierzchołka i -tego do j -tego wtedy i tylko wtedy, gdy f_i zależy od x_j . Jako przykład weźmy odwzorowanie F_1 :

$$\begin{aligned} y_1 &= x_1 * \sim x_2 + x_3, \\ y_2 &= x_1 + \sim x_3, \\ y_3 &= x_2 * x_3, \end{aligned} \quad (7.2)$$

gdzie $\sim x$ oznacza "nie x ". $N = 3$, więc macierz przejścia jest rzędu 8×8 , a graf przedstawiający to odwzorowanie zawiera osiem wierzchołków. Natomiast macierz zależności $B(F_1)$ jest rzędu 3×3 :

$$B(F_1) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (7.3)$$

a graf połączeń ma trzy wierzchołki (7.2).

Dodajmy, że punkty stałe wszystkich odwzorowań F nie zależą od tego, czy funkcje f_i obliczamy jednocześnie, czy też kolejno, jedną po drugiej.

Df. Boolowska odległość wektorowa dwóch stanów $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N), \mathbf{y} = (y_1, \dots, y_N)$ jest wektorem

$$\mathbf{d}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\delta[x_1, y_1], \dots, \delta[x_N, y_N]) \quad (7.4)$$

złożonym z elementów $\delta[x_i, y_i] = 0$ gdy $x_i = y_i$, $\delta[x_i, y_i] = 1$ gdy $x_i \neq y_i$.

Powszechnie stosowaną dla wektorów Boole'a odległość Hamminga można otrzymać, sumując wszystkie składowe odległości wektorowej.

Odległość wektorowa $\mathbf{d}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ spełnia następujące aksjomaty:

1. $\mathbf{d}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0$ pociąga $\mathbf{x} = \mathbf{y}$,
2. $\mathbf{d}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{d}(\mathbf{y}, \mathbf{x})$,
3. $\mathbf{d}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq \mathbf{d}(\mathbf{x}, \mathbf{z}) + \mathbf{d}(\mathbf{z}, \mathbf{y})$

dla każdego $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$. W aksjomacie 3 znak "+" jest dodawaniem logicznym, tj. $1 + 1 = 1$. Nierówność " \leq " jest spełniona dla każdej składowej z osobna ($0 \leq 0 \leq 1 \leq 1$). Nie oznacza to jednak, że relacja nierówności jest określona w \mathbf{X} ; przykładowo dla $N = 2$ nie można napisać ani $(0, 1) \leq (1, 0)$, ani $(1, 0) \leq (0, 1)$.

Przedostatnim już wprowadzonym tutaj pojęciem będzie sąsiedztwo. Każdemu wierzchołkowi N -ścianu $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)$ możemy przypisać N sąsiadów

$$\begin{aligned} x_{a_1} &= (\sim x_1, x_2, \dots, x_N), \\ x_{a_2} &= (x_1, \sim x_2, \dots, x_N), \\ &\dots \\ x_{a_N} &= (x_1, x_2, \dots, \sim x_N). \end{aligned} \quad (7.5)$$

Na przykład dla $N=3$ sąsiadami punktu $(0,1,1)$ są $(1,1,1)$, $(0,0,1)$ i $(0,1,0)$. Pojęcie sąsiedztwa jest przydatne przy omawianiu pochodnej Boole'a.

Df. Pochodna dyskretna F' odwzorowania F w punkcie $\mathbf{x} \in \{0, 1\}^N$ jest macierzą Boole'a $N \times N$ o elementach f'_{ij} takich, że

$$\begin{aligned} f'_{ij} &= 1 \text{ gdy } f_i(x_1, \dots, \sim x_j, \dots, x_N) \neq f_i(x_1, \dots, x_j, \dots, x_N), \\ f'_{ij} &= 0 \text{ gdy } f_i(x_1, \dots, \sim x_j, \dots, x_N) = f_i(x_1, \dots, x_j, \dots, x_N). \end{aligned} \quad (7.6)$$

Inaczej mówiąc, (i, j) -ty element macierzowy pochodnej odwzorowania F w punkcie \mathbf{x} jest równy 1 wtedy i tylko wtedy, gdy f_i zmienia się przy zastąpieniu $x = a$ jego j -tym sąsiadem.

7.3. Kilka twierdzeń.

Istnieje formalne podobieństwo pochodnej Boole'a do zwykłej pochodnej funkcji. Aby je uwypuklić, przytaczamy tu bez dowodu kilka twierdzeń.

Tw.1. Dla każdego odwzorowania F

$$\mathbf{d}(F(\mathbf{x}), F(\mathbf{y})) \leq B(F)\mathbf{d}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$$

gdzie $B(F)$ jest macierzą zależności odwzorowania F .

Tw.2. Dla każdej pary odwzorowań E, F

$$B(E \bullet F) = B(E)B(F)$$

gdzie " \bullet " oznacza złożenie odwzorowań, a po prawej stronie mamy iloczyn macierzy zależności.

Tw.3. Aby macierz M spełniała nierówność

$$\mathbf{d}(F(\mathbf{x}), F(\mathbf{y})) \leq M\mathbf{d}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y}$$

potrzeba i wystarcza, aby $B(F) \leq M$.

Tw.4. Dla każdego $x \in \{0, 1\}^N$ i dla każdego $y \in \{\text{zbiór sąsiadów } x\}$

$$\mathbf{d}(F(\mathbf{x}), F(\mathbf{y})) = F'(\mathbf{x})\mathbf{d}(\mathbf{x}, \mathbf{y}).$$

Tw.5. Dla każdego $x \in \{0, 1\}^N$ zachodzi

$$F'(\mathbf{x}) \leq B(F) ,$$

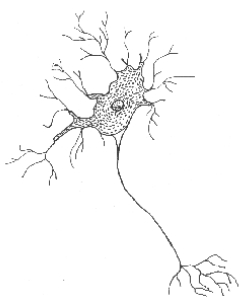
$$\text{Sup}\{F'(\mathbf{x})\} = B(F) .$$

W twierdzeniu 5 kres górny Sup jest liczony po wszystkich $x \in \{0, 1\}^N$. Ponieważ ten zbiór jest skończony, kres górny jest równy po prostu wartości maksymalnej $F'(x)$.

Za kluczowe uważamy tu twierdzenie 4, ponieważ wskazuje ono na rolę pochodnej Boole'a analogiczną do standartowego ilorazu różnicowego. Praktycznie jednak ważniejsze od podobieństw okazały się różnice. Jak wzmiankowano we wstępie, nie udało się przetłumaczyć równań różniczkowych na automaty komórkowe. Być może przyczyna leży

w tym, że zbiór stanów sieci jest przeliczalny w odróżnieniu od zbioru liczb rzeczywistych którymi operują równania różniczkowe. Można by sobie wyobrazić, że zawężamy nasze zainteresowania do funkcji, które możemy przedstawić w postaci szeregu Fouriera. Taką funkcję można wyrazić przez przeliczalny ciąg współczynników rozwinięcia w szereg. Jednak te współczynniki są również liczbami rzeczywistymi.

Pomiędzy formalizmem automatów komórkowych a równaniami różniczkowymi istnieje technika, która łączy niektóre zalety automatów z elastycznością równań różniczkowych. Są to tzw. sieci sprzężonych odwzorowań. Będzie o nich mowa w jednym z ostatnich rozdziałów.



Rozdział 8

MODEL PRZYPADKOWYCH ODWZOROWAŃ

W mechanice statystycznej przyjmuje się założenie tzw. równych a priori prawdopodobieństw. Oznacza to, że wszystkie stany mikroskopowe są równo prawdopodobne. Mówi się też często o tzw. hipotezie ergodycznej, która zakłada, że cała przestrzeń fazowa jest wypełniona przez trajektorie z równą gęstością.

Coś podobnego można również założyć dla automatów komórkowych, a ogólniej - dla odwzorowań zdefiniowanych na zbiorach skończonych. Szukając własności wyróżniających dane odwzorowanie, możemy je porównywać z ich średnimi po wszystkich możliwych odwzorowaniach. Zakładamy przy tym, że każde odwzorowanie jest równo prawdopodobne. Uzyskujemy w ten sposób model dynamiki, który możemy traktować jako punkt odniesienia. Ten model jest znany w literaturze jako model przypadkowych odwzorowań (*random map model*) [26].

Własności odwzorowań, które możemy porównywać ze sobą, to na przykład średnia długość cyklu granicznego, średni rozmiar basenu atrakcji (tj. ilość konfiguracji które kończą się w tym samym cyklu granicznym) itp. Obliczając te wielkości dla danego odwzorowania, obliczamy średnią po wszystkich stanach początkowych - przyjmujemy przy tym, że one też są równo prawdopodobne. W modelu przypadkowych odwzorowań uśredniamy jeszcze raz wielkości otrzymane dla danego odwzorowania po wszystkich możliwych odwzorowaniach.

Dla zbioru o N elementach istnieje N^N możliwych odwzorowań tego zbioru w siebie. Łatwo to zauważyć, kiedy uprzytomnimy sobie, że zadanie dowolnego odwzorowania polega na przyporządkowaniu argumentowi jego wartości. Nie narzucamy żadnych warunków: wartość może

być równa argumentowi, choć zdarzać się to będzie z prawdopodobieństwem $1/N$. Dla każdego argumentu można określić jego wartość na N sposobów, a trzeba to zrobić N razy, co kończy dowód. Waga każdego odwzorowania w modelu przypadkowych odwzorowań jest więc N^{-N} .

8.1. Średnia długość cyklu

Rozpatrzmy zbiór wszystkich możliwych odwzorowań zbioru o N elementach w siebie. Każde z tych odwzorowań można przedstawić w postaci grafu, podobnie jak na rysunku (7.1). Odwzorowanie z rysunku (7.1) miało jeden cykl graniczny o długości 2 i dwa punkty stałe, tj. cykle graniczne o długości 1. Basen atrakcji cyklu o długości 2 zawierał 4 stany. Średnia długość cyklu wynosi więc $[4 \cdot 2 + (10 - 4) \cdot 1]/10 = 1.4$. Liczba 10 jest tu ilością wszystkich stanów układu. Można obliczyć w ten sposób średnią długość cyklu granicznego dla każdego odwzorowania, a następnie wyśredniować po odwzorowaniach. Jedynym parametrem tego obliczenia jest liczba N wszystkich stanów.

Badając średnią długość cyklu, będziemy rozpatrywać zbiór wszystkich możliwych odwzorowań o danej długości cyklu granicznego i o danej ilości kroków, które nas do tego cyklu doprowadzają. Okaże się za chwilę, że takie rozróżnienie jest korzystne. Rozpatrzenie wszystkich możliwych zdarzeń będzie polegało również na uwzględnieniu N stanów początkowych. Pełna statystyka obejmuje więc N^{N+1} przypadków; za przypadek uważamy tu wybór danego odwzorowania oraz dany stan początkowy.

Ile więc jest przypadków, w których ewolucja już w pierwszym kroku pozostawi układ w stanie początkowym? Jest to przypadek, gdy w macierzy przejścia mamy jedynkę na głównej diagonalu, przy czym numer stanu początkowego jest zgodny z numerem wiersza (i kolumny), gdzie ta jedynka się znajduje. Jest to możliwe na N sposobów, ponieważ tyle mamy stanów początkowych. Ponieważ nie narzucamy tu innych warunków na położenie pozostałych jedynek w macierzy przejścia, ilość wszystkich przypadków otrzymujemy mnożąc wspomniane N przez N^{N-1} . Inaczej mówiąc, ilość przypadków gdy cykl graniczny ma długość $c = 1$, tj. jest punktem stałym, i w ten cykl graniczny trafiamy od razu w pierwszym kroku ($t = 0$), obliczamy następująco:

$$K(1, 0) = N \cdot 1 \cdot N^{N-1} \quad (8.1)$$

gdzie $K(c, t)$ oznacza ilość przypadków, w których cykl graniczny o długości c zostanie osiągnięty po t krokach. To ostatnie oznaczenie można

kojarzyć z pojęciem tzw. czasu włączeniowego (*transient time*), tj. czasu, po którym stan początkowy jest zapomniany. (W układach fizycznych mówimy o czasie relaksacji.) W iloczynie po prawej stronie równości 8.1 pierwszy czynnik odpowiada za ilość możliwości wyboru stanu podstawowego, drugi - jedynek - za ilość możliwych położeń jedynek w danej kolumnie, a trzeci za ilość możliwości rozkładu jedynek w pozostałych kolumnach. Wielkość N^{N-1} odpowiada brakowi jakichkolwiek ograniczeń - jedynek w $N - 1$ kolumnach można rozmieścić na wszystkie możliwe sposoby, każdą w N możliwych miejsc.

Taką samą argumentację stosujemy, aby określić ilość przypadków dla $K(c, t)$ dla innych wartości argumentów c i t . Mamy więc

$$K(2, 0) = N \cdot (N - 1) \cdot 1 \cdot N^{N-2} \quad (8.2)$$

Jak poprzednio, wyrażenie 8.2 jest iloczynem ilości sposobów, na jakie może zajść dane wydarzenie. Pierwszy czynnik, N , to ilość możliwych wyborów stanu początkowego. Drugi czynnik, $N - 1$, to ilość stanów w które ewolucja przerzuca stan początkowy - jak widać, po pierwszym kroku jest dozwolony każdy stan, z wyjątkiem początkowego. Trzeci czynnik, jedynek, to ilość sposobów na jakie układ może wrócić do stanu początkowego, który został określony już poprzednio. Powrót do stanu początkowego w drugim kroku ewolucji oznacza, że $c = 2$. Fakt, że już stan początkowy należy do cyklu granicznego, oznacza że $t = 0$.

Kolejne wyrażenia otrzymane powyższą metodą to

$$K(3, 0) = N \cdot (N - 1) \cdot (N - 2) \cdot 1 \cdot N^{N-3},$$

...

$$K(c, 0) = N \cdot (N - 1) \cdot \dots \cdot (N - c + 1) \cdot 1 \cdot N^{N-c},$$

...

$$K(N, 0) = N \cdot (N - 1) \cdot (N - 2) \cdot \dots \cdot (N - N + 1) \cdot 1 \cdot N^{N-N} = N!,$$

$$K(1, 1) = N \cdot (N - 1) \cdot 1 \cdot N^{N-2},$$

...

$$K(c, 1) = N \cdot (N - 1) \cdot \dots \cdot (N - c) \cdot 1 \cdot N^{N-c-1},$$

...

$$K(1, t) = N \cdot (N - 1) \cdot \dots \cdot (N - t + 1) \cdot 1 \cdot N^{N-t},$$

i tak dalej. Ogólny wzór na prawdopodobieństwo danej długości cyklu c i danego czasu włączeniowego t [27] .

$$P(c, t) = N^{-N-1} K(c, t) = \frac{N!}{(N - t - c)!} N^{N-t-c} \quad (8.3)$$

Rozkłady prawdopodobieństwa zmiennych t i c można otrzymać z wyrażenia (8.3) jako rozkłady brzegowe:

$$P(c) = \sum_{t=0}^{N-c} P(c, t) \quad (8.4)$$

$$P(t) = \sum_{c=1}^{N-t} P(c, t) \quad (8.5)$$

Wyrażenie (8.3) jest symetryczną funkcją argumentów t i c . Różnica w dolnych granicach sumowania wynika z faktu, że długość cyklu c przyjmuje wartości od 1 do N , a czas włączeniowy t - od 0 do $N - 1$. Dla dużych wartości N rozkłady $P(t)$ i $P(c)$ są praktycznie takie same.

Formuła (8.3) jest również wygodnym punktem wyjścia do obliczenia średniej ilości N_a cykli granicznych na automat [28]. Wystarczy w tym celu wyodrębnić wszystkie przypadki, gdy cykl o danej długości zaczyna się od stanu początkowego. Takich przypadków znajdziemy $K(c, 0)$. Ta wielkość jest iloczynem ilości stanów początkowych w cyklu o długości c , czyli liczby c , i ilości cykli o długości c . Szukaną średnią znajdziemy więc ze wzoru

$$N_a = N^{-N} \sum_{c=1}^N \frac{K(c, 0)}{c} \quad (8.6)$$

Dla dużych wartości N możemy uzyskać wyrażenia przybliżone, korzystając z formuły Stirlinga. W szczególności średnia długość cyklu [1,4]

$$\langle c \rangle = \sqrt{\frac{\pi N}{8}} \quad (8.7)$$

a dyspersja rozkładu $P(c)$

$$\langle (c - \langle c \rangle)^2 \rangle = \frac{16 - 3\pi}{24} N \quad (8.8)$$

Jak widać, względny błąd wielkości c dąży do około 0.7, gdy N dąży do nieskończoności. Średnia długość cyklu jest więc przykładem tzw. silnego braku samouśredniania [30]. Wrócimy do tej własności przy omawianiu funkcji korelacji w modelu Isinga.

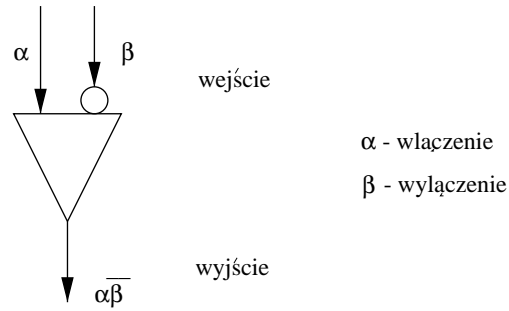
8.2. Model Kauffman

Gdyby ktoś chciał badać model przypadkowych odwzorowań za pomocą symulacji komputerowych, już układ kilkunastu komórek mógłby się okazać zbyt duży. Przyjmując ilość stanów pojedynczej komórki $k = 2$, otrzymujemy dla 10 komórek $N = 2^{10} = 1024$. Ilość odwzorowań które powinno się przebadac byłaby więc rzędu $N^N \simeq 10^{3000}$. Biorąc pod uwagę duży rozrzut wyników, który wynika z braku samouśredniania, widzimy że dość trudno byłoby zapewnić przyzwoitą dokładność obliczeń.

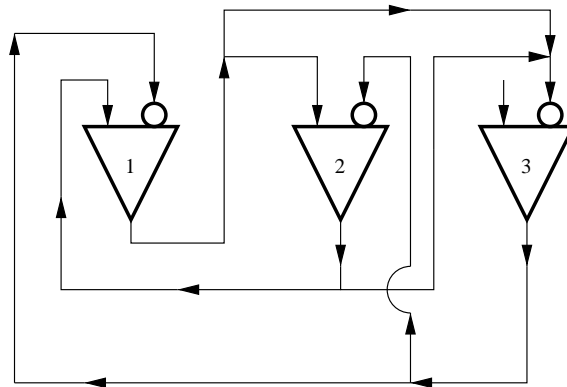
Istnieją zagadnienia o dużym stopniu złożoności, których symulacja nastrocza tego rodzaju problemy. Do takich zagadnień należy model Kauffmana [31]. Jego najprostsza wersja jest zdefiniowana następująco: komórki danej sieci mogą pozostawać w jednym z dwóch stanów. Stan danej komórki w $n + 1$ -szym kroku jest określony przez stan K innych komórek w n -tym kroku czasowym. Regułę automatu losuje się na początku symulacji dla każdej komórki z osobna. Losuje się również otoczenie każdej komórki, co można robić z pominięciem geometrii sieci. Jednak raz wybrane reguły ewolucji są potem przestrzegane - automat Kauffmana jest deterministyczny.

Model Kauffmana ma pochodzenie biologiczne: był stworzony z myślą o symulacji układu genetycznego. Włączanie lub wyłączanie kolejnych genów odpowiada w tym modelu zmianom stanu poszczególnych komórek. Ewolucja skończonego automatu musi prowadzić do cykli granicznych. Długość tych cykli i długość czasów włączeniowych zależy od wielkości K , która jest ważnym parametrem modelu. Dla $K = 1$ średnia długość cyklu $\langle c \rangle$ jest proporcjonalna do $\exp(1/8 \log_2 L)$, gdzie L jest ilością komórek. Dla $K = 2$ $\langle c \rangle \cdot L^{1/2}$. Dla przypadku $K \cdot N$ model Kauffmana jest równoważny modelowi przypadkowych odwzorowań, a więc $\langle c \rangle \cdot 2^{L/2}$.

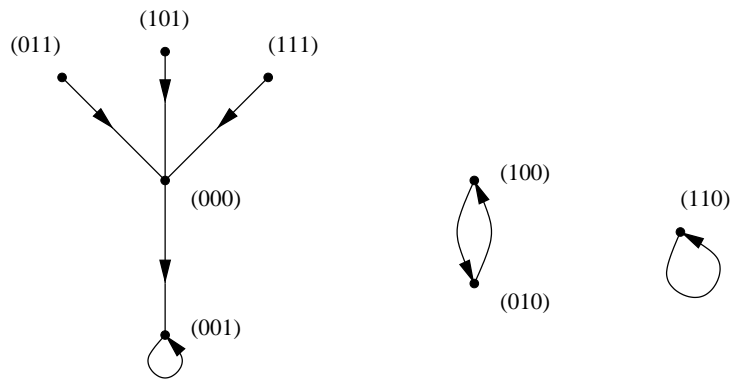
Żeby wyobrazić sobie dynamikę modelu Kauffmana, ograniczmy się do układu $N = 3$ wzajemnie oddziałujących genów [25]. Każdy gen może być włączony lub wyłączony, czyli może być w stanach 1 lub 0. Stan każdego z nich wpływa na stan dwóch pozostałych w następnym kroku czasowym, tak jak przedstawiono na rys.8.1 . W naszym przy-



Rysunek 8.1: Pojedynczy neuron



Rysunek 8.2: Sieć trzech neuronów [25].



Rysunek 8.3: Graf reprezentujący sieć połączeń w trzech neuronach z rysunku 8.2

kładzie ewolucja w czasie jest określona równaniami

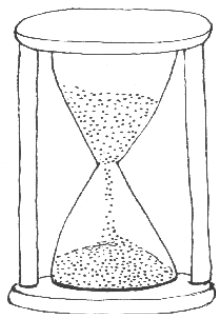
$$\begin{aligned} f_1 &= x_2 \cdot \sim x_3 \\ f_2 &= x_1 \cdot \sim x_3 \\ f_3 &= \sim x_1 \cdot \sim x_2 \end{aligned}$$

gdzie $\sim x$ oznacza nie x . Pierwsze z równań opisuje fakt, że gen numer 1 w $t + 1$ -ym kroku jest włączony, jeśli w czasie t gen 2 był włączony,

a gen 3 - wyłączony - i tak dalej. Dynamika całej sieci, czyli w naszym przykładzie - trzech genów, może być określona poprzez schemat jak na rysunku 8.2, lub prościej - za pomocą grafów, jak na rysunku 8.3. Widzimy, że układ ma trzy tzw. atraktory: dwa punkty stałe i jeden cykl graniczny o długości dwa. Basen atrakcji, czyli zbiór stanów prowadzących do danego atraktora, jest największy dla punktu stałego (001).

Wyobraźmy sobie teraz układ 10^5 genów - tyle ma człowiek. Jak zauważył Kauffman [32], w tak dużym układzie samo osiągnięcie atraktora może trwać dłużej niż wiek Wszechświata. Ten wniosek właściwie nie zależy od kroku czasowego, jaki przyjmiemy dla symulacji. Ile może trwać reakcja genu: 10^{-5} sekundy? 10^{-10} ? Taki czas byłby z biologicznego punktu widzenia nonsensownie krótki. Układ genów znajduje z pewnością sposób, by ominąć większość możliwych stanów i znaleźć stan stacjonarny. Takie dopasowanie przedstawia się w modelu Kauffmana jako lokalne minimum w "krajobrazie" możliwych stanów, prowadzące do optymalnego dopasowania się do biologicznego otoczenia. Dopasowanie N genów to ruch w przestrzeni N -wymiarowej. Dla $N > 4$ lepiej tego nie rysować.

Model Kauffmana spotkał się z krytyką za zbytne uproszczenia rzeczywistego układu biologicznego. Jednak już tak sformułowany problem okazał się dość trudny, gdy doszło do analizy wyników numerycznych - jest to regułą dotyczącą większości wyników w fizyce komputerowej. Wydaje się, że największym osiągnięciem modelu było opisanie przejścia fazowego od krótkich cykli granicznych dla $K = 1$ do chaotycznych i skomplikowanych zachowań dla $K > 2$. Z biologicznego punktu widzenia ta faza chaotyczna charakteryzuje się niemożnością układu dotarcia do optymalnego stanu końcowego, co zostało nazwane przez autora katastrofą złożoności (*complexity catastrophe*). Interesujące analogie między modelem Kauffmana a szkłem spinowym lub siecią neuronową przekraczają ramy tego wykładu.



Rozdział 9

SAMORGANIZOWANY STAN KRYTYCZNY

W 1987 roku Bak, Tang i Wiesenfeld (BTW) wprowadzili pojęcie samorganizowanego stanu krytycznego (*self-organized criticality*, czyli SOC) [33]. Praca [33] i jej rozwinięcie [34] spotkały się z lawinowo rosnącym zainteresowaniem, co oznaczało, że wiele osób zaczęło badania SOC i w krótkim czasie ukazało się na ten temat wiele publikacji. Fakt, że niektóre wyniki prac BTW okazały się niezupełnie prawdziwe, wcale tego zainteresowania nie zmniejszył.

O samoorganizacji mówi się od dawna [35]. Ten termin oznacza dalekie od równowagi stany uporządkowane. Najlepiej znanym przykładem są wiry Bénarda [36]: Jeżeli ciecz, zamknięta w płaskim naczyniu, podgrzewamy od dołu a chłodzimy od góry, to przy pewnej wartości gradientu temperatury ciepło będzie przenoszone przy pomocy makroskopowych wirów tworzonych przez ciecz. Jest tak, jakby cząsteczki cieczy umówiły się ze sobą, gdzie mają się wznosić a gdzie opadać. Co więcej, wiry te tworzą na płaszczyźnie uporządkowaną strukturę, zbliżoną do sieci krystalicznej! Ten stan jest uporządkowany, bo jego entropia jest mniejsza niż entropia przypadkowych ruchów cieczy. Natomiast słowo "krytyczny" oznacza, że rozmiar fluktuacji jest dowolnie duży. Jest to analogia do nieciągłego przejścia fazowego np. ciecz-gaz, gdzie fluktuacje gęstości w pobliżu temperatury krytycznej prowadzą do zmętnienia cieczy. Może to być widoczne gołym okiem [37]. Jędrne określenie SOC brzmi: jest to taki stan krytyczny, do którego prowadzą ośrodki rozchodzące się w nim zaburzenia, niezależnie od warunków początkowych. Gdy go już doprowadzą, ośrodek pozostaje w SOC; jest to więc stan stabilny, mimo dowolnie dużych (krytycznych) fluktuacji [38].

Zastanawiające, że SOC wymaga ośrodka co najmniej dwuwymiarowego. W ośrodku jednowymiarowym fluktuacje są zawsze skończone,

ponieważ istnieje skończone prawdopodobieństwo zatrzymania każdej fluktuacji. Zatrzymująca fluktuacje bariera jest lokalna: jest punktem na osi. Istnieje skończone prawdopodobieństwo dowolnie wysokiej bariery, a więc gdzieś na nieskończonej osi taka bariera istnieje. Tak więc układ jednowymiarowy nie osiągnie SOC. Zatrzyma się w tzw. stanie minimalnie stabilnym [34]. Natomiast na płaszczyźnie bariera taka musiałaby być krzywą o nieskończonej długości, bo tylko taka krzywa może rozgraniczyć nieskończone półpłaszczyzny, a więc wpłynąć na wartości średnie dotyczące układu. Bariera o nieskończonej długości, nie zawierająca luk przepuszczających fluktuacje, raczej się nie zdarza.

Pojęcie SOC było dla BTW kluczem do tzw. "szumu $1/f$ ". Niskoczęstotliwościowa część widma mocy fluktuacji w wielu ośrodkach jest mianowicie odwrotnie proporcjonalna do częstości f . Zjawisko to było obserwowane w opornikach elektrycznych, nurtach rzek i świetle gwiazd [33]; jest więc być może uniwersalną cechą transportu.

9.1. SOC w piasku

Sztandarowym przykładem SOC była przez jakiś czas sterta suchego piasku, uzupełniana w sposób ciągły przez dosypywanie go z góry wąską strużką [34]. Sterta, początkowo mała i płaska, przyjmuje po pewnym czasie kształt stożka. Nachylenie jego ścian fluktuuje wokół pewnej wartości krytycznej. Fluktuacje mają tu postać lawin, schodzących w nieprzewidywalnych momentach i mających nieprzewidywalne rozmiary. Najwięcej jest lawin małych, ale zdarzają się też duże; rozmiar lawiny jest ograniczony jedynie rozmiarem stożka. Rozkład odstępów czasu między lawinami $P(T) \propto T^{-\alpha}$ może być użyty do otrzymania $P(f = 1/T) = P(T(f))dT/df \propto f^{-2+\alpha}$. Wynik eksperymentu numerycznego BTW dla trójwymiarowego układu brzmiał: $\alpha = 0.92$ [34]. Pozwalało to wierzyć, że modelowa sterta piasku opisuje zjawisko szumu $1/f$. Innym ciekawym wynikiem symulacji był rozkład rozmiaru s lawin: dla $P(s) \propto s^{-\tau}$, a symulacje prowadzone dla trójwymiarowego układu dały $\tau = 1.37$ [34].

Reguły użytego tu automatu komórkowego zakładały, że lawina zaczyna się obsypywać, gdy przekroczony zostanie pewien kąt krytyczny nachylenia zbocza. Ziarno piasku przesunęło się wtedy o jedną komórkę, co mogło prowadzić do przekroczenia kąta krytycznego w kolejnej komórce - i tak dalej. Takie sformułowanie okazało się jednak nieprecyzyjne: naśladowcy BTW odkryli, że nie wiadomo co robić gdy w jakimś

punkcie spotkają się dwie lawiny? Problem jest znany jako komutacja reguł automatu [39], przez analogię do operatorów w mechanice kwantowej. Na dobitkę eksperymenty przeprowadzone w rzeczywistym piasku ujawniły, że jeżeli średnica sterty u jej podstawy przekracza półtora cala, teoria SOC przestaje działać. Przewagę zyskują większe lawiny, budzone pod powierzchnią zbocza.

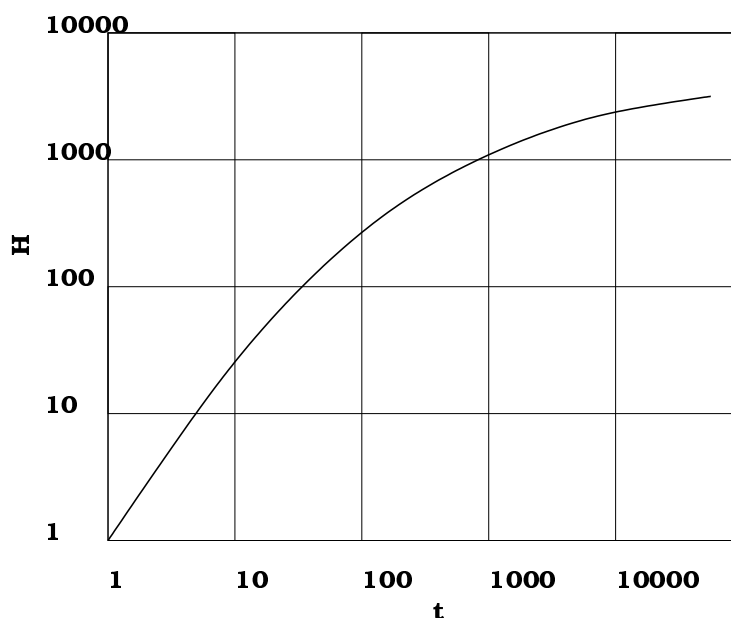
Wydaje się jednak, że te zarzuty ani nie zaszkodziły pojęciu SOC, ani nie zmniejszyły zapału komputerowców do badań tego pojęcia przy użyciu automatów komórkowych. Jednorodność rozkładu $P(s)$ porównano z doświadczalnym prawem Gutenberga-Richtera, dotyczącym trzęsień ziemi [40]. A piasek stał się popularnym tematem badań, zyskując miano materii granulowanej [41],[42].

SOC doczekał się też prostego i precyzyjnego przykładu numerycznego [38], który można określić jako stertę piasku bez zdefiniowanej odległości między ziarnami. Sąsiedzi każdego ziarna są mianowicie dobierani przypadkowo spośród wszystkich ziaren na zboczu, niezależnie od ich położenia. W tym przykładzie lawina jest uruchamiana, gdy ziarno piasku wyląduje w miejscu, gdzie już znajduje się inne ziarno. Oba ziarna przerzucane są na inne, wylosowane miejsca. Trwa to tak długo, aż wszystkie ziarna upadną na puste miejsca. Wtedy dopiero do układu dostarcza się z zewnątrz następne ziarno. Rozmiar lawiny s (i czas jej trwania t) to ilość uruchomionych ziaren (i kroków czasowych) między dwoma kolejnymi takimi uzupełnieniami. Ziarna są odprowadzane z układu w ten sposób, że część położenia uważa się za brzeg stożka; ziarno, które tam upadnie - znika. W takim sformułowaniu problem komutacji reguł przestaje być kłopotliwy, ponieważ dla dużego układu można zaniedbać prawdopodobieństwo spotkania się dwóch ziaren lądujących w tym samym położeniu.

9.2. SOC w automacie *Life*

O automacie *Life* była już mowa krótko w rozdziale 2, tu trzeba powiedzieć więcej. Przypomnijmy, że jest to automat zdefiniowany na dwuwymiarowej sieci kwadratowej, na otoczeniu Moore'a, na które składa się komórka centralna i jej osiem najbliższych sąsiadów. Komórka może być żywa lub martwa (1 lub 0). Martwa komórka ożywa w następnym kroku czasowym, jeśli miała 3 żywych sąsiadów; żywa pozostaje żywa, jeśli miała 2 lub 3 żywych sąsiadów. W pozostałych przypadkach ko-

mórka staje się (lub pozostaje) martwa, czyli przyjmuje stan 0. Takie reguły - śmierć zarówno z natłoku, jak z samotności - można porównywać do znanego równania logistycznego, z jego tłumiącą wzrost zależnością kwadratową [36], a ogólniej - do członu Verhulsta w problemach dotyczących wzrostu populacji [15]. Reguły te pozwalają na nadspodziewanie bogate zachowania sieci [22], przypominając pierwotną zupe - ciecz w jakiej powstało życie - o której myślał von Neumann.



Rysunek 9.1: Odległość Hamminga w zależności od czasu.

Doświadczenia numeryczne wskazują, że Life pozostawiony bez ingerencji zastyga w formie "skamienielin": izolowanych, małych form, statycznych lub oscylujących z okresem 2. Najczęściej spotykane skamienieliny prezentuje tablica 9.1. Zanim jednak dojdzie do tego stanu końcowego, układ emituje "szybowce" - formy ruchome, przemieszczające się bez żadnych ograniczeń. Zderzenie szybowca ze skamienieliną może prowadzić do emisji kolejnych szybowców, które z kolei budzą do życia kolejne skamienieliny. Fizykowi kojarzy się to z reakcją rozszczepienia uranu i z emisją kolejnych neutronów. Można zapytać, czy począwszy od pewnego rozmiaru układu reakcja będzie się sama podtrzymywać? Taki stan moglibyśmy nazwać stanem krytycznym. Ale w literaturze można spotkać różne opinie na ten temat [43],[44]. Pomiary współczynnika mnożenia k [45] szybowców dają wartość 0.5 ± 1 [46].

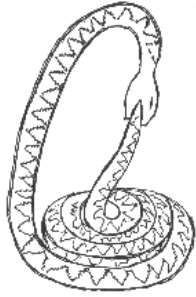
Idąc jednak za oryginalnym sformułowaniem [33],[34],[36], ujmijmy problem nieco inaczej. Sterta piasku pozostaje w samorganizowanym

NR	Reguła	nazwa	NR	Reguła	nazwa
1		Kwadrat	2		Krzyż
3		Łódź	4		Statek
5		Ul	6		Barka
7		Długa łódź	8		Długi statek
9		Trójki	10		Bochen
11		Staw	12		Wąż
13		Szlak	14		Migacz
15		Stykacz	16		Prasa
17		Wiatrak	18		Szybowiec

Tablica 9.1: Przykłady 18 "skamienielin" automatu *Life* [46]. Kreskowania ukazują kolejne stany. Na przykład "Migacz" jest raz pionowy, raz poziomy. Do kompletu dołączono szybowiec. Więcej o *Life* można znaleźć na stronie <http://www.mindspring.com/~alanh/life/>

stanie krytycznym tylko wtedy, jeśli stale dosypujemy piasku. Inaczej mówiąc, SOC jest stanem stacjonarnym układu otwartego. Stan krytyczny układu oznacza, że zasięg rozchodzących się w nim zaburzeń jest nieograniczony. Jak pamiętamy, jest to cechą automatów chaotycznych, należących do klasy III Wolframa. Można więc stwierdzić SOC, zaburzając układ otwarty i obserwując rozchodzenie się tego zaburzenia. Jeśli jego zasięg przekroczy rozmiar sieci, mamy do czynienia ze stanem krytycznym.

Ten sposób rozumowania był zastosowany w pracy [47]. Układ "doświadczalny", tj. kwadrat 400×400 komórek, był poddany strumieniowi szybowców. Deterministyczna ewolucja układu była zaburzona przez zmianę stanu jednej komórki w pobliżu środka układu. Obserwowana różnica między ewolucją układu zaburzonego i niezaburzonego, mierzona jako odległość Hamminga D (wzór 4.1) między stanami sieci w funkcji czasu, jest pokazana na rys. (9.1). Jak wynika z obliczeń, dla długich wartości czasu t otrzymujemy zależność $D(t) \propto t^\mu$, gdzie $\mu = 1.1 \pm 0.1$. Tak więc w układzie otwartym Life można uważać za automat klasy III. Wynik jest nieco kontrowersyjny, bo Life jest znany jako automat uniwersalny, należący do klasy IV [22]. Wnioskujemy więc, że dla klasyfikacji danego automatu istotne są warunki brzegowe.



Rozdział 10

ZASTOSOWANIA NIE CAŁKIEM FIZYCZNE

W tym rozdziale omówimy kilka zastosowań automatów komórkowych, które nie mieszczą się w fizyce rozumianej potocznie. Relacjonujemy je tutaj aby wskazać elastyczność techniki automatów oraz aby nawiązać do pewnych zagadnień teoretycznych, które były wyrażane w języku fizyki, ale nie znalazły jak dotąd fizycznych przykładów doświadczalnych.

10.1. Model Lotki-Volterry - dynamika populacji

Związki z dynamiką populacji ma ciąg Fibonacciego [48], równanie logistyczne [36] i równania Lotki-Volterry [49]. Mniej znany jest tzw. trójskładnikowy model Lotki-Volterry [50], który można przedstawić w postaci trzech równań reakcji



W pracy [50] równania (10.1) były podstawą dynamiki gazu sztywnych kul o różnych kolorach, zmieniających kolor przy zderzeniu. Można, wzorem klasycznego sformułowania, widzieć w tych równaniach cykliczną wersję łańcucha pokarmowego (Historia maleńka taka: wróbel pożera robaka...). W tej interpretacji osobnik A zjada spotkanego B i najedzony rozmnaża się, tworząc następnego A . Podobne skutki niosą spotkania B z C , oraz C z A . Rozważany był również przykład zastosowania modelu do elektoratów trzech partii politycznych. Członkowie każdego elektoratu mają dar przekonywania członków jednego z dwóch pozostałych elektoratów. Musi to prowadzić do cyklicznych zmian przynależności każdego zainteresowanego do trzech kolejnych partii. Symula-

cje [50] wskazują, że liczebności poszczególnych elektoratów mogą oscylować wokół pewnych wartości równowagowych.

Ten problem można badać również przy pomocy odpowiedniego automatu komórkowego. W tym celu dzielimy płaszczyznę na komórki. Każda komórka może być w stanie A , B lub C . W każdym kolejnym kroku czasowym komórka A , która sąsiaduje z komórką B , zmienia swój stan na B ; komórka B sąsiadująca z C staje się C , a komórka C sąsiadująca z A staje się A . Na rysunku (10.1) pokazane są wyniki uzyskane przy pomocy takiego automatu. Każda z trzech partii może więc odczytać tu swą przyszłość.

Reakcje typu (10.1) można też modelować za pomocą układu równań różniczkowych. Zakłada się przy tym tzw. hipotezę doskonałego mieszania, tj. brak korelacji przestrzennych pomiędzy poszczególnymi składnikami reakcji. Jeżeli stałe trzech reakcji, opisujące ich szybkość, są sobie równe, to można przededefiniować skalę czasu kładąc te stałe równe jedności. Równania mają wtedy postać

$$\begin{aligned} da/dt &= a(b - c) \\ db/dt &= b(c - a) \\ dc/dt &= c(a - b) \end{aligned} \quad (10.2)$$

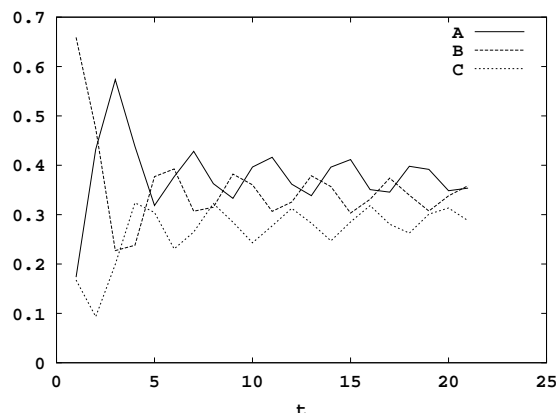
gdzie a, b, c to koncentracje trzech reagentów; $a + b + c = 1$. Suma $a + b + c$ jest stała w czasie, o czym łatwo się przekonać, dodając trzy równania (10.2) stronami; po prawej stronie otrzymujemy zero. Co ciekawe, stałą jest również iloczyn $abc \equiv \alpha$. Dowód jest równie prosty: obliczamy $d(abc)/dt$ wykorzystując przepis na pochodną iloczynu i podstawiając równania (10.2); w wyniku również otrzymujemy zero. Największa możliwa wartość α wynosi $1/27$.

Można te stałe wykorzystać do eliminacji dwóch zmiennych b i c ; pozostaje równanie

$$da/dt = \pm[a^2(1 - a)^2 - 4\alpha a]^{1/2} \quad (10.3)$$

Znak \pm oznacza, że ewolucję układu można uruchomić w przód lub w tył w czasie. Rozwiązanie numeryczne tego równania też wykazuje oscylacje wielkości a w czasie.

Tak więc wszystkie metody prowadzą do wniosku, że model trój-składnikowy Lotki-Volterry daje wyniki podobne do znanego modelu dwuskładnikowego. Można mieć nadzieję, że podobna stabilność regularności jest cechą środowisk bardziej złożonych.



Rysunek 10.1: Koncentracje komórek w stanach A, B, C w zależności od czasu. Układ modelowy obejmuje sieć 100×100 komórek.

10.2. Ewolucja reguł. Zastosowanie algorytmu genetycznego

Chyba najprostszym zagadnieniem z dziedziny rozpoznawania obrazów jest odróżnianie czarnego od białego. Trochę bardziej złożonym problemem jest stwierdzenie, czy na danym obrazie jest więcej czerni, czy bieli? Jeżeli obraz jest na sieci, to wydaje się że najprościej policzyć czarne komórki. Ale do tego trzeba mieć zdolność pamiętania dużych liczb, nie mówiąc już o umiejętności liczenia. Automat komórkowy musi to robić prościej. Reguła jakiego automatu zrobi to najlepiej?

Autorzy pracy [51] postanowili uruchomić w komputerze ewolucję automatów, nastawionych na ten jeden cel. Przeżywały automaty, które to robiły lepiej niż inne. Układem badanym przez automaty był łańcuch 149 komórek, każda w stanie 1 (czern) lub 0 (biel). Taki ciąg był przez automaty traktowany jako stan wyjściowy sieci. Jeżeli reguła automatu doprowadzała układ do stanu jednorodnego, złożonego z samych jedynek, jury uznawało że automat rozpoznał stan początkowy jako "raczej czarny". I odwrotnie.

Jakość automatu mierzono następująco: wybierano w sposób losowy 100 stanów początkowych łańcucha o gęstościach ρ jedynek (czyli komórek czarnych) z przedziału $(0,1)$. Każdy oceniany automat uruchamiano dla tych 100 stanów początkowych i pozwalano mu pracować przez 320 kroków. Jeżeli automat wyprodukował w tym czasie stan jednorodny, uznawano że zdążył zakończyć zadanie. Jeżeli większość komórek w stanie początkowym była czarna, to wynik: "same jedyne" uznawano za

sukces, a wynik "same zera" za porażkę. Za sukces automat dostawał jeden punkt, za porażkę - nic. Ocena była średnim wynikiem; mieściła się więc w granicach $(0,1)$. Szybko się okazało, że dobry automat myli się tylko w okolicach $\rho = 0.5$, gdzie stan początkowy zawierał prawie tyle samo białych, co czarnych komórek.

Do startu dopuszczono 100 automatów z rodziny $(k, r) = (2, 3)$: promień otoczenia równy 3, dwa stany komórki. Ta rodzina obejmuje $k^{2r+1} = 2^7 = 128$, więc wszystkich jej członków sprawdzić nie sposób. Reguły pierwszych tworców ewolucji uzyskano więc metodą losowania. Po pierwszym etapie selekcji pozostawiono 20 automatów, które uzyskały najlepsze wyniki. Pozostałe 80 reguł uzyskano, wymieniając jedynki i zera między odpowiadającymi sobie miejscami w tabelach reguł elitarniej dwudziestki (krzyżowanie). Dodatkowo wprowadzono mutacje, zmieniając w sposób przypadkowy w dwóch miejscach tabele reguł nowych automatów. Po czym oceniano automaty od nowa i powtarzano kolejne etapy ewolucji: selekcję, krzyżowanie i mutacje. I tak w kółko.

Jak widać, ewolucja nie narzucała określonych reguł, a premiowała tylko wyniki. Nadzieją żywych eksperymentatorów było, że wyhodowane w ten sposób automaty okażą się lepsze, niż reguła Gacsa-Kurdymowa-Lewina (GKL), pochodząca z 1978 roku. Reguła ta brzmi następująco: jeśli $s_i(t) = 0$, to $s_i(t+1)$ jest taki, jak większość komórek ze zbioru $\{s_i(t), s_{i-1}(t), s_{i-3}(t)\}$. Jeśli natomiast $s_i(t) = 1$, to $s_i(t+1)$ jest taki, jak większość komórek ze zbioru $\{s_i(t), s_{i+1}(t), s_{i+3}(t)\}$. Przez "większość" rozumiemy tu zasadę głosowania: np. większość ze zbioru $\{1,0,1\}$ jest równa 1. Otóż reguła GKL otrzymywała systematycznie ocenę 0.972.

Historia przebiegu tak zadanej ewolucji dała się podzielić na epoki. W pierwszej epoce układ został opanowany przez automaty, które wszystkie stany otoczenia kwalifikowały jako czarne, oraz automaty które wszystko traktowały jako białe. Te automaty o niewątpliwie prostych regułach miały nad konkurentami jedną niewątpliwą przewagę: miały rację w 50 procentach, czyli w połowie przypadków. Porównując ich problem do problemu rozpoznawania zagrożenia i podjęcia właściwej decyzji, można powiedzieć, że powstały w tej epoce zwierzęta które zawsze atakowały oraz takie które zawsze uciekały. Jak się łatwo domyślić, oceny uzyskiwane przez te automaty nie przekraczały 0.5. W drugiej epoce niektóre automaty uzyskały dodatkową zdolność do kwalifikowania skrajnie przeciwnych gęstości ($\rho \approx 0$ lub $\rho \approx 1$). Innymi słowy np. te, które dotąd

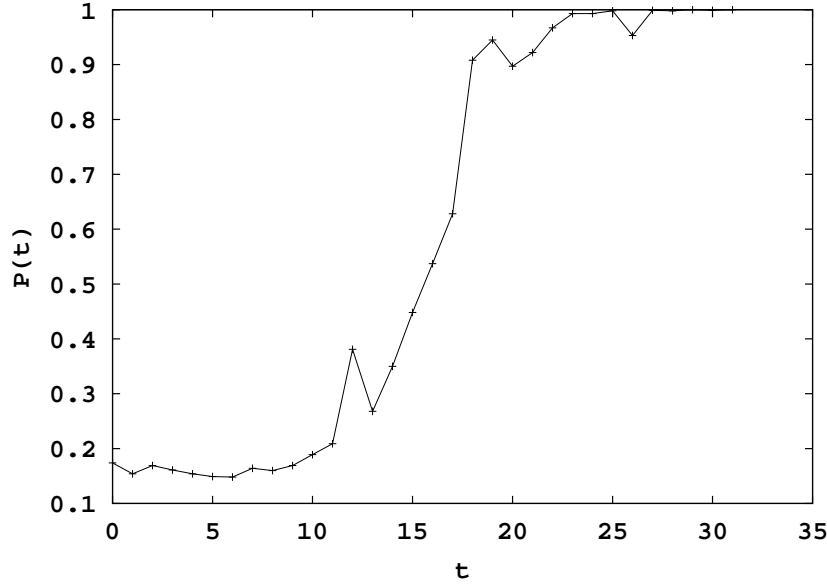
zawsze atakowały, nauczyły się że w skrajnie niekorzystnej sytuacji lepiej zmykać. Ocena w tej epoce wzrosła, osiągając wyniki z przedziału (0.51-0.75). W trzeciej epoce niektóre automaty, wyspecjalizowane jak poprzednio, zwiększały stopniowo swoje umiejętności, poszerzając zakres ρ , w którym podejmowały właściwą decyzję. Szczytowe osiągnięcie tak zaprogramowanej ewolucji to ocena 0.936. Potem nastąpiła stagnacja. Nie udało się osiągnąć poziomu GKL.

Co ciekawe, ewolucja przebiegła w sposób ciągły: w regułach automatów ze szczytu ewolucji pozostały ślady pierwszej epoki. O każdym z nich można było łatwo powiedzieć, czy jego przodkowie rozpoznawali każdy stan otoczenia jako czarny, czy też automat pochodzi z rodziny "wszystko białe". Można by się spodziewać, że zwycięzcy będą mieli reguły symetryczne względem przestawienia 0 z 1 - taką symetrię obserwujemy u GKL. To się jednak nie stało. Autorzy pracy [51] spróbowali przyspieszyć ewolucję, odgórnie narzucając warunek symetrii na reguły automatów. Okazało się jednak, że w tych warunkach ewolucja w ogóle nie działa.

10.3. Model Penny starzenia biologicznego populacji genetycznej.

W modelu Penny zajmujemy się ewolucją, jaką przechodzą geny. Informacja genetyczna każdego osobnika jest reprezentowana przez ciąg zer i jedynek. Zero oznacza tu gen nieuszkodzony, a jedynka - chorobę genetyczną. Model powstał niedawno [52] i rozwija się dość dynamicznie. Tu przedstawimy jego prostą wersję, zaczerpniętą z pracy [53].

Życie każdego osobnika może trwać od 1 do np. 32 kroków czasowych. W t -tym kroku ujawnia się stan jego t -tego genu. Jeżeli ilość genów uszkodzonych przekracza pewien poziom krytyczny T , osobnik ginie. Prawdopodobieństwo przeżycia przez jednostkę kolejnego kroku czasowego zależy ponadto od ilości osobników N w populacji jak $1 - N/N_{max}$, gdzie N_{max} jest parametrem otoczenia. Ukończywszy wiek dojrzałości R , rzeźzone osobniki rozmnażają się przez pączkowanie. W każdym kroku czasowym z prawdopodobieństwem B z każdego osobnika powstają dwa - drugi w wieku 0. Potomek dziedziczy komplet genów - z czasem się dowie, jaki - dodatkowo zmutowany w M losowych miejscach. Mutacja nie może naprawić uszkodzonego genu, a jedynie uszkodzić zdrowy. Typowe wartości parametrów modelu to



Rysunek 10.2: Prawdopodobieństwo, że gen ujawniony w wieku t okaże się uszkodzony. Wykres dotyczy populacji równowagowej [53].

$T = 3$, $N_{max} = 10^7$, $R = 8$, $B = 1/2$, $M = 1$. Populacja zaczyna swój byt w czasie $t = 0$ od 10^6 osobników z przypadkowo rozlosowanymi uszkodzeniami.

Wprowadzenie parametru N_{max} opisuje efekt znany jako paradoks pastwiska. Mianowicie w gminie jest 10 gospodarstw, każde gospodarstwo ma jedną krowę. Krowy pasą się na wspólnym pastwisku. Każda krowa daje 10 litrów mleka: $10 \times 10 = 100$. Ta sytuacja trwa, aż jeden z gospodarzy dokupuje sobie drugą krowę. Trawy nie przybywa, wobec tego każdy gospodarz może liczyć na 9 litrów mleka, z wyjątkiem jednego który ma 18 litrów. Obecnie $11 \times 9 = 99$, do momentu aż pojawia się czyjaś dwunasta krowa. Wtedy $12 \times 8 = 96$. Większość gospodarzy ma coraz mniej mleka, toteż znów ktoś kupuje krowę. W końcu wszystkie krowy zdychają z braku trawy.

W modelu Penny tego typu hekatomba jest mało prawdopodobna, ale populacja może wyginać z kilku powodów. Jednym z nich jest duża początkowa śmiertelność młodzieży. Po kilkunastu krokach czasowych nadchodzi kryzys - większość populacji ginie. Jeżeli ktoś (coś) ocaleje, to ustali się nowy rozkład równowagowy uszkodzonych genów, który będzie daleki od jednorodnego. Można to zobaczyć na Rys.10.2 Progiem, poniżej którego uszkodzone geny pojawiają się dużo rzadziej, jest wiek dojrzałości R .

10.4. Model Baka-Sneppena

W modelu Penny pojawia się "ciśnienie ewolucji", które "wypycha" uszkodzone geny powyżej wieku dojrzałości. Ten efekt jest wypreparowany w czystej postaci w modelu ewolucji Baka-Sneppena [54]. Układem modelowym jest tu ciąg $i = 1, 2, \dots, N$ komórek, zawierających liczby rzeczywiste x_i z przedziału $(0,1)$. W stanie początkowym liczby te są wylosowane z rozkładu jednorodnego. Działanie ewolucji polega na tym, że komórka, której zawartość jest w danej chwili najmniejsza, otrzymuje nową liczbę, również wylosowaną z rozkładu jednorodnego. Jednocześnie takiej samej zmianie poddawani są jej najbliżsi sąsiedzi, niezależnie od ich stanu - jest to jakaś wersja odpowiedzialności zbiorowej, która wprowadza oddziaływanie między komórkami układu.

W wyniku tak modelowanej ewolucji rozkład prawdopodobieństwa $p(x)$, początkowo jednorodny, przechodzi stopniowo w nowy - też jednorodny, ale dopiero powyżej pewnej wartości progowej $R \approx 2/3$. Dla $x < R$ prawdopodobieństwo $p(x)$ jest równe zero, co oczywiście widać tym lepiej, im większa jest liczba komórek N . Średnia $\langle x(t = \infty) \rangle$ tego asymptotycznego rozkładu jest więc $(1 + R)/2 \approx 0.83$. Na rysunku 10.3 pokazano przebieg $\langle x(t) \rangle$ w funkcji czasu t . Natomiast na rysunku 10.4 zademonstrowany jest histogram rozkładu prawdopodobieństwa zmiennej x po 5×10^5 krokach. Jak widać, wykres ten jest podobny do rysunku 10.2.

Model Baka-Sneppena doczekał się bardzo szybko swojej wersji średniopolewej, zbudowanej za pomocą równań fundamentalnych [55]. Wprowadźmy mianowicie prawdopodobieństwo, że x' jest mniejsze od x , czyli $P(x) = \int^x p(x') dx'$, oraz $Q(x) = 1 - P(x)$. Wtedy rozkład prawdopodobieństwa k -tej kolejnej najmniejszej wartości x

$$p^k(x) = a(N, k) P^{k-1}(x) p(x) Q^{N-k}(x) \quad (10.4)$$

gdzie $a(N, k) = N!/(k-1)!(N-k)!$. Stąd otrzymujemy rozkład najmniejszej wartości x :

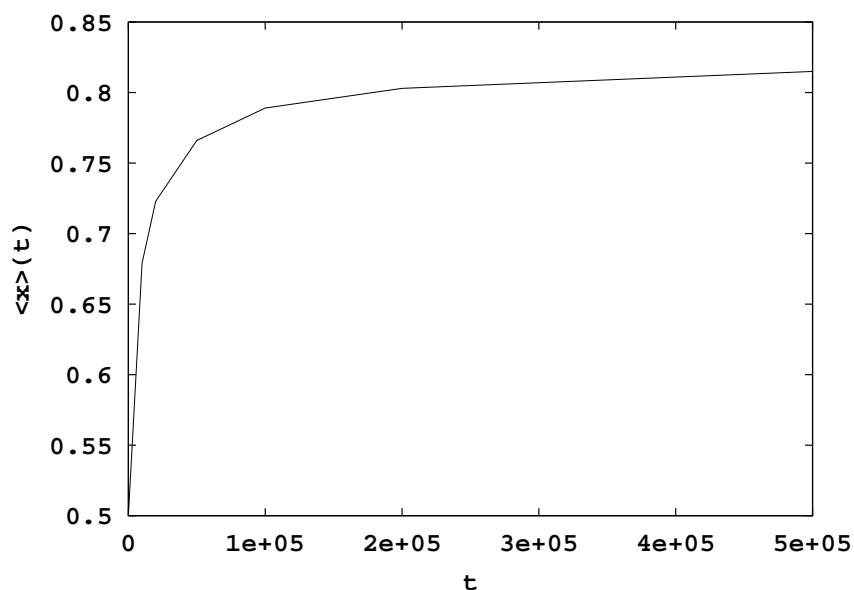
$$p_1(x) = N p(x) Q^{N-1}(x) \quad (10.5)$$

Wtedy równanie ewolucji dla rozkładu $p(x)$ ma postać

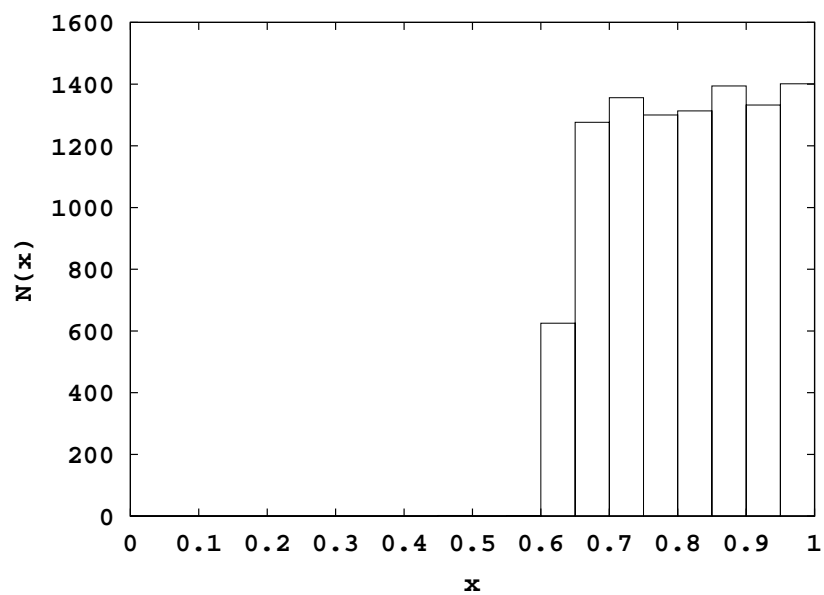
$$p(x, t+1) - p(x, t) = p_1(x)/N - 2/(N-1)[p(x, t) - p_1(x)/N] + 3/N \quad (10.6)$$

Pierwszy człon po prawej stronie tego równania opisuje modyfikację rozkładu $p(x, t)$ powstałą po odjęciu komórki z najmniejszą wartością x . Drugi człon opisuje odjęcie dwóch kolejnych komórek, przy czym informacja, że są to najbliżsi sąsiedzi komórki odjętej przed chwilą, nie jest brana pod uwagę - to właśnie jest przybliżenie średniego pola. Ostatni człon odpowiada za uzupełnienie rozkładu trzech komórek za pomocą rozkładu jednorodnego. Otóż rozwiązanie numeryczne równania (10.6) pokazuje, że dolna granica rozkładu R ustala się na poziomie $1/3$, a nie $2/3$ jak w wyniku symulacji. Tak więc raz jeszcze okazało się, że zaniechanie lokalnych korelacji prowadzi do błędnych wyników.

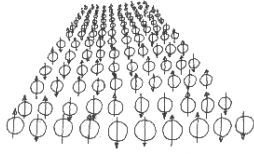
Model Baka-Sneppena jest miłą ilustracją obowiązującej w ewolucji zasady Czerwonej Królowej [56]. Czerwona Królowa jest figurą szachową, postacią z inspirującej książki Lewisa Carrolla *Alicja po drugiej stronie lustra*. Figura ta biegnie bardzo szybko, ale jedynym skutkiem tego biegu jest pozostawanie w tym samym miejscu. Podobnie w ewolucji do każdego następnego wyścigu stają tylko zwycięzcy z poprzedniego. Co z tego więc, że w danym kroku czasowym wartość naszej komórki nie została zmieniona? Wartość R stale rośnie i słabszych od nas jest coraz mniej.



Rysunek 10.3: Średnia wartość zmiennej x w funkcji czasu, czyli liczby iteracji t .



Rysunek 10.4: Histogram wielkości x w modelu Baka-Sneppena po 5×10^5 iteracji. Obliczenia były prowadzone dla $N = 10^4$ komórek.



Rozdział 11

MODEL ISINGA

”Cokolwiek było, jest lub będzie w fizyce komputerowej, da się wyrazić w modelu Isinga”; jeśli nawet to nieprawda, brzmi bardzo wiarygodnie. Pojęcie spinu i automaty komórkowe trafiły tą drogą nawet pod strzechy badań opinii publicznej [1,2].

Model Isinga w wersji oryginalnej służył do opisu ferromagnetyka. Należy sobie wyobrazić sieć krystaliczną tworzoną przez magnetyczne atomy. Spin danego atomu, czyli jego wkład do całkowitego momentu magnetycznego próbki, może być dodatni lub ujemny, ale wartość bezwzględna momentu magnetycznego jest stała, przynajmniej w najprostszej wersji $S = 1/2$. Energia całości E zależy od orientacji poszczególnych momentów magnetycznych, a mianowicie

$$E = - \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j - h \sum_i s_i, \quad (11.1)$$

gdzie i, j to indeksy przebiegające po wszystkich atomach, J_{ij} jest tzw. całką oddziaływania wymiany (cokolwiek to by nie znaczyło) między atomami i i j , $s_i = \pm 1$, h wreszcie jest energią oddziaływania spinów z polem magnetycznym. Ponieważ układ fizyczny zwykle pozostaje w stanach o niskiej energii, jest sens dodać, że $J > 0$ preferuje stany w których sąsiednie spiny są skierowane tak samo (oba $+$ lub oba $-$), a pole magnetyczne ”stara się” ustawić spiny zgodnie ze znakiem h .

W języku automatów komórkowych można to wyrazić następująco: i -ta komórka może pozostawać w dwóch stanach, czyli $s_i = \pm 1$. Jeżeli tendencję układu do zmniejszenia własnej energii przyjąć za definicję reguły deterministycznego automatu komórkowego, to reguła ta ma postać

$$s_i(t+1) = \text{sign}[\sum_j J_{ij} s_j + h] \quad (11.2)$$

Fizycznym uzasadnieniem deterministycznego charakteru automatu

jest konieczne w tym przypadku założenie, że temperatura jest równa zeru. W dalszej części tego wykładu zobaczymy, jak zmieniają się reguły automatu dla temperatury dodatniej. Jak zobaczymy poniżej, taka dynamika prowadzi do automatów klasy I lub II. Dowód podał Bernard Derrida [59]. Dla prostoty opuścimy w tym dowodzie pole magnetyczne.

11.1. Dowód Derridy

Zakładamy, że $J_{ji} = J_{ij}$ - w magnetyzmie jest to prawie zawsze prawdą. (W następnym rozdziale będziemy dyskutować wyjątek od tej reguły.) Zdefiniujmy $g_i(t) = \sum_j J_{ij}s_j(t)$ oraz tzw. funkcję pracy W (nie mylić z energią)

$$W(t) = - \sum J_{ij}s_i(t)s_j(t+1) \quad (11.3)$$

Można zapisać $W(t)$ na dwa równoważne sposoby:

$$\begin{aligned} W(t) &= - \sum_i g_i(t)s_i(t+1) = \\ &= - \sum_i g_i(t+1)s_i(t) \end{aligned} \quad (11.4)$$

Zauważając, że $s_i(t+2) = \text{sign}[g_i(t+1)]$, można spożytkować pierwszą równość w (11.4), pisząc

$$\begin{aligned} W(t+1) &= - \sum_i g_i(t+1)s_i(t+2) = \\ &= - \sum_i |g_i(t+1)| \end{aligned} \quad (11.5)$$

Druga równość w (11.4) pozwala napisać

$$\begin{aligned} W(t) &= - \sum_i |g_i(t+1)| \text{sgn}[g_i(t+1)]s_i(t) = \\ &= - \sum_i |g_i(t+1)|s_i(t+2)s_i(t) \end{aligned} \quad (11.6)$$

Różnica wyrażeń (11.5) i (11.6) jest ujemna lub zero:

$$W(t+1) - W(t) = - \sum_i |g_i(t+1)|\{1 - s_i(t+2)s_i(t)\} \quad (11.7)$$

Oznacza to, że funkcja $W(t)$ maleje lub dąży do stałej. Wiecznie maleć nie może, przynajmniej dla układów skończonych. Wobec tego $s_i(t+2) = s_i(t)$. Może to być cykl graniczny o długości 2 - wtedy mamy do czynienia z automatem klasy II. Być może po prostu $s_i(t) = \text{const}(t)$. Wtedy automat należy do klasy I. *Quod erat demonstrandum.*

Wniosek jest nieco przykry: dynamika oparta na modelu Isinga w temperaturze $T = 0$ nie jest ciekawa. Dalej będziemy rozważać przypadki gdy $T > 0$. Ogólnie biorąc, reguły automatu stają się probabilistyczne - dodatnia temperatura oznacza zawsze pewien rozkład równowagowy. W fizyce temperatura jest zawsze porównywana z energią, bez energii nie ma sensu. Mówiąc jednak o automatach komórkowych, stykamy się często z automatami w których energia nie jest określona. Ogólniej: dla wielu automatów funkcja pracy, która byłaby minimalizowana przez reguły automatu, nie istnieje. Wtedy wprowadzenie "temperatury" oznacza po prostu wprowadzenie do reguł szumu, czyli zmiennej losowej.

11.2. Losowość w regułach automatu *Life*

Automat *Life*, znany z poprzednich rozdziałów, jest właśnie takim przypadkiem gdzie funkcja pracy nie jest znana. (Żeby napisać "nie istnieje", musiałbym przynajmniej znać dowód.) Prześledźmy tu sposób wprowadzenia do reguł *Life'a* parametru losowości, który za autorami tej koncepcji [60] będziemy oznaczać T . Jak jednak wspomniałem wyżej, nie jest to temperatura. Sposób nie odnosi się tylko do *Life'a*, ale potrzebujemy założenia że $k = 2$, i w związku z tym możemy mówić o żywych i martwych komórkach.

Niech $P(k, \alpha, T)$ będzie prawdopodobieństwem pojawienia się komórki "w stanie i na sposób" α , gdy k spośród jej sąsiadów jest żywych. Przez "sposób" α rozumiemy tu różnicę między komórką która właśnie ożyła, a komórką żywą już w chwili poprzedniej. Prawdopodobieństwa $P(k, \alpha, 0)$ są równe 1 lub 0, ponieważ opisują przypadek deterministyczny. Losowość T wprowadza się wzorem

$$(1 + T)P(k, \alpha, T) = P(k, \alpha, 0) + \rho T \quad (11.8)$$

gdzie ρ jest gęstością jedynek, czyli żywych komórek. Jak widać, tak zdefiniowana reguła zależy od czasu poprzez gęstość ρ . Ta ryzykowna recepta ma jednakże dwa plusy. Pierwszy, że dla $T = 0$ reguła staje się na powrót deterministyczna, natomiast dla dużych wartości T otrzymujemy $P(k, \alpha, T) = \rho$ niezależnie od stanu otoczenia. Jak zobaczymy niżej, takie ujęcie stanowi pewną analogię rzeczywistej temperatury. Drugim plusem jest fakt, że jeżeli reguła zachowuje gęstość ρ dla $T = 0$, to zachowuje ją dla dowolnej wartości T . A oto dowód:

Założmy, że w danej chwili t gęstość żywych komórek wynosiła $\rho(t)$. Gęstość $\rho(t+1)$ obliczamy ze wzoru

$$\begin{aligned}\rho(t+1) &= \sum_k \rho(t) q(k, s) P(k, s, T) \\ &+ \sum_k [1 - \rho(t)] q(k, b) P(k, b, T)\end{aligned}\quad (11.9)$$

gdzie $q(k, \sigma)$ jest prawdopodobieństwem, że komórka w stanie $\sigma = 0, 1$ ma dokładnie k żywych sąsiadów, s (*still living*) oznacza że komórka żyła już w czasie t , a b (*born*) - że ożyła w czasie $t+1$. Podstawiamy za $P(k, \alpha, T)$ wyrażenie otrzymane ze wzoru (11.8) i korzystamy z warunku normalizacji

$$\sum_k \rho(t) q(k, 1) + \sum_k [1 - \rho(t)] q(k, 0) = 1 \quad (11.10)$$

otrzymując wzór

$$\begin{aligned}(1+T)\rho(t+1) &= T\rho(t) \\ &+ \sum_k \rho(t) q(k, s) P(k, s, 0) \\ &+ \sum_k [1 - \rho(t)] q(k, b) P(k, b, 0)\end{aligned}\quad (11.11)$$

Jeżeli więc jest prawdą, że w "temperaturze" T równej zero gęstość $\rho(t)$ nie zależy od czasu, czyli

$$\sum_k \rho(t) q(k, 1) P(k, s, 0) + \sum_k [1 - \rho(t)] q(k, 0) P(k, b, 0) = \rho(t) \quad (11.12)$$

to podstawiając (11.11) do (11.12) otrzymujemy $\rho(t+1) = \rho(t)$. Q.e.d.

11.3. Metody Monte Carlo

Łatwo wyobrazić sobie obliczenie własności równowagowych układu opisanego modelem Isinga. Należy mianowicie obliczyć sumę statystyczną

$$Z = \sum_{\sigma} \exp[-\beta E(\sigma)] \quad (11.13)$$

po wszystkich stanach układu. Współczynnik $\beta = 1/(k_B T)$ jest odwrotnością energii termicznej. Otrzymywanie własności fizycznych z sumy statystycznej to temat omówiony w wielu podręcznikach fizyki statystycznej (np. [61]), więc nie będziemy się nim tutaj zajmować.

Niestety pojawia się tu duży rozziw między "wyobrazić sobie" a "wykonać". Dla układu N spinów suma (11.13) zawiera 2^N składników. Z

obliczeniowego punktu widzenia problem obliczenia Z jest klasy NP . Ścisłe obliczenia analityczne udały się jak dotąd tylko dla dwuwymiarowego układu w polu równym zero. Było to w 1944 roku [62]. W tej sytuacji do głosu dopuszczono probabilistyczne automaty komórkowe. Ponieważ ich używanie wymaga stosowania generatorów liczb quasi-losowych, wiele osób używa tu wspólnej nazwy "metod Monte Carlo" (MC). Nawiasem mówiąc, termin "quasi-losowy" pochodzi z pracy [24], gdzie przeprowadzono dość bezlitosną kwalifikację: liczby losowe mogą pochodzić tylko z eksperymentu i są niepowtarzalne; liczby pseudolosowe, rzeczywiście przypadkowe, mogłyby pochodzić z generatora ale to niemożliwe; liczby quasi-losowe to to co bierzemy z generatora, wma- wiając sobie że są to liczby przypadkowe. Tak czy inaczej, stosujemy metody MC do modelu Isinga, i to na kilka sposobów. Cel tych sposobów jest jeden: obliczyć namagnesowanie, czyli średnią wartość spinu, w zależności od pola i temperatury.

Do wszystkich tych sposobów odnosi się następujące rozumowanie: Wprowadźmy do modelu Isinga prawdopodobieństwo p_i , że i -ty spin jest skierowany w górę. Zmiana tego prawdopodobieństwa w czasie może być zapisana przy pomocy równania fundamentalnego

$$dp_i/dt = -p_i w_i(+ \rightarrow -) + (1 - p_i) w_i(- \rightarrow +) \quad (11.14)$$

gdzie $w_i(+ \rightarrow -)$ oznacza prawdopodobieństwo odwrócenia i -tego spinu ze stanu "w górę" do stanu "w dół". W równowadze termodynamicznej p_i nie zależy od czasu, a więc $dp_i/dt = 0$. Z drugiej strony spodziewamy się, że do przypadku tejże równowagi stosuje się rozkład Gibbsa

$$p_i = A \exp[-\beta E(\uparrow)] \quad (11.15)$$

gdzie $E(\uparrow)$ jest energią układu gdy i -ty spin jest skierowany w górę, a A jest stałą normalizacji. Stosunek prawdopodobieństw w równowadze spełniałby więc relację

$$w_i(+ \rightarrow -)/w_i(- \rightarrow +) = \exp\beta[E(\uparrow) - E(\downarrow)] = \exp[2\beta E(\uparrow)] \quad (11.16)$$

ponieważ $E(\uparrow) = -E(\downarrow)$, jak widać ze wzoru (11.4). Ale prawdopodobieństwa w_i nie zależą od p_i ; są więc takie same, w równowadze czy nie. Związek (11.16) obowiązuje więc dla wszystkich metod obliczeń. Podaję listę tych metod za pracą [63]:

1. Algorytm Metropolis.

Wybieramy losowo komórkę i . Na próbę odwracamy jej spin i obliczamy związaną z tym odwróceniem zmianę energii ΔE . Jeśli

$\Delta E < 0$, akceptujemy odwrócenie spinu. Jeśli $\Delta E > 0$, losujemy liczbę R z przedziału $(0,1)$ i porównujemy ją z $\varepsilon \equiv \exp(-\beta\Delta E)$. Jeśli $\varepsilon > R$, akceptujemy odwrócenie spinu. Jeśli jednak $\varepsilon < R$, odwracamy spin z powrotem. Po czym losujemy następną komórkę.

2. Kąpiel cieplna.

Komórki modyfikujemy tu jedna za drugą. Dla każdej komórki obliczamy $r_i(t) = \{1 + \exp[-2\beta \sum_j J_{ij}s_j(t)]\}^{-1}$ i porównujemy z liczbą losową $R \in (0, 1)$. Reguła kąpeli cieplnej (*heat bath*) mówi, że $s_i(t+1) = -1$, gdy $R > r_i(t)$; w przeciwnym razie $s_i(t+1) = 1$. Informacja, jaki był stan spinu s_i w czasie t , jest tracona tylko pozornie: stan tego spinu wpływa na ewolucję sąsiednich komórek.

3. Dynamika Glaubera. Gdy $s_i(t) = -1$, to: gdy $R > r_i(t)$, to $s_i(t+1) = -1$, w przeciwnym razie $s_i(t+1) = 1$. Gdy $s_i(t) = 1$, to: gdy $R > 1 - r_i(t)$, to $s_i(t+1) = 1$, w przeciwnym razie $s_i(t+1) = -1$. Liczby R i r_i otrzymujemy tak samo, jak w algorytmie kąpeli cieplnej.

W granicy $T \rightarrow 0$ wszystkie te recepty sprowadzają się do wzoru (11.2). Można sobie wyobrazić również inne algorytmy, spełniające warunek (11.13). Na przykład wprowadzenie do automatu pamięci o poprzednich stanach polegałoby na modyfikacji prawdopodobieństw odwrócenia spinu gdy $\Delta E > 0$ i gdy $\Delta E < 0$ przez ten sam czynnik $\zeta < 1$ w przypadku, gdy odwrócenie zmieniałoby stan spinu w porównaniu ze stanem w chwili $t - 1$. Dodajmy, że w istocie losowanie liczby $R \in (0, 1)$ i porównywanie jej z p : "gdy $R < p$, to A " oznacza, że czynność A wykonujemy z prawdopodobieństwem p .

Wbrew prostocie powyższych przepisów praktyka uprawiania obliczeń metodami MC jest dość trudna, zwłaszcza dla przypadku niskich temperatur. Mamy często do czynienia z "zawieszaniem się" algorytmu, co polega na tym że pewne konfiguracje spinów okazują się nadspodziewanie stabilne. Przykładowo, jeśli będziemy szukać namagnesowania równowagowego w polu równym zero dla temperatury niższej niż temperatura Curie, a zaczniemy symulację od stanu początkowego o zerowym namagnesowaniu, to układ nie będzie miał żadnego powodu żeby wybrać daną orientację spinu taką samą w całej próbce. Ustalą się granice między obszarami "plus" i "minus", które można porównać ze ścianami domenowymi, i układ znajdzie się w stanie metastabilnym. Teoretycznie biorąc, układ będzie dążył do swego prawdziwego stanu równowagi.

Problem w tym, że będzie to robił niewyobrażalnie powoli. W warsztatach komputerowców są różne narzędzia do zwalczania tej przypadłości. Wprowadza się na przykład tzw. "demony Creutza", to znaczy błędzące po siatce obszary w których spiny są zmieniane niezależnie od algorytmu [64]. Jeżeli powierzchnia zajmowana przez te obszary nie jest zbyt duża, to ich wpływ na otrzymywaną statystykę wyników można zaniedbać. Innym narzędziem przyspieszającym obliczenia jest technika znana jako *multispin coding*, polegająca na operowaniu 16-to lub 32-bitowymi konfiguracjami spinów, a nie pojedynczymi spinami [65]. Tak czy inaczej, metody MC wymagają dużych i mocnych maszyn.

11.4. Rozprzestrzenianie się uszkodzeń

O tej metodzie mówiliśmy przy okazji klasyfikacji automatów: skończona szybkość rozprzestrzeniania się uszkodzeń była cechą automatów klasy III. Tu przedstawimy jej zastosowanie do modelu Isinga w ramach wyżej opisanej metodyki MC [66].

Uruchamiamy więc np. algorytm Metropolis dla dwóch (A i B) bliźniaczych sieci Isingowskich spinów, używając do obu sieci tego samego ciągu liczb losowych. Uszkodzenie wprowadzamy, utrzymując jeden spin sieci B w stanie \downarrow . To uszkodzenie powoduje dalsze różnice pomiędzy stanami obu sieci w kolejnych krokach czasowych. Będziemy rozróżniać dwa typy tych różnic: w sieci A i -ty spin jest \uparrow , a w sieci B - \downarrow lub odwrotnie. Prawdopodobieństwo zdarzenia się uszkodzenia pierwszego typu oznaczmy d^{+-} , a drugiego - d^{-+} .

Zamiast spinów $s_i^{A,B}$ wprowadźmy teraz nowe zmienne: $\Pi_i^{A,B} = (1 + s_i^{A,B})/2$. Te zmienne przyjmują wartości 1 lub 0. Prawdopodobieństwa d możemy teraz wyrazić w postaci:

$$d^{+-} = [\Pi_i^A(1 - \Pi_i^B)], d^{-+} = [\Pi_i^B(1 - \Pi_i^A)] \quad (11.17)$$

gdzie [...] oznacza średnią czasową: $[x(t)] = 1/t \sum_t x(t')$, a t jest ilością wykonanych iteracji. Używając algorytmu MC wierzymy, że dla odpowiednio dużych wartości N średnia czasowa $[x]$ nie zależy od stanu początkowego $x(0)$, a więc opisuje pewien stan równowagi. Czasem nazywa się to ergodycznością automatu lub algorytmu, w nawiązaniu do podobnego pojęcia używanego w mechanice statystycznej. Do problemu ergodyczności wrócimy jeszcze w końcu tego rozdziału.

Wprowadzamy teraz nową zmienną

$$\Gamma_{0i} = d^{+-} - d^{-+} = [\Pi_i^A] - [\Pi_i^B] \quad (11.18)$$

Zwróćmy uwagę, że średnie dla sieci A i B nie są równoważne. Jeżeli algorytm MC jest ergodyczny, to średnia dla sieci A jest równa średniej termodynamicznej $\langle \dots \rangle$, otrzymanej przy użyciu sumy statystycznej Z (równanie 11.13)

$$\langle x \rangle = 1/Z \sum_{\sigma} x(\sigma) \exp[-\beta E(\sigma)] \quad (11.19)$$

gdzie suma przebiega po wszystkich stanach σ układu. Zachodzi więc równość $[\Pi_i^A] = \langle \Pi_i \rangle$. Natomiast dla sieci B mamy

$$\begin{aligned} [\Pi_i^B] &= P(s_i = 1/s_0 = -1) = P(\Pi_i = 1/\Pi_0 = 0) = \\ &= P(\Pi_i = 1, \Pi_0 = 0)/P(\Pi_0 = 0) = \\ &= \langle \Pi_i(1 - \Pi_0) \rangle / \langle (1 - \Pi_0) \rangle \end{aligned} \quad (11.20)$$

gdzie skorzystaliśmy z pojęcia prawdopodobieństwa warunkowego $P(X/Y) = P(XY)/P(Y)$. Podstawiając otrzymane wyrażenia do wzoru (11.18) i wracając do zmiennych s_i , otrzymujemy

$$2(1 - \langle s_i \rangle) \Gamma_{0i} = \langle s_i s_0 \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_0 \rangle \quad (11.21)$$

Po lewej stronie równości (11.21) występuje średni spin, czyli równowagowa wartość namagnesowania. Natomiast wyrażenie po prawej stronie to funkcja korelacji spin-spin. Suma takich funkcji korelacji po spinach s_i daje podatność magnetyczną. Ten wynik oznacza, że o ile tylko algorytm MC działa poprawnie, metoda rozprzestrzeniania się uszkodzeń może dać ważną informację o równowagowych własnościach układu.

11.5. Ergodyczność

W poprzednim podrozdziale trafiliśmy, jak na dzika, na problem ergodyczności. O jego wadze niech nam powie następujące rozumowanie: W zerowym polu magnetycznym oba kierunki namagnesowania są równoważne. Każdej konfiguracji σ spinów o namagnesowaniu $s(\sigma)$ odpowiada konfiguracja σ' o średnim namagnesowaniu $s(\sigma') = -s(\sigma)$ i takim samym prawdopodobieństwie. W efekcie średnie namagnesowanie jest równe zeru. Nie ma żadnego przejścia fazowego.

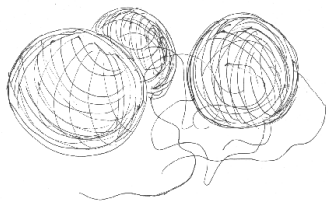
W mechanice statystycznej radzimy sobie z tym paradoksem przechodząc do granicy termodynamicznej ($N \rightarrow \infty$) w obecności niewielkiego pola magnetycznego h . W tej granicy znikają prawdopodobieństwa konfiguracji spinowych σ z niezerowym momentem magnetycznym skierowanym przeciwnie do pola. Znikają, gdyż są mnożone przez czynnik $\exp[-\beta N s(\sigma)]$. Wtedy przechodzimy do granicy $h \rightarrow 0$. Sztuczka polega więc na dobraniu kolejności przejść granicznych. Dlaczego jednak jesteśmy zmuszeni do technicznych sztuczek? I jak się to ma do faktu, że wszystkie próbki eksperymentalne są skończone? Czy przejścia fazowe istnieją? Wreszcie, jak się ma do tych kłopotów metoda MC?

Poważna odpowiedź musi brać pod uwagę dynamikę procesu przejścia fazowego, czyli jego zależność od czasu. Przypuśćmy, że schładzamy układ eksperymentalny w polu równym zero i dochodzimy do temperatury, w której zachodzi przejście fazowe. Powyżej tej temperatury odchylenia namagnesowania od zera są nieobserwowalnie małe. Co więcej, czas ich trwania jest bardzo krótki. Oznacza to, że w ułamku sekundy namagnesowanie osiąga wiele razy wartości dodatnie i ujemne. W miarę zbliżania się do temperatury krytycznej rozmiar tych fluktuacji rośnie. Rośnie też ich czas trwania, który w temperaturze krytycznej osiąga ogromne wartości, dużo dłuższe niż czas trwania pomiaru. Jednak w temperaturze krytycznej ciągle jest w przybliżeniu tyle samo spinów w górę i w dół. Tuż poniżej temperatury krytycznej przewagę osiąga jedna z orientacji spinu. Jeżeli pole jest równe zero, to nie potrafimy przewidzieć, jaka będzie ta orientacja. Mówimy, wtedy o spontanicznym złamaniu symetrii. Ważne jest jednak to, że gdyby próbka była rzeczywiście nieskończona, nie obserwowalibyśmy przewagi jednej orientacji spinów nad drugą. Możemy je zobaczyć w eksperymencie dlatego, że fluktuacja - bo to ciągle jest fluktuacja - osiąga czas trwania i rozmiary makroskopowe.

Formalizm sumy statystycznej nie opisuje tego procesu, ponieważ zależności od czasu nie bierze się tam pod uwagę. Średnią czasową wielkości mierzonych $[x(t)] = 1/t \sum_t^t x(t')$ zastępuje się w ramach tego formalizmu wzorem (11.19). Paradoksalnie, bliższa eksperymentowi jest metoda symulacji MC, gdzie informację czerpiemy z średnich czasowych. Można mówić o paradoksie, ponieważ rzeczywista dynamika procesu jest daleka od symulowanej. Nie mamy powodu wierzyć w symulacje w odniesieniu do dynamiki. Wierzimy tylko, że symulacje mogą dać właściwy stan równowagi.

Otóż treść hipotezy ergodycznej to właśnie równość średniej czasowej i średniej po zespole, danej wzorem (11.19). Przejście fazowe to przypadek złamania tej hipotezy. Trajektoria $\{s_i(t)\}$, która powyżej temperatury krytycznej może z równą swobodą penetrować na zmianę obszary w przestrzeni stanów z dodatnim i ujemnym namagnesowaniem, w temperaturze krytycznej tę swobodę traci. Czas jej przechodzenia z jednej z wymienionych części przestrzeni stanów do drugiej staje się w temperaturze krytycznej dużo dłuższy, niż czas trwania pomiaru. Jest to fakt eksperymentalny, który może znaleźć odzwierciedlenie w dobrze przeprowadzonej symulacji komputerowej. Natomiast formalizm sumy statystycznej jest tylko procedurą średniowania. W opisie przejścia fazowego ta procedura musi być wspomagana opisanymi wyżej sztuczkami.

O ergodyczności mówi się również mocniej jako o zdolności trajektorii do wypełniania z równą gęstością całej przestrzeni fazowej. Można sobie wyobrazić procedurę MC która nie byłaby ergodyczna w tym mocnym sensie, ale która zachowywałaby równość wyżej wymienionych średnich. Zabawne jest pomyśleć, że taka procedura, czyli odpowiednio dobrane reguły automatu, byłaby dla nas tym bardziej atrakcyjna, im mniej stanów by zajmowała, ponieważ symulacja trwałaby krócej. Z tego punktu widzenia ergodyczność automatu byłaby jego wadą. Ilustracją do tych uwag niech będzie przykład automatu $Q2R$ na sieci kwadratowej. $Q2$ odwraca spin tylko, gdy dokładnie dwa z jego czterech sąsiadów są skierowane w dół; trajektoria w tym automacie porusza się więc po powierzchni stałej energii. Symbol " R " oznacza, że automat został skonstruowany z automatu $Q2$ zgodnie ze wzorem (5.3). Automat $Q2R$ bywa używany do symulacji namagnesowania w modelu Isinga i daje całkiem niezłe wyniki dotyczące namagnesowania [67]. Niedawno Dietrich Stauffer znalazł dla sieci 8×8 czas powrotu tego automatu do stanu początkowego równy zaledwie 10^6 kroków [68]. 10^6 to wyraźnie mniej niż 2^{64} . Automat $Q2R$ nie jest więc ergodyczny.



Rozdział 12

DYNAMICZNY DIAGRAM FAZOWY

Wspominaliśmy już wyżej, że problem przyporządkowania każdemu automatu funkcji pracy, która byłaby minimalizowana przez reguły automatu, nie doczekał się jak dotąd ogólnego rozwiązania. Istnieje jednak rozwiązanie tego problemu dla określonej rodziny automatów, a mianowicie dla probabilistycznych automatów elementarnych z regułą głosowania, która dodatkowo nie zależy od stanu centralnej komórki [69]. Chociaż ta rodzina jest dość niewielka, sposób postępowania przy konstrukcji funkcji pracy nie jest obciążony jakimiś specjalnie restrykcyjnymi założeniami, i w zasadzie można sobie wyobrazić podobne wyniki dla szerszych rodzin automatów. Dlatego przytoczymy tu wyniki pracy [69]. Potem przejdziemy do dyskusji przyporządkowania odwrotnego: funkcja pracy \rightarrow rodzina automatów.

12.1. Od automatu do funkcji pracy

Mówimy o automatach zdefiniowanych na jednowymiarowej sieci, czyli na ciągu komórek $i = 1, \dots, N$ z periodycznym warunkiem brzegowym $s_{N+1} = s_1$. Każda komórka może zawierać 0 lub 1. W parzystych (nieparzystych) krokach czasowych określany jest stan podsieci o parzystych (nieparzystych) wartościach wskaźnika i . Reguła $v_i(t+1) = F[v_i-1(t), v_i(t), v_i+1(t)]$ spełnia z założenia dodatkowy warunek aby $F[x, y, z] = F[z, y, x]$. Przy tych warunkach automat jest określony przez trzy parametry a, b, c :

$$P(1/0, 0) = a, P(1/0, 1) = b, P(1/1, 1) = c \quad (12.1)$$

gdzie $P(1/x, z)$ jest prawdopodobieństwem że między komórkami w stanach x, z pojawi się komórka w stanie 1, oraz $P(0/x, z) = 1 - P(1/x, z)$.

W granicy deterministycznej prawdopodobieństwa P są zerami lub jedynkami, i rodzina zawiera $2^3 = 8$ automatów.

Otóż dla każdego zbioru liczb $\{a, b, c\}$ należących do przedziału $(0,1)$ prawdopodobieństwa konfiguracji $\sigma \equiv \{v_i(t)\}$ dadzą się przedstawić w postaci

$$P(\sigma) = \exp[-H(\sigma)] \quad (12.2)$$

gdzie H jest funkcją pracy zdefiniowaną następująco:

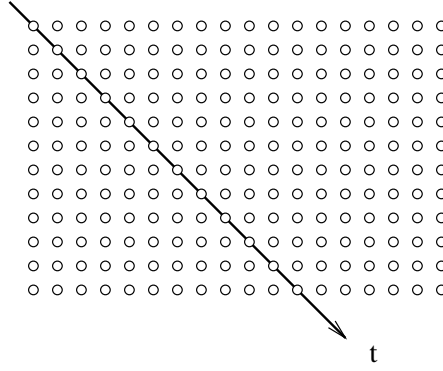
$$\begin{aligned} H = & -B \sum_i v_i - J \sum_i v_{i-1} v_{i+1} + \\ & - D \sum_i (v_i v_{i-1} + v_i v_{i+1}) - E \sum_i v_{i-1} v_i v_{i+1} \end{aligned} \quad (12.3)$$

Parametry B , J , D i E są dane wzorami

$$\begin{aligned} (1-a)^3 \exp(B) &= a(1-b)^2 \\ (1-b)^3 \exp(J) &= (1-a)(1-c) \\ a(1-b) \exp(D) &= b(1-a) \\ b^2(1-a)(1-c) \exp(E) &= ac(1-b)^2 \end{aligned} \quad (12.4)$$

W razie potrzeby możemy zmienne $v_i = 0, 1$ przerobić na spiny $s_i = 2v_i - 1 = -1, 1$. Jak widać, przepis na funkcję H nie jest obiecujący: do parametryzacji niewielkiej rodziny automatów potrzebujemy aż czterech parametrów. We wzorze (12.3) pojawiają się też oddziaływania trójspinowe, rzadko spotykane w modelu Isinga. Jednak wynik jest interesujący teoretycznie; ewolucję każdego automatu z badanej klasy można sprowadzić do mechaniki statystycznej określonej odpowiednim hamiltonianem Isinga.

Podobne rozważania można prowadzić dla automatów, których reguły są równoważne operacjom logicznym. Rozpatrzmy np. regułę XOR, która odegrała istotną rolę w historii sieci neuronowych [70]. Odpowiadający jej automat może być zdefiniowany w podobny sposób, jak opisany wyżej: stan każdej komórki w czasie $t + 1$ określa się na podstawie stanu jej dwóch sąsiadów w czasie t . Alternatywnie można sobie wyobrazić sieć kwadratową, tworzoną przez układ jednowymiarowych łańcuchów komórek; komórki każdego łańcucha odpowiadają węzłom sieci kwadratowej, a łańcuchy biegną równolegle do przekątnych kwadratów (rys.12.1). Stan danego łańcucha jest tworzony ze stanu łańcucha sąsiedniego za pomocą reguł automatu. Taki układ dwuwymiarowy powstał z układu jednowymiarowego przez dodanie prostopadłej do tego ostatniego osi czasu, dlatego bywa tu używana nazwa układów $d + 1$ -wymiarowych. W naszym przypadku $d = 1$.



Rysunek 12.1: Schemat automatu typu 1+1.

Otóż regule XOR określonej na zmiennych $v_i = 0, 1$ odpowiada funkcja pracy

$$H = A \sum_i v_i(t+1) - K \sum_i v_i(t+1)[v_{i-1}(t) - v_{i+1}(t)]^2 \quad (12.5)$$

jeżeli $0 < A < K$. Sprawdźmy to. Dla stanów $\{v_{i-1}(t), v_{i+1}(t)\} = \{0, 0\}$ lub $\{1, 1\}$ otrzymujemy następujące wartości funkcji pracy: dla $v_i(t+1) = 0$ $H = 0$, dla $v_i(t+1) = 1$ $H = A$. Mniejsza wartość H odpowiada wartości v_i równej zero. Natomiast dla pozostałych stanów $\{0, 1\}$, $\{1, 0\}$ mamy odpowiednio: dla $v_i(t+1) = 0$ $H = 0$, dla $v_i(t+1) = 1$ $H = A - K$. Automat zrealizuje więc $v_i = 1$.

Wyrażając funkcję pracy przez spiny ($s_i = 2v_i - 1$) otrzymujemy, jak poprzednio, oddziaływania trójspinowe $s_i(t+1)s_{i-1}(t)s_{i+1}(t)$.

12.2. Od energii do automatu

Do zagadnienia funkcji pracy można podejść odwrotnie. Mamy daną funkcję pracy, a więc na przykład energię sieci oddziałujących spinów. Jakie automaty ta energia generuje?

Fizycznym odpowiednikiem tego problemu może być przejście fazowe I rodzaju od fazy niemagnetycznej do magnetycznej, zachodzącego w niskich temperaturach [71]. Przejście I rodzaju dokonuje się tu przez zarodkowanie: obszar zajęty przez nową fazę narasta w sposób ciągły. Inaczej mówiąc, atomy na powierzchni magnetycznego klastra stają się magnetyczne, przy czym ich stan jest stanem o możliwie najniższej energii. W ten sposób definiowane są reguły odpowiedniego automatu.

Stan otoczenia → Automat ↓	↑↑	↓↑=↑↓	↓↓
A	↑	↑	↑
B	↑	↑	↓
C	↑	↓	↑
D	↑	↓	↓
E	↓	↑	↑
F	↓	↑	↓
G	↓	↓	↑
K	↓	↓	↓

Tablica 12.1: Lista wszystkich automatów, możliwych do uzyskania dla sieci kwadratowej w ramach schematu pokazanego na rysunku (12.1). Automaty są oznaczone literami $A - K$. Definicja każdego automatu jest trójką symboli: ↑ lub ↓.

Najprostszym przykładem jest tu przypadek sieci kwadratowej z oddziaływaniem między najbliższymi sąsiadami

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i \quad (12.6)$$

równoważnym najprostszej wersji modelu Isinga (11.1). Stan magnetyczny atomu na granicy międzyfazowej jest określany jako stan podstawowy, przy czym zgodnie z rysunkiem (12.1) bierze się pod uwagę oddziaływanie z dwoma sąsiednimi atomami: tym wyżej i tym po lewej stronie. Otoczenie składa się więc z tych dwóch atomów. Podobnie definiowane są tzw. automaty Tooma [76]. Określenie reguły automatu polega więc na podaniu magnetycznego stanu podstawowego atomu, obliczonego przy użyciu funkcji pracy (12.6), dla wszystkich stanów otoczenia. (Oznaczenie H przypomina hamiltonian w modelu Isinga.) W zasadzie trzeba więc rozróżnić cztery stany magnetyczne otoczenia każdego atomu, a mianowicie (↑↑), (↑↓), (↓↑) i (↓↓). Jednak energia oddziaływania danego atomu z otoczeniem jest taka sama dla stanów (↓↑) i (↑↓). Wobec tego definicja automatu jest trójką symboli (α, β, γ) , opisujących stany magnetyczne atomu, gdy jego otoczenie jest w stanach odpowiednio: (↑↑), (↑↓)=(↓↑) i (↓↓). W grę wchodzi $2^3 = 8$ automatów, których lista jest podana w Tabeli 12.1.

Okazuje się jednak, że nie wszystkie z tych automatów mogą być realizowane. Niektóre z nich nie dadzą stanu podstawowego dla żadnych wartości parametrów modelu (J, h) . Przyporządkowanie każdej parze

wartości tych parametrów odpowiedniego automatu nazwiemy za pracę [72] dynamicznym diagramem fazowym. Jak wiadomo, terminem "diagram fazowy" określa się przyporządkowanie wartościom parametrów (całki wymiany, temperatura itp.) stanu układu. Użyte tu słowo "dynamiczny" wskazuje, że zamiast określonego stanu mamy tu automat, odpowiednik równania ewolucji. Stan układu, realizowany przez taki automat, będzie zależał od stanu początkowego sieci.

12.3. Konstrukcja dynamicznego diagramu fazowego

Prześledzimy tu sposób eliminacji "niefizycznych" automatów z Tabeli 12.1. Zauważmy przy tym, że pomnożenie obu liczb (J, h) przez dowolną stałą dodatnią nie zmienia stanu podstawowego. Można by więc ograniczyć przestrzeń parametrów do osi h/J . Jednak nie zrobimy tego, bo wynik na płaszczyźnie lepiej wygląda.

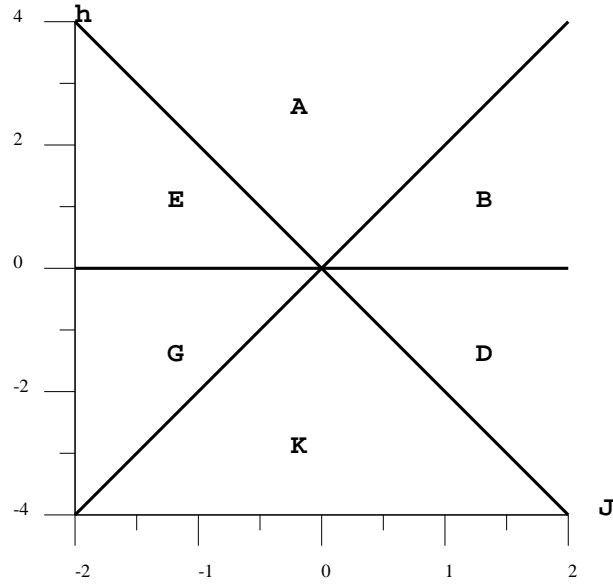
Dla każdego stanu otoczenia (s_1, s_2) wykreślimy na płaszczyźnie (J, h) prostą o równaniu $H(s_1, s_2, s) = H(s_1, s_2, -s)$. W tym równaniu H jest energią oddziaływania spinu s z parą jego najbliższych, już magnetycznych sąsiadów s_1, s_2 , oraz z polem magnetycznym:

$$H = -s[J(s_1 + s_2) + h] \quad (12.7)$$

Ta prosta oddzieli na płaszczyźnie (J, h) obszar, gdzie niższą energię ma stan $s = \uparrow$ od obszaru, gdzie niższą energię ma stan $s = \downarrow$. Ponieważ mamy trzy stany otoczenia, dynamiczny diagram fazowy będzie zawierał trzy proste.

Dla stanu otoczenia $s_1 = s_2 = \uparrow$ otrzymujemy z (12.7) równanie prostej $2J + h = 0$. Dla obszaru leżącego nad tą prostą, czyli dla $h > -2J$, niższą energię będzie miał stan $s = \uparrow$; poniżej tej prostej - stan przeciwny. Rozpatrywany stan otoczenia odpowiada pierwszej kolumnie tabeli 12.1. Punktom obszaru $h > -2J$ odpowiadają więc automaty o $\alpha = \uparrow$. Podobnie dla stanu $(\uparrow\downarrow)$ otrzymujemy prostą $h = 0$. Automaty odpowiadające obszarowi $h > 0$ mają więc w pozycji β symbol \uparrow . Wreszcie dla stanu otoczenia $(\downarrow\downarrow)$ równanie odpowiedniej prostej brzmi $-2J + h = 0$. Dla $h > 2J$ trzeci symbol, czyli γ jest \uparrow .

Utworzony podział płaszczyzny (J, h) jest przedstawiony na rysunku 12.2. Obszar nad wszystkimi trzema prostymi to obszar gdzie $h > 0$ oraz $h > \pm J$. Dla tego obszaru wszystkie trzy symbole α, β, γ są \uparrow .



Rysunek 12.2: Dynamiczny diagram fazowy dla modelu Isinga określonego wzorem (12.6) dla sieci kwadratowej.

Z tabeli 12.1 wynika, że automat o takiej regule to automat A , toteż opatrujemy literą A obszar nad wszystkimi trzema prostymi. Z kolei obszar gdzie $h > 0$, $h > 2J$ ale $h < -2J$ odpowiada automatu $(\alpha, \beta, \gamma) = (\downarrow\uparrow\uparrow)$, co odczytujemy z tabeli 12.1 jako automat E - wpisujemy więc literę E na diagramie. Otóż nie ma na rysunku obszaru, gdzie $h > 0$ i jednocześnie $h < \pm 2J$, co odpowiadałoby automatu $(\downarrow\uparrow\downarrow) = F$. Dlatego automat F na diagramie nie występuje. Podobnie reguła automatu $C = (\uparrow\downarrow\uparrow)$ wymaga, by $h < 0$ i jednocześnie $h > \pm 2J$, co nie jest możliwe.

12.4. Magnetoelastyczne przejście fazowe. Dynamiczny nieporządek

Powyższy schemat został zastosowany do opisu przejścia fazowego I rodzaju z fazy niemagnetycznej do magnetycznej, zachodzącego w YMn_2 w niskich temperaturach. Przejście było obserwowane w temperaturze około $100K$, jednak może zachodzić również w $T = 0$, jeśli stosujemy ciśnienie zewnętrzne [73]. Wtedy granica międzyfazowa jest określona przez gradient ciśnienia. W tym sensie można mówić o magnetoelastycznym charakterze przejścia fazowego.

YMn_2 ma specyficzną strukturę krystaliczną, która jest układem te-

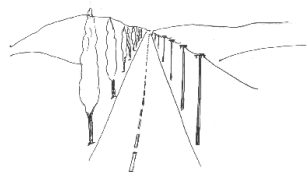
traedrów. Ponieważ wiązanie $Mn - Mn$ jest antyferromagnetyczne, struktura magnetyczna jest "sfrustrowana". Oznacza to, że w stanie podstawowym istnieją wiązania łączące spiny równoległe mimo antyferromagnetycznego charakteru oddziaływania. W YMn_2 sfrustrowane jest co trzecie wiązanie. Wiąże się to z nieprawdopodobną degeneracją stanu podstawowego: komórka elementarna zawierająca 16 atomów manganu po narzuceniu periodycznych warunków brzegowych może pozostawać w 90 stanach magnetycznych, przy czym wszystkie te stany mają tę samą, najniższą z możliwych energię [74]. YMn_2 przypomina pod tym względem szkło spinowe, chociaż nie ma tu nieporządku wiązań magnetycznych, który wprowadzałby rozkład głębokości lokalnych minimów energii. Dodajmy, że biologicznym odpowiednikiem szkła spinowego jest dyskutowany w rozdziale 8 model Kauffmana.

Można zapytać, jaka struktura magnetyczna powstaje podczas przejścia fazowego? Symulacje prowadzone przy użyciu automatu komórkowego pozwalają badać wynik przejścia w zależności od struktury magnetycznej podłoża: można zadać daną strukturę podłoża i obserwować, co tworzy się na nim. Wyniki wskazują, że żadna z 90 struktur periodycznych z okresem sieci nie jest odtwarzana w procesie przejścia. To, co powstaje, wygląda na strukturę aperiodyczną, czyli pozbawioną okresowości, i nosi wszelkie cechy struktury nieuporządkowanej. Gdybyśmy badali rzeczywistą próbkę z taką strukturą magnetyczną, byłibyśmy przekonani że powstała przypadkowo. A jest wynikiem algorytmu w pełni deterministycznego. Jest tak, jak u Wolframa [7]: "whether a pattern is found depends on how it is looked for."

Proces przejścia fazowego był również badany techniką deterministycznego rozprzestrzeniania się uszkodzeń [75]. Uszkodzenie było wprowadzane w postaci zmiany stanu magnetycznego jednego atomu. We wszystkich badanych przypadkach uszkodzenie osiągało granice układu. Oznacza to, że powstająca struktura magnetyczna jest niestabilna; modyfikacja stanu magnetycznego jednego atomu może wprowadzić zmiany powstającej struktury na dowolnie dużym obszarze. Z punktu widzenia teorii automatów komórkowych - jeżeli taka istnieje - wynik oznacza, że automat używany w symulacji jest automatem chaotycznym.

Dlaczego ta bogata dynamika nie jest kontrprzykładem twierdzenia Derridy, omówionego w rozdziale 11? Odpowiedź kryje się w specyficznej konstrukcji automatu o wymiarze $(1+1)$, przedstawionej na rysunku 12.1. Jedną z osi układu jest czas. Oznacza to, że stan układu, który

jest granicą międzyfazową w czasie t , jest określany na podstawie stanu układu, który był granicą międzyfazową w czasie $t - 1$, ale nie odwrotnie. Formalnie znaczy to, że $J_{ij} \neq J_{ji}$. Założenie twierdzenia Derridy w tym przypadku nie obowiązuje.



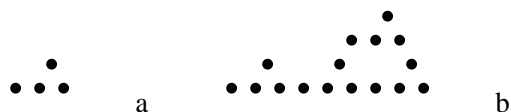
Rozdział 13

FRAKTALE

Ten rozdział nie dotyczy bezpośrednio automatów komórkowych. Ale dotyczy pojęć, które się pojawiają dość często wśród komórek automatów.

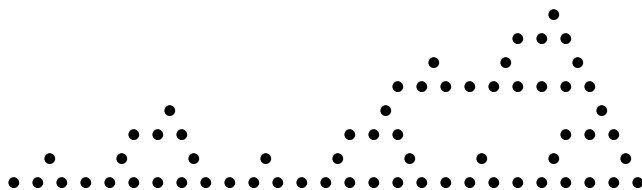
W świecie fraktali pojęciem centralnym jest wymiar fraktalny. Podając przykłady tworów o wymiarze fraktalnym, koncentrujemy się zwykle na strukturach, które w kolejnych przybliżeniach ujawniają coraz bardziej mikroskopijne szczegóły. Dla celów związanych z automatami komórkowymi można zastosować podejście przeciwne: komplikacja będzie się tu ujawniać w kolejnych oddaleniach. Opiszemy więc tzw. wymiar fraktalny klastra (*cluster fractal dimension*).

Zacznijmy od przykładu. Z czterech kulek, każda o średnicy L_0 i masie M_0 układamy leżącego lwa, jak na rysunku 13.1 a. Potem z czterech takich lwów układamy kolejnego lwa, jak na rysunku 13.1 b.



Rysunek 13.1: a. Lew. b. Lew z lwów.

A potem z czterech takich lwów, po cztery lwy każdy, znów układamy lwa.



Rysunek 13.2: c. Lew z lwów z lwów.

Może ktoś w tym zobaczyć mysz - wszystko jedno. Ważna jest zasada

działania: ”i tak dalej”. Jasne, że za n -tym krokiem musimy zużyć 4^n kulek, natomiast długość n -tego lwa wynosi $L(n) = 3^n L_0$. Pytanie brzmi: jak masa lwa zależy od jego długości? Gdyby lew był trójwymiarowy, odpowiedź brzmiałaby tak samo jak dla sześciangu: $M/M_0 = (L/L_0)^3$. Ta trójka to byłby właśnie wymiar lwa. Tu jednakże mamy

$$n = \frac{\log(L/L_0)}{\log(3)} = \frac{\log(M/M_0)}{\log(4)} \quad (13.1)$$

więc $M/M_0 = (L/L_0)^D$, gdzie $D = \log(4)/\log(3)$. Lew, a raczej jego ekstrapolacja z n do nieskończoności, jest więc fraktalem: tworem o wymiarze ułamkowym $D \approx 1.263$. W pewnych kręgach nasz lew obserwowany z wystarczająco dużej odległości jest rozpoznawany jako krzywa Kocha [77].

Ogólniej, wymiar fraktalny D klastra opisuje zależność masy M klastra od jego rozmiarów L , przy czym zakłada się, że jest to funkcja potęgowa. Czasem mówimy o tym założeniu ”hipoteza skalowania M z L ”. W żargonie: znając D wiemy, jak M skaluje się z L . Podana tu definicja, choć pogładowa, nie jest ścisła: gdybyśmy zamiast długości lwa L przyjęli jako argument funkcji M wysokość lwa H , otrzymalibyśmy inną wartość wymiaru fraktalnego. Dokładniej sformułowany problem brzmi: iloma kwadratami o boku L można pokryć n -tego lwa? Okazuje się, że jeśli $L_0 < L < 3^n$, to ilość tych kwadratów zależy od L jak L^{-D} . Tak więc bok kwadratu nie może być mniejszy od maksymalnych rozmiarów lwa. W naszym przypadku jest to jego długość; czy lew stoi, czy leży, nie zmienia to jego wymiaru. Pozostaje pytanie: skąd wiemy, że to mają być kwadraty a nie np. sześciany? Odpowiedź: wszystko jedno, mogą być twory z przestrzeni dowolnie wysoko wymiarowej, wymiar D od tego się nie zmieni. Byle nie miały zbyt niskiego wymiaru, bo lew będzie wystawał.

13.1. Skalowanie skończonych rozmiarów

Zmorą fizyka komputerowego jest - może być - właśnie ekstrapolacja do nieskończoności. Przypuśćmy, że metodą symulacji komputerowej szukamy zależności Y od X , być może typu $Y = X^a$, prawdziwej w granicy $L \rightarrow \infty$. Przyjmuje się czasem robocze określenie nieskończoności: $\log(\infty) \approx 80$, ale i takie liczby są najczęściej poza zasięgiem symulacji. Jak wobec tego szukać wielkości a ?

Recepta brzmi: trzeba zbadać, jak otrzymywane przez nas wyniki zależą od rozmiaru układu L , a następnie przejść z L do nieskończoności. Realizacja tej recepty przebiega następująco: Trzeba zrobić wykresy wielkości $\log(Y_L)$ od wielkości $\log(X_L)$ dla kilku wartości $L : L_1, L_2, \dots, L_N$. Następnie trzeba przeskalować te wykresy, używając transformacji

$$\begin{aligned} \log(X_L) &\rightarrow \log(X_L) - \alpha \log(L) \\ \log(Y_L) &\rightarrow \log(Y_L) - \beta \log(L) \end{aligned} \quad (13.2)$$

Wartości parametrów skalowania α i β znajdujemy z warunku, by przeskalowane wykresy miały punkt wspólny. Jeżeli wykresy zleją się w jeden wykres, to hipotezy skalowania: $X \propto L^\alpha$, $Y \propto L^\beta$ były prawdziwe i recepta działa. Otrzymany wykres jest prawdziwy dla każdej wartości L , a więc również dla $L = \infty$. Można użyć tego wykresu do znalezienia wielkości a . Jeżeli jednak wykresy nie zleją się w jedną krzywą, to dalej nic nie wiemy.

Recepta ma nazwę: skalowanie skończonych rozmiarów (*finite size scaling*) [78].

13.2. D. L. A.

Pod tym skrótem czai się zagadnienie zwane po angielsku *diffusion-limited aggregation*. W tzw. przekładzie swobodnym brzmiałoby to: agregacja [79] ograniczona przez dyfuzję. Podobno przekłady są jak kobiety: wierne lub piękne. Jeśli to prawda, ten jest wierny. Tematem zagadnienia jest tworzenie się cząsteczek w aerozolu. Rozmiary tych cząsteczek są zwykle dużo większe, niż zasięg tworzących je oddziaływań. Naturalną jest więc hipoteza, że kształt cząsteczek nie zależy od rodzaju tych oddziaływań. Oddziaływania istnieją i są krótkozasięgowe - na tym kończy się ich wpływ na strukturę cząsteczek. Można się więc spodziewać, że kształty tych cząsteczek będą przejawiały pewne ogólne prawidłowości. Taką prawidłowością mógłby być ich wymiar fraktalny.

Wyobrażamy sobie, że cząsteczki tworzą się przez agregację, to znaczy dołączanie mniejszych, swobodnie wędrujących atomów. Fraktalny charakter tworzonych w ten sposób "agregatów" jest konsekwencją faktu, że dla wędrujących atomów powierzchnia tworzonej cząsteczki jest dużo łatwiej dostępna, niż jej wcześniej utworzone wnętrze. Dlatego atomy będą przyczepiać się głównie na powierzchni, a raz utworzone niezapełnione

miejsca pozostaną niezapełnione. Na tym właśnie polega ”ograniczenie przez dyfuzję”. Zadaniem dla symulacji jest znalezienie wymiaru fraktalnego powstającego agregatu. Inaczej mówiąc, jak skaluje się promień cząsteczki R z jej masą M ? Gdyby nie było ograniczenia, odpowiedź brzmiałaby jak dla sześcianu: $R \propto M^{1/3}$. Bada się również kształt funkcji korelacji $c(r)$ zdefiniowanej wzorem

$$c(r) = 1/N \sum_{r'} \rho(r') \rho(r' + r) \quad (13.3)$$

gdzie $\rho(r)$ jest gęstością atomów w punkcie r . Badania eksperymentalne cząsteczek w aerozolu mówią, że $c(r)$ jest malejącą funkcją r . Jeżeli symulacja polega na losowym umieszczaniu atomów na powierzchni agregatu, to otrzymujemy wynik jak dla litej bryły: $c(r) = \text{constans}$.

Wyniki stają się bardziej interesujące, jeśli symulowana cząsteczka przed przyczepieniem się do agregatu porusza się w przestrzeni ruchem przypadkowym, tak jak podczas symulacji zjawisk dyfuzji. Otrzymywane wyniki są wtedy lepszym odtworzeniem eksperymentu. Promień agregatu narasta nieco szybciej: $R \propto M^{0.58}$, a funkcja korelacji gęstość-gęstość maleje z odległością jak $c(r) \propto r^{-0.343}$. Położenia atomów można ograniczyć do komórek sieci, co bardzo przyspiesza obliczenia. Do 1995 roku największy agregat wyhodowany poza siecią (*off-lattice*) w trójwymiarowej przestrzeni zawierał 10^7 atomów [80].

13.3. Analiza R/S. Prawo Hursta

Rozpatrzmy ciąg danych pozyskiwanych w czasie, czyli tzw. sygnał $\xi(t)$, gdzie czas t jest zmienną dyskretną. Definiujemy średnią $\langle \xi \rangle_\tau$ i odchylenie standardowe S sygnału w przedziale czasu $(0, \tau)$

$$\langle \xi \rangle_\tau = 1/\tau \sum_{t=1}^{\tau} \xi(t) \quad (13.4)$$

$$S = \{1/\tau \sum_{t=1}^{\tau} [\xi(t) - \langle \xi \rangle_\tau]^2\}^{1/2} \quad (13.5)$$

oraz akumulowane odchylenie od średniej $X(t, \tau)$

$$X(t, \tau) = \sum_{u=1}^t [\xi(u) - \langle \xi \rangle_\tau] \quad (13.6)$$

i jego zakres R

$$R(\tau) = \max\{X(t, \tau)\} - \min\{X(t, \tau)\} \quad (1 < t < \tau) \quad (13.7)$$

Badanie zależności ilorazu R/S od τ to właśnie analiza R/S , wymyślona przez H. E. Hursta [77]. Jeżeli nie ma korelacji między kolejnymi wartościami sygnału, a S jest skończone, to ścisłym wynikiem jest

$$R/S = (\pi\tau/2)^{1/2} \quad (13.8)$$

Hurst spędził kawał życia nad Nilem, badając poziom wody rzeki. Traktując poziom wody w latach 1904-1957 jako sygnał $\xi(t)$, otrzymał prawo empiryczne

$$R/S = (\tau/2)^H \quad (13.9)$$

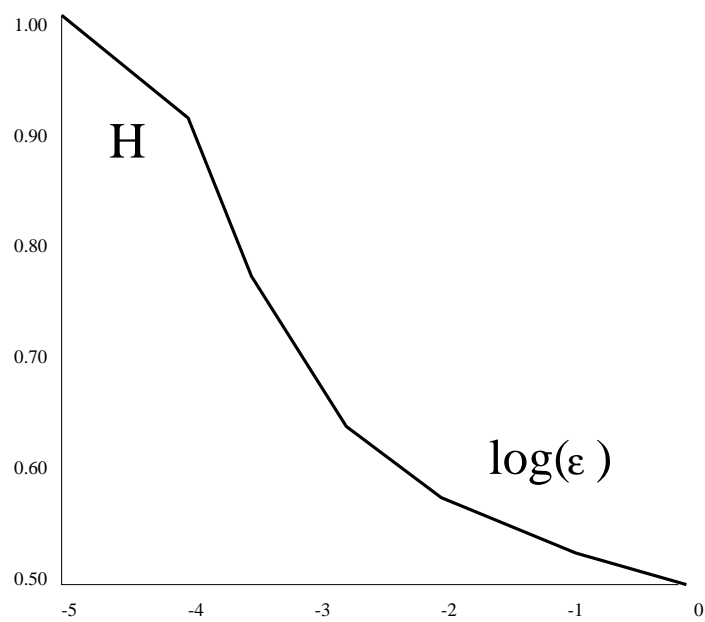
gdzie $H = 0.73 \pm 0.09$.

Zależność tę nazwano prawem Hursta. Prawo to znalazło potem potwierdzenie dla zależności od czasu poziomu wody w wielu innych rzekach, ciśnienia atmosferycznego, opadów deszczu i ilości plam na Słońcu. We wszystkich tych przypadkach wykładnik H przyjmuje wartości wyraźnie wyższe od $1/2$.

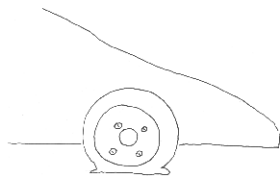
Źródłem tego odchylenia są korelacje między kolejnymi wartościami $\xi(t)$ sygnału. Hurst modelował te korelacje doświadczalnie przy pomocy "probabilistycznej" talii 53 kart: 13 jedynek, 8 trójek, 4 piątki i 1 siódemka oraz tyle samo kart z oznaczeniami ujemnymi, plus joker. Opis tych uroczych doświadczeń można znaleźć w książce J. Federa [77]. Tu podamy prostsze rozumowanie. Wartości sygnału $\xi(t)$ otrzymujemy przy pomocy generatora liczb losowych. Czas t jest tu liczbą naturalną. Korelacje między kolejnymi wartościami wprowadzamy za pomocą transformacji

$$\begin{aligned} \xi(t+1) &= r + (1+r)\xi(t) & \text{dla } r < 0 \\ \xi(t+1) &= r + (1-r)\xi(t) & \text{dla } r > 0 \end{aligned} \quad (13.10)$$

gdzie r pochodzi bezpośrednio z generatora. Jak widać, jeżeli $\xi(t) = 0$, to $\xi(t+1) = r$ i korelacja znika. Na ogół się to jednak nie zdarza, toteż otrzymana wartość wykładnika Hursta wynosi $H = 1.0$. Hurst w swych doświadczeniach eliminował co jakiś czas korelacje, tasując dokładnie talię, jeśli zdarzyło mu się wylosować jokera. Naśladowując go w doświadczeniu numerycznym, można "zerować" korelacje z prawdopodobieństwem ε , wstawiając $\xi(t+1) = r$ jeśli $r < \varepsilon$. Zależność wykładnika Hursta od prawdopodobieństwa ε podaje rysunek 13.3.



Rysunek 13.3: Wykładnik Hursta H w zależności od prawdopodobieństwa ϵ niszczenia korelacji.



Rozdział 14

PROBLEMY TRANSPORTU

Gaz - niekoniecznie doskonały - jest ośrodkiem najbardziej nieuporządkowanym. Nie znaczy to jednak, że nie obowiązują tam żadne prawa. A więc bezpośrednio z mechaniki wynika twierdzenie Liouville'a: objętość zajęta przez układ w przestrzeni stanów jest stała w czasie, czyli jest tzw. całką ruchu. Ogólniej, układ N cząstek ma $6N - 1$ całek ruchu $C_i, i = 1, \dots, 6N - 1$ [81]. To znaczy, że trajektoria jest zamknięta w podprzestrzeni $C_i(x_1(t), y_1(t), z_1(t), vx_1(t), \dots, vz_N(t)) = \text{const}(t)$. Łatwo to dostrzec, bo trajektoria w $6N$ -wymiarowej przestrzeni fazowej ($3N$ współrzędnych i $3N$ pędów) jest zawsze krzywą jednowymiarową: położenie i pęd określają dokładnie przyszłość układu. Taka krzywa jednowymiarowa powstaje na przecięciu $6N - 1$ podprzestrzeni, każda o wymiarze $6N - 1$. Ale jak dotąd rozumiemy tylko kilka z tych całek ruchu.

W ciągłym opisie probabilistycznym trajektoria nie jest deterministyczną krzywą, ale ma więcej wymiarów. W każdym zderzeniu dwóch cząstek rozkład kątowny przechodzi z dwóch funkcji delta w rozkład ciągły, określony przez różniczkowy przekrój czynny. Punkt w przestrzeni fazowej staje się w następnej chwili kulą czy też elipsoidą obrotową i rośnie, wypełniając w końcu większość wymiarów przestrzeni. W przyzwoitych modelach zachowana jest przynajmniej energia, która pozostaje równa wartości początkowej E_0 . Układ rozprzestrzenia się więc w podprzestrzeni $E = E_0$. Informacja o większości całek ruchu zostaje jednak zagubiona. Objętość w przestrzeni fazowej rośnie. Rośnie więc jej logarytm: entropia. I tak z wadliwego (bo probabilistycznego) modelu, nieco zażenowani, otrzymujemy drugą zasadę termodynamiki. "Nieodwracalność jest ludzką iluzją" - stwierdził Smoluchowski, zde gustowany tą drogą dochodzenia przez fałsz do prawdy.

Rozwiązaniem tego paradoksu jest - może być - koncepcja tzw. mieszania (*mixing*). Objętość w przestrzeni fazowej zajęta przez układ jest

stała, ale jej kształt zmienia się. Początkowo zwarta bryła, kula czy $6N$ -kostka, rozciąga wszędzie coraz cieńsze macki, które splątują się ze sobą w sposób coraz bardziej złożony. Powstaje struktura której "wszędzie pełno". Operując skończoną dokładnością pomiaru niesposób wydzielić część przestrzeni fazowej, gdzie układ by nie trafił. Koncepcja mieszanina pozwala nam przeinterpretować wyniki modeli probabilistycznych w duchu zgodności z twierdzeniem Liouville'a.

Można nad tym dyskutować. Tu interesujące jest jednak, jakie przybliżenia wiążą się z opisem transportu w gazie przy użyciu automatów komórkowych? Jak oceniać te przybliżenia w porównaniu z innymi modelami? Zaczniemy od tych innych modeli.

14.1. Podejście Eulera i podejście Lagrange'a

Model ośrodka ciągłego, czyli podejście Eulera [82], nie bierze pod uwagę istnienia atomów. Gaz jest tu reprezentowany przez pola prędkości i gęstości cząstek. Ewolucja czasowa jest określona przez równania różniczkowe, zazwyczaj dość złożone, których rozwiązywanie to osobna specjalizacja. Równania te zawierają parametry ściśliwości i lepkości, zwykle zależnych od temperatury - informacje o tych zależnościach czerpiemy z eksperymentów makroskopowych. W istocie są to bardzo okrojone informacje o oddziaływaniu między cząstkami.

Z drugiej strony najbardziej konsekwentną realizacją klasycznego obrazka gazu jest model sztywnych kul, zderzających się, powiedzmy, elastycznie, ze sobą i ze ściankami pudła - bilard trójwymiarowy. Można to nazwać podejściem Lagrange'a [82]. Ambitnym celem takiego podejścia mogłaby być kontrola wpływu stanu początkowego na ewolucję gazu w czasie. Otóż takie postawienie problemu jest skazane na porażkę. Układ jest chaotyczny, co oznacza eksponencjalnie szybkie narastanie błędu numerycznego w czasie. Nasze wyniki będą z pewnością nieprawdziwe już po kilkunastu zderzeniach. Możemy się z tym pogodzić, jeżeli uznamy, że błąd numeryczny wyprowadza nas z prawdziwego stanu do innego, który jednak jest równie prawdopodobny. Wtedy rzeczywistą średnią czasową zastępujemy przez średnią po stanach, po których prowadzi nas komputer. Z musu pozostajemy więc w ramach swego rodzaju hipotezy ergodycznej. Rzecz jasna nie można się spodziewać że otrzymamy w ten sposób informację o nieznanach całkach ruchu. Dodajmy, że obliczenia w modelu bilardu są bardzo czasochłonne. Nie wiadomo więc, czy szum numeryczny zdąży przeprowadzić układ przez wystarczająco

dużo stanów, aby można mówić o średniej po zespole.

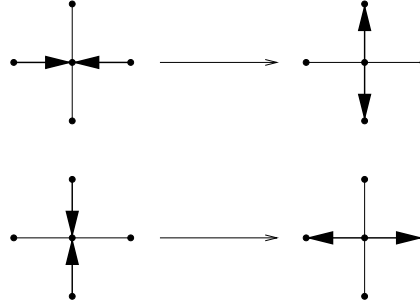
Jaki plan badań transportu w gazie jest więc realistyczny? Przybliżenie ośrodka ciągłego daje opis uśredniony, fenomenologiczny, który być może eliminuje interesujące efekty. Z drugiej strony wyniki symulacji nie pozwalają na określenie stanów mikroskopowych układu w przyszłości.

14.2. Gaz sieciowy

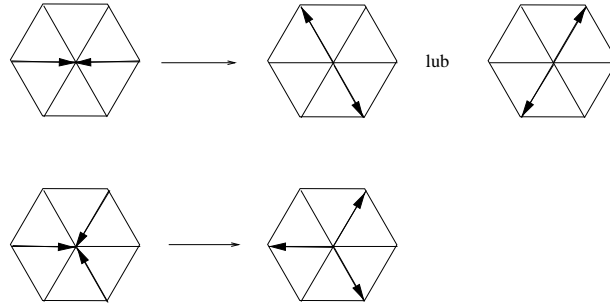
Obliczenia w ramach modelu gazu sieciowego (*lattice gas*) nie są panaceum na te kłopoty, ale próbą przezwyciężenia pewnego impasu. Mają wszystkie wady symulacji poza dwoma: są szybsze, a ich błędy numeryczne narastają wolniej. Mają większość zalet symulacji: biorą pod uwagę poszczególne cząstki, dopuszczają lokalne fluktuacje. Mają jedną zasadniczą wadę: czas, położenie i prędkość cząstek są liczbami naturalnymi, jak zawsze gdy mamy do czynienia z techniką automatów komórkowych. Czy to duża wada? Odpowiedź zależy od tego, co chcemy osiągnąć.

Najprostszy model gazu sieciowego można wprowadzić na sieci kwadratowej. Model jest znany jako HPP od nazwisk autorów pracy [83]. W modelu tym rozpatrujemy stany węzłów sieci. Każda linia łącząca węzły może w chwili t zawierać zero lub jedną cząstkę, poruszającą się wzdłuż tej linii z prędkością jednostkową. Masy i prędkości wszystkich cząstek są takie same. Toteż mamy $2^4 = 16$ stanów każdego węzła, rozumianych jako konfiguracje dochodzących do niego cząstek. Taki stan węzła jest wektorem Boole'a o czterech składowych. Na przykład stan $\{0, 1, 1, 1\}$ oznacza, że w danym węźle sieci spotykają się trzy cząstki nadbiegające z góry, z lewej strony i z dołu. Reguły automatu HPP dopuszczają takie zderzenia, dla których zachowane są pęd i energia kinetyczna. Łatwo je przedstawić graficznie, jak na rysunku 14.1. W przypadkach innych, niż przedstawione na rysunku, cząstki poruszają się niezależnie od siebie. Może to oznaczać zderzenie w których cząstki wymieniają się prędkościami, jak w rzeczywistych zderzeniach elastycznych. Jak widać, automat HPP jest deterministyczny.

Reguły modelu gazu sieciowego były wielokrotnie ulepszone. Dużym krokiem do przodu było wprowadzenie sieci trójkątnej, zamiast kwadratowej. Jest to tzw. model FHP [84]. Reguły odpowiedniego automatu przedstawia graficznie rysunek 14.2. Stan węzła jest wektorem Boole'a o 6 składowych.



Rysunek 14.1: Reguły zderzeń w modelu HPP.



Rysunek 14.2: Reguły zderzeń w modelu FHP.

Automat realizujący model FHP jest probabilistyczny: przyszłość niektórych stanów określa się przy użyciu generatora liczb quasi-losowych. Nawiązując do dyskusji na początku tego rozdziału można jednak stwierdzić, że wymiar zajętej części przestrzeni fazowej nie rośnie w zderzeniu. Najważniejszym skutkiem wprowadzenia sieci trójkątnej okazała się izotropowość tensorów drugiego rzędu, opisujących przepływ gazu. Przykładem jest tensor, wiążący strumień pędu z polem prędkości cząstek. Takie tensory są anizotropowe w sieci kwadratowej, ale już izotropowe w sieci trójkątnej, która ma sześciokrotną oś obrotu.

Ta izotropowość umożliwiła wyprowadzenie z automatów komórkowych znanych uprzednio równań różniczkowych, opisujących przepływ cieczy i gazu. (W fizyce teoretycznej określenie "gaz" bywa zarezerwowane do zbioru nieoddziałujących cząstek, tak więc uwzględniając zderzenia, należałoby mówić o cieczy.) Takie wyprowadzenie jest ważne, jeżeli stała sieci jest mała w porównaniu z typową długością fali gęstości cieczy, i jeżeli krok czasowy automatu jest bardzo krótki w porównaniu ze skalą czasową symulowanych zjawisk. Probabilistyczne równania różnicowe, opisujące automat, można wtedy przybliżać przez odpowiednie równania różniczkowe [85].

Konstruując wspomniane równania różnicowe, używamy czasem za-

łożenia, że stany sąsiednich węzłów sieci nie zależą od siebie. Takie założenie odpowiada znanemu z mechaniki statystycznej założeniu tzw. chaosu molekularnego, które sprowadza się do wyrażenia gęstości prawdopodobieństwa par cząstek przez iloczyn gęstości prawdopodobieństwa pojedynczych cząstek. Jak wiadomo, to założenie prowadzi do pojawienia się nieodwracalności w równaniu kinetycznym Boltzmanna, co pozostaje w sprzeczności z twierdzeniem Liouville'a, ale w zgodzie z II zasadą termodynamiki. Dyskusja tego paradoksu przekroczyłaby ramy tematu tego wykładu. Powiedzmy więc tylko, że równania różniczkowe dotyczące przepływów opisują procesy nieodwracalne, tak samo jak równanie kinetyczne Boltzmanna. W szczególności dotyczy to równań Naviera-Stokesa, które opisują gaz nieściśliwy. Dla zapewnienia nieściśliwości praktycznie wystarczy, aby liczba Macha (tj. stosunek prędkości cząstek do prędkości dźwięku w ośrodku) była odpowiednio mała.

W odróżnieniu od znanych równań różniczkowych, technika automatów komórkowych nie potrzebuje założenia o chaosie molekularnym. Automaty umożliwiają więc wgląd w procesy, które nigdy do tej pory nie były opisywane teoretycznie. W szczególności mamy nadzieję, że dowiemy się czegoś o największej zagadce współczesnej fizyki klasycznej - o turbulencji.

Do modelu gazu sieciowego wprowadzano szereg ulepszeń. Polegały one m.in. na wprowadzeniu cząstki spoczywającej i na dopuszczeniu zderzeń wielocząstkowych. W niektórych wersjach modelu rezygnuje się z lokalnego zachowania energii kinetycznej. Nie licząc fluktuacji, energia kinetyczna pozostaje jednak zachowana w średniej po wielu węzłach. Zasadniczym przeformułowaniem modelu, zwanym gazem sieciowym Boltzmanna, było dopuszczenie wielu cząstek, poruszających się jednocześnie wzdłuż danego wiązania. Stan węzła w punkcie x jest tu opisany przez funkcję rzeczywistą $f_i(x, t)$, t.j. przez średnią ilość cząstek poruszającą się wzdłuż kierunku i w czasie t . Po narzuceniu zasad zachowania masy i pędu oblicza się dla każdego węzła lokalny stan równowagi, a następnie określa zlinearyzowane równanie ruchu. Zgodnie z tym równaniem układ zbliża się w każdym kroku czasowym do swojego lokalnego stanu równowagi. Jednak procesy w sąsiednich węzłach modyfikują lokalne stany równowagi, co sprawia że ewolucja układu jako całości może odzwierciedlać złożone przepływy w skali makroskopowej. Przykłady zastosowań modeli gazu sieciowego i gazu sieciowego Boltzmanna to problem przejścia fazowego ciec-z-gaz, problem separacji faz

i problem przepływu przez ośrodek porowaty [85].

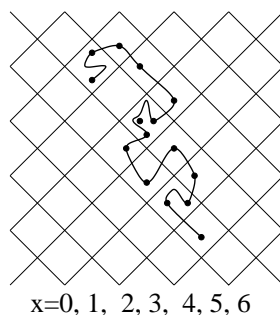
Na zakończenie tego paragrafu wróćmy na chwilę do całek ruchu. Jak wynika z powyższych rozważań, model gazu sieciowego nic nam nie powie o rzeczywistych całkach ruchu. Odwrotnie, okazuje się że reguły automatów zachowują pewne wielkości, które nic nie mają wspólnego z fizyką. Wiążą się one z dyskretnym charakterem zderzeń modelowych. Ich istnienie oznacza, że ewolucja opisana modelem gazu sieciowego nie jest ergodyczna.

14.3. Ruch DNA w żelu

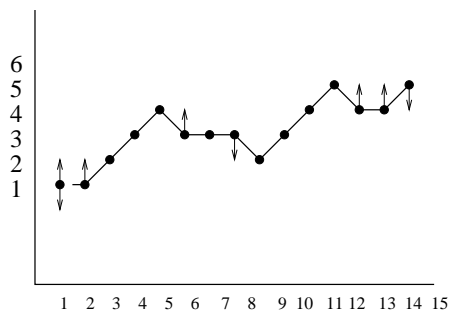
Przykładem ośrodka porowatego jest żel agarozowy - zastygła, nieregularna sieć wiązań polimerowych. Między wiązaniami znajdują się wypełnione cieczą wolne przestrzenie o średnicy od kilkudziesięciu do kilkuset nanometrów. Do takiego ośrodka wkrapla się molekuly DNA, które pod działaniem pola elektrycznego dryfują w żelu. Prędkość dryfu zależy od długości i kształtu molekuly, dlatego po kilkudziesięciu minutach kropla roztworu rozdziela się na mniejsze krople, każda złożona z molekuli o danej długości. Ta metoda badania DNA nosi nazwę elektroforezy [86].

Molekuła DNA w żelu jest giętkim łańcuchem, a jej ruch w żelu można porównać do pełzania (*reptation*). Ten charakter ruchu stał się wdzięcznym tematem wielu symulacji komputerowych, z których niektóre dadzą się sprowadzić do formalizmu automatu komórkowego [87]. W takim modelu żel jest przedstawiony jako periodyczna sieć komórek, a molekuła DNA - jako ciąg ogniw łańcucha, tzw. reptonów, połączonych giętkimi wiązaniami (rysunek 14.3). W najprostszej wersji modelu reguła automatu dopuszcza ruch reptonów tylko wzdłuż łańcucha, to znaczy w ramach komórek już zajętych, które tworzą rodzaj powyginanej rury. Ruch sprowadza się więc do przesuwania się zgęszczeń molekuly. W modelu dyskretnym za takie zgęszczenie uważa się sytuację, gdy w jednej komórce znajdują się dwa lub więcej niż dwa reptony.

Używany tu automat jest probabilistyczny. Jeżeli włączymy pole elektryczne, na przykład skierowane zgodnie ze zwrotem osi OX , to prawdopodobieństwo przejścia i -tego reptonu do komórki w prawo w górę lub w prawo w dół będzie równe $A \exp(\beta q E)$, gdzie E jest natężeniem pola elektrycznego, q jest ładunkiem reptonu a β - odwrotnością energii termicznej $k_B T$. Stałą normalizacji A należy obliczyć, biorąc pod uwagę wszystkie możliwe zdarzenia, które dla danego reptonu zależą od



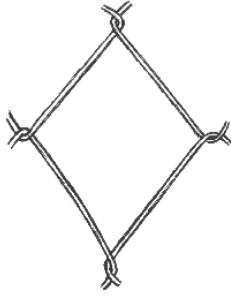
Rysunek 14.3: Molekuła DNA w żelu przedstawiona jako łańcuch reptonów w sieci periodycznej [87].



Rysunek 14.4: Ta sama konfiguracja molekuly. Oś OX z rysunku 14.3 jest tutaj osią OY , natomiast na osi OX są zaznaczone numery kolejnych reptonów. Możliwość ruchu danego reptonu w kierunku jednego z końców łańcucha jest zaznaczona strzałką w górę, a w kierunku drugiego końca - strzałką w dół.

konfiguracji wiązań łączących go z sąsiednimi reptonami. Jeżeli oba sąsiednie reptony ($i-1$ -wszy i $i+1$ -wszy) znajdują się w innych komórkach, to i -ty repton nie może zmienić swojej komórki i z pewnością zostanie tam, gdzie jest. W konfiguracji przedstawionej na rysunku 14.4 w tej sytuacji znajdują się reptony 3-5 oraz 9-12. Jeśli $i-1$ -wszy sąsiad i -tego reptonu znajduje się w tej samej komórce, co i -ty repton, to wiązanie między nimi jest luźne, i i -ty repton może przejść do komórki sąsiedniej, którą zajmuje repton $i+1$. To odpowiada sytuacji reptonów 2, 8 i 14. Z rysunku wynika, że powinno się tu wymienić również repton 7, który w zasadzie mógłby się przesunąć do dowolnej z sąsiednich komórek. Fakt, że model nie dopuszcza ruchu reptonu 7 w żadnym kierunku, jest dużym uproszczeniem motywowanym przyspieszeniem obliczeń. Dodajmy, że nieco więcej swobody mają końce molekuly, dla których definiuje się osobne reguły.

Omówiony model stosuje się zwykle do niezbyt krótkich molekuł i niezbyt silnych pól elektrycznych. Przy jego pomocy udało się odtworzyć (a więc "zrozumieć") niektóre fakty eksperymentalne. Na przykład prędkość molekuly w żelu jest odwrotnie proporcjonalna do jej długości. Okazało się też, że jeżeli reguły automatu nie są tak skrajnie uproszczone, jak opisano wyżej, to ta proporcjonalność się nieco psuje. Ale i do takiej teorii można znaleźć odpowiednie dane doświadczalne [88].



Rozdział 15

SIECI SPRZĘŻONYCH ODWZOROWAŃ

Technikę automatów komórkowych trzeba widzieć jako jedną z wielu technik badawczych. Ma ona swoje ograniczenia i jest naturalne, że chcielibyśmy je pokonywać. Jeżeli liczby naturalne, opisujące stan komórki, zastąpimy liczbami rzeczywistymi, to otrzymamy sieć sprzężonych odwzorowań (*coupled map lattice*) [89]. Inaczej mówiąc, jest to zbiór równań iteracyjnych

$$x_i(t+1) = F_i(\{x_j(t)\}), i, j = 1, \dots, N \quad (15.1)$$

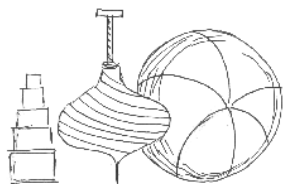
gdzie $x_i(t)$ jest liczbą rzeczywistą numer i , która w kroku czasowym t zmienia się zgodnie z receptą F_i . Argumentami funkcji F_i mogą być wszystkie zmienne x_j - sprzężenie między zmiennymi jest wtedy globalne. Jeżeli funkcja F_i zależy tylko od kilku zmiennych, to mówimy o sprzężeniu lokalnym. To określenie nie musi być ścisłe, bo odległość między zmiennymi x_j nie musi być zdefiniowana, a nawet gdyby była, to F_i może być funkcją zmiennych dowolnie oddalonych od x_i . Jednak w wielu zastosowaniach funkcja ta jest określona na otoczeniu x_i , tak jak to było w przypadku automatu komórkowego.

Układy nieliniowych równań iteracyjnych są obok układów nieliniowych równań różniczkowych narzędziem powszechnie używanym do badania chaosu [90],[91]. Sieci sprzężonych odwzorowań są też stosowane

FORMALIZM	PRZESTRZEŃ	CZAS	STAN
automaty komórkowe	dyskretna	dyskretny	dyskretny
sieci sprzężonych odwzorowań	dyskretna	dyskretny	ciągły
cząstkowe równania różniczkowe	ciągła	ciągły	ciągły

Tablica 15.1: Porównanie współczesnych technik obliczeniowych [89]

do badań dynamiki ośrodków nieliniowych [89]. Jednak zastosowań sieci sprzężonych odwzorowań można w literaturze znaleźć mniej, niż zastosowań automatów komórkowych. Metoda ta jest nowsza i mniej znana. Numerycznie jest trudniejsza, niż automaty, ponieważ zabiera więcej pamięci i ponieważ nie broni nas przed narastaniem błędów numerycznych. Należy się jednak spodziewać, że liczba jej zwolenników będzie rosła, ponieważ liczby rzeczywiste ciągle się przydają. Z drugiej strony z numerycznego punktu widzenia oczywista jest przewaga techniki sieci sprzężonych odwzorowań nad równaniami różniczkowymi, gdzie błędy numeryczne tworzą się w sposób ciągły. Fizykowi potrzebne jest jednak każdorazowe uzasadnienie jej użycia. To samo odnosi się do techniki automatów komórkowych. W naszym obrazie świata królują bowiem równania różniczkowe - od równania Newtona do równania Schrödingera.



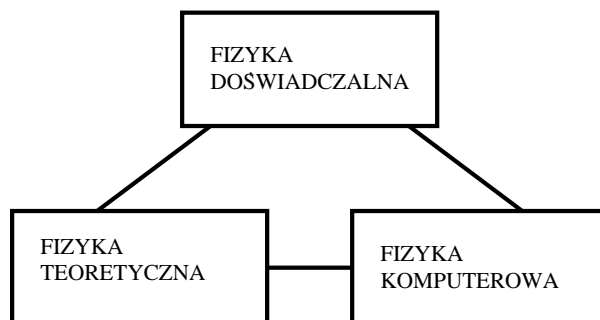
Rozdział 16

CZY TO ZABAWA ? ROLA AUTOMATÓW KOMÓRKOWYCH W FIZYCE

Symulacje prowadzone metodami fizyki komputerowej zyskują sobie równorzędne miejsce obok innych metod badawczych. I jak zawsze gdy coś dobrze idzie, pojawia się niebezpieczeństwo że będziemy to robić dla czystej przyjemności. Takie zjawisko pojawia się w fizyce teoretycznej w postaci rachunków bez zastosowania, i w fizyce doświadczalnej w postaci pomiarów dla samego pomiaru. Pojawia się w nauce w postaci odpowiadania na nieistniejące pytania. Wiedział to już Swift, gdy opisywał akademię wynalazców. To samo dotyczy fizyki komputerowej: "symulacja dla symulacji". Fizyka komputerowa (a w szczególności automaty komórkowe) może być przedmiotem zabawy. Bawić się można, ale nie nazywamy tego prowadzeniem badań.

Dotyczy to, powtórzmy, każdej gałęzi fizyki i nie tylko fizyki. Oceniając badania prowadzone metodami komputerowymi, trzeba stosować te same kryteria, które przykładamy do innych metod. Te kryteria trzeba stosować uczciwie, nie sugerując się pozorami: "dziecinne reguły automatu, trochę grafiki". Podobnie o wartości obliczeń nie decyduje ich niezrozumiałość, a o wartości eksperymentu - cena aparatury. Usprawiedliwieniem dla pracy badacza są pytania, jakie sobie zadaje. Na te pytania ma z całą powagą szukać odpowiedzi.

Fizyka komputerowa pojawiła się wraz z nowym narzędziem, nową metodą badawczą. Wraz z narzędziem pojawiły się nowe możliwości. Możemy zadawać pytania, które były kiedyś nie do pomyślenia. Jak zawsze w takich razach okazuje się, że grzęźliśmy w schematach. To



dobrze służy naszej wyobraźni, otwiera oczy. Fizyka komputerowa ma cechy wspólne z fizyką teoretyczną - jej wyniki powinny być powtarzalne. Ale ma też cechy wspólne z fizyką doświadczalną - jej wyniki mogą być nieprzewidywalne. Mówimy wtedy o nieredukowalności obliczeniowej: jedyną metodą otrzymania wyników jest symulacja krok po kroku.

Tu dochodzimy do ważnej dziedziny zastosowań automatów komórkowych. Istnieje wiele problemów, o których rozwiązaniu decyduje statystyka lokalnych, przestrzenno-czasowych konfiguracji zmiennych dyskretnych opisujących układ. Można proponować opis poprzez zmienne rzeczywiste i konstruować równania różniczkowe, ale okazuje się wtedy że zaniedbujemy lokalne korelacje, i to zaniedbanie zmienia wyniki. Najstarszym i klasycznym przykładem jest równanie kinetyczne Boltzmanna i założenie chaosu molekularnego [92]. To założenie, skądinąd zasłużone w historii fizyki, zaniedbuje korelacje między prędkościami zderzających się cząstek, co jak wiadomo prowadzi do fałszywych wyników. Założenie to może być konsekwentnie usunięte w symulacjach gazu sieciowego. Innym znanym przykładem jest teoria Landaua przejść fazowych [93], która daje średniopółowe - a więc niepoprawne - wartości wskaźników krytycznych. Teoria ta zaniedbuje wpływ korelacji spinowych. Symulacja metodą automatów komórkowych uwzględnia korelacje i daje jeśli nie poprawne (bo takie nie zawsze są znane), to w każdym razie inne wartości wskaźników krytycznych [94]. Przytoczmy też model samoorganizacji Baka-Sneppena, określony na sieci (rozdział 10). Jego realizacja poprzez równanie różniczkowe daje błędną wartość progu funkcji rozkładu. W tych i wielu innych przypadkach automaty komórkowe pozwalają poprawnie opisać statystykę lokalnych konfiguracji zmiennych, i to decyduje o zgodności wyników z doświadczeniem, natomiast wprowadzone przy tym uproszczenia opisu okazują się nieistotne. Trzeba też wspomnieć przydatność automatów komórkowych do badania chaosu metodą rozprzestrzeniania się uszkodzeń [95]. Tu eksponowaną rolę gra

zależność ewolucji układu od małych zmian stanu początkowego. Automaty komórkowe są formalizmem, w którym pojęcie małych, lokalnych zmian stanu układu jest łatwe do wprowadzenia. Jak pisze Schuster w podsumowaniu popularnej monografii [36] "...automaty komórkowe zdają się stawać ważnym narzędziem w poszukiwaniu odpowiedzi na wiele spośród postawionych wyżej pytań."

Cechą nauki XX wieku była nieufność wobec samej siebie. Psychologowie powiedzieli nam o podświadomości, matematycy o twierdzeniu Gödla, filozofowie nauki o paradygmatach. Fizycy cytują Hawkinga: zgodność z doświadczeniem nie jest dowodem na prawdziwość teorii [96]. Mamy zdrową tendencję do przyglądania się sobie i swoim narzędziom. Dla teoretyka takim przyglądaniem się jest dyskusja teoretycznych założeń. Co jest pomijane od początku? Czego ten model na pewno nie opisze? Do czego nie wolno go stosować? Co otrzymujemy z równań w przypadkach granicznych? Dla eksperymentatora jest to dyskusja błędu czy też niepewności pomiaru, pomiar wykonywany na znanych próbkach, kalibracja aparatury. Wierzimy, że tak będzie dalej. Symulacje komputerowe też potrzebują takiego zwierciadła. Tu dochodzimy do drugiego ważnego zastosowania automatów komórkowych. Dla wielu zagadnień są one przypadkiem granicznym, punktem odniesienia. Uprośćmy skrajnie model. Przyspieszymy obliczenia, a w wielu przypadkach umożliwimy otrzymanie rozsądnej statystyki. Zobaczymy, czy czynniki X, Y, Z wpływają na wyniki? jaki jest ten wpływ? Takie postępowanie służy planowaniu badań, testowaniu modeli, wnioskowi jakościowym, ogólnie pojętemu zdrowemu rozsądkowi. Takie postępowanie często jest jedyną możliwością dyskusji problemu, a czasem jedynym jego sformułowaniem. W ramach takiego postępowania pojawiają się prace wąsko wyspecjalizowane: badanie przejść fazowych na wymyślonych modelach, gaz sieciowy łamiący niektóre zasady zachowania, szesnastobitowa reprezentacja RNA lub symulacje opinii publicznej przy pomocy modelu Isinga. Ale specjalizacja jest dziś nieodłączną cechą nauki, nie tylko symulacji komputerowych. Prace te mają sens, jeśli służą odpowiedzi na nasze pytania.



Dodatek A

STABILNOŚĆ ROZWIĄZAŃ RÓWNAŃ RÓŻNICZKOWEGO

Rozpatrzmy równanie iteracyjne, tj. równanie typu $x_{n+1} = F(x_n)$. Przy danej wartości początkowej x_0 równanie to produkuje ciąg $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n, \dots$. Wskaźnik n można traktować jako czas dyskretny; wtedy kolejne wartości zmiennej x_n stanowią trajektorię. Mogą istnieć punkty x^* spełniające równość $x^* = F(x^*)$; są to tak zwane punkty stałe. Jeśli x^* jest wartością początkową, wszystkie kolejne punkty będą miały również wartość x^* .

Pytanie o stabilność punktu stałego można sformułować następująco: przypuśćmy, że kolejny wyraz x_n przyjmie wartość bliską x^* . Czy kolejne wartości $x_{n+1}, x_{n+2}, x_{n+3}$ będą coraz bliższe x^* , czy coraz dalsze? Czy, inaczej mówiąc, małe odchylenie od punktu stałego jest osłabiane, czy wzmacniane przez ewolucję czasową? Jeżeli jest wzmacniane, to punkt stały jest niestabilny.

Stabilność punktu stałego można rozstrzygnąć, badając pochodną $F'(x^*)$. Przedstawmy mianowicie n -te odchylenie od punktu stałego w postaci $\delta_n = x_n - x^*$. Rozwijając funkcję F w szereg Taylora i ograniczając rozwinięcie do wyrazu liniowego, otrzymujemy

$$x_{n+1} - x^* = F(x_n) - x^* \approx F(x^*) + (x_n - x^*)F'(x^*) - x^* = (x_n - x^*)F'(x^*),$$

a więc

$$\delta_{n+1} = \delta_n F'(x^*).$$

O tym, czy wartości bezwzględne δ_n rosną z n , czy maleją, decyduje więc wartość bezwzględna pochodnej z funkcji F . Jeżeli $|F'(x^*)| > 1$, to punkt stały x^* jest niestabilny. Zilustrujemy to rozumowanie prostym

przykładem równania logistycznego

$$x_{n+1} = rx_n(1 - x_n) \quad (\text{A.1})$$

gdzie $x_n \in < 0, 1 >$, $r \in < 0, 4 >$. Jeżeli wartość parametru r nie przekracza 1, to równanie (A.1) ma tylko jeden punkt stały $x^* = 0$. Wartość pochodnej funkcji F w tym punkcie $F' = r$, a więc dla $r < 1$ punkt stały $x^* = 0$ jest stabilny. Jeżeli $r > 1$, to mamy dwa punkty stałe: $x^* = 0$ i $x^* = 1 - 1/r$. Pierwszy staje się niestabilny. Stabilność drugiego zależy od tego, czy spełnione jest równanie

$$|F'(x^*)| = |2 - r| < 1 \quad (\text{A.2})$$

a więc punkt stały $x^* = 1 - 1/r$ traci stabilność, gdy $r > 3$.

Dla porównania dodajemy, że warunek stabilności równania różniczkowego $dx/dt = f(x)$ ma postać $f'(x^*) < 0$, gdzie x^* jest rozwiązaniem równania $f(x^*) = 0$.

Ogólnie biorąc, nie mamy ogólnej metodyki rozwiązywania równań nieliniowych, tak różniczkowych jak iteracyjnych. Wyżej opisane badanie punktu stałego opiera się na tzw. linearyzacji równania, tj. przybliżeniu funkcji F przez funkcję liniową, i nie mówi nic o ewentualnie istniejących innych punktach stałych.

Literatura

- [1] S.Wolfram, *Rev.Mod.Phys.* 55 (1983) 601.
- [2] G.Y.Vichniac, *Physica D* 10 (1984) 96.
- [3] R. Penrose, *Nowy umysł cesarza*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1995.
- [4] M.R. Garey and D.S. Johnson, *Computers and Intractability. A Guide to the Theory of NP-Completeness*, W.H. Freeman and Co., New York 1979.
- [5] L. Blum, in 1989 *Lectures in Complex Systems*, Ed. Erica Jen, Addison-Wesley 1990, p.1.
- [6] M.W. Bern and R.L. Graham, *Sci. Am.*, January 1989, str. 66.
- [7] S.Wolfram, *Phys.Rev.Letters* 55 (1985) 449.
- [8] S. Wolfram, *Physica D* 10 (1984) 1.
- [9] H.K. Janssen, *Z.Phys. B* 42 (1981) 151.
- [10] D. Stauffer, *J. Phys. A* 24 (1991) 909.
- [11] K. Culik II and S. Yu, *Complex Systems 2* (1988) 177.
- [12] S.S.Manna and D.Stauffer, *Physica A* 162 (1990) 176.
- [13] W.Li, N.H. Packard and C.Langton, *Physica D* 45 (1990) 77.
- [14] W.K. Wooters and C.G. Langton, *Physica D* 45 (1990) 95.
- [15] N.G. van Kampen, *Procesy stochastyczne w fizyce i chemii*, PWN, Warszawa 1990.
- [16] H.A. Gutowitz, J.D. Victor and B.W. Knight, *Physica D* 28 (1987) 18.
- [17] J.Kari, *Physica D* 45 (1990) 379.
- [18] S.Amoroso and Y.N.Patt, *J.Comp.Syst.Sci.* 6 (1972) 448.
- [19] D.Richardson, *J.Comp.Syst. Sci.* 6 (1972) 373.

- [20] T.Toffoli and N.H.Margolus, *Physica D* 45 (1990) 229.
- [21] E.Moore, *Proc. Symp. Appl. Math.* 14 (1962) 17.
- [22] E.R.Berlekamp, J.H.Conway and R.K.Guy, *Winning Ways for Your Mathematical Plays*, Vol.2, Academic Press, London 1982, str.817.
- [23] E.Jen, *Physica D* 45 (1990) 3.
- [24] F.James, *Rep.Prog.Phys.* 43 (1980) 1145.
- [25] F.Robert, *Discrete Iterations. A Metric Study* Springer-Verlag, Berlin 1986
- [26] B. Derrida and H. Flyvbjerg, *J. de Physique* 48 (1987) 971.
- [27] K. Kułakowski, *Physica A* 216 (1995) 120.
- [28] K. Kułakowski and M. Antoniuk, *Acta Phys.Pol.* 27 (1996) 643.
- [29] B. Harris, *Ann.Math.Stat.* 31 (1960) 1045.
- [30] S. Wiseman and E. Domany, *Phys.Rev. E* 52 (1995) 3469.
- [31] S. A. Kauffman, *The Origins of Order*, Oxford University Press, New York 1993.
- [32] S.A.Kauffman, *Scientific American* 265 (1991) 64.
- [33] P.Bak, C.Tang and K.Wiesenfeld, *Phys.Rev.Lett.* 59 (1987) 381.
- [34] P.Bak, C.Tang and K.Wiesenfeld, *Phys.Rev. A* 38 (1988) 364.
- [35] H.Haken, *Synergetics*, Springer, Berlin 1982.
- [36] H.G.Schuster, *Chaos deterministyczny. Wprowadzenie*, Wyd.Nauk.PWN, Warszawa 1993.
- [37] J.J.Binney, N.J.Dowrick, A.J.Fisher i M.E.J.Newman, *Zjawiska krytyczne. Wstęp do teorii renormalizacji*, Wyd.Nauk.PWN, Warszawa 1998.
- [38] H.Flyvbjerg, *Phys.Rev.Lett.* 76 (1996) 940.
- [39] D.Dhar, *Phys.Rev.Lett.* 64 (1990) 1613.
- [40] A.Mehta and G.C.Barker, *Rep.Prog.Phys.* 57 (1994) 383.
- [41] M.Massalska-Arodź, *Delta 2* (1995) 1.
- [42] A.Alippi, P.Diodati and G.Paparo, *Acoustic Lett.* 17 (1994) 193.
- [43] C.Bennett and M.S.Bourzutschky, *Nature* 350 (1991) 468.
- [44] J.Hemmingson, *Physica D* 80 (1995) 151.

- [45] J.M.Massalski, *Fizyka jądrowa, Skrypt uczelniany AGH nr.1274*, Kraków 1991, s.197.
- [46] M.Grodecki, *praca dyplomowa*, WFiTJ AGH, 1997.
- [47] K.Malarz, K.Kułakowski, M.Antoniuk, M.Grodecki and D.Stauffer, *Int.J.Mod.Phys.C* 9 (1998) 449.
- [48] R. Wit, *Wykłady o modelowaniu w fizyce medycznej*, skrypt Uniwersytetu Jagiellońskiego, Kraków 1994.
- [49] G. Nicolis and I. Prigogine, *Self-Organization in Nonequilibrium Systems*, Wiley-Interscience, New York 1977.
- [50] J. Górecki, *Mikroskopowe symulacje modelowych układów chemicznych, Konferencja Fizyki Komputerowej, Instytut Fizyki Jądrowej*, Kraków, 24-26 XI1997.
- [51] M.Mitchell, J.P.Crutchfield and P.Graber, *Physica D* 75 (1994) 361.
- [52] T.J.P.Penna, *J.Stat.Phys.* 78 (1995) 1629.
- [53] T.Sitkowski, *Praca dyplomowa*, WFiTJ AGH, Kraków 1997.
- [54] P.Bak and K.Sneppen, *Phys.Rev.Lett.* 71 (1993) 4083.
- [55] H.Flyvbjerg, K.Sneppen and P.Bak, *Phys.Rev.Lett.* 71 (1993) 4087.
- [56] M.Ridley, *Czerwona Królowa*, Rebis Poznań 1999.
- [57] W.Weidlich, *Phys. Rep.* 204 (1991) 1.
- [58] K.Kacperski and J.Hołyst, *Physica A* 269 (1999) 511.
- [59] B.Derrida, in *Fundamental Problems in Statistical Mechanics VII*, ed. H. Van Beijeren, Elsevier 1990, p.273.
- [60] L.S.Schulman and P.E.Seiden, *J.Stat.Phys.* 19 (1978) 293.
- [61] R.P.Feynman, *Wykłady z mechaniki statystycznej*, PWN, Warszawa 1980.
- [62] L.Onsager, *Phys.Rev.* 65 (1944) 117.
- [63] A.A.Junior and F.D.Nobre, *Physica A* 243 (1997) 58.
- [64] M.Creutz, *Phys.Rev.Lett.* 69 (1992) 1002.
- [65] C.Kalle and V.Winkelmann, *J.Stat.Phys.* 28 (1982) 639.
- [66] A.Coniglio, L.de Arcangelis, H.J.Heerrmann and N.Jan, *Europhys.Lett.* 8 (1989) 315.

- [67] W.M.Lang and D.Stauffer, *J.Phys.A* 20 (1987) 5413.
- [68] D.Stauffer, *Irreversible statistical mechanics from reversible motion: Q2R automata, Conference on Computational Physics*, Atlanta, 22-26 March 1999.
- [69] E.Domany and W.Kinzel, *Phys.Rev.Lett.* 53 (1984) 311.
- [70] J.Hertz, A.Krogh i R.G.Palmer, *Wstęp do teorii obliczeń neuro-nowych*, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, Warszawa 1993.
- [71] M.Antoniuk and K.Kułakowski, *Physica A* 232 (1996) 162.
- [72] M.Antoniuk and K.Kułakowski, *Physica A* 242 (1997) 219.
- [73] R.Hauser, E.Bauer, E.Gratz, Th.Haufler, G.Hilscher and G.Wiesinger, *Phys.Rev.B* 50 (1994) 13493.
- [74] K.Kułakowski, M.Antoniuk, J.Deskur and P.Gawroński, *J.Magn.Magn.Mater.* 196-197 (1999) 824.
- [75] M.Antoniuk, *Badanie metastabilnych struktur magnetycznych w modelu Isinga metodą automatów komórkowych*, praca doktorska, WFiTJ AGH, Kraków 1998.
- [76] D.Makowiec *Phys.Rev.E* 60 (1999) 3787
- [77] J.Feder, *Fractals*, Plenum Press, New York 1988.
- [78] M.N.Barber, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol.8, eds. C.Domb and J.L.Lebowitz, Academic Press, London 1983, p.145.
- [79] *Słownik naukowo-techniczny angielsko-polski*, red. S.Czerni i M.Skrzyńska, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, Warszawa 1986.
- [80] P.Meakin, *Physica D* 86 (1995) 104.
- [81] J.Ford, *Physics Reports* 213 (1992) 271.
- [82] *Encyklopedia fizyki*, PWN, Warszawa 1973.
- [83] J.Hardy, Y.Pomeau and O.de Pazzis, *J.Math.Phys.* 14 (1973) 1746.
- [84] U.Frisch, B.Hasslacher and Y.Pomeau, *Phys.Rev.Lett.* 56 (1986) 1505.
- [85] D.H.Rothman and S.Zaleski, *Rev.Mod.Phys.* 66 (1994) 1417.
- [86] B.Alberts, D.Bray, A.Johnson, J.Lewis, M.Raff, K.Roberts i P.Walter, *Podstawy biologii komórki*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1999.

- [87] G.T.Barkema and M.E.J.Newman, *Physica A* 244 (1997) 25.
- [88] J.Rousseau, G.Drouin and G.W.Slater, *Phys.Rev.Letters* 79 (1997) 1945.
- [89] K.Kaneko, *Theory and applications of coupled map lattices*, J.Wiley & Sons, Chichester 1993.
- [90] G.L.Baker i J.P.Gollub, *Wstęp do dynamiki układów chaotycznych*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1998.
- [91] E.Ott, *Chaos w układach dynamicznych*, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, Warszawa 1997.
- [92] K.Huang, *Fizyka statystyczna*, PWN, Warszawa 1978.
- [93] L.Landau i E.Lifszyc, *Fizyka statystyczna*, PWN, Warszawa 1959.
- [94] W.Selke, L.N.Shchur and A.L.Talapov, in Annual Reviews of Computational Physics I, ed. by D.Stauffer, World Scientific, Singapore 1994, p.17.
- [95] N.Jan and L.de Arcangelis, in Annual Reviews of Computational Physics I, ed. by D.Stauffer, World Scientific, Singapore 1994, p.1.
- [96] S.W.Hawking, *Krótką historia czasu*, Alfa, Warszawa 1990.

Indeks

- agregacja, 84
- aktywność automatu, 19
- algorytm Metropolis, 68
- automat elementarny, 13
- automat głosujący, 14
- automat legalny, 13
- automaty przegubowe, 23

- basen atrakcji, 42
- baza, 31
- Boolowska odległość wektorowa, 39

- czas włączeniowy, 17, 44

- demon Creutza, 69
- dynamika Glaubera, 69

- funkcja korelacji, 85

- graf połączeń, 38
- granica termodynamiczna, 71

- kąpiel cieplna, 69
- katastrofa złożoności, 48
- komiwojazer, 8

- liczby losowe, 68
- linearyzacja automatu, 35

- macierz zależności, 38
- maszyna Turinga, 8
- miara niezmiennicza, 22

- nieprzewidywalność obliczeniowa, 10

- oddziaływania trójspinowe, 75
- odległość Hamminga, 18
- otoczenie, 11

- paradoks pastwiska, 60
- Pochodna dyskretna, 39
- probabilistyczna talia kart, 86
- problemy klasy NP, 9

- reguła automatu, 11
- reguła Gacsa-Kurdymowa-Lewina, 58

- sąsiedztwo, 39
- samoorganizacja, 49
- skamienielina, 52
- stan minimalnie stabilny, 50
- stan próżni, 13
- szum $1/f$, 50

- twierdzenie Gödla, 8

- wymiar fraktalny klastra, 82

- XOR, 13, 31

- złożoność problemu, 10
- zasada Czerwonej Królowej, 62