Algorithmen in Zellularautomaten

12. Diskretisierung kontinuierlicher Systeme

Thomas Worsch

Fakultät für Informatik
Karlsruher Institut für Technologie

Sommersemester 2017

Ziele

- Diffusion
- weitere Beispiele: Wellen, BZ-Reaktion, Reaktions-Diffusions-Systeme
- Einsparung von Zuständen bei stochastischen ZA

Überblick

- Taylorentwicklung
- Von Taylor zu ZA
- ZA für Diffusion
- ZA für Wellenausbreitung
- Rundungsfehler und probabilistische ZA

Satz von Taylor

Es sei f eine reelle Funktion einer Veränderlichen, die auf einem Intervall $I_\alpha =]x_0 - \alpha; x_0 + \alpha[$ mindestens $(n+1)$–mal stetig differenzierbar ist. Dann gibt es für jedes $x \in I_\alpha$ ein $\theta \in [0;1]$, so dass

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x - x_0)^k + R_n(x, x_0, \theta)$$

mit

$$R_n(x, x_0, \theta) = \frac{f^{(n+1)}(x_0 + \theta(x - x_0))}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1}.$$

Taylorentwicklung (eine Veränderliche)

Ist f auf einem Intervall $I_\alpha =]x_0 - \alpha; x_0 + \alpha[$ unendlich oft stetig differenzierbar, und gilt für alle $x \in I_\alpha$ und alle $\theta \in [0;1]$

$$\lim_{n\to\infty} R_n(x, x_0, \theta) = 0,$$

dann gilt für alle $x = x_0 + \Delta x \in I_\alpha$:

$$\begin{aligned} f(x_0 + \Delta x) &= f(x_0) + \Delta x f'(x_0) + \frac{(\Delta x)^2}{2} f''(x_0) + \cdots \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\Delta x)^k}{k!} f^{(k)}(x_0) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\left(\Delta x \frac{d}{dx} \right)^k f \right)(x_0) . \end{aligned}$$

Taylorentwicklung (zwei Veränderliche)

Ist $f(x,y)$ auf $I_\alpha = \left\{(x,y) \mid (x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 < \alpha\right\}$ unendlich oft stetig differenzierbar, und ist $\lim_{n\to\infty} R_n(\ldots,\theta) = 0$, dann gilt für alle $(\Delta x, \Delta y)$ mit $(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 < \alpha$:

$$\begin{aligned} f(x_0+\Delta x, y_0+\Delta y) &= \sum_{r,s\geq 0} \frac{(\Delta x)^r (\Delta y)^s}{r!s!} \frac{\partial^{r+s} f}{\partial x^r \partial y^s}(x_0,y_0) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\left(\Delta x \frac{\partial}{\partial x} + \Delta y \frac{\partial}{\partial y} \right)^k f \right)(x_0,y_0) \,. \end{aligned}$$

Nablaoperator

$$\nabla := \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix}$$

Nützliche Skalarprodukte:

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \nabla \cdot \nabla = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \\ \Delta \mathbf{x} \cdot \nabla &= \begin{pmatrix} \Delta x & \Delta y \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} = \Delta x \frac{\partial}{\partial x} + \Delta y \frac{\partial}{\partial y} \end{aligned}$$

Bemerkung

Mit dem ∇ lässt sich die Taylorentwicklung schreiben als:

$$f(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left((\Delta\mathbf{x} \cdot \nabla)^k f \right) (\mathbf{x})$$

Abkürzungen

Es seien Δt, Δx und Δy festgelegt.

$$
\begin{aligned}
(Tf)(t,x,y) &:= f(t+\Delta t, x, y) & (T^{-}f)(t,x,y) &:= f(t-\Delta t, x, y)\\
(Xf)(t,x,y) &:= f(t, x+\Delta x, y) & (X^{-}f)(t,x,y) &:= f(t, x-\Delta x, y)\\
(Yf)(t,x,y) &:= f(t, x, y+\Delta y) & (Y^{-}f)(t,x,y) &:= f(t, x, y-\Delta y)\\
(If)(t,x,y) &:= f(t, x, y)
\end{aligned}
$$

Überblick

- Taylorentwicklung
- Von Taylor zu ZA
- ZA für Diffusion
- ZA für Wellenausbreitung
- Rundungsfehler und probabilistische ZA

Bezug zu Zellularautomaten

- **Diskretisierung:**
  Bringe Werte $f(t, x, y)$ mit den Zuständen von Zellen in Verbindung:
  - Fixiere Werte t_0, x_0, y_0, Δt, Δx und Δy und definiere:

$$\begin{array}{rcl} g : \mathbb{N}_0 \times \mathbb{Z} \times \mathbb{Z} & \to & \mathbb{R} \\ (t, i, j) & \mapsto & f(t_0 + t\Delta t, x_0 + i\Delta x, y_0 + j\Delta y) \end{array}$$

  - Speichere Näherung von $g(t, i, j)$ in Zelle (i, j).

Bezug zu Zellularautomaten

- **Diskretisierung:**
  Bringe Werte $f(t, x, y)$ mit den Zuständen von Zellen in Verbindung:
  - Fixiere Werte t_0, x_0, y_0, Δt, Δx und Δy und definiere:

$$\begin{aligned} g : \mathbb{N}_0 \times \mathbb{Z} \times \mathbb{Z} &\to \mathbb{R} \\ (t, i, j) &\mapsto f(t_0 + t\Delta t, x_0 + i\Delta x, y_0 + j\Delta y) \end{aligned}$$

  - Speichere Näherung von $g(t, i, j)$ in Zelle (i, j).
- **Aufgabe:**
  Finde Überführungsfunktion, so dass nach einmaliger Anwendung in Zelle (i, j) Wert $g(t + 1, i, j)$ gespeichert.

Bezug zu Zellularautomaten

- **Diskretisierung:**
  Bringe Werte $f(t, x, y)$ mit den Zuständen von Zellen in Verbindung:
  - Fixiere Werte t_0, x_0, y_0, Δt, Δx und Δy und definiere:

$$\begin{aligned} g : \mathbb{N}_0 \times \mathbb{Z} \times \mathbb{Z} &\rightarrow \mathbb{R} \\ (t, i, j) &\mapsto f(t_0 + t\Delta t, x_0 + i\Delta x, y_0 + j\Delta y) \end{aligned}$$

  - Speichere Näherung von $g(t, i, j)$ in Zelle (i, j).
- **Aufgabe:**
  Finde Überführungsfunktion, so dass nach einmaliger Anwendung in Zelle (i, j) Wert $g(t + 1, i, j)$ gespeichert.
- **Probleme:**
  - Warum soll das überhaupt gehen?
  - Fehler durch Näherungen

Rechnung

Für $q \in \{t, x, y\}$, $\Delta q \in \{\Delta t, \Delta x, \Delta y\}$ und $Q \in \{T, X, Y\}$ liefert die Taylorentwicklung:

$$
\begin{aligned}
Qf &= f + \Delta q \frac{\partial f}{\partial q} + \frac{(\Delta q)^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial q^2} + \frac{(\Delta q)^3}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial q^3} + \cdots \\
Q^- f &= f - \Delta q \frac{\partial f}{\partial q} + \frac{(\Delta q)^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial q^2} - \frac{(\Delta q)^3}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial q^3} \pm \cdots
\end{aligned}
$$

Näherung für erste Ableitung (1)

Also:

$$Qf = f + \Delta q \frac{\partial f}{\partial q} + \frac{(\Delta q)^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial q^2} + \frac{(\Delta q)^3}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial q^3} + O((\Delta q)^4)$$

$$Qf \approx f + \Delta q \frac{\partial f}{\partial q}$$

$$\frac{\partial f}{\partial q} \approx \frac{Q - I}{\Delta q} f \quad \big(\text{Fehler: } O(\Delta q)\big)$$

Näherung für erste Ableitung (2)

Oder:

$$
\begin{aligned}
Qf &= f + \Delta q \frac{\partial f}{\partial q} + \frac{(\Delta q)^2}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial q^2} + \frac{(\Delta q)^3}{3!}\frac{\partial^3 f}{\partial q^3} + O((\Delta q)^4) \\
Q^- f &= f - \Delta q \frac{\partial f}{\partial q} + \frac{(\Delta q)^2}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial q^2} - \frac{(\Delta q)^3}{3!}\frac{\partial^3 f}{\partial q^3} + O((\Delta q)^4) \\
Qf - Q^- f &= 2\Delta q \frac{\partial f}{\partial q} + O((\Delta q)^3) \\
\frac{\partial f}{\partial q} &\approx \frac{Q - Q^-}{2\Delta q} f \quad \left(\text{Fehler: } O((\Delta q)^2)\right)
\end{aligned}
$$

Näherung für zweite Ableitung

Analog:

$$
\begin{aligned}
Qf + Q^{-}f &= 2f + (\Delta q)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial q^2} + O((\Delta q)^4) \\
\frac{\partial^2 f}{\partial q^2} &\approx \frac{Q - 2I + Q^{-}}{(\Delta q)^2} f \qquad \left(\text{Fehler: } O((\Delta q)^2)\right) \\
&\approx \frac{\frac{Q - I}{\Delta q} - \frac{I - Q^{-}}{\Delta q}}{\Delta q} f
\end{aligned}
$$

Überblick

- Taylorentwicklung
- Von Taylor zu ZA
- ZA für Diffusion
- ZA für Wellenausbreitung
- Rundungsfehler und probabilistische ZA

Beispiel (Diffusion)

Beispiel (Diffusion)

- Es sei f eine Funktion mit $\dot{f} = D\nabla^2 f$, also

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}\right)$$

- Einsetzen der Näherungen für die Ableitungen ergibt:

$$\frac{T - I}{\Delta t} f \approx D\,\frac{X - 2I + X^-}{(\Delta x)^2} f + D\,\frac{Y - 2I + Y^-}{(\Delta y)^2} f$$

- Auflösen nach Tf …

Auflösen nach Tf liefert die Näherung

$$
\begin{aligned}
& f(t+\Delta t, x, y) \\
& \approx f(t, x, y) \\
& +D\Delta t \, \frac{(f(t, x+\Delta x, y) - f(t, x, y)) - (f(t, x, y) - f(t, x-\Delta x, y))}{(\Delta x)^2} \\
& +D\Delta t \, \frac{(f(t, x, y+\Delta y) - f(t, x, y)) - (f(t, x, y) - f(t, x, y-\Delta y))}{(\Delta y)^2}
\end{aligned}
$$

Weniger fehlerträchtig:

$$\frac{T - T^-}{2\Delta t} f \approx D \frac{X - 2I + X^-}{(\Delta x)^2} f + D \frac{Y - 2I + Y^-}{(\Delta y)^2} f$$

also:

$f(t + \Delta t, x, y)$

$\approx f(t - \Delta t, x, y)$

$+2D\Delta t \dfrac{(f(t, x + \Delta x, y) - f(t, x, y)) - (f(t, x, y) - f(t, x - \Delta x, y))}{(\Delta x)^2}$

$+2D\Delta t \dfrac{(f(t, x, y + \Delta y) - f(t, x, y)) - (f(t, x, y) - f(t, x, y - \Delta y))}{(\Delta y)^2}$

Diffusion durch Mittelwertbildung

Es sei $N = M_r^{(2)}$, insbesondere also $\mathbf{n} \in N \implies -\mathbf{n} \in N$.
Es sei $\Delta x = \Delta y$.
Betrachte $f(\mathbf{x})$ und

$$\bar{f}(\mathbf{x}) := \frac{1}{|N|} \sum_{\mathbf{n} \in N} f(\mathbf{x} + \Delta x \mathbf{n}).$$

Taylorentwicklung für die $f(\mathbf{x} + \Delta x \mathbf{n})$ liefert

$$\begin{aligned} \bar{f}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{|N|} \sum_{\mathbf{n} \in N} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left((\Delta x \mathbf{n} \cdot \nabla)^k f \right)(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{|N|} \frac{1}{k!} \sum_{\mathbf{n} \in N} \left((\Delta x \mathbf{n} \cdot \nabla)^k f \right)(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

Terme für ungerades k fallen weg.

Wegen der Symmetrie von N erhält man näherungsweise

$$\begin{aligned} \bar{f}(\mathbf{x}) &\approx f(\mathbf{x}) + \frac{1}{2|N|} \sum_{\mathbf{n} \in N} \left((\Delta x \mathbf{n} \cdot \nabla)^2 f \right)(\mathbf{x}) \\ &= f(\mathbf{x}) + \frac{(\Delta x)^2}{2|N|} \sum_{\mathbf{n} \in N} \left((\mathbf{n} \cdot \nabla)^2 f \right)(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

Nach einiger Rechnung ergibt sich wegen $N = M_r^{(2)}$:

$$\sum_{\mathbf{n} \in N} (\mathbf{n} \cdot \nabla)^2 = \frac{(4r+2)r(r+1)(2r+1)}{6} \nabla^2.$$

Somit:

$$
\begin{aligned}
\bar{f}(\mathbf{x}) &\approx f(\mathbf{x}) + \frac{(\Delta x)^2}{2(2r+1)^2} \frac{2(2r+1)^2 r(r+1)}{6} \left(\nabla^2 f\right)(\mathbf{x}) \\
&= f(\mathbf{x}) + (\Delta x)^2 \frac{r(r+1)}{6} (\nabla^2 f)(\mathbf{x})
\end{aligned}
$$

beziehungsweise

$$
(\nabla^2 f)(\mathbf{x}) \approx \frac{6}{(\Delta x)^2 r(r+1)} (\bar{f}(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}))
$$

Folglich:

$$\begin{aligned} Tf &\approx f + \Delta t \frac{\partial f}{\partial t} = f + \Delta t D \nabla^2 f \\ &\approx \left(1 - \frac{6D\Delta t}{(\Delta x)^2 r(r+1)}\right) f + \frac{6D\Delta t}{(\Delta x)^2 r(r+1)} \bar{f} \end{aligned}$$

Für $\frac{6D\Delta t}{(\Delta x)^2 r(r+1)} = 1$ ergibt sich $Tf \approx \bar{f}$.

Mittelwertbildung approximiert Diffusion mit $D = \frac{(\Delta x)^2}{\Delta t} \frac{r(r+1)}{6}$.

Algorithmus (effiziente Berechnung von Mittelwerten)

f beliebig; $\qquad g = |N|\bar{f}$

Algorithmus (effiziente Berechnung von Mittelwerten)

f beliebig; $\quad g = |N|\bar{f}$

Im Eindimensionalen:

$$\begin{aligned}
g(x) - g(x-1) &= \sum_{i=-r}^{i=r} f(x+i) - \sum_{i=-r}^{i=r} f(x-1+i) \\
&= \sum_{i=-r}^{i=r} f(x+i) - \sum_{i=-r-1}^{i=r-1} f(x+i) \\
&= f(x+r) - f(x-r-1)
\end{aligned}$$

Also:

$$g(x) = g(x-1) + f(x+r) - f(x-r-1)$$

Bei sequenzieller Berechnung „im Mittel“ nur 2 Additionen statt $2r$

Effiziente Berechnung von Mittelwerten 2

Im Zweidimensionalen:

$$
\begin{aligned}
h(x,y) &= \sum_{j=-r}^{r} f(x, y+j) \\
g(x,y) &= \sum_{i=-r}^{r} h(x+i, y)
\end{aligned}
$$

Dann ist $g = |N|\bar{f}$.
„Im Durchschnitt" nur 4 Additionen statt $(2r+1)^2 - 1$.

Überblick

- Taylorentwicklung
- Von Taylor zu ZA
- ZA für Diffusion
- ZA für Wellenausbreitung
- Rundungsfehler und probabilistische ZA

Beispiel (Wellenausbreitung)

Es sei f eine Funktion mit $\ddot{f} = c^2 \nabla^2 f$, also

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = c^2 \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right)$$

Wie kommt man von $\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}$ zu einem Näherungswert für Tf?

Beispiel (Wellenausbreitung 2)

Mögliche Approximierungen:

$$Tf \approx 2f - T^{-}f + (\Delta t)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial t^2}$$

Oder mit $g = \frac{\partial f}{\partial t}$:

$$\begin{aligned} Tf &\approx f + \Delta t \frac{\partial f}{\partial t} \approx f + \Delta t g \\ Tg &\approx g + \Delta t \frac{\partial g}{\partial t} = g + \Delta t \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \end{aligned}$$

Oder:

$$Tg \approx g + \Delta t \frac{\partial g}{\partial t} = g + \Delta t \frac{\partial^2 f}{\partial t^2}$$

Beispiel (Belousov-Zhabotinski-Reaktion)

chemische Uhr, räumliche Strukturen (z.B. Spiralen)
„Oregonator“-Beschreibung:

$$\begin{aligned}
\frac{du}{dt} &= k_1 av - k_2 uv + k_3 au - k_4 u^2 \\
\frac{dv}{dt} &= -k_1 av - k_2 uv + f k_5 w \\
\frac{dw}{dt} &= 2k_3 au - k_5 w
\end{aligned}$$

siehe auch
`http://digbib.ubka.uni-karlsruhe.de/diva/2003-134/`
(ab Minute 18)

Beispiel (Reaktions-Diffusions-Systeme)

Allgemeines Schema:

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial f_1}{\partial t} &= F_1(f_1, f_2, \ldots, f_k) + D_1 \nabla^2 f_1 \\
\frac{\partial f_2}{\partial t} &= F_2(f_1, f_2, \ldots, f_k) + D_2 \nabla^2 f_2 \\
&\vdots \\
\frac{\partial f_k}{\partial t} &= F_k(f_1, f_2, \ldots, f_k) + D_k \nabla^2 f_k
\end{aligned}
$$

Beispiel (RDS von Turing)

$$
\begin{aligned}
F_1(f_1, f_2) &= f_1 f_2 - f_1 - 12 \\
F_2(f_1, f_2) &= -f_1 f_2 + 16
\end{aligned}
$$

Überblick

- Taylorentwicklung
- Von Taylor zu ZA
- ZA für Diffusion
- ZA für Wellenausbreitung
- Rundungsfehler und probabilistische ZA

Rundungsfehler

Durchschnittsbildung in $H_1^{(1)}$-Nachbarschaft mit Abrunden:

	0	0	0	0	9	0	0	0	0	
	0	0	0	3	3	3	0	0	0	
	0	0	1	2	3	2	1	0	0	
	0	0	1	2	2	2	1	0	0	
	0	0	1	1	2	1	1	0	0	
	0	0	0	1	1	1	0	0	0	
	0	0	0	0	1	0	0	0	0	
	0	0	0	0	0	0	0	0	0	

Rundungsfehler 2

„kaufmännisches Runden“ hilft nicht:

	0	0	0	0	9	0	0	0	0	
	0	0	0	3	3	3	0	0	0	
	0	0	1	2	3	2	1	0	0	
	0	0	1	2	2	2	1	0	0	
	0	0	1	2	2	2	1	0	0	

Rundungsfehler 2

„kaufmännisches Runden“ hilft nicht:

	0	0	0	0	9	0	0	0	0	
	0	0	0	3	3	3	0	0	0	
	0	0	1	2	3	2	1	0	0	
	0	0	1	2	2	2	1	0	0	
	0	0	1	2	2	2	1	0	0	

Ausweg

Manchmal hilft geschicktes *zufälliges* Runden (Weimar und Boon, 1994)

Probabilistisches Runden

Es sei $k \in \mathbb{N}$ und $\varepsilon \in [0; 1[$.

Einfache Variante des probabilistischen „Rundens“ von $k + \varepsilon$:

- mit Wahrscheinlichkeit ε runde auf $k + 1$
- mit Wahrscheinlichkeit $1 - \varepsilon$ runde auf k

Es ist $\varepsilon(k + 1) + (1 - \varepsilon)k = k + \varepsilon$.

Aufwendige Variante:

- Wähle Zahlen k_i und Wahrscheinlichkeiten $p_i(\varepsilon)$, so dass
- $\sum_i p_i(\varepsilon) = 1$ ist und $\sum_i k_i p_i(\varepsilon) = k + \varepsilon$.
- „Runde“ mit Wahrscheinlichkeit $p_i(\varepsilon)$ auf k_i.

Definition (probabilistischer/stochastischer ZA)

- „lokale Überführungsfunktion“ von der Form

  $$\delta : Q^N \to [0;1]^Q$$

  $\delta(\ell)(q)$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass eine Zelle mit lokaler Konfiguration ℓ in Zustand q übergeht.
- Für alle $\ell \in Q^N$ muss gelten:

  $$\sum_{q \in Q} \delta(\ell)(q) = 1$$

- Verschiedene Zellen mit gleicher lokaler Konfiguration können in einem Schritt in verschiedene Nachfolgezustände übergehen.

Zusammenfassung

- Geeignete Diskretisierung partieller Differentialgleichungen liefert manchmal Zellularautomaten, die gute Näherungen sind.
- Manchmal reichen abgebrochenen Taylorentwicklungen.
- Rundungsfehler kann man manchmal durch probabilistisches Runden (in entsprechenden Zellularautomaten) verkleinern.