元胞自动机和复杂性研究

赵 松 年

（中国科学院大气物理研究所大气边界层物理和大气化学国家重点实验室，北京 100029）

元胞自动机是建立复杂系统的离散模型，深入了解其动力学相互作用与时空演化过程的实验数学方法．它开创了基础科学研究与复杂性探索的新途径，是一类获得迅速发展的新的并行计算机，又是计算机、信息和智能应用高科技的热点之一．

为了研究由大量个体相互作用所形成的复杂现象，如自组织现象、耗散结构、合作效应等；许多计算机专家和物理学家从 80 年代初开始对元胞自动机（cellular automata，CA）进行了广泛深入的研究．由于元胞自动机的基元（元胞或网格点）具有空间离散化、时间离散化、状态离散化、相互作用的局域化和动力学演化的同步性等特点，因而与传统的计算机数值计算和模拟方法比较，元胞自动机能更好地模拟晶格生长、雪花形成、分形晶体生长、化学过程和流体及湍流的形成等难以解析表达的复杂现象，甚至能逼真地反映大量个体相互作用的细致结构模式（pattern），因而成为与计算神经网络同时迅速发展的并行计算模型．本文简要介绍了元胞自动机的基本原理，一维与二维模型及其在流体湍流研究中的应用．由于许多复杂的物理学问题可望用元胞自动机进行有效的模拟研究，物理学领域的科技工作者应当尽量了解和掌握这一新的计算机发展方向并在自己的研究工作中加以应用．

一、计算科学的新领域

大家知道，流体动力学是研究流体的状态随时间的变化规律的一门科学．长期以来，它向计算机提出许多巨大的计算课题，也是世界各先进国家工程技术领域每年投入大量人力、物力和资金从事计算的课题．流体力学、空气动力学、电磁流体力学、大气和海洋动力学中的实验与计算结果的精度直接与宇航器的结构设计，气候预测，水利工程，核动力系统，军事科学技术甚至国民经济的许多应用部门密切相关，每一类计算都是在特定的约束条件下力求得出某些具体设计要求的近似结果．真正模拟三维流体真实运动过程的计算是一个延续了一百多年的著名难题．如果说从雷诺（O. Reynolds）1883 年进行有关流体从层流向湍流发展的实验算起，已经整整一个世纪过去了，也许它将成为跨越三个世纪的难题向人类的智慧挑战并永远载入科学史册．

众所周知的 Navier-Stokes 方程就是牛顿第二定律在连续介质流体中的应用，它的强非线性造成解析的巨大困难，方程中的粘性作用只有在很小的尺度范围才能显示出来．当雷诺数 $Re \to \infty$ 时，这个尺度将趋于零，因而要求计算网格非常细密，使得现有的计算机无法胜任这样的计算，而且边界条件中的微小误差可以产生很大的偏离，出现解的不稳定性[1]．

“山穷水尽疑无路，柳暗花明又一村”．用离散的元胞自动机模型直接模拟粒子的运动和碰撞，却意外地得到某些湍流的维妙维肖的图象；用 4 × 4 小阵列 CA 作二维流体动力学的计算，获得了比超级计算机 CRAY-XMP 快 1000 倍的效果．如果采用 1024 × 1024 的 CPU 阵列组成 CA，再来作二维与三维流体动力学计算，其速度可比 CRAY-XMP 快 35 万倍以上．作一个比喻，喷气式客机的航速比人步行的速度仅快 500 倍，那么 CA 超过 CRAY 竟达 35 万倍，这是何等惊人的速度！

究其原因，不难看出，传统的计算机虽然可

以作流体计算，但串行结构造成数据检索调用的瓶颈现象，使得世界上一流的超级计算机 CRAY-XMP 也发挥不出应有的效果；CA 是由大量相同元胞（或格点）组成的并行运算结构，而流体正如大家所熟知的也是由大量质点构成的连续介质，如此相似的结构使得 CA 以"多"取胜，在向超级计算机的挑战中，取得这样"辉煌"的胜利也就是意料之中的事了[2].

二、"生命"自我复制程序

生物个体的发育过程本质上是单细胞的自我复制过程. 50 年代，计算机创始人、著名数学家冯·诺伊曼（von Neumann）曾希望通过特定的程序在计算机上实现类似于生物体发育中细胞的自我复制. 为了避免当时电子管计算机技术的限制，他提出了一个简单的模式，把一个长方形平面分成若干个网格，每一个格点表示一个细胞或系统的基元，它们的状态赋值为 0 或 1，在网格中用空格或实格表示，在事先设定的规划下，细胞或基元的演化就用网格的空格与实格的变动来描述. 这样的模型就是元胞自动机. 在冯·诺伊曼逝世之后的长达十多年时间内这一开创性的研究几乎完全停止. 1970 年，J. H. Conway 编制了一个名为"生命"的游戏程序. 它由几条简单法则的组合，细胞或基元在网格中就能产生无法预测的延伸、变形和停止等复杂的模式. 这种意想不到的奇妙结果吸引了一大批计算机科学家研究"生命"程序的特点，最后终于证明这个程序与图林（A. Turing）机等价，也就是说给定适当的初始条件，"生命"模型能模拟任何一种计算机.

到 80 年代，物理学家、计算机科学家对元胞自动机模型的兴趣大增，原因是这类简单的模型能十分方便地复制出复杂的现象或动态演化过程中的吸引子、自组织和混沌现象. 一般来说，复杂系统由许多基本单元组成，各基本单元根据功能结构的不同而分成若干不同的层次. 高层次的变量或自由度较少，它从低层次得到选择信息，并对低层次起支配作用. 当这些子系统或基元相互作用时，主要是邻近基元之间的相互作用，而且一个基元的状态演化受周围少数几个基元状态的影响. 在相应的空间尺度上，基元间的相互作用往往是比较简单的确定性过程，如细胞的生与死，物态的冰相与汽化粒子的左旋和右旋等都是常见的二值逻辑状态. 用元胞自动机来模拟一个复杂系统时，时间被分成一系列离散的瞬间，空间分成一种规则的格子. 每个格子在简单情况下可取 0 或 1 状态，稍许复杂一些的情况可以取多值，如照片的灰度级等. 在每一个时间间隔，网格中的格点按照一定的规则同步地更新它的状态，这个规则由所模拟的实际系统的真实物理机制来确定. 如果遇到难以确定的困难情形，也可试验几种规则，以观察模式的宏观演化结果是否与真实过程一致. 建立模型时，尽量使个体简化，发挥元胞自动机的特点，"以多取胜"，而不是以"复杂取胜"[1). 格点状态的更新是由其自身和四周邻近格点在前一时刻的状态共同决定. 不同的格子形状、不同的状态集和不同的操作规则将构成不同的元胞自动机. 在一维模型中，是把直线分成相等的许多等分，分别代表元胞或基元；在二维模型中，是把平面分成许多正方形或六边形网格；而三维模型则是把空间划分出许多立体网格.

三、一维模型

若元胞的状态有 k 种，状态的更新由自身及其四周邻近的 n 个元胞状态共同决定，那么可能有的演化规则数为 k^{k^n} 种，它一般是很大的数目，这正是模拟复杂现象所必须具备的条件. 用 a_i，$a_{i,j}$ 和 $a_{i,j,k}$ 分别表示一维、二维和三维元胞自动机模型网格点上的元胞. 现在以一维模型为例，格点 i 上的元胞状态或为 0，或为 1，它的更新规则在最简单的情况下可以仅由左右相邻格点上的元胞状态决定，通常假

1）赵凯华、朱照宣、黄畇，非线性物理导论，北京大学非线性研究中心，1992 年 8 月.

定符合布尔（Boole）动力学原则，即由 a_{i-1} 和 a_{i+1} 两个元胞状态的模 2 加法值来决定[3]：

$$a_i^{(t)} = a_{i-1}^{(t-1)} \oplus a_{i+1}^{(t-1)}, \qquad (1)$$

式中“⊕”表示异或运算(相同者之和为 0，相异者之和为 1)，即

$$0\oplus0 = 0, 1\oplus1 = 0, 0\oplus1 = 1. \qquad (2)$$

按照上述规则，只有 a_{i-1} 与 a_{i+1} 在时刻(i — 1)的状态不同时，a_i 在时刻 i 的状态才为 1，其他情况为 0。

如果稍许改变一下元胞状态更新的规则，元胞状态要由自身与左右相邻元胞前一时刻的状态共同决定.如规定左右相邻元胞均为“0”状态，而自身为“1”状态时，更新后的状态就为“1”，否则为“0”，用公式表示为

$$\left.\begin{array}{l} a_i^{(t)} \to 1,\ (\text{当}\ a_{i-1}^{(t-1)} a_i^{(t-1)} a_{i+1}^{(t-1)} = 0,1,0\ \text{时}) \\ a_i^{(t)} \to 0.\ (\text{其他情况时}) \end{array}\right\} (3)$$

我们还可以看到，即使 a_i 的状态更新规则相同，而初始条件不同，那么演化的终态性质将是完全不同的. 以上演化结果可以是定常吸引子，相当于耗散动力学系统的终态，也可以是自相似结构的分形图案.

再如，将更新规则扩大到由 a_i 自身及左右各两个邻近元胞（a_{i-1}, a_{i-2}; a_{i+1}, a_{i+2}）共同决定，并给定系统的初始条件，则可以得出混沌吸引子的结果.

四、二维模型

对于象晶体生长、凝聚态、形态发生、流体湍流等等复杂现象，可以用二维元胞自动机来模拟.

通常是在有限大小的正方形或长方形平面上划分出许多网格，网格的形状最初采用正方形，以后发展成正六方形和三角形. 网格点上元胞的状态更新规则更加依赖于对系统宏观过程和机制的定性了解，使建立的规则符合真实的物理规律. 让我们来看一看二维模型是如何模拟自然界中的雪花，神经元的发育和流体湍流的形成等等过程的.

雪花是自然界中的结晶和增长现象，具有树枝状形态，而且千姿百态，千差万别，形态结构十分复杂.结晶过程涉及到物质三态的相变，因此很难用传统的数学方法建立模型或进行分析. 但是，通过二维元胞自动机却成功地模拟出许多种雪花，其形态逼真已达到难辨真伪的程度，使观者感叹 CA 的杰作竟然可以与大自然的造形相媲美，感叹人类的智慧和科学的力量达到了何等惊人的程度.

雪花的典型图象是平面六角对称的冰晶，实际的雪花是从一个冻结核（种子）增长起来的，周围是过饱和的水汽，六个树枝状分支的形态的任何瞬时增长都受空间小尺度均匀的外部条件(温度、湿度、各种污染物浓度等)的控制，因此基本上是各分支都相同.用 CA 模拟雪花形成的自然过程时，模型平面被分成许多很小的正六边形网格，格点的状态或者是赋值为“0”，表示水汽；或者赋值为“1”，表示冰晶. 在雪花形成的最初阶段只有一个冰核，因此模型从平面网格中心的一个元胞开始，模拟雪花一步一步地生长.生长的规则主要考虑以下几点：

(1) 稳定的边界：雪花图形边缘的元胞或者周围有众多的冰晶使其消耗大量的潜热来冻结，或者在较低温度下一定会冻结为冰晶，一旦冻结之后，就不再融化.

(2) 奇偶规则：雪花边界上任何元胞下一时刻的状态由周围相邻的六个元胞状态之和来确定.如果用 0 或 1 表示的诸状态之和为奇数，这个元胞就为冰(1 状态)；否则就保持水汽(0 状态). 奇偶规则主要反映了在雪花生长过程中，冰汽交界面应有足够大的面积来扩散冻结时释放的潜热这个物理特性. N.H.Packard 根据这些规则进行 10000 步计算后便模拟出雪花的瞬态图形，如果还考虑其他一些更细致的补充规则如限制与优先规则等，则可以模拟出其他各种六角形雪花形态.

五、复杂系统的 CA 模型

近 10 年来，CA 模拟神经系统功能结构的发育过程取得了可喜的进展. 模型是按生物组

织形态发生过程中同类相聚的类聚行为（sorting behavior）建立的,其中元胞状态的更新规则由周围相邻元胞状态的多数来确定，通俗地讲就是“少数服从多数”的表决原则．一个元胞在 t 时刻的状态应与四周相邻元胞在前一时刻的多数状态一致．若 0,1 状态数相等，则计入自身的状态来形成多数状态或者通过涨落作用来随机地选择该元胞的更新状态．模型通常是在平面上由 $N\times N$ 个格点组成网格方阵；格点只有 0 或 1 状态,演化规则是局域性的,即仅由四周相邻格点的状态来决定．

CA 模型的一个重要进步是建立流体力学中的格气模型.1976 年，Hardy, de Pazzis 和 Pomeau 提出了一个用他们名字的第一个字母命名的二维 HPP 格气模型：网络是正方型的，每个格点上最多有四个分子，质量相同，速度大小为一个单位，可以在格点上下左右方向上取一种指向，不准有完全相同的两个以上分子同时占据同一格点，连续介质可以用分子之间的碰撞来描述，时间空间和速度都取离散值．格气模型不考虑真实分子复杂的相互作用，只按质量守恒、动量守恒等作出状态更新的某些规则,如碰撞前后粒子数相等,但速度的方向和大小可以不同，碰撞后沿直角方向分开．

HPP 格气模型给出了局域平衡现象，但与 Navier-Stokes 方程有较大差别，所得结果也不尽合理．1985 年，由 Frish, Hasslacher 和 Pomeau 提出了一个新的格气模型叫做 FHP 模型，其中关键之点是用正六角形网格代替正方形网格，一举解决了 HPP 模型中非旋转对称问题，克服了伽利略不变性的困难，演化结果与 Navier-Stokes 方程一致，还成功地模拟了 Benard 对流等许多复杂的流体力学现象，特别是多孔介质渗流的 CA 模型在石油开采方面已得到实际应用．

为了提高运算精度，可以采用玻耳兹曼格点规则，但计算量大；还可采用近期提出的其他一些 CA 算法，读者不难用前面介绍的知识举一反三，加以理解．

我们已经看到，在元胞自动机中，状态的更新有两种情况：一种是确定性的；另一种是随机性的，犹如在牛顿第二定律中加入随机外作用力的郎之万方程的物理含义．在演化的初期会出现许多分支结构，随机性因素的作用会逐渐衰减，确定性的作用会逐渐增加，使系统达到一个稳定的总构型．分支结构可能会发生收缩合并，终态可能是定常吸引子、极限环或混沌吸引子．年青的理论物理学家 S. Wolfram 于 1982 年参加了一次研讨 CA 的小型会议，他惊奇地看到计算机屏幕上显示的图案太像海滩贝壳上的花纹，从此他深深地迷上了元胞自动机，并对 CA 的发展作出了很大贡献．在文献 [4] 中，他曾用熵来描述其演化行为，并把元胞自动机分成四类：类型 I 是模式随时间演化而消失；类型 II 是模式演化到一个固定的有限尺寸；类型 III 是模型均匀无限地生长；类型 IV 是模型无规律地生长或收缩．它们分别对应人们已经熟悉的动力学中的不动点、周期行为、自相似结构和混沌状态．

S. Wolfram 建议用元胞自动机作为模拟湍流的一条途径，今后努力的方向是把二维的格气模型推广到三维中去，探讨用 CA 模拟可压缩流体的可能性．

CA 与 Turing 机或者 K. Godel 定理一样是不可判定的，换句话说，不能用有限的程序步骤对元胞自动机演化图形的终态给行一般性的答案．但元胞自动机实际上与 Turing 机是等价的，因此具有强大的计算功能，它的并行运算方式为研制非 Neumann 计算机展示了美好的前景．

在探索复杂性的过程中，没有计算机的参与是不可想象的．对于绝大多数的变系数的和非线性的微分方程以及不规则几何图形等复杂问题，数学的解析方法几乎无能为力，解决非线性微分方程的求解，研究由它所描述的复杂现象和过程的时间演化的动态行为，只能依靠计算机模拟和数值计算方法，因为它能对理论分析上难以处理的复杂问题给出丰富的、系统性的、感性而直观的启示．特别是四维的动态图

象显技术为复杂系统的演化过程、细部构造提供了无与伦比的逼真图象，直接模拟客观世界的现象与规律。按照理论的设计来进行各种数值计算与模拟，方便地改变控制参数以观察动态结果，还可以在空间与时间大、中、小诸尺度上进行仿真研究。因此，元胞自动机开创了复杂性研究的新途径，是流体动力学最重要的研究方法之一。

过去难于问津、望而却步的实验研究，如今在功能强大的计算机面前变得轻而易举。非线性造成的计算复杂性是过去无法解决的，但现在已不存在不可逾越的障碍了[5]。研究者在计算机显示屏上直接观看这些无法预测的动态结果时，一种创造性的思想便油然而生，难道事实不正是这样吗?

人们已找到了探索复杂性的方法——元胞自动机，因而也就找到了描述大自然的最好方法。

[1] 吴江航、韩庆书，计算流体力学的理论、方法及应用，科学出版社，(1988)，12—13。

[2] 郝柏林、张淑誉，漫谈物理学和计算机，科学出版社，(1988)，93—95;199—202.

[3] E. Jackson, Perspectives of Nonlinear Dynamics, Cambridge University Press, New York, 2(1990), 454—504.

[4] S. Wolfram, 科学, No. 1(1985), 85—96.

[5] 赵松年，非线性科学：它的内容、方法和意义，科学出版社，(1993)，68—75.

法拉第——提出波粒二象性概念的先驱者[1)]

阎 康 年

(中国科学院自然科学史研究所，北京 100010)

很多史料表明，在爱因斯坦提出波粒二象性概念之前，在波粒二象性概念的起源上还有一个发展过程，例如法拉第在这个问题上曾经作出了重要的贡献，而且与爱因斯坦在提出该概念的说法上极其相似，却长期以来被人们忽视或遗忘了。

笔者在 1991 年 8 月曾经在《物理》杂志上发表过《法拉第的原子论思想转变和场概念的起源》[1]一文，分析和归纳了关于法拉第提出场概念及其时间的四种说法，并且提出了两种看法：力场是法拉第在 1832 年 3 月交给皇家学会存档的一封密封信中提出的，在文中他说磁力存在于磁铁周围的空间中，并有传递的时间和过程[2]，这就意味着力场的存在。爱因斯坦曾经说过："磁力线就是磁场"，"场是物体周围的物理空间"；实体场是法拉第在 1844 年 1 月给 R. 泰勒 (R. Taylor) 的信中提出的，在这封公开发表的信中他提出了一个新的原子模型：原子由力心及其周围的力组成，而力是物质的，所以分布在力心周围空间中的力物质实际上是物质的一种特殊形态——场，我们可以称之为"实体场"。爱因斯坦实际上沿着这样的思路，在 1905 年提出了质量和能量等当的概念和表示式，并且约在 1920 年又提出场是实在和粒子不过是场的凝聚[3]。这样，就形成了场概念的三个发展阶段：力场—实体场—实在场，前两者已取得公认，后者得到一些物理学家的赞同却仍存在歧议。

众所周知，爱因斯坦通过对场的不连续性分析，在 1909 年提出了波粒二象性概念。这个概念是为了解释光和辐射时从奇点及其周围的场的波动性共存的观点提出的。但是，类似的想法在法拉第于 1846 年 5 月给 R. 菲利浦斯 (R. Phillips) 的信中曾经明确地说明过，对此可详细说明如下。

1) 该文是作者根据他在 1993 年 8 月26日在西班牙萨拉戈萨举行的第 19 届国际科学史大会的物理史组会议上宣读的文稿经修改和补充后写成的。