

Клеточно-автоматные методы численного решения задач математической физики на гексагональной сетке

И.В.Матюшкин^{1,2}, М.А.Заплетина^{1,2}

¹Институт проблем проектирования в микроэлектронике РАН

²Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

imatyushkin@ippm.ru

Аннотация — Рассмотрены особенности клеточно-автоматных реализаций схем решения классических задач для уравнений в частных производных (Лапласа, диффузии и волнового). Анализ ограничен КА с непрерывными значениями и дается в контексте типовых конечно-разностных методов. Показано, что КА-решение уравнения Лапласа основано на решении уравнения диффузии, где коэффициент переноса вводится искусственно. Эмпирически получена локальная функция перехода для граничных ячеек, гарантирующая сохранение вещества. На примере трех задач дается связь микро- и макрокоэффициентов диффузии.

Ключевые слова — клеточные автоматы, уравнения в частных производных, гексагональная сетка, диффузия, волновое уравнение.

I. ВВЕДЕНИЕ

В практике приборно-технологического моделирования СБИС зачастую возникает необходимость решения уравнений в частных производных, характерных для математической физики [1]. С появлением многоядерных процессоров для этого стало возможно использовать вычислительный параллелизм, требующий эффективного распараллеливания алгоритмов. Одним из подходов является клеточно-автоматная (КА) (пере)формулировка алгоритма [2, 3], т.к. классические КА обладают синхронностью. Если в классических КА допустить непрерывность состояний ячейки, что мы и сделаем в работе, то возникает генетическая связь с известными численными методами. Мощь современных компьютеров позволяет использовать тип double, где 8 байт (52 бита мантиссы) кодируют примерно $4.5 \cdot 10^{15}$ значений. Наше обращение к гексагональным решеткам обусловлено:

- 1) их изотропностью;
- 2) более мягкими условиями по требованиям Куранга-Леви;
- 3) опережающим проектированием топологии СБИС с 3 осями симметрии;
- 4) все более широким применением.

Более подробно особенности гексагональных решеток применительно к задачам нанотехнологии рассмотрены нами в работе [4], также определенный интерес представляет недавняя работа авторов [5].

Под классическими задачами математической физики мы понимаем заданные на односвязных областях на плоскости задачи Неймана, Дирихле и Коши для уравнений Лапласа/Пуассона, а также решение уравнения диффузии при тех же дополнительных условиях.

Три основных типа уравнений математической физики содержат в своей записи оператор Лапласа:

$$\Delta u \equiv \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) u = f(x, y) -$$

уравнение Лапласа/Пуассона (электростатики),

$$\frac{\partial u}{\partial t} \equiv u_t = \nabla(D\nabla u) = D\Delta u - \text{уравнение диффузии (переноса),}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \equiv u_{tt} = a^2 \Delta u - \text{уравнение волновых колебаний.}$$

Напомним общую классификацию уравнений в частных производных эллиптического и параболического типа при трех классических видах краевых условий:

- 1) условия Дирихле

$$u(x, y, t)|_{\partial\Omega} = f(x, y);$$

- 2) условия Неймана

$$\left. \frac{\partial u}{\partial n} \right|_{\partial\Omega} = f(x, y), \quad f \in C(\partial\Omega);$$

- 3) условия Коши

$$\left(\frac{\partial u}{\partial n} + ku \right) \Big|_{\partial\Omega} = f, \quad k = k(x, y, t), \quad f = f(x, y, t),$$

где Ω – пространственная область, n – внешняя единичная нормаль к границе области Ω , $\partial\Omega$ – граница области Ω . При аналитическом решении (2) часто требуют непрерывности функции f на границе области, то есть $f \in C(\partial\Omega)$.

II. ПРОСТЕЙШИЕ АППРОКСИМАЦИИ ПРОИЗВОДНЫХ НА ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ СЕТКЕ

Рассмотрим гексагональную сетку с длиной ребра l , центр координат совместим с центром одного из гексагонов (расположены вертикально), а сеточную функцию, аппроксимирующую искомое непрерывное решение, будем задавать естественным образом в центрах гексагонов. Таким образом, начальный узел с координатами $(0,0)$ и значением функции u_0 окружен шестью узлами с координатами:

$$1: (-l\sqrt{3}, 0), 2: \left(-l\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3l}{2}\right), 3: \left(l\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3l}{2}\right), \\ 4: (l\sqrt{3}, 0), 5: \left(l\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{3l}{2}\right), 6: \left(-l\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{3l}{2}\right).$$

Значения функции на соседних узлах аппроксимируются рядом Тейлора, в котором мы сохраняем члены четвертого порядка. Рассмотрим первые производные:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \cong \frac{1}{2l\sqrt{3}}(u_4 - u_1), \quad \frac{\partial u}{\partial x} \cong \frac{1}{2l\sqrt{3}}((u_5 - u_2) + (u_3 - u_6)), \\ \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{6l\sqrt{3}}((u_5 - u_2) + (u_3 - u_6) + 2(u_4 - u_1)) - \\ - \frac{3}{8}l^2 \frac{\partial}{\partial x}(\Delta u) \Big|_{(0,0)} + O(l^3), \\ \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{1}{6l}((u_2 + u_3) - (u_5 + u_6)) - \\ - \frac{3}{8}l^2 (u_{yyy} + \sqrt{3}u_{xyy}) + O(l^3).$$

Оператор Лапласа в предположении 7-точечной схемы задается суммой:

$$u_1 + \dots + u_6 = 6u_0 + \frac{9l^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) u + \\ + \frac{27l^4}{32} \left(\frac{\partial^4}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4}{\partial y^4} \right) u + \dots$$

III. КА-СХЕМА ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ЛАПЛАСА

Введем параметр $0 \leq \alpha \leq 1$ – фактор релаксации. Для внутренних ячеек справедлива, например, следующая локальная формула перехода (ЛФП):

$$u_1 + \dots + u_6 + 2u_0 \cong 6u_0 + 2u_0 \Rightarrow u_0^{t+1} = \\ = \frac{1}{6}(u_1^t + \dots + u_6^t)\alpha + (1-\alpha)u_0^t, \quad \alpha \cong \frac{3}{4}.$$

Нижний индекс указывает на номер ячейки в шаблоне соседства (если он равен 0 или пуст, то тогда указываем саму ячейку). Верхний индекс указывает на время взятия значения: t – на текущей итерации (настоящее), $t+1$ – на следующей итерации (будущее).

ЛФП для граничных ячеек выглядят так: для условий Дирихле $u^{t+1} = f(x, y)$, для условий Неймана (и полярных координат):

$$\text{postfix: } u^{t+1}(r = R, \varphi) = u^{t+1} + \varepsilon D_0 f(\varphi).$$

Последнее соотношение выводится из уравнения непрерывности. На основании решения нами одной тестовой задачи (Неймана) можно постулировать универсальную связь: $\varepsilon/l \cong 0.46 \approx 1/2$.

IV. КА-СХЕМА ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ДИФFUЗИИ

Пусть τ, l – кванты КА по времени и пространству.

Выражение $D_m = D \frac{\tau}{l^2}$ назовем макро(скопическим)

коэффициентом диффузии (синонимично: коэффициентом макродиффузии). Роль фактора релаксации играет (микро)коэффициент диффузии

$\left[D' \equiv \frac{4}{3} D \frac{\tau}{l^2} \right]$. И для внутренних ячеек ЛФП:

$$u^{t+1} = (1 - D')u^t + D' \frac{u_1^t + \dots + u_6^t}{6}.$$

Или, если получилось $D' > 1$, то введем ЛФП (с неочевидной связью микро- и макрокоэффициентов диффузии):

$$u^{t+1} = (1 - D'')u^t + D'' \frac{u_1^t + \dots + u_6^t}{6}, \quad D'' \equiv \frac{D'}{1 + D'}.$$

Обращает на себя внимание формальная общность вида формул. Отсюда следует, что решение уравнения Лапласа/Пуассона получается конечным (т.е. в котором глобальная конфигурация не изменяется) результатом КА-вычисления, в целом имитирующего решение уравнения диффузии, в котором коэффициент диффузии вводится искусственно и играет роль внутреннего параметра численного метода. Принципиальное отличие КА-стратегии решения диффузионных задач, в частности, с заданными краевыми условиями от традиционной, связанной с решением системы линейных уравнений с трехдиагональной матрицей, состоит в использовании итерационного подхода. При её реализации на обычных ЭВМ возможен даже проигрыш в длительности расчета, однако при реализации на вычислительном кластере с параллелизмом вычислений будет ощущаться уже выигрыш в быстродействии.

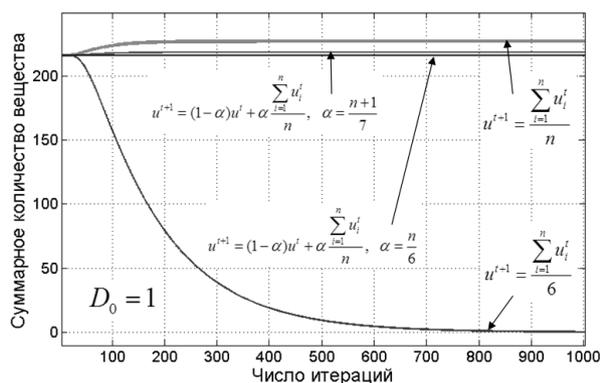
Для ЛФП граничных ячеек мы получили эмпирическим путем формулу, гарантирующую сохранение вещества (соответственно задача Неймана $\partial u / \partial n = 0$):

$$\text{boundary: } u^{t+1} = (1 - \alpha D_0)u^t + \alpha D_0 \frac{u_1^t + \dots + u_n^t}{n}, \\ \alpha \cong \frac{n}{6}.$$

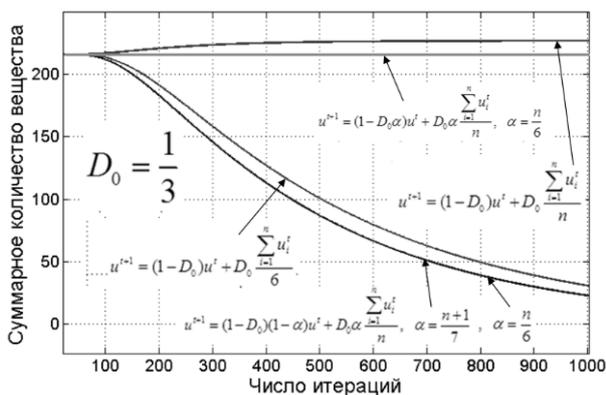
На рис. 1 показано выполнение условия замкнутости/консервативности для различных вариантов граничных ЛФП.

В качестве следующего примера рассмотрим решение одной довольно старой физической задачи, а именно – модели диффузии из постоянного источника в полубесконечное тело, естественно возникающей, например, в технологии микроэлектроники в процессе легирования полупроводникового материала из газовой или паровой фазы. Для классической задачи диффузии из постоянного источника в полубесконечное тело рассматривается уравнение диффузии при следующих краевых условиях Дирихле (1):

$$\begin{cases} \frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}, & D = const; \\ C(0,t) = C_s, & C(\infty,t) = 0, & C(x > 0, t = 0) = 0. \end{cases} \quad (1)$$



(а)



(б)

Рис. 1. Чувствительность динамики суммарного количества вещества для некоторых вариантов граничной ЛФП, лишь одна формула является верной

Решение, как известно, имеет вид (2):

$$C(x,t) = C_s \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}}, \quad \xi \equiv \frac{x}{2\sqrt{Dt}}, \quad (2)$$

$$\operatorname{erfc}(\xi) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\xi}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi.$$

Следует заметить, что в силу ограниченности поля КА решает в строгом смысле задачу (1) лишь до тех пор, пока концентрационная волна не достигнет правой границы поля. Таким образом, процесс КА-расчета проходит через три основных этапа: (а) начальная, удовлетворяющая (2), стадия; (б) переходные процессы; (в) состояние равновесия, которое соответствует переходу в уравнение Лапласа с появлением линейного решения.

Поскольку одномерная задача решается двумерным автоматом, для повышения адекватности модели: 1) был выбран размер поля 20-24 на 240 ячеек с распространением вещества в направлении большего измерения (слева направо); 2) оператор Лапласа в (1) двумерный; 3) по оси Y решение однородно, бесконечную область ограничиваем конечным прямоугольником с консервативными условиями по нижней и верхней границе (циклические условия на границах не стали использовать). Учёт краевых условий достигается за счет применения дополнительной функции перехода postfix, применяемой к граничным ячейкам (левым и правым) поля после совершения глобальной (или локальной, т.к. КА синхронный) функции перехода. Основным вопросом исследования будет: а) хорошо ли аппроксимирует экспериментальная кривая теоретическую, рассчитанную по (2); б) какова связь коэффициента микродиффузии D_0 при заданной формуле ОБПМ и коэффициента макродиффузии $D_m \square D$, стоящего в (1).

Для решения квазиодномерной задачи нами широко использовался обобщенный блочно-поворотный механизм Марголуса (ОБПМ), предложенный нами в [6]. Напомним, что в нем поле КА разбивается на непересекающиеся блоки, разбиение зависит от номера хода с некоторым периодом, а ЛФП для блока представляется композицией обменов между центральной и периферийной ячейкой блока и поворота, т.е. циклической перестановкой состояний соседних периферийных ячеек. Если дать номер 0 центральной ячейке блока, а номера от 1 до 6 другим ячейкам блока, то многообразие вариантов смещения разбиения и порядка взаимодействий «центр-периферия» можно задавать шаблоном-структурой. Интенсивность обмена «центр-периферия» в ЛФП представлена коэффициентом микродиффузии D_0 :

$C_i^{t+1} := C_i^t + D_0 (C_0^t - C_i^t), i = 1, 2, \dots, 6$. По умолчанию взято $D_0 = 1/3$. В обычных вариантах БПМ дискретных КА для отсылки к физическому коэффициенту диффузии используются вероятности поворотов и обменов. Требование однородности

фронта диффузионной волны (по оси ординат возможна по краям выпуклость фронта вправо) является фильтром для подходящих вариантов.

Комбинация всех полей шаблона-структуры КА ОБПМ делает неочевидной связь коэффициентов макро- и микродиффузии. Указанная связь, вообще говоря, имеет фундаментальное значение для КА-моделей диффузии. Для простого автомата Марголуса с бинарными значениями (сетка кубическая) выполняется соотношение: для размерностей пространства 1, 2, 3 соответственно $D/D_0 = 1, 3/2, 23/18$. (в явном виде коэффициент микродиффузии не вводится, но можно считать его равным 1, поскольку повороты против и по часовой стрелке совершаются всегда).

Рассмотрим одну из «хороших» ОБПМ-схем для поля $Y \times L = 24 \times 240$. Пусть нумерация (x, y) ячеек КА идет по строкам $1 \leq y \leq Y$ и столбцам $0 \leq x \leq L$ ($l=1, \tau=1$), а значения аналитического решения для стадии (а) и для стадии (с) обозначаются как $C_{diff}^t(x, y) \cong C_{diff}^t(x) \square \operatorname{erfc}(\square), C_{diff}^\infty(x, y) \cong C_{diff}^\infty(x) = C_s \left(1 - \frac{x}{L}\right)$ и не зависят, по предположению, от координаты y .

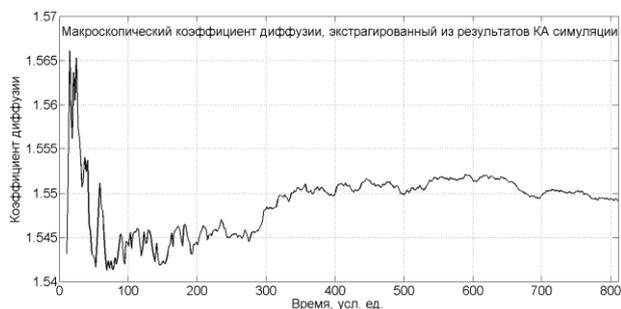


Рис. 2. Экстракция макроскопического коэффициента диффузии в условиях КА-ОБПМ расчета. Первые 5 измерений по времени (ходам) исключены из рассмотрения. 1 усл. ед. соответствует 3 ходам симуляции

Из общефизических соображений ожидается максимум концентрации в центре $y \approx Y/2$ и минимум по краям; эти слабо выраженные экстремумы действительно различимы, но при наступлении стадии (с) они исчезают из-за стохастики процесса. Примем, что такой КА моделирует одномерную задачу, введем среднюю концентрацию вещества по каждому столбцу

$$C^t(x) = \frac{1}{Y} \sum_{y=1}^Y C^t(x, y)$$

и за критерий остановки возьмем

$$\max_x |C_{diff}^\infty(x) - C^t(x)| \leq \frac{C_s}{10Y}$$

Использование другого критерия — $\max_x |C^t(x) - C^{t-1}(x)| \leq \varepsilon$, не предполагающего знания о действительном решении, наталкивается проблему

останова, т.к. всегда существует разброс значений по столбцу, влияющий на среднее.

Вернемся к простому КА, ЛФП которого были записаны в разделе III. Будем варьировать микрокоэффициент D_0 и следить за экстрагированным макрокоэффициентом D . Как мы видим на рис. 3, чем меньше D_0 , тем короче переходный участок и тем меньше D , причем зависимость линейная: $D = \lambda D_0$, $\lambda = 0.7799$ ($0.7672 \div 0.7926$). Коэффициент наклона прямой брался с учетом дискретности поля КА и экстракции. Его значение близко к $3/4$, что меньше даваемых теорией бинарного КА БПМ значений и для одномерной, и для двумерной диффузии. Сравнить нужно скорее КА ОБМП — наиболее очевидный и быстрый из всех вариантов «хороших» схем — там значение $\lambda = 1.55 \square 3/2$, что весьма близко даваемому теорией значению двумерной диффузии.

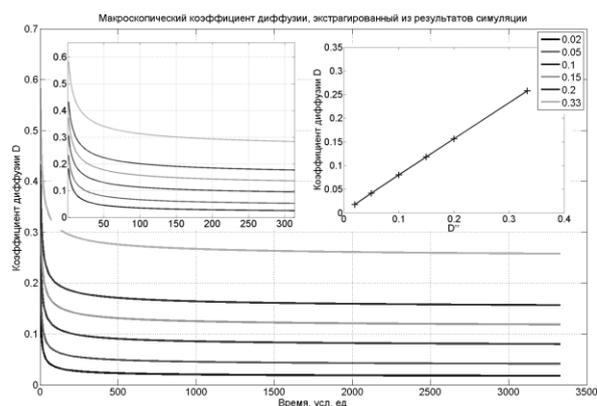


Рис. 3. Коэффициент макродиффузии, экстрагированный из данных КА-симуляции: параметрическая зависимость от коэффициента микродиффузии $D_0 \equiv D''$. Вклейки: слева — начальный участок, справа — линейная связь D , экстрагированного из последней точки графика (она принадлежит стадии (а)), и D_0 . При идеальном решении мы должны получать горизонтальные линии

Не надо забывать, что макроскопическое уравнение диффузии и его классическое решение представляют ту кривую, которая меняется в физическом времени и которой старается достичь КА в своем итерационном времени, а также важно соотношение этих характерных времен. Чем меньше квант времени КА, тем больше итераций дается КА, чтобы достичь искомого решения, и тем меньше значение D_0 . Прослеживается явная связь с соотношением Куранта (1928), требующего также малости шага по времени для явных методов решения уравнения диффузии. Таким образом, смысл числа Куранта для КА-задач состоит в том, что скорость итерационного КА-процесса, в котором предшествующие значение состояния ячейки рассматривается как отклонение от действительного, должна превышать скорость обмена веществом между соседними ячейками. Если это условие не выполняется, то следует говорить об отсутствии аппроксимации КА-схемой решения нестационарной диффузионной задачи.

V. КА-СХЕМА РЕШЕНИЯ ВОЛНОВОГО УРАВНЕНИЯ

Для решения 2D волнового уравнения на прямоугольной сетке в [7] использовалась следующая ЛФП (шаблон Неймана, см. также [10]), наследованная из схемы Ферми-Паста-Улама [7]:

$$\begin{aligned} u^{t+1} &:= (2u - u^{t-1}) + 2a^2(\delta u - u + \lambda u), \\ \lambda u &\equiv b \left((u_e - u)^2 - (u_w - u)^2 + (u_n - u)^2 - (u_s - u)^2 \right), \quad (3) \\ \delta u &\equiv (u_n + u_s + u_e + u_w) / 4. \end{aligned}$$

Здесь b – коэффициент нелинейности, верхний индекс t у текущего состояния ячейки не проставлен. Для гексагональной сетки аналогичная, но более простая схема (4) приведена в [9]. Там же методом фон Неймана была исследована устойчивость (но без привязки к КА!) этой и более общей схемы, содержащей члены со смешанными производными (напомним, $h = l\sqrt{3}$):

$$u^{t+1} = 2u - u^{t-1} + \left(a \frac{\tau}{h} \right)^2 \left(\frac{2}{3} \sum_{i=1}^6 u_i - 4u^t \right). \quad (4)$$

В [10] изложен, на наш взгляд, более «умный» метод решения волнового уравнения, восходящий к записи Бяльницки-Бирулы (Białynicki-Birula) [11] уравнений Максвелла, где, благодаря удвоению переменных при объединении векторов электрического и магнитного полей, нет обращения к состоянию ячейки на прошлом ходу (что потребовало КА с памятью). Вкратце суть метода показана на схеме (5):

$$\begin{aligned} u_n = a^2 u_{xx} &\Rightarrow \left\{ s = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial v}{\partial x}, \quad \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \frac{\partial u}{\partial x} \right\}, \quad (5) \\ a &= \frac{1}{\sqrt{\varepsilon\mu}}. \end{aligned}$$

Здесь под парой $\langle \varepsilon, \mu \rangle$ можно понимать электрическую и магнитную проницаемости среды или в общем случае просто коэффициенты. Аналогом (5) для двумерного случая будет запись (6) через комплекснозначный вектор $(U, V) \in \mathbb{C}^2$ (авторы [11] провели такие же рассуждения для 3D случая и разных спинов электрона):

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial t} &= \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) V, \quad \frac{\partial V}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) U, \quad (6) \\ \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Здесь i – мнимая единица. Очевидно, что (6) может быть переписано четырьмя линейными связями на 4-мерный вещественнозначный вектор, подпадая под вид (5). Несмотря на простоту записи и, соответственно,

записи КА-схемы, она вдвое расточительнее (3) по затратам памяти.

ПОДДЕРЖКА

Работа выполнена в рамках НИР «Исследование перспективных моделей вычислений и реализующих их архитектур высокопроизводительных информационно-вычислительных комплексов нового поколения» по программе фундаментальных исследований ОНИТ РАН «Архитектурно-программные решения и обеспечение безопасности суперкомпьютерных информационно-вычислительных комплексов новых поколений».

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Brio M., Zakharian A.R., Webb G.M. Numerical Time-Dependent Partial Differential Equations for Scientists and Engineers // Elsevier Inc., 2010, p.306.
- [2] Toffoli T. Cellular automata as an alternative to (rather than approximation of) differential equations in modeling physics // Physica D, 1984. Vol.10, pp. 117-127.
- [3] Vick B. Multi-physics modeling using cellular automata // Complex Systems, 2007, no.17, pp.65-78.
- [4] Матюшкин И.В., Коробов С.В., Вильданов Р.Р. Особенности гексагональных клеточных автоматов на плоской поверхности для задач нанотехнологии // Нанотехнология и нанотехнологии, Труды МФТИ, том 6, номер 1, 2014, стр. 72-80.
- [5] Hamilton B., Bilbao S. Hexagonal vs. Rectilinear Grids for Explicit Finite Difference Schemes for the Two-dimensional Wave Equation // 21st International Congress on Acoustics, Montreal, Canada, no. 133(3532), 2013, p.9.
- [6] Гаврилов С.В., Матюшкин И.В. Статистический анализ блочно-поворотного механизма Марголуза в клеточно-автоматной модели диффузии в среде с дискретными особенностями // Компьютерные исследования и моделирование, 2015, №6, том 7. – С.1155-1177.
- [7] Rucker R. Continuous-valued cellular automata in two dimensions // in book « New Constructions in Cellular Automata » / ed. by D. Griffeath, C.Moore, Oxford University Press, Oxford, 2003. – PP.295-316.
- [8] Ulam S. Random processes and transformations // In Proceedings of the International Congress of Mathematicians (Cambridge, Massachusetts, August 30-September 6, 1950), volume 2. Providence, Rhode Island: American Mathematical Society, 1952. - PP.264–275
- [9] Fabero J.C., Bautista A., Casasús L. An explicit finite differences scheme over hexagonal tessellation // Applied Mathematics Letters, 2001, Volume 14, Issue 5. - PP.593-598.
- [10] Janowicz M.W. et al. Cellular automaton approach to electromagnetic wave propagation in dispersive media // Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. / The Royal Society, 2006, T. 462, №. 2074. – PP.2927-2948.
- [11] Białynicki-Birula I. Weyl, Dirac, and Maxwell equations on a lattice as unitary cellular automata // Physical Review D, 49, 1994. – PP.6920–6927.

Cellular automata methods of the numerical solution of mathematical physics equations for the hexagonal grid

I.V. Matyushkin^{1,2}, M. A. Zapletina^{1,2}

¹Institute for Design Problems in Microelectronics, Russia, Moscow

²National Research University of Electronic Technology

imatyushkin@ippm.ru

Keywords – cellular automata, partial differential equations, hexagonal grid, diffusion, wave equation.

ABSTRACT

Different CA types, which solve elliptic (Laplace), parabolic (diffusion) and hyperbolic (wave) partial differential equations, are formulated for the hexagonal grid. The continuous CA are only used. As it turned out, the iteration patterns of Laplace and diffusion equation's solutions have close connections. A local function of transition for boundary cells has been empirically proved, but not obtained. The connection between micro- (for local function of transition) and macro- (for diffusion equation) coefficients have been obtained for the quasi one-dimensional problem of matter diffusion in half-space. CA behavior was discussed in the context of Courant-Lewy conditions. In comparison with seven-dot scheme, a block automaton we suggest as generalization of Margolus automaton to hexagonal grid, has demonstrated better behavior. The method of Neumann conditions writing with using CA has been proposed. This method is based on continuity equation. The method of coming out to complex plane is proposed for two-dimensional wave equation. This method allows avoiding the computation of second derivatives, which demand using CA with memory for time parameter.

REFERENCES

- [1] Brio M., Zakharian A. R., Webb G. M. Numerical Time-Dependent Partial Differential Equations for Scientists and Engineers. *Elsevier Inc.*, 2010, p.306.
- [2] Toffolli T. Cellular automata as an alternative to (rather than approximation of) differential equations in modeling physics. *Physica D*, 1984. vo. 10, pp.117 – 127.
- [3] Vick B. Multi-physics modeling using cellular automata - *Complex Systems*, 2007, no. 17, pp. 65–78.
- [4] Matyushkin, I.V., Korobov, S.V., Vil'danov, R.R. Osobennosti geksgonal'nyh kletochnyh avtomatov na ploskoj poverhnosti dlya zadach nanotekhnologii. - *Nanofizika i nanotekhnologii: Trudy MFTI*, 2014. vol. 6, no. 1. pp.72-80 (In Russian).
- [5] Hamilton B., Bilbao S. Hexagonal vs. Rectilinear Grids for Explicit Finite Difference Schemes for the Two-dimensional Wave Equation. *21st International Congress on Acoustics, Montréal, Canada, 2013*, no. 133 (3532), p.9.
- [6] Gavrilov S. V., Matyushkin I. V. Statisticheskij analiz blochno-povorotnogo mekhanizma Margolusa v kletochno-avtomatnoj modeli diffuzii v srede s diskretnymi osobennostyami. *Komp'yuternye issledovaniya i modelirovanie*, 2015, vol. 7, no. 6, pp.1155-1176 (In Russian).
- [7] Rucker R. Continuous-valued cellular automata in two dimensions // in book « New Constructions in Cellular Automata» / ed. by D. Griffeath, C.Moore, Oxford University Press, Oxford, 2003, pp.295-316.
- [8] Ulam S. Random processes and transformations // In Proceedings of the International Congress of Mathematicians (Cambridge, Massachusetts, August 30-September 6, 1950), volume 2. Providence, Rhode Island: American Mathematical Society, 1952, pp.264–275
- [9] Fabero J.C., Bautista A., Casasús L. An explicit finite differences scheme over hexagonal tessellation // *Applied Mathematics Letters*, 2001, Volume 14, Issue 5, pp.593-598.
- [10] Janowisz M.W. at al. Cellular automation approach to electromagnetic wave propagation in dispersive media // Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. / The Royal Society, t. 462, No. 2074, 2006, pp.2927-2948.
- [11] Bialynicki-Birula I. Weyl, Dirac, and Maxwell equations on a lattice as unitary cellular automata // *Physical Review D*, 49, 1994, pp.6920-6927.