

4. Zelluläre Automaten

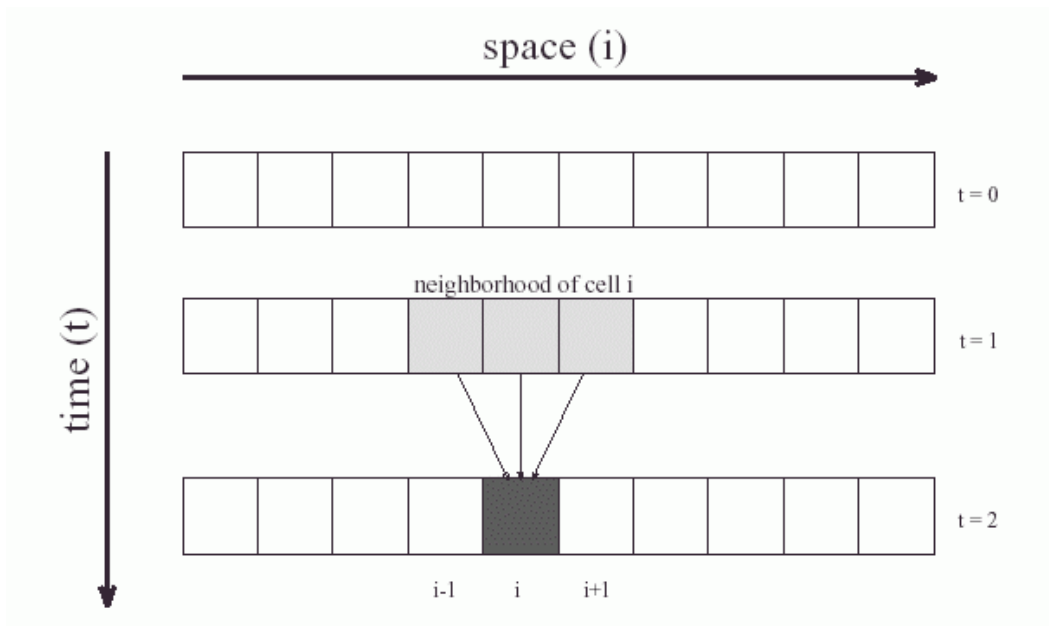
Einordnung:

- Modell mit räumlich *konstantem* Medium,
- *raumorientiert*,
- *diskret*,
- mit *fester* Nachbarschaft der Zellen,
- mit *kontextsensitiven* Wachstumsregeln.

Zelluläre Automaten

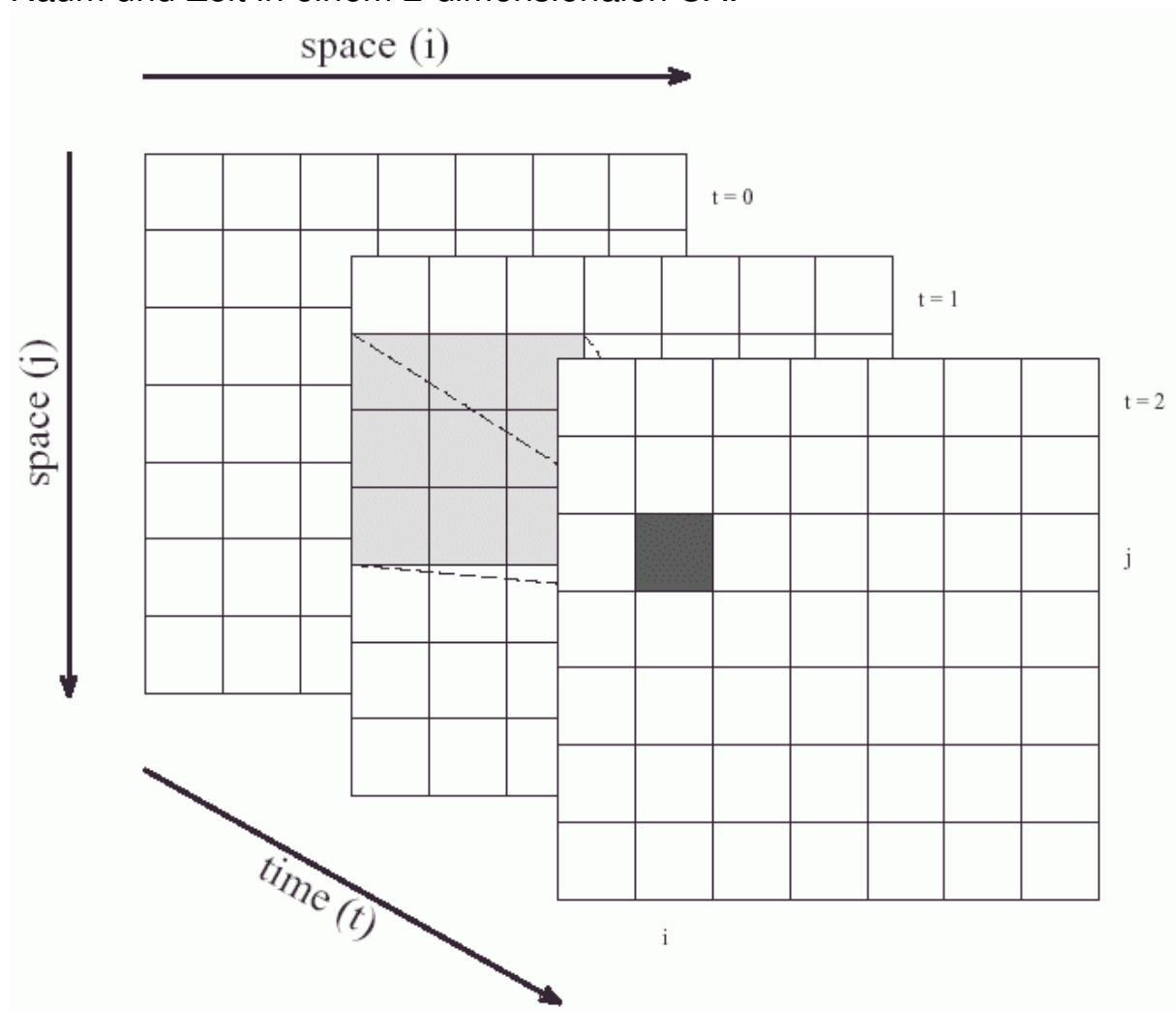
(auch: Zellularautomaten, Polyautomaten, *cellular automata*, CA)

- mathematische Modelle mit diskretem Raum und diskreter Zeit
- die Zeit verläuft in Schritten
- Raum wird als Gitter oder Array von Zellen repräsentiert
- in den klassischen CA-Modellen kann jede Zelle nur endlich viele Zustände annehmen
- für jede Zelle gilt eine Menge lokaler Regeln, die festlegen, wie sich der neue Zustand dieser Zelle aus ihrem Zustand und dem der Nachbarzellen (im vorherigen Zeitschritt) ergibt.
- Ein zellulärer Automat heißt *homogen*, wenn alle Zellen dieselbe Regelmenge haben. Wir betrachten im Folgenden nur homogene CA.



Je nach Dimensionszahl des zugrundeliegenden Gitters unterscheidet man 1-, 2- und höherdimensionale CA.

Raum und Zeit in einem 2-dimensionalen CA:



Formale Definition von CA:

4-Tupel (L, S, N, f) mit

L regelmäßiges Gitter (Elemente von L : „Zellen“)

S endliche Menge von Zuständen

N endliche Menge von Nachbarschaftsindizes mit

$$\forall c \in N, r \in L: r+c \in L$$

$f: S^N \rightarrow S$ Übergangsfunktion

Konfiguration $C_t: L \rightarrow S$ weist jeder Zelle einen Zustand zu,

f ändert C_t zu C_{t+1} : $C_{t+1}(r) = f(\{C_t(i): r \text{ in } N(r)\})$ mit $N(r)$

Nachbarschaft von r .

- Wichtige Eigenschaften:
 - Homogenität
Jede Zelle hat die selbe Zustandsmenge und Übergangsfunktion.
 - Lokalität
Zustandsübergänge sind in Zeit und Raum lokal.

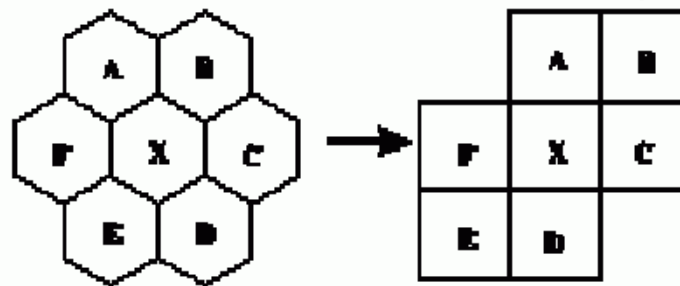
Wegen ihrer diskreten Struktur ist die Realisierung von CA auf Rechnern besonders einfach.

Simulation von Zellulären Automaten

- Für jede Generation
 - F = Feld der aktuellen Generation
 - Für jedes Gitterelement $F(i,j)$
 - Wende alle Regeln auf $F(i,j)$ an und speichere Ergebnis in $G(i,j)$
 - Kopiere G nach F
- Verbesserungen:
 - Statt Kopierschritt abwechselnd aktueller ZA in einem der beiden Felder
 - Kompilieren der Regeln in eine „look-up-table“
- mit Parallelrechnern hochgradige Parallelsierung der Berechnung möglich.

Gitter-Geometrie

- Reguläres Gitter
- Ein-dimensionaler Automat: Lineares Feld
Beispiele: Verkehrssimulation, „Color-Eater“
- Zwei-dimensionale Automaten:
 - Dreieckige Zellen: wenige direkte Nachbarn,
 - Quadratische Zellen: einfache Repräsentation, einfache Visualisierung, manchmal nicht ausreichend isotrop.
 - Hexagonale Zellen: geringste Anisotropie
- Dreieckige und Hexagonale Automaten müssen auf ein quadratisches Gitter abgebildet werden:
 - Scheren-Abbildung: $shear(i, j) = (i + floor(j/2), j)$



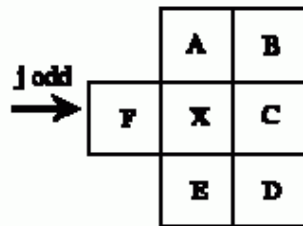
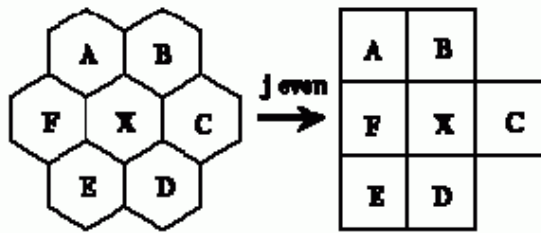
Nachbarschaft wird einheitlicher erhalten, aber Bedingungen für Grenzen schwieriger berechenbar.

Für Visualisierung Rücktransformation notwendig

Literatur:

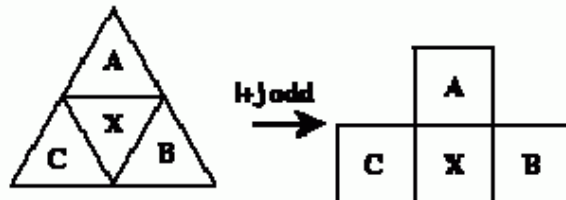
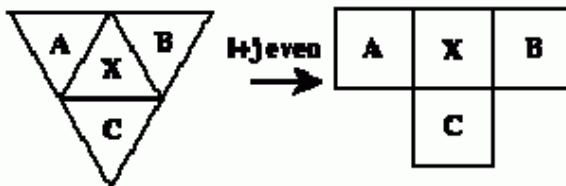
J. Weimar (1998): Simulation with Cellular Automata,
<http://www.tu-bs.de/institute/WiR/weimar/Zaskript/>

- Shift-Abbildung $shift(i,j) = (i,j)$

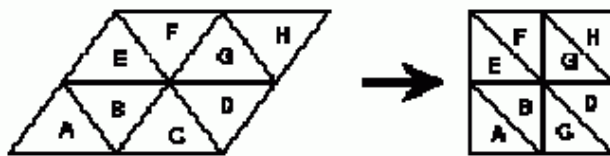


Grenzbedingungen einfach zu implementieren, Visualisierung einfach, Nachbarschaft abhängig von Parität des Index \rightarrow inhomogen
 Fehlende Indizes hinzunehmen und auf der Basis eines invarianten Zustandsteils die sechs relevanten Nachbarn ausfiltern.

- Abbildungen für Dreieckszellen:

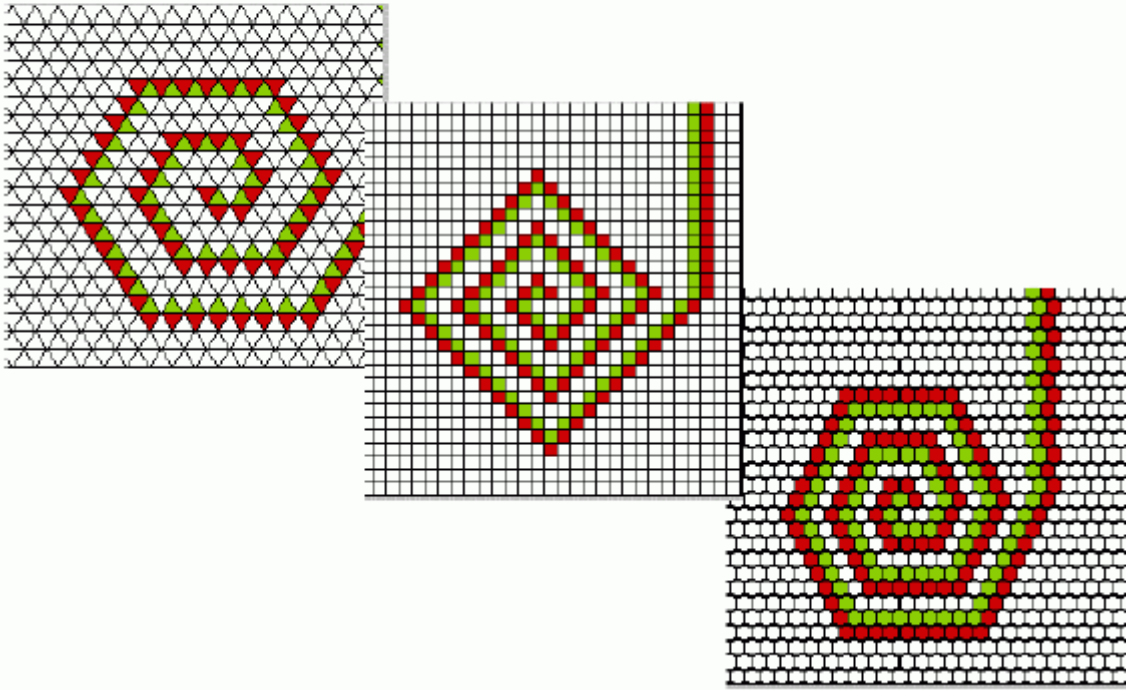


Jede Zeile von Dreiecken wird auf eine Zeile von Quadrate abgebildet \rightarrow Nicht einheitliche Nachbarschaften



Erweiterung des Zustands einer Zelle notwendig (SxS), \rightarrow größere Zustandsmenge einheitliche Transformation der Nachbarschaften,

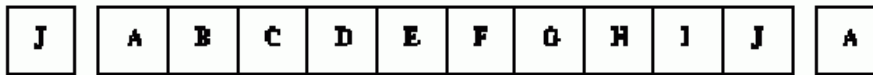
Gitter Topologie 2D



Das Problem der Gitter-Ränder:

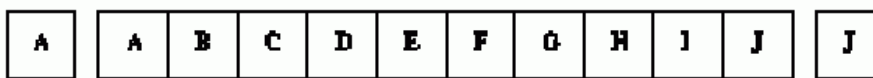
- Simulation eines wirklich unendlichen Gitters unmöglich (simulationstechnisch und möglicherweise durch reales System bedingt - natürliche Grenzen)

- Periodische Grenzen



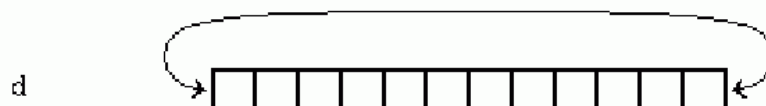
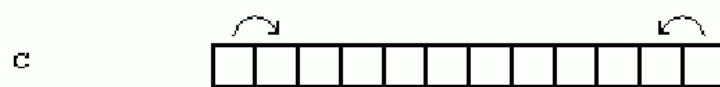
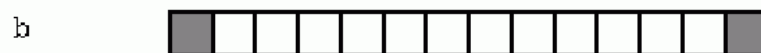
Bei zwei-dimensionalen Automaten - „Torus“

- Reflektive Grenzen



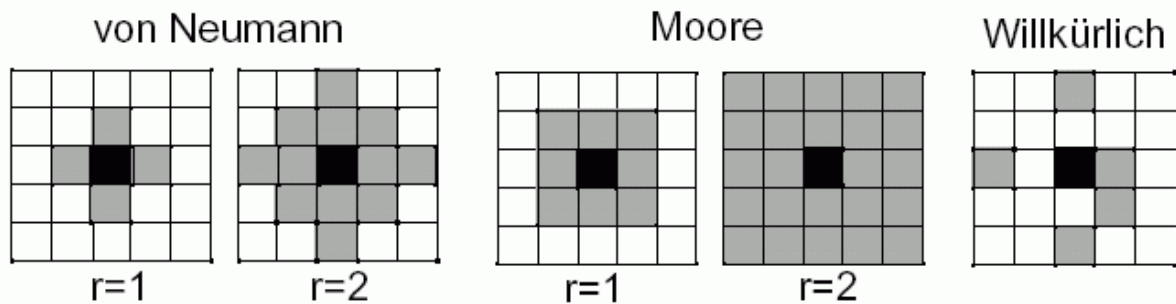
Wenn das reale System Grenzen hat, aber der Wert an der Grenze nicht vorgegeben ist.

- Kombinationen möglich, z.B. um einen langen Tunnel zu simulieren sind periodische Grenzen in der Horizontalen, reflektive Grenzen in der Vertikalen sinnvoll.
- Fixe Grenzen:
Zellen an der Grenze besitzen fixen Wert.



a: unendliches Gitter, b: fixe Grenzen, c: reflektive Grenzen,
d: periodische Grenzen

Nachbarschaften



Gegeben: Zelle i, j

- Von Neumann-Nachbarschaft
$$N_{i,j} = \{(k,l) \in L : |k-i| + |l-j| \leq r\}$$
- Moore-Nachbarschaft
$$N_{i,j} = \{(k,l) \in L : |k-i| \leq r \wedge |l-j| \leq r\}$$
- Grundsätzlich kann jede Art von Nachbarschaftsmenge gebildet werden, solange sie für alle Zellen gleich und endlich ist.
- Große Nachbarschaften → bessere Isotropie, beim Simulieren ineffizient.

Zustände

-
- jede Zelle in G befindet sich in einem definierten Zustand, der Element der endlichen Menge von Elementarzuständen ist, z.B.
 $E = \{\text{ein}, \text{aus}\}$

Lokale Funktion / Regeln

- definiert für jede Zelle und alle möglichen Umgebungen den nächsten Zustand, z.B. als Regel
- Regeln heißen **totalistisch**, falls sie nur summarisch von den Nachbarzuständen abhängen
- Regeln sind i.Allg. nicht umkehrbar - eine Konfiguration kann verschiedene Vorgänger haben
- **probabilistische** Regeln erlauben, im Gegensatz zu **deterministischen** Regeln eine stochastische Auswahl mehrerer Folgezustände für die gleiche Umgebung

Regelanwendung

- **synchrone** Automaten wenden f zu jedem Zeitschritt auf alle Zellen gleichzeitig an
- **asynchrone** Automaten wenden f sequentiell auf alle Zellen an:
 - in fester, deterministischer Folge
 - in stochastischer Folge
 - in dynamisch gesteuerter, deterministischer Folge
 - ...

im Folgenden werden nur synchrone CA betrachtet.

Beispiel eines zweidimensionalen zellulären Automaten:

John H. Conway (späte 60er Jahre): "*Game of Life*"

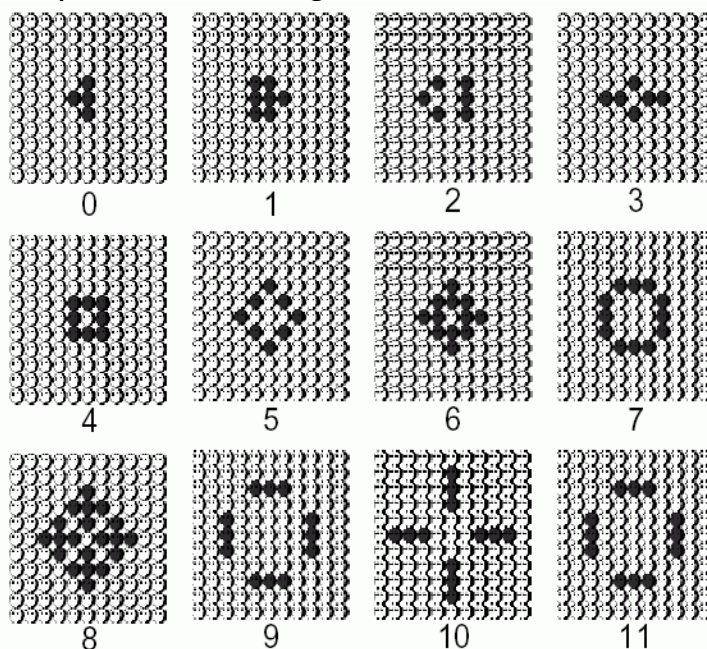
1970 von Martin Gardner in seiner mathematischen Kolumne in "Scientific American" vorgestellt, löste Welle weltweiter Forschung an diesem CA aus.

- regelmäßiges Quadratgitter
- nur 2 Zustände ("tot" und "lebendig", bzw. "0" und "1")
- Moore-Nachbarschaft mit Radius 1, d.h. es werden 8 Nachbarzellen betrachtet
- Regeln:

Life-Regeln

- Eine Zelle ist im nächsten Takt „lebendig“, wenn genau drei ihrer Nachbarn lebendig sind
- Eine lebendige Zelle ist im nächsten Takt „tot“, wenn weniger als 2 oder mehr als 4 ihrer Nachbarn lebendig sind.

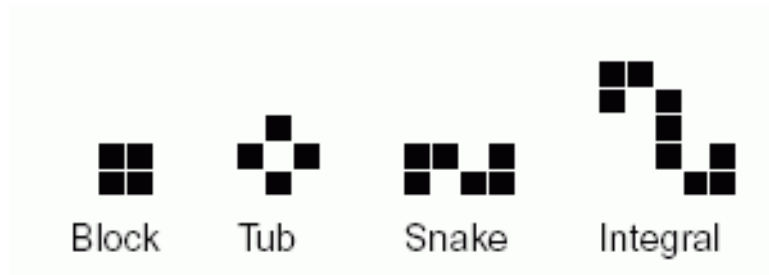
Beispiel-Entwicklung:



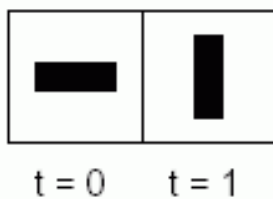
Muster lassen sich durch ihr Verhalten (bei der weiteren Entwicklung) klassifizieren.

Beispiele:

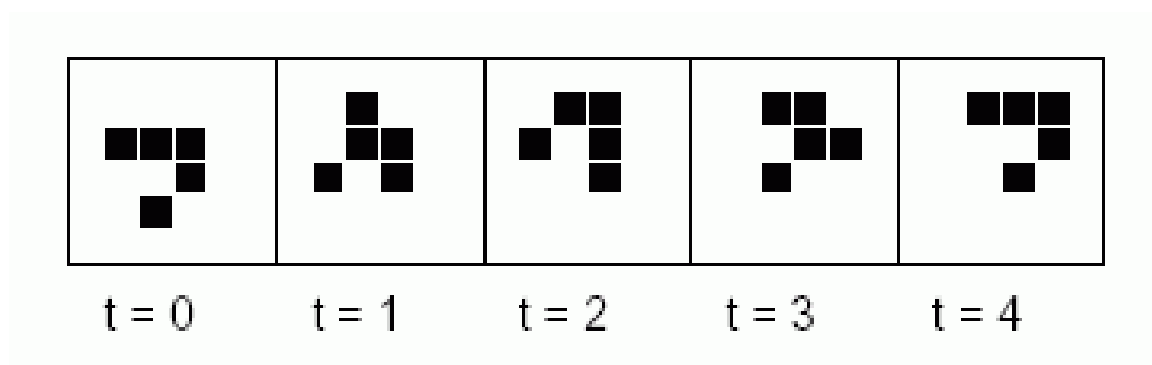
Typ I: "Stilleben", Muster, die sich nicht ändern (Fixpunkte der Übergangsfunktion):



Typ II: Oszillatoren (periodische Muster): z.B. der "Blinker"

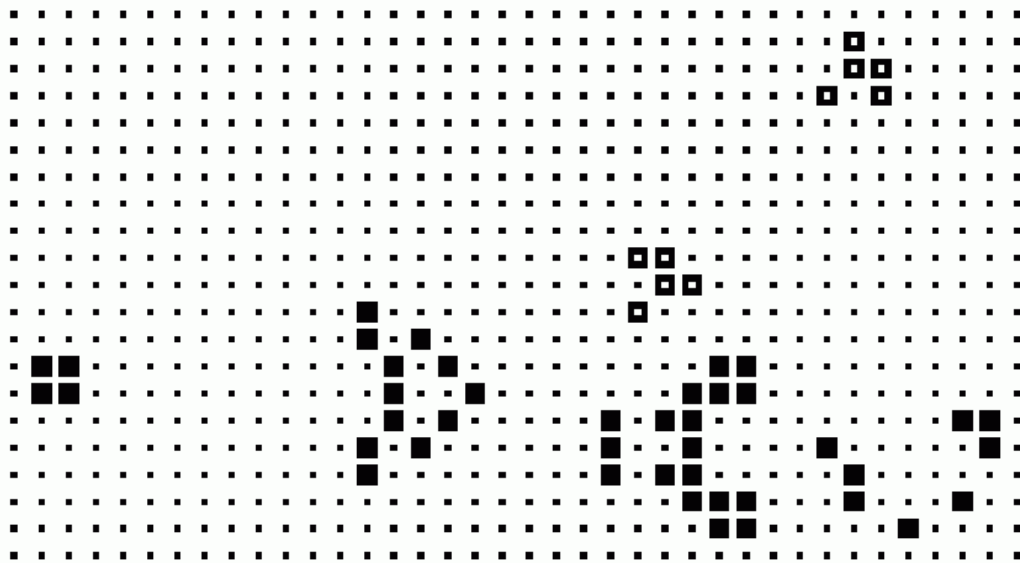


Typ III: "Raumschiffe" = Muster, die nach einer endlichen Zahl von Schritten wiederkehren, aber räumlich verschoben. Muster, die sich mit konstanter Geschwindigkeit über das Gitter bewegen. Beispiel: der "Gleiter"



Typ IVa: "Kanonen" = Oszillatoren, die in jedem Zyklus Raumschiffe emittieren.

Gleiterkanone:



Typ IVb: "Dampfer" = Raumschiffe, die Stilleben, Oszillatoren und / oder Raumschiffe hinter sich lassen.

Typ IVc: "Brüter" = Muster, die ihre Populationsgröße quadratisch (oder noch schneller) vergrößern (z.B. ein Raumschiff, das Gleiterkanonen produziert).

Typ V: unstabile Muster. Muster, die sich durch eine Folge von Zuständen weiterentwickeln und nie zum Ausgangszustand zurückkehren. Kleine Muster mit "langer" Entwicklungsphase vor der Stabilisierung heißen "Methusalems".

The Game of Life Beobachtungen

- für eine gegebene Anfangskonfiguration kann i.Allg. das zukünftige Verhalten nicht ohne Simulation vorhergesagt werden.
- einige Startzustände können nicht im Laufe der Simulation entstehen. Diese Zustände heißen *Garten-Eden* Konfigurationen.
- das Spiel ist (berechnungs-)universell. Der Beweis wird über die Konstruktion und Interaktion logischer Gatter geführt.

Das "Game of Life" wird auch von "harten" AL-Vertretern nicht als Beispiel für tatsächliches künstliches Leben angesehen.

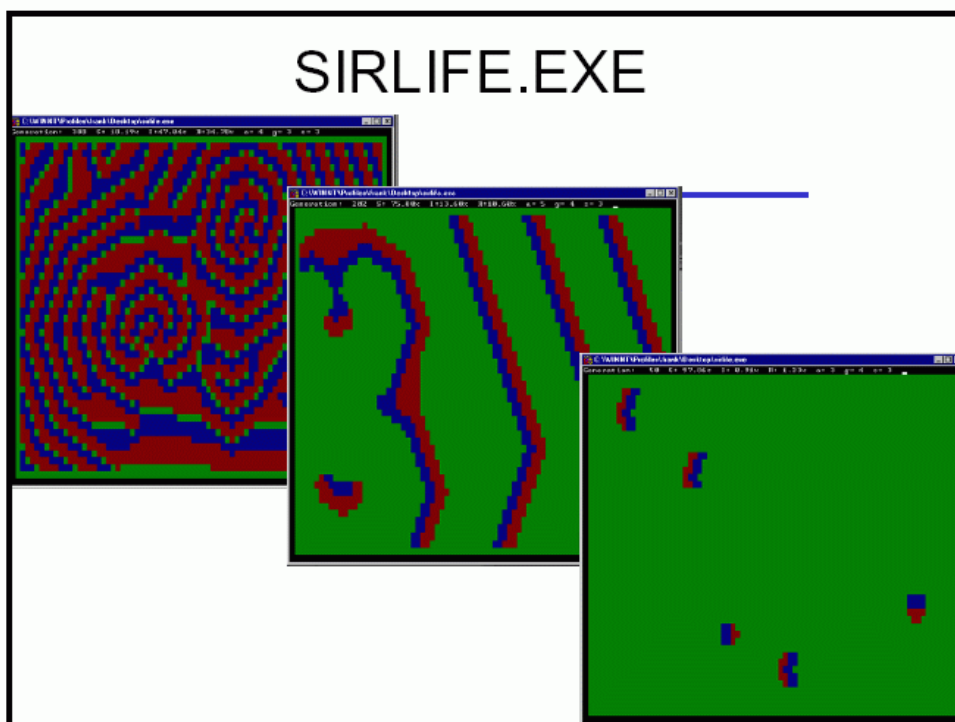
Es verwirklicht nur wenige der Lebens-Eigenschaften.

Jedoch demonstriert es die musterbildenden Potenziale einfacher, lokaler Regeln – und die Grenzen der Berechenbarkeit solcher einfach zu definierender Systeme:

There are important limitations on predictions, which may be made for the behavior of systems capable of universal computation. The behavior of such systems may in general be determined in detail essentially only by explicit simulation. [...] No finite algorithm or procedure may be devised capable of predicting detailed behavior in a computationally universal system. Hence, for example, no general finite algorithm can predict whether a particular initial configuration in a computationally universal cellular automaton will evolve to the null configuration after a finite time, or will generate persistent structures, so that sites with nonzero values will exist at arbitrarily large times. (This is analogous to the insolubility of the halting problem for universal Turing machines [see for example Beckmann, 1980].) (Wolfram, 1984b, p. 31)

Praktischer Einsatz zweidimensionaler CA:
in der Simulation natürlicher Phänomene, z.B. der
Ausbreitung von Epidemien

Beispiel:



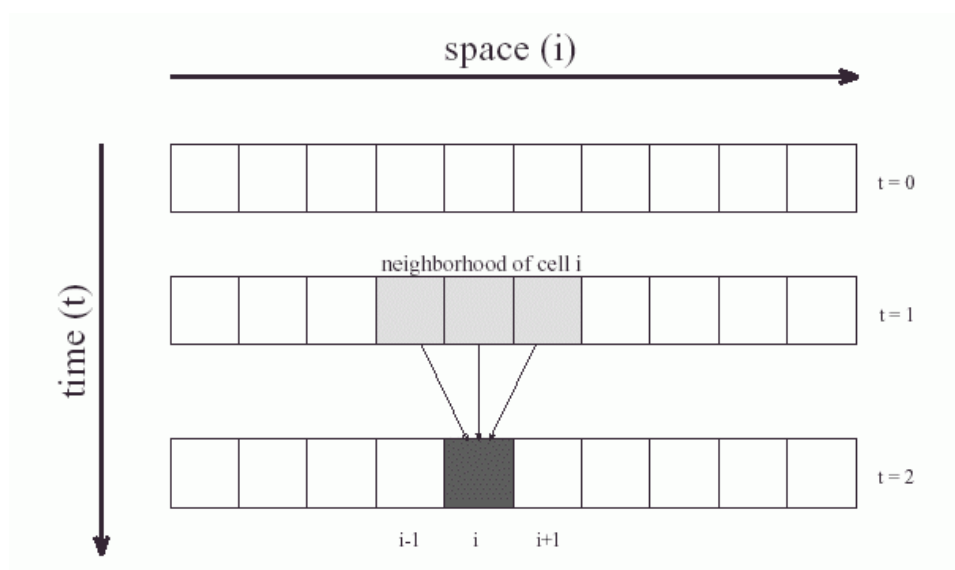
(Universität Leipzig)

1-dimensionale zelluläre Automaten

zugrunde liegt ein (potenziell endloses) Band mit Gitterzellen

jede Zelle nimmt einen von k möglichen Zuständen an (einfachster Fall: $k = 2$)

Nachbarschaft mit Radius r : betrachte r nächste Nachbarn auf jeder Seite (einfachster Fall: $r = 1$, d.h. nur 2 Nachbarn und die Zelle selbst werden betrachtet)



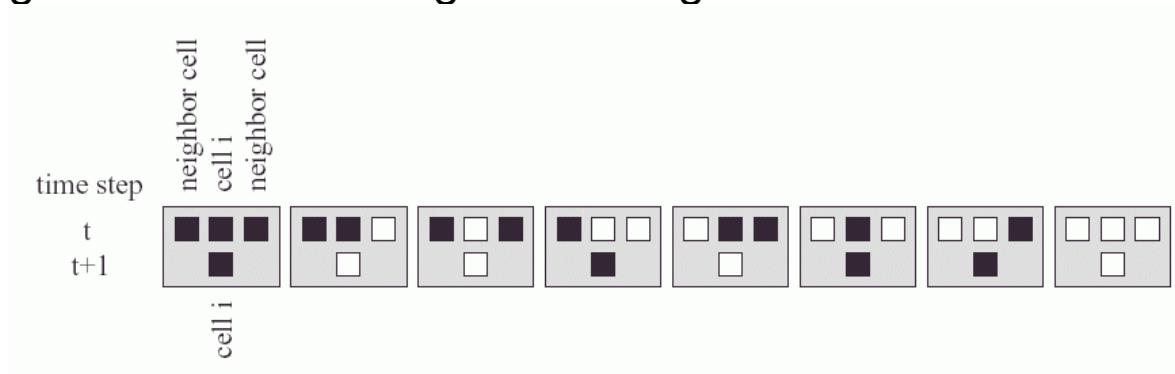
Beschreibung der Regel durch eine Funktionstabelle (look up table, *rule table*, manchmal auch der *Genotyp* genannt):

z.B.

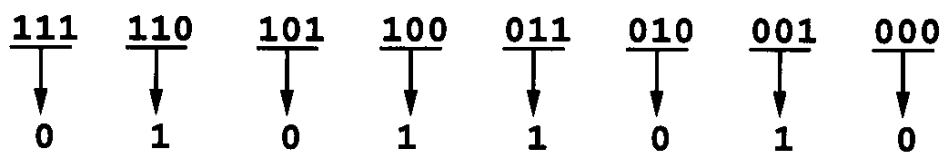
$a_{i-1}(t)$	$a_i(t)$	$a_{i+1}(t)$	$a_i(t+1)$
0	0	0	0
0	0	1	1
0	1	0	1
0	1	1	0
1	0	0	1
1	0	1	0
1	1	0	0
1	1	1	1

(*)

grafische Darstellung dieser Regel:



Codierung einer Regel als Dezimalzahl (gewonnen aus dem 01-String der Funktionswerte, der die Wirkung eindeutig festlegt):



$$01011010 = 0 \times 128 + 1 \times 64 + 0 \times 32 + 1 \times 16 + 1 \times 8 + 0 \times 4 + 1 \times 2 + 0 \times 1 = 90$$

Bei *totalistischen* Regeln hängt das Ergebnis der Funktion nur von der Summe der Werte in der Nachbarschaft ab.

Hier wird eine andere Form der Codierung gewählt:

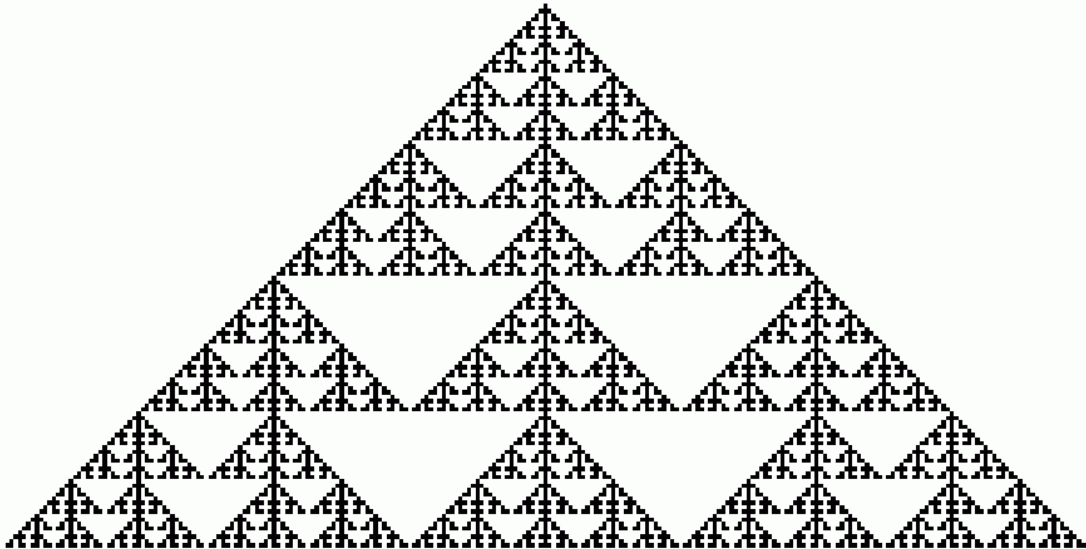
z.B. für einen totalistischen CA mit $r = 2$ und $k = 2$ (unten sind Beispiel-Zustandsübergänge aufgezählt, die von dieser Regel induziert werden):

$$\begin{array}{cccccc}
 \Sigma = 5 & \Sigma = 4 & \Sigma = 3 & \Sigma = 2 & \Sigma = 1 & \Sigma = 0 \\
 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & = & 20 \\
 \Sigma = 1 & : & 01\mathbf{0}\ 00 & \longrightarrow & \mathbf{0} \\
 \Sigma = 2 & : & 10\mathbf{0}\ 01 & \longrightarrow & \mathbf{1} \\
 \Sigma = 3 & : & 01\mathbf{1}\ 01 & \longrightarrow & \mathbf{0} \\
 \Sigma = 4 & : & 11\mathbf{1}\ 01 & \longrightarrow & \mathbf{1} \\
 \Sigma = 5 & : & 11\mathbf{1}\ 11 & \longrightarrow & \mathbf{0}
 \end{array}$$

weitere, häufig verwendete Restriktionen für die Regeln:

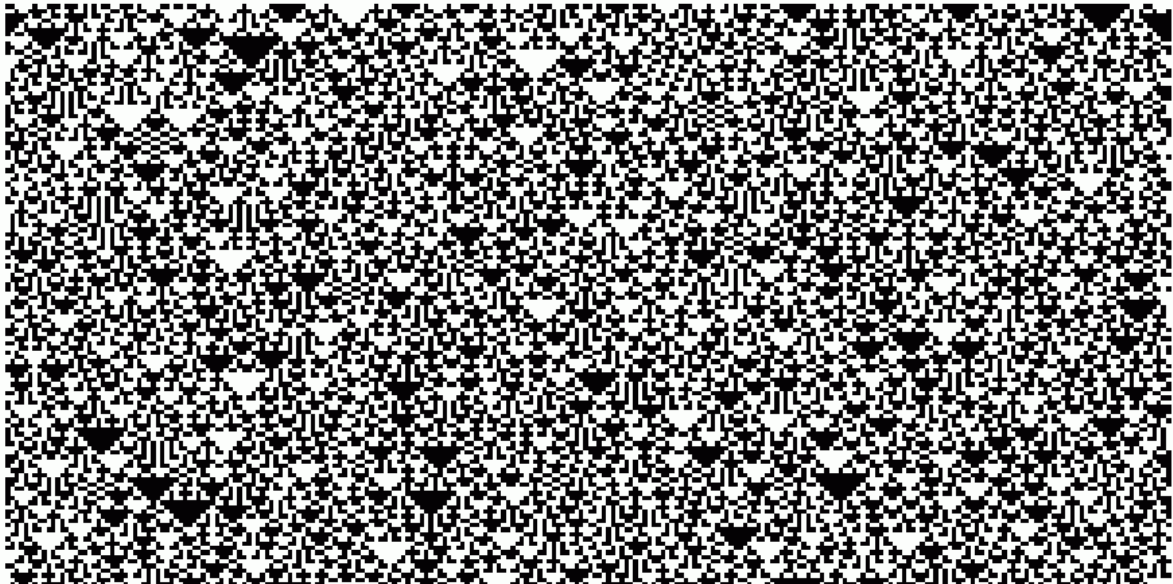
- es gibt einen speziellen Zustand 0 ("quiescent state"), und wenn alle Zellen der Nachbarschaft (und die aktuelle Zelle) den Zustand 0 haben, ist das Ergebnis wieder 0
- Symmetrie der Regeln (z.B. 100 und 001 müssen denselben Zustand liefern)

Anwendung des CA mit der obigen Regelmenge (*) auf eine Zeile mit einer einzigen 1, sonst lauter Nullen:



(senkrechte Achse = Zeitachse!)

ein anderes Muster entsteht, wenn man (bei gleicher Regelmenge!) von einer Anfangszeile mit *zufälliger* Verteilung von Nullen und Einsen ausgeht:



typisch: "Dreiecke" als kleine, geordnete Strukturen im Chaos.

Resultierendes Muster als Ergebnis der Anwendung einer CA-Regelmenge: "*Phänotyp*".

Wolfram's Klassifikation

Stephen Wolfram ordnete die 1-dim. CA-Regeln in 4 Klassen ein, je nach der Dynamik, die sich entwickelt bei "typischen" (zufälligen) Ausgangszeilen (d.h. nach dem typischen Phänotyp):

Klasse I:

Es entsteht ein räumlich homogener Zustand. Muster verschwinden. "Fixpunkt"-Zustand.

Beispiel:



(totalistische Regel mit $k=2$, $r=2$ und Code 60)

Klasse II:

liefert Folgen von einfachen stabilen oder periodischen Strukturen (endlose Zyklen derselben Zustände).

Beispiel:

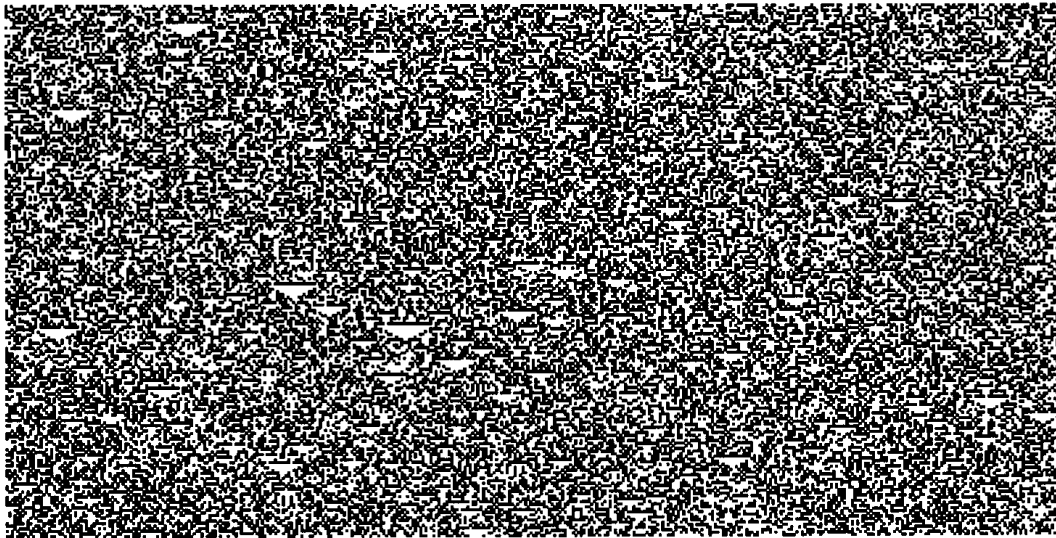


(totalistische Regel mit $k=2$, $r=2$ und Code 56)

Klasse III:

zeigt chaotisches, aperiodisches Verhalten. Muster wachsen unbegrenzt mit fester Wachstumsrate.

Beispiel:



(totalistische Regel mit $k=2$, $r=2$ und Code 10)

Klasse IV:

liefert komplizierte lokale Strukturen, von denen sich einige fortbewegen können. Muster wachsen und schrumpfen mit der Zeit. Die "interessanteste" Klasse, möglicherweise mit universeller Berechnungskapazität, wie beim Game of Life.

Beispiel:



(totalistische Regel mit $k=2$, $r=2$ und Code 20)

Die 4 Klassen unterscheiden sich auch durch die Wirkung, die kleine Änderungen in den Anfangsbedingungen haben (Wolfram 1984):

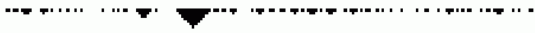
Klasse I: keine Änderung im Endzustand.

Klasse II: Änderungen nur in einer Region endlicher Größe.

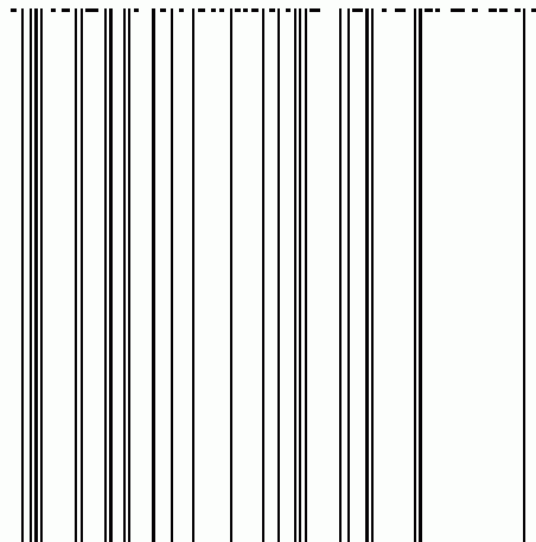
Klasse III: Änderungen in einer Region mit ständig wachsender Größe.

Klasse IV: Irreguläre Änderungen.

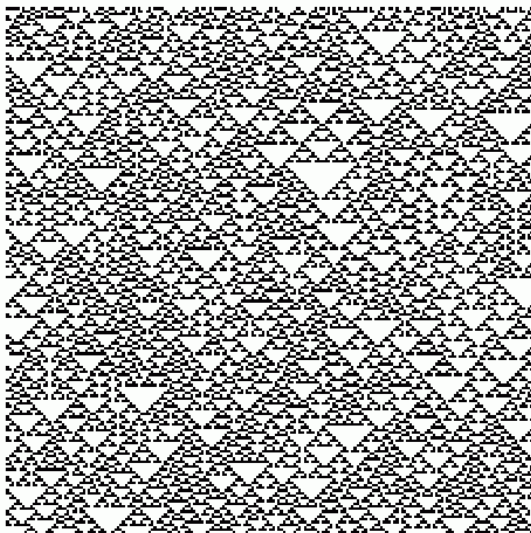
weitere Beispiel-CA (mit $k = 2$, $r = 1$):



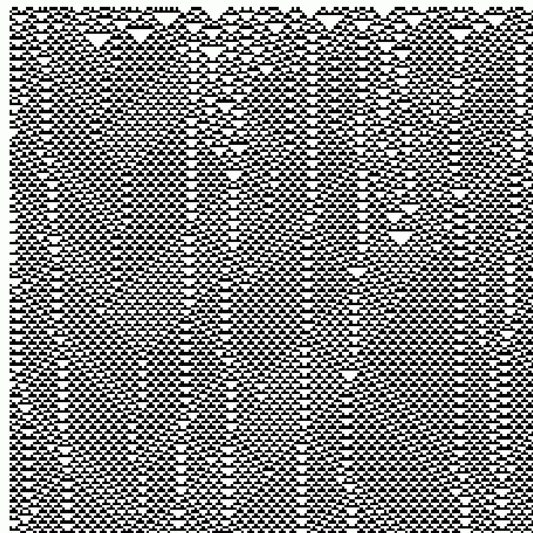
Klasse I (allg. Regel mit Code 128)



Klasse II (Code 4)

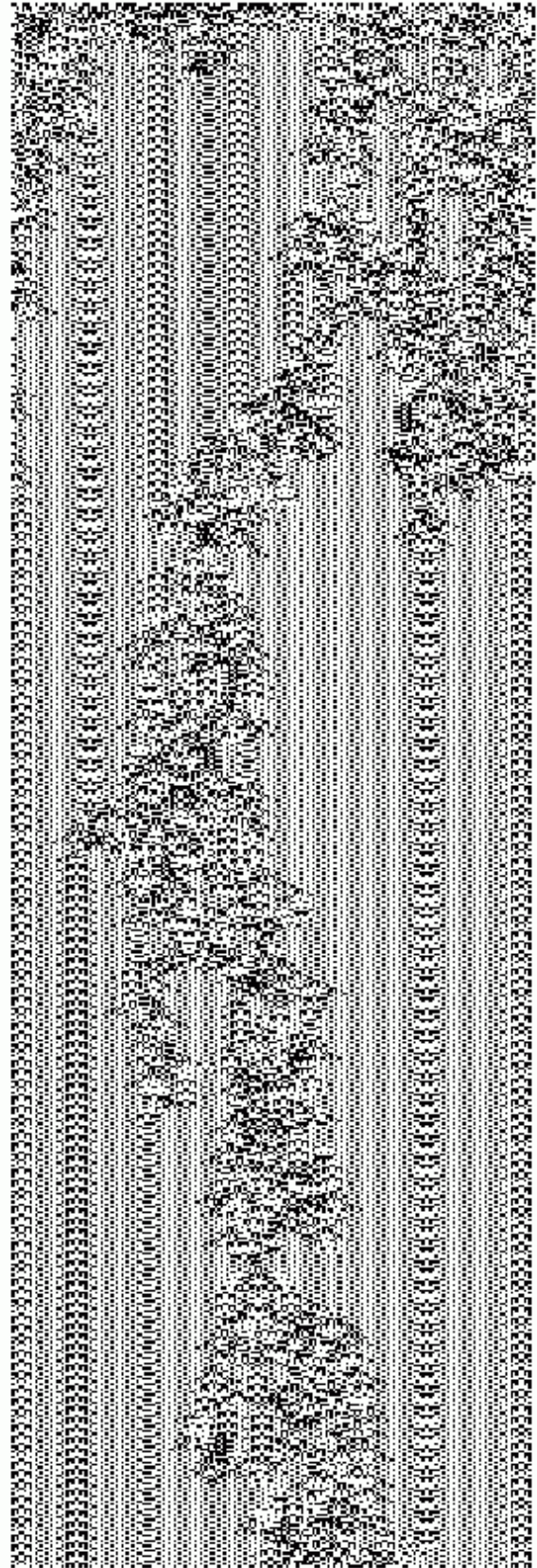
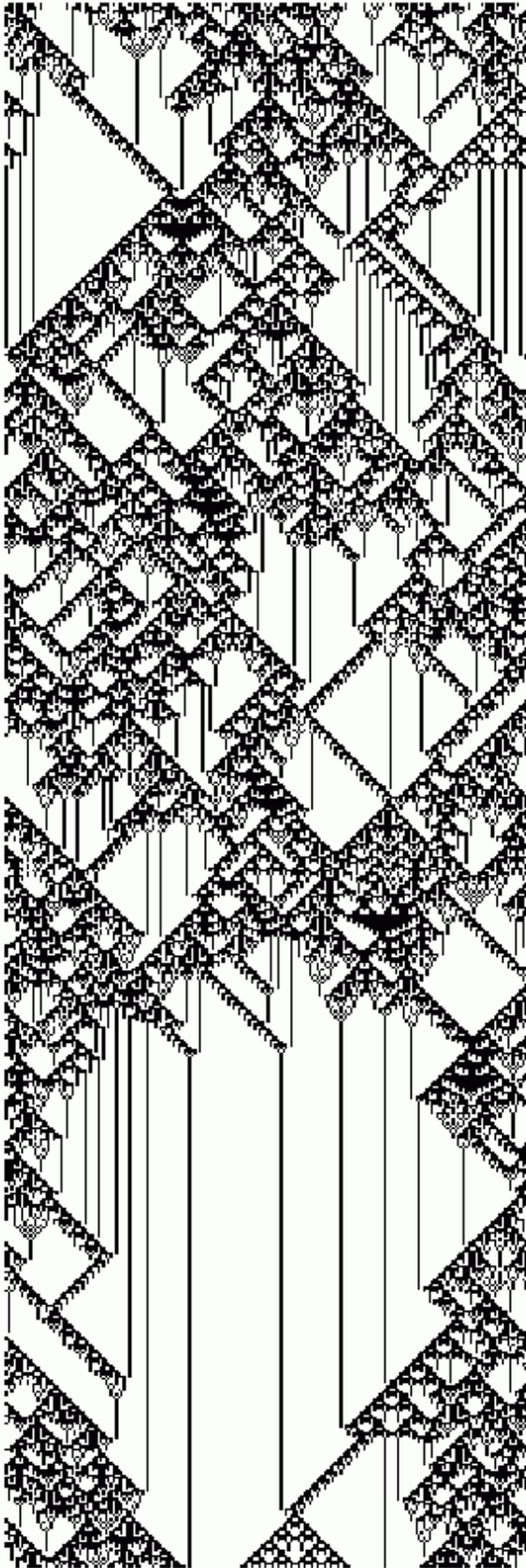


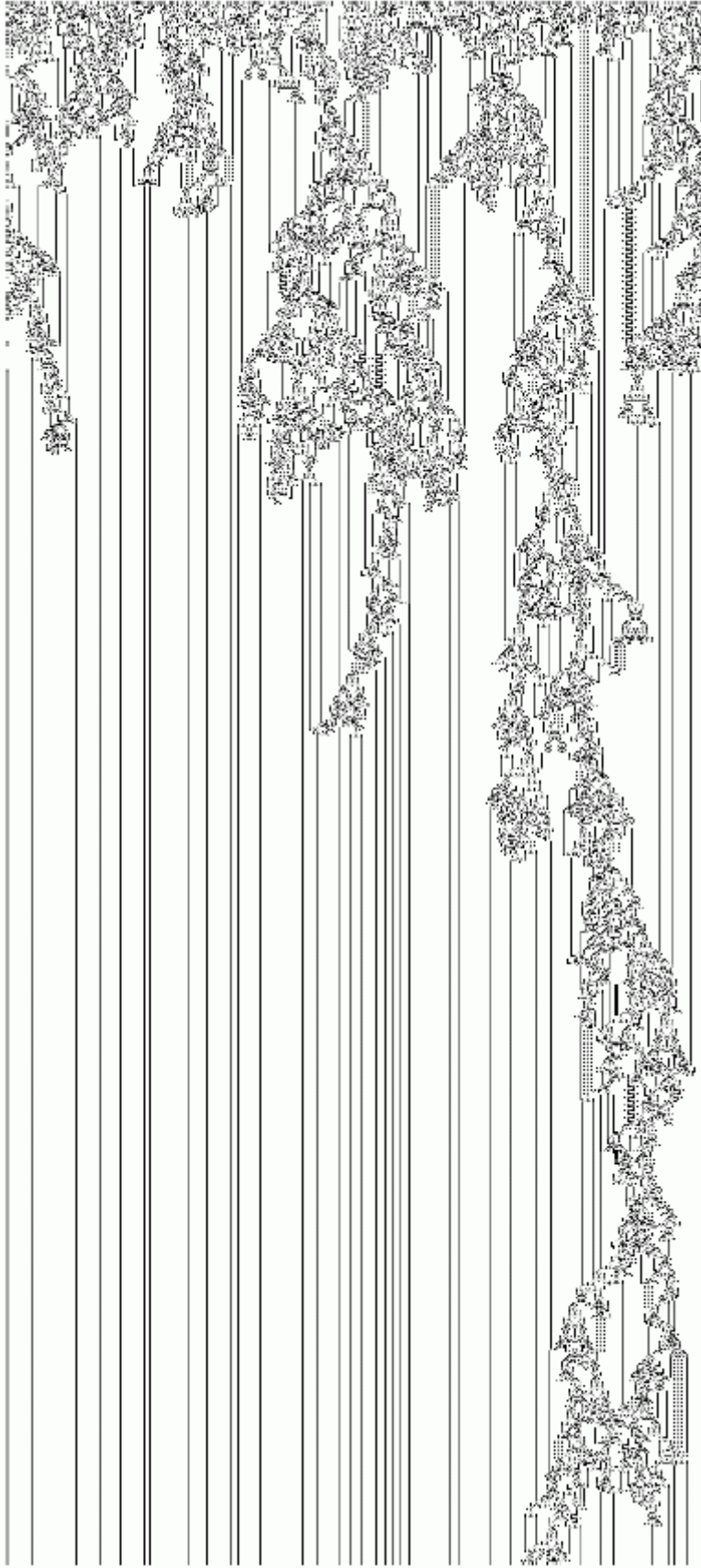
Klasse III (Code 22)



Klasse IV (Code 54)

weitere Beispiele für Klasse-IV-CA:





Klassifikation aller symmetrischen Regeln mit "quiescent state" und mit $k=2$, $r=1$ (P = peripheral, d.h. der Zustand der aktuellen Zelle selbst hat keinen Einfluss; T = totalistisch):

Rule	Classif.	Rule	Classif.	Rule	Classif.	Rule	Classif.
0	T,P,I	72	I	128	T,I	200	II
4	II	76	II	132	I	204	II
18	III	90	P,III	146	III	218	II
22	T,III	94	II	150	T,III	222	II
32	I	104	T, I	160	P, I	232	T, II
36	II	108	II	164	II	236	II
50	I/II	122	III	178	II	250	P, I
54	III	126	T,III	182	III	254	T, I

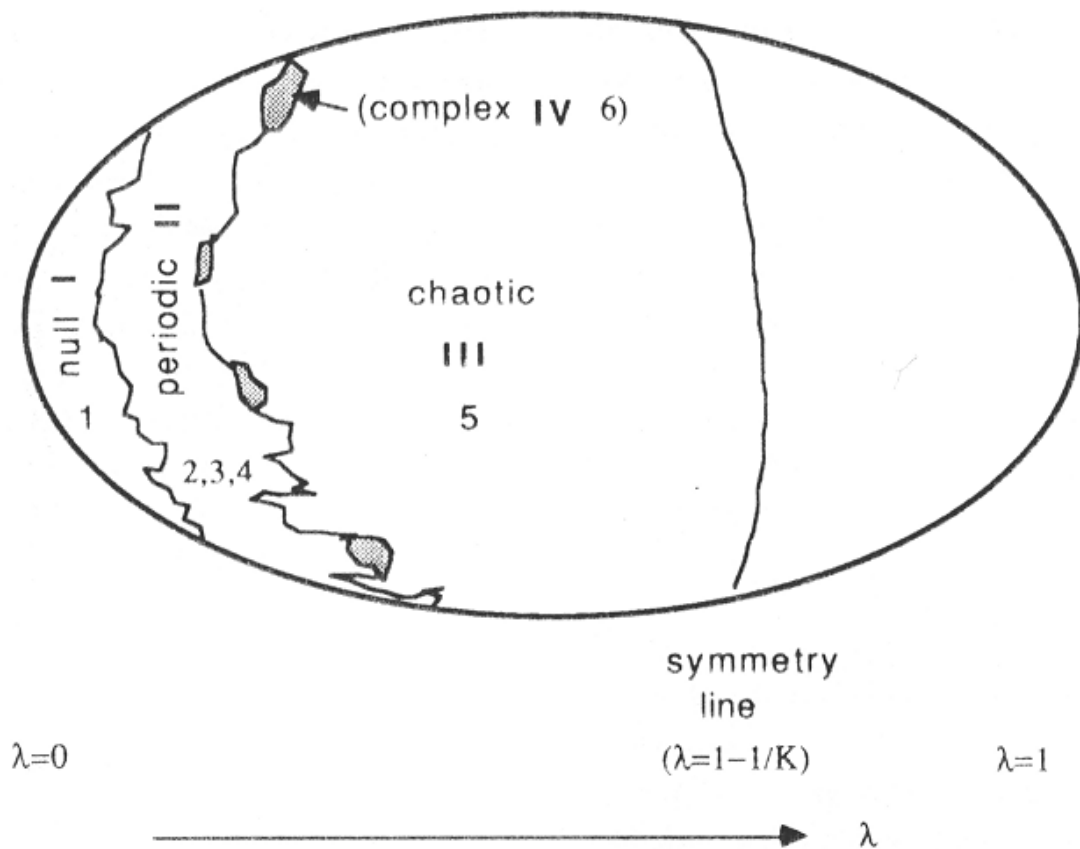
(aus Adami1998)

Interessanter als die bloße Auflistung ist die Struktur des "rule space", d.h.: welche Klassen sind "benachbart"?
Wie ändert sich das Verhalten, wenn man nur 1 Bit der Regel-Tabelle ändert?

- zunächst einmal lässt sich aus der Kenntnis der Regeln wenig über die Dynamik des CA erschließen (außer in einfachen Fällen, wo das Vorliegen von Klasse I sofort evident ist).
- Eine interessante Charakterisierung der Funktionstabelle liefert der Anteil λ der Einträge $\neq 0$:

Mit wachsendem λ gelangt man von Klasse I in der Regel zu Klasse II und III, und schließlich aus Symmetriegründen in umgekehrter Reihenfolge wieder zurück. Klasse IV ist eingestreut "zwischen" II und III.

Li, Packard & Langton (1990) skizzieren den "rule space" wie folgt:

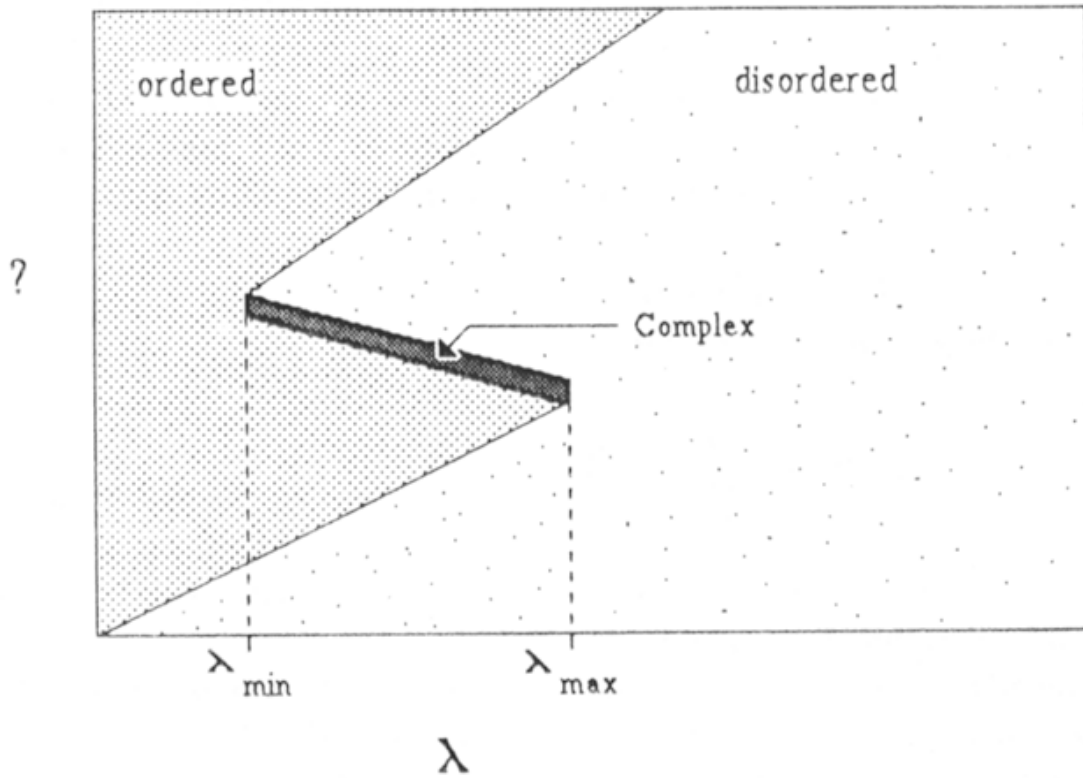


"Edge-of-Chaos-Prinzip":

die interessantesten Strukturen (mit größtem morphogenetischem und Rechen-Potenzial, d.h. Klasse IV) liegen "am Rand des Chaos", d.h. zwischen den Klassen II und III.

Analogie zu kontinuierlichen dynamischen Systemen: dort "Bifurkations-Szenario" beim Übergang ins Chaos.

Die Struktur der "Chaos-Grenze" ist jedoch bei den CA nicht ganz klar, da ein zweiter, ordnender Parameter (neben λ) nicht definiert werden konnte. Dieser bleibt hypothetisch:



5. Reaktions-Diffusions-Systeme

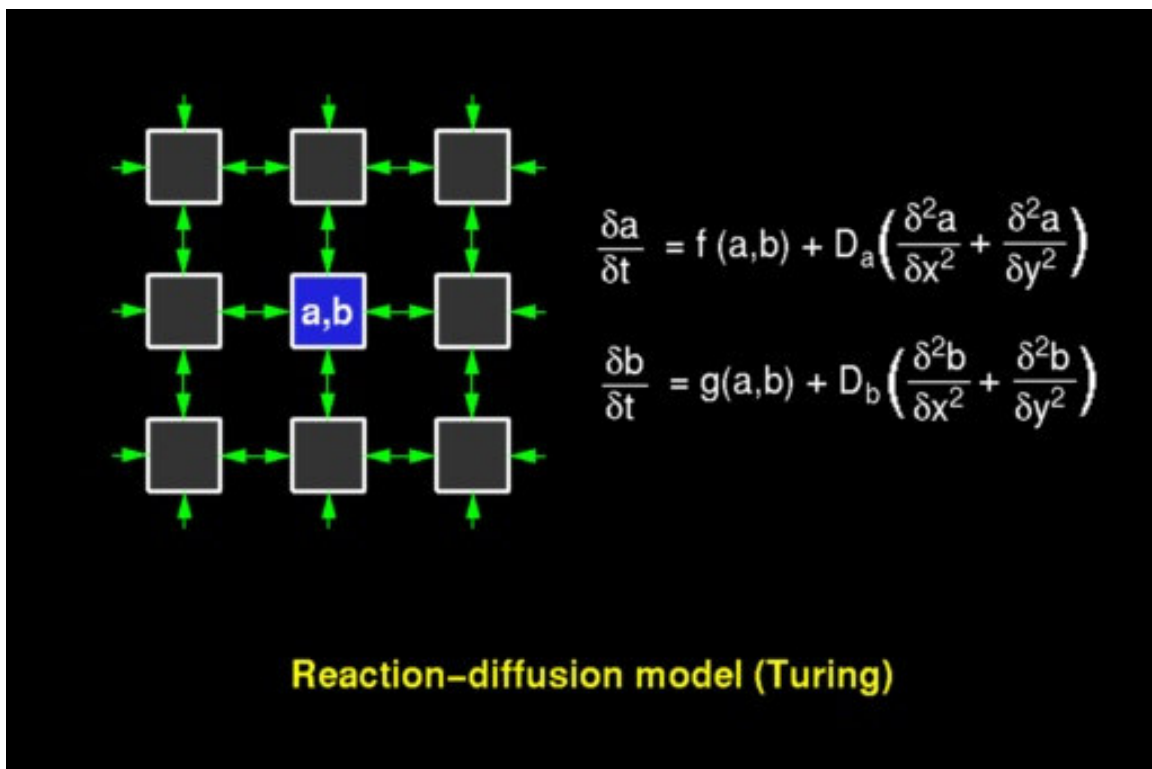
Gegenstück zu zellulären Automaten:
ebenfalls raumorientiert, mit fester Nachbarschafts-
relation und kontextsensitiven Regeln
aber: **kontinuierlich** in Raum, Zeit und Strukturen
- geht zurück auf den Ansatz von Turing zur
Morphogenese

Formalismus: partielle Differentialgleichungen

(diese müssen aber für die Realisierung der Simulation im
Rechner wieder diskretisiert werden → enger Bezug zu
zellulären Automaten!)

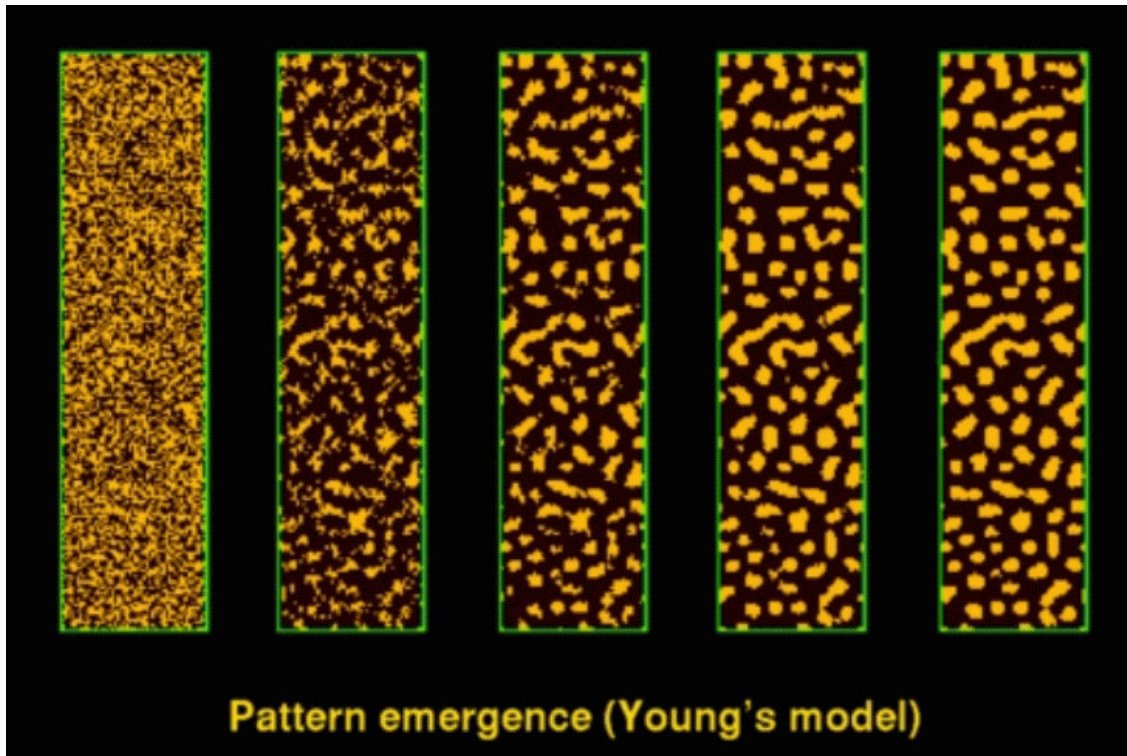
Grundideen:

- Substrate diffundieren im Raum, wechselwirken miteinander und mit Objekten
- Systeme partieller Differentialgleichungen legen die Dynamik der Substrate fest
- charakteristisch: Modellierung von (Konzentrations-) *Feldern*, -gradienten.



bei bestimmten Funktionen und Parameterkombinationen kann es zur räumlichen und zeitlichen (makroskopischen) Musterbildung kommen – auch bei homogenem Ausgangszustand! ("Symmetriebrechung")

Beispiel:



- räumliche Muster: Patches, Streifen, Zickzackmuster, Wellen...
- zeitliche Muster: Oszillationen, Bewegung von Wellenfronten, Interferenzmuster...

Entstehung von Mustern: Reaktions-Diffusions-Modelle

Zwei Substanzen reagieren in einem 2D-Medium miteinander und bewegen sich (diffundieren).

$$\frac{\partial a}{\partial t} = f(a, b) + D_a \left(\frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial y^2} \right)$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = g(a, b) + D_b \left(\frac{\partial^2 b}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 b}{\partial y^2} \right)$$

a, b – Konzentrationen der beiden Substanzen

(Turing 1952: Erklärung von Symmetriebrechung und Musterentstehung in homogenen Medien)

Erklärungsleistung von R.-D.-Modellen

- Wahl von f und g bestimmt Mustertyp und Stabilität
- Anfangsbedingungen („Keim“) bestimmen Realisierung
- Substratverbrauch durch zeitlich veränderliche f und g darstellbar

Biologische Anwendungen:

- Schneckenhäuser, Muschelschalen
- Tier„fell“zeichnungen (Leopard, Zebra, Vögel, Fische, ...)

(aus Lange 2001)

Realisierungen in der unbelebten Natur:

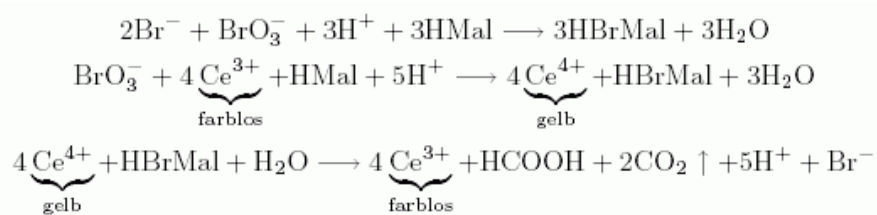
Oszillierende chemische Reaktionen

bekanntestes Beispiel:

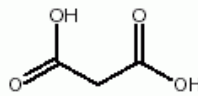
- die *Belousov-Zhabotinsky-Reaktion*

(es gibt andere Beispiele: Briggs-Rauscher-Reaktion, Bray-Liebhaftsky-Reaktion...)

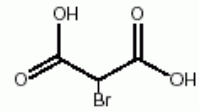
Reaktionsgleichungen:



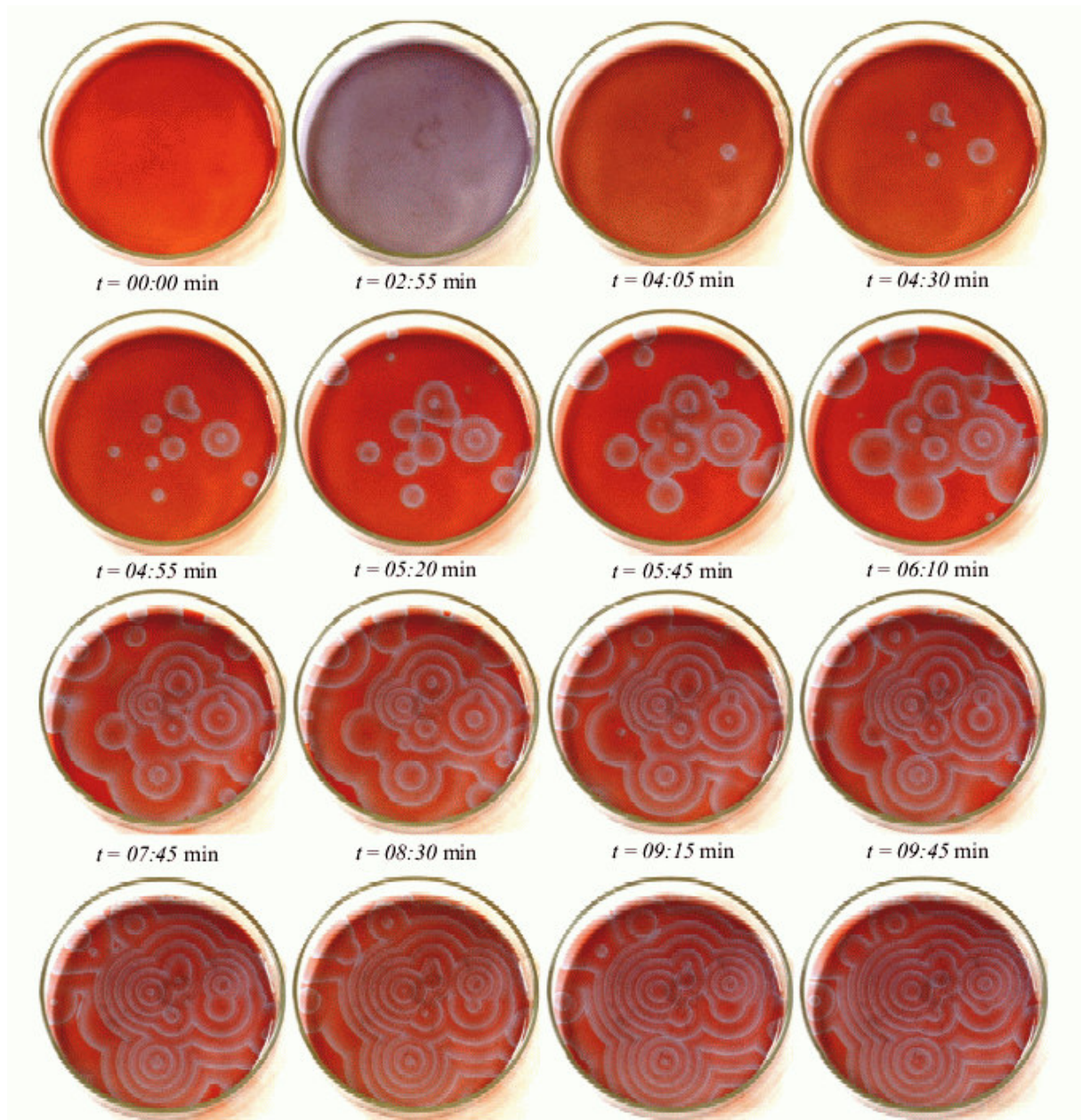
Dabei bedeutet *HMal* Malonsäure



und *HBrMal* Brommalonsäure

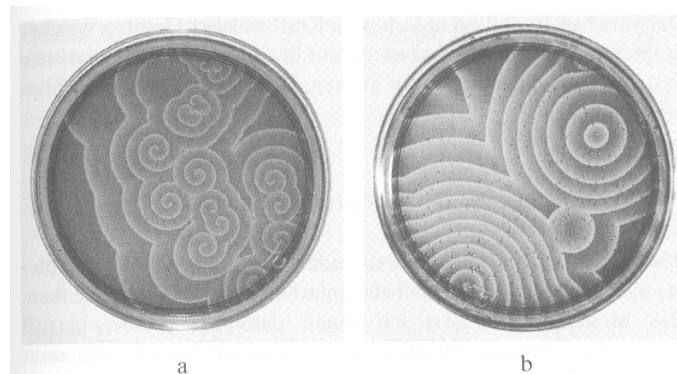


Ergebnis im Labor (zeitlicher Ablauf; Variante mit Ferroin statt Cer):



(aus Krieger 2001)

bei genauer Betrachtung lassen sich 2 "Morphotypen" von räumlichen Mustern unterscheiden: Spiralen (a) und konzentrische Kreise (b).



a

b

Anleitung zur Durchführung des Versuchs:

Geräte und Chemikalien:

Erlenmeyerkolben mit Stopfen, Kristallisier- oder Petrischale, Magnetrührer, ggf. Projektor
0,5 M Natriumbromat-Lösung, 1,5 M Malonsäure-Lösung, 5 M Schwefelsäure (halbkonzentriert!), 0,3 M Natriumbromid-Lösung, 0,01 M Ferriin-Lösung

Durchführung (räumliche Oszillation):

In einem Kolben zu 15 ml Bromat- und 3 ml Malonsäure-Lösung 2 ml Schwefelsäure und 5 ml Bromid-Lösung geben. Bei Zugabe des Bromids entsteht zunächst Brom. Den Kolben daher verschließen und so lange rühren/schütteln bis die braune Brom-Farbe wieder verschwunden ist. Erst jetzt 5 ml Ferriin-Lösung zugeben, da der Indikator sonst vom Brom zersetzt würde. Die Schale 2 - 3 mm hoch füllen und möglichst ruhig lagern. (ggf. mit Kork-Scheibchen oder Schaumstoff "abfedern") Es bilden sich meist konzentrische rote und blaue Kreise aus.

Durchführung (zeitliche Oszillation):

8 ml Bromat-Lösung, 10 ml Malonsäure-Lösung, 10 ml Schwefelsäure, 7 ml Wasser und 4 ml Bromid-Lösung zusammengeben und Gefäß verschließen. Wenn sich das Gemisch entfärbt hat (Brom abgebaut ist), 1 ml Ferriin-Lösung zugeben und den Ansatz ständig rühren. Nach kurzer Zeit beginnt die rot-blaue-Oszillation, die meist mehrere Stunden läuft.



Gefahren:

Natriumbromat wirkt brandfördernd, Malonsäure reizend, Ferriin gesundheitsschädlich. Schwefelsäure ist ätzend, das zu Beginn der Reaktion freiwerdende Brom ätzend und giftig! (Abzug!)

Entsorgung:

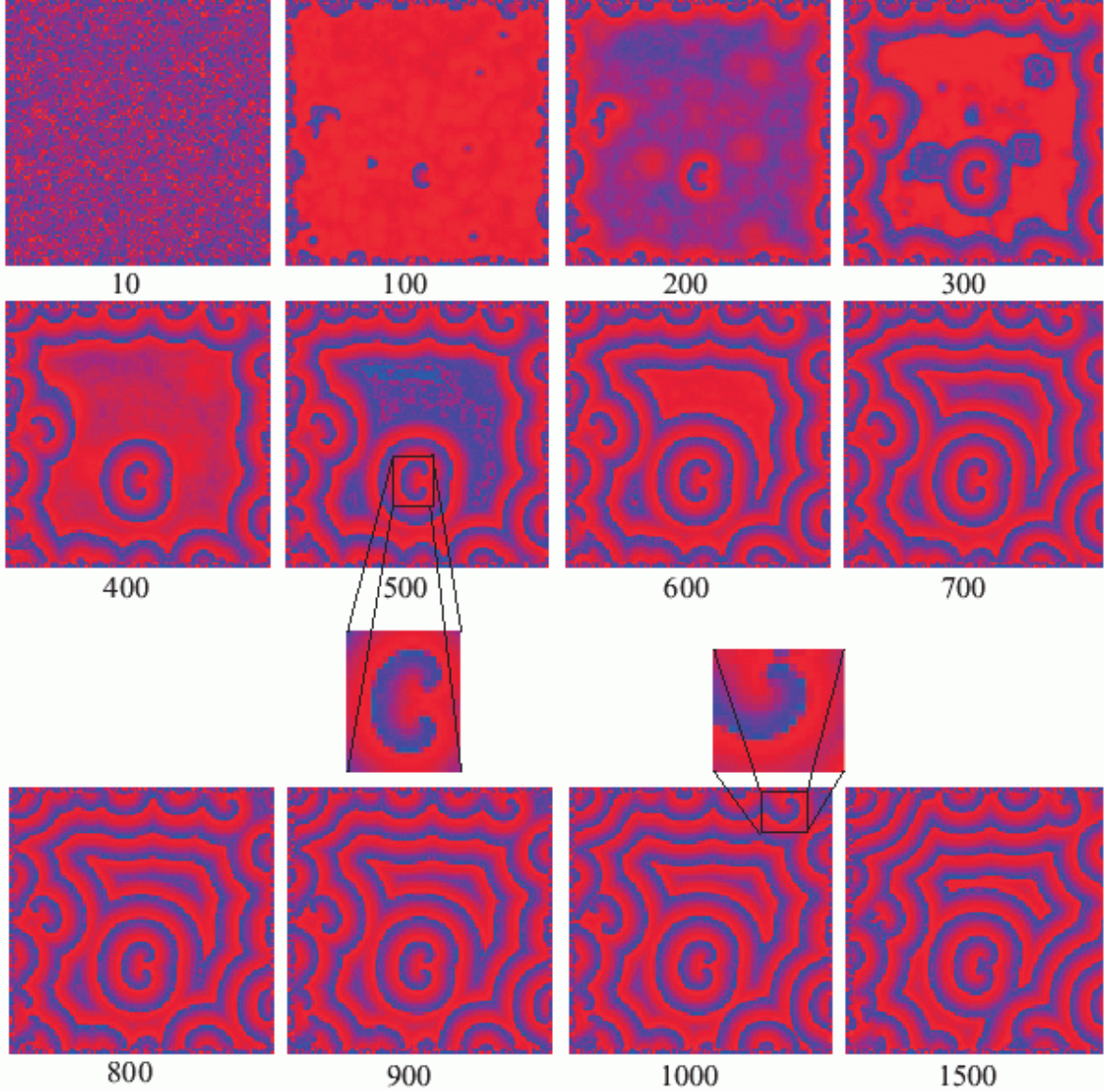
Die Lösungen als anorganische Abfälle entsorgen.

Mathematisches Modell der Reaktionskinetik (eine Variante, nach Krieger 2001):

$$\begin{aligned}\frac{\Delta X}{\Delta t} &= k_1AY + k_2AX - k_3XY - 2k_4X^2 \\ \frac{\Delta X}{\Delta t} &= -k_1AY - k_3XY + \frac{f}{2}k_5BZ \\ \frac{dz}{\Delta t} &= 2k_2AX - k_5BZ\end{aligned}$$

zur räumlichen Simulation Konstruktion eines zellulären Automaten als räumlich und zeitlich diskretisierte Version des zugrundeliegenden dynamischen Systems

Simulationsergebnisse (bei stochastischen Anfangsbedingungen):



(aus Krieger 2001)

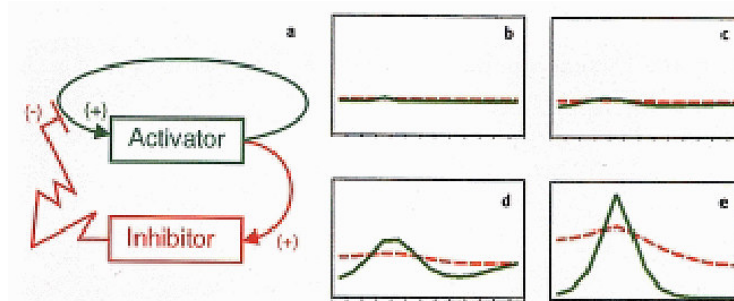
Aktivator-Inhibitor-Modelle: Spezialfall des Reaktions-Diffusions-Ansatzes

beispielhaft lässt sich hieran die Musterbildung in Reaktions-Diffusions-Modellen studieren

2 Substanzen:

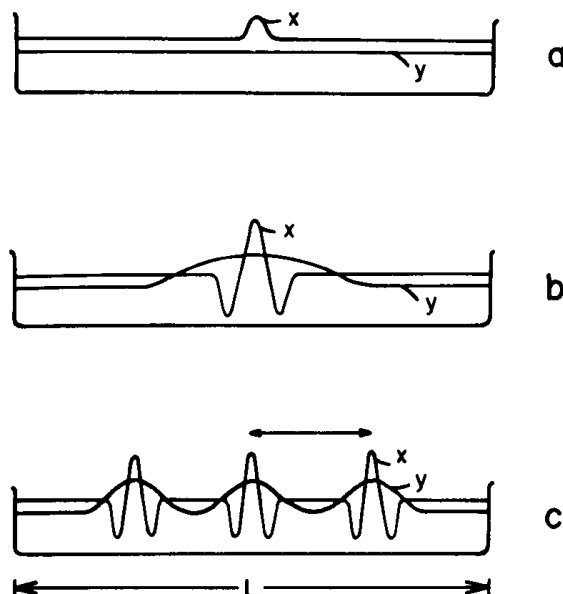
- Aktivator: fördert die eigene Entstehung ("autokatalytisch") und die des Inhibitors, fördert in visuellen Modellen zugleich die Pigmentbildung
- Inhibitor: hemmt die Bildung des Aktivators

Inhibitor diffundiert schneller als der Aktivator (größere Diffusionskonstante)



Ergebnis:

Die homogene Verteilung beider Substanzen (b) ist instabil; ein winziges lokales Anwachsen der Aktivator-Konzentration wächst weiter an (c, d), bis ein *steady state* erreicht wird, in dem sich Selbstaktivierung und Inhibition gerade ausgleichen. In größerer Entfernung vom Peak der Aktivator-Konzentration können weitere Peaks entstehen (x Aktivator, y Inhibitor):



math. Modell:

$a(x, t)$ Konzentration des Aktivators an Position x zur Zeit t

$b(x, t)$ entsprechend für den Inhibitor

r_a, r_b Abbauraten (decay rates)

D_a, D_b Diffusionskonstanten

weitere Größen: Konstanten

$$\frac{\partial a}{\partial t} = s \left(\frac{a^2}{b} + b_a \right) - r_a a + D_a \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} \quad (1)$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = s a^2 - r_b b + D_b \frac{\partial^2 b}{\partial x^2} + b_b \quad (2)$$

Wenn man in (1) den Einfluss des Inhibitors weglässt und alle Konstanten zu 1 bzw. 0 vereinfacht, so ergibt sich mit

$$\frac{\partial a}{\partial t} = a^2 - a$$

eine Differentialgleichung mit einem labilen *steady state* bei $a=1$ (jede kleinste Abweichung wird sofort verstärkt).

Für den Inhibitor hat man bei entspr. Vereinfachung:

$$\frac{\partial b}{\partial t} = a^2 - b$$

\Rightarrow *steady state* bei $b = a^2$

Wenn man die Inhibitorkonzentration im *steady state* annimmt und die Wirkung des Inhibitors auf a jetzt einbezieht, bekommt man:

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \frac{a^2}{b} - a \approx \frac{a^2}{a^2} - a = 1 - a$$

und dies charakterisiert einen *steady state* bei $a=1$ mit *negativem feedback* (Ableitung hängt von $-a$ ab), d.h. durch die Berücksichtigung des Inhibitors ist der *steady state* nun *stabil!*

bei Einbeziehung der Raumdimension und der Diffusion:
stabile räumliche Muster

Zur Simulation werden die Ableitungen durch Differenzen
approximiert:

$$\frac{\partial a}{\partial t}(x, t) \approx a_i(t+1) - a_i(t),$$

$$\frac{\partial a}{\partial x}(x, t) \approx a_{i+1}(t) - a_i(t), \text{ and}$$

$$\frac{\partial^2 a}{\partial x^2}(x, t) \approx [a_{i+1}(t) - a_i(t)] - [a_i(t) - a_{i-1}(t)].$$

Einsetzen in (1) und (2) ergibt:

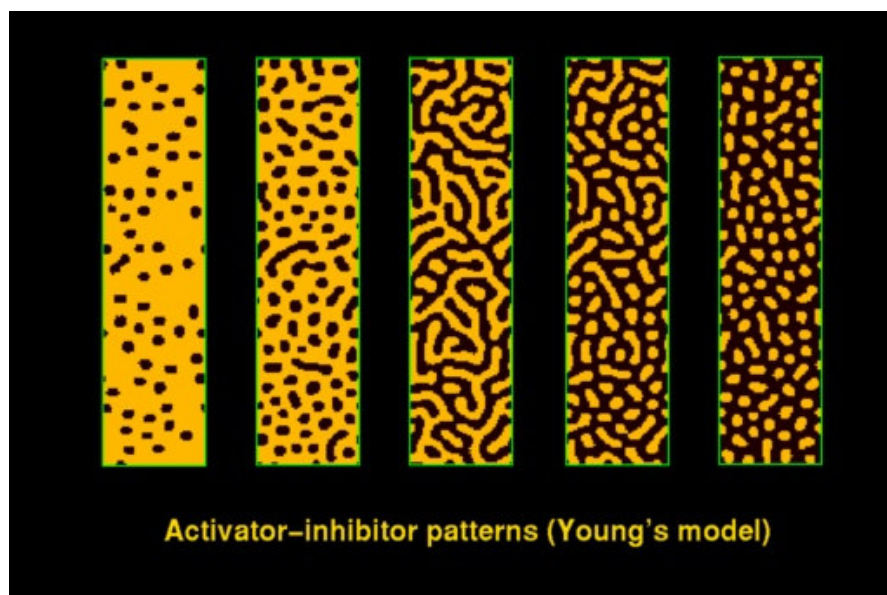
$$a_i(t+1) = a_i(t) + s \left(\frac{a_i^2(t)}{b_i(t)} + b_a \right) - r_a a_i(t) + D_a (a_{i-1}(t) + a_{i+1}(t) - 2a_i(t))$$

$$b_i(t+1) = b_i(t) + s a_i^2(t) - r_b b_i(t) + D_b (b_{i-1}(t) + b_{i+1}(t) - 2a_i(t)) + b_b$$

Diese Gleichungen kann man als Regeln eines 1D-Zellular-
automaten mit 2 Variablen für jede Zelle ansehen

- allerdings sind die Variablen reellwertig – Abweichung von der
Voraussetzung diskreter Zustände

Simulationsergebnisse im 2-dim. Fall:

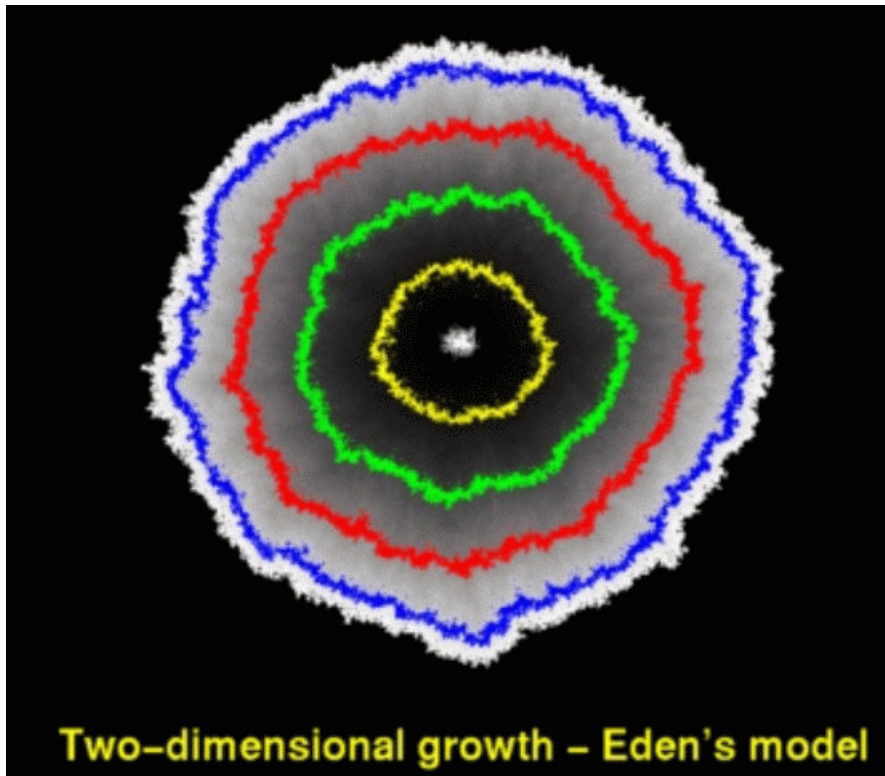


weiterer Spezialfall:

Der Fall wachsenden Substrats: Diffusions-limitierte Aggregation (DLA)

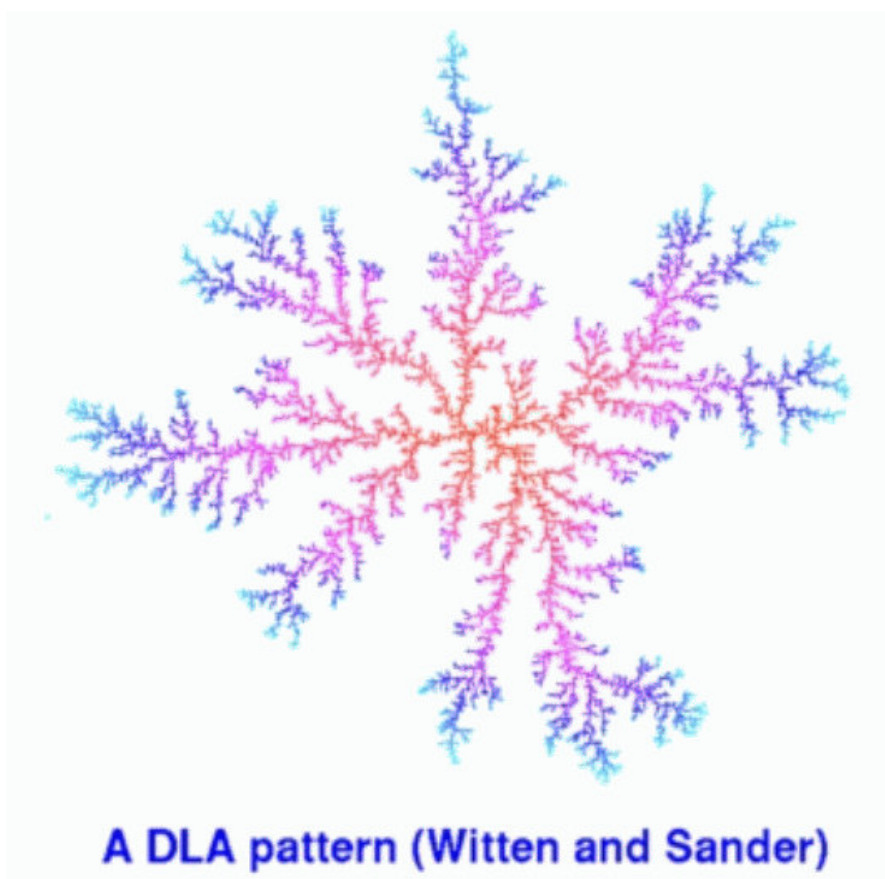
- Edens Modell (1960)
 - beginnt mit einem Teilchen in der Mitte
 - zufällige Position am jeweiligen Rand wird ausgewählt
 - neues Teilchen wird dort platziert
- Witten und Sander (1983)
 - beginnt mit einem Teilchen in der Mitte (Keim)
 - neue Teilchen diffundieren zufällig auf der Struktur
 - falls sie den aktuellen Rand treffen, haften sie dort („chemische Reaktion“)

Das soll einen Unterschied machen?



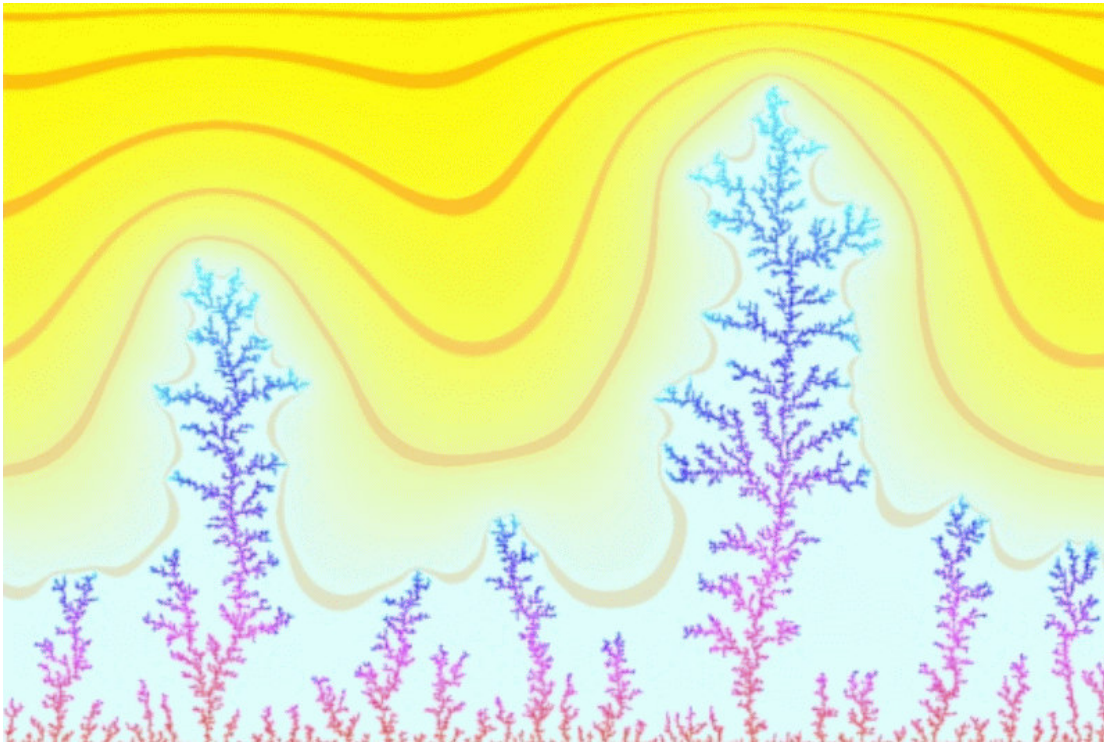
man spricht bei Eden's Modell auch von *akkretivem Wachstum*.

- Die zweite Variante des Ansatzes:



(n. Lange 2001, Negativ)

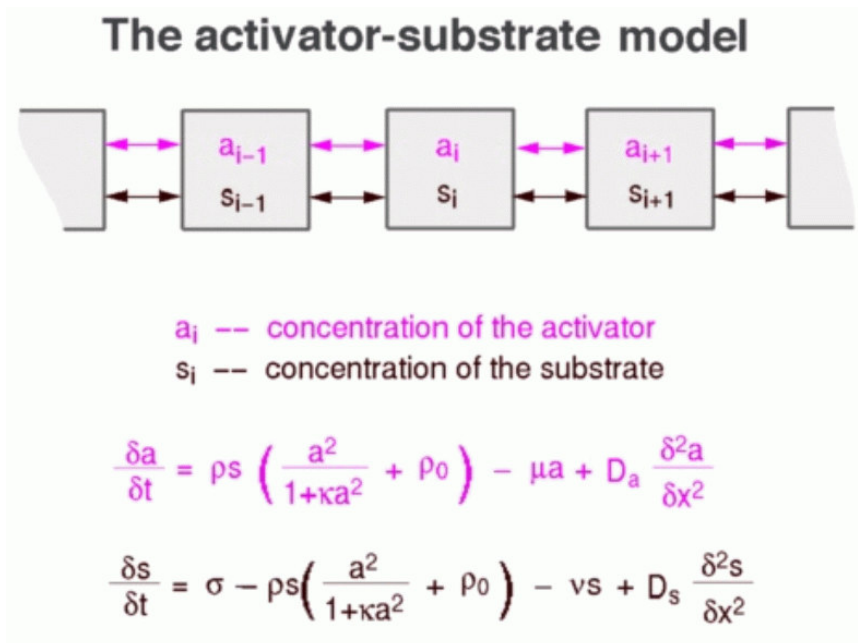
von einer Linie ausgehendes DLA-Muster:



3D-Variante: simuliert Wachstum von Meeresschwämmen
(Modellvorstellung: Wachstum in Richtung höchster Nährstoffkonzentration) – Kaandorp 1992



Aktivator-Substrat-Modell (1-dimensionaler Fall):

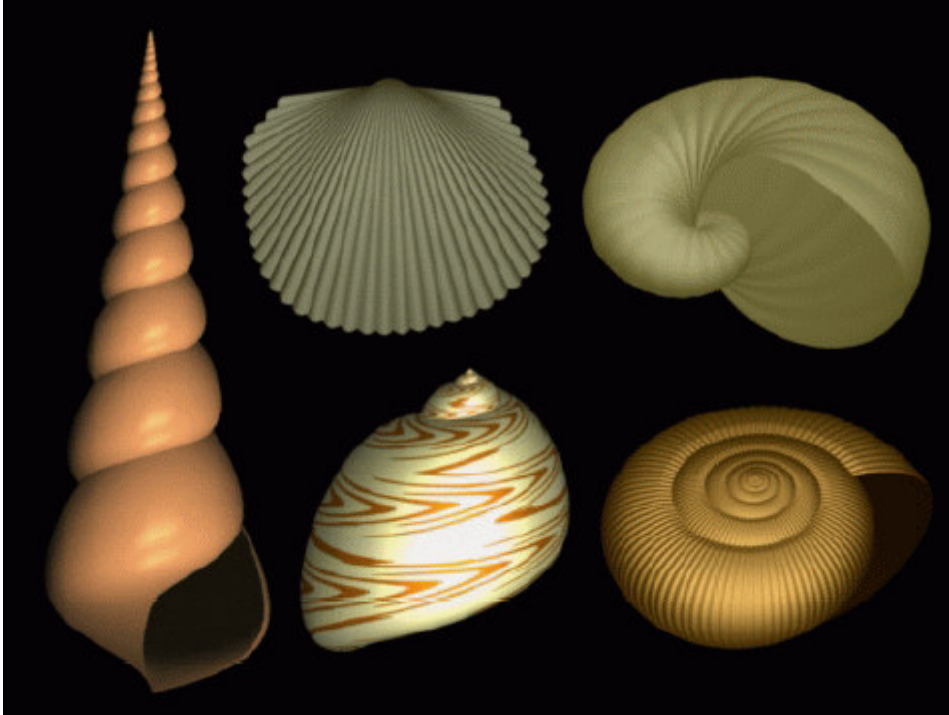


Anwendung:

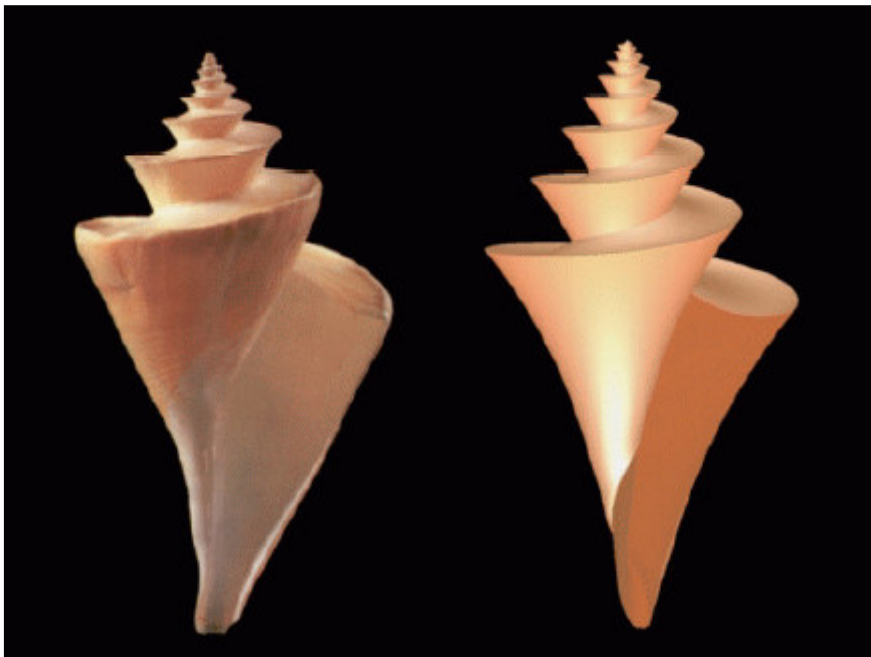


im linken Bild läuft die Zeit von oben nach unten (wie bei 1D-Zellularautomaten) – im rechten Bild ist das Streifenmuster lediglich geometrisch transformiert

Anwendung: Modellierung von Schneckenschalen (Fowler et al. 1992)



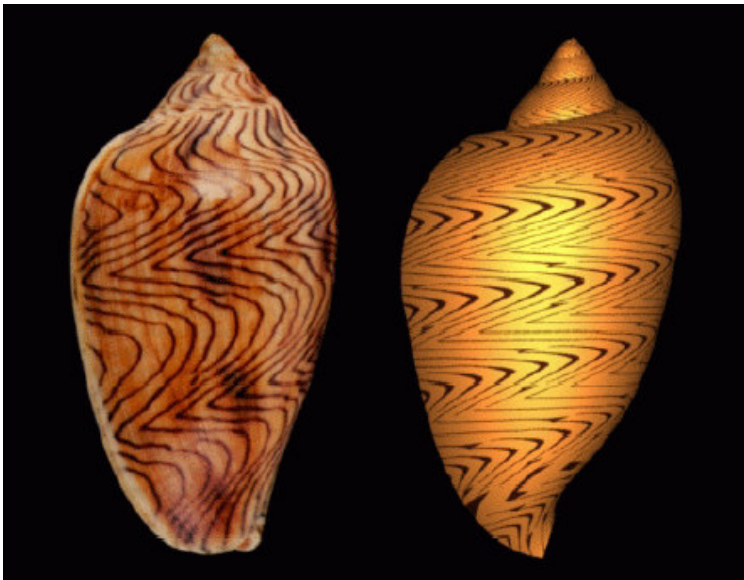
Simulationsergebnisse, aus Fowler et al. 1992



links: Foto, rechts: Simulation



links: Foto, Mitte und rechts: Simulationen



links: Foto, rechts: Simulation



links: Foto, rechts: Simulation



links: Foto, rechts: Simulation



links: Foto, rechts: Simulation