

УДК 621.391.1:0047

## Стохастическое клеточно-автоматное моделирование колебаний и автоволн в реакционно-диффузионных системах\*

О.Л. Бандман, А.Е. Киреева

Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук, просп. Акад. М.А. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090

E-mails: bandman@ssd.sccc.ru (Бандман О.Л.), kireeva@ssd.sccc.ru (Киреева А.Е.)

**Бандман О.Л., Киреева А.Е.** Стохастическое клеточно-автоматное моделирование колебаний и автоволн в реакционно-диффузионных системах // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2015. — Т. 18, № 3. — С. 255–274.

В статье обобщен опыт исследования стохастических клеточно-автоматных моделей образования устойчивых колебаний и автоволн в активных средах. В результате сформировалось понятие стохастического клеточного автомата (КА), который соответствует асинхронным КА с вероятностными правилами переходов. В статье дается формальное представление стохастического КА и стохастической КА-модели. Описаны свойства КА-моделей и методы их синтеза по заданному набору элементарных физических и химических превращений. Возможности моделирования автоволновых и колебательных процессов показаны на примере реакции окисления монооксида углерода на платиновом катализаторе с перестройкой структуры его поверхности. Моделирование позволило выявить области значений параметров реакции, при которых наблюдаются устойчивые колебания плотности реагентов, и наблюдать автоволны на поверхности платины. Особое внимание уделено обеспечению высокой эффективности параллельной реализации алгоритма функционирования стохастического КА, которое требует предварительного преобразования асинхронного режима в блочно-синхронный и обоснования его эквивалентности асинхронному. Последнее проделано для исследуемой КА-модели реакции путем проведения сравнительного статистического анализа результатов моделирования.

**DOI:** 10.15372/SJNM20150302

**Ключевые слова:** компьютерное моделирование, стохастический клеточный автомат, асинхронный клеточный автомат, параллельные вычисления, каталитические реакции, автоволны.

**Bandman O.L., Kireeva A.E.** Stochastic cellular automata simulation of oscillations and autowaves in reaction-diffusion systems // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2015. — Vol. 18, № 3. — P. 255–274.

In this paper, experience in the conducted investigation of the stochastic cellular automata models of forming stable oscillations and autowaves in active media is generalized. As a result, the concept of stochastic cellular automaton (CA), corresponding to the asynchronous CA with probabilistic transition rules, is formulated. The formal notions of a stochastic CA and a stochastic CA model are given. Properties of the CA models and methods of their synthesis, using a specified set of elementary physical and chemical transformations, are described. The possibility of the autowave and oscillatory processes simulation is shown on an example of the carbon monoxide oxidation reaction on the platinum catalyst with reconstructing its surface structure. The CA-simulation enabled to reveal the range of reaction parameters values, at which stable oscillations of the reagents concentration occur, and to observe autowaves over the platinum surface. Considerable attention has been given to a high efficiency of the stochastic CA parallel implementation, which demands preliminary transformation of the asynchronous mode to the block-synchronous one with validation of its equivalence to the asynchronous mode. The latter is done for the investigated reaction CA model by means of the comparative statistical analysis of the simulation results.

**Keywords:** stochastic cellular automata, computer simulation, asynchronous cellular automata, parallel calculations, catalytic reactions, autowaves.

---

\*Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 14-01-31425 мол-а), Интеграционного проекта СО РАН (№ ИП-47-2012), Программы Президиума РАН (№ 15-9-2014).

## 1. Введение

Большинство явлений окружающего нас мира нелинейны и диссипативны. Их математические описания, опирающиеся на законы сохранения массы и энергии, и, тем более, попытки линеаризации представляемых зависимостей допустимы для небольшого количества естественных процессов. Более того, математические модели, требующие непрерывности не только описываемых зависимостей, но и их производных, также бывают бессильны для описания явлений разрывного вида, таких как химические превращения, биологическая жизнь и смерть, некоторые экологические и социальные процессы. Начало их математического моделирования заложено в работах Колмогорова [1] и Фишера [2] (1937 год), посвященных исследованию распространения устойчивого фронта. Затем (в 1950-х годах) появилась статья Тьюринга [3], положившая начало изучению процессов формирования устойчивых пространственных структур, а также сообщение Белоусова [4] о волновых процессах в химической реакции. Сообщение Белоусова было затем (в 1970 году) подтверждено и обосновано Жаботинским [5], что вызвало поток исследований автоволн в химических реакциях. И, наконец, фундаментальная монография Николиса и Пригожина [6] о процессах самоорганизации в неравновесных системах сформировала научное направление, которое называется иногда “неравновесной пространственной динамикой”, иногда “пространственно-распределенными диссипативными процессами”, иногда “динамикой реакционно-диффузионных систем”. В западной литературе в последнем десятилетии диссипативные системы, обладающие “сложным поведением”, т. е. способные к самоорганизации и внезапному изменению характера поведения (эмерджентности), стали называть “сложными системами” (“complex systems” [7]). Следуя современным и наиболее близким по духу исследованиям В.К. Ванана [8, 9] и опираясь на опыт моделирования химических реакций [10–12], мы будем использовать термин “реакционно-диффузионные процессы”.

Во всех перечисленных выше работах использовались дифференциальные уравнения в частных производных и аналитические методы их решений. Это требовало больших усилий и изощренных способов анализа уравнений, а в результате давало мало информации. Другой подход к исследованию реакционно-диффузионных процессов основан на качественной теории нелинейных процессов [13] (1970-е годы), которая позволила изучать поведенческие свойства реакционно-диффузионных систем путем построения их фазовых портретов по заданным дифференциальным уравнениям. Это существенно повысило возможности анализа динамических свойств моделируемой системы и позволило исследовать области значений параметров, при которых система приходит в устойчивый режим того или иного типа. Однако применение качественной теории ограничено двумя факторами: во-первых, результат не дает количественных решений и, во-вторых, количество параметров, от которых зависит поведение системы, может быть не более трех, так как построить фазовый портрет в пространстве большей размерности невозможно.

Развитие вычислительных методов численного решения дифференциальных уравнений не оказало существенного влияния на решение проблемы моделирования реакционно-диффузионных процессов. Более того, решение задач больших размеров (много неизвестных и большие размеры области моделирования) на суперкомпьютерах связано с трудностью их распараллеливания.

Кроме того, потребность постичь все тонкости механизмов сложного поведения реакционно-диффузионных процессов вызывает неудовлетворенность математическим описанием процесса в виде дифференциального уравнения в частных производных, полученного путем аппроксимации методом согласованного поля (mean field approximation) [14] или путем преобразования схемы механизма химических реакций с добавлением диф-

фузионного члена. Полученные путем численного решения пространственные конфигурации часто оказываются размытыми, поскольку оперируют осредненными значениями концентраций, и не отображают влияние мелких деталей. Устранение этого недостатка требует уменьшения шагов по времени и по пространству, что при неявных схемах дискретизации приводит к вычислительной неустойчивости, а при явных схемах — к замедлению счета. Еще одна проблема, вытекающая из природы традиционного моделирования, состоит в том, что в них не учитываются флуктуации в моделируемых процессах, которые в природе существуют.

Перечисленные проблемы компьютерного моделирования реакционно-диффузионных процессов, вызванные свойствами непрерывности и детерминированности традиционных моделей, побудили к поиску дискретных моделей, удовлетворяющих требованиям: во-первых, по возможности полно отображать все свойства процесса и, во-вторых, позволяющим просто и эффективно реализовать модель на современном суперкомпьютере. В литературе можно найти несколько десятков дискретных методов моделирования реакционно-диффузионных процессов. Хороший обзор с глубоким их анализом дан в [9]. В большинстве своем они являются расширениями или модификациями классического клеточного автомата фон-Неймана [15], который был предложен как модель биологического самовоспроизведения, но затем, пройдя несколько стадий развития [16], стал восприниматься как модель пространственной динамики [17, 18], которая ни в коем случае не является аппроксимацией дифференциального уравнения в частных производных, а представляет альтернативную модель.

Интуитивно классический клеточный автомат понимается как дискретное пространство, разделенное на клетки, каждая клетка имеет имя (обычно это координаты пространства) и состояние “ноль” или “единица”, которое может быть изменено на значение функции перехода от состояний клеток окрестности и своего собственного. Функция перехода для всех клеток одинакова. Функционирование КА происходит в дискретном времени следующим образом. В момент  $t$  во всех клетках вычисляется значение функции перехода, и затем все клетки одновременно (синхронно) изменяют свое состояние на это значение, что означает изменение глобального состояния КА. Последовательность таких переходов имитирует пространственную динамику системы (называемую “эволюцией”). Изучение эволюционных способностей КА [17, 18, 21] показало, что КА способен моделировать машину Тьюринга [22], т. е. является универсальной моделью вычислений. Стали расширяться области применения КА и разрабатываться методы КА-моделирования [16] разных естественных явлений: течения вязкой жидкости [23], фазовых превращений [24], распространения эпидемий [25], самоорганизации в природе [26, 27]. Для типичных физических явлений (диффузия [19] и поток вязкой жидкости [23]) были доказаны соответствия предложенных КА-моделей их представлениям в виде дифференциальных уравнений в частных производных. Естественным образом понятие КА-модели модифицировалось, подстраиваясь под моделируемое явление. Так в моделях потока жидкости (Lattice-Gas model) состояниями клеток являются булевы векторы, а функции перехода применяются с заданными вероятностями, в моделях диффузии функции перехода вычисляются в последовательно и случайно (т. е. асинхронно) выбираемой клетке, в модели типа хищник–жертва [26] состояниями служат вещественные числа и так далее.

Для моделирования реакционно-диффузионных процессов наиболее подходящей модификацией оказались стохастические КА, которые включили в себя используемые химиками разновидности метода Монте-Карло [28, 29]. Такие КА оказались полезными для выявления свойств гетерогенных поверхностных реакций. В частности, именно эти методы позволили оценить область значений параметров реакции, в которой возникают

автоколебания, и наблюдать характер распространения автоволн. Особенно важно, что использование развитых методов КА-моделирования позволило решить задачу распараллеливания стохастических КА путем преобразования КА с асинхронным режимом к эквивалентному КА с блочно-синхронным режимом [36] и показать, что для реакционно-диффузионных КА такое преобразование допустимо.

Излагаемый далее материал посвящен определению и применению стохастической КА-модели. Статья имеет 3 части. В первой дается формальное определение стохастического КА, условия его корректного поведения и блочно-синхронное преобразование для эффективного распараллеливания. Вторая часть посвящена применению стохастического КА к моделированию реакции окисления СО на платине. В третьей части описывается способ распараллеливания и приводятся результаты параллельной реализации на кластере МВС-100К МСЦ РАН.

## 2. Стохастическая КА-модель реакционно-диффузионного процесса

### 2.1. Стохастический КА

Формально стохастический КА задается тройкой понятий  $\aleph_\gamma = \langle A, X, \Theta \rangle$ , где  $A$  — *алфавит состояний клеток*, т. е. множество символов или чисел;  $X = \{\mathbf{x}_k | k = 1, \dots, N\}$  — *множество имен клеток*, которые часто задаются векторами координат дискретного пространства конечных размеров;  $\Theta$  — *локальный оператор*, определяющий функционирование стохастического КА; индекс  $\gamma$  указывает на асинхронный характер функционирования КА. Пара  $(u, \mathbf{x})$ , где  $u \in A$ ,  $\mathbf{x} \in X$ , называется *клеткой*. Множество клеток  $\Omega = \{(u_k, \mathbf{x}_k) | u_k \in A, \mathbf{x}_k \in X\}$ , где  $\forall (\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_l) \mathbf{x}_k \neq \mathbf{x}_l, \mathbf{x}_k, \mathbf{x}_l \in X$ , называется *клеточным массивом*, а перечень состояний клеток  $\Omega_A = (u_1, u_2, \dots, u_{|X|})$  — *глобальным состоянием* стохастического КА.

В пространстве  $X$  определены подмножества имен клеток, называемые *шаблонами*:

$$T_n(\mathbf{x}) = \{\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{x} + \mathbf{a}_{n-1}\}, \quad (1)$$

где  $\mathbf{a}_j$  — вектор смещения  $j$ -й координаты  $\mathbf{x}$ ,  $n = |T(\mathbf{x})|$ . Клетки с именами из  $T_n(\mathbf{x})$  образуют *локальную конфигурацию*

$$S(\mathbf{x}) = \{(u_0, \mathbf{x}), (u_1, \mathbf{x} + \mathbf{a}_1), \dots, (u_{n-1}, \mathbf{x} + \mathbf{a}_{n-1})\} \quad (2)$$

с определяющим шаблоном  $T_n(\mathbf{x})$ .

Функционирование стохастического КА задается *локальным оператором*

$$\Theta(\mathbf{x}) = \Phi(\theta_1(\mathbf{x}), \dots, \theta_m(\mathbf{x})), \quad (3)$$

который является композицией нескольких подстановок [30]. Подстановка

$$\theta(\mathbf{x}) : S(\mathbf{x}) \rightarrow S'(\mathbf{x}) \quad (4)$$

определяет смену состояний в окружении клетки. Определяющие шаблоны ее правой и левой частей находятся в соотношении  $T'_{n'}(\mathbf{x}) \subseteq T_n(\mathbf{x})$ , причем первые  $n' = |T'(\mathbf{x})|$  клеток в локальной конфигурации составляют *базу* подстановки, а остальные  $(n - n')$  клеток играют роль *контекста* [31].

Подстановка применима к клетке  $(a, \mathbf{x}) \in \Omega$ , если  $S(a, \mathbf{x}) \subseteq \Omega$ . Применение  $\theta(\mathbf{x})$  сводится к замене состояний базовых клеток  $(u_j, \mathbf{x} + \mathbf{a}_j) \in S'(\mathbf{x})$  на новые значения

$$u'_j = f_j(u_1, \dots, u_n), \quad n = |S(\mathbf{x})|, \quad j = 0, \dots, |S'(\mathbf{x})|, \quad (5)$$

где  $f_j(u_1, \dots, u_n)$  — функция перехода. Контекстные клетки не меняют своих состояний при применении подстановки (4).

В локальном операторе стохастического КА (3) обычно используются следующие способы композиции подстановок: суперпозиция, случайный выбор одной из подстановок, применение подстановок в случайном порядке [32].

Применение локального оператора  $\Theta(\mathbf{x})$  к одной клетке  $\mathbf{x} \in X$  происходит за один временной шаг. Применение  $\Theta(\mathbf{x})$  ко всем клеткам  $\mathbf{x} \in X$  называется *глобальным оператором* и обозначается  $\Theta(X)$ . Применение  $\Theta(X)$  изменяет глобальное состояние  $\Omega(t)$  на новое  $\Omega(t+1)$ . Такое изменение составляет *итерацию*. Последовательность итераций  $\Omega^* = \Omega(0), \dots, \Omega(t), \dots, \Omega(t_{\text{fin}})$  называется *эволюцией*.

Стохастический КА предполагает *асинхронный режим* функционирования, т. е. следующий алгоритм, на каждом  $i$ -м шаге которого выполняется следующее:

- 1) с вероятностью  $p = 1/|X|$  выбирается клетка  $(u, \mathbf{x}_i) \in \Omega_i$ ;
- 2) к выбранной клетке применяется локальный оператор  $\Theta(\mathbf{x}_i)$ , в результате чего состояния базовых клеток  $(u', \mathbf{x}) \in S'(\mathbf{x})$  применимых постановок  $\theta \in \Theta$  немедленно меняются на новые значения, изменяя  $\Omega_i$  на  $\Omega_{i+1}$ .

Условно принимается, что  $|X|$  шагов этого алгоритма составляет одну итерацию. Такое соглашение удобно для сравнения синхронного и асинхронного режимов и соответствует понятию одного шага решеточной модели Монте-Карло [29].

Фактически функционирование стохастического КА может рассматриваться, как эволюция двухуровневой цепи Маркова. Верхний уровень составляет однородная цепь Маркова с пространством состояний, равным множеству клеток  $X$ , что соответствует пункту 1) приведенного выше алгоритма. На каждом  $i$ -м шаге работы этой цепи включается неоднородная цепь Маркова нижнего уровня. Эта сеть эволюционирует как скрытая сеть [33] с пространством состояний, равным множеству вероятностных подстановок  $\{\theta_1, \dots, \theta_m\}$  и множеством наблюдаемых состояний, равных значениям функций перехода этих подстановок, что соответствует пункту 2) алгоритма.

## 2.2. Условия корректности и проблема параллельной реализации

Применение локального оператора ко всем клеткам  $\Omega(t)$  должно удовлетворять двум условиям корректности [34]. Первое условие требует, чтобы при переходе из одного глобального состояния в другое не произошло “состязаний” между двумя подстановками по изменению состояния одной и той же клетки. Формально это условие выражается в том, что базы подстановок (4) должны иметь непересекающиеся определяющие шаблоны (1):

$$T'_k(\mathbf{x}) \cap T'_m(\mathbf{y}) = \emptyset \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in X, \quad \forall k, m \in \{1, \dots, l\}, \quad l = |\Theta(\mathbf{x})|. \quad (6)$$

Следует отметить, что в (6) допускается  $m = k$ .

Второе условие корректности требует, чтобы локальный оператор на каждой итерации мог быть применен к каждой клетке клеточного массива, что называется в теории параллельных процессов *справедливостью* [34]. Для стохастических КА это условие называется *равноправием* и формулируется в виде требования того, чтобы вероятность выбора любой клетки на любом шаге была равна вероятности выбора любой другой клетки на любом другом шаге [35].

В стохастическом КА при последовательной реализации условие (6) никаких ограничений не накладывает, поскольку на каждом шаге применяется только одна подстановка. Это условие также не нарушается, если допустить одновременное обновление только тех

клеток  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{y}$ , для которых (6) справедливо. На этом положении основан эффективный метод параллельной реализации асинхронных КА [36], состоящий в следующем. Каждая итерация, состоящая из  $|X|$  шагов применения  $\Theta(\mathbf{x})$  к случайно выбранным  $\mathbf{x} \in X$ , разбивается на несколько синхронных *этапов* таким образом, чтобы на каждом этапе  $\Theta(\mathbf{x})$  применялся к подмассиву  $\Omega_k(t)$ ,  $k = 1, \dots, |B|$ , в котором не содержится ни одной пары клеток, для которых нарушается условие (6).

### 2.3. Преобразование стохастического КА в блочно-синхронный

Алгоритм преобразования стохастического КА  $\aleph_\gamma = \langle A, X, \Theta_\gamma \rangle$  в блочно-синхронный  $\aleph_\beta = \langle A, X, \Theta_\beta \rangle$  выполняется следующим образом.

1. На множестве  $X$  определяется блок  $B(\mathbf{x})$ , такой что

$$B(\mathbf{x}) \supseteq \bigcup_{i=1}^n T_i, \quad n = |\Theta|. \quad (7)$$

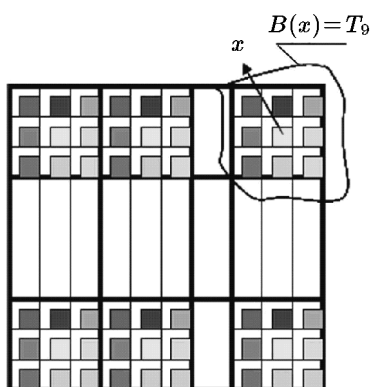
Стремление иметь наименьшее число этапов приводит к выбору

$$B(\mathbf{x}) = \bigcup_{i=1}^n T_i.$$

2. На множестве имен  $X$  строится порождаемое шаблоном  $B(\mathbf{x})$  разбиение на подмножества (рис. 1):

$$\Pi = \{\Pi_1, \Pi_2, \dots, \Pi_n \mid \forall \Pi_k \in \Pi : |\Pi_k| = |X|/|B(\mathbf{x})|\}. \quad (8)$$

3. Итерация разбивается на  $n$  этапов. На каждом  $k$ -м этапе из разбиения  $\Pi$  случайно равновероятно выбирается  $\Pi_j$  и к подмассиву  $\Omega_j$  синхронно применяется локальный оператор  $\Theta(\mathbf{x})$ .



**Рис. 1.** Построение блочно-синхронного разбиения клеточного массива на подмассивы для блока  $B(\mathbf{x})$  с размерами  $3 \times 3$ . Клетки одного и того же уровня серого цвета составляют подмассив разбиения

Очевидно, что при одновременном обновлении двух и более клеток может быть нарушено второе условие корректности: равное право любой клетки на ее выбор для обновления, что может исказить эволюцию исходного стохастического КА. Факты такого искажения приведены в [35].

С другой стороны, успешное применение блочно-синхронного преобразования для моделирования процессов эпитаксиального роста кристаллов [36] дает основания полагать,

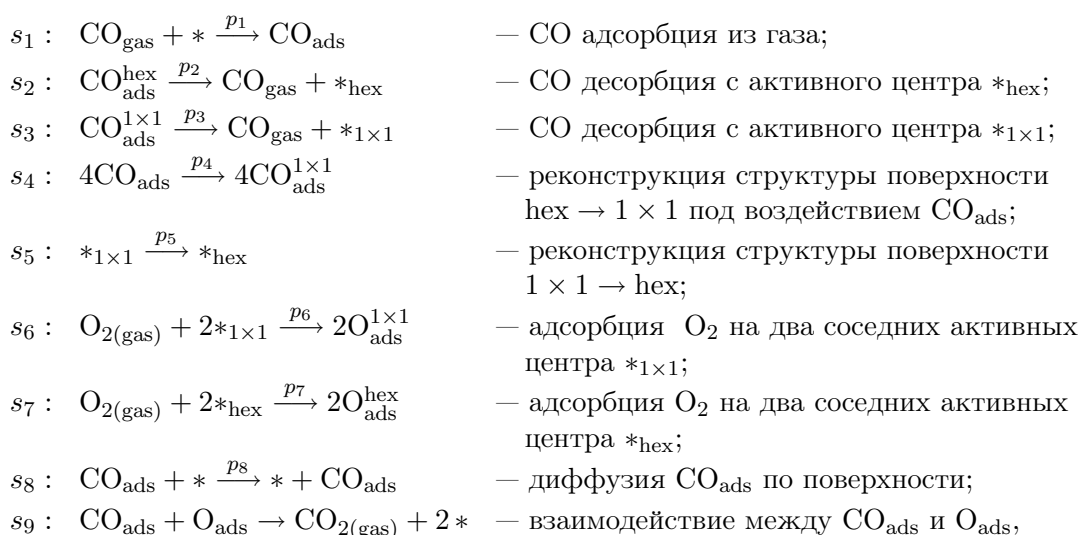
что преобразование применимо, во всяком случае, в классе стохастических КА, моделирующих поверхностные физико-химические процессы. Отсюда следует вывод, что при разработке параллельных алгоритмов реализации стохастических КА на основе блочно-синхронного преобразования, необходимо убеждаться в том, что искажения, вносимые преобразованием, приемлемы.

### 3. Стохастическая КА-модель реакции окисления моноокси углерода на поверхности платины

#### 3.1. Механизм реакции окисления СО на поверхности платины с перестройкой поверхности

Реакция окисления СО на поверхности металлов платиновой группы с перестройкой поверхности изучалась экспериментально [37] и моделировалась с помощью решеточного метода Монте-Карло [10]. Это обстоятельство послужило основанием для выбора ее в качестве типового примера для проверки применимости методов и опыта использования стохастического КА для компьютерного моделирования возникновения колебаний в окислительных реакциях на каталитической поверхности.

Реакция окисления СО происходит на поверхности катализатора Pt<sub>100</sub>, над которой находится смесь газов СО и О<sub>2</sub> с парциальными давлениями  $P(\text{CO})$  и  $P(\text{O}_2)$  соответственно. Каждая точка поверхности считается *активным центром*. В связи с реконструкцией структуры поверхности платины под воздействием адсорбированных молекул СО активные центры могут иметь гексагональную (hex) или кубическую (1 × 1) структуру. Элементарные события (стадии) реакции описываются девятью химическими уравнениями:



где \* означает любую из двух структур поверхности катализатора.

Вероятности  $p_i$  выполнения стадий вычисляются, исходя из заданных констант их скоростей  $k_i$  [s<sup>-1</sup>]:

$$p_i = \frac{k_i}{\sum_{i=1}^8 k_i}, \quad i = 1, \dots, 8. \quad (9)$$

Причем, поскольку диффузия намного более быстрый процесс, чем остальные элементарные стадии, константа скорости диффузии  $k_8$  берется равной:  $k_8 = M_{\text{diff}} \sum_{i=1}^7 k_i$ , где  $M_{\text{diff}}$  — коэффициент интенсивности диффузии, определяющий число попыток диффузии в единицу времени. Взаимодействие между молекулами  $\text{CO}_{\text{ads}}$  и  $\text{O}_{\text{ads}}$  происходит мгновенно, поэтому стадия  $s_9$  реализуется сразу же, как только  $\text{CO}_{\text{ads}}$  и  $\text{O}_{\text{ads}}$  окажутся на соседних активных центрах.

Моделирование реакции с помощью решеточной модели Монте-Карло [10] показало, что колебательный характер реакции обусловлен обратным фазовым переходом поверхности платины из гексагонального неактивного состояния в активное кубическое. Колебания обнаруживаются при

$$k_1=14.7, \quad k_2=4, \quad k_3=0.03, \quad k_4=3, \quad k_5=2, \quad k_6=56, \quad k_7=k_6 \cdot 10^{-3}, \quad M_{\text{diff}}=50. \quad (10)$$

### 3.2. Построение стохастической КА-модели по химическим уравнениям

Каталитическая реакция окисления СО на платине  $\text{Pt}_{100}$  является ярким примером, иллюстрирующим соответствие стохастической КА-модели и модели кинетического метода Монте-Карло [10]. Множество активных центров в стохастическом КА рассматривается как множество имен клеток, в котором каждый активный центр — это клетка. Участвующие в реакции вещества и тип структуры поверхности составляют символичный алфавит состояний, каждое химическое уравнение легко преобразуется в вероятностную подстановку, а стохастический характер процесса соответствует асинхронному режиму функционирования КА.

Прямое соответствие механизма реакции клеточно-автоматному представлению процесса ее реализации сводит построение стохастической КА-модели к простому переходу от параметров и уравнений реакции к клеточно-автоматным формализмам. Стохастический КА  $\aleph_\gamma = \langle A, X, \Theta \rangle$  рассматриваемой реакции имеет алфавит состояний, содержащий символы из уравнений реакции:

$$A = \{ *_{1 \times 1}, *_{\text{hex}}, \text{CO}_{\text{ads}}^{1 \times 1}, \text{CO}_{\text{ads}}^{\text{hex}}, \text{O}_{\text{ads}}^{1 \times 1}, \text{O}_{\text{ads}}^{\text{hex}} \}.$$

Множество имен задается координатами двумерной прямоугольной решетки, каждая клетка которой отображает активный центр поверхности  $X = \{(i, j) | i = 1, \dots, M_i, j = 1, \dots, M_j\}$ . Локальный оператор  $\Theta(i, j)$  является сложной локальной композицией [32] подстановок

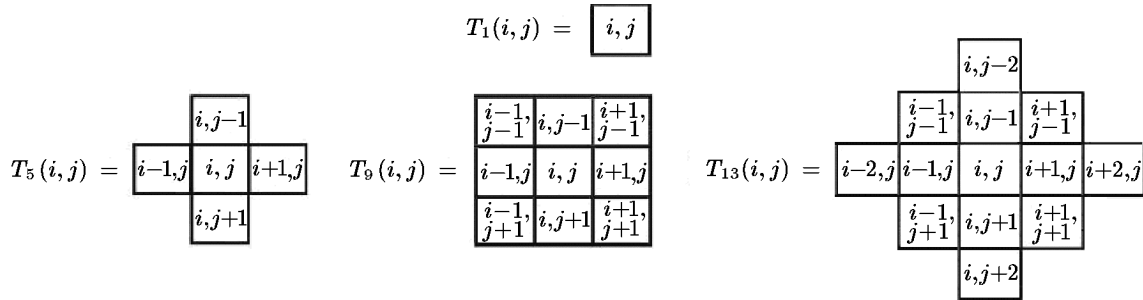
$$\Theta(i, j) = \Phi(\theta_{(1,9)}, \theta_2, \theta_3, \theta_4, \theta_5, \theta_{(6,9)}, \theta_{(7,9)}, \theta_{(8,9)}). \quad (11)$$

В (11) подстановки  $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_5$  моделируют стадии реакции  $s_1, s_2, s_3, s_5$  соответственно, и их запись мало отличается от соответствующих химических уравнений:

$$\begin{aligned} \theta_1 : & \{ (*, (i, j)) \} && \xrightarrow{p_1} \{ (\text{CO}_{\text{ads}}, (i, j)) \}, \\ \theta_2 : & \{ (\text{CO}_{\text{ads}}^{\text{hex}}, (i, j)) \} && \xrightarrow{p_2} \{ (*_{\text{hex}}, (i, j)) \}, \\ \theta_3 : & \{ (\text{CO}_{\text{ads}}^{1 \times 1}, (i, j)) \} && \xrightarrow{p_3} \{ (*_{1 \times 1}, (i, j)) \}, \\ \theta_5 : & \{ (*_{1 \times 1}, (i, j)) \} && \xrightarrow{p_5} \{ (*_{\text{hex}}, (i, j)) \}. \end{aligned} \quad (12)$$

Базовая часть подстановок (12) содержит только одну клетку, и следовательно, в них используется шаблон  $T_1(i, j)$  (рис. 2).





**Рис. 2.** Шаблоны соседства, используемые в стохастической КА-модели реакции окисления СО на Pt<sub>100</sub> с перестройкой структуры поверхности

Подстановка  $\theta_4$  меняет состояния четырех клеток, составляющих квадратный блок с клеткой  $(i, j)$  в шаблоне  $T_9$ , выбираемый равновероятно:

$$\theta_4 : S_k(i, j) \xrightarrow{p_4} S'_k(i, j), \quad k = 1, \dots, 4, \quad (13)$$

где  $S_k(i, j)$  и  $S'_k(i, j)$  — локальные конфигурации с определяющими шаблонами  $T_4^k(i, j)$ ,  $k = 1, \dots, 4$ , такими что

$$\bigcup_{k=1}^4 T_4^k(i, j) = T_9 \quad \forall k = 1, \dots, 4, \quad (i, j) \in T_4^k(i, j),$$

и для любой пары  $(S_k(i, j), S'_k(i, j))$  состояния всех клеток из  $S_k(i, j)$  и  $S'_k(i, j)$  равны  $\text{CO}_{\text{ads}}$  и  $\text{CO}_{\text{ads}}^{1 \times 1}$  соответственно.

Подстановки  $\theta_6, \theta_7, \theta_8, \theta_9$  меняют состояние клетки  $(i, j)$  и равновероятно одного ( $k$ -го,  $k = 1, \dots, 4$ ) из ее соседей в шаблоне  $T_5$ :

$$\begin{aligned} \theta_6 : & \{(*_{1 \times 1}, (i, j)), (*_{1 \times 1}, (i, j)_k)\} \xrightarrow{p_6} \{(\text{O}_{\text{ads}}^{1 \times 1}, (i, j)), (\text{O}_{\text{ads}}^{1 \times 1}, (i, j)_k)\}, \\ \theta_7 : & \{(*_{\text{hex}}, (i, j)), (*_{\text{hex}}, (i, j)_k)\} \xrightarrow{p_7} \{(\text{O}_{\text{ads}}^{\text{hex}}, (i, j)), (\text{O}_{\text{ads}}^{\text{hex}}, (i, j)_k)\}, \\ \theta_8 : & \{(*, (i, j)), (\text{CO}_{\text{ads}}, (i, j)_k)\} \xrightarrow{p_8} \{(\text{CO}_{\text{ads}}, (i, j)_k), (*, (i, j))\}, \\ \theta_9 : & \{(\text{CO}_{\text{ads}}, (i, j)), (\text{O}_{\text{ads}}, (i, j)_k)\} \xrightarrow{1} \{(*, (i, j)), (*, (i, j)_k)\}. \end{aligned} \quad (14)$$

Во всех подстановках отсутствие верхних индексов hex или  $1 \times 1$  означает, что подстановка применяется независимо от структуры поверхности катализатора.

Подстановки с двойным индексом вида  $\theta_{(l,9)}$ ,  $l = 1, 6, 7, 8$ , означают суперпозицию подстановки реакции  $\theta_9$  с любой другой подстановкой  $\theta_l$ , после выполнения которой кислород и моноокись углерода оказываются в соседних клетках. Такое объединение подстановок в одно действие обусловлено тем, что реакция происходит немедленно, как только молекулы реагентов соприкасаются. При этом, поскольку в результате применения  $\theta_l$  подстановка  $\theta_9$  может оказаться применимой к любой  $(i, j)_k \in T_5$ ,  $k = 1, \dots, 4$  (рис. 2), то шаблон для суперпозиции

$$T_{13}(i, j) = \bigcup_{k=1}^4 T_5((i, j)_k). \quad (15)$$

Алгоритм моделирования процесса реакции окисления СО на Pt<sub>100</sub> с перестройкой поверхности состоит из следующих действий.

1. Случайно с равной вероятностью выбирается клетка  $(i, j) \in X$ ;
2. К клетке  $(i, j)$  применяется локальный оператор (11), т. е. в соответствии с вероятностями (9) выбирается подстановка  $\theta_k \in \Theta(i, j)$  и производится замена состояний клеток базовой локальной конфигурации  $\theta_k(i, j)$ ;
3. Переход к 1.

Процесс вычисления условно подразделяется на *итерации*. За одну итерацию принимается  $M_i \times M_j \times M_{\text{diff}}$  таких процедур. Вычисления продолжаются до принудительного останова.

## 4. Результаты экспериментального моделирования

### 4.1. Автоколебания и бифуркационная диаграмма

При экспериментальном клеточно-автоматном моделировании реакции окисления СО на Pt<sub>100</sub> с перестройкой структуры поверхности [38] использовались следующие параметры:

- размер клеточного массива  $|X| = 200 \times 200$ , соответствующий площади поверхности катализатора  $3.1 \cdot 10^{-15} \text{ м}^2$ ;
- значение вероятностей применения подстановок, вычисленные по (9):  
 $p_1 = 3.61 \cdot 10^{-3}$ ,  $p_2 = 9.83 \cdot 10^{-4}$ ,  $p_3 = 7.37 \cdot 10^{-6}$ ,  $p_4 = 7.37 \cdot 10^{-4}$ ,  
 $p_5 = 4.92 \cdot 10^{-4}$ ,  $p_6 = 1.38 \cdot 10^{-2}$ ,  $p_7 = 1.38 \cdot 10^{-5}$ ;
- коэффициент интенсивности диффузии  $M_{\text{diff}} = 50$ ;
- граничные условия периодические;
- в исходном состоянии все клетки массива находились в состоянии  $*_{\text{hex}}$ , что соответствует свободной поверхности катализатора с гексагональной структурой.

В ходе КА-моделирования на каждой итерации вычислялись следующие численные характеристики.

- Концентрации реагентов, адсорбированных на поверхности катализатора:

$$n(\text{CO}_{\text{ads}}) = \frac{N(\text{CO}_{\text{ads}}^{1 \times 1}) + N(\text{CO}_{\text{ads}}^{\text{hex}})}{|X|}, \quad n(\text{O}_{\text{ads}}) = \frac{N(\text{O}_{\text{ads}}^{1 \times 1}) + N(\text{O}_{\text{ads}}^{\text{hex}})}{|X|}. \quad (16)$$

- Интенсивность образования CO<sub>2</sub>:

$$v(\text{CO}_2) = \frac{N(\text{CO}_{\text{ads}} + \text{O}_{\text{ads}})}{|X|}. \quad (17)$$

- Доли поверхности с кубической и гексагональной структурой:

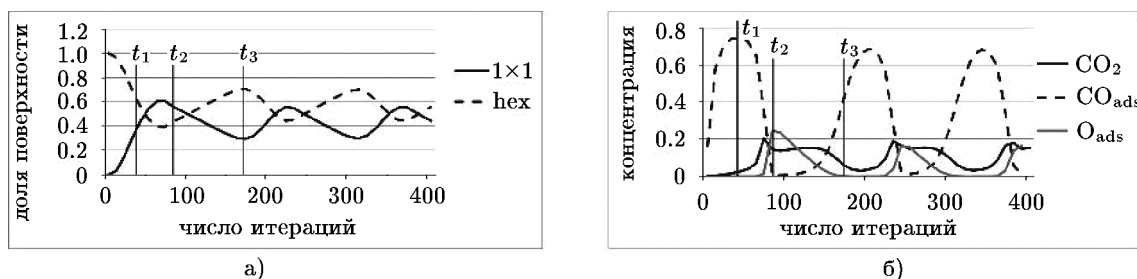
$$f(1 \times 1) = \frac{N(*_{1 \times 1}) + N(\text{CO}_{\text{ads}}^{1 \times 1}) + N(\text{O}_{\text{ads}}^{1 \times 1})}{|X|}, \quad (18)$$

$$f(\text{hex}) = \frac{N(*_{\text{hex}}) + N(\text{CO}_{\text{ads}}^{\text{hex}}) + N(\text{O}_{\text{ads}}^{\text{hex}})}{|X|},$$

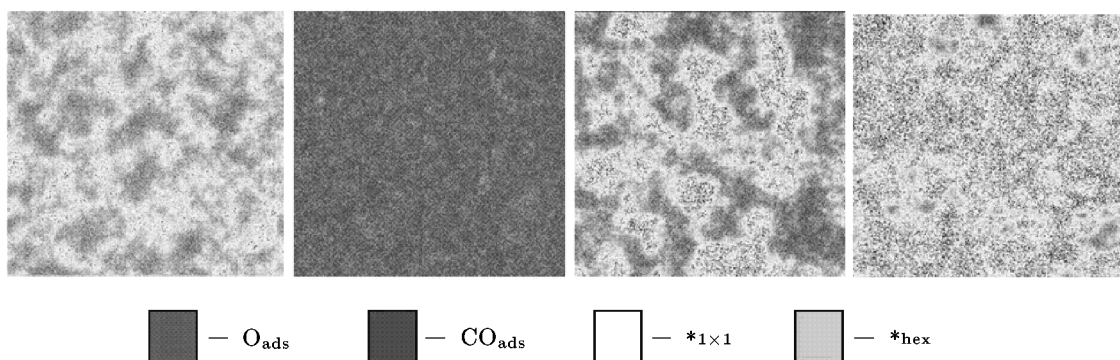
где  $N(a)$  — это количество клеток в состоянии  $a$  в клеточном массиве.

В результате моделирования реакции получены устойчивые колебания вычисляемых характеристик (рис. 3).

Колебания концентраций соответствуют смене покрытий поверхности адсорбированными реагентами (рис. 4).

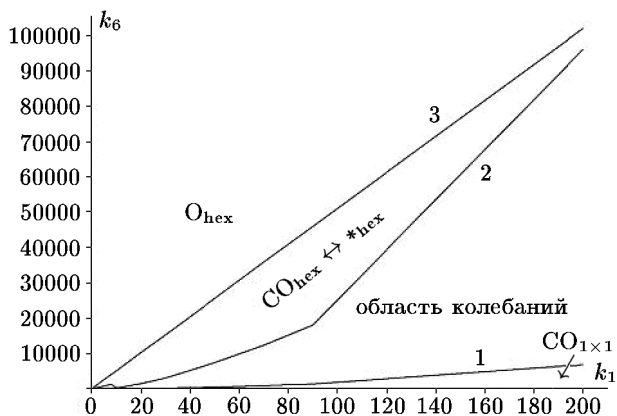


**Рис. 3.** Характер колебаний в реакции окисления CO на Pt<sub>100</sub>: а) доли 1 × 1 и hex поверхности; б) концентрация CO<sub>ads</sub>, O<sub>ads</sub> и интенсивность образования CO<sub>2</sub>



**Рис. 4.** Изменение состояний поверхности в ходе реакции CO<sub>ads</sub> → O<sub>ads</sub> на Pt<sub>100</sub>. Слева направо: образование островков CO<sub>ads</sub>, которые затем покрывают всю поверхность, на которой появляются островки O<sub>ads</sub>, распространяющиеся по всей поверхности

Обобщенное представление о самоорганизации в ходе исследуемой реакции дает бифуркационная диаграмма [38]. Диаграмма была построена в пространстве констант скоростей адсорбции CO ( $k_1$ ) и O<sub>2</sub> ( $k_6$ ). Каждая точка на плоскости  $k_1, k_6$  соответствует одному из возможных устойчивых состояний динамической системы: стационарное однородное покрытие или автоколебания (рис. 5).



**Рис. 5.** Бифуркационная диаграмма реакции окисления CO на Pt<sub>100</sub>

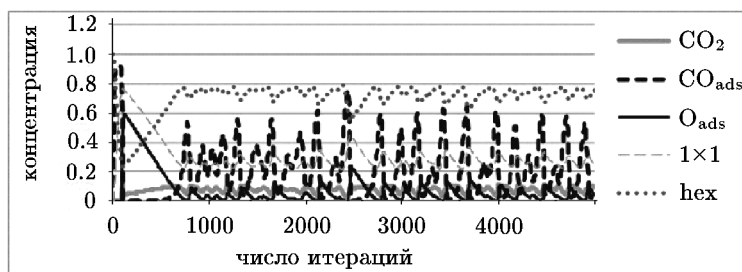
Для построения бифуркационной диаграммы было проведено более ста численных экспериментов в диапазоне значений  $k_1 \in [0; 200]$  и  $k_6 \in [0; 10^5]$  при значениях остальных констант скорости (10) при  $M_{diff} = 50$  и  $|X| = (200 \times 200)$  клеток. В различных точках диаграммы ( $k_1, k_6$ ) исследовался характер протекания реакции окисления. В результате

обнаружено наличие четырех режимов протекания реакции.

1. Устойчивое состояние, при котором поверхность катализатора покрыта  $\text{CO}_{1 \times 1}$  (область ниже границы 1).
2. Устойчивые колебания концентраций реагентов и интенсивности образования  $\text{CO}_2$  (область колебаний между кривыми 1 и 2).
3. Устойчивые колебания  $\text{CO}_{\text{ads}}^{\text{hex}} \leftrightarrow *_{\text{hex}}$ , при которых доля  $1 \times 1$  поверхности очень мала и адсорбция кислорода практически не происходит (область между кривыми 2 и 3).
4. Устойчивое состояние, при котором поверхность покрыта  $\text{O}_{\text{hex}}$  (область выше границы 3).

На диаграмме видны две области равновесных состояний, в которых колебаний нет. В первом случае (область ниже прямой 1) вся поверхность покрыта  $\text{CO}_{1 \times 1}$ . Это объясняется тем, что скорость адсорбции  $\text{O}_2$  меньше скорости адсорбции  $\text{CO}$  ( $k_6 < k_1$ ). Во втором случае (область выше прямой 3) ( $k_1 < k_6$ ) вследствие отсутствия  $\text{CO}_{\text{ads}}$  структура поверхности остается гексагональной. На поверхности очень медленно адсорбируется  $\text{O}_2$ , концентрация которого достигает 0.2, остальная поверхность остается свободной.

На границе области колебаний (прямая 1) изменения концентраций реагентов и интенсивности образования  $\text{CO}_2$  носят нерегулярный характер, период и амплитуда хаотически изменяются в течение реакции (рис. 6). При увеличении значений  $k_6$  колебания становятся более регулярными, их период увеличивается, так же как и доля свободной поверхности с гекс-структурой.



**Рис. 6.** Нерегулярные колебания скорости образования  $\text{CO}_2$ , концентраций  $\text{CO}_{\text{ads}}$  и  $\text{O}_{\text{ads}}$  на границе 1 области колебаний при  $k_1 = 50$  и  $k_6 = 389$

В области устойчивых колебаний  $\text{CO}_{\text{ads}}^{\text{hex}} \leftrightarrow *_{\text{hex}}$  (область между кривыми 2 и 3) происходит медленная адсорбция  $\text{CO}$  на гекс-поверхность, но, поскольку концентрация  $\text{CO}_{\text{ads}}$  недостаточна для реконструкции поверхности в структуру  $1 \times 1$ , необходимую для образования покрытия  $\text{O}_{\text{ads}}$ , адсорбция кислорода не происходит, и интенсивность образования  $\text{CO}_2$  практически равна нулю.

Наиболее продуктивным режимом с точки зрения образования  $\text{CO}_2$  и смены покрытий  $\text{CO}_{\text{ads}}$  и  $\text{O}_{\text{ads}}$  являются устойчивые колебания в области между кривыми 1 и 2 (рис. 5). В этой области при увеличении значений  $k_1$  и  $k_6$  характер колебаний становится менее регулярным, период увеличивается, доля поверхности с кубической структурой уменьшается, и, как следствие, уменьшается количество  $\text{O}_{\text{ads}}$  и интенсивность образования  $\text{CO}_2$ . Наибольшая скорость образования  $\text{CO}_2$  наблюдается в области колебаний в интервале значений  $k_1 \in [10, 50]$  и  $k_6 \in [22, 800]$ , лежащих вблизи границы 1.

## 5. Параллельная реализация алгоритма функционирования стохастического КА

### 5.1. Эквивалентность стохастического и блочно-синхронного режимов

Как показывают натурные испытания и экспериментальное моделирование, процессы самоорганизации в гетерогенных каталитических реакциях еще не изучены во всех возможных проявлениях. Чтобы обнаружить и наблюдать разные виды пространственных автоколебаний такие, например, как спиралевидные автоволны или формирование устойчивых пространственных структур, необходимо моделировать процесс на поверхности большого размера в более длительное время. В модельном выражении это означает, что  $|X| > 10^8$ , количество итераций  $t_{\text{fin}} > 10^6$ , что требует использования суперкомпьютеров.

Эффективная реализация алгоритмов моделирования на суперкомпьютерах параллельной архитектуры является самостоятельной задачей. Для моделей, основанных на синхронных КА, эта задача решается просто путем применения известного *метода декомпозиции области* (domain decomposition). Для стохастических КА, у которых глобальный оператор изменяет состояния нескольких клеток одновременно ( $T'(\mathbf{x}) > 1$ ), этот метод неприменим, так как эти клетки могут оказаться в соседних процессорах. Чтобы обеспечить одновременное обновление состояний пограничных клеток, необходимо организовать передачу *немедленно после изменения состояния каждой клетки*. Существуют несколько алгоритмов, в которых такая организация обменов обеспечивается [39, 40]. Они имеют приемлемую эффективность при реализации на многопроцессорных вычислительных системах с мощными процессорами, но сложны в программировании и совсем не пригодны для реализации на специализированных ускорителях [39].

Проверка совпадения результатов КА-моделирования реакции окисления СО на Pt<sub>100</sub> при применении стохастического КА  $\aleph_\gamma$  и блочно-синхронного КА  $\aleph_\beta$  производилась путем сравнения статистических оценок набора численных характеристик  $\xi^\mu \in \{n(\text{O}_{\text{ads}})^\mu, n(\text{CO}_{\text{ads}}^{\text{hex}})^\mu, n(\text{CO}_{\text{ads}}^{1 \times 1})^\mu, v(\text{CO}_2)^\mu, f(1 \times 1)^\mu, f(\text{hex})^\mu\}$ ,  $\mu \in \{\gamma, \beta\}$ , полученных в ходе моделирования их эволюций. Поскольку эти характеристики являются случайными величинами, сравнению подвергались оценки их математических ожиданий  $M[\xi^\mu]$  и дисперсии  $D[\xi^\mu]$ :

$$M[\xi^\mu] = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^V \xi_j^\mu = \bar{\xi}^\mu, \quad D[\xi^\mu] = \frac{1}{V-1} \sum_{j=1}^V (\xi_j^\mu - \bar{\xi}^\mu)^2 = \bar{\sigma}^\mu \quad (19)$$

с доверительными интервалами  $I_{\bar{\xi}^\mu}$  и  $I_{\bar{\sigma}^\mu}$ :

$$\begin{aligned} \bar{\xi}^\mu - \frac{D[\xi^\mu]z_\lambda}{\sqrt{V}} < I_{\bar{\xi}^\mu} < \bar{\xi}^\mu + \frac{D[\xi^\mu]z_\lambda}{\sqrt{V}}, \\ (\bar{\sigma}^\mu)^2 - z_\lambda \sqrt{\frac{2}{V-1}} (\bar{\sigma}^\mu)^2 < I_{\bar{\sigma}^\mu} < (\bar{\sigma}^\mu)^2 + z_\lambda \sqrt{\frac{2}{V-1}} (\bar{\sigma}^\mu)^2, \end{aligned} \quad (20)$$

где  $z_\lambda$  — аргумент функции нормального распределения, при котором ее значение равно  $\lambda/2$ . Доверительные интервалы рассчитывались при  $\lambda = 0.95$ .

Для оценки значений характеристик в ходе моделирования вычислялись также среднеквадратичные разности

$$E(\xi) = \sqrt{\frac{1}{V} \sum_{j=1}^V (\xi_j^\gamma - \xi_j^\beta)^2} \quad (21)$$

и распределения

$$P(\xi^\mu) = \frac{N(\xi^\mu = \xi')}{t_{\text{fin}}}, \quad \mu = \{\gamma, \beta\}, \quad (22)$$

где  $N(\xi^\mu = \xi')$  — число, равное количеству итераций, при котором  $\xi^\mu = \xi'$ , где  $\xi'$  — это одно из значений характеристики  $\xi^\mu$ , полученное в результате КА-моделирования.

Сравнительный анализ выбранных характеристик производился по результатам ( $V = 100$ ) вычислительных экспериментов, выполненных при  $|X| = 200 \times 200$ . Длительность каждого эксперимента  $t_{\text{fin}} = 1000$  итераций. Эволюции сравнивались по следующим параметрам:

- распределение  $P(\xi)$  (22) для концентраций  $\xi \in \{n(\text{O}_{\text{ads}}), n(\text{CO}_{\text{ads}}^{1 \times 1}), n(\text{CO}_{\text{ads}}^{\text{hex}})\}$  (16);
- распределение интенсивности образования  $P(v(\text{CO}_2))$  (17);
- распределение доли поверхности платины с разной структурой  $f(1 \times 1)$  и  $f(\text{hex})$  (18);
- распределение периодов колебаний концентраций  $T$ ;
- оценки математических ожиданий  $\bar{\xi}$  и дисперсии  $\bar{\sigma}$  (19);
- доверительные интервалы  $I_{\bar{\xi}}$  и  $I_{\bar{\sigma}}$  (20);
- бифуркационная диаграмма реакции (рис. 5).

Анализ результатов моделирования показал, что значения всех характеристик, полученных при моделировании реакции с помощью стохастического КА  $\aleph_\gamma$  и с помощью блочно-синхронного КА  $\aleph_\beta$  различаются не более чем в третьем десятичном знаке (см. табл. 1).

**Таблица 1.** Разница между значениями оценок математического ожидания, дисперсии и доверительными интервалами, полученными для характеристик, вычисленных на 70-й итерации эволюции при асинхронном и блочно-синхронном режимах

$\xi$	$(\bar{\xi}^\gamma - \bar{\xi}^\beta)/\bar{\xi}^\gamma$	$(\bar{\sigma}^\gamma - \bar{\sigma}^\beta)/\bar{\sigma}^\gamma$	$(I_{\bar{\xi}^\gamma} - I_{\bar{\xi}^\beta})/I_{\bar{\xi}^\gamma}$	$(I_{\bar{\sigma}^\gamma} - I_{\bar{\sigma}^\beta})/I_{\bar{\sigma}^\gamma}$
$v(\text{CO}_2)$	3.07E-04	3.15E-03	(2.87E-04; 2.86E-04)	(3.16E-03; 3.14E-03)
$n(\text{CO}^{1 \times 1})$	7.28E-04	2.85E-03	(7.59E-04; 7.56E-04)	(1.91E-03; 1.90E-03)
$n(\text{O}^{1 \times 1})$	3.36E-03	4.48E-03	(3.37E-03; 3.43E-03)	(8.97E-03; 8.93E-03)
$f(1 \times 1)$	1.53E-04	1.53E-03	(1.53E-04; 1.53E-04)	(1.54E-03; 1.53E-03)
$f(\text{hex})$	2.09E-04	1.25E-03	(2.08E-04; 2.09E-04)	(1.22E-03; 1.21E-03)

Среднеквадратичные разности распределений численных характеристик для стохастического и блочно-синхронного КА:  $E(v(\text{CO}_2)) = 5.9 \cdot 10^{-5}$ ,  $E(n(\text{CO}_{\text{ads}}^{\text{hex}})) = 5.4 \cdot 10^{-5}$ ,  $E(f(1 \times 1)) = 6.5 \cdot 10^{-5}$ ,  $E(T) = 7.1 \cdot 10^{-5}$  также не превосходят  $10^{-4}$ .

Бифуркационная диаграмма, построенная для  $\aleph_\beta$  с теми же константами (10) [?], что и диаграмма стохастического КА  $\aleph_\gamma$  (рис. 5) и в том же пространстве констант  $k_1, k_6$ , полностью с ней совпадает.

Результаты сравнений параметров и характеристик эволюций КА  $\aleph_\gamma$  и  $\aleph_\beta$  подтверждают правомерность применения блочно-синхронного преобразования стохастического

КА для моделирования каталитической реакции окисления СО на суперкомпьютерах с параллельной архитектурой.

Поскольку исследуемая модель может рассматриваться как типичный представитель стохастических КА-моделей, описывающих широкий класс физико-химических поверхностных процессов, то вполне допустимо распространить результат о применимости блочно-синхронных преобразований для их эффективного распараллеливания на класс стохастических КА, моделирующих явления в виде элементарных движений и превращений разных абстрактных или реальных частиц. Узнать, при каких конкретно свойствах локального оператора блочно-синхронное преобразование сильнее изменяет эволюцию исходного стохастического КА, пока не удалось. Наиболее существенные результаты в этом направлении достигнуты в [35].

### 5.2. Параллельная реализация и ее эффективность

Параллельная реализация блочно-синхронной версии стохастического КА  $\aleph_\beta$  размером  $M \times M$ ,  $M = 8000$ , моделирующего реакцию окисления СО на катализаторе Pt<sub>100</sub>, была выполнена на суперкомпьютере МВС-100К МСЦ РАН, каждый узел которого состоит из двух четырехядерных микропроцессоров. Соответственно, использовалась схема из двух стандартов параллельного программирования: MPI+OpenMP. Вычислительный процесс организуется следующим образом.

- В соответствии с блочно-синхронным алгоритмом (подпункт 2.3) строится разбиение клеточного массива на  $n$  подмножеств  $\Pi_k$ ,  $k = 1, \dots, n$ , (рис. 7).
- Клеточный массив разрезается на  $N$  доменов размерами  $|M' \times M'|$ ,  $M' = |X|/N + 4$ .
- Каждому  $l$ -му домену назначается  $l$ -й MPI-процесс.
- На каждом вычислительном узле запускается четыре MPI-процесса.
- В каждом MPI-процессе создается по два OpenMP-потока.
- Потоки явным образом назначаются на ядра, объединенные общей кэш-памятью.

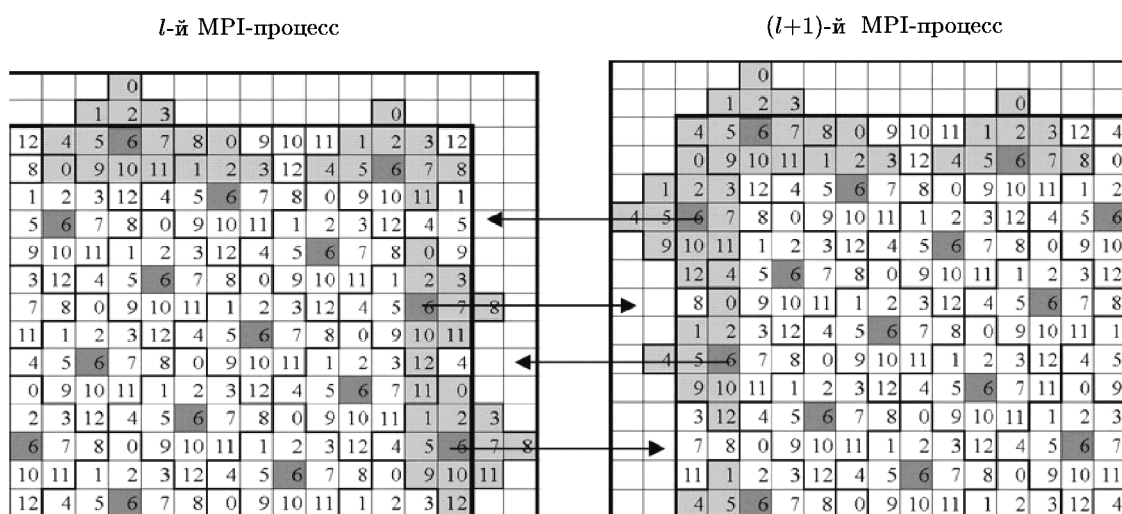


Рис. 7. Межпроцессный обмен при распараллеливании блочно-синхронного КА  $\aleph_\beta$

Каждая итерация вычислительного процесса состоит из  $n$  последовательных этапов. На  $k$ -м этапе  $l$ -й MPI-процесс вычисляет новые значения состояний клеток  $x \in \Pi_k \cap X_l$  и пересылает значения граничных клеток  $l$ -го домена соседним процессам. При этом на  $k$ -м этапе в одном пакете пересылаются значения только тех граничных клеток, которые принадлежат подмножеству  $\Pi_k$  (рис. 7). Объем пересылаемых данных составляет  $2P_{\text{dom}}$  байт, где  $P_{\text{dom}}$  — периметр домена.

Результаты распараллеливания представлены в табл. 2, где  $T(N)$  — время вычислений с использованием  $N$  процессов,  $S(N) = \frac{T(1)}{T(N)}$  — ускорение и  $Q(N) = \frac{T(1)}{T(N)N}$  — эффективность в сильном смысле (strong scaling efficiency). Данные, приведенные в табл. 2, показывают, что при использовании до 128 процессов  $Q(N)$  выше 80%. При дальнейшем увеличении числа процессов эффективность распараллеливания уменьшается, так как время, затрачиваемое на межпроцессорный обмен, становится больше времени вычислений.

**Таблица 2.** Эффективность распараллеливания блочно-синхронной версии стохастического КА реакции окисления CO на Pt<sub>100</sub>

$N$	$T(N)$	$S(N)$	$Q(N)$
1	266.68	1	1
4	67.62	3.94	0.99
16	18.15	14.69	0.92
32	9.45	28.36	0.89
64	5.06	52.69	0.82
128	2.85	93.7	0.73

## 6. Заключение

В связи с интенсивным развитием химических композитных и нанотехнологий методы компьютерного моделирования нелинейных пространственно распределенных процессов на микро- и наноуровнях (на уровне взаимодействий абстрактных и реальных частиц) становятся востребованными. Очевидно, что для моделирования таких процессов требуются очень большие размеры ( $10^{12} - 10^{18}$ ) клеточного пространства. Поэтому к моделям этого класса предъявляется еще дополнительное требование — возможность эффективного размещения вычислений на современных суперкомпьютерах с параллельной архитектурой. Введенное в статье понятие стохастического КА, моделирующего широкий класс реакционно-диффузионных явлений и опирающегося на теорию асинхронных клеточных автоматов, позволило создать метод компьютерного моделирования, удовлетворяющий приведенным требованиям. Естественно, существует еще много проблем как теоретических, так и методологических, которые надо решить, чтобы стохастический КА стал широко применимым. Теоретические проблемы касаются, в основном, синхронно-асинхронных и пространственно временных эквивалентных преобразований, необходимых для создания методов эффективного размещения вычислений по процессорам суперкомпьютера. Методологические проблемы состоят в формализации способов определения соответствий между параметрами модели и соответствующими физико-химическими величинами.



## Литература

1. **Колмогоров А.Н., Петровский И.Г., Пискунов И.С.** Исследование уравнения диффузии, соединенной с возрастанием количества вещества и его применение к одной биологической проблеме // Бюллетень МГУ. Секция А. — М.: Изд-во МГУ, 1937. — Вып. 6. — С. 1–25.
2. **Fisher R.A.** The Genetical Theory of Natural Selection. — Oxford: Oxford Univ. Press, 1930.
3. **Turing A.M.** The chemical basis of morphogenesis // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series B. Biological Sciences. — 1952. — Vol. 237, № 641. — P. 37–72.
4. **Белоусов Б.П.** Периодически действующая реакция и ее механизм // Сб. рефератов по радиационной медицине за 1958 г. — М.: Медгиз, 1959. — С. 145–147.
5. **Жаботинский А.М.** Концентрационные колебания. — М.: Наука, 1974.
6. **Пригожин И., Николис Г.** Самоорганизация в неравновесных системах: от диссипативных структур к упорядоченности через флуктуации. — М.: Мир, 1979.
7. **Vossara N.** Reaction-Difusion Complex Systems. — Berlin: Springer, 2004.
8. **Ванаг В.К.** Диссипативные структуры в реакционно-диффузионных системах. Эксперимент и теория. — Ижевск: ИКИ, 2008.
9. **Ванаг В.К.** Исследование пространственно-распределенных динамических систем методами вероятностного клеточного автомата // Успехи физических наук. — 1999. — Т. 169, № 5. — С. 481–505.
10. **Елохин В.И., Матвеев И.И., Городецкий В.В.** Автоколебания и химические волны в реакции окисления СО на Pt и Pd: кинетические модели Монте-Карло // Кинетика и катализ. — 2009. — Т. 50, № 1. — С. 45–53.
11. **Elokhin V.I., Sharifulina A.E.** Simulation of heterogeneous catalytic reaction by asynchronous cellular automata on multicomputer // Proc. of PaCT 2011. — Berlin: Springer, 2011. — P. 204–209. — (Lect. Notes Comput. Sci.; 6873).
12. **Бандман О.Л.** Дискретные методы моделирования физико-химических процессов // Прикладная дискретная математика. — 2009. — № 4. — С. 33–49.
13. **Андронов А.А., Леонтович Е.А., Гордон И.И., Майер А.Г.** Качественная теория динамических систем второго порядка. — М.: Наука, 1966.
14. **Advanced Mean Field Methods. Theory and Practice / Manfred Opper and David Saad.** — The MIT Press, 2001.
15. **Фон Нейман Дж.** Теория самовоспроизводящихся автоматов. — М.: Мир, 1971.
16. **Бандман О.Л.** Клеточно-автоматные модели пространственной динамики // Системная информатика: сб. научн. тр. / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2006. — Вып 10. — С. 59–111.
17. **Wolfram S.** Statistical mechanics of cellular automata // Review of Modern Physics. — 1993. — Vol. 55. — P. 607–640.
18. **Toffoli T.** Cellular automata as an alternative to (rather than approximation of) differential equations in modeling physics // Physica D. — 1984. — Vol. 10. — P. 117–127.
19. **Toffoli T., Margolus N.** Cellular Automata Mashines. A new Environment for Modeling. — The MIT Press, 1987.
20. **Малинецкий Г.Г., Степанцов М.Е.** Моделирование диффузионных процессов клеточными автоматами // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 1998. — № 6. — С. 1017–1021.
21. **Wolfram S.** A New Kind of Science. — Wolfram Media Inc., 2002.
22. **Wolfram S.** Universality and complexity in cellular automata // Physica D. — 1984. — Vol. 1. — P. 91–125.

23. **Frish U., Hasslacher B., and Pomeau Y.** Lattice-gas automata for Navier-Stokes equation // Phys. Rev. Lett.—1986.— Vol. 56.— P. 1505–1508.
24. **Воссага N.** Phase-transition in cellular automata // Computation Complexity.— Berlin: Springer, 2012.— P. 2157–2167.
25. **Sirakoulis G.Ch., Karafyllidis I., and Thanailakis A.** A cellular automaton model for the effect of population movement on epidemic propagation // Ecological Modelling.— 2000.— Vol. 133, № 3.— P. 209–223.
26. **Афанасьев И.В.** Клеточно-автоматная модель динамики популяций трех видов организмов озера Байкал // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние.— Новосибирск, 2014.— Т. 17, № 3.— С. 217–227.
27. **Chowdhury D., Nishinary K., and Schadschneider A.** CA modeling of ant-traffic on trails // Simulating Complex Systems by Cellular Automata / Hoekstra A., Kroc J., Sloot P.M.A.— Berlin: Springer, 2010.— P. 275–300.
28. **Jansen A.P.J.** An Introduction to Monte Carlo Simulations of Surface Reactions.— 2003.— arXiv:cond-mat/0303028v1[stst-mech].
29. **Latkin E.I., Elokhin V.I., and Gorodetskii V.V.** Monte Carlo model of oscillatory CO oxidation having regard to the change of catalytic properties due to the adsorbate induced Pt(100) structural transformation // J. of Molecular Catalysis A: Chemical.— 2001.— Vol. 166.— P. 23–30.
30. **Bandman O.** Cellular automata composition techniques for spatial dynamics simulation // Simulating Complex Systems by Cellular Automata. Understanding complex Systems / Hoekstra A., Kroc J., Sloot P.M.A.— Berlin: Springer, 2010.— P. 81–115.
31. **Achasova S., Bandman O., Markova V., and Piskunov S.** Parallel Substitution Algorithm. Theory and Application.— Singapore: World Scientific, 1994.
32. **Kalgin K.V.** Domain specific language and translator for cellular automata models of physico-chemical processes.— Berlin: Springer, 2011.— P. 172–180.— (Lect. Notes Comput. Sci.; 6873).
33. **Elliott R.J., Aggoun L., and Moore J.B.** Hidden Markov Models. Estimation and Control.— Berlin: Springer, 2008.
34. **Ачасова С.М., Бандман О.Л.** Корректность параллельных процессов.— Новосибирск: Наука, 1998.
35. **Калгин К.В.** Клеточно-автоматное моделирование физико-химических процессов нано-уровня на графических ускорителях // Тр. Межд. науч. конф. ПаВТ'2013.— Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2013.— С. 146–154.
36. **Bandman O.** Parallel simulation of asynchronous cellular automata evolution // Proc. ACRI-2006.— Berlin: Springer.— P. 41–47.— (Lect. Notes Comput. Sci.; 4173).
37. **Imbihl R., Ertl G.** Oscillatory kinetics in heterogeneous catalysis // Chemical Reviews.— 1995.— Vol. 95, № 3.— P. 697–733.
38. **Шарифулина (Киреева) А.Е.** Параллельная реализация каталитической реакции ( $\text{CO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$ ) с помощью асинхронного клеточного автомата // Вестник ЮУрГУ.— 2012.— № (47)306.— С. 112–126.
39. **Калгин К.В.** Параллельная реализация асинхронных клеточных автоматов на 32-ядерной вычислительной системе // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние.— Новосибирск, 2012.— Т. 15, № 1.— С. 55–65.
40. **Overeinder B.J., Sloot P.M.A.** Application of time warp to parallel simulations with asynchronous cellular automata // Proc. European Simulation Symposium.— The Netherlands: Delft, 1993.— P. 397–402.

*Поступила в редакцию 18 июня 2014 г.,  
в окончательном варианте 1 сентября 2015 г.*

## Литература в транслитерации

1. **Kolmogorov A.N., Petrovskij I.G., Piskunov I.S.** Issledovanie uravneniya diffuzii, soedinennoj s vozrastaniem kolichestva veshchestva i ego primenenie k odnoj biologicheskoj probleme // Byulleten' MGU. Sektsiya A. — M.: Izd-vo MGU, 1937. — Vyp. 6. — S. 1–25.
2. **Fisher R.A.** The Genetical Theory of Natural Selection. — Oxford: Oxford Univ. Press, 1930.
3. **Turing A.M.** The chemical basis of morphogenesis // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series B. Biological Sciences. — 1952. — Vol. 237, № 641. — P. 37–72.
4. **Belousov B.P.** Periodicheski dejstvuyushchaya reaktsiya i ee mekhanizm // Sb. referatov po radiatsionnoj meditsine za 1958 g. — M: Medgiz, 1959. — S. 145–147.
5. **Zhabotinskij A.M.** Kontsentratsionnye kolebaniya. — M.: Nauka, 1974.
6. **Prigozhin I., Nikolis G.** Samoorganizatsiya v neravnovesnykh sistemakh: ot dissipativnykh struktur k uporyadochennosti cherez fluktuatsii. — M.: Mir, 1979.
7. **Boccaro N.** Reaction-Difusion Complex Systems. — Berlin: Springer, 2004.
8. **Vanag V.K.** Dissipativnye struktury v reaktsionno-diffuzionnykh sistemakh. Eksperiment i teoriya. — Izhevsk: IKI, 2008.
9. **Vanag V.K.** Issledovanie prostranstvenno-raspredeleennykh dinamicheskikh sistem metodami veroyatnostnogo kletochnogo avtomata // Uspekhi fizicheskikh nauk. — 1999. — T. 169, № 5. — S. 481–505.
10. **Elokhin V.I., Matveev I.I., Gorodetskij V.V.** Avtokolebaniya i khimicheskie volny v reaktsii okisleniya CO na Pt i Pd: kineticheskie modeli Monte-Karlo // Kinetika i kataliz. — 2009. — T. 50, № 1. — S. 45–53.
11. **Elokhin V.I., Sharifulina A.E.** Simulation of heterogeneous catalytic reaction by asynchronous cellular automata on multicomputer // Proc. of PaCT 2011. — Berlin: Springer, 2011. — P. 204–209. — (Lect. Notes Comput. Sci.; 6873).
12. **Bandman O.L.** Diskretnye metody modelirovaniya fiziko-khimicheskikh protsessov // Prikladnaya diskretnaya matematika. — 2009. — № 4. — S. 33–49.
13. **Andronov A.A., Leontovich E.A., Gordon I.I., Majer A.G.** Kachestvennaya teoriya dinamicheskikh sistem vtorogo poryadka. — M.: Nauka, 1966.
14. **Advanced Mean Field Methods. Theory and Practice / Manfred Opper and David Saad.** — The MIT Press, 2001.
15. **Fon Nejman Dzh.** Teoriya samovosproizvodyashchikhsya avtomatov. — M.: Mir, 1971.
16. **Bandman O.L.** Kletochno-avtomatnye modeli prostranstvennoj dinamiki // Sistemnaya informatika: sb. nauchn. tr. / RAN. Sib. otd-nie. — Novosibirsk, 2006. — Vyp 10. — S. 59–111.
17. **Wolfram S.** Statistical mechanics of cellular automata // Review of Modern Physics. — 1993. — Vol. 55. — P. 607–640.
18. **Toffoli T.** Cellular automata as an alternative to (rather than approximation of) differential equations in modeling physics // Physica D. — 1984. — Vol. 10. — P. 117–127.
19. **Toffoli T., Margolus N.** Cellular Automata Mashines. A new Environment for Modeling. — The MIT Press, 1987.
20. **Malinetskij G.G., Stepantsov M.E.** Modelirovanie diffuzionnykh protsessov kletochnymi avtomatami // Zhurn. vychisl. matem. i mat. fiziki. — 1998. — № 6. — S. 1017–1021.
21. **Wolfram S.** A New Kind of Science. — Wolfram Media Inc., 2002.
22. **Wolfram S.** Universality and complexity in cellular automata // Physica D. — 1984. — Vol. 1. — P. 91–125.

23. **Frish U., Hasslacher B., and Pomeau Y.** Lattice-gas automata for Navier-Stokes equation // Phys. Rev. Lett.—1986.— Vol. 56.— P. 1505–1508.
24. **Boccara N.** Phase-transition in cellular automata // Computation Complexity.— Berlin: Springer, 2012.— P. 2157–2167.
25. **Sirakoulis G.Ch., Karafyllidis I., and Thanailakis A.** A cellular automaton model for the effect of population movement on epidemic propagation // Ecological Modelling.— 2000.— Vol. 133, № 3.— P. 209–223.
26. **Afanas'ev I.V.** Kletochno-avtomatnaya model' dinamiki populyatsij trekh vidov organizmov ozera Bajkal // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie.— Novosibirsk, 2014.— T. 17, № 3.— S. 217–227.
27. **Chowdhury D., Nishinary K., and Schadschneider A.** CA modeling of ant-traffic on trails // Simulating Complex Systems by Cellular Automata / Hoekstra A., Kroc J., Sloot P.M.A.— Berlin: Springer, 2010.— P. 275–300.
28. **Jansen A.P.J.** An Introduction to Monte Carlo Simulations of Surface Reactions.— 2003.— arXiv:cond-mat/0303028v1[stst-mech].
29. **Latkin E.I., Elokhin V.I., and Gorodetskii V.V.** Monte Carlo model of oscillatory CO oxidation having regard to the change of catalytic properties due to the adsorbate induced Pt(100) structural transformation // J. of Molecular Catalysis A: Chemical.— 2001.— Vol. 166.— P. 23–30.
30. **Bandman O.** Cellular automata composition techniques for spatial dynamics simulation // Simulating Complex Systems by Cellular Automata. Understanding complex Systems / Hoekstra A., Kroc J., Sloot P.M.A.— Berlin: Springer, 2010.— P. 81–115.
31. **Achasova S., Bandman O., Markova V., and Piskunov S.** Parallel Substitution Algorithm. Theory and Application.— Singapore: World Scientific, 1994.
32. **Kalgin K.V.** Domain specific language and translator for cellular automata models of physico-chemical processes.— Berlin: Springer, 2011.— P. 172–180.— (Lect. Notes Comput. Sci.; 6873).
33. **Elliott R.J., Aggoun L., and Moore J.B.** Hidden Markov Models. Estimation and Control.— Berlin: Springer, 2008.
34. **Achasova S.M., Bandman O.L.** Korrektnost' parallel'nykh protsessov.— Novosibirsk: Nauka, 1998.
35. **Kalgin K.V.** Kletochno-avtomatnoe modelirovanie fiziko-khimicheskikh protsessov nano-urovnya na graficheskikh uskoritelyakh // Tr. Mezhd. nauch. konf. PaVT'2013.— Chelyabinsk: Izdatel'skij tsentr YUUrGU, 2013.— S. 146–154.
36. **Bandman O.** Parallel simulation of asynchronous cellular automata evolution // Proc. ACRI-2006.— Berlin: Springer.— P. 41–47.— (Lect. Notes Comput. Sci.; 4173).
37. **Imbihl R., Ertl G.** Oscillatory kinetics in heterogeneous catalysis // Chemical Reviews.— 1995.— Vol. 95, № 3.— P. 697–733.
38. **Sharifulina (Kireeva) A.E.** Parallel'naya realizatsiya kataliticheskoy reaktsii ( $\text{CO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$ ) s pomoshch'yu asinkhronnogo kletochnogo avtomata // Vestnik YUUrGU.— 2012.— № (47)306.— S. 112–126.
39. **Kalgin K.V.** Parallel'naya realizatsiya asinkhronnykh kletochnykh avtomatov na 32-yadernoj vychislitel'noj sisteme // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie.— Novosibirsk, 2012.— T. 15, № 1.— S. 55–65.
40. **Overeinder B.J., Sloot P.M.A.** Application of time warp to parallel simulations with asynchronous cellular automata // Proc. European Simulation Symposium.— The Netherlands: Delft, 1993.— P. 397–402.