

Параллельная реализация каталитической реакции ($CO + O_2 \rightarrow CO_2$) / Pt₁₁₀ с помощью асинхронного клеточного автомата

А. Е. Шарифулина¹

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН

В статье описывается клеточно-автоматная (КА) модель реакции окисления монооксида углерода (CO) на поверхности платины. Дается формальное определение асинхронного КА и приводятся результаты моделирования каталитической реакции. Для достижения высокой эффективности распараллеливания асинхронный КА преобразуется в блочно-синхронный. Проводится сравнительный анализ основных характеристик моделирования, полученных для асинхронного и блочно-синхронного КА. И на основе полученных результатов делается вывод о приемлемой точности аппроксимации асинхронного режима блочно-синхронным для класса задач "реакция – диффузия". В статье представлены результаты распараллеливания блочно-синхронного КА и приведены оценки эффективности параллельной реализации.

1. Введение

Сегодня компьютерное моделирование является основным средством изучения явлений в большинстве наук: физике, химии, биологии, экономике, социологии. Традиционные методы моделирования, основанные на решении дифференциальных уравнений, недостаточно эффективны для описания распределенных динамических систем таких как популяции животных, человеческие сообщества, химические и физические процессы на микро-уровне. Эти явления существенно нелинейны и диссипативны, обладают способностью к самоорганизации и самовоспроизведению. Решение сложных систем дифференциальных уравнений с частными производными, использующихся для описания таких явлений, сопряжено со значительными математическими трудностями. Кроме того, пространственно распределенные, неоднородные системы, далёкие от состояния равновесия, невозможно описать в терминах дифференциальных уравнений. Сложное поведение таких нелинейных динамических систем в большинстве случаев можно определить простыми локальными правилами, описывающими явления на микро-уровне. Такие представления явлений легко выражаются в терминах клеточных автоматов.

Клеточный автомат (КА) представляет собой множество связанных по входам и выходам одинаковых конечных автоматов (клеток) с простыми детерминированными или вероятностными правилами переходов, вычисляющими новые состояния в зависимости от значений соседних клеток [1, 2]. КА наиболее эффективны для описания фазовых и бифуркационных переходов, где важно учитывать флуктуации, где коллективное поведение системы определяется локальным поведением составляющих ее элементов, когда система является неоднородной и представляется затруднительным определением каких-либо усредненных величин, способных адекватно отражать ее состояние в целом [3].

Одним из примеров таких систем являются реакции гетерогенного катализа, использующиеся сегодня во многих областях человеческой деятельности. Классической реакцией гетерогенного катализа является окисление монооксида углерода (CO) на металлах платиновой группы (Pt, Pd). Изучение механизма протекания каталитических процессов на Pt и Pd важно с точки зрения фундаментальной науки, так как особенностью этих реакций является возникновение в неравновесных условиях таких критических явлений, как множественность стационарных состояний, кинетические фазовые переходы, автоколебания, хаос, гистерезис [4]. Кроме того, окислительно-восстановительные реакции на металлах платиновой группы имеют важное практическое применение, т.к. они являются основой каталитических преобразователей, использующихся для очистки выхлопных газов.

Каталитические реакции представляют собой открытые нелинейные системы, поведение которых определяется взаимодействием частиц на атомно-молекулярном уровне, влиянием

температуры, влиянием процессов переноса вещества и тепла на скорость химического превращения. Асинхронный вероятностный клеточный автомат, известный ещё как кинетический метод Монте-Карло, позволяет отобразить нелинейность каталитических процессов непосредственным образом, моделируя взаимодействие реальных атомов и молекул с помощью дискретных правил переходов.

Для изучения пространственно-временной динамики каталитических реакций необходимо моделировать взаимодействие большого количества молекул ($\approx 10^{20}$) в течение длительного периода времени ($\approx 10^{10}$ итераций). Следовательно, решение таких задач требует использования эффективных алгоритмов распараллеливания. Проблема эффективного распараллеливания асинхронных КА с вероятностными правилами переходов на сегодняшний день до конца не решена. В работах [5, 6] предложен метод достижения высокой эффективности распараллеливания путём аппроксимации асинхронного КА блочно-синхронным КА. Блочно-синхронный режим работы нарушает стохастичность моделируемого процесса, поэтому эквивалентность эволюций асинхронного и блочно-синхронного КА не может быть доказана в общем случае.

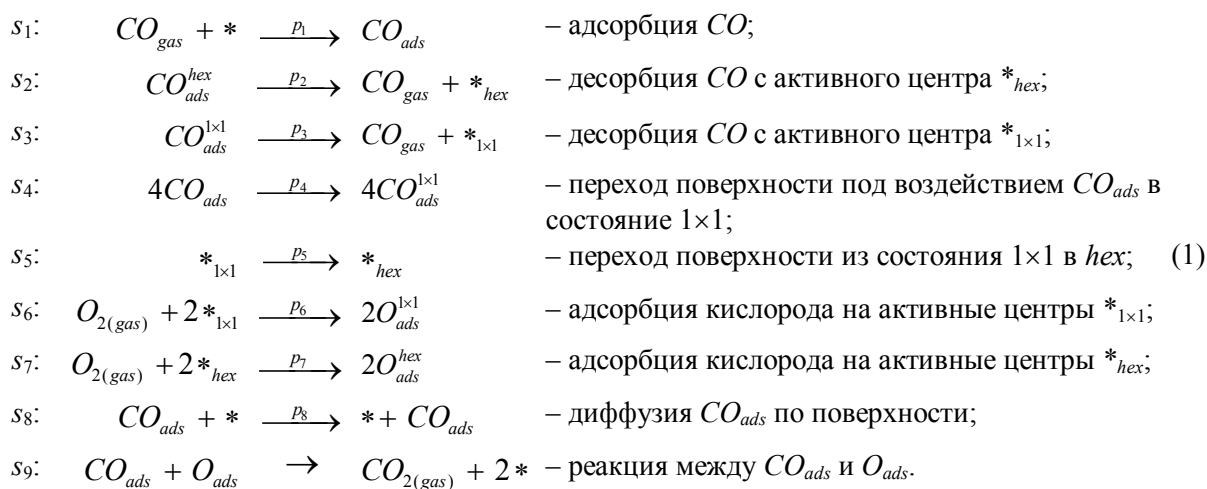
Целью работы является сравнение эволюций асинхронного КА, моделирующего реакцию окисления CO на поверхности Pt, и блочно-синхронного; параллельная реализация блочно-синхронного КА и анализ эффективности распараллеливания.

Во втором разделе статьи приведены уравнения реакции, описывающие каталитическое окисление CO на Pt, представлена клеточно-автоматная модель реакции и результаты КА-моделирования. В третьем разделе описывается метод преобразования асинхронного режима работы КА в блочно-синхронный и проводится сравнительный анализ их эволюций. Четвёртый раздел посвящен параллельной реализации блочно-синхронного КА, приводятся алгоритм и оценки эффективности распараллеливания.

2. Моделирование каталитической реакция окисления CO на Pt

2.1 Описание механизм реакции

Экспериментальные и теоретические исследования, проведённые в [4, 7], показали, что в ходе реакции окисления происходит периодическая реконструкция структуры поверхности платины из гексагональной в кубическую ($hex \leftrightarrow 1 \times 1$). Реконструкция поверхности вызвана изменением каталитических свойств поверхности под воздействием адсорбированного CO . Детальный механизм реакции, учитывающий перестройку и изменение каталитических свойств поверхности, описан в [8]:



Символ « $*_{hex}$ » обозначает свободный активный центр поверхности с гексагональной структурой, « $*_{1 \times 1}$ » – свободный активный центр поверхности с кубической структурой, а символ « $*$ » – это свободный активный центр с любой структурой hex или 1×1 . Активный центр,

– это атом поверхности катализатора, на котором адсорбируются молекулы. На одном центре может адсорбироваться только одна молекула, и адсорбция на одном центре не влияет на возможность адсорбции на соседние.

Согласно алгоритму, предложенному в [8], активные центры поверхности катализатора выбираются случайным образом, для выбранного центра с вероятностью p_i выбирается одна из элементарных стадий s_i , $i = 1, \dots, 9$ приведенных выше (1). Вероятность выбора всех стадий, кроме s_9 , вычисляется по формуле:

$$p_i = k_i / \sum_{l=1}^8 k_l, \quad (2)$$

где k_i – константа скорости i -ой стадии, причём $k_8 = M_{diff} \cdot \sum_{l=1}^7 k_l$, где M_{diff} – параметр интенсивности диффузии. Стадия s_9 реализуется сразу же после выбора одной из следующих стадий: адсорбции CO (s_1), адсорбции O (s_6, s_7), диффузии (s_8). Это связано с тем, что взаимодействие между молекулами CO_{ads} и O_{ads} , оказавшихся на соседних активных центрах, происходит мгновенно.

Известно, что в условиях, далеких от равновесных, реакция окисления CO на поверхности платиновых металлов может сопровождаться появлением таких критических явлений как автоколебания, подвижные волны, хаос. Колебательный характер реакции был обнаружен в вычислительных экспериментах [7, 8] с помощью метода Монте-Карло при следующем наборе констант скоростей элементарных стадий:

$$k_1=14,7, k_2=4, k_3=0,03, k_4=3, k_5=2, k_6=56, k_7=0,056, M_{diff}=50. \quad (3)$$

Колебания концентраций реагентов обусловлены обратимым фазовым переходом поверхности платины из состояния hex в 1×1 , различная адсорбционная активность hex и 1×1 - поверхности является причиной периодической смены покрытий $CO_{ads} \leftrightarrow O_{ads}$

2.2 Клеточно-автоматная модель реакции окисления CO на Pt

Механизм реакции, описанный в разделе 2.1, реализуется с помощью асинхронного КА. Поверхности катализатора соответствует клеточный массива, молекулы и атомы, участвующие в реакции, – это состояния клеток. Элементарные стадии s_i описываются вероятностными правилами переходов КА. Асинхронный режим работы соответствует случайному выбору активных центров поверхности катализатора.

Асинхронный клеточный автомат определяется тремя понятиями [9]:

$$\aleph_\alpha = \langle A, X, \Theta \rangle,$$

A – это алфавит состояний клеток, X – множество имен клеток, Θ – локальный оператор.

Алфавит состояний выбран в соответствии с реагентами, участвующими в реакции:

$$A = \{ *_{1 \times 1}, *_{hex}, CO_{ads}^{1 \times 1}, CO_{ads}^{hex}, O_{ads}^{1 \times 1}, O_{ads}^{hex} \}. \quad (4)$$

Символы $*_{1 \times 1}$ и $*_{hex}$ обозначают свободный активный центр поверхности с гексагональной и кубической структурой соответственно; $CO_{ads}^{1 \times 1}$, CO_{ads}^{hex} – это молекула монооксида углерода, адсорбированная на 1×1 и hex поверхности; $O_{ads}^{1 \times 1}$, O_{ads}^{hex} – молекула кислорода, адсорбированная на 1×1 и hex поверхности соответственно.

Множество имён $X = \{(i, j): i=1..M_i, j=1..M_j\}$ определяется координатами клеток в дискретном пространстве, соответствующем поверхности катализатора. Клеткой называется пара $(u, (i, j))$, где $u \in A$ – это состояние клетки, $(i, j) \in X$ – имя клетки. На множестве имен вводятся именуемые функции $\varphi(i, j): X \rightarrow X$, определяющие имена соседних клеток для клетки (i, j) . Конечное множество именуемых функций называется шаблоном соседства $T(i, j)$, ставящим в соответствие каждой клетке массива множество её соседей [10].

В исследуемой модели используются следующие шаблоны соседства (Рис. 1):

$$\begin{aligned}
T_1(i, j) &= \{\varphi_0(i, j)\}; \\
T_5(i, j) &= \{\varphi_0(i, j), \varphi_1(i, j), \dots, \varphi_4(i, j)\}; \\
T_9(i, j) &= \{\varphi_0(i, j), \varphi_1(i, j), \dots, \varphi_8(i, j)\}; \\
T_{13}(i, j) &= \{\varphi_0(i, j), \varphi_1(i, j), \dots, \varphi_{12}(i, j)\},
\end{aligned} \tag{5}$$

где именуемые функции имеют следующий вид:

$$\{\varphi_0(i, j), \varphi_1(i, j), \dots, \varphi_{12}(i, j)\} = \{(i, j), (i, j-1), (i+1, j), (i, j+1), (i-1, j), (i-1, j-1), (i, j-2), (i+1, j-1), (i+1, j+1), (i-1, j+1), (i, j-2), (i+2, j), (i, j+2), (i-2, j)\}.$$

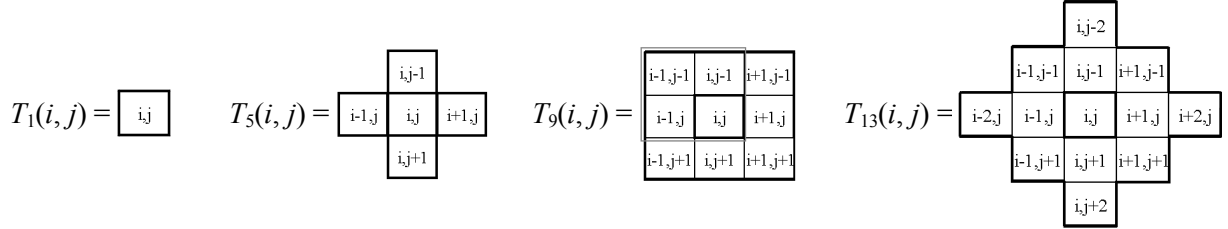


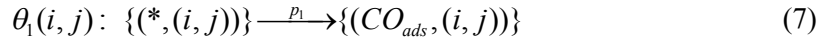
Рис. 1. Шаблоны соседства, используемые в КА-модели реакции окисления.

Локальный оператор $\Theta(i, j)$ определяет правила изменения состояний клеток в соответствии с уравнениями реакции и является сложной композицией подстановок и их суперпозиций:

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

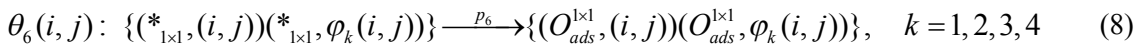
где $\theta_l, l \in \{2, 3, 4, 5\}$ – подстановки, соответствующие стадиям реакции окисления, а $\theta_{(l,9)} = \theta_9(\theta_l), l = 1, 6, 7, 8$ – суперпозиции двух подстановок θ_l и θ_9 . Подстановки θ_l и суперпозиции $\theta_{(l,9)}$ выбираются с вероятностью p_l , вычисляемой по формуле (2).

В КА-модели реакции окисления каждой элементарной стадии s_l соответствует подстановка θ_l . Например, адсорбция монооксида углерода на свободный активный центр (s_1) описывается подстановкой θ_1 :



Отсутствие индексов 1×1 и *hex* означает, что подстановка применяется независимо от состояния поверхности и не изменяет её структуру.

Подстановки и суперпозиции изменяют состояние клеток в зависимости от состояний соседних клеток, принадлежащих соответствующему шаблону моделирования. Например, для применения подстановки θ_6 необходимо, чтобы две соседние клетки находились в состоянии $*_{1 \times 1}$:



Подстановки $\theta_l, l \in \{1, 2, 3, 5\}$ применяются к одной клетке, поэтому для них используется шаблон $T_1(i, j)$. Подстановка θ_4 применяется к блоку, состоящему из четырёх соседних клеток, блок выбирается случайным образом по шаблону $T_9(i, j)$. Для применения остальных подстановок $\theta_l, l \in \{6, 7, 8, 9\}$ требуются состояния двух клеток: (i, j) и одной из четырёх соседних клеток $\varphi_k(i, j), k = 1, 2, 3, 4$. Соседняя для (i, j) клетка $\varphi_k(i, j)$ выбирается по шаблону $T_5(i, j)$ с вероятностью 0,25.

Суперпозиция подстановок $\theta_{(l,9)} = \theta_9(\theta_l), l = 1, 6, 7, 8$ предполагает применение подстановки θ_9 к результату выполнения $\theta_l, l = 1, 6, 7, 8$. Необходимость использования суперпозиции связана с особенностями реализации стадии s_9 . При применении суперпозиции $\theta_{(l,9)} = \theta_9(\theta_l), l = 6, 7, 8$ сначала к клетке с именем (i, j) применяется подстановка θ_l , которая по шаблону $T_5(i, j)$ выбирает одну из четырёх соседних клеток $\varphi_k(i, j), k = 1, 2, 3, 4$. Сразу же после применения θ_l к выбранным клеткам (i, j) и $\varphi_k(i, j)$ применяется подстановка θ_9 , которая также по шаблону $T_5(i, j)$ выбирает одну из четырёх соседних клеток. В результате объединения

шаблонов получаем, что при применении суперпозиции необходимо использовать шаблон $T_{13}(i,j)$:

$$T_{13}(i, j) = \bigcup_{k=1}^4 T_5(\varphi_k(i, j)) \quad (9)$$

При применении суперпозиции $\theta_{(1,9)} = \theta_9(\theta_1)$ достаточно использования шаблона $T_5(i, j)$, т.к. подстановка θ_1 изменяет состояние одной клетки, и затем к этой же клетке применяется подстановка θ_9 , которая по шаблону $T_5(i, j)$ выбирает одну из четырех соседних клеток $\varphi_k(i, j)$.

Асинхронный режим функционирования КА предполагает, что локальный оператор $\Theta(i, j)$ применяется по очереди к случайно выбранным клеткам массива, сразу же изменяя их состояния. Далее асинхронный КА с определенными выше алфавитом A , множеством имён X и локальным оператором $\Theta(i, j)$ будем обозначать символом KA_a .

Реагенты, адсорбированные на поверхности катализатора, постоянно диффундируют, тогда как остальные процессы (адсорбция, десорбция, реконструкция поверхности) происходят намного реже, поэтому константа скорости диффузии s_8 значительно выше, чем константы скорости остальных стадий. В КА-модели это реализуется с помощью увеличения вероятности выбора подстановки, моделирующей диффузию, в M_{diff} раз по сравнению с суммой вероятностей остальных подстановок. В соответствии с [7, 8] значение M_{diff} выбирается в диапазоне $50 \div 100$.

Время в КА-модели дискретно, весь процесс КА-моделирования разбивается на итерации. При моделировании реакции окисления итерация принимается равной $M_i \cdot M_j \cdot M_{diff}$ применениям локального оператора $\Theta(i, j)$ к случайно выбранным клеткам массива. За итерацию клеточный массив Ω переходит из одного глобального состояния $\Omega(t)$ в другое $\Omega(t+1)$, где t – номер итерации. Последовательность $\Sigma(\Omega) = \Omega(0), \dots, \Omega(t), \Omega(t+1), \dots, \Omega(t_{fin})$, полученная в результате итеративного функционирования КА, называется эволюцией, $\Omega(0)$ – исходное состояние клеточного массива, $\Omega(t)$ – состояние массива на t -ой итерации, t_{fin} – число итераций [10].

2.3 Результаты КА-моделирования

Компьютерное моделирование реакции окисления с помощью последовательной реализации KA_a выполнялось на клеточном массиве размером $M_i \times M_j = 200 \times 200$ клеток с периодическими граничными условиями. Вероятности применения подстановок θ_i вычисляются по формуле (2) для констант скорости k_i (3): $p_1 = 3,613 \cdot 10^{-3}$, $p_2 = 9,83 \cdot 10^{-4}$, $p_3 = 7,37 \cdot 10^{-6}$, $p_4 = 7,37 \cdot 10^{-4}$, $p_5 = 4,92 \cdot 10^{-4}$, $p_6 = 1,3762 \cdot 10^{-2}$, $p_7 = 1,38 \cdot 10^{-5}$, $p_8 = 9,80392 \cdot 10^{-1}$. Параметр диффузии $M_{diff} = 50$. В исходном состоянии все клетки массива находятся в состоянии $*_{hex}$.

В качестве характеристик КА-моделирования реакции окисления выбраны следующие величины:

- концентрации реагентов, адсорбированных на поверхности катализатора: $n(O_{ads})$, $n(CO_{ads})$;
- скорость образования CO_2 : $v(CO_2)$;
- доли поверхности с кубической и гексагональной структурой: $f(1 \times 1)$, $f(hex)$.

Концентрация адсорбированных на поверхности катализатора веществ вычисляется после каждой итерации как отношение количества клеток (N), находящихся в состоянии, соответствующем данному реагенту, к размеру клеточного массива ($M_i \cdot M_j$):

$$n(CO_{ads}) = \frac{N(CO_{ads}^{1 \times 1}) + N(CO_{ads}^{hex})}{M_i \cdot M_j} \quad (10)$$

$$n(O_{ads}) = \frac{N(O_{ads}^{1 \times 1}) + N(O_{ads}^{hex})}{M_i \cdot M_j} \quad (11)$$

Скорость образования CO_2 вычисляется как отношение числа применений подстановки θ_9 , произошедших за итерацию, к размеру клеточного массива:

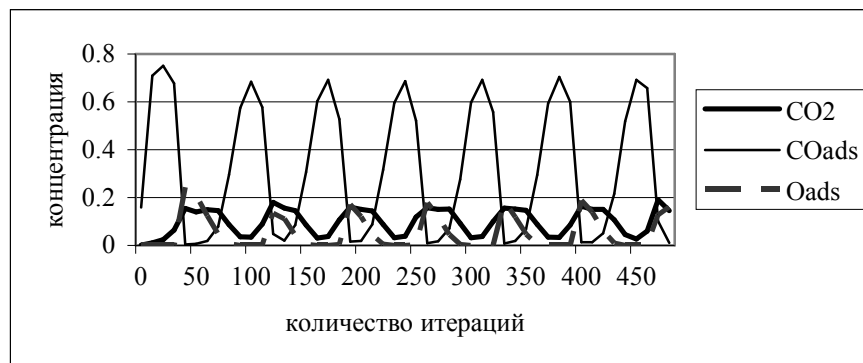
$$v(CO_2) = \frac{N(CO_{ads} + O_{ads})}{M_i \cdot M_j} \quad (12)$$

Доля 1×1 и hex поверхности вычисляется после каждой итерации по следующим формулам:

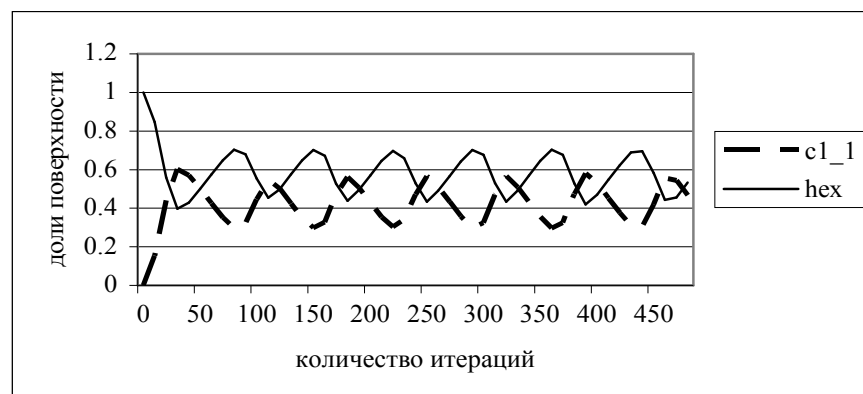
$$f(1 \times 1) = \frac{N(*_{1 \times 1}) + N(CO_{ads}^{1 \times 1}) + N(O_{ads}^{1 \times 1})}{M_i \cdot M_j} \quad (13)$$

$$f(hex) = \frac{N(*_{hex}) + N(CO_{ads}^{hex}) + N(O_{ads}^{hex})}{M_i \cdot M_j} \quad (14)$$

В результате КА-моделирования реакции окисления получены колебания концентраций реагентов $n(O_{ads})$, $n(CO_{ads})$, скорости образования CO_2 – $v(CO_2)$ и доли поверхности с кубической и гексагональной структурой $f(1 \times 1)$, $f(hex)$ (Рис. 2).



а)



б)

Рис. 2. Характер колебаний в реакции окисления CO на Pt:

а) концентрация CO_{ads} , O_{ads} и скорость образования CO_2 ; б) доли 1×1 и hex поверхности.

Колебания концентраций реагентов в реакции окисления CO наблюдаются только при определённых значениях констант скорости реакции. С помощью исследования эволюции KA_a построена бифуркационная диаграмма в пространстве констант скорости адсорбции кислорода $k_6 \in [0; 10^5]$ и монооксида углерода $k_1 \in [0; 200]$ (Рис. 3). Точками обозначены значения, полученный в результате КА-моделирования, пунктирная линия построена с помощью линейной интерполяции.

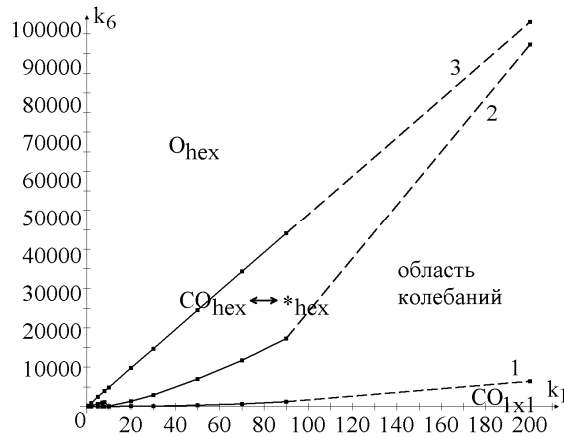


Рис. 3. Бифуркационная диаграмма реакции окисления CO на Pt .

В зависимости от значений констант k_6 и k_1 обнаружено наличие трёх различных режимов протекания реакции:

- два равновесных состояния – поверхность катализатора покрывается $CO_{1 \times 1}$ (ниже границы 1) либо O_{hex} (выше границы 3);
- режим колебаний концентраций реагентов и скорости образования CO_2 (область колебаний между кривыми 1 и 2)
- периодическая смена $CO_{ads}^{hex} \leftrightarrow *_{hex}$, при которой доля 1×1 поверхности мала, и адсорбция кислорода практически не происходит (область между кривыми 2 и 3).

3. Блочно-синхронный режим функционирования КА

3.1 Преобразование асинхронного КА в блочно-синхронный

Изучение пространственно-временной динамики реакции окисления CO требуют проведения вычислительных экспериментов с использованием клеточных массивов размером $M_i \times M_j = 8000 \times 8000$ клеток в течение 10^6 итераций. Решение таких задач на однопроцессорной машине займёт несколько месяцев, поэтому необходимо использовать эффективные алгоритмы распараллеливания. Эффективное распараллеливание асинхронных КА является трудновыполнимой задачей, так как при асинхронном режиме межпроцессорный обмен данными приходится выполнять после изменения каждой граничной клетки. Поэтому асинхронный режим работы изменяется на блочно-синхронный, который вводит частичную синхронизацию режима функционирования, не нарушая при этом условия корректности, т.е. состояние клетки одновременно не могут изменить разные подстановки.

Преобразование асинхронного КА $KA_\alpha = \langle A, X, \Theta \rangle$ в блочно-синхронный $KA_\beta = \langle A, X, \Theta \rangle$ выполняется следующим образом [5].

1) На множестве имён X определяется шаблон, называемый блоком $B(i, j)$. Для выполнения условия корректности блок должен включать в себя все шаблоны соседства (4):

$$T_1(i, j) \subset T_5(i, j) \subset T_9(i, j) \subset T_{13}(i, j) \subseteq B(i, j) \Rightarrow B(i, j) = T_{13}(i, j), |B(i, j)| = 13. \quad (15)$$

Блок $B(i, j)$ определяет на множестве имён множество разбиений $\Pi = \{X_1, X_2, \dots, X_{13}\}$ таких, что для всех $X_k, k = 1, \dots, |B(i, j)|$ выполняются соотношения:

$$|X_k| = \frac{|X|}{|B(i, j)|}, \quad \bigcup_{k=1}^{|B(i, j)|} X_k = X, \quad X_k \cap X_l = \emptyset \quad \forall k, l = 1, \dots, |B(i, j)|; \quad (16)$$

$$\bigcup_{(i, j) \in X_k} B(i, j) = X, \quad B(i, j) \cap B(k, l) = \emptyset \quad \forall (i, j), (k, l) \in X_k. \quad (17)$$

2) Итерация разбивается на $|B(i, j)| = 13$ этапов. На каждом этапе локальный оператор $\Theta(i, j)$ применяется ко всем клеткам выбранного случайным образом разбиения X_k . Порядок выбора клеток внутри разбиения X_k не важен, т.к. условие (15) гарантирует, что локальный оператор применяется к разным блокам и шаблоны применения подстановок не пересекаются.

3.2 Сравнение асинхронного и блочно-синхронного режимов работы КА

При блочно-синхронном режиме работы на каждом этапе локальный оператор применяется только к клеткам одного разбиения X_k , что существенно уменьшает стохастичность выбора клеток. Эволюция блочно-синхронного КА для некоторых классов задач не совпадает с эволюцией асинхронного КА, например, для КА со взвешенными шаблонами, вычисляющих новые состояния в зависимости от взвешенной суммы состояний соседних клеток. При асинхронном и блочно-синхронном режимах КА со взвешенными шаблонами для некоторых последовательностей случайных чисел, определяющих выбор клеток, формируются различные устойчивые структуры (Рис. 4).

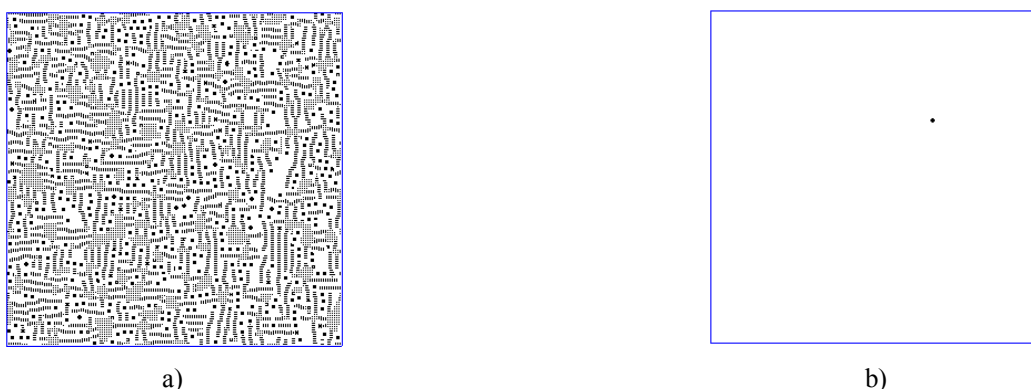


Рис. 4. Устойчивые состояния КА со взвешенными шаблонами при одинаковых начальных значениях и различных режимах функционирования: а) асинхронный; б) блочно-синхронный.

В общем случае невозможно доказать эквивалентность эволюций асинхронного и блочно-синхронного КА, каждая задача требует проведения отдельного анализа результатов КА-моделирования. Вычислительные эксперименты для различных моделей класса "реакция – диффузия" подтверждают возможность использования блочно-синхронного преобразования для этого класса задач. Например, при реализации модели Ziff-Gulari-Barshad (ZGB) с помощью асинхронного и блочно-синхронного КА значения скорости образования CO_2 , концентраций CO_{ads} и O_{ads} очень близки.

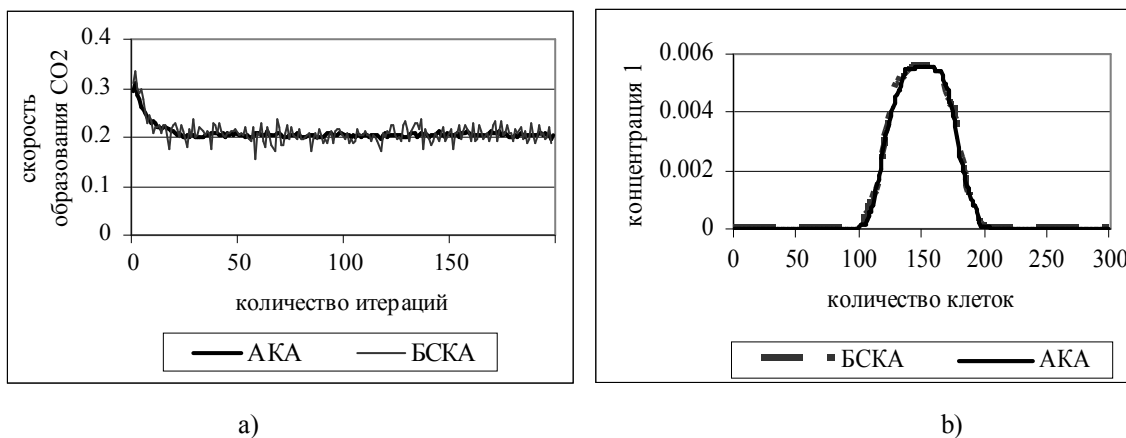


Рис. 5. Сравнение асинхронного и блочно-синхронного режимов моделирования задач класса "реакция-диффузия": а) скорость образования CO_2 в КА-модели ZGB ; б) концентрация единиц в КА-модели диффузии.

На **Рис. 5а** представлены изменения скорости образования CO_2 при вероятности адсорбции CO 0,5. Уровень клеточно-автоматного шума для значений, полученных с помощью блочно-синхронного КА при $B(i, j) = T_9(i, j)$, находится в пределах допустимой величины и при увеличении размера блока уменьшается. Ещё одним примером КА-модели, допускающей преобразование асинхронного режима в блочно-синхронный, является диффузия. При моделировании диффузии с помощью асинхронного и блочно-синхронного КА осреднённые значения концентрации единиц совпадают (**Рис. 5б**).

Для проверки возможности применения блочно-синхронного преобразования в случае КА-моделирования реакции окисления CO на Pt (1), сравнивались результаты вычислительных экспериментов, выполненных при $M_i \times M_j = 200 \times 200$ клеток, $t_{fin} = 10^5$ итераций и для значений констант скорости (3). В качестве параметров сравнения выбраны следующие характеристики:

- распределение вероятностей $n(O_{ads})$, $n(CO_{ads})$, $v(CO_2)$, $f(1 \times 1)$, $f(hex)$ и периодов колебаний T ;
- математическое ожидание и дисперсия $n(O_{ads})$, $n(CO_{ads})$, $v(CO_2)$, $f(1 \times 1)$, $f(hex)$, T и доверительные интервалы для математического ожидания и дисперсии;
- бифуркационная диаграмма реакции окисления.

Анализ результатов моделирования показал, что значения распределений вероятностей $n(O_{ads})$, $n(CO_{ads})$, $v(CO_2)$, $f(1 \times 1)$, $f(hex)$, T , полученные с помощью KA_α и KA_β , очень близки. На **Рис. 6** представлено распределение вероятностей $v(CO_2)$ и периодов колебаний. Среднеквадратичные разности распределений вероятностей этих характеристик для асинхронного и блочно-синхронного КА не превосходят 10^{-4} . Например, среднеквадратичные разности распределений вероятностей $v(CO_2)$ и периодов T составляют $E(v(CO_2)) = 5.9 \cdot 10^{-5}$ и $E(T) = 7.1 \cdot 10^{-5}$.

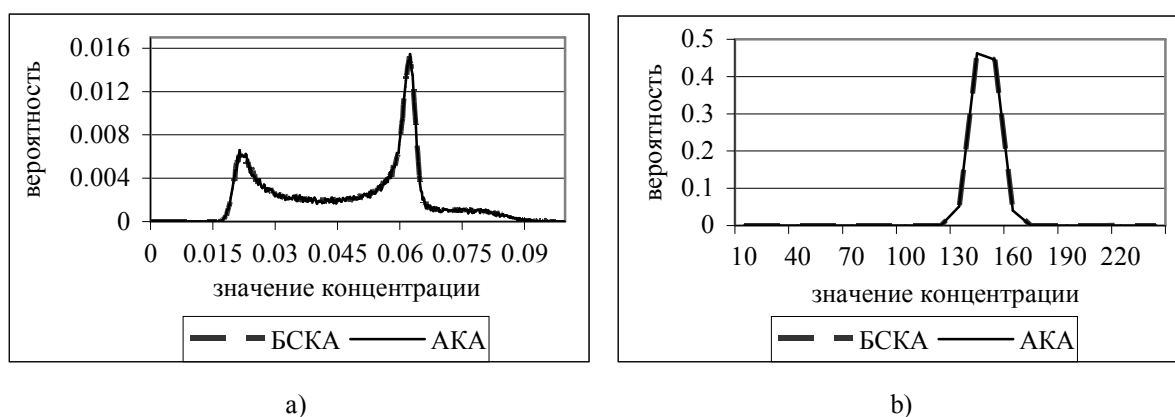


Рис. 6. Сравнение значений распределения вероятностей, вычисленных с помощью KA_α и KA_β : а) скорость образования CO_2 ; б) периоды колебаний.

Математическое ожидание ($M\xi$), дисперсия ($D\xi$) и доверительные интервалы для математического ожидания $I_{M\xi}$ и дисперсии $I_{D\xi}$, вычисленные для скорости образования CO_2 и периодов колебаний, приведены в таблице 1. Доверительные интервалы рассчитывались с доверительной вероятностью $\gamma=0.95$. Из таблицы видно, что значения числовых характеристик для концентраций адсорбированных реагентов, скорости образования CO_2 и доли 1×1 и hex поверхности, полученных в результате моделирования с помощью асинхронного и блочно-синхронного КА, отличаются незначительно.

Бифуркационная диаграмма, построенная в результате анализа эволюции блочно-синхронного КА в пространстве констант скорости адсорбции кислорода k_6 и монооксида углерода k_1 , совпадает с диаграммой, вычисленной с помощью асинхронного КА (**Рис. 3**). Это подтверждает, что KA_α и KA_β демонстрируют одинаковый характер поведения реакции окисления.

Таблица 1. Статистические характеристики $\nu(CO_2)$ и T , полученные с помощью KA_α и KA_β .

Характеристики	$M\zeta$	$D\zeta$	$I_{M\zeta}$	$I_{D\zeta}$
$\nu(CO_2)^{AKA}$	0.048841	0.000317	(0.048805; 0.048876)	(0.000316; 0.000318)
$\nu(CO_2)^{БСКА}$	0.048826	0.000316	(0.048791; 0.048862)	(0.000315; 0.000317)
T^{AKA}	14.490580	0.461572	(14.485427; 14.495732)	(0.456621; 0.466523)
$T^{БСКА}$	14.469609	0.538590	(14.464047; 14.475171)	(0.532817; 0.544363)

Полученные результаты свидетельствуют о совпадении эволюций асинхронного и блочно-синхронного КА.

4. Результаты распараллеливания блочно-синхронного КА

Распараллеливание блочно-синхронного КА заключается в разделении клеточного массива $\Omega(A, X)$ на домены $|Dom| = \frac{|X|}{n}$, которые распределяются между n процессами. Каждый процесс вычисляет новые значения клеток своего домена и пересылает граничные значения соседним процессам. Обмен граничными значениями выполняется в конце каждого этапа, т.к. условие (15) гарантирует, что при применении локального оператора $\Theta(i, j)$ к клеткам выбранного разбиения X_k не понадобятся значения состояний клеток, вычисленных на текущем этапе [5]. Объём пересылаемых данных составляет $2 \cdot P_{Dom}$ байт, где P_{Dom} – периметр домена.

Распараллеливание блочно-синхронного КА выполнялось на суперкомпьютере «МВС-100К» (МСЦ РАН) с использованием библиотеки MPI. При распараллеливании используется гибридная модель MPI+OpenMP. На каждом вычислительном узле запускается 4 MPI-процесса, в каждом из которых запускается по 2 потока. Для эффективного использования ресурсов вычислительного модуля потоки явным образом назначаются на ядра, объединённые общей кэш-памятью. Результаты распараллеливания клеточного массива размером $|X|=8000 \times 8000$ представлены в таблице 2. В качестве характеристик распараллеливания рассматриваются: T_n – время вычислений с использованием n процессов, $S(n) = \frac{T_1}{T_n}$ – ускорение и $Q(n) = \frac{T_1}{T_n \cdot n}$ – эффективность распараллеливания.

Таблица 2. Характеристики распараллеливания блочно-синхронного КА

n	1	4	16	32	64	128
T_n, s	266,68	67,62	18,15	9,45	5,06	2,85
$S(n)$	1	3,94	14,69	28,36	52,69	93,73
$Q(n)$	1	0,99	0,92	0,89	0,82	0,73
$ Dom $	$2,56 \cdot 10^8$	$6,4 \cdot 10^7$	$1,6 \cdot 10^7$	$8 \cdot 10^6$	$4 \cdot 10^6$	$2 \cdot 10^6$

Данные приведенные в таблице показывают, что при использовании до 128 процессов эффективность $Q(n)$ выше 80%, при дальнейшем увеличении числа процессов эффективность распараллеливания падает. Это связано с возрастанием накладных расходов на обеспечение обмена данными между вычислительными узлами и недостаточной загрузкой ядер. Для достижения высокой эффективности размер домена $|Dom|$ должен превышать $2,04 \cdot 10^6$ клеток.

5. Заключение

В работе реализован асинхронный клеточный автомат, моделирующий реакцию окисления CO на поверхности Pt. Построенная КА-модель демонстрирует колебания скорости реакции, концентраций веществ, адсорбирующихся на поверхности катализатора, и долей 1×1 и hex

поверхности. Колебания сопровождаются различными волновыми процессами на моделируемой поверхности.

Для достижения высокой эффективности распараллеливания выполнено преобразование асинхронного КА в блочно-синхронный. Для проверки эквивалентности эволюций KA_α и KA_β сравнивались значения распределения вероятностей концентраций и периодов колебаний, математическое ожидание и дисперсия распределения вероятностей, доверительные интервалы и бифуркационные диаграммы реакции окисления. Статистические характеристики, полученные в результате моделирования с помощью асинхронного и блочно-синхронного КА, отличаются незначительно, что свидетельствует о применимости преобразования KA_α в KA_β для реакции окисления CO .

Выполнено распараллеливание блочно-синхронного КА, моделирующего реакцию окисления CO на Pt. Анализ характеристик распараллеливания при $|X|=8000 \times 8000$ клеток показал, что для достижения высокой эффективности размер домена $|Dom|$ должен превышать $2,04 \cdot 10^6$ клеток.

Литература

1. Wolfram S. «New Kind of Science» // Wolfram Media, Inc. 2002 // <http://www.wolframscience.com/>
2. Тоффоли Т., Марголюс Н. Машины клеточных автоматов. М.: Мир, 1991. - С. 269.
3. Ванг В.К. Исследование пространственно распределенных динамических систем методами вероятностного клеточного автомата // Успехи физических наук. Обзоры актуальных проблем, 1999. - Т. 169. - № 5. - С. 481-505.
4. Ronald Imbihl and Gerhard Ertl. Oscillatory Kinetics in Heterogeneous Catalysis // Chemical Reviews, 1995. - Vol. 95, No. 3. – P. 697-733.
5. Бандман О.Л. Параллельная реализация клеточно-автоматных алгоритмов моделирования пространственной динамики // Сибирский журнал вычислительной математики. 2007. - № 4. – С. 345-361.
6. Nedeя S.V., Lukkien J.J., Jansen A.P.J., Hilbers P.A.J. Methods for parallel simulations of surface reactions // arXiv:physics/0209017. – V. 1. - 2002.
7. Elokhin V. I., Latkin E. I., Matveev A. V., and Gorodetskii V. V. Application of statistical lattice models to the analysis of oscillatory and autowave processes in the reaction of carbon monoxide oxidation over platinum and palladium surfaces // Kinetics and Catalysis. – 2003. - V. 44. - № 5. - P. 692-700.
8. Latkin E.I., Elokhin V.I., 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 // Journal of Molecular Catalysis A: Chemical. - 2001. -V. 166. - P. 23–30.
9. Бандман О.Л. Клеточно-автоматное моделирование диффузионно-реакционных процессов // Автометрия. - 2003. -Т. 39. - № 3. - С. 1-16.
10. Бандман О.Л. Клеточно-автоматные модели пространственной динамики. // Системная информатика - Методы и модели современного программирования. -2006, №10. – С. 59 – 113.