Клеточно-автоматное моделирование пространственно распределенных процессов на суперкомпьютерах

О.Л.Бандман

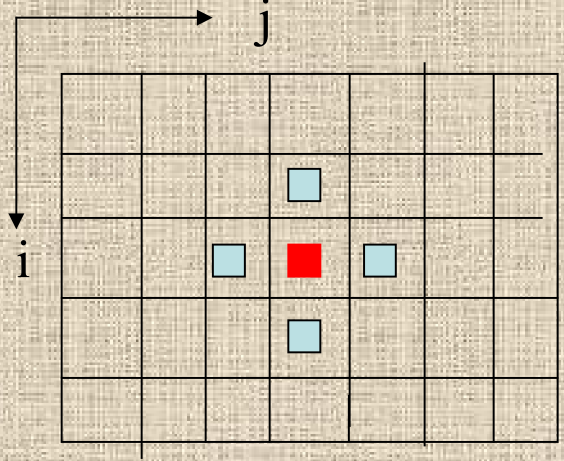
bandman@ssd.sscc.ru

Институт вычислительной математики
и математической геофизики
СОРАН

Летняя школа 2012

Развитие методов компьютерного моделирования

Клеточный автомат



$$\aleph = \langle A, X, \Theta, \rho \rangle$$

$$A=\{0,1\} \vee \{0,1,\ldots,n\} \vee \{\text{Symbols}\}$$

$$X=\{(i,j): i,j=0,\ldots,N\}$$

$T(i,j) = \{(i,j)_0, (i-1,j)_1, (i,j+1)_2, (i+1,j)_3, (i,j-1)_4\}$ – шаблон

$V(T(i,j))=\{v_0, v_1, v_2, v_3, v_4\}$ - локальная конфигурация

$v_0(t+1) = F(v_0, v_1, v_2, v_3, v_4)$ – функция переходов

база **_контекст_**

$\Theta(i,j) = \Phi(F_1, \ldots, F_h)$ –локальный оператор

композиция функций переходов

Режимы функционирования

Клеточный массив: $$\Omega = \begin{pmatrix} v_{00} & \cdots & v_{0n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{m0} & \cdots & v_{mn} \end{pmatrix}$$ Глобальное состояние

Применение $\Theta(i,j)$ ко всем $(i,j) \in X$: $\Omega(t) \to \Omega(t+1)$: t-ая итерация

Синхронный режим : 1) вычисляются $v(i,j,t+1)= \Theta(i,j,t)$ $\forall\ (i,j) \in X$

2) $v(i,j,t)$ заменяются на $v(i,j,t+1)$ $\forall\ (i,j) \in X$

Асинхронный режим: $\forall\ \boldsymbol{\tau} = 1,\ldots, |\Omega|$

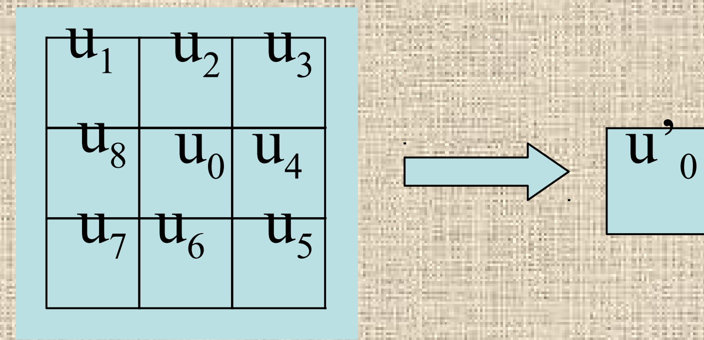
1) выбирается случайно $(i,j) \in X$,

2) вычисляется $v(i,j,t+1)= \Theta(i,j,t)$,

3) $v(i,j,t)$ заменяются на $v(i,jt+1)$.

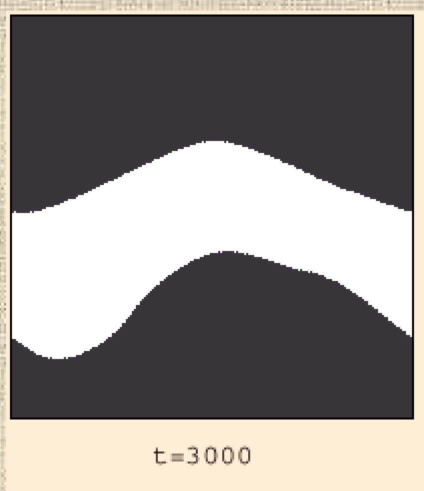
КА «разделение фаз»

$A=\{0,1\}$
$X=\{(i,j):\ i,j=0,\ldots,199\}$



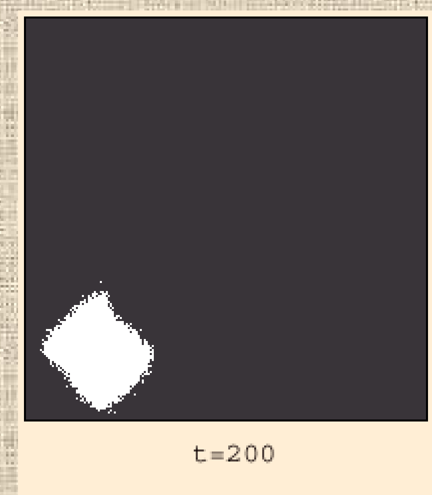
$$u' = \begin{cases} 1, \text{ if } \Sigma u_k > 5 \text{ or } \Sigma u_k = 4 \\ 0, \text{ if } \Sigma u_k < 4 \text{ or } \Sigma u_k = 5 \end{cases}$$

Синхронный режим



Любой порядок применения локального оператора одновременная смена состояний

Асинхронный режим



Случайный порядок применения локального оператора последовательно

Современный взгдяд на КА

CA are mathematical idealization of physical systems, in which time and space are discrete and physical quantities take a finite set of discrete values

S Wolfram .Stat. mechanics of CA
Review of Modern Physics 55 N3 (1983)

КА – это математическая идеализация физической системы, в которой время и пространство дискретны, а физические величины принимают конечное множество значений

КА-моделирование пространственной динамики

Использовапние КА для моделирования пространственных процессов вызвано следующими факторами

- **Технологический:** ***1) специализированные процессоры***

  2) суперкомпьютеры, кластеры,

- **Математический:**

  1) ***Нужда в методах моделирования нелинейных процессов (химия, биология, социология…) часто нет других моделей***

  2) ***Необходимость параллельных реализаций в связи с увеличением размеров задач***

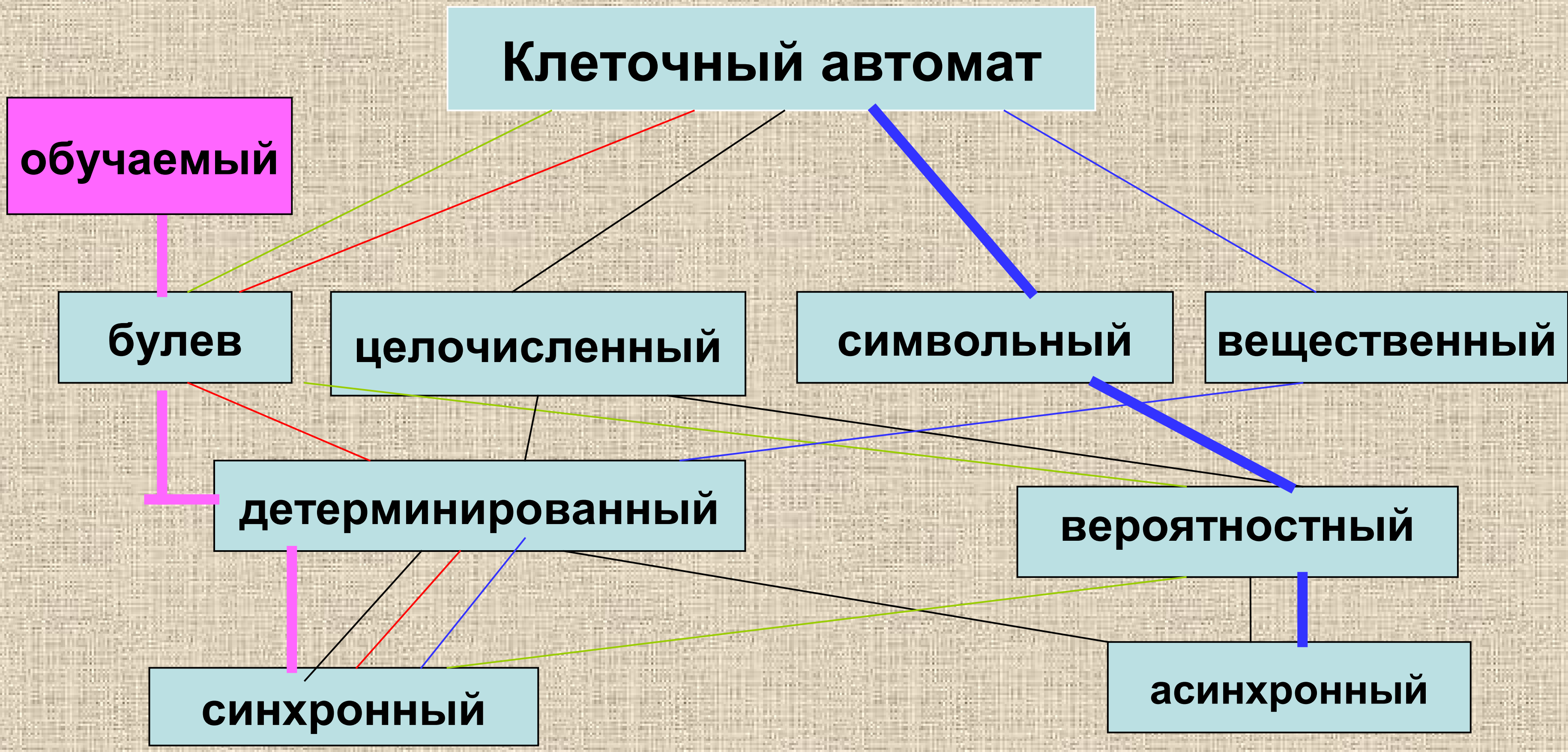
  3) Трудности в преодолении сложности программирования

- **Экономический:**

  Переоценка ценностей вычислительной работы

  аппаратура → дешевеет, программироваие → дорожает

Классы КА-моделей
(мелкозернистые алгоритмы)



Классификация КА-моделей пространственной динамики

- Физико-химические процессы **реакция-диффузия**

  - агрегация, ограниченная диффузией
  - реакция Белоусова-Жаботинского

- Физические явления на основе ***КА-гидродинамики***

  - простая модель FHP
  - потоки, струи, волны

- Процессы самоорганизации
  - формирование устойчивых структур
  - взаимодействия «хищник-жертва»

Процессы

«реакция+диффузия»

Агрегация с ограниченной диффузией

(*рост кораллов, электролиз, образование снега*)

A={■,□,■}, X={(i,j)}, Ω(0)={$N_{□}$ = 0.1|X|, $N_{■}$= **0.9|X|**, **u(200,300,)=u(400,300)=**■},

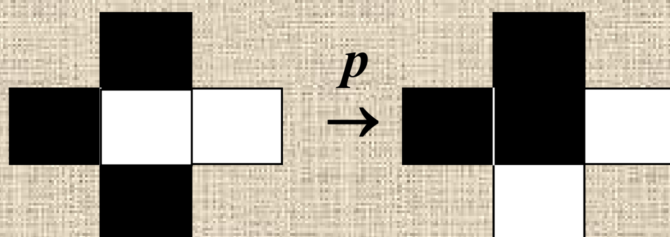
|X|=600$\times$600

Локальный оператор $\boldsymbol{\Theta}$(i,j) = **R(** $\theta_{Agr}\theta_{Diff)}$**)**

Асинхронный режим

Наивная диффузия

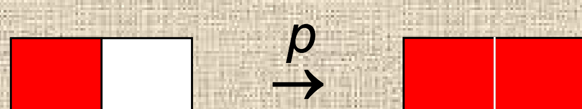
θ_{Diff}:



Обмен состояниями со случайно выбранным соседом, если он не ■

Агрегация

Θ_{Agr}:



Прилипание □ *к* ■ *с вероятностью p*

Агрегация, ограниченная диффузией

(моделирование   К.В. Калгина)

КА, моделирующий реакцию Белоусова-Жаботинского

Малоновая кистота + окисленный бромат + соль церия
= химический осциллятор

$$\aleph = \langle \Theta, A, X \rangle \qquad A=\{I,2,3\ldots,255\}, \qquad M=\{i,j\}.$$

u_1	u_2	u_3
u_7	u_0	u
u	u	u

T(i,j)

(i,j)

Sum=$\sum u$,

$$\Theta: \begin{cases} (255,(i,j)) \rightarrow (1,(i,j)) \\ (1,u_1,\ldots,u_8)(i,j) \rightarrow (f_1(u_1,\ldots,u_8),(i,j)) \\ (\grave{\ddot{u}},u_1,\ldots,u_8)(i,j) \rightarrow (f_2(u_1,\ldots,u_8),(i,j)) \end{cases}$$

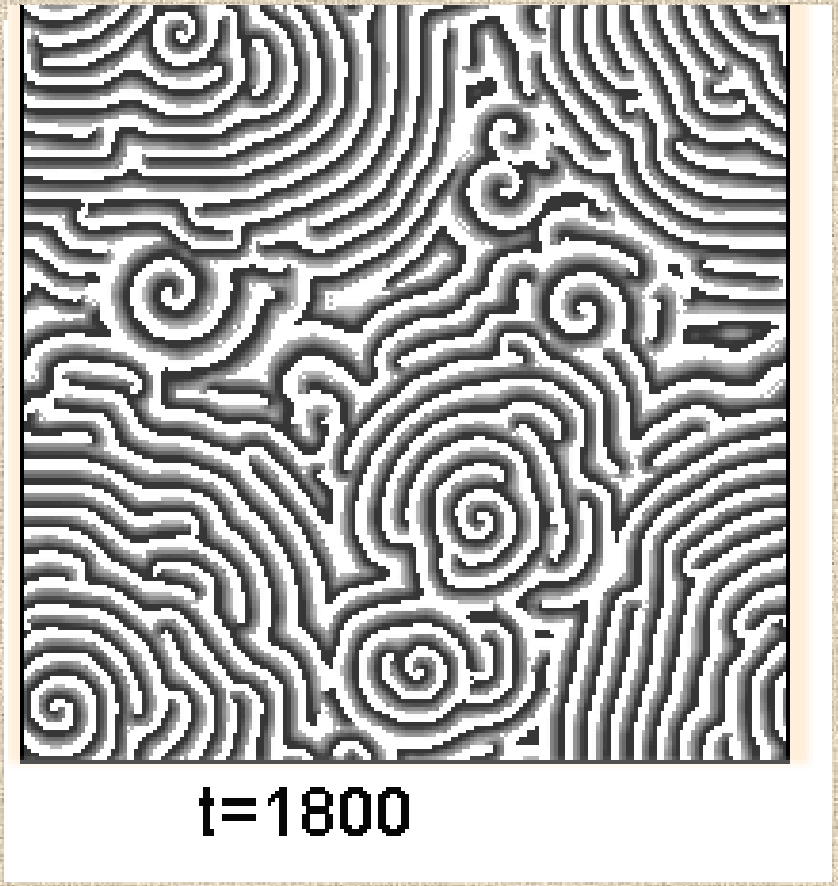
a = число u: u=2,…,254
b = число u: u=255
c = число u ; u=1

$\grave{\ddot{u}} \in \{2,\ldots,254\}$,
$f_1 = a/2+b/3+1$,
$f_2 = \text{Sum}/(9\text{-}c) + Z$

Z=10 - 80

Процесс реакции Белоусова-Жаботинского

Спирали Z=70



КА – гидродинамика

Lattice-Gas Hydrodynamics

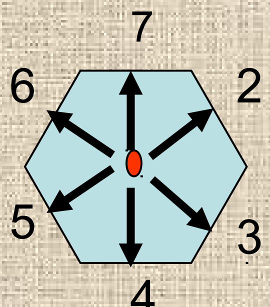
(решеточный газ)

Гексогональная Lattice-Gas модель вязкой жидкости FHP

U.Frish, B Hasslacher, Y.Pomeau в 1986 совершили открытие:

2D Поток может быть представлен абстрактными частицами движущимися с единичной скоростью в 6 направлениях.

Структура клеточного массива гексагональная
В каждой клетке не более 6 движущихся частиц
Масса частицы $m=1$
Скорость частицы $u_i=1$ в одном из 6 направлений
В клетке не может быть более одной частицы, движущейся в одном направлении



$$u = (s_7, s_6, s_5, s_4, s_3, s_2, s_1)$$

$$S_k \in \{0,1\}$$

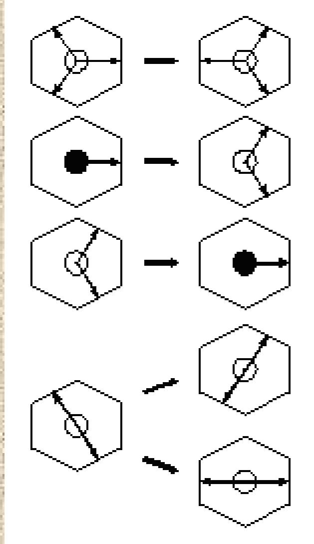
M={(i,j)}

A={(s_k):k=1….7

Режим синхронный
$\Theta = \Theta_2 (\Theta_1)$

Локальные операторы КА FHP (Gas-Lattice)

Θ_1: u(i,j) → u'(i,j)



0101010 → 1010100

0000001 → 0010100

0100100 → 0010010

0100100 → 1001000

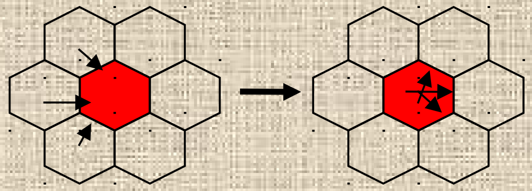
Одна частица покоя с массой **m=1**

⇒

столкновение

Условия сохранения масс и импульсов соблюдаются локально

Θ_2: u(i,j)∗S''(i,j) → u'(i,j)

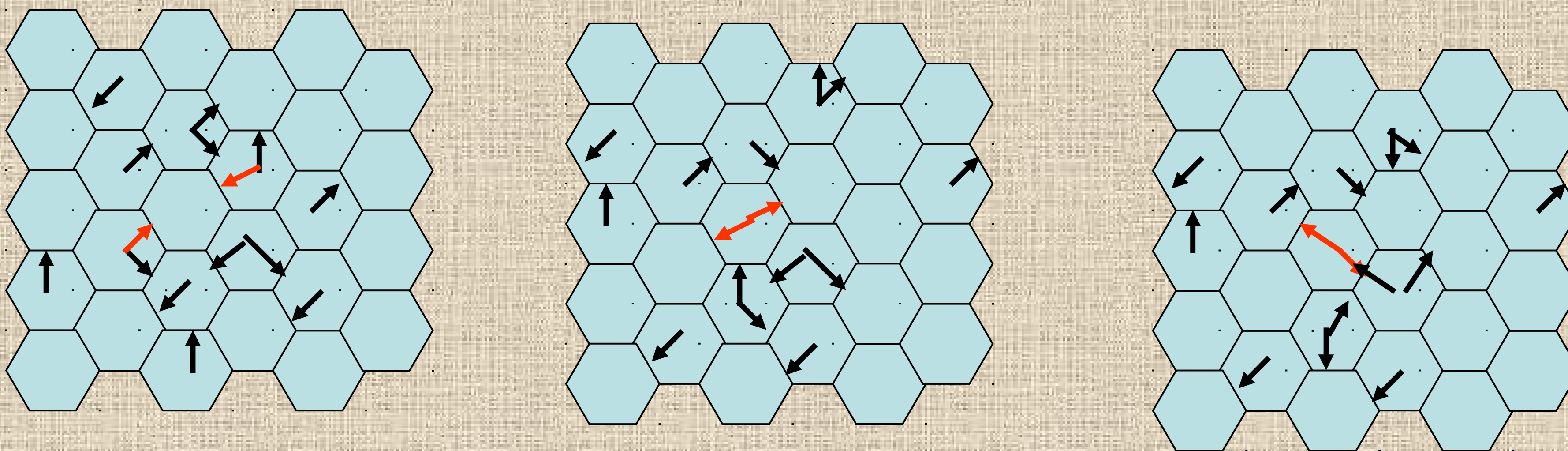


$$u' = \bigvee s_k(i_k.j_k),\ k=1,\dots,6$$

сдвиг

Условия сохранения соблюдаются глобально

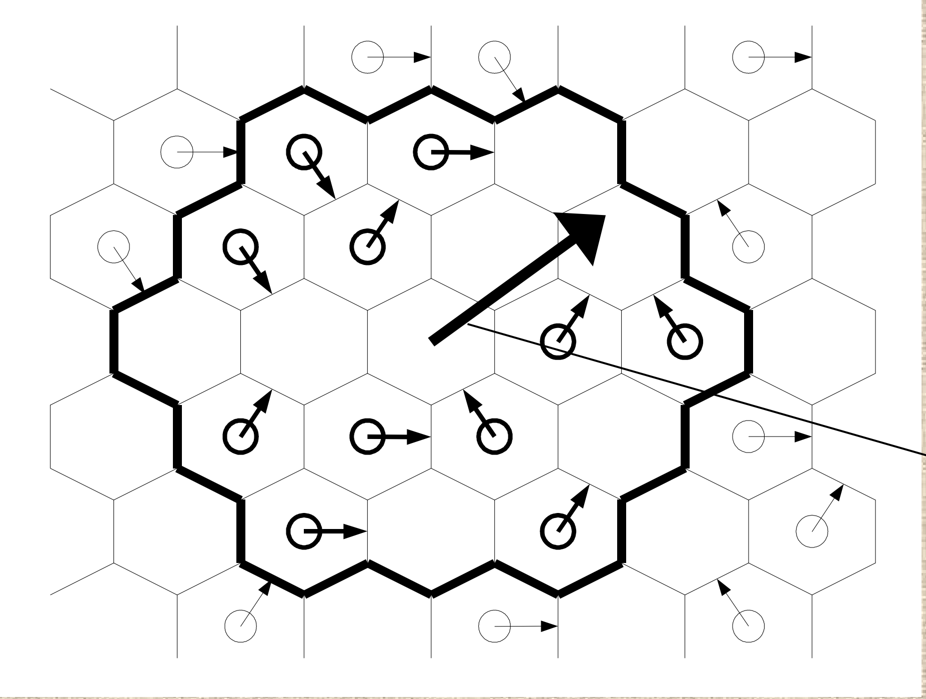
FHP – модель
процесс эволюции



t → сдвиг → t+1/2 → столкновение → t+1

$$\Omega(t) \longrightarrow \Omega(t+1)$$

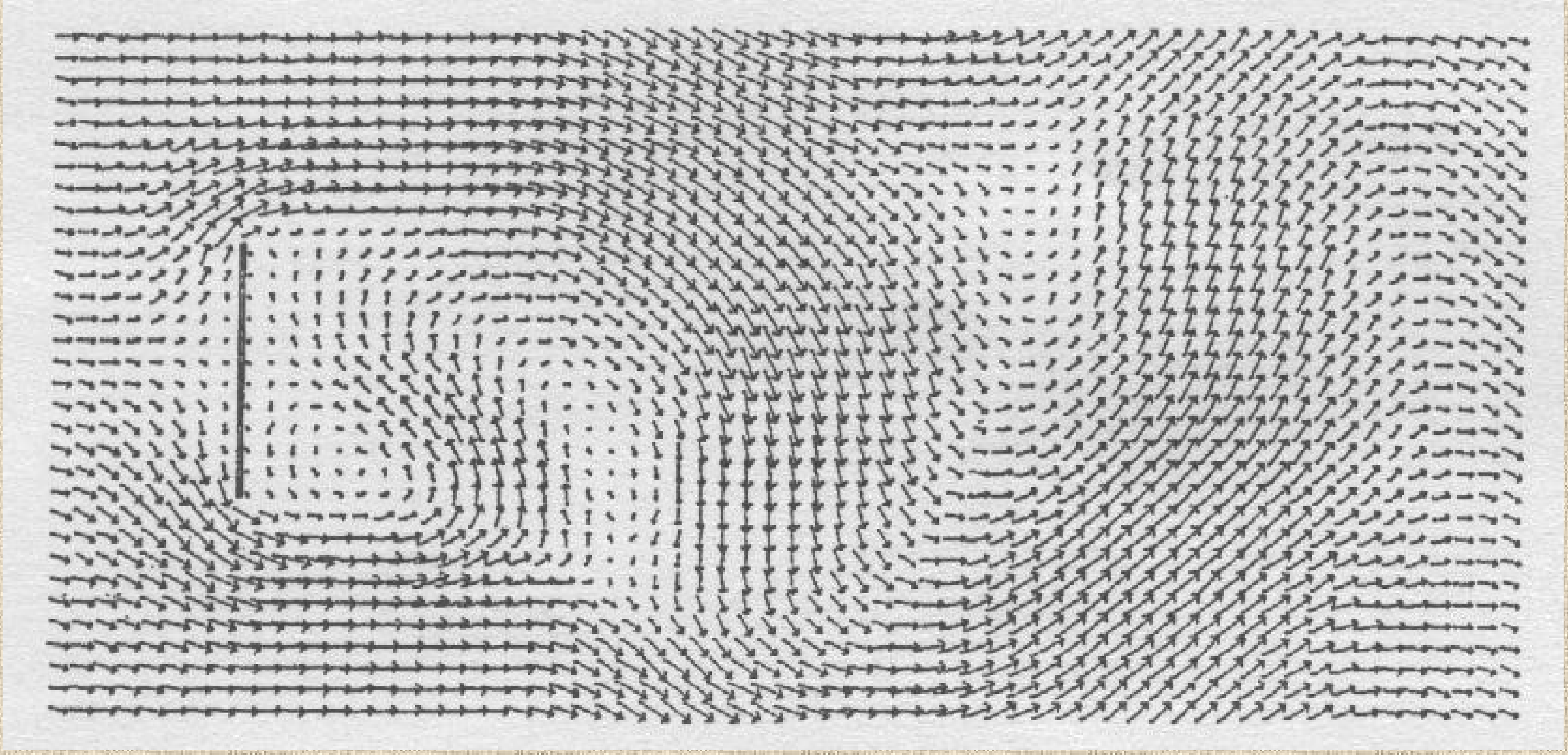
Осредненный вектор скорости



$$\sum_{Av} \mathbf{v}_k$$

$$\forall (i,j): \quad \langle u \rangle = \frac{1}{|Av|} \sum v_k$$

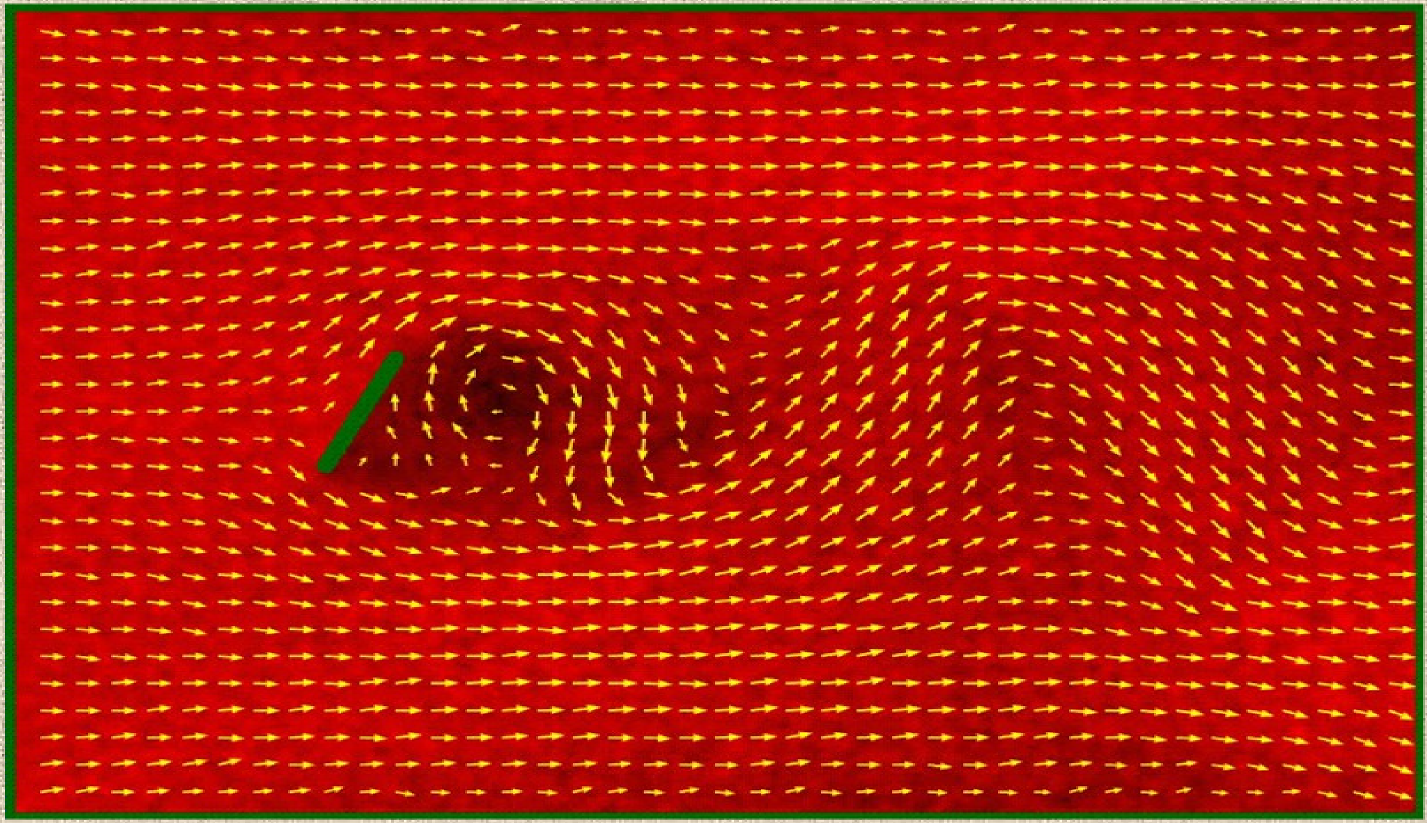
Результат применения FHP- модели



From : **Rothman D.H., Zalesky S.** ***Lattice-Gas Cellular Automata Simple Models of Complex Hydrodynamics, London, 1997***

Целочисленная Lattice-Gas модель FHP-MP

Ю.Г.Медведев



КА-модели процессов

самоорганизации

Формирование устойчивых структур

1952, Alan Turing ***The Chemical Basis of Morphogenesis*.**
Philosophical Transactions of the Royal Society B (London), 237, 37--72, 1952.

Активаторно-ингибиторная КА-модель D.Young'a

1984, David Young ***A local activator-inhibitor model of vertebrate skin patterns***
Math. Biosciences, v.72. 1.

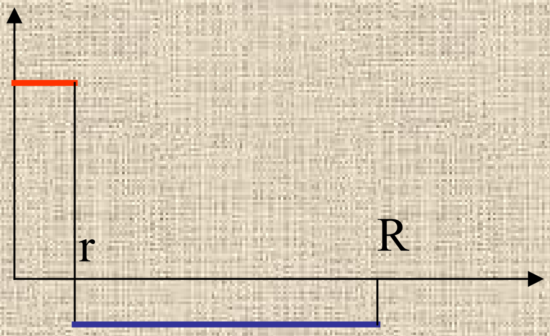
Условия образования устойчивых структур:

1) Ингибитор должен оказывать влияние на пространстве с большим радиусом действия чем активатор ($D_u \ll D_v$)

2) Суммарные воздействия активаторов и ингибиторов равны

Непрерывная модель

Дискретная модель



Формирование устойчивых структур КА с взвешенными шаблонами

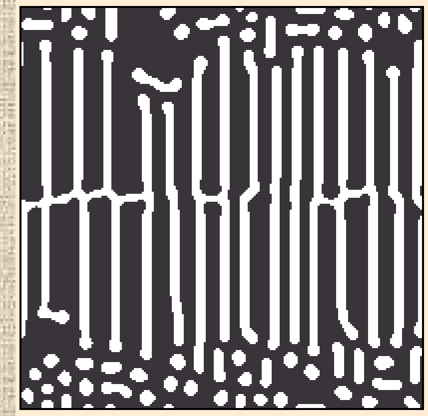
$$u(t+1) = \begin{cases} 1, \text{if } \sum\limits_{W} w_k u_k > 0 \\ 0, \quad \text{otherwise} \end{cases}$$

$$W = \begin{array}{cccccccc} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & \\ \hline -a & -a & -a & -a & -a & -a & -a & \\ -a & -a & -a & -a & -a & -a & -a & 0 \\ -a & -a & 1 & 1 & 1 & -a & -a & 1 \\ -a & -a & 1 & 1 & 1 & -a & -a & 0 \\ -a & -a & 1 & 1 & 1 & -a & -a & 1 \\ -a & -a & -a & -a & -a & -a & -a & 0 \\ -a & -a & -a & -a & -a & -a & -a & 0 \end{array}$$

(i,j)

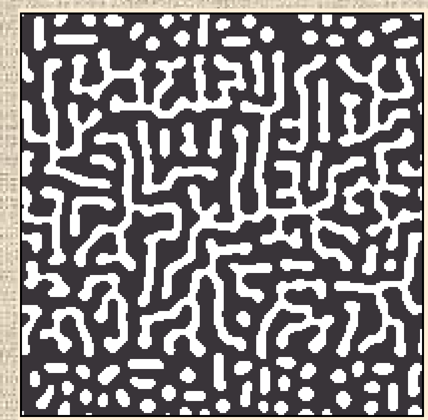
a=0.22

Синхронный КА



t=120

Асинхронный КА



=50

Хищник - Жертва

Хищник

Жертва

Ω_v **= {(v,(i,j)}, V(I,j) =** $\sum_T$ **v (i,j)**

$\forall$ (i,j)

Ω_u **= {(u,(i,j)}, U(i,j) =** $\sum_T$ **u(i,j)**

$\forall$ (i,j)

Если V>U, то v(i,j)=0 (p=(V-U)/V);
(***голодный хищник умирает*****)**

Если U>V, то v=1 (p=0.5⟨v⟩ (1- ⟨v⟩))
(***сытый хищник размножается*****)**

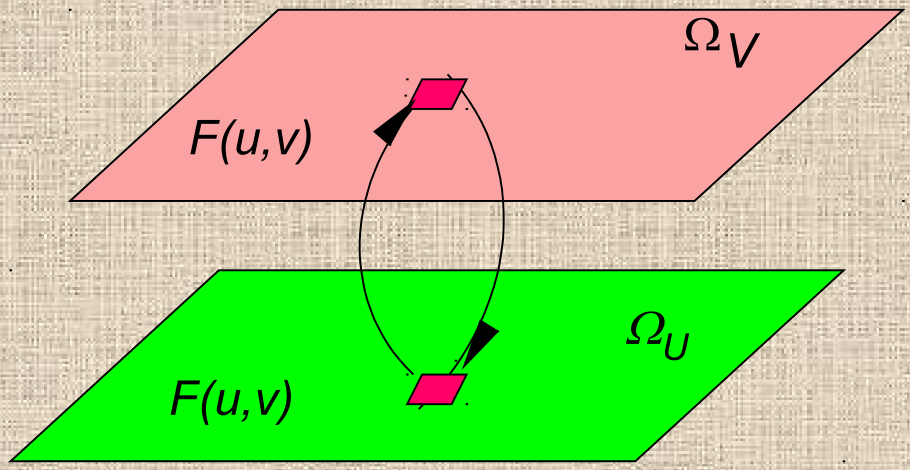
+ 100 тактов диффузии

Если V>U, то u=0
(***хищник съедает все*****)**

Если U>V, то u=1 (p=0.5⟨u-v⟩ (1- ⟨u-v⟩))
(***оставшаяся жертва размножается)***

+ 1 такт диффузии

Двунаправленная параллельная композиция

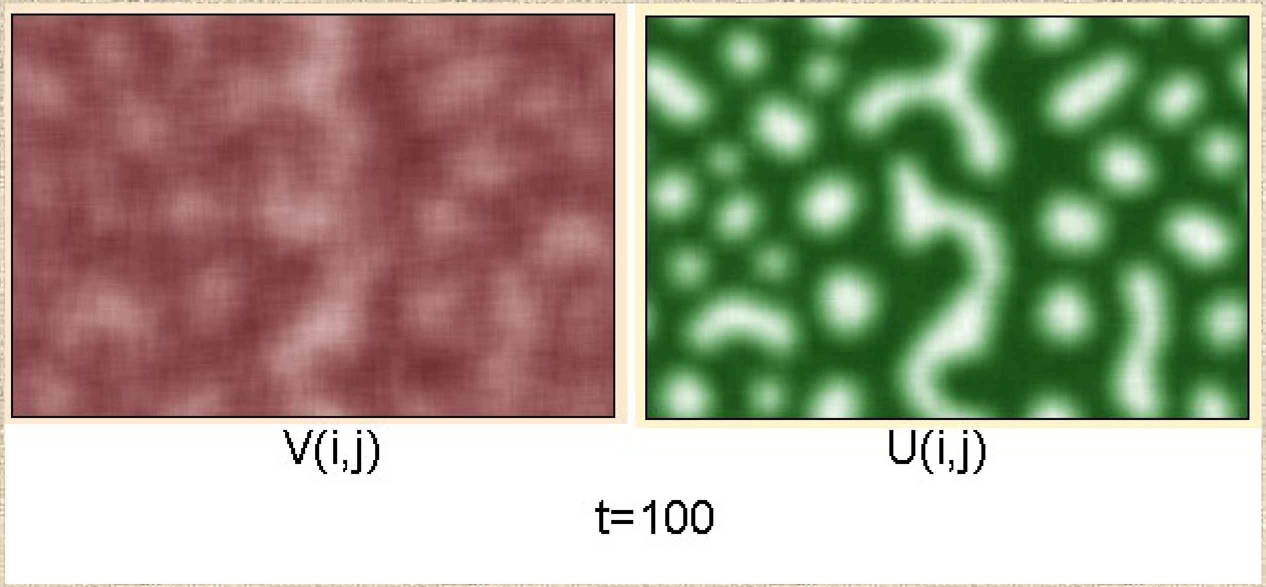


$$\aleph_{\mathrm{v}}=\langle A_{v}, \mathrm{X}_{\mathrm{v}}, \Theta_{\mathrm{v}}\rangle$$

$$\aleph_{\mathrm{u}}=\langle A_{u}, \mathrm{X}_{\mathrm{u}}, \Theta_{\mathrm{u}}\rangle$$

Эволюция КА : **"хищник (V) -- жертва (U)"**

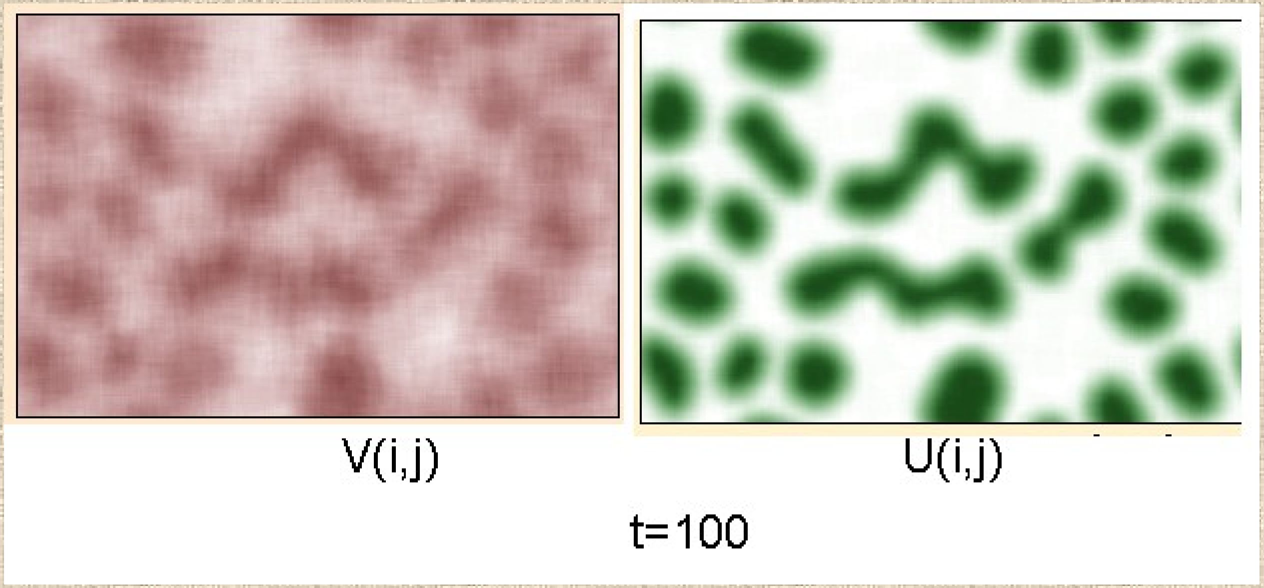
$\rho_v(0) = 0.2$, $\rho_u(0) = 0.3$, полоса $\rho_v(0) = 0.8$



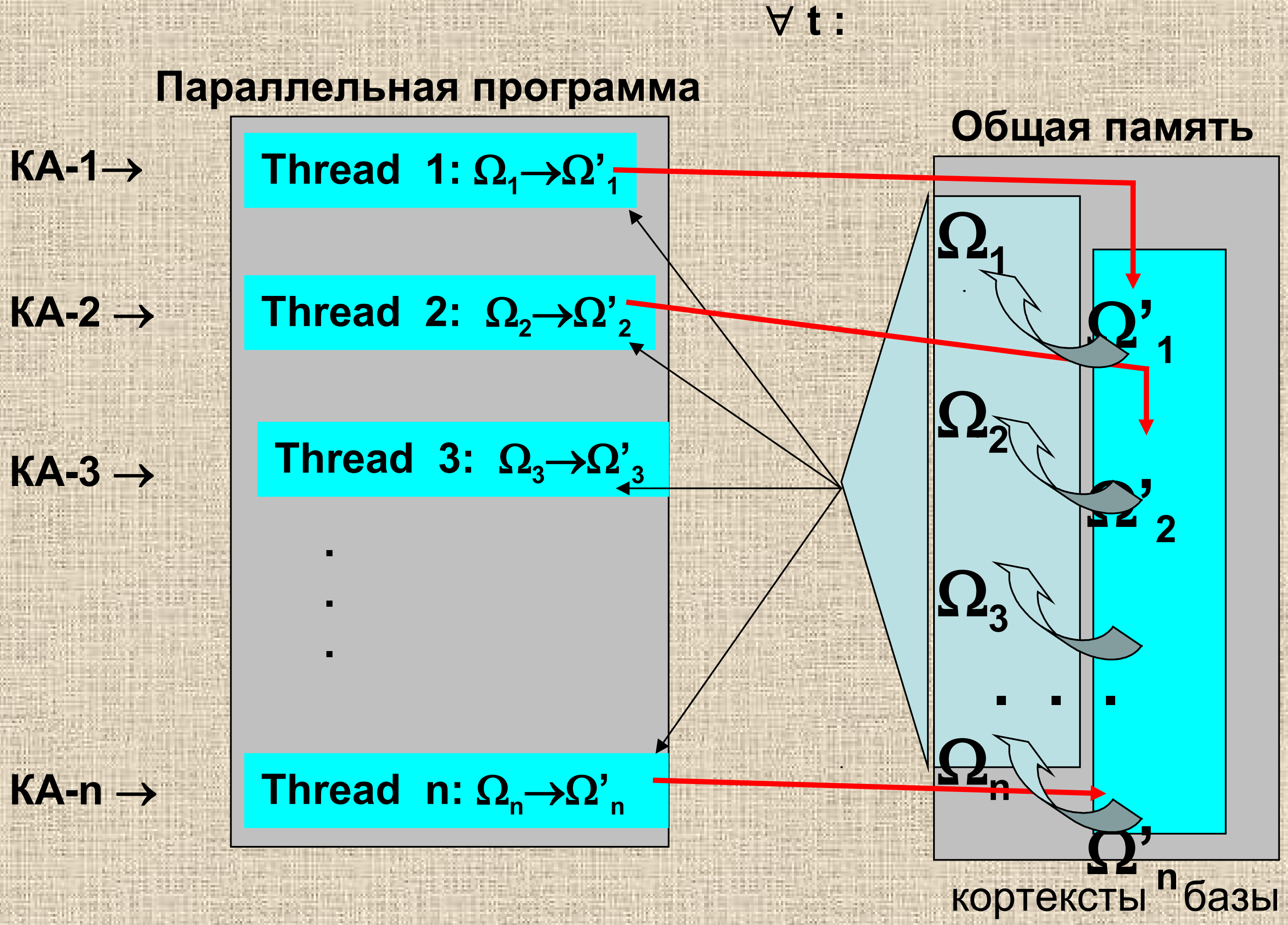
300×400

Эволюция КА : **"хищник (V) -- жертва (U)"**

$\rho_v(0) = 0.2$, $\rho_u(0) = 0.6$, в центре $\rho_v(0) = 0.8$



Реализация КА-системы на многоядерном компьютере



Prey –predatory CA system

Parallel multicore implementation

Number of threads	1		2		4	
	time	speedup	time	speedup	time	speedup
CA, Dv/Du=50	134	1	77	1.74	47	2.35
CA, Dv/Du=1	150	1	77	1.94	57	2.63
Dom. Decomp	134	1	72	1.85	39	3.4

time = computation time of 500 iterations (sec)

Speedup = time(1)/time(n)

Пожалуйста,
задавайте вопросы!

Классический КА

этап 1 1946-1970

1. **J. von Neumann CA (Stanislav Ulam 1946)**

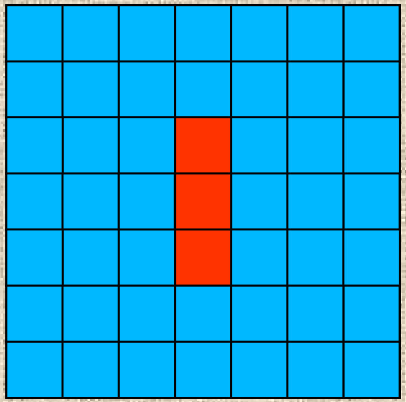
КА – это регулярная структура двоичных конечных автоматов с одинаковыми правилами переходов , выраженных в виде булевых функций от состояний соседних автоматов

2. **Игра «жизнь» John Convey (1970)**

Локальный оператор

u_1	u_2	u_3
u_8	u_0	u_4
u_7	u_6	u_5

$\Rightarrow$ $u'_0(t+1)$



Функция перехода

$$u_0(t+1) = \begin{cases} 1, & \text{if } (u_0=0\ \&\ \Sigma u_k=3) \vee (u_0=1\ \&\ \Sigma(u_k<2\ \vee\ \Sigma u_k>3) \\ 0, & \text{в остальных случаях} \end{cases}$$

Три этапа развития идей о КА

1. **Классический КА** - ***проблема самовоспроизведения , интеллектуальные игры (1956 – 1980)***

2. **Однородные структуры** - ***параллельные универсальные перестраиваемые схемы для микроэлектроники (1970 – 2000)***

3. **КА-модели пространственной динамики** – ***гидродинамика, поверхностная химия, кристаллизация, кинетика нано-систем, биология, социальные процессы***

   (1985 ⟶