

Вестник Московского университета

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в ноябре 1946 г.

Серия 15

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА
И КИБЕРНЕТИКА

№ 3 • 2013 • ИЮЛЬ–СЕНТЯБРЬ

Издательство Московского университета

Выходит один раз в три месяца

СОДЕРЖАНИЕ

Аверчук Г.Ю., Куркина Е.С. Сравнительный анализ методов Монте-Карло на примере расчета сложной динамики решеточной модели химической реакции	3
Никольский М.С. Численный метод приближенного решения задачи Б.В. Булгакова	11
Дорогуш Е.Г. Вычисление пропускной способности и уровня загруженности кольцевой автомагистрали	16
Егоров И.Е. Оценка альтернативных стратегий управления системами с асимптотически устойчивыми положениями равновесия	24
Кашаева С.Ю. Упрощенное доказательство теоремы Дуба–Мейера для неотрицательных субмартингалов	33
Марченков С.С., Калинина И.С. Оператор FE-замыкания в счетнозначной логике	42
Башов М.А. Минимизация веса идеалов в слое булева куба	47

CONTENTS

Averchuk G. Yu., Kurkina E. S. Comparative analysis of Monte Carlo methods for simulations of complex dynamics in the lattice model of the chemical reaction	3
Nikolskiy M. S. Some numerical method for approximate solution of the B. V. Bulgakov's problem	11
Dorogush E. G. Determining the circular highway capacity and congestion level	16
Egorov I. Ye. Evaluation of alternative control strategies for the systems with asymptotically stable equilibrium positions	24
Kashayeva S. Yu. A simplified proof of the Doob–Meyer theorem for nonnegative submartingales	33
Marchenkov S. S., Kalinina I. S. The FE-closure operator in countable-valued logic	42
Bashov M. A. Ideal weight minimization in the Boolean cube layer	47

УДК 548.55-522:004.942-021

Г. Ю. Аверчук¹, Е. С. Куркина²**СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ МОНТЕ-КАРЛО НА ПРИМЕРЕ РАСЧЕТА СЛОЖНОЙ ДИНАМИКИ РЕШЕТОЧНОЙ МОДЕЛИ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ***

Методами Монте-Карло рассчитывается сложная колебательная динамика микроскопической модели химической реакции, происходящей на поверхности катализатора. Используются пять наиболее употребительных алгоритмов и оценивается сложность и производительность каждого из них. Показано, что время расчета может отличаться более чем на два порядка. Выявлен самый эффективный алгоритм Монте-Карло. С помощью него исследованы механизмы возникновения колебаний и волн на микроуровне в решеточной модели, содержащей миллионы узлов.

Ключевые слова: микроскопическая стохастическая модель, гетерогенно-каталитическая реакция, методы Монте-Карло, автоколебания.

1. Введение. Микроскопические имитационные модели являются наиболее полными моделями, описывающими динамику систем с вероятностной природой взаимодействий, таких, как химические реакции. С помощью этих моделей можно детально описать структуру катализатора и сложные взаимодействия веществ с катализатором и между собой в адсорбционном слое, исследовать механизмы возникновения макроскопических структур и волн на микроуровне и изучить влияние флуктуаций. В основе микроскопического описания лежит решеточная модель с определенным дискретным множеством микросостояний и заданным набором элементарных процессов, реализация которых приводит к изменению макросостояния системы. Эволюция системы рассматривается в приближении марковского случайного процесса с непрерывным временем и конечным фазовым множеством, элементы которого представляют собой микросостояния системы. Эволюция рассчитывается с помощью динамических стохастических алгоритмов, называемых методами Монте-Карло (МК); при этом получаются отдельные наиболее вероятные траектории марковского случайного процесса.

Основным препятствием для использования микроскопических стохастических моделей являются их огромная размерность, а значит, и запрашиваемые вычислительные ресурсы для реализации методом МК. Поэтому для расширения возможностей применения имитационных моделей актуально выявление наиболее эффективных алгоритмов. На примере расчетов сложной динамики микроскопической модели химической реакции, происходящей на поверхности катализатора, производится сравнение пяти наиболее употребительных алгоритмов МК. Оценивается сложность и производительность каждого из них. Выявлен самый быстрый алгоритм.

2. Микроскопическая стохастическая модель реакции. Рассмотрим микроскопическую стохастическую модель реакции $\text{NO} + \text{CO}$, происходящей на поверхности платинового катализатора с правильной квадратной решеткой (грань $\text{Pt}(100)$), изображенной на рис. 1. Кинетическая схема реакции состоит из семи элементарных стадий, описывающих элементарные реакции с двумя адсорбционными частицами NO и CO :

- 1) $(\text{NO})_{\text{газ}} + * \xrightarrow{k_1} [\text{NO}]$ — адсорбция NO ;
- 2) $(\text{CO})_{\text{газ}} + * \xrightarrow{k_2} [\text{CO}]$ — адсорбция CO ;
- 3) $[\text{CO}] + [\text{NO}] \xrightarrow{k_3} (\text{CO}_2)_{\text{газ}} + (\text{N})_{\text{газ}} + 2*$ — образование CO_2 ;
- 4) $[\text{NO}] \xrightarrow{k_4} (\text{NO})_{\text{газ}} + *$ — десорбция NO ;

¹ Факультет ИКТ РХТУ, асп., e-mail: altermn@gmail.com

² Факультет ВМК МГУ, вед. науч. сотр., д.ф.-м.н., e-mail: elena.kurkina@cs.msu.su

* Работа выполнена при поддержке РФФИ, проекты № 11-08-00979, 11-01-00887 и в рамках государственного контракта № 11.519.11.4004.