

# Клеточно-автоматное моделирование физико-химических процессов на графических ускорителях

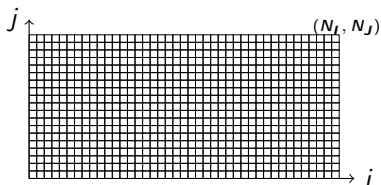
Константин Калгин

[kalgin@ssd.sccc.ru](mailto:kalgin@ssd.sccc.ru)  
ИВМиМГ СО РАН

## Определение КА

$$CA = \langle X, A, \Theta, \Upsilon \rangle$$

$$X = \{ \mathbf{x} = (i, j) \mid 1 \leq i \leq N_I, 1 \leq j \leq N_J \}$$



$A$  – алфавит, множество состояний клеток

$$A = \{0, 1\}$$

$$A = \{0, 1, 2, \dots\}$$

$$A = \{empty, O, CO\}$$

$$A = \{0, 1, 2, \dots\} \times \{empty, O, CO\}$$

$x = (\mathbf{x}, a)$  – клетка, где  $\mathbf{x} \in X$  и  $a \in A$

# Определение КА: оператор перехода $\Theta$

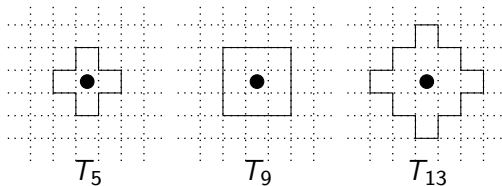
$$CA = \langle X, A, \Theta, \Upsilon \rangle$$

$\Theta : A^{|B|} \rightarrow A^{|B|}$  – локальный оператор перехода

$B = \{ \phi_1^B, \phi_2^B, \dots, \phi_{|B|}^B \}$  – шаблон

$\phi : X \rightarrow X$  – именуемые функции

$T(x) = \{ \phi_1(x), \phi_2(x), \dots, \phi_{|T|}(x) \}$  – соседство клетки  $x$



*Применение локального оператора перехода  $\Theta$  к клетке  $x$  приводит к обновлению соседних клеток  $B(x)$  новыми состояниями  $\Theta(B(x))$ .*

## Определение КА: режим итерации $\Upsilon$

$$CA = \langle X, A, \Theta, \Upsilon \rangle$$

**Синхронный( $\sigma$ ):** итерация есть применение оператора перехода ко всем клеткам одновременно

**Асинхронный( $\alpha$ )** : итерация состоит из  $N_I N_J$  шагов, на каждом шаге оператора перехода применяется к случайно выбранной клетке

**Блочно синхронный( $\beta, \gamma$ ):** итерация состоит из  $K$  стадии, на каждой стадии выбирается случайное множество клеток  $S_j$  из семейства  $S = \langle S_i \rangle$ , затем ко всем клеткам из  $S_j$  синхронно применяется правило перехода,

$$\forall i \quad |S_i| = \frac{N_I N_J}{K}$$

$$\forall i \quad \forall x_1, x_2 \in S_i : B(x_1) \cap B(x_2) = \emptyset$$

## Определение КА: блочно-синхронная итерация

Для удобства вводится покрывающий шаблон  $T$ :

$$B \subseteq T$$

$$\forall i \bigcup_{x \in S_i} T(x) = X$$

$$\forall i \forall x_1, x_2 \in S_i : T(x_1) \cap T(x_2) = \emptyset$$

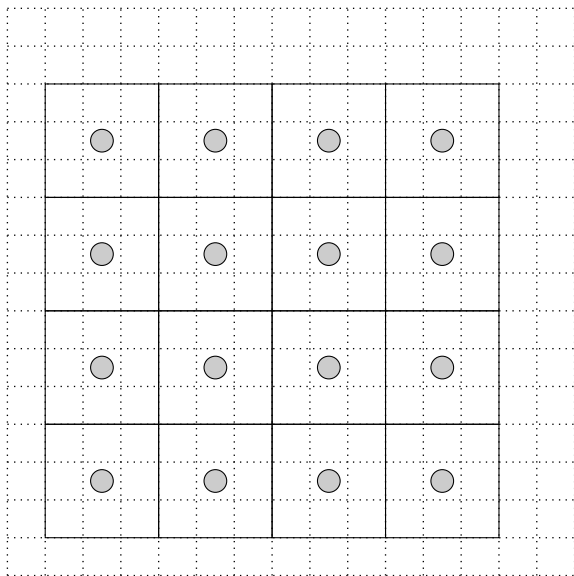
Определение БСКА ( $\beta$ ):

Семейство  $S$  есть разбиение множества  $X$

Определение Расширенного БСКА ( $\gamma$ ):

Семейство  $S$  есть объединение всех разбиений множества  $X$

# БСКА-9



# Размер семейства $S$ для различных БС режимов

Размер семейства  $S$ :

	$T_5$	$T_9$	$T_{13}$	$T_{25}$	$T_{49}$
$\beta$	5	9	13	25	49
$\gamma$	10	$(3^{N/3} + 3^{M/3}) \cdot 3$	26	$(5^{N/5} + 5^{M/5}) \cdot 5$	$(7^{N/7} + 7^{M/7}) \cdot 7$

## Правило перехода ZGB (Ziff-Gulari-Barshad)

$$A = \{CO, O, empty\}$$

$$\Theta^{adsCO} : \{empty\} \xrightarrow{(1-p_{Diff})p_{CO}} \{CO\},$$

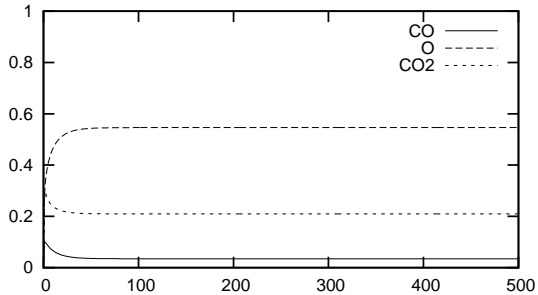
$$\Theta^{adsO_2} : \{empty, empty\} \xrightarrow{(1-p_{Diff})(1-p_{CO})} \{O, O\},$$

$$\Theta^{diff} : \{a, b\} \xrightarrow[p_{Diff}]{a, b \in \{CO, empty\} \ \& \ a \neq b} \{b, a\},$$

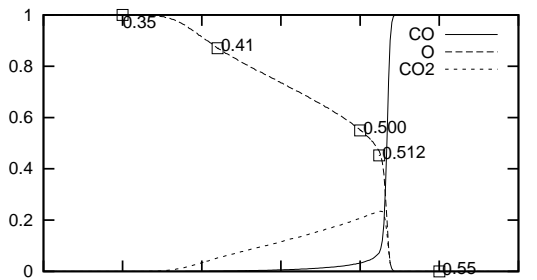
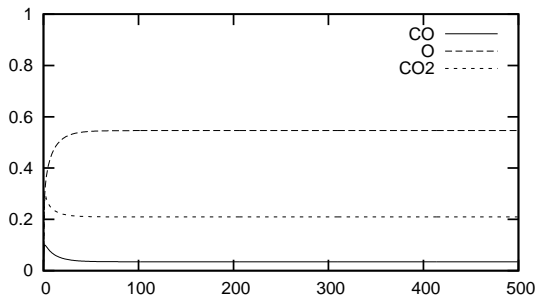
$$\Theta^{react} : \{a, b\} \xrightarrow[a, b \in \{CO, O\} \ \& \ a \neq b]{} \{empty, empty\}$$



# Эволюция ZGB



# Эволюция ZGB



# Статистики случайного процесса

Количество клеток с состоянием  $a$  в клеточном массиве после исполнения  $t$  итераций:

$$f_{t,a} = |\{(x, a) \in \Omega_t\}|.$$

Проверяем критерий однородности распределения величин  $f_{t,a}$  режимов  $\alpha$  и  $\beta/\gamma$  для

$$t < 500$$

$$a \in \{CO, O, \emptyset\}$$

$$p_{Diff} \in \{0, \frac{1}{2}, \frac{2}{3}\} \quad p_{CO} = \{0.3, 0.45, 0.55, 0.70\}$$

# Результаты

Результаты по статистике  $f_{t,a}$

$H_f^{\Upsilon, k_{diff}}$	$\Upsilon = \beta^N$ (БС)			$\Upsilon = \gamma^N$ (РСБ)		
	13	25	49	13	25	49
$k_{diff} = 0$	0	0	0	0	43	96.5
$k_{diff} = 1$	0	0	0	0	93	<b>97</b>
$k_{diff} = 2$	0	0	0	0	<b>97.6</b>	<b>98.1</b>

# Реализация на графическом ускорителе

1. Стадия исполняется на графическом ускорителе параллельно

# Реализация на графическом ускорителе

1. Стадия исполняется на графическом ускорителе параллельно
2. Одна клетка = Один поток

# Реализация на графическом ускорителе

1. Стадия выполняется на графическом ускорителе параллельно
2. Одна клетка = Один поток
3. Псевдо случайные числа генерируются на графическом ускорителе

## Реализация на графическом ускорителе

1. Стадия выполняется на графическом ускорителе параллельно
2. Одна клетка = Один поток
3. Псевдо случайные числа генерируются на графическом ускорителе
4. Проблему несогласованного доступа и деления варпов по ветвям условных переходов не решить



## Реализация на графическом ускорителе

1. Стадия выполняется на графическом ускорителе параллельно
2. Одна клетка = Один поток
3. Псевдо случайные числа генерируются на графическом ускорителе
4. Проблему несогласованного доступа и деления варпов по ветвям условных переходов не решить

	1000 × 1000	2000 × 2000	8000 × 8000
Ускорение GTX 280/Core i7	×25	×31	×35
Ускорение GTX 680/Core i7	×48	×60	×65

## Заключение

- ▶ Увеличение доли диффузии уменьшает различия между БС а А эволюциями
- ▶ РБС режим  $\gamma_{49}$  можно безопасно применять при  $p_{Diff} > 0.5$  ( $K_{Diff} = 2$ )
- ▶ РБС режим  $\gamma_{25}$  можно безопасно применять при  $p_{Diff} > 0.75$  ( $K_{Diff} = 3$ )
- ▶ Один рядовой графический ускоритель GTX 280/680\ заменяет 32/64-ядерный мультипроцессор (на этой задаче!)

---

Большое число КА моделей (в том числе Кинетические Методы Монте-Карло) поддаются эффективному распараллеливанию на графических ускорителях.