

ЭФФЕКТИВНОСТЬ АЛГОРИТМОВ МОНТЕ-КАРЛО, ПРИМЕНЯЕМЫХ ДЛЯ РАСЧЁТА КИНЕТИКИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Аверчук Г.Ю.

Каф. ИКТ, РХТУ им. Д.И. Менделеева; Россия, г. Москва, 125480, ул. Героев Панфиловцев, 20; Тел.: (495) 495-21-26, E-mail: altermn@gmail.com

Микроскопические стохастические модели являются наиболее полными моделями, описывающими динамику систем с вероятностной природой взаимодействий, таких как химические реакции. Эволюция системы в них разыгрывается в соответствии с элементарными процессами, задаваемыми кинетической схемой и рассчитывается методами Монте-Карло. В отличие от математических моделей, основанных на дифференциальных уравнениях, микроскопические модели не требуют выполнения условий для применения приближений среднего поля и позволяют исследовать макроскопическое поведение системы, исходя из микроуровня.

Основным препятствием для их использования является огромная размерность решеточной модели, а значит и запрашиваемые вычислительные ресурсы для реализации методом Монте-Карло. Для расширения возможностей применения микроскопических стохастических моделей актуально выявление наиболее эффективных алгоритмов.

В работе¹ рассмотрено шесть наиболее употребительных алгоритмов Монте-Карло. Алгоритмы опробовались при расчетах сложной волновой динамики двух гетерогенных каталитических реакций: реакции $NO + CO/Pt\{100\}$ и реакции типа Лотки-Вольтерра. Оценивалась сложность и производительность каждого из методов.

Исследования показали, что время расчетов может отличаться на 2-3 порядка, причем наиболее популярные методы Монте-Карло не являются оптимальными. Самым эффективным оказался менее известный многоуровневый метод, основанный на использовании структуры данных – дерево [1]. С помощью этого алгоритма была исследована колебательная динамика систем на решетках размером до 4 млн. ячеек. Выявлены механизмы зарождения макроскопических колебаний на микроуровне [2].

Литература.

1. J.L. Blue, I.M. Beichl, F. Sullivan Faster Monte Carlo simulations // *Phys. Rev. E.* **51**(2). 1995. P. 867-868.
2. Куркина Е.С., Аверчук Г.Ю. Моделирование методом Монте-Карло колебательной динамики гетерогенной каталитической реакции с латеральными взаимодействиями. // *Прикладная математика и информатика: Труды факультета ВМК МГУ* **41** М.: МАКС Пресс, 2012. Стр. 20-41.

¹Работа выполнена в рамках государственного контракта № 11.519.11.4004