

Моделирование экстракции с помощью клеточного автомата

Здесь описан компьютерный эксперимент, имитирующий динамику экстракции вещества из раствора. Эксперимент не ставит своей целью получение количественных данных о конкретном процессе экстракции. Задача данной имитации – показать возможность описания одного и того же процесса с разных его сторон и, следовательно, использования различных языков описания. На данном примере также показано, что между различными языками моделирования природного процесса вполне возможен однозначный перевод. Хотя бы в одну сторону, что весьма затруднительно для естественных литературных языков.

Заложим в алгоритм описания следующие упрощенные представления о процессе экстракции.

1. Имеется нейтральный растворитель, в котором хаотически распределены участвующие в тепловом движении молекулы экстрагента А. Молекул А значительно меньше, чем молекул нейтрального растворителя.
2. В растворе присутствуют молекулы экстрагируемого вещества В, которое не взаимодействует с молекулами растворителя. Молекул В значительно меньше, чем молекул А.
3. При случайном столкновении молекул А и В обязательно образуется новый комплекс $C = A + B$, который тут же удаляется из раствора каким-то механизмом, реагирующим только на появление молекулы С.

Требуется прогнозировать динамику количества молекул А и В в растворе.

В связи с тем, что наши представления опираются на принципиально микроскопическую картину элементарных актов взаимодействия между молекулами, естественно использовать язык дискретной математики. Наиболее подходящим языком оказывается математическая модель клеточного автомата, в котором внутренняя движущая сила олицетворена демоном Больцмана.

Клеточный автомат представляет собой некое собрание ячеек, которые бывают либо пустыми, либо содержат до двух молекул. Молекулы могут быть сорта А и/или В. Молекулы растворителя в автомате не учитываются, они составляют нейтральный фон. Физически ячейка представляет собой некоторый объем фазового пространства. Факт нахождения двух молекул в одной фазовой ячейке физически означает их столкновение в хаотическом тепловом движении.

Демон Больцмана живет и действует в квантованном историческом времени. За один шаг в этом времени демон успевает случайным образом распределить все наличные молекулы А и В в фазовом пространстве. Между шагами в дело вступает химический процессор, который осматривает все ячейки и решает, как поступать с их содержимым. В нашей модели химический процессор реагирует только на наличие в ячейке двух молекул разного типа. Процессор полагает, что в этом случае будет образован комплекс $C = A + B$, который тут же удаляется из раствора. В

алгоритме это соответствует уменьшению на единицу числа молекул А и на единицу же числа молекул В.

После работы химического процессора демон Больцмана выполняет следующий шаг во времени.

Реализуем этот алгоритм на языке программирования MatLab. Понадобится инициировать исходное состояние системы. Это делается однократным запуском скрипта

```
% linitiate extraction
```

```
nCells = 100;  
nA = 10;  
nB = 5;  
iStep = 1;  
Particles(1,1) = 0;  
Particles(2,1) = 0;  
clear Particles
```

Здесь задано фазовое пространство из nCells ячеек. Пусть для начала nCells = 100. Задано число частиц первого типа nA = 10. Задано число частиц второго типа nB = 5.

Организуем бесконечный цикл. В цикле будем распределять случайным образом все частицы по ячейкам. Ограничение: в ячейку может попасть не больше 2 частиц.

На каждом шаге цикла будем проверять факты попадания в одну и ту же фазовую ячейку двух частиц разного сорта. Такие две частицы имеют химическую возможность вступить в реакцию, образовать новое соединение такого типа, что сама химическая система удалит новое соединение вовне. Это и будет моделировать экстракцию. Каждый оборот такого цикла будет состоять в запуске на счет следующего скрипта

```
% Try extraction  
Particles(1,iStep) = nA;  
Particles(2,iStep) = nB;  
CellContent = zeros(2,nCells);
```

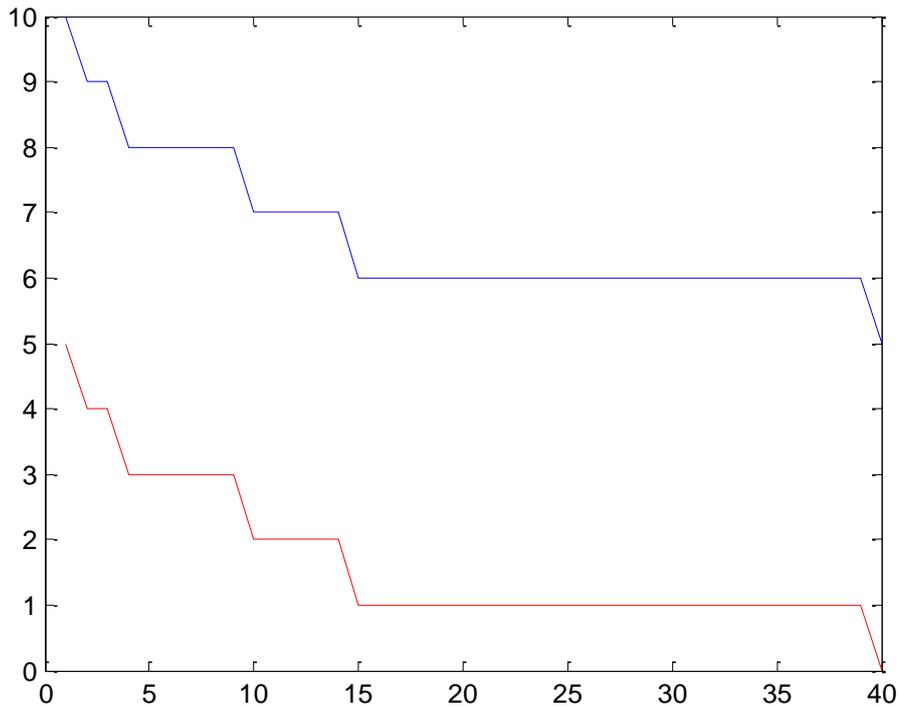
```
for iA = 1:nA  
    allocated = 0;  
    while ~allocated  
        i = round(myrand(1,nCells));  
        if CellContent(1,i) == 0  
            CellContent(1,i) = 1;  
            allocated = 1;  
        else  
            if CellContent(2,i) == 0  
                CellContent(2,i) = 1;  
                allocated = 1;  
            end % if  
        end % if  
    end % while  
end % iA  
for iB = 1:nB  
    allocated = 0;  
    while ~allocated  
        i = round(myrand(1,nCells));  
        if CellContent(1,i) == 0  
            CellContent(1,i) = 2;  
            allocated = 1;  
        else  
            if CellContent(2,i) == 0  
                CellContent(2,i) = 2;  
                allocated = 1;  
            end % if  
        end % if  
    end % while  
end % iB
```

```

end % if
end % while
end % iA
for iCell = 1:nCells
    if (CellContent(1,iCell) + CellContent(2,iCell)) == 3
        nA = nA - 1;
        nB = nB - 1;
    end % if
end % iCell
iStep = iStep + 1;

```

Построим график.



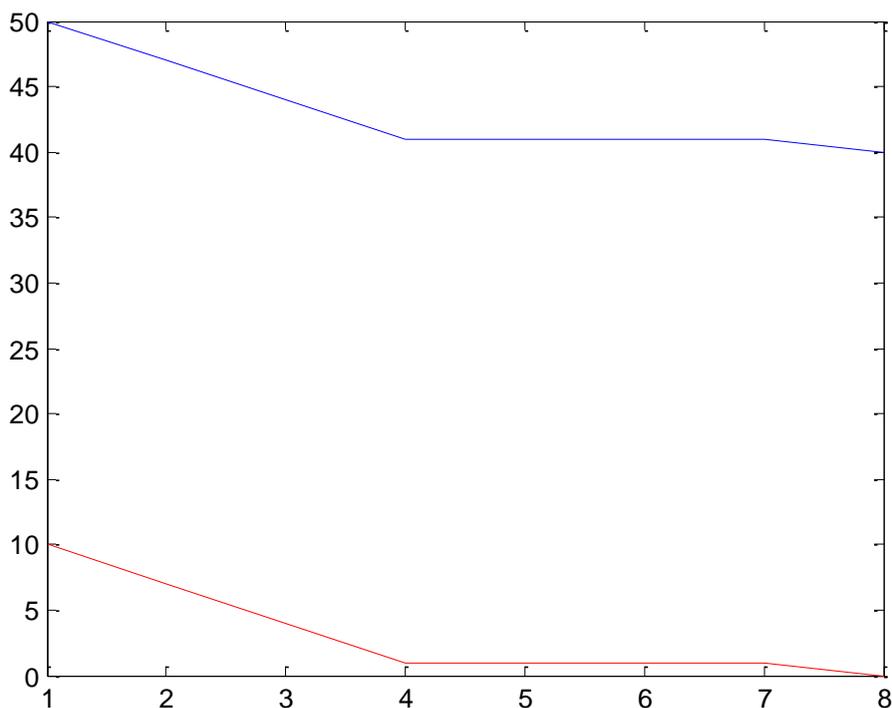
По вертикальной оси дано число частиц сорта А (синий график), оставшихся в системе на данном шаге, и, соответственно, сорта В (красный график). По горизонтальной оси дано количество шагов, то есть попыток случайно разместить частицы в фазовом пространстве. Каждый шаг это снимок микроскопического термодинамического состояния системы.

Конечно, тут бедная статистика. Улучшим статистику, иницировав систему с увеличенным числом частиц.

```
nA = 50;
```

```
nB = 10;
```

Получим график.



Получается более гладко. И ясно, что огибающая графика похожа на падающую экспоненту. Но экспонента строится в предположении, что объекты nA и nB имеют дифференциальную природу. То есть, могут изменяться на бесконечно малую величину. Экспонента $nB(t)$ тянется в бесконечность и никогда не падает до нуля.

Клеточный автомат преодолевает это сильное предположение о природе объектов. В нашем имитационном эксперименте мы находим, что при очень малом числе частиц 40 шагов теплового движения приводят к полной экстракции частиц B . А когда частиц побольше, то понадобилось всего 8 шагов.

Я уже обращал внимание научной общественности на семинарах и конференциях, что клеточные автоматы не только ловко решают конкретные прикладные задачи. Они еще могут плавно заполнять непреодолимый для математики пробел между дискретной и непрерывной моделью подобного процесса, где сама Природа считает на штуки. Но современный человек привык пользоваться дифференциалами, что удобно для вывода формул, а вот над Природой – насилие.

С помощью клеточного автомата мы можем посчитать на штуки элементарные акты реакций, а потом так увеличить статистику, чтобы кривые стали гладкими. Для таких гладких кривых можно подобрать эмпирические формулы, а затем получить из них дифференциальные уравнения. И, в отличие от практики составления и решения кинетических уравнений, когда коэффициенты уравнений приходится брать с потолка, потом подтягивая их к эксперименту, клеточный автомат позволяет прямо связать коэффициенты дифференциальных уравнений с характеристиками элементарных процессов.

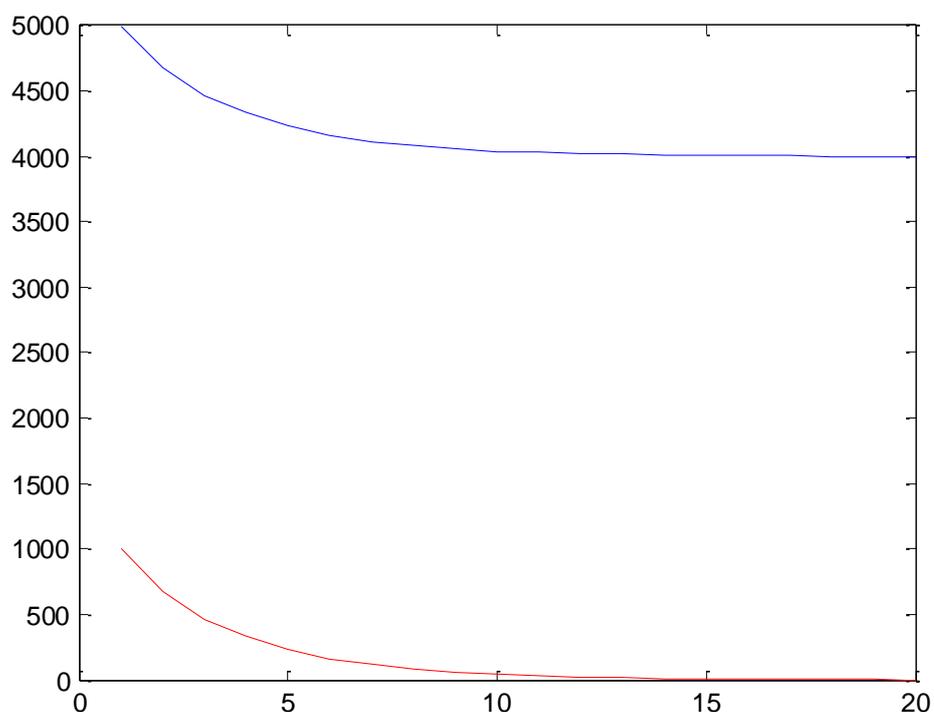
Однако, пока исследователи мучительно пытаются сообразить, как сосчитать вероятность элементарного акта экстракции при заданном числе тех и других частиц. Это только для того, чтобы через эту вероятность задать коэффициент в дифференциальном уравнении экстракции.

А не надо мучиться. Можно сразу моделировать элементарные акты экстракции, следить за процессами с помощью клеточного автомата, получать готовые кривые, к которым и устремляется вся работа по составлению и решению кинетических уравнений.

Продолжим. Зададим более обширное фазовое пространство и большее число активных частиц.

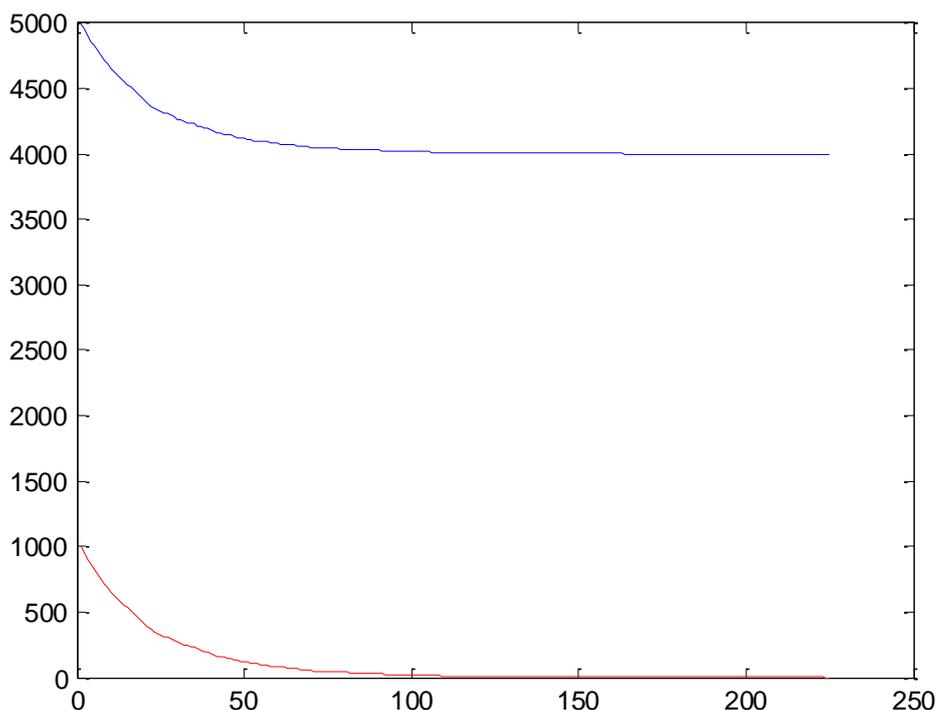
```
nCells = 10000;  
nA = 5000;  
nB = 1000;
```

Получим картину экстракции. Она имеет привычный вид.



Продолжим.

```
nCells = 100000;  
nA = 5000;  
nB = 1000;
```



Шагов при разбавлении системы посторонними частицами понадобилось больше. Но эта имитационная «экспонента» обязательно доходит до нуля. В отличие от бессильной экспоненты у математиков. И у математических физиков.

В заключение обратим внимание на универсальность предлагаемого приема. На простоту описания элементарных актов молекулярного взаимодействия в малом ансамбле. На простоту последующего перехода к описанию динамики этих актов в крупном ансамбле с помощью дифференциальных уравнений. Исследуя другие молекулярные системы, другие элементарные процессы, необходимо сменить лишь скрипт для химического процессора. В остальном, схема остается одной и той же.

С тем же успехом можно промоделировать, например, сложные события в механизме фотосинтеза, где поглощение света происходит в одних частях системы, а реакции образования новых веществ – в других и в другое время. А пытаться описать эти события сразу в терминах дифференциальных уравнений оказалось делом очень непростым. Мы это наблюдали на нашей конференции по молекулярному моделированию 2009 гда.