

Оптимальный порог переключения в алгоритме моделирования случайной последовательной адсорбции методом вспомогательных списков

М. В. УЛЬЯНОВ^{1,2}, С. О. УРАЗОВ^{2,*}

¹Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН, 117997, Москва, Россия

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Россия

*Контактный автор: Уразов Станислав Олегович, e-mail: urazov.msu@gmail.com

Поступила 02 декабря 2022 г., доработана 12 января 2023 г., принята в печать 27 марта 2023 г.

Рассмотрена задача определения оптимального порога переключения в методе вспомогательных списков, обеспечивающего эффективную по времени реализацию случайной последовательной адсорбции при осаждении ортогонально ориентированных линейных объектов на квадратную двумерную решетку. Изложены результаты теоретического анализа алгоритма метода вспомогательных списков на основе аппроксимаций функций концентрации свободных ячеек по экспериментальным данным. На основании теоретических результатов и экспериментального исследования сформулировано простое, в аспекте программных реализаций, условие переключения на формирование списков ячеек, доступных для осаждения.

Ключевые слова: случайная последовательная адсорбция, метод вспомогательных списков, временная эффективность.

Цитирование: Ульянов М.В., Уразов С.О. Оптимальный порог переключения в алгоритме моделирования случайной последовательной адсорбции методом вспомогательных списков. Вычислительные технологии. 2023; 28(3):84–100. DOI:10.25743/ICT.2023.28.3.006.

Введение

Случайная последовательная адсорбция (random sequential adsorption — RSA) представляет собой процесс, когда частицы случайно и необратимо осаждаются на подложку без перекрытия с ранее адсорбированными частицами. RSA является полезной моделью для многих физических, химических и биологических процессов [1, 2]. Подложка может быть как непрерывной, так и дискретной. Широко используемый тип дискретной подложки — квадратная решетка, состоящая из ячеек. Одна из самых простых форм частиц — так называемый k -мер (стержень, жесткая линейная цепь), т. е. линейная молекула, занимающая k соседних ячеек решетки в горизонтальном или вертикальном направлении.

Запрещение перекрытия означает взаимодействие жестких частиц, называемое взаимодействием исключенного объема, посредством создаваемых ими запрещенных площадей. По мере осаждения частиц сначала происходит перколяционный фазовый переход, т. е. возникает кластер, который пронизывает всю решетку. Затем система достигает состояния джамминга, когда осаждение даже еще одной частицы невозможно из-за

отсутствия какого-либо подходящего свободного пространства для ее размещения. Хотя в решетке есть некоторое свободное пространство, его локальные кластеры имеют неподходящие формы и размеры, чтобы принять частицу.

Кинетика осаждения изучалась во многих работах, в частности, были получены аналитические выражения для кинетики осаждения дисков на поверхность [3, 4] и на решетку [5–8]. Известно, что в процессе RSA концентрация покрытия поверхности частицами $\Theta(t)$ изменяется при больших временах как

$$\Theta(\infty) - \Theta(t) \propto \exp\left(-\frac{t}{\sigma}\right).$$

Здесь t — физическое время, которое учитывает неудачные попытки размещения; σ — подгоночный параметр; $\Theta(\infty)$ — концентрация джамминга [9–11].

Из-за обратной экспоненциальной зависимости роста концентрации покрытия от времени моделирование состояния джамминга на компьютере является очень трудоемкой задачей. Вообще говоря, достижение состояния джамминга возможно только за бесконечно долгое время. Технически решить эту проблему можно различными способами [12], включая составление вспомогательных списков ячеек, доступных для осаждения частиц [1, 13–17].

На начальном этапе используется простой случайный выбор возможных ячеек для адсорбции частиц непосредственно в решетке. После достижения определенной концентрации создаются списки ячеек, доступных для размещения начала частиц. Далее новая ячейка для размещения начала частицы выбирается из этих списков. Естественно, списки должны обновляться после успешного осаждения каждой частицы.

Метод, использующий вспомогательные списки ячеек как минимум гарантирует достижение состояния джамминга за конечное время. Понятно, что создание вспомогательных списков с самого начала процесса осаждения частиц не только не увеличивает скорость размещения частиц, но и приводит к значительным дополнительным затратам памяти. Тем не менее применение списков гарантирует, что каждая попытка размещения частицы будет успешной, однако формирование списков также требует некоторого времени, зависящего от концентрации частиц в решетке. Кроме того, поскольку некоторые ячейки решетки могут быть доступны для размещения как вертикальных, так и горизонтальных частиц, может потребоваться коррекция обоих списков после размещения каждой частицы.

Были попытки экспериментального определения порога переключения на формирование списков [12, 13], но в аспекте теоретического рассмотрения остается открытым вопрос, при какой концентрации использование списков становится эффективным.

1. Метод вспомогательных списков

Цель статьи — проанализировать описанный и обсуждаемый в [1, 12–17] метод реализации RSA путем создания вспомогательных списков ячеек, доступных для осаждения частиц. В статье рассматривается частный случай RSA ортогональных k -меров на квадратную решетку с периодическими граничными условиями. Основная задача — выбор параметра, управляющего переключением на этап формирования списков, и обоснование его оптимального значения, обеспечивающего максимальную временную эффективность программной реализации метода. Далее этот метод будем называть методом вспомогательных списков.

В кинетике RSA жестких ортогонально ориентированных частиц (k -меров) очередная частица при осаждении в решетку сама занимает ячейки решетки и создает вокруг себя запрещенную площадь [18], которая имеет порядок квадрата длины частицы. Формирование такой запрещенной площади реализует требование RSA о запрете перекрытий частиц. При этом сами запрещенные площади от разных частиц могут перекрываться, в связи с чем ячейки решетки динамически изменяют свои характеристики в процессе осаждения частиц. Пример взаимодействия запрещенных площадей (для $k = 4$) показан на рис. 1.

Для формализации этих характеристик в [18] введены следующие типы ячеек.

1. Ячейки типа “0”, качественно разделяемые на ячейки типа “0–”, которые заняты самими частицами, и ячейки типа “0+”, представляющие собой ячейки, в которых запрещено располагать начало любой новой частицы, далее эти ячейки будем называть “запрещенными”. Заметим, что в момент джамминга все ячейки решетки “запрещенные”, поскольку решетка заполнена только самими частицами “0–” и ячейками типа “0+”. На рис. 1 ячейки типа “0+” помечены символом “X”.
2. Ячейки типа “1h”, в которых разрешено расположение начала только для горизонтально ориентированных частиц, осаждение начиная с них вертикально ориентированных частиц запрещено. Помечены горизонтальной штриховкой.
3. Ячейки типа “1v”, в которых разрешено расположение начала только для вертикально ориентированных частиц, осаждение начиная с них горизонтально ориентированных частиц запрещено. Помечены вертикальной штриховкой.
4. Ячейки типа “2”, в которых разрешено расположение начала частиц любой ориентации.

Ячейки типов 1h и 1v называются ячейками типа 1 [18]. Далее будем называть их “полузапрещенными”. Отметим, что тело частицы, представляющее собой все ее компоненты, кроме начального, может быть расположено в ячейках любых типов, кроме ячеек 0–, поскольку перекрытие частиц запрещено.

Для осаждения частицы необходимо минимум два обращения к генератору равномерно распределенных псевдослучайных чисел. Первое обращение есть случайный выбор ориентации частицы. Следующее обращение к генератору происходит при выборе ячейки для размещения начала частицы. Заметим, что размещение начала возможно только в ячейках типа 2 для частиц любой ориентации, в ячейках типа 1h для частиц горизонтальной ориентации и в ячейках типа 1v для частиц вертикальной ориентации.

В процессе кинетики сами размещенные частицы и созданные ими запрещенные и полузапрещенные площади являются источником “промахов” генератора равномерно распределенных псевдослучайных чисел при попытке выбора начальной ячейки для

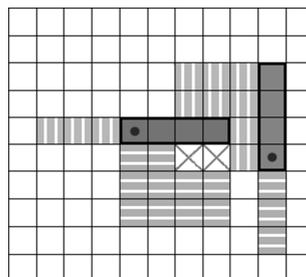


Рис. 1. Осажденные частицы и созданные ими запрещенные площади

Fig. 1. Adsorbed particles and the forbidden areas created by them

размещения очередной частицы с уже выбранной ориентацией. Под промахами понимается, что полученные с равномерного псевдослучайного генератора тип ориентации частицы и индекс начальной ячейки указывают на ячейку решетки, запрещенную для размещения частицы данной ориентации. В этом случае повторно выбираются тип ориентации частицы и индекс начальной ячейки.

С увеличением числа размещенных частиц доля запрещенных и полузапрещенных ячеек растет, обуславливая рост числа промахов. Этот рост особенно ощутим на шагах RSA, близких к джаммингу, и порождает обратную экспоненциальную зависимость концентрации покрытия от времени моделирования. Обсуждаемый метод как раз и направлен на сокращение числа промахов случайного генератора при реализации кинетики RSA.

Идея метода вспомогательных списков состоит в создании в определенный момент кинетики RSA двух вспомогательных списков, содержащих индексы ячеек решетки, разрешенных для размещения начала горизонтально и вертикально ориентированных частиц соответственно. Такие ячейки будем называть далее разрешенными. Отметим, что ячейки типа 2 входят одновременно в оба списка. При этом основной массив решетки хранит для каждой ячейки ее тип и для разрешенных ячеек их индексы во вспомогательных списках. Соответствующий элемент вспомогательного списка хранит индекс этой ячейки в основном массиве решетки, реализуя перекрестную ссылку.

В момент начала моделирования кинетики RSA все ячейки решетки являются разрешенными (тип 2) и случайный выбор начальной ячейки для осаждения происходит на начальных шагах RSA непосредственно в самой решетке. Однако с ростом числа осажденных частиц по описанным выше причинам наблюдается рост числа промахов генератора. При достижении управляющим параметром некоторого порогового значения создаются вспомогательные списки, которые содержат координаты только текущих разрешенных ячеек решетки для частиц горизонтальной и вертикальной ориентации. Пороговое значение управляющего параметра определяется, очевидно, на основе анализа текущего состояния решетки.

После создания списков кинетика RSA реализуется следующей процедурой. Поскольку вспомогательные списки содержат информацию только о разрешенных ячейках, а текущая длина списков известна, требуется всего два обращения к генератору равномерно распределенных псевдослучайных чисел — одно для выбора ориентации частицы и второе для выбора начальной ячейки в соответствующем вспомогательном списке. Далее происходят обработка запрещенных площадей в массиве решетки и сокращение длин списков разрешенных ячеек путем обмена уже запрещенного элемента списка с разрешенным. Это приводит к тому, что запрещенный элемент попадает в конец списка, а текущая длина списка сокращается на единицу. Такая процедура приводит к тому, что после формирования списков разрешенных ячеек на каждом шаге осаждения генератор не делает промахов.

Актуальным вопросом построения оптимального по трудоемкости алгоритма, реализующего этот метод, является выбор управляющего параметра и его оптимального порогового значения. Параметр, запускающий создание списков, обоснуем на основе следующих рассуждений. Поскольку с ростом числа осажденных частиц увеличивается и число запрещенных ячеек, введем в рассмотрение параметр α , динамически изменяющийся в кинетике RSA, — текущую долю запрещенных ячеек в исходной решетке. Очевидно, что в процессе осаждения частиц параметр α растет, а при достижении им порогового значения α^* происходит создание вспомогательных списков, содержащих ин-

дексы только текущих разрешенных ячеек решетки. Так как алгоритмически намного проще отслеживать число осажденных частиц, которые и определяют число запрещенных ячеек, мы первоначально получим оптимальный порог по параметру концентрации осажденных частиц, а затем покажем, как получить α^* .

Приведем необходимые обозначения: L — линейный размер исходной квадратной решетки; k — длина частицы; $\rho(k) = \Theta(\infty)$ — концентрация (доля покрытия решетки частицами) системы при джамминге, зависящая от длины частицы k . Оценка числа размещенных частиц в момент джамминга N_j есть $N_j(\rho, L, k) = \rho(k)L^2k^{-1}$. Например, в решетке 256×256 с периодическими граничными условиями при длине частиц 8 получаем в среднем 6128 осажденных частиц. Оценка сделана для известной доли покрытия при джамминге для $k = 8$ — $\rho(8) \approx 0.748$ [18]. Обозначим через N текущее число осажденных частиц и $x = NN_j^{-1}$ долю заполнения решетки частицами, т. е. текущую концентрацию осажденных частиц.

2. Элементы модели RSA и аппроксимирующие зависимости

Функции, описывающие кинетику RSA, впервые введены в [18]. Будем использовать две функции, зависящие от концентрации частиц x :

- функцию $f_1(x)$, значение которой есть текущая доля ячеек типа 1 в решетке, это сумма долей ячеек типов 1h и 1v;
- функцию $f_2(x)$, значение которой есть текущая доля ячеек типа 2 в решетке.

Основные эксперименты проведены для квадратных решеток размером $L = 512$ и длин частиц $k = 6, 8, 10, 12, 14, 16$. Кроме того, использованы ранее полученные в [18] результаты для $L = 256$ и $k = 8$.

Как показывают проведенные нами эксперименты, для значений $x > 0.4$ доля ячеек типа 2 существенно мала (и не превышает 3%) и основную долю разрешенных ячеек составляют ячейки типа 1. Тогда для $x > 0.4$ значение $f_1(x)L^2$ есть приемлемая оценка числа разрешенных ячеек, следовательно, оценка суммарной длины двух вспомогательных списков. Доля запрещенных ячеек хорошо оценивается как $h(x) = 1 - f_1(x)$. В реальной кинетике RSA рост числа запрещенных ячеек подчиняется достаточно сложной зависимости от текущей концентрации уже осажденных частиц [18] (рис. 2).

Исследование функции $f_1(x)$ на основе экспериментальных данных показывает, что зависимость $\ln f_1(x)$ хорошо аппроксимируется параболой (рис. 3) с $R^2 = 0.9968$ (для $L = 256, k = 8$), тогда экспоненциальная аппроксимация $f_1(x)$ имеет вид $f_1(x) \approx e^{-\lambda(x)}$, где функция $\lambda(x)$ — полином второй степени:

$$\lambda(x) = a_2x^2 + a_1x + a_0. \quad (1)$$

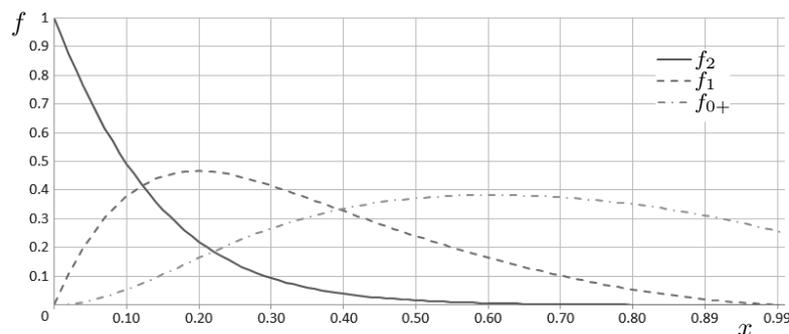


Рис. 2. Графики функций $f_2(x)$, $f_1(x)$, $f_{0+}(x)$ при $L = 512, k = 8$

Fig. 2. Functions $f_2(x)$, $f_1(x)$, $f_{0+}(x)$ with $L = 512, k = 8$

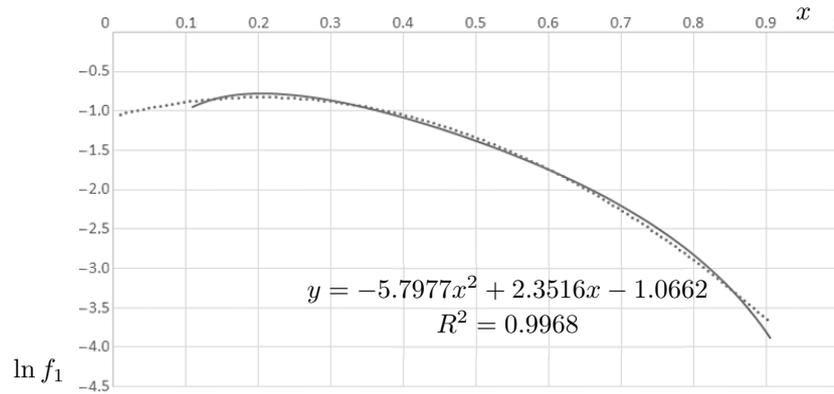


Рис. 3. Зависимость $\ln f_1(x)$ для $L = 256$, $k = 8$ (пунктир) и ее параболическая аппроксимация (сплошная кривая)

Fig. 3. Dependence of $\ln f_1(x)$ with $L = 256$, $k = 8$ (dotted line) and its parabolic approximation (solid line)

Такая аппроксимация вполне ожидаема для окрестности максимума. Примечательно, что она работает на довольно широком интервале концентраций, а не только вблизи максимума. Например, для $L = 256$, $k = 8$ оценка коэффициентов в $\lambda(x)$, полученная методом наименьших квадратов по экспериментальным данным, на сегменте $[0.1, \dots, 0.9]$ в усреднении на сто экспериментов дает следующие значения коэффициентов (рис. 3):

$$\lambda(x) = 5.7977x^2 - 2.3516x + 1.0662.$$

Отметим, что точка максимума аппроксимирующей параболы ($\lambda'(x) = 0$) — $x = 0.2028$ хорошо совпадает с точкой максимума функции $f_1(x)$, определенной по экспериментальным данным, — 0.2025 . С использованием полученной аппроксимации функция $h(x)$, задающая зависимость доли запрещенных ячеек от текущей концентрации частиц в решетке, может быть представлена в виде

$$h(x) = 1 - e^{-\lambda(x)}.$$

В статье [19] на основе свойств геометрического распределения получена зависимость матожидания числа равномерно случайных заполнений элементов массива для достижения заданной доли заполненных элементов в изначально свободном массиве.

В рассматриваемом методе необходима оценка числа обращений к генератору равномерно распределенных псевдослучайных чисел при достижении некоторой концентрации частиц в решетке. Получим эту оценку, рассуждая аналогично [19]: при концентрации s и уже выбранной случайной ориентации следующей частицы свободными для размещения ее начала являются ячейки типа 2 и половина ячеек типа 1, поскольку мы принимаем гипотезу о статистической равномогности множества ячеек типов $1h$ и $1v$. Тогда вероятность $p(s)$ “успеха” для случайной величины $X(s)$ в испытании по выбору начальной ячейки и матожидание $E(X(s))$ — как случайной величины с геометрическим распределением — при текущей концентрации s определяются как

$$p(s) = f_2(s) + \frac{1}{2}f_1(s), \quad E(X(s)) = \frac{1}{p} = \frac{2}{2f_2(s) + f_1(s)}.$$

Введем в рассмотрение случайную величину $Y(x)$ — суммарное до достижения концентрации x число попыток осаждения, включая успешные. Под попытками будем понимать обращение к генератору по выбору ориентации и индекса начальной ячейки.

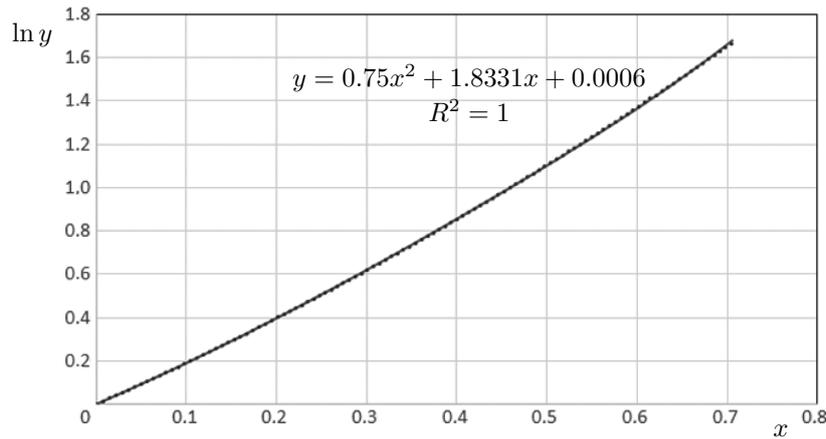


Рис. 4. Зависимость $\ln y(x)$ для $L = 256$, $k = 8$ (пунктир) и ее параболическая аппроксимация (сплошная кривая)

Fig. 4. Dependence $\ln y(x)$ with $L = 256$, $k = 8$ (dotted line) and its parabolic approximation (solid line)

На основе $E(X(s))$ матожидание $Y(x)$ по теореме о сумме матожиданий случайных величин равно

$$E(Y(x)) = \sum_{n=0}^{s=x} \frac{2}{2f_2(s) + f_1(s)}.$$

Рассмотрим функцию

$$y(x) = \frac{E(Y(x))}{xN_j}. \quad (2)$$

Проведенное на основе экспериментальных данных исследование функции $y(x)$ показывает, что зависимость $\ln y(x)$ так же очень хорошо аппроксимируется параболой (рис. 4) с $R^2 = 1$ (для $L = 256$, $k = 8$). Тогда экспоненциальная аппроксимация $y(x)$ имеет вид $y(x) \approx e^{\mu(x)}$, где функция $\mu(x)$ есть полином второй степени:

$$\mu(x) = b_2x^2 + b_1x + b_0.$$

Для $L = 256$, $k = 8$ оценка коэффициентов в $\mu(x)$, полученная методом наименьших квадратов по экспериментальным данным, на сегменте $[0.01, \dots, 0.70]$ в усреднении на ста экспериментах дает следующие значения коэффициентов (рис. 4):

$$\mu(x) = 0.75x^2 + 1.8331x + 0.0006. \quad (3)$$

3. Арифметический подход к обработке запрещенных площадей

После осаждения частицы в решетке необходима обработка покрытий ячеек решетки запрещенными площадями, созданными этой частицей. Обычно такая обработка выполняется цепочкой сравнений. Оценим ожидаемое число таких сравнений. Поскольку запрещенная площадь содержит $k^2 + k - 1$ ячеек и всего осаждается N_j частиц, суммарно за всю кинетику RSA необходимо обработать $\rho(k)L^2k^{-1}(k^2 + k - 1)$ ячеек. Для $L = 512$, $k = 16$ получаем 3 330 048 обрабатываемых ячеек.

Как показывает практика программирования, достаточно часто прямые арифметические вычисления оказываются более эффективными по времени выполнения, чем

Т а б л и ц а 1. Кодировка состояний ячеек в решетке
Table 1. Cell state encoding in a lattice

Тип ячейки	Код состояния ячейки
0– и 0+	0
1h	3
1v	5
2	11

Т а б л и ц а 2. Таблица действия операторов OpH и OpV
Table 2. Table of OpH and OpV operators output

Текущий тип ячейки	Код s_{old}	Результат покрытия 1h	Результат OpH s_{new}	Результат покрытия 1v	Результат OpV s_{new}
0– и 0+	0	0– или 0+	0	0– или 0+	0
1h	3	1h	3	1v	0
1v	5	0+	0	0+	5
2	11	1h	3	1v	5

цепочки сравнений, поскольку не содержат команд перехода. Для их реализации необходимо ввести кодировку состояний ячеек и операторы обработки перехода состояний. Кодировка состояний ячеек в решетке приведена в табл. 1.

При осаждении частицы возникают три вида покрытий, окружающих эту частицу ячеек запрещенными площадями. Эти покрытия должны быть обработаны для каждой ячейки, входящей в создаваемую частицей запрещенную площадь. Обозначим s_{old} текущий код состояния, хранящийся в обрабатываемой ячейке, а s_{new} — новый код состояния ячейки.

Покрытие собственно частицей. Ячейки, в которых расположена собственно частица, вне зависимости от предыдущего состояния получают тип 0– с кодом 0. Обработка этих ячеек производится прямым занесением кода $s_{new} = 0$ в соответствующие этим ячейкам элементы массива.

Покрытие разрешением 1h для горизонтально ориентированных частиц (покрытие запретом 1v). В ячейке, запрещенной для расположения начала вертикально ориентированных частиц, разрешено расположение только начала горизонтально ориентированных частиц. Для обработки этого покрытия введем в рассмотрение оператор OpH (табл. 2). Оператор OpH вычисляется по формуле

$$s_{new} = OpH(s_{old}) = ((s_{old} \bmod 4) \operatorname{div} 3) \cdot 3.$$

Покрытие разрешением 1v для вертикально ориентированных частиц (покрытие запретом 1h). В ячейке, запрещенной для расположения начала горизонтально ориентированных частиц, разрешено расположение только начала вертикально ориентированных частиц. Для обработки этого покрытия введем в рассмотрение оператор OpV (табл. 2). Оператор OpV вычисляется по формуле

$$s_{new} = OpV(s_{old}) = ((s_{old} \bmod 6) \operatorname{div} 5) \cdot 5.$$

4. Оценка трудоемкости алгоритма вспомогательных списков

Для оценки трудоемкости алгоритма будем считать, что он задает c_g элементарных операций при обращении к генератору равномерно распределенных псевдослучайных чисел и c_1 элементарных операций на обработку одной ячейки в исходной решетке или во вспомогательном списке. Очевидно, что число разрешенных ячеек, которые алгоритму необходимо выбрать для завершения кинетики RSA, равно числу частиц N_j , осажденных до перехода системы в состояние джамминга, — это подход амортизационного анализа [20]. Дальнейшие рассуждения о пороге переключения на формирование

списков будем проводить относительно значения текущей концентрации частиц в решетке x .

Для определения оптимального порога переключения на процедуру формирования списков выделим в алгоритме следующие три этапа и оценим их трудоемкость.

- *Этап первоначального осаждения частицы*, непосредственно использующий массив решетки, включает в себя случайный выбор ориентации частицы, получение случайных координат разрешенной ячейки для осаждения, собственно осаждение и обработку созданной частицей запрещенной площади. Эти действия производятся в массиве решетки. Этап выполняется до достижения пороговой концентрации x^* .
- *Этап начального формирования списков* — создание вспомогательных списков при достижении концентрацией частиц в решетке порогового значения x^* .
- *Этап осаждения с использованием списков*. Шаги на этом этапе аналогичны шагам на этапе первоначального осаждения, но при этом дополнительно обрабатываются элементы не только решетки, но и вспомогательных списков. Шаги повторяются до исчерпывания разрешенных ячеек в решетке, т. е. до достижения состояния джамминга, которое идентифицируется нулевой длиной обоих вспомогательных списков.

Оценим трудоемкость указанных этапов, полагая, что переключение на списки осуществляется при некоторой оптимальной (по трудоемкости) концентрации осажденных частиц x^* .

На этапе *первоначального осаждения частицы* выбор начальной ячейки для осаждения происходит непосредственно в самой решетке. Для фиксированного значения x будет осаждено xN_j частиц, для каждой из них будет выполнено по два обращения к генератору псевдослучайных чисел и обработано $k^2 + k - 1$ ячеек запрещенной площади. Это дает вклад в трудоемкость в виде $xN_j(2c_g + c_1(k^2 + k - 1))$.

Матожидание $E(Y(x))$ попыток осаждения на этом этапе по формуле (2) равно $y(x)xN_j$. Поскольку xN_j попыток были успешными, оставшиеся $y(x)xN_j - xN_j$ попыток есть промахи, для которых будут сделаны два обращения к генератору и одна проверка состояния ячейки, которая возвращает состояние “запрещена”, что дает $xN_j(y(x) - 1)(2c_g + c_1)$. Объединяя компоненты, получаем трудоемкость первого этапа

$$\begin{aligned} g_1(x, k, L, N_j) &= xN_j(2c_g + c_1(k^2 + k - 1)) + xN_j(y(x) - 1)(2c_g + c_1) = \\ &= xN_j(y(x)(2c_g + c_1) + c_1(k^2 + k - 2)). \end{aligned} \quad (4)$$

На этапе *формирования списков* для каждой ячейки в исходной решетке выполняем порядка c_1 элементарных операций — это проверка ее типа и для разрешенной ячейки запись ее индекса во вспомогательный список для частиц данной ориентации. Если ячейка относится к типу 2, запись происходит в оба вспомогательных списка. Мы рассматриваем реализацию, при которой формирование выполняется одним проходом по массиву решетки сразу для двух вспомогательных списков. Трудоемкость этапа складывается из прохода по всему массиву решетки и записи информации о свободных ячейках во вспомогательные списки. Поскольку доля свободных ячеек есть $e^{-\lambda(x)}$, трудоемкость составит

$$g_2(L, x) = c_1 L^2 (1 + e^{-\lambda(x)}),$$

но $e^{-\lambda(x)} < 1$ и можно приближенно считать, что

$$g_2(L, x) \approx \frac{3}{2} c_1 L^2. \quad (5)$$

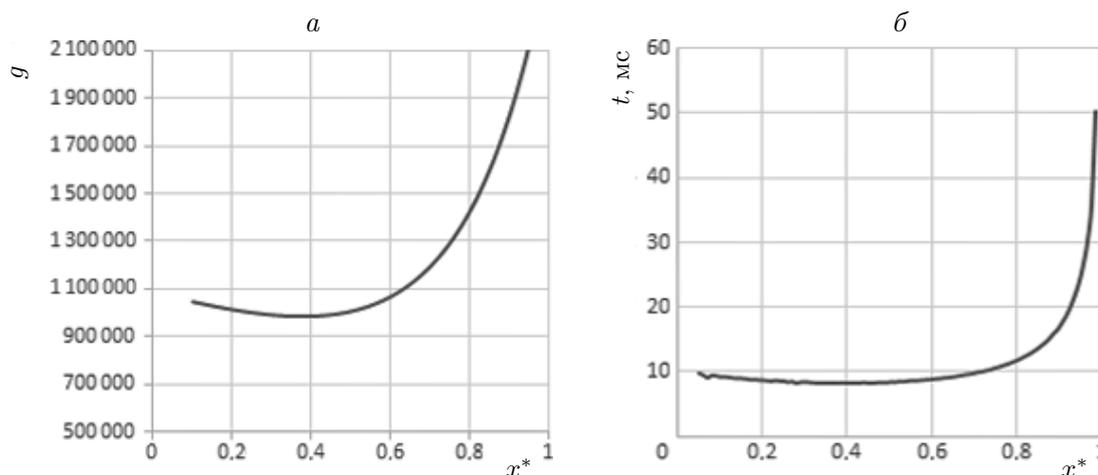


Рис. 5. Зависимость оценки трудоемкости (а) и реального времени расчета (б) от точки переключения на работу со вспомогательными списками при $L = 256$, $k = 8$
 Fig. 5. Dependence of the estimation of labor intensity (a) and real time of calculation (b) on the switching point to work with auxiliary lists at $L = 256$, $k = 8$

На этапе *осаждения с использованием списков* осталось осадить $N_j(1 - x)$ частиц, для каждой из которых необходимы только два обращения к случайному генератору. При этом, как и на этапе первоначального осаждения, обработке подлежат $k^2 + k - 1$ ячеек запрещенной площади. Но для каждой ячейки выполняется ее обработка не только в самой решетке, но и во вспомогательном списке, что дает $2c_1$ на каждую ячейку. Таким образом,

$$g_3(L, x) = N_j(1 - x)(2c_g + 2c_1(k^2 + k - 1)). \quad (6)$$

Объединяя полученные по формулам (4)–(6) результаты, получаем, что общая суммарная трудоемкость алгоритма RSA, реализующего метод вспомогательных списков, имеет вид

$$g_{RSA}(x, k, L, N_j) = xN_j(y(x)(2c_g + c_1) + c_1(k^2 + k - 1) - c_1) + \frac{3}{2}c_1L^2 + N_j(1 - x)(2c_g + 2c_1(k^2 + k - 1)). \quad (7)$$

На рис. 5 приведены оценка трудоемкости, вычисленная по формуле (2) при $c_g = 8$, $c_1 = 1$, и реального времени расчета при $L = 256$, $k = 8$. Качественное поведение функций совпадает, более того минимум по трудоемкости имеет оценку порядка 0.40, а реальный минимум по времени 8256.71 мкс достигается при концентрации частиц, равной 0.38. Это показывает, что выбранное отношение числа операций на обработку ячейки и трудоемкости обращения к генератору, равное 8, близко к реальности для нашей программной реализации.

5. Оптимальное значение управляющего параметра для метода списков

На основе полученной функции трудоемкости требуется определить такое пороговое значение x^* , которое доставляет минимум функции $g_{RSA}(x, k, L, N_j)$. Приведем соображения о существовании оптимального значения x^* . В кинетике RSA с ростом числа

осажденных частиц, т. е. с ростом x , увеличивается число запрещенных ячеек, что приводит к большому количеству промахов генератора равномерно распределенных псевдослучайных чисел при выборе начальной ячейки для размещения очередной частицы. Этот факт сильно увеличивает трудоемкость на последних шагах RSA. С другой стороны, использование вспомогательных списков с самого начала моделирования процесса RSA также неэффективно, поскольку требует дополнительных операций на работу с этими списками.

Декомпозиция полученной функции трудоемкости (7) позволяет выделить в ней три компонента:

- g_C — фиксированной трудоемкости, который не зависит от x ;
- g_{lx} — зависит линейно от x ;
- $g_{y(x)}$ — зависит от x и $y(x)$:

$$\begin{aligned} g_C(k, L, N_j) &= \frac{3}{2}c_1L^2 + 2c_gN_j + 2c_1N_j(k^2 + k - 1), \\ g_{lx}(x, k, N_j) &= -xN_j(2c_g + c_1(k^2 + k)), \\ g_{y(x)}(y(x), x, N_j) &= y(x)xN_j(2c_g + c_1). \end{aligned}$$

Введем в рассмотрение функцию $g_x(x)$, содержащую те компоненты оценки суммарной трудоемкости алгоритма (7), которые зависят от x и $y(x)$. Это сумма $g_{lx}(k, N_j)$ и $g_{y(x)}(y(x), x)$:

$$g_x(x) = y(x)xN_j(2c_g + c_1) - xN_j(2c_g + c_1(k^2 + k)),$$

подставив $y(x) \approx e^{\mu(x)}$, получаем

$$g_x(x) = e^{\mu(x)}xN_j(2c_g + c_1) - xN_j(2c_g + c_1(k^2 + k)).$$

Определим $x^* = \operatorname{argmin} g_x(x)$, приравняв нулю производную $g_x(x)$. С учетом вида функции $\mu(x)$ (см. формулу (3)) запишем

$$\frac{d}{dx}g_x(x) = e^{\mu(x)}(2b_2x^2 + b_1x + 1)N_j(2c_g + c_1) - N_j(2c_g + c_1(k^2 + k)) = 0,$$

откуда, полагая $b_0 = 0$ (поскольку $y(0) = 1$ и $y(x) = e^{\mu(x)}$, то $\mu(0) = 0$), получим

$$(2b_2x^2 + b_1x + 1)e^{b_2x^2 + b_1x} = \frac{2c_g + c_1(k^2 + k)}{2c_g + c_1}. \quad (8)$$

Из формулы (8) следует, что нас интересует отношение числа операций c_1 и c_g , а не их явные значения. Обозначив γ_0 отношение $2\frac{c_g}{c_1}$, из (8) получим

$$r(x) = (2b_2x^2 + b_1x + 1)e^{b_2x^2 + b_1x} - \frac{\gamma_0 + k^2 + k}{\gamma_0 + 1} = 0. \quad (9)$$

Определяя $x^* = \operatorname{argzero} r(x)$ путем численного решения трансцендентного уравнения (9), получим оптимальный порог концентрации x^* для переключения на процедуру формирования вспомогательных списков.

Изначально в качестве управляющего параметра введена доля запрещенных ячеек в решетке α . Покажем, как на основе x^* может быть получено пороговое значение α^* для запуска этапа формирования списков. Для этого заметим, что пороговая доля запрещенных ячеек α^* равна $h(x^*)$, а следовательно, $\alpha^* = 1 - e^{-\lambda(x^*)}$, где $\lambda(x^*)$ определяется формулой (1). На основании (9) можно говорить, что оптимальный порог зависит от γ_0 , k и коэффициентов аппроксимации b_1 и b_2 функции $\mu(x)$ — $x^* = x^*(\gamma_0, k, b_1, b_2)$.

В первом приближении можно считать, что число операций c_g в современном генераторе псевдослучайных чисел [21] на одно обращение с учетом трудоемкости вызова и возврата из самой функции в разы превышает число операций c_1 на обработку одной ячейки решетки. Решение уравнения (9) с $\gamma_0 = 16$ для $L = 256$, $k = 8$ дает значение $x^* = 0.407$, а при $\gamma_0 = 19$ получаем $x^* = 0.378$, что практически совпадает с нашими экспериментальными результатами. Для других программных реализаций, языков и случайных генераторов значение γ_0 определяется, очевидно, на основе экспериментальных исследований.

6. Результаты экспериментов, обсуждение и рекомендации

Экспериментальное исследование проведено на компьютере с характеристиками: процессор x64 Intel(R) Celeron(R) N4100 1.10 ГГц, оперативная память 4 ГБ, операционная система Linux 5.15.76-1-MANJARO, язык программной реализации C++, компилятор gcc (GCC) 12.2.0. Использован стандартный генератор псевдослучайных чисел, встроенный в язык C++. Время расчета приведено в микросекундах с усреднением по 1000 запускам.

Основные экспериментальные результаты приведены на рис. 6 и в табл. 3. На рис. 6 показано, как время выполнения программной реализации алгоритма метода списков при $L = 512$ зависит от порога переключения x^* на вспомогательные списки для частиц различной длины. В табл. 3 приведены экспериментально определенные значения

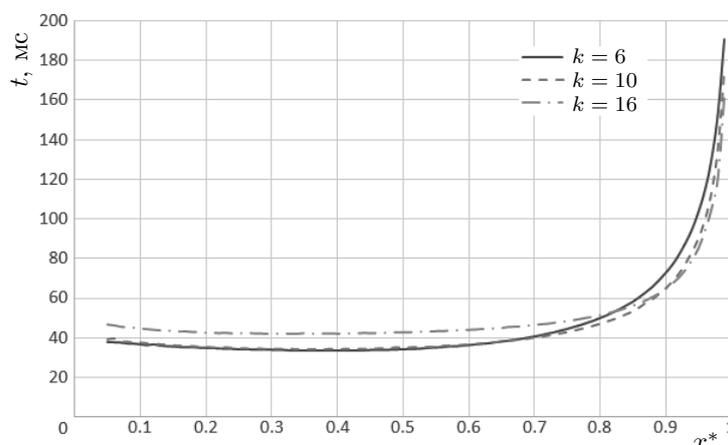


Рис. 6. Зависимость времени расчета RSA от порога переключения x^* на вспомогательные списки при осаждении частиц различной длины

Fig. 6. Dependence of the RSA calculation time on the threshold x^* for switching to auxiliary lists during the deposition of particles of different lengths

Т а б л и ц а 3. Экспериментальные результаты по оптимальному порогу переключения
Table 3. Experimental results on the optimal switching threshold

k	x^*	$t(x^*)$	Диапазон x с 5%-ным отклонением от $t(x^*)$	$x^* : f_{0+}(x^*) \approx f_1(x^*)$
6.00	0.41	33 286.87	[0.19, 0.55]	0.46
8.00	0.37	33 091.20	[0.19, 0.54]	0.39
10.00	0.35	34 213.65	[0.17, 0.55]	0.35
12.00	0.36	36 504.10	[0.15, 0.58]	0.31
14.00	0.34	40 072.44	[0.14, 0.59]	0.29
16.00	0.30	42 285.71	[0.12, 0.60]	0.27

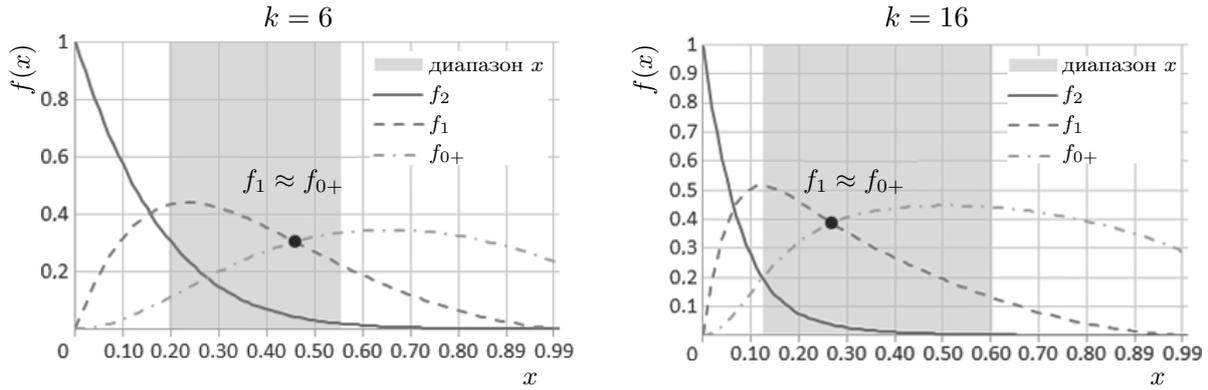


Рис. 7. Диапазон рекомендуемых значений порога переключения x^* на вспомогательные списки и функции динамики кинетики RSA при длинах частиц 6 и 16

Fig. 7. The range of recommended values of the switching threshold x^* for auxiliary lists and functions of the RSA kinetics dynamics at particle lengths of 6 and 16

оптимального порога переключения x^* на вспомогательные списки для исследованного диапазона длин частиц и соответствующие этим порогам минимальные времена расчетов. Очевидно, что время расчета увеличивается с ростом длины частицы, поскольку при этом растет запрещаемая частицей площадь, т. е. число запрещаемых ею ячеек решетки. Как и ожидалось, наблюдается очень пологий минимум времени на достаточно широком диапазоне по концентрации частиц. В табл. 3 приведены значения границы диапазонов по x^* , в которых время расчета отличается от оптимального не более чем на 5%. Отметим, что этот диапазон увеличивается с ростом длины частиц. На рис. 7 приведено наложение этого диапазона на графики поведения основных функций, отражающих кинетику RSA ортогональных частиц на квадратную решетку с периодическими граничными условиями.

Визуальный анализ информации на рис. 7 позволяет сформулировать следующую рекомендацию для программной реализации метода списков. Переключение на этап формирования и дальнейшего использования вспомогательных списков можно производить в момент, когда текущее (по концентрации осажденных частиц) значение функции $f_{0+}(x)$ становится больше, чем значение функции $f_1(x)$. Программное отслеживание такого момента не представляет особого труда, так как требует только подсчета текущего количества ячеек типа $0+$ и типа 1. Для всего исследованного диапазона длин частиц эта точка лежит внутри 5%-ного диапазона отклонений от оптимального времени и имеет тенденцию смещения влево с ростом длины частицы. Для частиц длины 10 эта точка практически совпадает с оптимальным порогом переключения. Информация о точном значении концентрации осажденных частиц при такой рекомендации порога переключения приведена в табл. 3. Очевидно, что такая рекомендация работает при использовании стандартного генератора псевдослучайных чисел языка C++, поскольку оптимальный порог переключения на вспомогательные списки зависит от соотношения числа операций на обработку ячейки и числа операций используемого генератора.

Благодарности. Авторы выражают искреннюю признательность заведующему лабораторией математического моделирования и информационных технологий в науке и образовании Астраханского государственного университета д. ф.-м. н., проф. Юрию Юрьевичу Тарасевичу за тщательное обсуждение статьи, особенно в части терминологии, и ценные замечания по ее содержанию.

Список литературы

- [1] **Evans J.W.** Random and cooperative sequential adsorption. *Reviews of Modern Physics*. 1993; 65(4):1281–1329. DOI:10.1103/RevModPhys.65.1281.
- [2] **Adamczyk Z.** Modeling adsorption of colloids and proteins. *Current Opinion in Colloid & Interface Science*. 2012; 17(3):173–186. DOI:10.1016/j.cocis.2011.12.002. Available at: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S135902941100152X>.
- [3] **Evans J.W.** Comment on “Kinetics of random sequential adsorption”. *Physical Review Letters*. 1989; 62(22):2642. DOI:10.1103/PhysRevLett.62.2642. Available at: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.62.2642>.
- [4] **Schaaf P., Johner A., Talbot J.** Asymptotic behavior of particle deposition. *Physical Review Letters*. 1991; 66(12):1603–1605. DOI:10.1103/PhysRevLett.66.1603. Available at: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.66.1603>.
- [5] **Hoffman K.D.** On the nonequilibrium distribution of adatoms resulting from dissociative adsorption of a diatomic gas. *Journal of Chemical Physics*. 1976; 65(1):95–102. DOI:10.1063/1.432762.
- [6] **Evans J.W.** Irreversible random and cooperative process on lattices: direct determination of density expansions. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*. 1984; 123(2):297–318. DOI:10.1016/0378-4371(84)90158-4.
- [7] **Evans J.W.** Nonequilibrium percolative $c(2\times 2)$ ordering: oxygen on Pd(100). *Journal of Chemical Physics*. 1987; (87):3038–3048. DOI:10.1063/1.453040.
- [8] **Baram A., Kutasov D.** On the dynamics of random sequential absorption. *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 1989; 22(6):L251. DOI:10.1088/0305-4470/22/6/011.
- [9] **Privman V., Wang J.-S., Nielaba P.** Continuum limit in random sequential adsorption. *Physical Review B: Condensed Matter*. 1991; 43(4):3366–3372. DOI:10.1103/PhysRevB.43.3366.
- [10] **Cornette V., Linares D., Ramirez-Pastor A.J., Nieto F.** Random sequential adsorption of polyatomic species. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2007; 40(5):11765. DOI:10.1088/1751-8113/40/39/005.
- [11] **Budinski-Petkovic L., Vrhovac S.B., Loncarevic I.** Random sequential adsorption of polydisperse mixtures on discrete substrates. *Physical Review E: Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*. 2008; (78):061603. DOI:10.1103/PhysRevE.78.061603.
- [12] **Ciesla M.** Effective modelling of adsorption monolayers built of complex molecules. *Journal of Computational Physics*. 2019; (401):108999. DOI:10.1016/j.jcp.2019.108999.
- [13] **Slutskii M.G., Barash L.Y., Tarasevich Yu.Yu.** Percolation and jamming of random sequential adsorption samples of large linear k -mers on a square lattice. *Physical Review E*. 2018; 98(6):062130. DOI:10.1103/PhysRevE.98.062130. Available at: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.98.062130>.
- [14] **Nord R.S.** Irreversible random sequential filling of lattices by Monte Carlo simulation. *Journal of Statistical Computation and Simulation*. 1991; 39(4):231–240. DOI:10.1080/00949659108811358.
- [15] **Brosilow B.J., Ziff R.M., Vigil R.D.** Random sequential adsorption of parallel squares. *Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics*. 1991; 43(2):631–638. DOI:10.1103/PhysRevA.43.631.

- [16] **Fusco C., Gallo P., Petri A., Rovere M.** Random sequential adsorption and diffusion of dimers and k -mers on a square lattice. *Journal of Chemical Physics*. 2001; (114):7563–7569. DOI:10.1063/1.1359740.
- [17] **Gould H., Tobochnik J., Christian W., Ayars E.** An introduction to computer simulation methods: applications to physical systems, 2nd edition. *American Journal of Physics*. 2006; 74(7):652–653. DOI:10.1119/1.2219401.
- [18] **Ulyanov M.V., Tarasevich Yu.Yu., Eserkepov A.V., Grigorieva I.V.** Characterization of domain formation during random sequential adsorption of stiff linear k -mers onto a square lattice. *Physical Review E*. 2020; 102(4):042119. DOI:10.1103/PhysRevE.102.042119. Available at: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.102.042119>.
- [19] **Ульянов М.В., Уразов С.О.** Реализация случайной последовательной адсорбции (RSA) методом редукции вспомогательных массивов: аналитическое рассмотрение и вычислительный эксперимент. *Вычислительные технологии*. 2022; 27(2):74–90. DOI:10.25743/ICT.2022.27.2.007.
- [20] **Cormen T., Leiserson Ch., Rivest R., Stein C.** Introduction to algorithms. Cambridge: MIT Press; 1990: 1312.
- [21] **Слеповичев И.И.** Генераторы псевдослучайных чисел: учебное пособие. Саратов: СГУ; 2017: 118.

Optimal switching threshold in the algorithm for simulating Random Sequential Adsorption by the Auxiliary List Method

ULYANOV MIKHAIL V.^{1,2*}, URAZOV STANISLAV O.^{2,*}

¹V.A. Trapeznikov Institute of Control Sciences of RAS, 117997, Moscow, Russia

²Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics Lomonosov Moscow State University, 119991, Moscow, Russia

*Corresponding author: Urazov Stanislav O., e-mail: urazov.msu@gmail.com

Received December 02, 2022, revised January 12, 2023, accepted March 27, 2023.

Abstract

The article considers the problem of determining the optimal switching threshold in the algorithm for modelling random sequential adsorption by the auxiliary list method in order to increase the time efficiency of program implementation. Random sequential adsorption is a process where particles are randomly and irreversibly deposited on a substrate without overlapping with previously adsorbed particles. Random sequential adsorption is a useful model for many physical, chemical, and biological processes.

A square lattice consisting of cells is often used to represent a substrate. The article considers an algorithm for modelling the deposition of linear particles occupying several consecutive cells on a square lattice.

To study the features and kinetics of the random sequential adsorption and determine the characteristics of the coating, it is necessary to find statistically significant data through simulation of the deposition of particles on a lattice, both for different lattice sizes and for different particle

lengths. The need to obtain large samples generates the requirement for the time efficiency of the software implementation of random sequential adsorption simulation.

Due to the inverse exponential dependence of the growth of the lattice coating concentration with particles on the simulation time, direct simulation of the jamming state on a computer is a laborious task. Technically, this problem can be solved by various methods, in particular, by switching at a certain concentration of deposited particles to auxiliary lists of cells available for adsorption by particles.

There are known results on the experimental determination of the threshold for switching to the formation of lists stage, but the question theoretically remains open at what concentration the use of lists becomes effective.

The article is devoted to the presentation of the results of theoretical analysis of the algorithm of the auxiliary list method based on approximations of the concentration functions of free cells according to experimental data. The results obtained agree with the experimentally determined switching threshold. Based on theoretical results and experimental research, a simple, in terms of software implementation, condition for switching to the formation of lists of cells available for adsorption is formulated.

Keywords: random sequential adsorption, auxiliary list method, time efficiency.

Citation: Ulyanov M.V., Urazov S.O. Optimal switching threshold in the algorithm for simulating Random Sequential Adsorption by the Auxiliary List Method. Computational Technologies. 2023; 28(3):84–100. DOI:10.25743/ICT.2023.28.3.006. (In Russ.)

Acknowledgements. The authors express their sincere gratitude and appreciation to the Head of the Laboratory of Mathematical Modelling and Information Technologies in Science and Education of the Astrakhan State University, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, prof. Yury Yuryevich Tarasevich for a very useful, especially in terms of terminology, discussion of the article, meaningful recommendations for its improvement, and valuable comments on its content.

References

1. **Evans J.W.** Random and cooperative sequential adsorption. *Reviews of Modern Physics*. 1993; 65(4):1281–1329. DOI:10.1103/RevModPhys.65.1281.
2. **Adamczyk Z.** Modeling adsorption of colloids and proteins. *Current Opinion in Colloid & Interface Science*. 2012; 17(3):173–186. DOI:10.1016/j.cocis.2011.12.002. Available at: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S135902941100152X>.
3. **Evans J.W.** Comment on “Kinetics of random sequential adsorption”. *Physical Review Letters*. 1989; 62(22):2642. DOI:10.1103/PhysRevLett.62.2642. Available at: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.62.2642>.
4. **Schaaf P., Johner A., Talbot J.** Asymptotic behavior of particle deposition. *Physical Review Letters*. 1991; 66(12):1603–1605. DOI:10.1103/PhysRevLett.66.1603. Available at: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.66.1603>.
5. **Hoffman K.D.** On the nonequilibrium distribution of adatoms resulting from dissociative adsorption of a diatomic gas. *Journal of Chemical Physics*. 1976; 65(1):95–102. DOI:10.1063/1.432762.
6. **Evans J.W.** Irreversible random and cooperative process on lattices: direct determination of density expansions. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*. 1984; 123(2):297–318. DOI:10.1016/0378-4371(84)90158-4.
7. **Evans J.W.** Nonequilibrium percolative $c(2 \times 2)$ ordering: oxygen on Pd(100). *Journal of Chemical Physics*. 1987; (87):3038–3048. DOI:10.1063/1.453040.
8. **Baram A., Kutasov D.** On the dynamics of random sequential adsorption. *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 1989; 22(6):L251. DOI:10.1088/0305-4470/22/6/011.
9. **Privman V., Wang J.-S., Nielaba P.** Continuum limit in random sequential adsorption. *Physical Review B: Condensed Matter*. 1991; 43(4):3366–3372. DOI:10.1103/PhysRevB.43.3366.
10. **Cornette V., Linares D., Ramirez-Pastor A.J., Nieto F.** Random sequential adsorption of polyatomic species. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2007; 40(5):11765. DOI:10.1088/1751-8113/40/39/005.

11. **Budinski-Petkovic L., Vrhovac S.B., Loncarevic I.** Random sequential adsorption of polydisperse mixtures on discrete substrates. *Physical Review E: Statistical, Nonlinear, and soft Matter Physics*. 2008; (78):061603. DOI:10.1103/PhysRevE.78.061603.
12. **Ciesla M.** Effective modelling of adsorption monolayers built of complex molecules. *Journal of Computational Physics*. 2019; (401):108999. DOI:10.1016/j.jcp.2019.108999.
13. **Slutskii M.G., Barash L.Y., Tarasevich Yu.Yu.** Percolation and jamming of random sequential adsorption samples of large linear k -mers on a square lattice. *Physical Review E*. 2018; 98(6):062130. DOI:10.1103/PhysRevE.98.062130. Available at: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.98.062130>.
14. **Nord R.S.** Irreversible random sequential filling of lattices by Monte Carlo simulation. *Journal of Statistical Computation and Simulation*. 1991; 39(4):231–240. DOI:10.1080/00949659108811358.
15. **Brosilow B.J., Ziff R.M., Vigil R.D.** Random sequential adsorption of parallel squares. *Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics*. 1991; 43(2):631–638. DOI:10.1103/PhysRevA.43.631.
16. **Fusco C., Gallo P., Petri A., Rovere M.** Random sequential adsorption and diffusion of dimers and k -mers on a square lattice. *Journal of Chemical Physics*. 2001; (114):7563–7569. DOI:10.1063/1.1359740.
17. **Gould H., Tobochnik J., Christian W., Ayars E.** An introduction to computer simulation methods: applications to physical systems, 2nd edition. *American Journal of Physics*. 2006; 74(7):652–653. DOI:10.1119/1.2219401.
18. **Ulyanov M.V., Tarasevich Yu.Yu., Eserkepov A.V., Grigorieva I.V.** Characterization of domain formation during random sequential adsorption of stiff linear k -mers onto a square lattice. *Physical Review E*. 2020; 102(4):042119. DOI:10.1103/PhysRevE.102.042119. Available at: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.102.042119>.
19. **Ulyanov M.V., Urazov S.O.** Implementation of Random Sequential Adsorption (RSA) by auxiliary array reduction method: analytical consideration and computational experiment. *Computational Technologies*. 2022; 27(2):74–90. DOI:10.25743/ICT.2022.27.2.007. (In Russ.)
20. **Cormen T., Leiserson Ch., Rivest R., Stein C.** Introduction to algorithms. Cambridge: MIT Press; 1990: 1312.
21. **Slepovichev I.I.** Generatory psevdosluchaynykh chisel [Pseudo random number generators]. Saratov: SGU; 2017: 118. (In Russ.)