

0.1. Уразов С.О. Оптимальный порог редукции вспомогательных массивов в алгоритме случайной последовательной адсорбции (RSA)

Процесс случайной последовательной адсорбции (RSA) регламентирует последовательное осаждение частиц без перекрытий на подложку и лежит в основе моделирования целого ряда систем с жесткими частицами, в связи с чем является востребованным в области исследования природных явлений и в производственных процессах. Примерами могут служить осаждение биочастиц в различных средах, осаждение нанотрубок на подложки и др. [?, ?].

Прямой алгоритм, реализующий RSA, предполагает равномерный случайный выбор ориентации частицы и места в системе для её осаждения. Осажденные частицы не могут перекрывать другие, уже находящиеся в системе, и остаются до конца процесса. Процедура заканчивается при наступлении состояния джамминга — в тот момент, когда в системе не остается места, достаточного для осаждения очередной частицы. Таким образом, при приближении к джаммингу число свободных мест для осаждения уменьшается, и из-за равномерного случайного выбора ориентации и местоположения частицы увеличивается вероятность попасть в уже занятый участок системы. Эти промахи являются причиной временной неэффективности прямой программной реализации алгоритма RSA — потери времени связаны с генерацией места осаждения очередной частицы, значительно замедляя процесс.

В данной работе исследован частный случай RSA осаждения k -меров (прямоугольные частицы, занимающие k подряд ячеек) на квадратную решетку с периодическими граничными условиями (тороидальный тип). Был разработан метод, использующий два дополнительных массива, в которых хранится информация о свободных и занятых ячейках для размещения частицы, отдельно для горизонтально и вертикально ориентированных частиц. По достижении определённого порога заполненности массивов они редуцируются. После редукции в массивах остаются только указатели на ячейки, доступные для осаждения. После редукции массивов случайная генерация позиций частиц происходит уже по уменьшенному диапазону ячеек. Преобразование эквивалентно стандартному алгоритму RSA в силу равномерности случайного выбора. Метод позволяет значительно уменьшить число промахов случайного генератора при выборе ячейки для осаждения очередной частицы, ускоряя тем самым моделирование процесса осаждения.

Проведены экспериментальные исследования по определению порога редукции, доставляющего минимум временных затрат. В результате теоретического расчёта, основанного на оценках трудоёмкости этапов алгоритма, получены оценки оптималь-

ного порога редукции, коррелирующие с экспериментальными результатами.

Научный руководитель — д.т.н. Ульянов М. В.

Список литературы

- [1] ЛЕБОВКА Н.И., ТАРАСЕВИЧ Ю.Ю., ГИГИБЕРИЯ В.А. и др. Образование структур в двумерных системах стержнеобразных частиц // Тр. XX Всероссийский семинар «Моделирование неравновесных систем – 2017», Красноярск, 2017.
- [2] 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 // Phys. Rev. E. 2020. Vol. 102. Iss. 4. P. 042119.