

0.1. Уразов С.О. Сравнительный анализ алгоритмов моделирования случайной последовательной адсорбции частиц на квадратную решетку

Случайная последовательная адсорбция (RSA) представляет собой процесс, когда объекты случайно и необратимо осаждаются на подложку без перекрытия с ранее адсорбированными объектами. RSA является полезной моделью для исследования многих физических, химических и биологических процессов [1].

В докладе рассматривается частный случай RSA, в котором подложка представляет собой квадратную решётку, а объекты – линейные частицы, которые занимают некоторое количество последовательных ячеек решётки. Прямой алгоритм, реализующий RSA, предполагает равномерный случайный выбор ориентации частиц и их начальной позиции в решётке для осаждения. Из-за обратной экспоненциальной зависимости роста концентрации покрытия от времени, прямое программное моделирование является трудоёмкой задачей. При этом для полноценного исследования процесса необходим статистически значимый объем данных, из-за чего возникает задача эффективной симуляции процесса RSA.

Технически, для решения данной задачи уже разработаны различные методы, использующие вспомогательные списки [2]. Временная эффективность программных реализаций этих методов зависит от размеров решётки и длин частиц. В докладе представлены результаты полномасштабного экспериментального исследования с опорой на теоретическую оценку [3] трудоёмкости алгоритмов этих методов. Даны рекомендации по выбору метода и его параметров в зависимости от размеров решётки и длин частиц.

Список литературы

- [1] ЛЕВОВКА Н.И., ТАРАСЕВИЧ Ю.Ю., ГИГИБЕРИЯ В.А. и др. Образование структур в двумерных системах стержнеобразных частиц // Труды XX Всероссийского семинара «Моделирование неравновесных систем – 2017». Красноярск, 2017. С. 80–83.
- [2] ULYANOV M. V., TARASEVICH YU. YU., ESERKEROV 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. N. 4. P. 042119.
- [3] УЛЬЯНОВ М. В., УРАЗОВ С. О. Реализация случайной последовательной адсорбции (RSA) методом редукции вспомогательных массивов: аналитическое рассмотрение и вычислительный эксперимент // Вычислительные технологии. 2022. Т. 27. № 2. С. 74–90.