

ОБЩЕРОССИЙСКИЙ СЕМИНАР
«ИНФОРМАТИКА, УПРАВЛЕНИЕ И СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ»

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

Докладчики:

д.ф.-м.н., проф. Юрий Юрьевич Тарасевич

(Астраханский государственный университет),

д.т.н., проф. Михаил Васильевич Ульянов

(ИПУ РАН им. В. А. Трапезникова, МГУ им. М. В. Ломоносова).

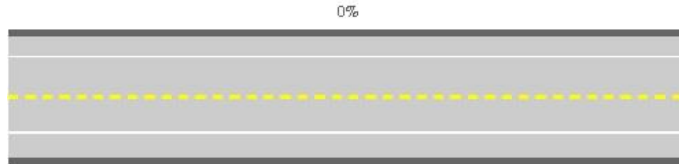
АСТРАХАНЬ — МОСКВА

27 декабря 2022 г.

Renyi's Parking constant 0.7475979203..



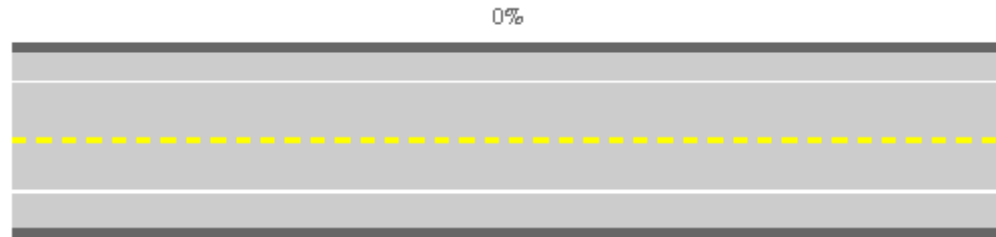
Alfréd Rényi
(1921–1970)



©Wolfram

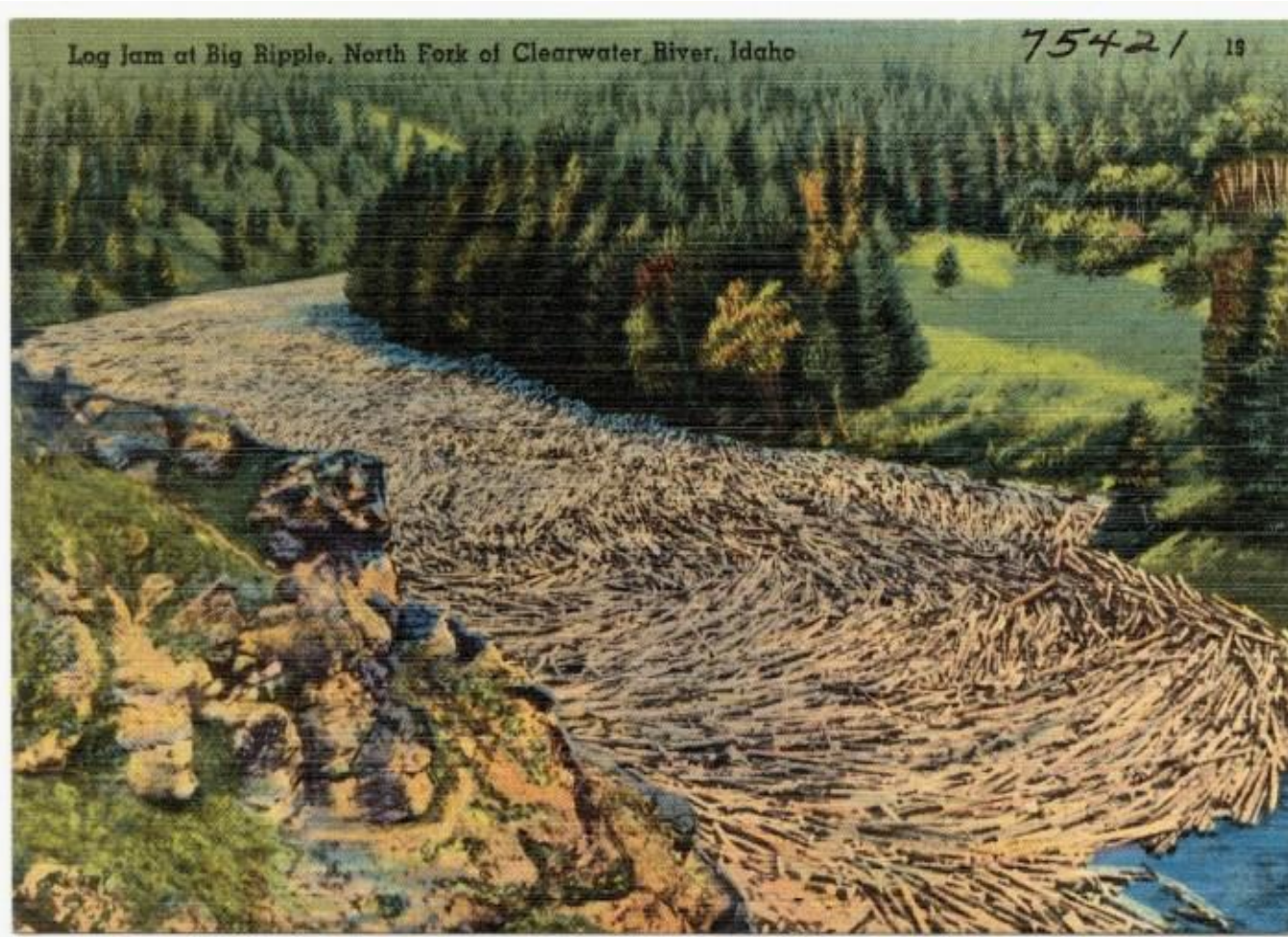
$$\rho = \int_0^{\infty} \exp \left[-2 \int_0^v \frac{1 - e^{-u}}{u} du \right] dv$$

A. Rényi, On a one-dimensional problem concerning random space filling, *Select. Transl. Math. Stat. Probab.* 4, 203 (1963), translation from *Magyar Tud. Akad. Mat. Kutató Int. Közl.* 3, No.1–2, 109–127 (1958).



<https://mathworld.wolfram.com/RenyisParkingConstants.html>

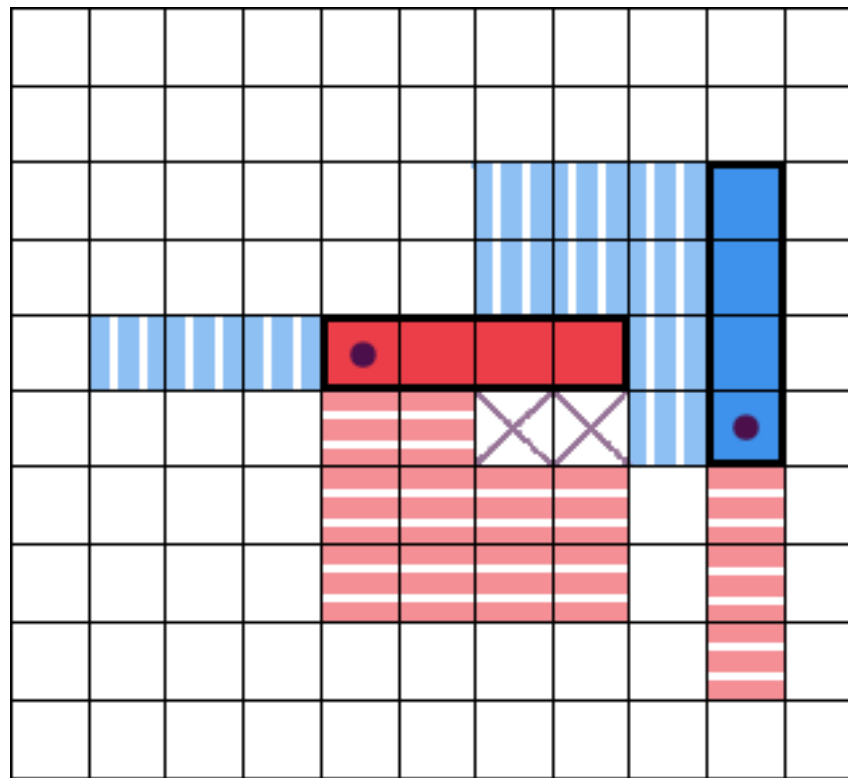
Jamming — затоп



https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Log_jam_at_Big_Ripple,_North_Fork_of_Clearwater_River,_Idaho_%2875421%29.jpg

Осажденные частицы и запрещенные площади

Рассматривается задача RSA линейных ортогонально ориентированных частиц на квадратную решетку, с периодическими граничными условиями (тор). Запрещение перекрытия означает взаимодействие частиц, называемое *взаимодействием исключенного объема*, посредством создаваемых ими запрещенных площадей.



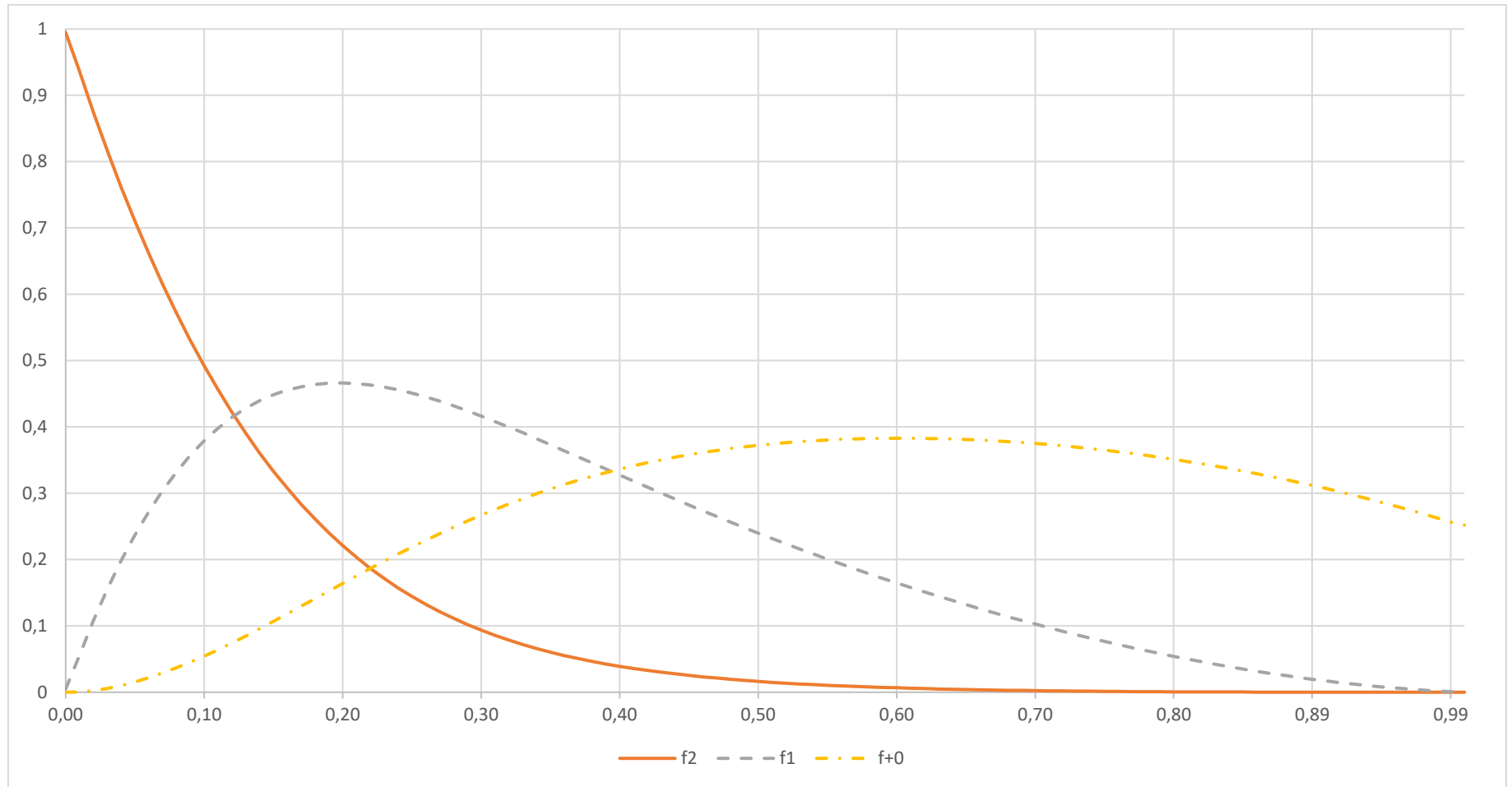
Типы ячеек в процессе кинетики RSA

В процессе кинетики RSA ячейки решётки динамически изменяют свои характеристики. Для их формализации в статье ¹ были введены следующие типы ячеек и соответствующие функции:

1. Ячейки типа «0», это ячейки, занятые самим частицами, и ячейки типа «0+», — ячейки, в которых запрещено располагать начало любой новой частицы. Функция $f_{+0}(x)$ — текущая доля в решетке.
2. Ячейки типа «1h» и «1v» — ячейки, в которых разрешено расположение начала только горизонтально или только вертикально ориентированных частиц. Функция $f_1(x)$, — текущая доля ячеек типа «1» в решетке, которая есть сумма долей ячеек типов «1h» и «1v»;

¹ M. V. Ulyanov, Yu. Yu. Tarasevich, A. V. Eserkepov, I. V. Grigorieva Characterization of domain formation during random sequential adsorption of stiff linear k-mers onto a square lattice // Phys. Rev. E.— 2020.— Oct.— Vol. 102, Iss. 4.— P. 042119 DOI 10.1103/PhysRevE.102.042119

3. Ячейки типа «2» — ячейки, в которых разрешено расположение начала частиц любой ориентации, функция $f_2(x)$, — текущая доля ячеек типа «2» в решетке.



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

Идея метода укорачивающихся списков

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, которые создаются при *достижении управляющим параметром* некоторого порогового значения.

При работе со списками нужно всего два обращения к генератору равномерно распределенных псевдослучайных чисел — одно для выбора ориентации частицы и второе для выбора начальной ячейки. Далее происходит обработка запрещенных площадей в массиве решетки и укорачивание списков «разрешенных» ячеек. Использование списков гарантирует достижение джамминга.

Терминология и обозначения

Обозначим: L — линейный размер исходной квадратной решетки, k — длина частицы, $\rho(k) = \Theta(\infty)$ — концентрация джамминга, т.е. доля покрытия решетки частицами при джамминге, зависящая от длины частицы k ($\rho(8) \approx 0,748$).

В этих обозначениях оценка числа размещенных частиц в момент джамминга N_j есть $N_j(\rho, L, k) = \rho L^2 k^{-1}$. Обозначим также N — текущее число осажденных частиц, и $x = NN_j^{-1}$ долю заполнения решетки частицами, т.е. текущую концентрацию осажденных частиц.

Введем в рассмотрение динамически изменяющийся параметр α , — текущую долю «запрещенных» ячеек в исходной решетке. В процессе осаждения α растёт, и при достижении порогового значения α^* происходит создание вспомогательных списков. мы первоначально получим оптимальный порог по параметру концентрации осажденных частиц, а затем покажем, как получить α^*

Оценка числа обращений к генератору псевдослучайных чисел

При фиксированной концентрации s и уже выбранной случайной ориентации следующей частицы «свободными» для ее начала являются ячейки типа «2» и половина ячеек типа «1».

Тогда вероятность «Успеха» для случайной величины $X(s)$ в испытании по выбору начальной ячейки и матожидание $E(X(s))$ 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, тогда матожидание $Y(x)$ равно:

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

Пусть

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

Значение $y(x)$ есть приведенное на одну частицу число обращений к генератору равномерно распределенных псевдослучайных чисел для ее осаждения при концентрации частиц x .

Зависимость $\ln(y(x))$ хорошо аппроксимируется параболой с $R^2 = 1$ (для $L = 256, k = 8$), тогда $y(x)$ 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 $\mu(x)$ на сегменте $[0,01 \dots 0,70]$ в усреднении по 100 экспериментам даёт следующие значения коэффициентов

$$\mu(x) = 0,75x^2 + 1,8331x + 0,0006.$$

Арифметический подход к обработке запрещенных площадей

Прямые арифметические вычисления оказываются более эффективными по времени выполнения, чем цепочки сравнений. Предлагается следующая кодировка состояний ячеек в решетке:

<i>Тип ячейки</i>	<i>Код состояния ячейки</i>
«0-» и «0+»	0
«1h»	3
«1v»	5
«2»	11

Обозначим:

S_{old} — текущий код состояния, хранящийся в обрабатываемой ячейке,

S_{new} — новый код состояния ячейки.

<i>Текущий тип ячейки</i>	<i>Код s_{old}</i>	<i>Покрытие «1h»</i>	<i>OpH s_{new}</i>
«0-» или «0+»	0	«0-» или «0+»	0
«1h»	3	«1h»	3
«1v»	5	«0+»	0
«2»	11	«1h»	3

Оператор OpH имеет следующую арифметическую формулу:

$$s_{new} = \text{OpH}(s_{old}) = ((s_{old} \bmod_4) \text{div } 3) * 3.$$

<i>Текущий тип ячейки</i>	<i>Код s_{old}</i>	<i>Покрытие «1v»</i>	<i>OpV s_{new}</i>
«0-» или «0+»	0	«0-» или «0+»	0
«1h»	3	«0+»	0
«1v»	5	«1v»	5
«2»	11	«1v»	5

Оператор OpV имеет следующую арифметическую формулу:

$$s_{new} = \text{OpV}(s_{old}) = ((s_{old} \bmod_6) \text{div } 5) * 5.$$

Оценка трудоемкости алгоритма укорачивающихся списков

Пусть c_g — число элементарных операций при обращении к генератору, а c_1 — число элементарных операций на обработку одной ячейки. Запрещенная площадь составляет $k^2 + k - 1$ ячеек. Рассмотрим следующие три этапа:

Этап первоначального осаждения частиц.

При концентрации x будет осаждено xN_j частиц, это дает вклад в трудоемкость в виде: $xN_j (2c_g + c_1(k^2 + k - 1))$. Матожидание $E(Y(x))$ числа попыток осаждения равно $y(x)xN_j$, при этом, поскольку xN_j попыток были успешными, то оставшиеся $y(x)xN_j - xN_j$ попытки есть «промахи», что дает $xN_j(y(x) - 1)(2c_g + c_1)$. Объединяя компоненты, мы получаем трудоемкость первого этапа:

$$g_1(x, k, L, N_j) = xN_j (y(x)(2c_g + c_1) + c_1(k^2 + k - 2)).$$

Этап формирования списков.

На этом этапе для каждой ячейки в исходной решетке выполняется c_1 элементарных операций — это запись индекса для «разрешенной» ячейки во вспомогательный список. Трудоемкость этапа приближенно равна

$$g_2(L) \approx \frac{3}{2} c_1 L^2.$$

Этап осаждения с использованием списков

На этом этапе осталось осадить $N_j(1 - x)$ частиц, и необходимо только два обращения к случайному генератору. Для каждой ячейки выполняется ее обработка как в самой решетке, так и во вспомогательном списке, что даёт $2c_1$ на каждую ячейку.

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

Введем в рассмотрение функцию $g(x)$, содержащую те компоненты, которые зависят от x и $y(x)$:

$$g(x) = y(x)xN_j(2c_g + c_1) - xN_j \left(2c_g + c_1(k^2 + k) \right).$$

Определим $x^* = \arg \min g(x)$, $\frac{d}{dx} g(x) = 0$ с учетом функции $\mu(x)$:

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

Из формулы следует, что нас интересует отношение числа операций c_1 и c_g , а не их явные значения. Обозначим γ_0 отношение $2 \frac{c_g}{c_1}$, тогда:

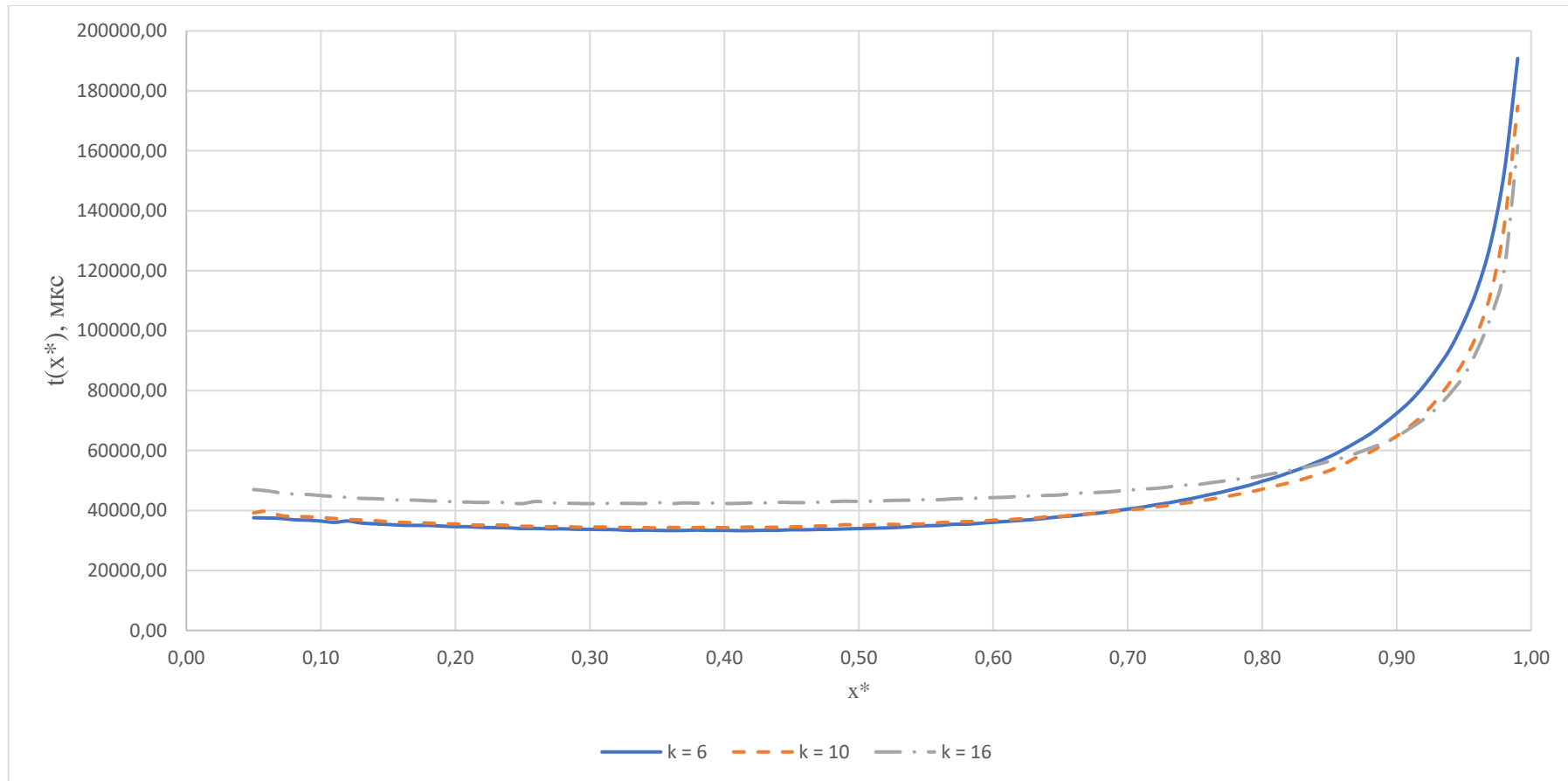
$$r(x) = (2b_2x^2 + b_1x + 1)e^{b_2x^2 + b_1x} - \frac{(\gamma_0 + k^2 + k)}{(\gamma_0 + 1)} = 0.$$

Таким образом, $x^* = \mathbf{arg\ zero\ } r(x)$, т.е. ноль функции $r(x)$.

Решение этого уравнения с $\gamma_0 = 16$ для $L = 256, k = 8$ дает значение $x^* = 0,407$, а при $\gamma_0 = 19$ мы получаем $x^* = 0,378$, что практически совпадает с нашими экспериментальными результатами.

Экспериментальные результаты

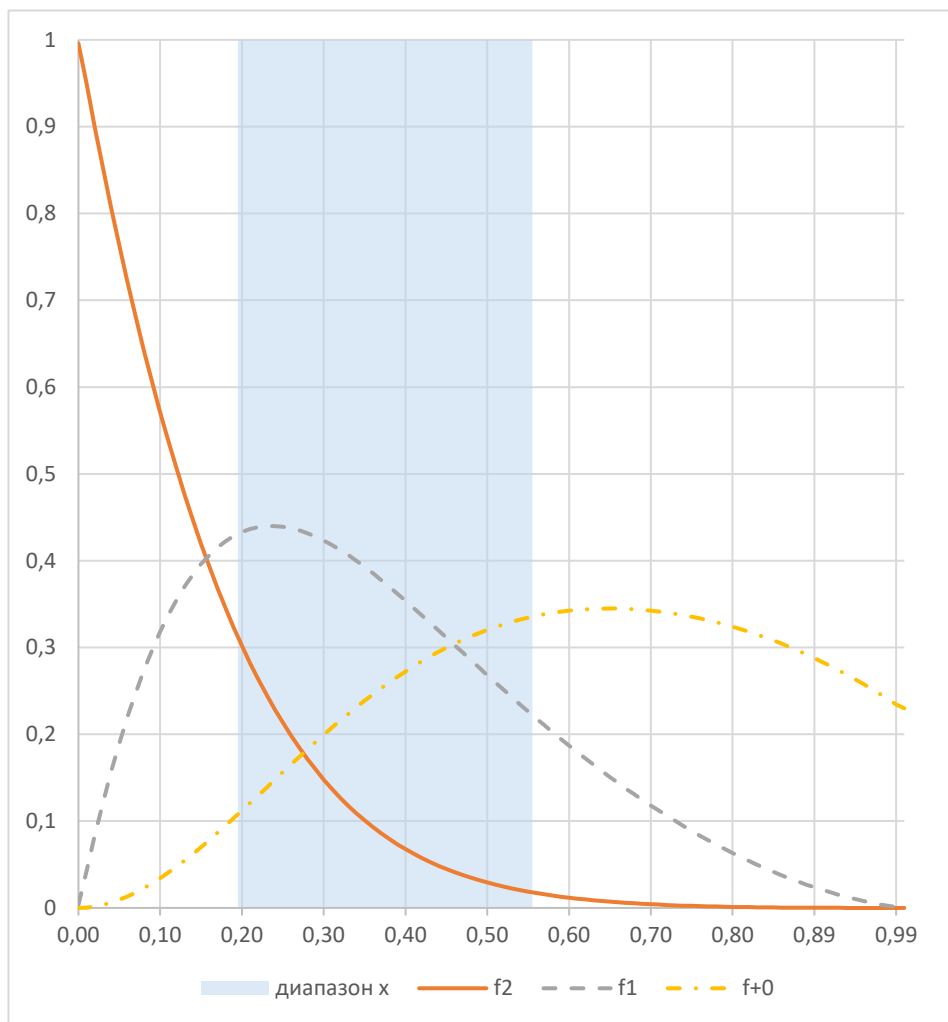
Экспериментальное исследование выполнено С. О. Уразовым (ВМК МГУ), результаты усреднения по 1000 экспериментам для решетки 512 x 512



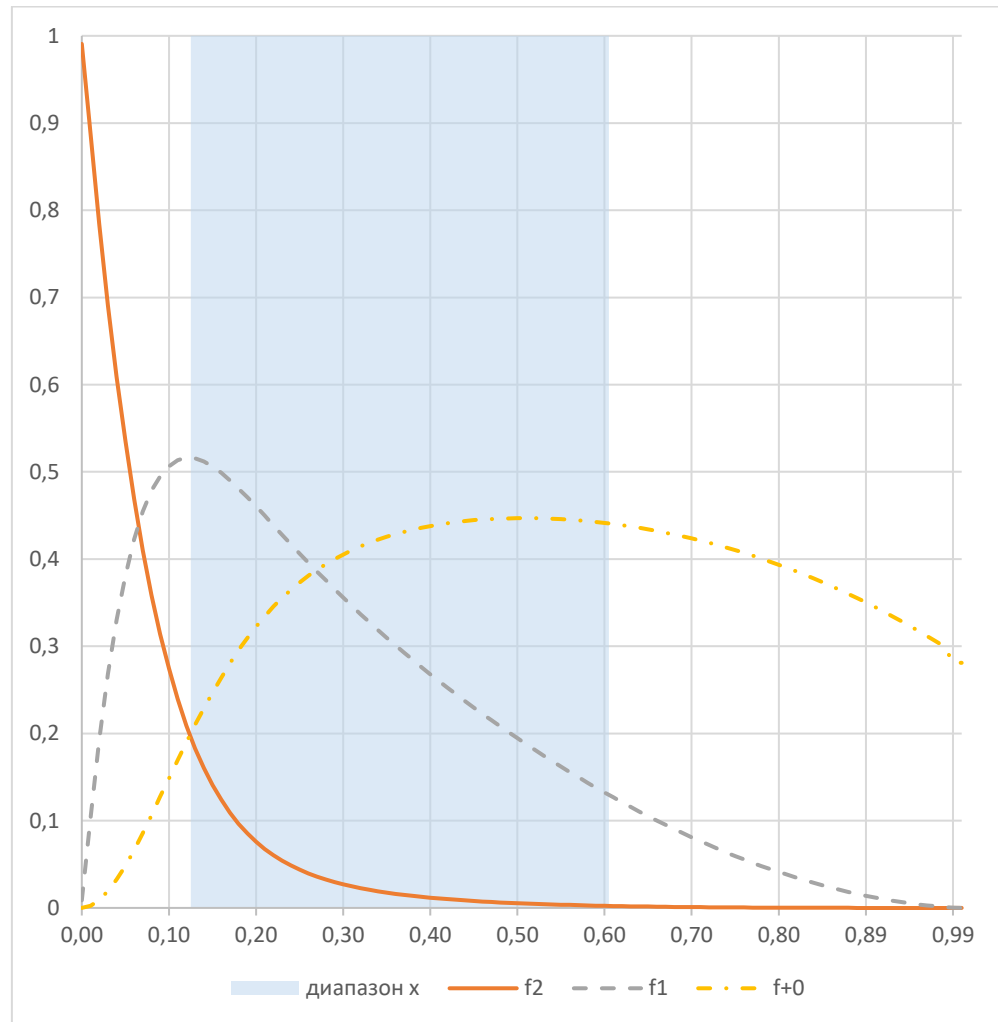
Зависимость времени расчета от порога переключения x^* на вспомогательные списки при осаждении частиц различной длины.

Экспериментально определенные пороги переключения на списки в зависимости от длины частиц

k	x^*	$t(x^*), \text{ мкс}$	Диапазон x с 5% отклонением Δt	$f_{+0}(x) \approx f_1(x)$
6	0.41	33286.87	[0.19, 0.55]	0.46
8	0.37	33091.20	[0.19, 0.54]	0.39
10	0.35	34213.65	[0.17, 0.55]	0.35
12	0.36	36504.10	[0.15, 0.58]	0.31
14	0.34	40072.44	[0.14, 0.59]	0.29
16	0.30	42285.71	[0.12, 0.60]	0.27



a) $k = 6$



b) $k = 16$

Диапазон (в пределах 5% по времени) рекомендуемых значений порога переключения x^* на вспомогательные списки и функции динамики кинетики процесса RSA.

Практическая рекомендация

Рекомендация для программной реализации метода списков:

Переключение на этап формирования 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, т.к. требует только подсчета текущего количества ячеек типа «+0» и количества ячеек типа «1». Для всего исследованного диапазона длин частиц эта точка лежит внутри 5% диапазона отклонений от оптимального времени и имеет тенденцию смещения влево с ростом длины частицы.

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!