

# Реализация случайной последовательной адсорбции (RSA) методом редукции вспомогательных массивов: аналитическое рассмотрение и вычислительный эксперимент

М. В. УЛЬЯНОВ<sup>1,2</sup>, С. О. УРАЗОВ<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup>Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН, 117997, Москва, Россия

<sup>2</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Россия

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

Поступила 5 марта 2022 г., принята в печать 11 марта 2022 г.

Рассмотрена задача разработки теоретически обоснованного метода, обеспечивающего эффективную по времени реализацию случайной последовательной адсорбции (RSA) при осаждении вертикально и горизонтально ориентированных линейных объектов на квадратную двумерную решетку. Предложен метод редукций вспомогательных массивов, дано его аналитическое рассмотрение в аспекте определения оптимального порога редукций и представлены результаты экспериментального исследования его программной реализации. Для различных параметров реализации RSA приведены диапазоны порога редукций, рекомендованные при практическом использовании предложенного метода.

*Ключевые слова:* случайная последовательная адсорбция, метод редукции, временная эффективность.

*Цитирование:* 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.

## Введение

Случайная последовательная адсорбция (Random Sequential Adsorption — RSA) представляет собой процесс, когда объекты случайно и необратимо осаждаются на подложку без перекрытия с ранее адсорбированными объектами [1]. Подложка может быть как непрерывной, так и дискретной. RSA является полезной моделью для многих физических, химических и биологических процессов [1, 2]. Запрет на перекрытие обусловлен взаимодействием исключенного объема, которое предусматривает, что энергия взаимодействия между объектами  $U$  определяется следующим образом:

$$U = \begin{cases} 0 & \text{при } r > d, \\ \infty & \text{при } r \leq d, \end{cases}$$

где  $r$  — расстояние между двумя частицами, а  $d$  — постоянная решетки [3].

В решетке по мере осаждения объектов сначала происходит перколяционный фазовый переход, т. е. возникает кластер, который пронизывает всю систему. Затем система достигает состояния джамминга, когда любое дополнительное осаждение невозможно из-за отсутствия свободного пространства для размещения даже одного объекта. Хотя на подложке и имеется некоторое свободное пространство, конфигурации пустот не имеют подходящих формы и размеров, чтобы принять следующий объект.

Кинетика осаждения изучалась во многих работах, в частности были получены аналитические выражения для кинетики осаждения дисков на поверхность [5, 6] и решетку [7–10]. Известно, что в процессе RSA концентрация покрытия поверхности частицами  $\Theta(t)$  при больших временах изменяется как

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

где  $t$  — физическое время, которое учитывает неудачные попытки размещения;  $\sigma$  — подгоночный параметр;  $\Theta(\infty)$  — концентрация джамминга [11–13].

Широко используемый тип подложки — квадратная решетка, которую удобнее трактовать не как совокупность вершин и ребер, а как набор квадратных ячеек. В этом случае простейшая форма частиц представляет собой линейные полимино (линейные  $k$ -меры), т. е. жесткие линейные молекулы, занимающие  $k$  соседних ячеек решетки. Далее в статье под термином “частица” будем понимать именно линейный  $k$ -мер.

В статье рассматривается RSA горизонтально и вертикально ориентированных частиц на квадратную решетку с периодическими граничными условиями. В этой постановке процедура RSA предусматривает равномерный случайный выбор ориентации частицы и начальной ячейки для ее размещения [4]. Процесс выбора повторяется вплоть до нахождения ячейки, в которой возможно размещение начала частицы выбранной ориентации, или до регистрации состояния джамминга.

Ячейки решетки, доступные для размещения начала частиц, далее будем называть “разрешенными”, причем в кинетике RSA фиксируем как ячейки, разрешенные для частиц обеих ориентаций, так и ячейки, разрешенные для частиц только одной из ориентаций. Осаждение частицы, начиная со случайно выбранной ячейки, возможно, только если эта ячейка оказывается разрешенной для выбранной ориентации. Поскольку осажденная частица создает запрещенную область, имеющую площадь порядка квадрата длины частицы, в кинетике RSA все большее и большее число ячеек решетки становятся недоступными для размещения начала частиц [4]. Полное отсутствие разрешенных ячеек сигнализирует о достижении системой состояния джамминга и приводит к останову кинетики RSA. Из-за экспоненциальной зависимости концентрации покрытия решетки частицами от времени моделирования создание состояния джамминга на компьютере является достаточно трудоемкой задачей.

## 1. Методы эффективной реализации RSA

Требование временной эффективности реализации рассматриваемого частного случая RSA связано с необходимостью получения статистически значимых результатов как при различных размерах решеток, так и для различных длин частиц. При этом для фиксированных размера решетки и длины частицы необходимо в силу стохастического характера RSA провести серию вычислительных экспериментов для получения объема выборки, достаточного для целей исследования.

Прямая реализация алгоритма RSA (прямой метод) в ячейках решетки приводит к значительному росту числа обращений к генератору равномерно распределенных псевдослучайных чисел на последних, вблизи джамминга, шагах RSA, поскольку при этом доля ячеек, разрешенных для размещения начала частиц, чрезвычайно мала [4]. Заметим, что в этой реализации не идентифицируется состояние джамминга, а останов происходит после превышения фиксированного порога неудачных попыток размещения.

Для решения проблемы временных затрат при программной реализации RSA предложены различные технические способы [14], включая составление списков ячеек, доступных для осаждения частиц [1, 15–18]. Один из вариантов технического решения [14], назовем его методом списков разрешенных ячеек, предполагает, что на начальном этапе используется простой равномерный случайный выбор ориентации частиц и ячеек решетки для адсорбции частиц. После достижения определенной (пороговой) концентрации создаются два списка ячеек, доступных для осаждения частиц горизонтальной и вертикальной ориентации. Далее, после случайного выбора типа частицы, новая ячейка для ее размещения выбирается уже из соответствующего списка. При таком методе списки должны обновляться после каждого успешного осаждения частицы. Такой подход как минимум гарантирует достижение состояния джамминга за конечное время. Понятно, что использование списков с самого начала процесса осаждения не увеличивает скорость размещения частиц, а приводит к значительным дополнительным затратам памяти. Тем не менее метод гарантирует, что каждая попытка размещения частицы будет успешной.

Однако формирование и обновление списков требуют значительного количества времени, которое зависит от выбранной пороговой концентрации (доли заполнения решетки частицами). Эта концентрация определяет начальную длину списков разрешенных ячеек. После каждого осаждения длины этих списков сокращаются, и при достижении нулевой длины констатируется достижение джамминга. Кроме того, поскольку запрещенная область от любой частицы воздействует как на список ячеек, доступных для размещения вертикальных частиц, так и на список ячеек, доступных для размещения горизонтальных частиц, необходима коррекция обоих списков после размещения каждой частицы. Метод списков разрешенных ячеек показывает хорошие временные характеристики на экспериментально определенных порогах переключения, однако для него отсутствует теоретическое обоснование пороговой концентрации. Таким образом, остается открытым вопрос, начиная с какой концентрации использование списков становится эффективным.

Возникает задача разработки алгоритма, подкрепленного аналитическим рассмотрением и обеспечивающего приемлемую временную эффективность реализации RSA вертикально и горизонтально ориентированных частиц на квадратную двумерную решетку с периодическими граничными условиями.

## 2. Метод редукции вспомогательных массивов

Для решения задачи повышения временной эффективности будем опираться на известную идею создания списков разрешенных ячеек [1, 15–18], которую будем реализовывать в виде двух вспомогательных массивов. Основная идея авторов статьи состоит в отказе от используемого в методе списков обновления этих массивов после каждого осаждения, что приводит к дополнительным временным затратам. Наша основная

идея — разрешить хранение в этих дополнительных массивах информации не только о разрешенных ячейках, но и ячейках, недоступных для размещения начала частиц, формирующихся в процессе кинетики RSA, с последующей редукцией содержимого этих массивов до списков только разрешенных ячеек на основе некоторого управляющего параметра.

В момент начала процесса RSA все ячейки решетки являются разрешенными и случайный выбор начальной ячейки для осаждения происходит непосредственно в самой решетке. Собственно вспомогательные массивы создаются при первом запуске процедуры редукции и содержат координаты только разрешенных ячеек решетки для горизонтальных и вертикальных частиц соответственно на момент выполнения этой процедуры. Первоначально процедура редукции запускается при достижении порогового значения некоторым управляющим параметром на основе анализа состояния решетки в кинетике RSA. Последующие редукции выполняются при достижении этим параметром порогового значения уже на основе анализа состояния вспомогательных массивах.

В рамках предлагаемого метода возникает задача как выбора параметра, управляющего редукцией, так и обоснования его порогового значения, приводящего к запуску процедуры редукции. Параметр, управляющий процедурой редукции, обоснуем следующими рассуждениями. При осаждении очередная частица сама занимает ячейки решетки и создает вокруг себя запрещенную площадь [4], в которой невозможно разместить начало следующих частиц. Эта площадь имеет порядок квадрата длины частицы. Такие ячейки, недоступные для размещения начала частиц, будем называть “запрещенными”. Отметим, что ячейка может быть запрещенной как для размещения начала частиц обеих ориентаций, так и только для частиц определенной ориентации.

Уже размещенные частицы и созданные ими запрещенные площади и являются источником промахов генератора равномерно распределенных псевдослучайных чисел при попытке выбора начальной ячейки для размещения очередной частицы. Под “промахами” понимается, что полученные с равномерного псевдослучайного генератора тип ориентации частицы и индексы ячейки указывают на ячейку решетки, запрещенную для размещения частицы данной ориентации. С ростом числа размещенных частиц доля запрещенных ячеек, а следовательно, количество промахов растет. На этой основе введем в качестве параметра, динамически изменяющегося в кинетике RSA и управляющего процедурой редукции, параметр  $\alpha$  — долю запрещенных ячеек. На начальном этапе эта доля относится к ячейкам исходной решетки, а после первой редукции мы говорим о доле запрещенных ячеек во вспомогательных массивах.

Задачу об оптимальном в смысле временной эффективности пороге редукции будем решать относительно порогового значения этого параметра —  $\alpha^*$ . При достижении значения  $\alpha^*$  в самой решетке создаются вспомогательные массивы, содержащие индексы только текущих разрешенных ячеек. При достижении значения  $\alpha^*$  во вспомогательном массиве происходит его редукция, состоящая в том, что массив усекается (редуцируется) до индексов только текущих разрешенных ячеек решетки, допускающих размещение начала частиц данной ориентации. Отметим, что в силу случайности выбора ориентации частиц редукция вспомогательных массивов для вертикальных и горизонтальных частиц в общем случае не будет происходить одновременно. Обоснование порогового значения  $\alpha^*$  будет опираться на анализ трудоемкости как собственно процедуры RSA, так и процедуры редукции.

### 3. Упрощенная модель и обозначения

В реальной кинетике RSA рост числа запрещенных ячеек подчиняется достаточно сложной зависимости от текущей концентрации уже осажденных частиц [4]. Рассмотрим решение в упрощенной модели, основанной на идее ренорм-групп [19]. В этом случае вся решетка разбивается на укрупненные разрешенные и запрещенные ячейки, размер которых коррелирован с линейным размером осаждаемой частицы. Полагаем, что число укрупненных ячеек равно числу частиц, осажденных до перехода системы в состояние джамминга — именно столько разрешенных ячеек необходимо выбрать до завершения кинетики RSA. Например, в решетке  $256 \times 256$  с периодическими граничными условиями при длине частицы 8 получаем в среднем (оценка сделана по известной плотности при джамминге [4]) 6128 осажденных частиц и, следовательно, 6128 укрупненных ячеек.

Введем обозначения:  $L$  — линейный размер исходной решетки,  $L_r$  — линейный размер укрупненной решетки,  $k$  — длина частицы,  $\rho = \Theta(\infty)$  — плотность системы при джамминге. Число размещенных частиц есть  $\rho L^2 k^{-1}$ , поэтому  $L_r = L \sqrt{\rho k^{-1}}$  и в укрупненной ячейке содержится порядка  $\rho^{-1} k$  исходных ячеек.

В целях определения порогового значения параметра  $\alpha^*$  рассмотрим дополнительную задачу об определении числа случайных испытаний до заполнения запрещенными укрупненными ячейками определенной доли  $\alpha$  укрупненной решетки. Моделью является массив ячеек, и очевидно, что нас интересует матожидание числа испытаний до заполнения заданной доли ячеек  $\alpha$  в изначально свободном массиве.

### 4. Матожидание числа испытаний до заполнения заданной доли ячеек

*Постановка задачи.* Дан массив из  $N$  пустых ячеек, в которые равномерно случайно бросаются шарики. Вероятность попадания в любую ячейку равна  $1/N$ . Каждая ячейка может содержать ровно один шарик, и если мы попадаем в пустую ячейку, то шарик в ней остается и фиксируется “успех”, а если попадание произошло в уже занятую ячейку, то шарик отскакивает и фиксируется “промах”.

В процессе бросаний ячейки постепенно заполняются шариками, и для попадания в некоторую из оставшихся свободных ячеек необходимо сделать все большее и большее число испытаний до наступления “успеха”. Всего необходимо заполнить  $M = \alpha N$  ячеек. Пусть случайная величина  $Z(\alpha, N)$  есть число испытаний относительно изначально свободного массива из  $N$  ячеек до регистрации  $\alpha N$  занятых ячеек. Необходимо определить  $E(Z(\alpha, N))$ .

*Решение.* Рассмотрим ситуацию, когда в исходных  $N$  ячейках осталось ровно  $m$  свободных. Тогда вероятность  $p_m$  “успеха” есть  $m/N$ . Введем в рассмотрение случайную величину  $Y_m$ , значение которой есть число испытаний до первого “успеха”. Случайная величина  $Y_m$  имеет геометрическое распределение, для которого известно, что

$$E(Y_m) = \frac{1}{p_m} = \frac{N}{m}.$$

Заметим, что при заданном значении  $\alpha$  процесс завершится, когда значение  $m$  станет равно

$$m^* = N - M = N - \alpha N = N(1 - \alpha).$$

Пусть случайные величины  $Y_i$  есть число испытаний до первого “успеха” при условии, что в системе имеется ровно  $i$  свободных ячеек, тогда поскольку вероятность “успеха” равна  $p_i = i/N$ ,

$$E(Y_i) = \frac{1}{p_i} = \frac{N}{i}.$$

В начале процесса, когда все ящики пусты,  $i = N$ , после первого бросания  $i = N - 1$ , после попадания в следующий пустой ящик  $i = N - 2$  и т.д. “Успех” при  $i = m^* - 1$  означает, что в массиве осталось  $m^*$  свободных и  $\alpha N$  занятых ячеек. Тогда по известной теореме о математическом ожидании суммы случайных величин

$$E(Z(\alpha, N)) = E(Y_N) + E(Y_{N-1}) + \dots + E(Y_{m^*-1}) = \sum_{i=m^*-1}^N E(Y_i),$$

$$E(Z(\alpha, N)) = \frac{N}{N} + \frac{N}{N-1} + \frac{N}{N-2} + \dots + \frac{N}{m^*-1},$$

и, поскольку  $m^* = N - M$ ,

$$E(Z(\alpha, N)) = N \left( \frac{1}{N} + \frac{1}{N-1} + \frac{1}{N-2} + \dots + \frac{1}{N-M-1} \right).$$

Оценка суммы гармонического ряда дается формулой Эйлера

$$H_n = \sum_{j=1}^n \frac{1}{j} \approx \ln n + \gamma, \quad \gamma \approx 0.57,$$

тогда выражение в скобках равно  $H_N - H_{N-M}$ . По формуле Эйлера окончательно получаем

$$E(Z(\alpha, N)) \approx N(\ln N - \ln N - M),$$

но, поскольку  $N - M = N(1 - \alpha)$ ,

$$E(Z(\alpha, N)) = N(\ln N - \ln N - \ln 1 - \alpha) = N \ln \frac{1}{1 - \alpha}.$$

Т а б л и ц а 1. Теоретические значения  $E(Z(\beta, N))$  и экспериментальные результаты при  $N = 1000$

Table 1. Theoretical values for  $E(Z(\beta, N))$  and experimental results at  $N = 1000$

$M$	$N - M$	$\alpha$	$1 - \alpha$	$\beta$	$E(Z(\beta, 1000))$	Выборочное среднее
800	200	0.80	0.20	5.00	1609.438	1606.95
850	150	0.85	0.15	6.67	1897.120	1894.92
900	100	0.90	0.10	10.00	2302.585	2297.96
910	90	0.91	0.09	11.11	2407.946	2405.09
920	80	0.92	0.08	12.50	2525.729	2517.87
930	70	0.93	0.07	14.27	2659.260	2653.51
940	60	0.94	0.06	16.67	2813.411	2803.37
950	50	0.95	0.05	20.00	2995.732	2986.94
960	40	0.96	0.04	25.00	3218.876	3207.14
970	30	0.97	0.03	33.33	3506.558	3492.83

Заметим, что значение  $(1 - \alpha)$  есть доля свободных ячеек в массиве. Обозначим  $\beta = \frac{1}{1 - \alpha}$ , содержательно  $\beta$  — отношение общего числа ячеек к числу свободных, при этом  $\alpha = \frac{\beta - 1}{\beta}$ , тогда окончательно для случайной величины  $Z(\beta, N)$  получаем

$$E(Z(\beta, N)) = N \ln \beta.$$

В табл. 1 приведены некоторые результаты экспериментального исследования по определению выборочного среднего для случайной величины  $Z(\beta, N)$  при  $N = 1000$  с усреднением по 10 000 экспериментов. Согласование с теоретическим значением вполне удовлетворительное, и ошибка не превышает 0.4%. Источник наблюдаемой систематической ошибки связан с тем, что ошибка оценки  $H_n$  по формуле Эйлера зависит от значения  $n$  и стремится к нулю только при  $n \rightarrow \infty$ .

## 5. Оценка трудоемкости алгоритма редукции

Для определения оптимального порога переключения на процедуру редукции вспомогательных массивов оценим трудоемкость собственно процедуры RSA и процедуры редукции. Для оценки трудоемкости считаем, что алгоритм задает  $c_g$  элементарных операций при обращении к равномерному генератору псевдослучайных чисел и  $c_1$  элементарных операций на обработку одной ячейки в исходной решетке. Дальнейшие рассуждения о пороге редукции будем проводить относительно заданного значения параметра  $\beta$ .

Для оценки трудоемкости выделим в алгоритме два этапа, которые повторяются до исчерпывания разрешенных ячеек в решетке, т. е. до достижения джамминга:

- этап осаждения частиц, включающий выбор ориентации частицы, получение координат доступной ячейки для осаждения, собственно осаждение и обработку запрещенной площади;
- этап редукции и создание обновленных вспомогательных массивов.

*Оценка трудоемкости этапа осаждения частиц.* В начале кинетики RSA размер массива в упрощенной модели с укрупненными ячейками составляет  $N = L_r^2$ , где  $L_r$  — линейный размер укрупненной решетки. Реализация RSA требует двух обращений к генератору на один шаг — выбор ориентации частицы и выбор начальной ячейки (в линейно развернутом двумерном массиве), тогда до первой редукции в среднем произойдет  $2E(Z(\beta, N)) \approx 2N \ln \beta$  обращений к генератору, после первой редукции число разрешенных ячеек сократится в  $\beta$  раз —  $N_1 = N/\beta$ , после второй  $N_2 = N/\beta^2$  и т. д., сумма получаемой геометрической прогрессии равна  $2 \frac{\beta}{\beta - 1} N \ln \beta$ . При условии  $\beta \gg 1$  суммарное число обращений к генератору может быть оценено как

$$2N \ln \beta \approx 2L_r^2 \ln \beta. \quad (1)$$

Этап осаждения разбивается на успешные размещения частиц и промахи генератора, когда мы попадаем на запрещенную ячейку.

*Трудоемкость успешных размещений.* Всего за время работы алгоритма (использован подход амортизационного анализа [20]) будет размещено  $L_r^2$  частиц и сделано  $L_r^2$  успешных обращений к генератору с попаданием в свободную ячейку. Для размещения самой частицы и обработки порождаемой ей запрещенной площади требуется

$c_1(k^2 + k - 1)$  элементарных операций с ячейками исходной решетки [4], что с учетом (1) в сумме дает

$$2c_g L_r^2 + c_1 L_r^2 (k^2 + k - 1). \quad (2)$$

*Трудоёмкость промахов.* Остальные  $2(L_r^2 \ln \beta - L_r^2)$  обращений к генератору есть обращения к запрещенным ячейкам, т.е. собственно промахи генератора для определения ориентации и индекса ячейки с трудоёмкостью  $c_g$  на каждый вызов. При этом каждый раз затрачивается  $c_1$  операций на определение того, что ячейка запрещена, итого получаем

$$2c_g(L_r^2 \ln \beta - L_r^2) + c_1(L_r^2 \ln \beta - L_r^2). \quad (3)$$

Таким образом, суммарная оценка трудоёмкости этапа осаждения с учетом (2) и (3) имеет вид

$$\begin{aligned} 2c_g L_r^2 + c_1 L_r^2 (k^2 + k - 1) + 2c_g(L_r^2 \ln \beta - L_r^2) + c_1(L_r^2 \ln \beta - L_r^2) = \\ = c_1 L_r^2 (k^2 + k - 2) + (c_1 + 2c_g)(L_r^2 \ln \beta). \end{aligned} \quad (4)$$

*Оценка трудоёмкости этапа редукции.* При первой редукции для каждой простой ячейки в исходной решетке выполняется порядка  $c_1$  элементарных операций, этот же порядок  $c_1$  относится и к последующим редукциям — это проверка состояния запрещена/разрешена и запись во вспомогательный массив индексов ячейки, если она является разрешенной для частиц данной ориентации. Рассматриваем простую реализацию, при которой редукция выполняется сразу для двух вспомогательных массивов.

Оценим число редукций  $r$  при заданном значении  $\beta$ . Алгоритм останавливается при джамминге, т.е. в состоянии отсутствия свободных ячеек, и после каждой редукции размер вспомогательного массива сокращается в  $\beta$  раз:

$$\frac{L_r^2}{\beta^r} = 1, \quad \ln L_r^2 = r \ln \beta, \quad r = \frac{\ln L_r^2}{\ln \beta}.$$

Поскольку укрупненная ячейка содержит порядка  $\rho^{-1}k$  простых ячеек, общие затраты на редукцию составят

$$c_1 \rho^{-1} k L_r^2 \frac{2 \ln L_r}{c \ln \beta}. \quad (5)$$

Объединяя полученные результаты (4) и (5), получаем, что общая суммарная трудоёмкость алгоритма RSA с редукцией вспомогательных массивов  $f(L_r, k, \rho, \beta)$  зависит от размера укрупненной решетки  $L_r$ , длины частицы  $k$ , концентрации джамминга  $\rho$  и управляющего параметра  $\beta$ :

$$f(L_r, k, \rho, \beta) = c_1 L_r^2 (k^2 + k - 2) + (c_1 + 2c_g)(L_r^2 \ln \beta) + c_1 \rho^{-1} k L_r^2 \frac{2 \ln L_r}{\ln \beta}. \quad (6)$$

## 6. Оптимальное значение управляющего параметра редукции

Пусть в кинетике RSA текущее значение доли запрещенных ячеек равно  $\alpha$ , при этом  $\beta = \frac{1}{1 - \alpha}$ , и требуется определить такое пороговое значение этого параметра, при котором оценка суммарной трудоёмкости алгоритма RSA методом редукций будет минимальной. Соображения о существовании такого порога следующие: в ситуации  $\alpha = 0$



и  $\beta = 1$  необходимо после размещения каждой частицы проводить редукцию, что приводит к минимизации числа обращений к генератору псевдослучайных чисел на этапе осаждения. Это описанный выше метод списков свободных ячеек, который применяется на каждом шаге осаждения в кинетике RSA. Число обращений к генератору равно удвоенному числу размещенных до джамминга частиц — одно обращение на выбор ориентации, второе на выбор индекса ячейки, но при этом число редукций равно числу размещенных частиц. Очевидно, что сама по себе процедура редукции вычислительно затратна, а ее многократное применение неприемлемо. Другой крайний случай при  $\alpha = 1$  приводит к полному отказу от редукций и прямой реализации RSA, но на последних шагах, вблизи джамминга, при выборе очередной ячейки, доступной для размещения частицы, наблюдается значительное число промахов, соизмеримое с числом ячеек в решетке.

Введем в рассмотрение функцию  $g(\beta)$ , содержащую те компоненты оценки суммарной трудоемкости алгоритма (6), которые зависят только от параметра  $\beta$ :

$$g(\beta) = (c_1 + 2c_g)(L_r^2 \ln \beta) + c_1 \rho^{-1} k L_r^2 \frac{2 \ln L_r}{\ln \beta}.$$

Определим  $\beta^* = \arg \min g(\beta)$ , приравняв нулю производную:

$$\frac{d}{d\beta} g(\beta) = (c_1 + 2c_g) L_r^2 \frac{1}{\beta} - c_1 \rho^{-1} k L_r^2 \frac{2 \ln L_r}{\ln^2 \beta} \frac{1}{\beta} = 0,$$

что после сокращения на не равное нулю  $L_r^2 \frac{1}{\beta}$  приводит к равенству

$$\begin{aligned} c_1 + 2c_g &= c_1 \rho^{-1} k \frac{2 \ln L_r}{\ln^2 \beta}, \\ 1 &= \frac{c_1 \rho^{-1} k}{c_1 + 2c_g} \frac{2 \ln L_r}{\ln^2 \beta}, \\ \ln \beta &= \sqrt{\frac{c_1 \rho^{-1} k}{c_1 + 2c_g} 2 \ln L_r}, \end{aligned}$$

из которого следует, что

$$\beta^* = \exp \left( \sqrt{\frac{2c_1}{c_1 + 2c_g} \frac{k \ln L_r}{\rho}} \right).$$

Обозначив

$$\gamma_c = \frac{2c_1}{c_1 + 2c_g}, \quad \gamma = \gamma_c \rho^{-1} k,$$

окончательно получаем

$$\beta^* = e^{\sqrt{\gamma \ln L_r}}. \quad (7)$$

Поскольку в качестве управляющего параметра изначально введена доля запрещенных ячеек в решетке или в текущем вспомогательном массиве  $\alpha$ , пороговое значение  $\alpha^*$  имеет вид

$$\alpha^* = \frac{\beta^* - 1}{\beta^*}.$$

## 7. Оценка оптимального порога переключения на процедуру редукции

Из формулы (7) для  $\beta^*$  следует, что нас интересует именно отношение числа операций  $\gamma_c$ , а не их явные значения. Обозначим это отношение  $\gamma_0 = c_g/c_1$ , тогда  $\gamma_c = \frac{2}{1 + 2\gamma_0}$ . В первом приближении можно считать, что число операций  $c_g$  в современном генераторе псевдослучайных чисел (например, в генераторе, основанном на вихре Мерсенна [21]) на одно обращение с учетом трудоемкости вызова и возврата из самой функции в несколько раз превышает число операций  $c_1$  на обработку одной простой ячейки. Оценочно, с учетом высказанных предположений, полагая, например, что  $\gamma_0 \in [3, \dots, 6]$ , получаем диапазон варьирования  $\gamma_c \in [0.154, \dots, 0.286]$ .

Приведем пример оценки порога переключения на редукцию для решетки с  $L = 256$  и  $k = 8$ , плотность джамминга  $\rho = 0.748$ , что дает  $L_r^2 = 6128$ , при этом  $\rho^{-1}k = 10.695$  и в диапазоне варьирования  $\gamma_c$  от 0.154 до 0.286 получаем диапазон значений  $\gamma$  от 1.65 до 3.06. Значения параметра  $\beta^*$ , вычисленные по формуле (7), изменяются от 15 до 38, что приводит к двум или трем редукциям, значения  $\alpha^*$  изменяются от 0.93 до 0.97. Другие значения  $\beta^*$  для различных  $\gamma$  и ожидаемое число редукций (округленное до целого) приведены в табл. 2.

На рис. 1 показана зависимость компонента  $g$  трудоемкости алгоритма от параметра  $\beta$ . Значение отношения  $\gamma_0$  принято равным 4.5 при  $\gamma = 2.139$ . Для удобства восприятия по оси ординат приведено нормированное значение  $g_{norm}(\beta)$ :

Т а б л и ц а 2. Теоретические значения для  $\gamma$ ,  $\beta^*$ ,  $r$  и  $\alpha^*$  при  $L_r^2 = 6128$ ,  $k = 8$  для  $\gamma_0 \in [3, \dots, 6]$   
 Table 2. Theoretical values for  $\gamma$ ,  $\beta^*$ ,  $r$  and  $\alpha^*$  at  $L_r^2 = 6128$ ,  $k = 8$  for  $\gamma_0 \in [3, \dots, 6]$

$\gamma_0$	$\gamma$	$\beta^*$	$r$	$\alpha^*$
3.00	3.056	38	2	0.97
3.50	2.674	30	3	0.97
4.00	2.377	25	3	0.967
4.50	2.139	21	2	0.95
5.00	1.945	18	3	0.95
5.50	1.783	16	3	0.94
6.00	1.645	15	4	0.93

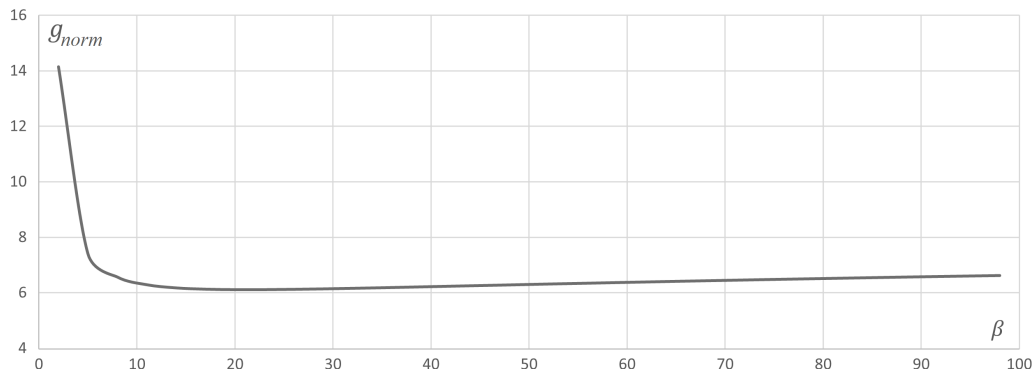


Рис. 1. График зависимости нормированного значения  $g_{norm}$  от  $\beta$  при  $L_r^2 = 6128$ ,  $\gamma = 2.139$ ,  $\beta^* = 21.20$

Fig. 1. Normalized value  $g_{norm}(\beta)$  as a function of  $\beta$  with  $L_r^2 = 6128$ ,  $\gamma = 2.139$ ,  $\beta^* = 21.20$

$$g_{norm}(\beta) = \frac{1}{L_r^2(c_1 + 2c_g)}g(\beta) = \ln \beta + \gamma \frac{\ln L_r}{\ln \beta}.$$

Функция  $g_{norm}(\beta)$  имеет довольно пологий характер около точки минимума  $\beta^* = 21.20$ , в связи с чем для значения параметра редукции  $\beta^*$  может быть рекомендован широкий диапазон, обеспечивающий хорошие временные характеристики программной реализации. Например, фиксируя относительную погрешность в 0.5%, получаем диапазон  $\beta^*$  от 17 до 29.

## 8. Результаты экспериментов и обсуждение

Экспериментальное исследование выполнено на компьютере HP ProBook x360 11 G5 EE, язык программной реализации C++, компилятор g++ (GCC) 10.2.0. На рис. 2 показана реальная зависимость времени выполнения предложенного алгоритма (с усреднением по ста запускам) от значения параметра  $\beta$ , который в эксперименте изменялся от 5 до 100 с шагом один. Осаждение частиц длины  $k = 8$  проводилось на решетку со стороной  $L = 256$ . Оптимальное значение параметра редукции  $\beta^*$ , минимизирующее время, слабо изменялось во всех ста экспериментах и его выборочное округленное среднее оказалось равно 24.0.

Полученные результаты показывают, что теоретические расчеты удовлетворительно оценивают экспериментально полученное оптимальное значение параметра  $\beta^*$ . С учетом пологий ямы минимума (рис. 2) полученная теоретическая оценка порога 21, 20 доставляет попадание в 2%-ный интервал времени регистрации джамминга в кинетике RSA относительно оптимального порога редукции, полученного в экспериментальном исследовании.

При теоретических расчетах значение отношения  $\gamma_0$  ориентировочно принято равным 4.5. Очевидный интерес представляет задача идентификации значения  $\gamma_0$  по экспериментальным данным. Обращая формулу  $\beta^* = e^{\sqrt{\gamma \ln L_r}}$ , получим

$$(\ln \beta^*)^2 = \gamma \ln L_r,$$

откуда

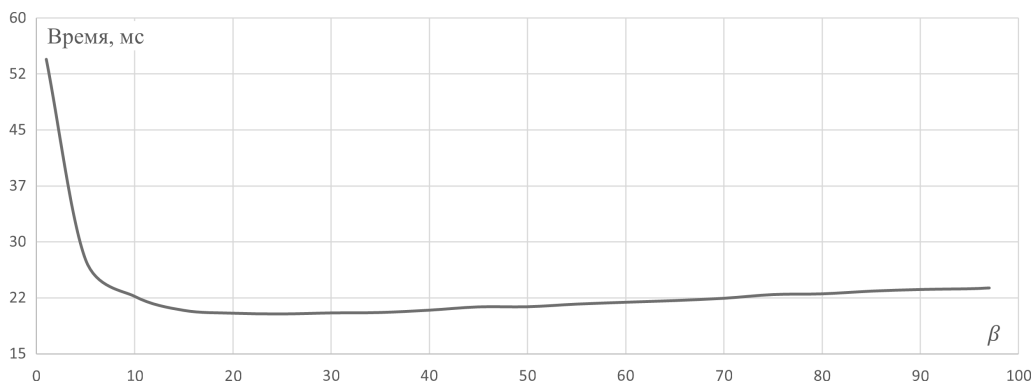


Рис. 2. График зависимости времени программной реализации от  $\beta$  при  $L = 256$  и  $k = 8$   
 Fig. 2. Program realization time as a function of  $\beta$  when  $L = 256$  and  $k = 8$

$$\gamma = \frac{(\ln \beta^*)^2}{\ln L_r} = \gamma_c \rho^{-1} k,$$

$$\gamma_c = \frac{\rho (\ln \beta^*)^2}{k \ln L_r} = \frac{2}{1 + 2\gamma_0},$$

окончательно запишем

$$\gamma_0 = \frac{k \ln L_r}{\rho (\ln \beta^*)^2} - \frac{1}{2}.$$

Для получения рациональных рекомендаций по выбору  $\beta^*$  выполнена серия экспериментов по осаждению частиц длины 6, 8 и 12 на решетки с линейным размером 256, 512 и 1024. Для фиксированных длины частицы и размера решетки проведено 3000 запусков программы. Полученные усредненные значения оптимального параметра  $\beta^*$  позволили выяснить влияние длины частицы и размера решетки на значение  $\gamma_0$ . Оказалось, что эта зависимость линейная, причем зависимость от  $L$  при фиксированном  $k$  существенно более слабая. Относительно округленных средних значений  $\gamma_0$  при фиксированном  $k$  зависимость хорошо аппроксимируется следующей простой линейной функцией:

$$\gamma_0(k) = 0.375k + 1.5.$$

Отметим, что в теории значение  $\gamma_0$  не должно зависеть от размера решетки и длины частицы. Одно из возможных объяснений наблюдаемой в эксперименте зависимости  $\gamma_0(k, L)$  состоит в том, что эта зависимость связана с ошибками, вносимыми используемой упрощенной моделью ренорм-групп.

Аппроксимация  $\gamma_0(k)$  дает  $\gamma_0(6) = 3.75$ ,  $\gamma_0(8) = 4.5$ ,  $\gamma_0(12) = 6.0$ . Удивительно, что  $\gamma_0(8) = 4.5$  совпадает с ориентировочными оценками. Именно по этим значениям и были далее по формуле (7) вычислены теоретические значения  $\beta^*$ . Кроме того, в эксперименте получены значения диапазонов для  $\beta^*$ , в которых наблюдаемое среднее время отклоняется от минимума не более чем на 1%. Результаты приведены в табл. 3.

Анализ полученных результатов позволяет говорить о том, что предложенный метод позволяет достаточно просто находить близкое к оптимальному значение параметра управления редукцией  $\beta^*$ . Пологий характер поведения функции  $g(\beta)$  в области минимума гарантирует, что значения параметра редукции, полученные в теории, хотя и отличаются от экспериментального оптимума, но практически все (за исключением

Т а б л и ц а 3. Экспериментальные результаты зависимости  $\gamma_0(k, L)$  и диапазоны для  $\beta^*$   
Table 3. Experimental values of  $\gamma_0(k, L)$  and range for  $\beta^*$

$L$	$k$	$\rho$	$\gamma_{0\text{эксп}}$	$\gamma_0(k)$	Значение $\beta^*$		
					по формуле (7)	диапазон	экспериментальное
256	6	0.77	3.56	3.75	17.78	[18, ..., 22]	19
512	6	0.77	3.88	3.75	22.00	[20, ..., 30]	21
1024	6	0.77	3.74	3.75	26.85	[23, ..., 30]	29
256	8	0.748	4.12	4.50	21.20	[23, ..., 30]	24
512	8	0.748	4.37	4.50	26.78	[24, ..., 36]	29
1024	8	0.748	4.81	4.50	33.32	[26, ..., 36]	30
256	12	0.7175	5.73	6.00	26.11	[22, ..., 35]	30
512	12	0.7175	6.11	6.00	33.96	[27, ..., 42]	31
1024	12	0.7175	6.20	6.00	43.37	[28, ..., 51]	40

Т а б л и ц а 4. Зависимость среднего экспериментального значения  $\beta^*$  от  $k$   
 Table 4. Values of average experimental  $\beta^*$  as a function of  $k$

$k$	$\beta_{\text{эксп. ср}}^*$
6	23.670
8	29.170
12	34.170

$L = 256$ ,  $k = 6$  и  $8$ ) лежат в интервале значений  $\beta$ , обеспечивающем отклонение не более чем в 1 % от оптимального времени работы программной реализации (отметим, что все значения попадают в интервал с 2 %-ным отклонением) и могут быть рекомендованы для практического использования.

Другой подход к построению рекомендаций состоит в непосредственной аппроксимации экспериментальных результатов. Средние значения диапазонов  $\beta^*$ , обеспечивающие отклонение не более чем в 1 % от оптимального времени, усреднены по размеру решетки  $L$  при фиксированной длине частицы  $k$ , результаты приведены в табл. 4. Для этих данных также получаем хорошее приближение линейной зависимостью

$$\beta_{\text{эксп. ср}}^*(k) = 1.68k + 14.46.$$

Прогноз по данной формуле для  $k = 16$  дает значение  $\beta^* = 41.34$ . Если воспользоваться полученной аппроксимацией экспериментальных данных для  $\gamma_0(k)$  и вычислить по полученному значению  $\gamma_0(16) = 7.5$  рекомендуемое значение  $\beta^*$ , получим 38.86. Рассматривая округленные до целого прогнозы для  $\beta^*$ , т. е. значения 41 и 39, получаем ошибку, не превышающую 5 %. Таким образом, оба предложенных способа прогнозирования работоспособны, особенно с учетом пологого минимума функции зависимости времени от параметра, управляющего редукцией.

Развитие исследований алгоритмов реализации кинетики RSA авторы видят в сравнительном экспериментальном анализе предложенного метода редукции вспомогательных массивов и метода списков разрешенных ячеек с возможным аналитическим исследованием метода списков.

**Благодарности.** Авторы выражают искреннюю благодарность и признательность заведующему лабораторией математического моделирования и информационных технологий в науке и образовании Астраханского государственного университета д.ф.-м.н., проф. Юрию Юрьевичу Тарасевичу за очень полезное, особенно в части терминологии, обсуждение статьи, рекомендации по ее улучшению 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.** Modelling 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] **Ulyanov M.V., Smetanin Yu.G., Shulga M.M., Eserkepov A.V., Tarasevich Yu.Yu.** Characterisation of diffusion-driven self-organisation of rodlike particles by means of entropy of generalised two-dimensional words. *Journal of Physics: Conference Series*. 2018; (1141):012137. DOI:10.1088/1742-6596/1141/1/012137. Available at: [https://www.researchgate.net/publication/329838597\\_Characterisation\\_of\\_diffusion-driven\\_self-organisation\\_of\\_rodlike\\_particles\\_by\\_means\\_of\\_entropy\\_of\\_generalised\\_two-dimensional\\_words](https://www.researchgate.net/publication/329838597_Characterisation_of_diffusion-driven_self-organisation_of_rodlike_particles_by_means_of_entropy_of_generalised_two-dimensional_words).
- [4] **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>.
- [5] **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>.
- [6] **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>.
- [7] **Hoffman D.K.** 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.
- [8] **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.
- [9] **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.
- [10] **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.
- [11] **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.
- [12] **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.
- [13] **Budinski-Petković L., Vrhovac S.B., Lončarević 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.
- [14] **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.
- [15] **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>.
- [16] **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.

- [17] **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.
- [18] **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.
- [19] **Гулд Х., Тобочник Я.** Компьютерное моделирование в физике: В 2-х частях. Часть 2: Пер. с англ. М.: Мир; 1990: 400.
- [20] **Кормен Т., Лейзерсон Ч., Риверст Р.** Алгоритмы: построение и анализ. М.: МЦНМО; 1999: 960.
- [21] **Слеповичев И.И.** Генераторы псевдослучайных чисел: учебное пособие. Саратов: СГУ; 2017: 118.

---

Вычислительные технологии, 2022, том 27, № 2, с. 74–90. © ФИЦ ИВТ, 2022  
Computational Technologies, 2022, vol. 27, no. 2, pp. 74–90. © FRC ICT, 2022

ISSN 1560-7534  
eISSN 2313-691X

---

COMPUTATIONAL TECHNOLOGIES

---

DOI:10.25743/ICT.2022.27.2.007

**Implementation of Random Sequential Adsorption (RSA) by auxiliary array reduction method: analytical consideration and computational experiment**

ULYANOV MIKHAIL V.<sup>1,2</sup>, URAZOV STANISLAV O.<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup>V.A. Trapeznikov Institute of Control Sciences of Russian Academy of Sciences, 117997, Moscow, Russia

<sup>2</sup>Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics Lomonosov Moscow State University, 119991, Moscow, Russia

\*Corresponding author: Urazov Stanislav O., e-mail: [urazov.msu@gmail.com](mailto:urazov.msu@gmail.com)

*Received March 5, 2022, accepted March 11, 2022.*

**Abstract**

The article addresses a method that provides a time-efficient implementation of the kinetics of random sequential adsorption (RSA). RSA model is relevant to many physical, chemical, and biological processes. In this regard, a wide range of researchers is interested in obtaining a large amount of data with statistically significant samples to enhance the studies of RSA kinetics using computer simulation. The underlying problem that arises here helps reducing the time spent on computer simulation.

RSA itself is a stochastic process where objects are randomly and irreversibly deposited on a substrate without overlapping with previously adsorbed objects. Computer simulation of RSA is difficult due to the random choice of the position from which the next object is allowed to fall. Random enumeration of positions, up to finding the allowed one, leads to an exponential dependence of the concentration of the substrate coverage by objects on the simulation time. The previously proposed methods for the implementation of RSA do not have a full theoretical justification. For example, in the method of free cell positions lists, it is not clear which value of concentration becomes effective when using the lists.

This paper considers the problem of developing a theoretically substantiated method that provides time-efficient implementation of RSA in the case of deposition of vertically and horizontally oriented particles on a square two-dimensional lattice with periodic boundary conditions.

The article presents the method of reduction of auxiliary arrays proposed by the authors, which provides a time-efficient implementation of RSA. The presented analytical study determines the

optimal reduction threshold and the results of an experimental examination of software implementation are presented. The obtained experimental data have shown that the theoretical predictions for the optimal reduction threshold fall within the interval providing no more than 2 % deviation from the optimal time, which provides recommendations for the practical application of the method.

*Keywords:* random sequential adsorption, reduction method, time efficiency.

*Citation:* 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.)

**Acknowledgements.** The authors express their sincere gratitude and appreciation to the Head of the Laboratory of Mathematical Modeling 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.** Modelling 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. **Ulyanov M.V., Smetanin Yu.G., Shulga M.M., Eserkepov A.V., Tarasevich Yu.Yu.** Characterisation of diffusion-driven self-organisation of rodlike particles by means of entropy of generalised two-dimensional words. *Journal of Physics: Conference Series*. 2018; (1141):012137. DOI:10.1088/1742-6596/1141/1/012137. Available at: [https://www.researchgate.net/publication/329838597\\_Characterisation\\_of\\_diffusion-driven\\_self-organisation\\_of\\_rodlike\\_particles\\_by\\_means\\_of\\_entropy\\_of\\_generalised\\_two-dimensional\\_words](https://www.researchgate.net/publication/329838597_Characterisation_of_diffusion-driven_self-organisation_of_rodlike_particles_by_means_of_entropy_of_generalised_two-dimensional_words).
4. **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>.
5. **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>.
6. **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>.
7. **Hoffman D.K.** 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.
8. **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.
9. **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.
10. **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.
11. **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.
12. **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.
13. **Budinski-Petković L., Vrhovac S.B., Lončarević 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.



14. **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.
15. **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>.
16. **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.
17. **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.
18. **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.
19. **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.
20. **Cormen T., Leiserson Ch., Rivest R., Stein C.** Introduction to algorithms. Cambridge: MIT Press; 1990: 1312.
21. **Slepovichev I.I.** Generatory psevdosluchainykh chisel [Pseudo random number generators]. Saratov: SGU; 2017: 118. (In Russ.)