ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 126 за 2020 г.

ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Г.И. Змиевская

# Моделирование неравновесных процессов методом стохастической молекулярной динамики: столкновения

***Рекомендуемая форма библиографической ссылки:*** Змиевская Г.И. Моделирование неравновесных процессов методом стохастической молекулярной динамики: столкновения // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 126. 40 с. https://doi.org/10.20948/prepr-2020-126
https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2020-126

**О р д е н а Л е н и н а**
**ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ**
**имени М.В.КЕЛДЫША**
**Р о с с и й с к о й  а к а д е м и и  н а у к**

**Г.И. Змиевская**

# Моделирование неравновесных процессов методом стохастической молекулярной динамики: столкновения

**Москва — 2020**

**Змиевская Г.И.**

**Моделирование неравновесных процессов методом стохастической молекулярной динамики: столкновения**

Учебно-методические материалы к лекциям «Стохастическое моделирование» (МФТИ, базовая кафедра ИПМ им. М.В. Келдыша РАН) освещают стохастические модели столкновений и флуктуационно обусловленных процессов в плазме и твердом теле, вызывающих фазовые переходы, такие как конденсация пара в плазме разряда и имплантация ионов в кристаллическую решетку твердого тела, а также определяющие заряд частиц пылевой плазмы над электродами или в космосе. Кинетические уравнения в частных производных и стохастические дифференциальные уравнения решаются численно методами Монте-Карло. Модели случайных процессов в фазовых пространствах позволяют рассчитывать неравновесные функции распределения зародышей фазового перехода по размерам и оценивать свойства плазмоподобных сред, изменяющиеся в результате радиационных повреждений материалов при имплантации ионов инертных газов в материалы.

**Ключевые слова:** кинетическая теория, уравнение Колмогорова, стохастические дифференциальные уравнения, зародыши фазового перехода, неравновесные процессы, имплантация, пористость, конденсация, самоорганизация, столкновения, флуктуации, комплексная плазма

**Galina Ivanovna Zmievskaya**

**Nonequilibrium processes modelling by stochastic molecular dynamics: collisions**

Educational-methodical materials for the lectures «Stochastic Modeling» (MIPT, the base department of the M.V. Keldysh Institute of Applied Mathematics of the RAS) cover stochastic models of collisions and fluctuation-specified processes in plasmas and solids, causing phase transitions such as condensation of vapor in the discharge plasma and implantation of ions into the crystal lattice of a solid, as well as processes in dusty plasma above electrodes or in space. Kinetic partial differential equations and stochastic differential equations are solved numerically by Monte Carlo methods. Models of random processes in phase spaces allow calculate non-equilibrium size distribution functions of phase transition nuclei and estimate the properties of plasma-like media that change as a result of radiation damage to materials upon implantation of inert gas ions into materials.

**Keywords:** kinetic theory, Kolmogorov equation, stochastic differential equations, nuclei of phase transition, nonequilibrium processes, implantation, porosity, condensation, self-organization, collisions, fluctuations, complex plasma

Работа частично поддержана грантом РФФИ 18-01-00436

## Предисловие

Современная вычислительная физика развивается вместе с расширением возможностей компьютеров, появлением новых алгоритмов и совершенствованием микроскопии наноразмерных объектов. При взаимодействии плазмы с поверхностью происходят фазовые переходы первого рода (конденсации паров в плазме разряда), этот процесс чаще всего описывается средствами термодинамики. Однако в условиях радиационного воздействия на поверхность необходимо обратить внимание на неравновесную стадию фазового перехода, когда формируются зародыши новой фазы, распределение которых по размерам влияет на развитие фазового перехода.

В настоящее время востребованы математические модели [1] и исследования плазмоподобных сред, к которым можно отнести: лазерную плазму с ионами различной кратности заряда, частично ионизованный газ с заряженной пылью, плазму твердого тела, дефекты кристаллической решетки, возникающие при имплантации ионов инертного газа. Актуальны также модели фазовых переходов второго рода в твердом теле (параэлектрик-сегнетоэлектрик, проводник-сверхпроводник). Активно изучаются создание пористости для фотонных и фононных кристаллов, формирование магнитных доменов и структур сегнетоэлектриков, пульсации турбулентности как самоорганизация фазовых пространствах, и др. Физико-химические процессы, столкновительные и флуктуационные, рассматриваются как марковские случайные процессы. Уравнения, математической физики в частных производных, описывающие столкновения, относят к больцмановскому типу. В 30-х годах прошлого века были опубликованы работы А.Н. Колмогорова [2], а затем М.Н. Леонтовича [3]. Эти работы, так же как и существовавшие до них основы кинетической теории разреженных газов, модель броуновского движения, описываемая уравнением Ланжевена и винеровским случайным процессом, создали предпосылки для введения понятия физико- вероятностных аналогов.

В 40-х годах К. Ито сформулировал стохастическое дифференциальное уравнение (СДУ) [4], послужившее прогрессу теории стохастических динамических переменных. Эти уравнения для скачкообразных марковских процессов и уравнения Ито в смысле Стратоновича для диффузионных случайных процессов используются в численном методе стохастической молекулярной динамики, разработанном в ИПМ им. М.В. Келдыша. Свойства алгоритмов решения СДУ и примеры моделей неравновесных процессов входят в настоящее издание учебно-методических материалам к спецкурсу базовой кафедры МФТИ «Стохастическое моделирование».

Исследования кинетики неравновесной плазмы [5] стимулировали создание численных моделей столкновительных сред. Важными особенностями являются существование и единственность решения уравнений при некоторых ограничениях на коэффициенты СДУ. Коэффициенты СДУ являются функционал—

коэффициентами, что делает задачи квазилинейными.Траектории случайных процессов моделей рассчитываются устойчивыми численными методами, интерпретируются решения СДУ в терминах плотностей переходной вероятности марковских процессов(кинетических функций распределения, зависящих от стохастических динамических переменных) [6, 7].

В настоящем издании приведены необходимые краткие сведения об уравнениях Колмогорова и о построении дискретной модели столкновений, приводящих к химическим реакциям, нарушающих равновесное ионизационно-рекомбинационное состояние смеси компоненов газа. Во Введении анонсируются задачи, показывающие возможности стохастической молекулярной динамики исследования неравновесных процессов в разреженном газе с химическими реакциями, в пылевой плазме и в тонком слое облучаемой поверхности. В первой части («Столкновения») приведены примеры расчета столкновительной релаксации, формирующей структуру фазового пространства скоростей. Во второй брошюре («Кластеризация») рассматривается флуктуационная стадия фазового перехода первого рода конденсации паров металла вблизи электрода и кристаллизации пара на поверхности субстрата, а также формирование флуктуаций заряда в пылевой плазме при конденсации и при термоэмиссии электронов, которые получены решением уравнений кинетической теории для включения этих процессов в код пылевой плазмы. В части «Блистеринг» фазовый переход возникает при имплантации ионов инертного газа высокой энергии, внедряющихся в кристаллическую решетку субстрата. Блистеринг (образование вакансионно-газовых неточечных дефектов) в алмазоподобном материале создает повреждения кристаллической решетки, вызывает пористость слоев и шероховатость поверхности, изменяет свойства металлических зеркал будущей рентгеновской литографии. Образование дефектов создает структуры пор — зародышей микротрещин и источники локальных напряжений в материале. Броуновское движение дефектов в решетке происходит под действием дальнодействующего потенциала косвенных упругих сил в твердом теле через возмущение акустических фононов при имплантации ионов. Оно происходит под действием периодического возмущения и изучается на модели генератора Ван-дер-Поля. Этим моделям и фазовому переходу второго рода посвящена третья часть («Броуновское движение»). Там же приводятся алгоритмы решения СДУ методом Эйлера и устойчивым методом семейства Розенброка.

## 1. Введение: Математическое моделирование и кинетическая теория

Изучение явления и приближенное описание его на языке математических уравнений соответствует теорети-ческой физике, разработка чис-ленного метода решения полученных уравнений относится к прикладной и вычислительной математике и далее следуют разработка алгоритма и собственно расчеты

на компьютере. А.А. Самарский, создавший в 1969 году при ИПМ базовую кафедру Математического моделирования МФТИ (многие ее выпускники работали и работают в ИПМ), называл этот процесс триадой «модель - алгоритм - программа» [1]. Вычислительный эксперимент в физике плазмы как новый раздел науки возник на пересечении интересов математической физики, вычислительной математики и физики плазмы. Труды Ю.С. Сигова [5] заложили основу дискретных моделей плазмы и плазмоподобных сред. Они легли в основу построения кинетических плазменных комплексов программ для решения задач умеренной и сильной плазменной турбулентности. С их помощью были получены асимптотически точные оценки сходимости метода частиц для уравнения Власова. Объектно-ориентированная модель плазмы позволила получить фундаментальные результаты по кинетике нелинейного взаимодействия частиц с когерентными волновыми пакетами в открытых пучково-плазменных системах [8].

Кинетические уравнения описывают многие явления динамики разреженных газов [6], физики плазмы и носителей заряда в твердом теле и др., они определяют функции распределения (ФР) как вероятные характеристики фазового пространства, в котором рассматривается конкретная задача [9]. Термодинамические параметры, характеризующие описываемую среду, могут быть рассчитаны как моменты этих функций по процедуре хорошо известной в кинетической теории. При использовании кинетического подхода многие практически важные задачи могут быть сведены к модели броуновского движения [10], уравнения которого формулируется как кинетические уравнения в частных производных. Эти уравнения, особенно в нестационарном случае, сложны как для аналитического, так и для численного решения, поэтому компьютерное моделирование неравновесных сред и фазовых переходов в них требует разработки новых численных методов. Численное решение уравнений Больцмановского типа было основано на доказательстве возможности аппроксимации решения конструированием пуассоновского случайного процесса, то есть решениями СДУ Ито. Обобщение методов Розенброка на случай СДУ позволило решать задачи Коши для уравнения в частных производных типа уравнений Фоккера-Планка. В интересах практических приложений были разработаны математические модели процессов, нарушающих термодинамическое равновесие в различных физических средах, построены стохастические процессы с требуемой точностью, осуществлена визуализация решения уравнений в форме поверхностей равных значений кинетических функций распределения, зависящих от многих переменных. Интерпретация результатов численных экспериментов происходит не только в терминах математического ожидания и дисперсии решения, при задаваемой и постоянной в течение расчета величине плотности вероятности случайного процесса, как это делалось авторами разработки эффективных алгоритма решения линейных СДУ [11]. Эволюция плотности переходной вероятности случайного

процесса, являющегося решением уравнения в частных производных, зависит от функционал-коэффициентов уравнений, учитывающих их нелинейность, заданную моделью [12–15]. Проблемы вычислительной нанофизики связаны с преемственностью школы отечественной вычислительной физики плазмы и с использованием устойчивых алгоритмов семейства методов Монте-Карло. Результаты расчетов, цитируемые в настоящей работе, были получены исследовательскими комплексами программ совместно с В.И. Шематовичем [16], А.Е. Королевым на БЭСМ-6 [17], А.Л. Бондаревой [12–15] в сотрудничестве с А.В. Ивановым [18] и В.Д. Левченко [19] на персональных компьютерах.

**1.1. Численное моделирование неравновесных сред и приложения.** Современные перспективные теоретико-экспериментальные исследования нелинейной оптики, материаловедения, фотоники, лазерной физики и других направлений привлекают внимание вычислителей, так же, как новые возможности вычислительной техники ранее стимулировали появление численного эксперимента в плазме и плазмоподобных средах на основе кинетической теории и математической физики для изучения механизмов неравновесных быстропротекающих процессов в бесстолкновительной среде с самосогласованными электромагнитными полями [5, 8, 19]. Физико-химические процессы столкновительной и флуктуационной природы в поверхностных слоях твердого тела приводят к фазовым превращениям, к повреждениям его порами и микротрещинами, при этом упругие свойства материала меняются самосогласованно [12].

Имплантацию ионов в поверхность чаще всего представляют каскадами точечных дефектов, распространяющихся вглубь облучаемого материала без создания объемных дефектов. Внедрение инертного газа и вакансий (ВГД), создает нанопористость, плотность которой и распределение пор по размерам и расстояниям от облучаемой поверхности с оценкой локальных упругих напряжений представляет интерес для управления свойствами пористых полупроводников, для создания матриц диэлектриков с включениями наночастиц металла в интересах плазмоники [18, 19]. Устройства на основе пористых полупроводников можно интегрировать с существующими полупроводниковыми оптическими и электронными элементами. Показатель преломления и диэлектрическая проницаемость пористых полупроводников меньше, чем у объемных материалов. Это может быть использовано для создания сред с низкой диэлектрической проницаемостью, что актуально, в частности, в связи с уменьшением размеров компонентов компьютеров. Учитывая развитую поверхность пористых сред и возможность их заполнения различными газами или жидкостями пористые среды возможно использовать в качестве сенсоров. Меняя толщину пористых слоев, можно создавать различные оптические среды и устройства, включая фотонные кристаллы [13, 14]. Фононика — новый раздел физики, занимающийся тонким управлением звуковыми, ультразвуковыми и тепловыми колебаниями

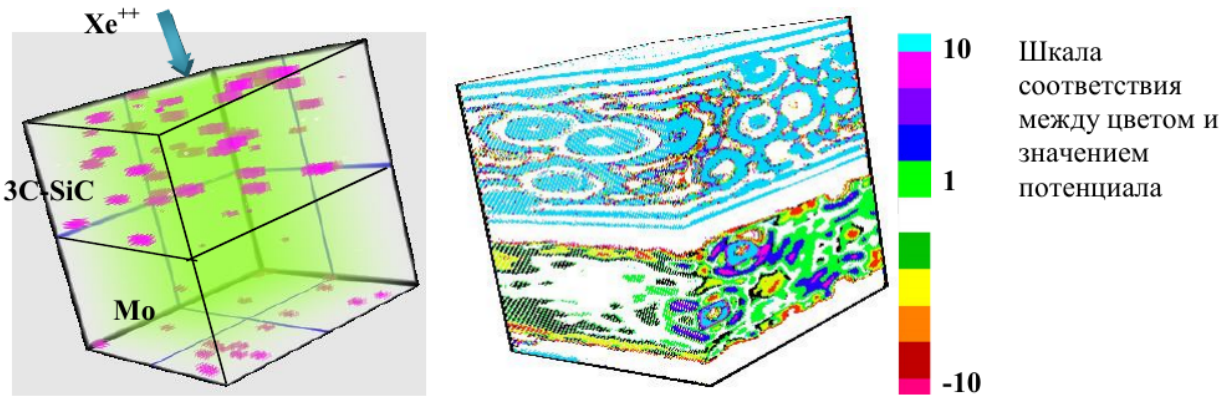


*Рис. 1.* Пример численного эксперимента изучения пористости(слева) и напряжений(справа), вызываемых имплантацией инертного газа

в различных структурах. Фононные устройства действуют как термодиоды, тепловые транзисторы, тепловые логические схемы и тепловая память, то есть управляя частотами порядка терагерц и выше. При этом возникает несколько новых трудностей. Во-первых, раз длины волн составляют считанные нанометры и меньше, то и соответствующие структуры должны изготавливаться чуть ли не с атомарной точностью. В принципе, такие многослойные структуры (сверхрешетки) делать умеют, но технически это уже гораздо более трудоемкий процесс. Как на этом масштабе реализовать периодические структуры с более сложной геометрией и можно ли это сделать вообще — вопрос нетривиальный. Во-вторых, тепловые фононы сильно взаимодействуют друг с другом и рассеиваются на дефектах. Именно по этой причине распространение тепла в твердом теле, в отличие от звука, описывается вовсе не тепловыми волнами, которые летят вперед с какой-то скоростью, а тепловой диффузией, то есть плавным замедляющимся «растеканием» тепла по телу. Управлять потоками тепловых фононов в таких условиях тоже очень непросто. В-третьих, если звуковые волны можно издавать на одной частоте, то тепловые фононы обычно существуют в твердом теле сразу в очень широком диапазоне частот. Это дополнительно усложняет управление ими, ведь акустические устройства обычно оптимизированы лишь для некоторого частотного интервала. Поэтому фононные устройства в области тепловых колебаний пока остаются не вполне удовлетворительными. Так, тепловые диоды — устройства, пропускающие тепло (2006 г.), состоят из двух половинок с разными спектрами тепловых колебаний.

Существуют также и попытки сделать нечто наподобие фотонных кристаллов, но для тепла. Можно изготовить решетку с периодически расположенными наноотверстиями и тепло пропускать через нее. Подобным способом удается подавить теплопередачу более чем в сто раз. Однако физический механизм тут совсем иной — тепловые фононы просто рассеиваются на этих наноотверстиях, которых в веществе слишком много для свободного распространения тепла. Это

совершенно не похоже на запрещенную зону частот в настоящем фононном кристалле и вряд ли может считаться достижением фононики.

Численные модели процесса конденсации тонкой пленки применимы для оптимизации уже существующих технологических процессов, например, для создания покрытий карбида кремния, $SiC$, являющегося термостойким материалом электроники и/или упрочняющим покрытием. Роль карбидов металлов в качестве катализаторов при получении углеродных нанотрубок и фуллеренов только начинает исследоваться. Начальная стадия нанесения покрытия тонкой пленки представлена численной моделью образования островков-зародышей бездефектных пленок карбида кремния $SiC$, и др. материалов, изменяющих свойства поверхности. Это важный этап в задачах моделирования конденсации паров $Si$ и в плазме разряда с образованием заряженных капель и порошков $3C - SiC$ [7, 15]; при образовании $SiC$ с учетом химических реакций $C$ (углерода газовой фазы) с островами зародышей расплава $Si$ на субстрате $Si(100)$, при фазовом переходе кристаллизации на стадии образования зародышей кристаллических политипов карбида кремния ($3C - SiC, 4H - SiC, 6H - SiC$) и др. Твердофазная эпитаксия поликристаллического карбида кремния, реализованная на практике, происходит в присутствии пористости субстрата $Si$. Механизмы этого способа эпитаксии привлекают внимание, поскольку важно снизить стоимость производства $SiC$.

В результате блистеринга (образования вакансионно-газовых дефектов) возникает пористость материалов. При имплантации ионов плохорастворимых газов в кристаллической решетке, при радиационном воздействии на кремний пористость может быть структурой, которая будет предшествовать процессам твердофазных химических реакций образования карбида кремния. Оценка прочности аморфизованного блистерингом слоя поверхности, граничащего с плазмой, и его шероховатости в численном эксперименте — актуальнейшая задача в связи с будущим мониторингом деградации свойств материалов термоядерного реактора /ТЯР/. Информация о поведении наноматериалов под радиационной нагрузкой, при высоких температурах и значительных нагрузках, а также в коррозионных средах очень важна применительно к созданию перспективных компонентов для реакторов деления и синтеза нового поколения (реакторы на быстрых нейтронах, высокотемпературные газовые реакторы, термоядерные реакторы и др.).

В качестве перспективного материала электроники следующего десятилетия рассматривается алмаз, поскольку отмечена его исключительная стабильность в экстремальных условиях (температур, радиации). Приборы могут обладать свойствами детекторов в ультрафиолетовом диапазоне. Радиационные дефекты в материалах (в том числе и алмазе) образуются при внедрении водорода, дейтерия и гелия. Происходит аморфизация кристаллической решетки. На этот процесс влияет отжиг образца и доза газа. В случае блистеринга на материалах

ТЯР речь идет об охрупчивании и разрушении материалов. При взаимодействии ионов с технологическими металлическими зеркалами, состоящими из бислоев наномасштабных размеров, состоящих из металла и диэлектрика $(Mo/Si)$, в измерительных приборах сталкиваются с необходимостью поддержания их рабочих характеристик при передаче оптического сигнала. С аналогичными повреждениями столкнутся технологии рентгеновской литографии, источник излучения для которой пока еще окончательно не выбран. При изучении роли возможного использования блистеринга при производстве новых материалов электроники важно установить температурный режим, при котором происходит образование под поверхностью образца слоя графитизации алмаза для создания внутреннего проводящего слоя.

Возможны приложения численных моделей в задачах модификации свойств поверхности и создания структур с заданными наномасштабными размерами. Структуры нанопокрытий, со свойствами алмазоподобного материала — карбида кремния $SiC$ — и условия их формирования можно моделировать с помощью программного комплекса, реализующего кинетические модели газа и плазмоподобных сред. Исследование механизмов процессов фазового перехода на неравновесной быстропротекающей стадии является сложной задачей, успешное решение которой возможно только в результате объединения теоретических, расчетных и экспериментальных исследований. Теория фазовых переходов II-го рода имеет широкую область применения и описывает переходы в различных системах, например в плазме, лазерах, конденсированных средах и т.д. Фазовые переходы можно разделить на два класса: равновесные и неравновесные. К первому классу относятся фазовые переходы в магнетиках, в сверхпроводниках и в сегнетоэлектриках. Для них роль управляющего параметра играет температура. К числу неравновесных переходов относятся, например, переходы в лазерах, в гидродинамике. Роль управляющего параметра в них играет накачка и число Рейнольдса. Кинетические уравнения, примененные в постановках этих задач, ждут своего решения.

Актуальность спецкурса связана, во-первых, с исследованием условий деградации свойств поверхности под воздействием радиационных и др. воздействий, во-вторых, позволяет развить направление, связанное с синтезом нанопокрытий. Подобная задача в настоящее время требует применения теоретических основ кинетической теории газов и плазмы, исследования физической природы сил, определяющих процесс зародышеобразования, определения и изучения всех факторов влияния на возникновение структур радиационных дефектов в твердом теле, которые приводят к разрушениям или аморфизации поверхности, а также образование наномасштабных структур на начальной стадии фазового перехода, размеры и расположение которых сказываются на линейной стадии роста пленок покрытия. Флуктуации заряда, возникающие при напылении покрытий, могут сказаться на свойствах пылевой плазмы при возник-

новении такого явления как пылевой кристалл и на механизме возникновения ускорения Ферми в космическом пространстве и в других средах.

**1.2. Вычислительный эксперимент: стохастическая молекулярная динамика.** Теоретические исследования и расчеты с помощью новых численных методов позволяют обнаружить новые нелинейные эффекты зависимости функции распределения кластеров зародышей фазового перехода от параметров «открытой физической системы». Они дают возможность обосновать появление эффектов самоорганизации стохастических динамических переменных в фазовом пространстве задачи в присутствии дальнодействующих самосогласованных потенциалов взаимодействия кластеров зародышей между собой, с границами моделируемой области и особенностями (дефектами типа «ступеньки», включениями типа зерен и др.) среды, в которой происходит фазовый переход. Результаты расчетов пригодны для сравнения механизмов дефектообразования в приповерхностном слое облучаемого образца, а также для оптимизации параметров нанесения тонких пленок.

Математические модели неравновесной стадии фазового перехода 1-го рода и нарушения равновесия в средах столкновениями и химическими превращениями основаны на решении систем квазилинейных интегро-дифференциальных уравнений математической физики в частных производных второго порядка методом стохастического аналога физико-химических процессов, т.е. когда системы стохастических дифференциальных уравнений /СДУ/ Ито, эквивалентные уравнениям Колмогорова (Фоккера-Планка, Колмогорова-Феллера, Эйнштейна-Смолуховского, Леонтовича (Больцмановского типа) и др.) могут быть объединены с кинетическими кодами при расщеплении задач по временным масштабам. Преемственность школы отечественной вычислительной физики плазмы привела к созданию программ кинетического комплекса на основе решения суперпозиции разных типов СДУ, а результаты расчетов неравновесных состояний в фазовом пространстве могут быть включены в кинетические коды для процессов с иными пространственно-временными масштабами. Фазовые переходы II-го рода моделируют с помощью уравнений записанных для параметра порядка $\eta$. (например, уравнение Гинзбурга – Ландау), что относится к макроскопическому описанию среды. Как было показано Ю.Л. Климонтовичем, фазовые переходы второго рода можно описывать на кинетическом уровне, с помощью уравнений, записанных для функции распределения параметра порядка $f(x, \eta, t)$.

Описание нелинейной стадии зародышеобразования как броуновского движения и стохастической диффузии в фазовом пространстве размеров кластеров зародышей или кластеризации развивает идею Я.Б. Зельдовича [20] о стационарном кинетическом уравнении зародышеобразования. Изменение химического состава в частично ионизованном газе происходит в результате столкновений молекул газа, как и состояние заряда кластеров в плазме разряда, описывается как

скачкообразный МП, для которого также записаны уравнения Ито, эквивалентные уравнениям больцмановского типа. Вычислительная физика сегодняшнего дня рассматривает самосогласованные модели так называемых плазмоподобных сред, к ним относятся: лазерная плазма с ионами различной кратности заряда, заряженная пыль, плазма твердого тела, дефекты его кристаллической решетки, острова расплава металла и диэлектрика на твердом субстрате, магнитные домены и домены сегнетоэлектрика, ускорение частиц на флуктуациях заряда в комплексной плазме и др. Одним из процессов взаимодействия плазмы с поверхностью является фазовый переход 1-го рода. Нередко этот процесс описывается средствами термодинамики. Однако в условиях радиационного воздействия на поверхность необходимо обратить внимание на неравновесную стадию фазового перехода, когда формируется начальное состояние системы, после чего происходит линейный рост новой фазы. Учет «открытости» моделируемых систем приводит к переменному числу частиц в расчетной области и/или несохранению полной энергии в системе за счет объемных источников и потоков через границы. Проведенные численные эксперименты ставят целью заполнение существующих пробелов в неравновесной теории зародышеобразования на флуктуационной стадии фазового перехода с использованием свойств Марковских процессов с учетом процессов взаимодействия зародышей новой фазы с плазмой разряда или имплантированных частиц с кристаллической решеткой, в которой происходит накопление радиационно-стимулированных дефектов в виде кластеров зародышей.

Отличительными чертами численного метода, который применялся при решении задач неравновесных состояний сред, является использование СДУ, а не уравнений Ньютона или Ланжевена для траекторий случайных процессов. Суть методов Монте-Карло как метода оценки статистически математического ожидания средних величин сохраняется [17, 21]. Однако модель марковского процесса характеризуется не только координатой в фазовом пространстве задачи, но и плотностью вероятности нахождения траекторий численного эксперимента в заданной области фазового объема. То есть оценивается решение частного случая уравнения Колмогорова.

В отличие от решения Фоккера-Планка с постоянными коэффициентами предполагается, что коэффициенты зависят от функции распределения, относительно которой сформулировано кинетическое уравнение (или от математического ожидания среднего значения стохастической динамической переменной), то есть мы получаем решение квазилинейной задачи, что делает рассмотрение неравновесных процессов более адекватным. Модель СДУ в форме Ито опирается на доказательство существования и единственности решения [22] при условии ограниченности по Липшицу коэффициентов СДУ и кинетических уравнений. Они строго связаны, и для зависимости ФР от одной, двух и трех переменных необходимо при выводе СДУ использовать специальные формулы

связи.

Стохастические процессы начальной стадии фазового перехода 1-го рода зависят от термодинамического потенциала образования зародышей фазового перехода (или энергии Гиббса, учитывающей не только размер зародыша, но и влияние среды на его образование), что определяет скорость кластеризации зародышей. Их броуновское движение зависит от массы и от потенциала косвенного упругого взаимодействия через возмущение колебаний акустических фононов, рассеиваемых зародышами и распространяющихся в кристаллической решетке или в среде с плазмой. Учет этих процессов обеспечивает плазмоподобность сред, в которых создается неравновесное состояние среды. Алгоритмы обеспечивают самосогласованность и учет дальнодействия в средах при фазовом переходе и расчете параметров нанесения островков тонких пленок.

Метод стохастической молекулярной динамики и теория стохастического моделирования неравновесной стадии фазового перехода 1-го рода на флуктуационной стадии (длительностью до микросекунд) применен в расчетах образования вакансионно-газовых пузырьков инертного газа в кристаллической решетке металла и диэлектрика (или блистеринга), для кластеров расплава металла и диэлектрика с учетом заряда на капле, а также островков-зародышей расплава на субстрате с возможностью кристаллизации и химических реакций как суперпозиции марковских процессов.

Результаты численного эксперимента интерпретированы в терминах кинетической теории разреженного газа и плазмы. Макроскопические характеристики рассчитаны как моменты неравновесных функций распределения зародышей фазового перехода по размерам и координатам конфигурационного фазового пространства задачи, к которым относятся пористость, напряжения в решетке, возникающие при фазовом переходе образования дефектов сферической формы. Выведены аналитические зависимости функционал-коэффициентов кинетических уравнений от размера зародыша и его координат, изменяющихся в результате как кластеризации зародышей, так и броуновского движения кластеров, которое управляется потенциалом косвенного упругого взаимодействия кластеров через возмущение акустических фононов кристаллической решетки и др. факторов взаимодействия броуновских частиц между собой и с плоскостями внутренних и внешних границ пространства задачи.

**1.3. Пространственно-временные масштабы моделей неравновесных процессов.** Приведем численные оценки параметров неупругих процессов в сталкивающихся потоках плазмы и времена в расчетах столкновений, образования зародышей конденсации и процессов имплантации ионов в поверхность. Для плазмы, образующейся в области столкновения лазерных факелов при начальной концентрации $N_e = 5 \cdot 10^{18} - 5 \cdot 10^{19}$см$^{-3}$ и скорости разлета $V_\infty = 3 \cdot 10^7$см/с, следуя приближению газодинамических задач [21], давление, температура и

концентрация частиц в зоне столкновения потоков равны: $p^0 = 3 \cdot 10^{10} - 3 \cdot 10^{11}$ Па, $T^0 = 3$ кэВ, $N_e^0 = 10^{19} - 10^{20}$см$^{-3}$. Температура электронов за фронтом ударной волны в момент столкновения факелов много меньше температуры ионов и составляет по оценкам несколько электронвольт. Таким образом, в течение характерного времени передачи энергии от ионов к электронам в рассматриваемом случае существует неравновесная плазма с высокой и низкой электронной температурой. Характерные времена существования такой неравновесности определяются выражением

$$\tau_{ie} = \frac{9}{16\pi^{1/2}\sqrt{2}} \frac{M_i}{\sqrt{m_e}} \frac{(kT_i)^{3/2}}{e^4 Z^2 n_i^0 \Lambda},$$

(где $\Lambda$ - кулоновский логарифм) и составляют в рассматриваемых условиях $10^{-7} - 10^{-8}$ с. Пространственный масштаб этой плазмы порядка нескольких миллиметров, т.е. плазма сгустка успевает разлететься до момента выравнивания $T_i$ и $T_e$. Такая плазма может быть использована для создания в ней инверсной заселенности, т.е. она может быть использована в качестве активной среды для лазера.

Для задач фазового перехода конденсации различие характерных времен кластеризации $\tau_g \sim 10^{-9}$ с и броуновского движения зародышей неточечных дефектов в материалах равно $\tau_r \sim 10^{-8}$ с, что позволило решать последовательно одномерные задачи.

Пространственно-временные параметры модели зародышеобразования при имплантации ионов в материалы: Время начальной стадии $10^{-4}$ с, линейный размер подложки  100 нм, общая толщина подложки  70 нм, слои подложки толщиной  10 нм ($Mo$) и 54 нм ($Si$), давление потока $10^5$ Па. Энергия ионов инертного газа $5-15$ кэВ, температура образца от 600 до 1000 К. Доза облучения $10^{14}$ —$10^{17}$ см$^{-2}$.

## 2. Марковские случайные процессы, стохастические и кинетические уравнения

Теоретическое обоснование нового численного метода решения квазилинейных уравнений параболического типа в частных производных подчеркивает отличия от метода молекулярной динамики и от Ланжевеновского подхода. Задача формулируется в виде уравнений стохастического аналога в форме Ито - Стратоновича, для решения которых используется эффективный устойчивый алгоритм. Он модифицирован на решение квазилинейных задач с функционал-коэффициентами, итерационно приближаемыми в процессе решения уравнений, для которых произведено расщепление решения по физическим процессам (кластеризации и броуновского движения, суперпозиции скачкообразного и диффузионного процессов, включение стохастических аналогов в кинетические коды и др.).

Целью спецкурса является обзор существующих математических моделей неравновесных физико- химических процессов, к которым относится начальная флуктуационная стадия фазового перехода 1-го рода, ионизационно-рекомбинационные столкновительные процессы в плазме и плазмоподобных средах, фазовые переходы типа «порядок-беспорядок» и др. модели, которые требуют решения систем нелинейных или квазилинейных интегро-дифференциальных уравнений математической физики в частных производных второго порядка. Для этого был разработан метод стохастического аналога физико-химических процессов, т.е. когда решаются системы СДУ Ито, Ланжевена и Ито–Стратоновича асимптотически эквивалентных уравнениям Колмогорова (Фоккера– Планка, Колмогорова–Феллера, Эйнштейна–Смолуховского, Леонтовича (Больцмановского типа) и др.).

Спецкурс знакомит с описанием нелинейной стадии фазового перехода, когда образуются зародыши новой фазы. Такие процессы происходят при конденсации пара в газовой среде или в плазме разряда и на поверхности, а также при имплантации ионов в кристаллическую решетку, изменяющих свойства материалов. Модели представлены как броуновское движение кластеров и стохастическая диффузия в фазовом пространстве размеров кластеров зародышей или кластеризация, моделируемые диффузионными случайными процессами и уравнениями типа Фоккера–Планка–Колмогорова. Химический состав и флуктуации заряда в пылевой или комплексной плазме формируются в результате столкновений ионов и электронов с кластерами и описываются как скачкообразный МП, для которого также записаны уравнения Ито, эквивалентные уравнениям больцмановского типа. С броуновским движением под воздействием периодической силы связаны модели поляризации сегнетоэлектриков, турбулентных пульсаций в потоке жидкости и с возникновением ускорения Ферми в средах с флуктуациями заряда.

Вычислительная физика сегодняшнего дня рассматривает самосогласованные модели так называемых плазмоподобных сред. К ним относятся: лазерная плазма с ионами различной кратности заряда, заряженная пыль, плазма твердого тела, дефекты его кристаллической решетки, острова расплава металла и диэлектрика на твердом субстрате, магнитные домены и др.

**2.1. Модели неравновесных сред и процессов.** Вычислительный эксперимент в физике плазмы возник на основе математической физики, вычислительной математики в приложении к дискретному моделированию высокотемпературной плазмы, плазмоподобных гравитирующих сред и пылевой плазмы. Решение кинетических уравнений и метод «крупных частиц» позволили понять механизмы процессов в бесстолкновительной плазме и роль коллективных процессов взаимодействия заряженных частиц через электромагнитные поля. Роль флуктуаций в фазовых переходах /ФП/ можно прояснить в вычислительных

экспериментах. Неравновесная начальная стадия ФП 1-го рода была представлена диффузией в фазовом пространстве размеров зародышей $\forall g \in \{\mathbf{G}\}$. В обзоре [24] этот подход получил развитие. Рассмотрена имплантация ионов инертных газов в слой поверхности с образованием в кристаллической решетке неточечных дефектов /ВГД/ как ФП 1-го рода в форме пористости методом стохастической молекулярной динамики, которая опирается на свойства МП, на решение уравнений математической физики /УМФ/ в частных производных (Колмогорова-Феллера и Эйнштейна-Смолуховского) для кинетических функций распределения /ФР/, на теорию стохастических динамических переменных и СДУ Ито-Стратоновича.

Модель конденсации пара была дополнена процессами в плазме разряда. Флуктуационная стадия ФП представлена кластеризацией зародышей и броуновским движением /БД/ сферических частиц с переменными массами, центры которых перемещаются в $\forall \mathbf{r}(x, y, z) \in \{\mathbf{R}\}$, где $\{\mathbf{R}\}$ - фазовом пространстве координат.

БД кластеров зародышей пор происходит в результате косвенного упругого взаимодействия ВГД в кристаллической решетке, облучаемой ионами инертного газа, между собой и с границами расчетной области через акустические фононы решетки и фриделевские осцилляции электронной плотности. Потенциал взаимодействия $U(x, y, z, t)$ зависит от плотности дефектов и их координат, а также от упругих модулей решетки. Изменения $U(x, y, z, t)$ отражают коллективные самосогласованные осцилляции поля упругих сил, действующих на ВГД при БД. При этом меняется рассеяние на порах акустических фононов, осциллирующий потенциал пересчитывается. Так же учтено дальнодействие ВГД, при сближении траекторий кластеров формируются структуры пористости. При заполнении пор различными веществами, в том числе, имеющими большой коэффициент преломления, возникает перспектива для изменений оптических свойств материала. Пористые среды могут использоваться также для изменения их теплопроводности, в коэффициенте температуропроводности материала пористость учитывается согласно теории Максвелла- Эйкена.

Численные методы Монте-Карло используются при решении краевых задач математической физики на основе вероятностных представлений о моделируемых физико-химических процессах. На примере метода стохастической молекулярной динамики (или стохастического аналога) рассматриваются принципы создания моделей, фазовые пространства для дискретного аналога стохастических динамических переменных задачи и траекторий случайного процесса, отражающих изменение во времени начального состояния дискретной среды. Это требует численного решения СДУ и вычисления интегралов вдоль моделируемых траекторий.

Точность статистических алгоритмов решений систем СДУ зависит от размера ансамбля моделируемых траекторий и от величины шага интегриро-

вания. Они важны при интерпретации вычислительного эксперимента, черты которого приобретают расчеты, осуществляемые согласно первым принципам физики. Цель моделирования – выяснение механизмов неравновесных быстропротекающих процессов столкновительной и флуктуационной природы в соответствующих пространственно-временных масштабах задач вычислительной нанофизики, описываемых молекулярно-кинетической теорией. В том числе для столкновительной релаксации газов с внутренними степенями свободы в ударных волнах, при плазменном напылении покрытий и эволюции состояния пылевой плазмы, а также в теории фазовых переходов на стадии зародышеобразования. Его флуктуационная неустойчивость проявляется при конденсации паров в объеме плазмы разряда или на поверхности (свойства которой модифицируются), или при имплантации ионов газа в кристаллическую решетку и влияет на технологические процессы.

Методы молекулярной динамики /МД/ используют имитационные модели движения частиц, решение уравнений Ньютона с заданными параметрами потенциалов взаимодействия, выбор которых и число траекторий вызывают критику. Стохастическая молекулярная динамика имеет существенные отличия от МД. Прежде всего коэффициенты СДУ являются функционал–коэффициентами, а системы СДУ квазилинейны. Вероятностные распределения не задаются априори а ищутся в процессе решения задачи Коши для систем СДУ последовательными приближениями, используя расщепление по физическим процессам и то, что в течение шага по времени коэффициенты СДУ постоянны, по траекториям находится математическое ожидание либо плотность переходной вероятности МП, то есть ФР, входящая в УМФ, которая используется в качестве начальных данных, по которым пересчитываются коэффициенты сноса и диффузии в СДУ. Например, в фазовом пространстве $\{\mathbf{G}\}$ происходят «скачкообразные» изменения размера $g$ при рекомбинации вакансионных и газовых кластеров, при расчете траекторий БД кластеров, если выполняются условия слияния ВГД, а также в задачах конденсации пара при достижении каплей расплава размера, который по критерию Релея неустойчив, процессы описываются СДУ Ито по Пуассоновской мере и будут учтены при записи (5), аналогично [7, 15].

Свойства скачкообразных или диффузионных МП $\{X(t), t \geq 0\}$ можно интерпретировать в терминах не только математических ожиданий случайных величин $\mathbf{M_x}$ и дисперсии $\mathbf{D_x}$, которые являются целью анализа эволюции стохастических динамических переменных $X_1(t), X_2(t), ..., X_N(t)$, рассматриваемых в задаче, но и численно найти плотности переходной вероятности МП $f(X_1(t), X_2(t), ..., X_N(t))$ и выразить с их помощью известные в кинетической теории ФР, здесь - по координатам и размерам зародышей УМФ. Системы нелинейных, линейных или квазилинейных УМФ параболического типа могут быть записаны в виде:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \mathcal{L}(f), \; f(t=0) = f_0, \tag{1}$$

где $\mathcal{L}(f)$ — интегро-дифференциальные операторы.

Объектом изучения (1) является ФР $f = f(\vec{x}, t)$ фазовых координат $\vec{x}$ (например, $\vec{x}$ — {координата, размер кластера}) и времени $t$. Система СДУ Ито имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{X}(t)}{dt} &= A(\vec{X}, t) + B(\vec{X}, t)\tilde{W}(t) \\ \vec{X}|_{t=0} &= \vec{X}_0, \quad t \geq 0. \end{aligned} \tag{2}$$

где $A$ и $B$ — коэффициенты (вектор и матрица, соответственно), а $W(t)$ — случайный процесс, состоящий в общем случае из пуассоновской (скачкообразной) и винеровской (диффузионной) частей, $\vec{X}(t)$– суперпозиция МП.

На основании определения интеграла в среднем квадратичном смысле (с.к.) [4, 22] и определения стохастического интеграла Ито (Ито,1968) приращение случайной функции $\Delta X(t)$ на малом интервале $\Delta t$ изменения аргумента $t$ приближенно равно сумме детерминированной $A(t, X)$ и случайной составляющих:

$$\Delta X = X(t+\Delta t) - X(t) = \mathbf{A}(t, X)\Delta t + \left[\mathbf{B}(t, X)\Delta\tilde{W}^0 + \int_{R^q} \mathbf{C}(t, x)\Delta\mathbf{P}^0(t, dx)\right], \tag{3}$$

где $W^0(t)$– винеровский процесс, а $\Delta\mathbf{P}^0(t, dx)$– приращение центрированного точечного пуассоновского процесса $\{\mathbf{P}^0(t, dx)\}$ в пространстве $\mathbf{R}^q \in \mathbf{R}^N$. В (3) $\mathbf{A}(t, X)$ и $\mathbf{C}(t, X)$– $m$–мерные векторные функции, $\mathbf{B}(t, X)$– матричная функция $m \times r$, $\tilde{W}^0(t) = (w_1(t), \ldots, w_r(t))^T$– $r$–мерный винеровский процесс с независимыми приращениями. Процесс $\tilde{W}^0(t)$ не имеет с.к. производной в обычном смысле и $dW^0$ не является дифференциалом в обычном смысле.

Метод численного стохастического моделирования опирается на теоремы, согласно которым $f(\vec{X})$ — плотность переходной вероятности Марковского случайного процесса (МП) $\vec{X}(t)$, являющегося решением СДУ Ито (2), удовлетворяет прямому уравнению Колмогорова (Скороход, 1983). Существует однозначная связь между системами СДУ и уравнением Колмогорова для плотности переходной вероятности МП [22].

Численные алгоритмы метода стохастического аналога устойчивы и эффективны, направлены на решение фундаментальной задачи определения механизма неравновесной диффузии имплантированных вакансионно-газовых пор на стадии их зарождения.

Решение задачи Коши для системы СДУ с пуассоновской компонентой сформулировано следующим образом: требуется найти вероятностный процесс $\mathbf{X}(\cdot), \mathbf{X}(0) = \mathbf{X}_0$, который непрерывен справа, с конечными пределами слева для всех $t \in [0, T]$ и для которого с вероятностью 1 для всех $t \in [0, T]$ одновременно

устанавливается

$$d\mathbf{X}(t) = \mathbf{a}(\mathbf{X},t)dt + \sum_{j=1}^{n_W} \sigma_{\cdot j}(\mathbf{X},t)dw_j(t) + \int_\Gamma c(\mathbf{X}(t^-),t,\theta)\nu(d\theta \times dt), \quad t \in [0,T] \tag{4}$$

или в интегральной форме

$$\begin{aligned} \mathbf{X}(t) \;=\; & \mathbf{X}(0) + \int_0^t \mathbf{a}(\mathbf{X},\tau)d\tau + \sum_{j=1}^{n_W} \int_0^t \sigma_{\cdot j}(\mathbf{X},\tau)dw_j(\tau) + \\ & \int_0^t \int_\Gamma c(\mathbf{Y}(\tau^-),\tau,\theta)\nu(d\theta \times d\tau), \quad t \in [0,T], \end{aligned} \tag{5}$$

где $\mathbf{X}(t)$ – $n_X$-мерный случайный процесс; $\mathbf{W}(t)$ суть $n_W$-мерный стандартный винеровский процесс; $\nu$ – пуассоновская мера на $\Gamma \times [0,T]$ с характеристической мерой $\Pi$, которая выбирается неотрицательной функцией $\pi(\theta,t,\mathbf{X})$; $a(\mathbf{X},t)$ и $c(\mathbf{X},t,\theta)$ являются $n_X$-мерными векторными функциями; $\sigma(\mathbf{X},t)$ – матричная функция $n_W \times n_X$-размерности; $\sigma_{\cdot j}(\mathbf{X},t)$ - $j$й столбец матрицы $\sigma$; $\mathbf{X}_0$ – начальное состояние системы; $\mathbf{X}(t^-)$ – решение в точке $t-0$, $\theta$ — величина скачка.

**2.2. Уравнение Чепмена-Колмогорова для многокомпонентной среды.** Понятие переходной вероятности случайного процесса $Q_i^\alpha(t',\Gamma^\alpha|t,x_i^\alpha)$ следует понимать, как вероятность нахождения элемента дискретной среды $a_i^\alpha$ в момент времени $t'$ в области $\Gamma^\alpha \subset X^\alpha$ при условии, что в момент $t$ элемент находился в состоянии $x_i^\alpha \in X^\alpha$.

Эволюция МП $\{x(t), t \geq 0\}$ определяется [10], если заданы: матрица переходных вероятностей случайного процесса на одном временном шаге ($Q_{ij}^\alpha$) и начальное распределение случайных величин $x(t=0) = \{p,q,m\} \equiv X_0$ такое, что $Q(X_0 = i) = Q_i, \quad i \in \Gamma^\alpha, \quad Q_i \geq 0$ и $\sum\limits_i Q_i = 1$. Для вектора состояния $\left\{\vec{X}^\alpha\right\}$ частиц сорта $\alpha$ $Q_{ij}^\alpha$ по определению равна

$$Q_i^\alpha(x_i^\alpha \in \Gamma^\alpha) = \int\limits_{\Gamma^\alpha} p_i^\alpha(t,x_i^\alpha)dx_i^\alpha. \tag{6}$$

Изменение состояния элемента $a_i^\alpha$ происходит в результате взаимодействия с другими элементами (столкновений), либо в результате перемещения в фазовом пространстве (непрерывные изменения — свободное и диффузионное). Если вероятность перехода из состояния $i \in \Gamma^\alpha$ в состояние $j \in \Gamma^\alpha$ за $n$ шагов обозначена, как $Q_{ij}^n = Q(x_{n+1} = j|x_1 = i)$, то уравнение Чепмена-Колмогорова

имеет вид

$$Q_{ij}^{m+n} = \sum_{k\in\Gamma^\alpha} Q_{ik}^m Q_{kj}^n. \tag{7}$$

Если изменения состояния модели $\{a\}$ и вектора состояния происходят в моменты $t$ скачков пуассоновского процесса $\{\nu(\cdot)\}$*, то для любых $s \le t$:

$$\mathbf{P}\{\nu(t) - \nu(s) = k\} = \frac{\lambda^k(X_n)(t-s)^k}{k!} e^{-\lambda(X_n)(t-s)},\ k = 0, 1, 2, ..., \tag{8}$$

где величина $\lambda \ge 0$ — называется параметром пуассоновского процесса. Начальное состояние задается в виде $Q_{ij}^0 = \delta_{ij}$ при $t = 0$, где $\delta$ обозначена дельта–функция, и $< \nu(t) >= \lambda t$ для всех $t \ge 0$.

Плотности переходных вероятностей $q_i^\alpha$ случайных процессов, изменяющих состояние дискретной среды $\{a^\alpha\}$, определяется как

$$Q_i^\alpha(t', \Gamma^\alpha | t, x_i^\alpha) = \int\limits_{\Gamma^\alpha} q_i^\alpha(t', y_i^\alpha | t, x_i^\alpha) dy_i^\alpha.$$

Переходная вероятность для суперпозиции МП, описывающих эволюцию состояния элемента дискретной среды $a_i^\alpha$, может быть записана в виде суммы

$$Q_i^\alpha(t', \Gamma^\alpha | t, x_i^\alpha) = \tilde{Q}_i^\alpha(t', \Gamma^\alpha | t, x_i^\alpha) + \hat{Q}_i^\alpha(t', \Gamma^\alpha | t, x_i^\alpha) + \mathbf{O}(t' - t), \tag{9}$$

где $\hat{Q}_i^\alpha$ отвечает скачкам случайного процесса, а $\tilde{Q}_i^\alpha$ — диффузии в фазовом пространстве $\mathbf{R^N}$. После дифференцирования по конечному моменту времени $t'$ выражения (9) мы получим прямое уравнение Колмогорова для плотности переходной вероятности $q_i^\alpha$ (при выводе учтен вид операторов для скачков и диффузии). Запишем в общем виде уравнение Колмогорова

$$\begin{gathered}\frac{\partial q_n(\tau,\xi|t,x)}{\partial\tau} + \sum_i \frac{\partial}{\partial\xi_i}\left[A_i^{(n)}(t,\xi) q_n(\tau,\xi|t,x)\right] - \\ \frac{1}{2}\sum_{ij}\frac{\partial^2}{\partial\xi_i\partial\xi_j}\left[B_{ij}^{(n)}(t,\xi) q_n(\tau,\xi|t,x)\right] = \\ -\lambda_n(\tau,\xi) q(\tau,\xi|t,x) + \int_{X^\alpha - \{\xi\}} \left.\frac{\partial\Lambda_n(\tau,\eta,\Gamma^\alpha)}{\partial v(\Gamma^\alpha)}\right|_{\xi\in\Gamma^\alpha} q_n(\tau,\eta|t,x).\end{gathered} \tag{10}$$

Здесь $A_i^{(n)}$ — вектор сноса (коэффициент трения), и $B_{ij}^n$ — матрица диффузии, фазовый объем модели обозначен $v(\Gamma^\alpha)$. Левая часть уравнения Колмогорова отвечает вкладу диффузионных случайных процессов, и может быть рассмотрена как его частный случай, в зависимости от числа переменных это формулируется уравнения типа Фоккера–Планка (ФПК, Смолуховского–Крамерса и др.). В

*скалярным процессом Пуассона называется однородный случайный процесс с независимыми приращениями

правой части уравнения (10) присутствует интегро–дифференциальный оператор, зависящий от $(\Lambda)$ и $(\lambda)$, учитывающий вклад в изменение состояния среды скачкообразной составляющей МП (8). Плотности переходной вероятности МП $q_t^\alpha$, входящие в уравнение (10), могут быть определены согласно определению (4.1) модели дискретной среды $a_i^\alpha$ в фазовом объеме $\Gamma^\alpha$.

## 3. Кинетическое уравнение Фоккера-Планка-Колмогорова для процессов диффузионного типа

Кинетическая модель, использующая МП диффузионного типа, ассоциируется с левой частью уравнения (10). Укажем здесь на важные свойства этого уравнения:

$$\begin{cases} \frac{\partial f(X,t)}{\partial t} = -\sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial X_i} a_i(X,t) f(X,t) + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{\partial^2}{\partial X_i \partial X_j} b_{ij}(X,t) f(X,t), \\ f(X,t)|_{t=0} = f_0(X), \\ \oint [a_i(X,t) f(X,t) + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^N \frac{\partial}{\partial X_j} b_{ij} f(X,t)] d\Gamma = 0 \quad i = 1,\ldots,m \end{cases}$$

здесь $\Gamma$ — граница всех возможных значений МП, $a_i(X)$ — вектор сноса, $b_{i,j}(X)$ — положительно определенная, симметрическая матрица диффузии, которые являются функционалами распределений стохастических переменных $X(t)$ и должны быть достаточно гладкими [22].

Входящие в уравнение ФПК функционалы $a_i$ и $b_{ij}$ имеют смысл с.к. (среднеквадратических) пределов $(l.i.m.)$ по времени $\Delta t \to 0$ условного математического ожидания $a$ и условной дисперсии $b$ приращения координат МП

$$\{X(t),\ t \geq 0\}: \quad \Delta X(t) = X(t+\Delta t) - X(t). \tag{11}$$

Коэффициенты сноса $(a_i)$ и диффузии $(b_{ij})$ в одномерном случае имеют вид:

$$a_i = \underset{\Delta t \to 0}{l.i.m.} \frac{1}{\Delta t} \mathbf{E}[X(t+\Delta t) - X(t) \mid X(t) = x], \tag{12}$$

и

$$b_{ij} = \underset{\Delta t \to 0}{l.i.m.} \frac{1}{\Delta t} \mathbf{E}[[X(t+\Delta t) - X(t)]^2 \mid X(t) = x]. \tag{13}$$

Эквивалентное ФПК интегральное представление уравнения Ито:

$$X(t) = X(t_0) + \int_{t_0}^t H(\tau, X(\tau)) d\tau + \int_{t_0}^t \sigma(\tau, X(\tau)) dW(\tau). \tag{14}$$

Функционалы $H(\tau, X(\tau))$ и $\sigma(\tau, X(\tau))$ должны быть ограниченными и гладкими. Они являются неупреждающими функционалами стохастического процесса, что связано со свойствами МП. При этих условиях существование и единственность

решения СДУ Ито доказано. $W(t)$ — стохастический винеровский процесс. Видно, что уравнение Ито содержит детерминированную и стохастическую части, причем последняя содержит приращение случайного винеровского процесса, который не имеет производной в обычном смысле и $dW$ не является дифференциалом в обычном смысле. Проблема вычисления стохастического интеграла, особенно в случае когда $\sigma(\tau, X(\tau))$ нельзя аппроксимировать постоянной величиной, представляет собой самостоятельную проблему, однако тесно связанную со спецификой исходной физической задачи [23]. Более подробно эти вопросы будут рассмотрены в части «Материалов», посвященной примерам [15,24] задач гомогенной и гетерогенной конденсации.

Кинетическое уравнение Фоккера-Планка-Колмогорова

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f(X,t)}{\partial t} = -\sum\limits_{i=1}^{N} \dfrac{\partial}{\partial X_i} a_i(X,t) f(X,t) + \dfrac{1}{2}\sum\limits_{i=1}^{N}\sum\limits_{j=1}^{N} \dfrac{\partial^2}{\partial X_i \partial X_j} b_{ij}(X,t) f(X,t) \\ f(X,t)\big|_{t=0} = f_0(X) \\ \oint \left[ a_i(X,t) f(X,t) + \dfrac{1}{2}\sum\limits_{j=1}^{N} \dfrac{\partial}{\partial X_j} b_{ij} f(X,t) \right] d\Gamma = 0, \qquad i = 1,\ldots m \end{cases}$$

Стохастическое уравнение Ито в форме Стратоновича

$$X(t) = X(t_0) + \int_{t_0}^{t} \underbrace{H(\tau, X(\tau))d\tau}_{drift} + \int_{t_0}^{t} \underbrace{\sigma(\tau, X(\tau))}_{stochastic\ diffusion} dW(\tau),$$

$$X\big|_{t=0} = X_0 \quad t \in [t_0, T_{end}]$$

$$a_i = \underset{\Delta t \to 0}{l.i.m.} \frac{1}{\Delta t} \mathrm{E}\left[ X(t+\Delta t) - X(t) \middle| X(t) = x \right]$$

$$H(E(X),t) = a(E(X),t) - \frac{1}{4}\frac{\partial b(E(X),t)}{\partial X}$$

$$b_{ij} = \underset{\Delta t \to 0}{l.i.m.} \frac{1}{\Delta t} \mathrm{E}\left[ \left[ X(t+\Delta t) - X(t) \right]^2 \middle| X(t) = x \right]$$

$$\sigma(E(X),t) = \sqrt{\frac{1}{q} b(E(X),t)}$$

*Рис. 2.* Сопоставление кинетического и стохастического уравнений, формулы связи функционал–коэффициентов в $1D$ случае, $E(X)$ обозначено математическое ожидание $X$

**3.1. О решении СДУ Ито.** Для решения систем СДУ для модели непрерывного диффузионного МП в последние 20 лет созданы устойчивые численные алгоритмы, связанные с именами Мильштейна Г.Н., Никитина Н.Н., Разевига В.Д., Platen E., Kloeden P.E.. Наиболее эффективным и физичным оказался метод решения СДУ, предложенный и успешно использованный в задачах статисти-

ческой радиотехники, автоматическом управлении, теории надежности и др., где необходимо было строить стационарные случайные процессы с заданными корреляционной функцией и одномерным распределением вероятностей.Численный метод решения систем СДУ с постоянными коэффициентами и заданным законом вероятностного распределения МП был разработан авторами работ (Артемьев, Аверина 1986; Artem'ev, Averina 1997). Решение СДУ строится путем разложения в ряд Тейлора точного решения $x(t + \Delta t)$, удержание членов разложения в ряд определяет порядок аппроксимации решения. Метод имеет ограничение (не выше второго порядка аппроксимации математического ожидания и дисперсии в смысле с.к. сходимости). Он прекрасно зарекомендовал себя в задачах управления и оптимизации движения летательных аппаратов, являясь наиболее удачным с точки зрения устойчивости и сходимости в среднеквадратическом смысле. Потребность в построении таких процессов возникает в задачах математической физики, решаемых методами Монте-Карло (Ермаков С.М., Михайлов Г.А., Некруткин В.В. и др.). Численный метод решения систем СДУ Ито–Стратоновича с функционал–коэффициентами представляет собой модификацию метода Авериной и Артемьева, которую (Зиньковская, 1989; Змиевская, 1996) применили для моделирования неравновесных процессов, возникающих при взаимодействии плазмы с поверхностью, к которым относятся задачи образования заряженных кластеров металла над поверхностью, островов тонких пленок на модифицируемой плазмой поверхности и вакансионно–газовых дефектов решетки твердого тела при внедрении в нее ионов гелия. Более подробно

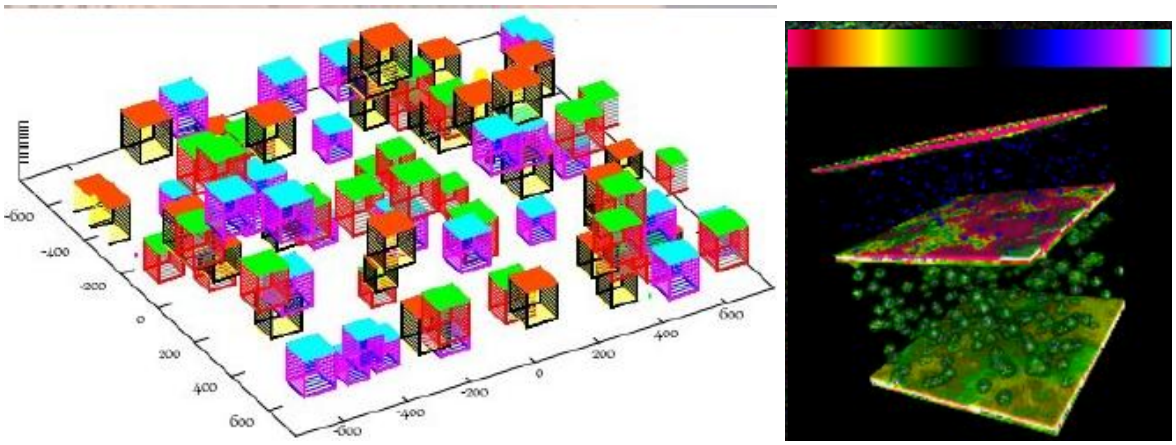


*Рис. 3.* Примеры стохастического моделирования. Слева - островки имплантируемого инертного газа на поверхности решетки металла никеля при заданной температуре образца, энергия ионов 10 кэВ доза облучения $10^{17}$ион/см$^2$. Справа: объемная визуализация потенциала косвенного упругого взаимодействия вакансионно-газовых пор в слоях образца $3C - SiC/Mo$, облучаемого потоком инертного газа $Xe^{++}$, (шкала соответствия цвета и безразмерных величин потенциала сверху). Толщина слоя карбида кремния составляет 0.5 мкм, толщина слоя $Mo$ — 1 мкм.

о решении СДУ методами Эйлера и Авериной Т.А., Артемьева С.С. и модификации методов для включения в метод стохастической молекулярной динамики см. в последней части «Материалов». Численный метод решения СДУ с постоянными коэффициентами и заданным законом вероятностного распределения МП строится путем разложения в ряд Тейлора точного решения $x(t+\Delta t)$, удержание членов разложения в ряд определяет порядок аппроксимации решения. Метод имеет ограничение (не выше второго порядка аппроксимации математического ожидания и дисперсии в смысле с.к. сходимости).

**3.2. Определение плотности переходной вероятности.** Задача определения ФР при решении УМФ при всей внешней схожести используемого математического аппарата, имеет существенные отличия. Прежде всего коэффициенты СДУ являются функционал–коэффициентами, а системы СДУ квазилинейны. Вероятностные распределения не задаются, а ищутся в процессе решения задачи Коши для систем СДУ последовательными приближениями, используя расщепление по физическим процессам и то, что в течение шага по времени коэффициенты уравнения постоянны (задача тем самым сводится к аппарату решения линейных СДУ), в зависимости от схемы расчета по всем траекториям МП находится математическое ожидание искомой стохастической динамической переменной задачи, либо используется плотность переходной вероятности (ФР) в качестве начальных данных, по которым пересчитываются коэффициенты сноса и диффузии в СДУ.

Случайный процесс $\{g(t), 0 \leq t \leq \infty\}$ заменен дискретной ограниченной последовательностью состояний $\{g_n(t)\}$ модели, причем отрезок $[0, T]$ разделен на $n$ частей: $0 = t_0 \leq ... \leq t_n = T$, на каждом отрезке $[t_n, t_{n+1}]$ определяется семейство случайных процессов $\{g_n^i(t)\}$, $i = 1, 2, ..., N_i$, со значениями в $\{G\}$, описываемое уравнениями Ито в форме Стратоновича:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = H(x,t) + \sigma(x,t)\tilde{\xi}(t) + \frac{q}{2}\sigma(x,t)\frac{\partial \sigma(x,t)}{\partial x}, \tag{15}$$

$$x(t=0) = x^0, \tag{16}$$

где $H(x)$ и $\sigma(x(t))$- векторные функции, $\tilde{\xi}$- стандартный «белый шум», $q$- его интенсивность. Вследствие того, что численное решение СДУ не дает в явном виде функцию распределения $f(x,t)$, ее необходимо восстанавливать по полученным реализациям марковского случайного процесса, для чего был разработан специальный алгоритм, описанный ниже.

**3.3. Численный эксперимент, схема расщепления.** Расщепление по физическим процессам является одним из методов решения нестационарных нелинейных кинетических уравнений. Использование схемы расщепления по физическим процессам обеспечивает универсальность кода, взаимозаменяемость

его частей, применимость его к описанию различных явлений взаимодействия плазмы и потоков ионов с твердым телом. Схема расщепления на малом шаге по времени $\Delta^t$ может быть записана в операторном виде:

$$f(g,x,y,z,t)|_{t=t_0+\Delta^t}= \hat{A}^n\hat{A}^{n-1}...\hat{A}^2\hat{A}^1 f(g,x,y,z)|_{t=t_0}$$

для $k$-ого подшага схемы

$$\frac{\partial f^k}{\partial t} = \hat{A}^k(g,x,y,z,t,f^k,...)f^k,$$

$$f^k|_{t=t_0}= f^{k-1}|_{t=t_0+\Delta^t}; t_0 < t < t_0+\Delta^t,$$

где $k = 1,...,n, \hat{A}^k$ — оператор, представляющий какой-либо физический процесс. $f^k$ — «промежуточная» функция распределения. Физический смысл функций распределения в моменты $t_0$ и $t_0+\Delta^t$ имеют лишь функции $f^1|_{t=t_0}$ и $f^n|_{t=t_0+\Delta^t}$. Для достижения второго порядка точности по времени, данная схема обычно центрируется на шаге, или, в более простых случаях, используются схемы с перешагиванием.

- Уточняем дискретную модель среды, включающую в себя: фазовые переменные и набор компонент, потенциалы (сечения) взаимодействия и законы сохранения.
- Формулируем СДУ (2) с учетом (3), коэффициенты (14) выражаем через коэффициенты (12) и (13).
- При заданных начальных условиях, соответствующих физическим параметрам задачи, решаем задачу Коши для полученной системы СДУ, так чтобы при этом порядок аппроксимации в с.к. пределе гарантировал достаточную точность расчетов.
- По траекториям случайного процесса $X_i(t), i = 1,\ldots,N$ рассчитываем математическое ожидание $\mathbf{M} = \frac{1}{N_i}\sum_1^N X_i$, дисперсию $\mathbf{D} = \frac{1}{N_i}\sum_1^N[(X_i - \mathbf{M}X_i)]^2$, а также и более высокие моменты случайного процесса $X(t)$ (Скороход, 1983).
- По траекториям процесса $X(t)$ восстанавливаем $f(\vec{X})$ МП и макроскопические физические параметры исследуемой среды, рассчитываемые интегрированием неравновесных функций распределения $f(\vec{X})$.

## 4. Модель дискретной среды

Рассмотрим модель дискретной среды, которая включает в себя: описание ее элементов и определение фазового пространства, в котором мы определим моделью изменение ее состояния: это могут быть скачкообразное либо диффузионное изменение состояния дискретной среды. Излучательные и плазмохимические превращения с изменением внутренней энергии должны быть описаны в

конечномерном фазовом пространстве, а также должны быть заданы законы изменения его состояния. Вероятностные меры позволяют построить марковский случайный процесс (или суперпозицию процессов), создавая стохастический аналог плазмы многозарядных ионов. Законы сохранения физических величин, изменяющихся в результате столкновений, выполняются при расчете скоростей, импульсов. Выбор пространственно-временных масштабов задачи связан с безразмерной формой записи уравнений математической физики в частных производных. Стохастические дифференциальные уравнения Ито формулируются с учетом соотношений, устанавливающих строгое соответствие коэффициентов уравнений, решаемых численно устойчивыми и эффективными устойчивыми численными методами, алгоритмы позволяют достичь заданной точности, а специально разработанные методики позволяют визуализировать результаты расчетов. В результате реализации численной модели получаем кинетические функции распределения частиц плазмы по скоростям и уровням внутренней энергии изменяющиеся во времени.

**4.1. Модель столкновений в частично ионизованном газе.** В общем случае

1) множество $\{a\}$ частиц (атомов, молекул, и их ионов) может быть представлено различными компонентами, выделение которых зависит от химической природы, заряда и уровня внутренней энергии

$$\{a\} = \{a^\alpha, \alpha = 0, 1, \ldots, M^\alpha\}$$

где $\left\{a^{\alpha=0}\right\}$ — электроны, $\alpha > 0$ — тяжелые частицы, и $M^\alpha$ — число компонент.

2) $\{a\}$ характеризуется конечномерными распределениями $p$ так, что:

$$p_i^\alpha(x_i^\alpha, t), \{\alpha = 0, 1, \ldots, M^\alpha, i = 1, \ldots, m, \ldots\}$$

3) Текущее состояние модели $\{a\}$ характеризуется точкой $X$ в фазовом пространстве $\{\mathbf{R} \times \mathbf{V} \times E^\alpha\}$, $E^\alpha$ обозначает внутреннюю энергию молекулы, $R, V$ - ее координаты и скорость. Пусть

$$\mathbf{X} = (\bigcup_{\alpha=0}^{M_\alpha} \bigcup_{i=1}^{\infty} \mathbf{x}_i^\alpha), i = 1, \ldots, m, \ldots$$

и $\mathbf{x}_i^\alpha$ является дискретным представлением состояния фазового пространства, где

$$\mathbf{x} = \{V_1^\alpha, r_1^\alpha, E_1^\alpha, \ldots, V_{N^\alpha}^\alpha, r_{N^\alpha}^\alpha, E_{N^\alpha}^\alpha, \ldots\}$$

4) Введем меру $\mathbf{S}$, связанную с единичной мерой $\mathbf{I}$, тогда

$$\mathbf{S}^\alpha(t, \Gamma^\alpha) = \sum_{i=1}^{\infty} \mathbf{I}\left(x_i^\alpha(t), \Gamma^\alpha\right), \quad \mathbf{I} = \begin{cases} 1, x_i^\alpha \in \Gamma^\alpha \\ 0, x_i^\alpha \notin \Gamma^\alpha. \end{cases} \tag{17}$$

где $\Gamma^\alpha \subset X^\alpha$ — ряд точек, а $\mathbf{S}(\Gamma^\alpha)$ — точное число элементов дискретной среды $\{a^\alpha\}$ в фазовом объеме $\Gamma^\alpha$ в момент времени $t$.

5) Среднее число элементов, соответствующее определению кинетической функции распределения $\mu_i^\alpha$ может быть определено, как

$$\mu_i^\alpha(\Gamma^\alpha) = \sum_i p_i^\alpha \left\{x_i^\alpha(t) \in \Gamma^\alpha\right\} = \sum_i \int_\alpha p_i^\alpha(x_i^\alpha, t) dx^\alpha.$$

6) Каждый элемент дискретной среды изменяет свое состояние во времени $x^{\Delta t} \to x'$, что может быть описано марковским случайным процессом

$$\left\{X(t), t \geq 0, X(0) = x_0\right\}.$$

7) Реализация численной модели связана с точным числом $N$ элементов дискретной среды, т.е. $\{i\} \ \ \infty \ \to \ N$. В рассматриваемом случае случайная мера $\{\mathbf{X}\}$ в фазовом пространстве определяется точным числом элементов дискретной среды в момент времени $t$ во множестве $\Gamma^\alpha$. Приведенные пояснения позволяют конкретизировать кинетические численные эксперименты, использующие реализации марковских случайных процессов.

## 5. Скачкообразные марковские процессы, модель Каца уравнения Больцмана

Вектор $\vec{X}(t)$ изменяется во времени, создавая последовательность стохастических динамических переменных $\{\vec{X}_n, \quad \tau_n\}$, такую, что

$$x_i^\alpha(t) = X_n^\alpha(\tau_n \leq t \leq \tau_{n+1}).$$

Для простоты рассмотрим модель газа, в единице объема, в котором происходят упругие столкновения (Яницкий, 1973). Напомним, что столкновением называется случайное событие, в результате которого точка $C^\alpha = \{c_1, ..., c_N\}$ мгновенно изменяет свое положение в фазовом пространстве $3N$ измерений.

При определении величины скачка, т.е. значения скоростей после столкновения, например, при изучении динамики столкновений в газе, учитываются инварианты столкновительного процесса (массы, количества движения, полной энергии, момента импульса и др.). Релаксация в газе из $N$ частиц описывается прямым уравнением Колмогорова (или правой частью уравнения (10)):

$$\frac{\partial q_t^\alpha(t, C)}{\partial t} = \frac{1}{v} \sum_{1 \leq i \leq j \leq N} g_{ij} \left[q_t^\alpha(t, C'_{ij}) - q_t^\alpha(t, C)\right] d\sigma_{ij}, \tag{18}$$

где относительная скорость $g_{ij} = |c_i - c_j|$, а дифференциальное сечение упругих столкновений $d\sigma_{ij} = \sigma(g_{ij}, \theta) \sin\theta d\theta d\xi$.

Вектор $C'_{ij} = \{c_1, ..., c_{i-1}, c'_i, c_{i+1}, ..., c_{j-1}, c'_j, c_{j+1}, ..., c_N\}$ — состояние модели после столкновения пары частиц $(c_i, c_j)$, симметричная функция $q_t^\alpha(t, C)$ переменных $c_1, ..., c_N$ является плотностью вероятностного распределения состояния $\{C_{ij}\}$ или ФР в момент времени $t$. Обозначим функцию рассеяния

$$W_{ij} = g_{ij}\sigma(g_{ij}) = 2\pi \int_0^\pi g_{ij}\sigma(g_{ij}, \theta_{ij}) \sin\theta_{ij} d\theta_{ij}$$

и предположим ограниченность $g\sigma(g)$ на любом конечном отрезке $[0, a], a \leq \infty$. Для того, чтобы сформулировать СДУ по точечной мере эквивалентные уравнению (18) следует определить характеристики МП, входящие в уравнение (10), $(\lambda_n - \Lambda_n)$:

1. условная вероятность скачка в фазовом пространстве, изменяющего случайный вектор $X_n$, равна

$$\mathbf{P}(X_n \in dY) = \lambda(dY)/\lambda(\Gamma^\alpha),$$

величина скачка определяется как

$$\mathbf{P}\{X_{n+1}^\alpha \in \Gamma^\alpha | X_0^\alpha, X_n^\alpha\} = \Lambda(X_n^\alpha, \Gamma^\alpha);$$

2. временные интервалы между скачками распределены экспоненциально

$$\mathbf{P}_\pi\{\tau_{n+1} - \tau_n < t | \tau_1 X_1^\alpha, \tau_n X_n^\alpha\} = \exp^{-t\lambda(X_n)}, \tag{19}$$

3. если произошло $\gamma$ столкновений, то

$$\lambda(X_n) = \sum_\gamma \lambda_\gamma(X_n); \tau_\Sigma(X_n) = \{\lambda(X_n)\}^{-1} = \sum_\gamma \tau_\gamma, \quad \mathbf{P}_\pi = \Pi_\gamma \exp\{-t/\tau_\gamma\}.$$

Приближенное решение задачи Коши для уравнения (18) с начальным условием $q_0(C, t = 0) = \lambda_0(p)$ может быть представлено в виде [6]

$$q_t(\tilde{C}) = \int \mathbf{E}\delta(\tilde{C} - \xi_p(t))\lambda_0(p)\, dp,$$

где $\xi_p(0) = p$, а случайные процессы $\{\xi_p(t)\}_{n=1}^N$, выходящие в момент времени $t = 0$ из случайной точки $\{\xi_p(0) = p\}$, — решение системы СДУ по мере Пуассона:

$$\xi_n^\alpha = p + \int_0^t d\tau \hat{A}_n^\alpha \left(\xi_m^{\alpha'}(\tau)\right), \quad m = 1, ..., N_{\alpha'}, \tag{20}$$

здесь $N_{\alpha'}$ — число моделирующих частиц, $\xi_n^\alpha$ — скорость частицы с номером $n$ сорта$\alpha$ в момент $t$, $\hat{A}_n^\alpha(\cdot)$ — стохастический оператор, который строится по исходному уравнению (имеется в виду модель Каца): на основе оператора упругих

столкновений и меры, характеризующей распределение частиц по скоростям, определяется пуассоновская мера $N_1(\xi(s), ds, dC_1{}', dC_1)$, интенсивностью $\mathbf{E}N_1$, а также устанавливается последовательность $n\Delta\tau$, на которые разбивается интервал $[0, T]$, что позволяет для скачков $\Theta_q = \vec{C}(t_q) - \vec{C}(t_{q-1})$, использовать распределение

$$P\{\Theta_q \leq \tau\} = F(\tau) = 1 - \exp\{-\lambda(\vec{C}^{q-1})\tau\}, \tag{21}$$

не зависящее от выбора начала отсчета времени и от пары частиц, реализующих скачок в фазовом пространстве. По случайному числу $R_1$ (из набора равномерно распределенных чисел на интервале $[0, 1]$) определяется $\Theta_q$ из распределения (21),$F(\tau)$, по формуле

$$\Theta_q = -\frac{\ln(1 - R_1)}{\lambda(\vec{C}^{(q-1)})},$$

где $\lambda \equiv \lambda_\Sigma$ из (20), затем может вычисляться $\Delta t_q = \Delta t_{q-1} + \Theta_q$, которому соответствует состояние газа, характеризующееся вектором $\vec{C}'$ в фазовом пространстве скоростей. Заметим, что удачный выбор счетчика времени повышает эффективность решения задач, широко применяется в масштабных расчетах динамики разреженного газа и представляет самостоятельный интерес (Иванов М.С. и Рогазинский С.В., 1988).

**5.1. Вектор состояния многокомпонентной среды сталкивающихся частиц, законы сохранения для дискретной модели $N$ частиц.** Случайные события в частично ионизованном газе или в столкновительной плазме (характерные масштабы системы меньше дебаевского радиуса, определяемого температурой и плотностью многокомпонентной среды) характеризуется вероятностью столкновения любой пары частиц $(i, j)$ из сортов $\alpha, \delta$, или дифференциальным $d\sigma^{\gamma,\delta}_{\alpha,\delta}(g, \theta)$ и полным $\sigma_{ij}(\vec{g})$ сечениями рассеяния частиц при столкновении. Скорости движения частиц до столкновения $C^\alpha_i, C^\beta_j$ и после него $C^\gamma_{i1}, C^\delta_{j1}$ связаны законами сохранения энергии и импульса частиц, участвующих в столкновении.

Численную реализацию стохастической модели можно интерпретировать как метод генерации некоррелированных по числу частиц $N$ и слабокоррелированных по скоростям $\vec{C}$ выборок [7, 17]

$$\left\{\vec{X}^1(t_\alpha), ..., \vec{X}^L(t_\alpha)\right\},$$

где

$$\vec{X}^\gamma(t_\alpha) = \left\{\vec{X}^\gamma_k(t_\alpha), k = 1, ..., M;\right\} \quad \vec{X}^\gamma_k = \left\{N^\gamma_k(t_\alpha); \vec{C}^{k,\gamma}_1(t_\alpha), ..., \vec{C}^{k,\gamma}_{N_k}(t_\alpha)\right\},$$

где $L$ — полное число реализаций численного эксперимента, $N^\gamma_k(t\alpha)$ — число моделирующих частиц $\alpha_k$ компоненты в момент времени $t_\alpha$ в реализации случайного процесса с номером $\gamma, \gamma = 1, ..., L; \alpha = 0, 1, ....$

Если $\xi_k(N_k)$ и $\Psi_k(\vec{C}_k)$ — некоторые функции числа и скоростей частиц $\alpha_k-$й компоненты, то макроскопические характеристики (физические параметры объема плазмы) являются математическими ожиданиями случайных величин и определяются выражениями

$$\xi_k(t_\alpha) = \mathbf{M}\left\{\xi_k\left[N_k(t_\alpha)\right]\right\} = \sum_{N_k=0}^{\infty} \xi_k(N_k) \int d\vec{C}^k \varphi_k(t_\alpha, \vec{X}_k), \tag{22}$$

$$\Psi_k(t_\alpha) = \mathbf{M}\left\{\Psi_k\left[\vec{C}^k(t_\alpha)\right]\right\} = \int d\vec{C}^k \Psi_k(\vec{C}^k)\varphi_k(t_\alpha, \vec{X}_k). \tag{23}$$

Статистическая оценка величин $\xi_k(t_\alpha)$ и $\Psi_k(t_\alpha)$ производится по формулам

$$< \xi_k\left\{N_k(t_\alpha)\right\} >_L = 1/L \sum_{\gamma=1}^{L} \xi_k\left\{N^\gamma_{k(\gamma)}(t_\alpha)\right\}, \tag{24}$$

$$< \Psi_k(\vec{C}^k(t_\alpha)) >_L = 1/L \frac{1}{< N_k(t_\alpha) >_L} \left\{\sum_{\gamma=1}^{L}\sum_{i=1}^{N_k} \Psi_k\left\{\vec{C}^k(t_\alpha)\right\}\right\}. \tag{25}$$

Таким образом по плотности вероятности $\varphi$ случайного процесса $\vec{X}$ вычисляются плотности $n_k$, кинетические температуры$T_k$ и другие характеристики столкновительной среды, а также частоты столкновений $\nu_{kl}$, константы скоростей неупругих процессов и аппроксимационные функции распределения $f_k(t, \vec{C}^k)$.

Так, например, плотность можно вычислить по формуле

$$< n_k(t_\alpha) >_L = n_k(t_0)\left\{1/L \sum_{\gamma=1}^{L} \frac{N^\gamma_k(t_\alpha)}{N^\gamma_k(t_0)}\right\},$$

где $n_k(t) = \int d\vec{C}^k f_k(t, \vec{C}^k)$, а статистические константы скорости неравновесного процесса, задаваемые выражением

$$K_\sigma^{kl\to mn} = \int f_k(t, \vec{C}^k) f_l(t, \vec{C}^l) g^{kl} d\sigma_{kl\to mn} d\vec{C}^k d\vec{C}^l, \tag{26}$$

могут быть рассчитаны как

$$< K_\sigma^{kl\to mn}(t_\alpha) >_L = \frac{A_k(t_\alpha)A_l(t_\alpha)}{L}\{\sum_{\gamma=1}^{L}\sum_{i=1}^{N^\gamma_k}\sum_{j=1}^{N^\gamma_l} g^{kl}_{ij}(t_\alpha)\sigma_{kl\to mn}(g^{kl,\gamma}_{ij})\}, \tag{27}$$

где относительная скорость сталкивающихся частиц равна

$$g^{kl,\gamma}_{ij}(t_\alpha) = |\vec{C}^{l,\gamma}_j(t_\alpha) - \vec{C}^{k,\gamma}_i(t_\alpha)|,$$

причем $A_k(t_\alpha) = \left\{ 1/L \sum\limits_{\gamma=1}^{L} N_k^\gamma(t_\alpha)/v \right\}^{-1}$, здесь $v$ — фазовый объем модели. Состояние системы $\alpha, \delta$ может отличаться от $\gamma, \delta$ значениями внутреннего момента импульса, если происходит изменение состояния возбуждения внутренней энергии. Вероятность того, что после столкновения вектор относительной скорости $\vec{g}'_{i1j1}$ попадет в телесный угол $d\Omega$, определяется в плоскости столкновения углом $\theta =$ между $(\vec{g}_{ij}, \vec{g}'_{i1,j1})$, $|g_{ij} = C_i - C_j|$. Множество таких событий может быть учтено системой кинетических уравнений, сформулированных для частиц сорта $\alpha$ (под которыми понимаем «тяжелые» частицы-ионы) для кинетических функций распределения $f_\alpha$.

## 6. Модель «однородного расширения в вакуум» газа, столкновения и химические реакции

Расширение потоков конденсирующихся паров в соплах уже в настоящее время используется для получения сверхчистых порошков. Образование заряженных металлических капель из продуктов распыления поверхности моделируется в единице объема. Это позволяет рассмотреть дальнейшее развитие модели — охлаждение потока плазмы, в которой образуются жидкие кластеры и возможные процессы кристаллизации, образования стекол и полимеров, фуллеренов и нанотрубок и др. При этом использованы свойства скачкообразных и диффузионных марковских процессов, а также их суперпозиции. Исследования частично ионизованного газа необходимо дополнить информацией о динамике и кинетике процессов за счет уточнения функций распределения частиц по скоростям методами кинетической теории.

Известно, что в потоках плазмы происходят сложные физико–химические процессы, меняющие степень ионизации, а следовательно, и возможный заряд на частицах конденсата, и описание перестает быть адекватным предположению о равновесии в такой среде.

Численный анализ кинетики неравновесных столкновительных процессов методом стохастического моделирования был реализован для ионизационно–рекомбинационных процессов, для столкновительно–излучательных моделей атомарных ионов и двухатомных молекул [24].

Неравновесные процессы в газе и плазме можно описать уравнениями математической физики: уравнением Леонтовича, несомненным достоинством которого является рассмотрение $N$ddefisчастичных функций распределения (в отличие от КФБ, формулируемого изначально для одночастичных функций распределения).

Рассмотрим задачу моделирования, где основную роль играют столкновения, приводящие к химическим реакциям, т.е. в уравнении стохастического аналога (3) мы будем рассматривать пуассоновскую составляющую.

СДУ как объект численного исследования в моделировании столкновительных процессов в разреженном газе впервые были использованы в начале 1980 ddefisx годов при разработке стохастической модели частично ионизованного газа [7], расширяющегося в вакуум [16].

В кинетической теории известно «преобразование Никольского» [27], позволяющее получить оценку решения уравнения Больцмана для модели «однородного расширения в вакуум». Исходная постановка задачи расчета релаксации простого газа с парными столкновениями была модифицирована в модель газа с изменяющимся в результате реакций числом частиц, которые разлетаются с постоянной скоростью, распределяясь в пространстве сферически симметрично.

Рассматривается частично ионизованный газ, множество частиц $\{a\}$ которого разбивается на компоненты $\{a^\alpha, \alpha = 0, 1, \ldots, M^\alpha\}$, где $\alpha = 0$ соответствует свободным электронам, а $\alpha \geq 0$ - частицам с внутренней структурой: детализация внутренней структуры $a^{\alpha \geq 0} = a^{\alpha \geq 0}(\Lambda^\alpha)$ определяется набором квантовых чисел $\Lambda^\alpha = (\lambda_1^\alpha, \ldots, \lambda_{I\alpha}^\alpha)$, задающих формальную химическую структуру, массу, заряд, энергию внутреннего возбуждения и др. ($M^\alpha$ — число компонент, определяемое степенью детализации внутренней структуры).

Частицы газа участвуют в следующих физических процессах:

- однородно разлетаются со скоростью $\vec{u} = \vec{r}/t$, где $t$ и $\vec{r}$ — время и координата;
- испытывают парные и тройные столкновения, сопровождающиеся упругими и неупругими процессами в том числе плазмохимическими реакциями, ионизационными и электрон-ионными рекомбинационными процессами.

В соответствии с физико-вероятностным аналогом однородно расширяющегося многокомпонентного частично ионизованного газа представим системой

$$a_{\alpha_1} + a_{\alpha_2} \to a_{\alpha_3} + a_{\alpha_4},$$

$$a_{\alpha_1} + a_{\alpha_2} \to a_{\alpha_1}^{(+)} + a_{\alpha_2} + a_{\alpha=0}, \qquad a_{\alpha_1},\ a_{\alpha_1}^{(+)} \in (1, 2, ..., M^\alpha), \tag{28}$$

$$a_{\alpha_1} + a_{\alpha_2} + a_{\alpha=0} = a_{\alpha_1}^{(-)} + a_{\alpha_2}, \qquad a_{\alpha_1},\ a_{\alpha_1}^{(-)} \in (1, 2, ..., M^\alpha)$$

соответственно. Выполнив соответствующее преобразование кинетического уравнения, получим, что состояние газа на микроскопическом уровне описания определяется решением следующей задачи Коши

$$\frac{\partial p_i^\alpha(t, \vec{v}_i^\alpha)}{\partial t} = \mathcal{L}_d p_i^\alpha(t, \vec{v}_i^\alpha) + \mathcal{L}_S p_i^\alpha(t, \vec{v}_i^\alpha), \tag{29}$$
$$p_i^\alpha(t = t_0) =^{(O)} p_i^\alpha(\vec{v}_i^\alpha),$$

где величина $t_0$ — начальный момент времени разлета, а $p_i^\alpha(t, \vec{v}_i^\alpha)$ — плотность вероятностного распределения хаотической скорости $\vec{v}_i^\alpha$ частицы $a_i^\alpha$ в момент

времени $t$, (${}^{(O)}p_i^\alpha(\vec{v}_i^\alpha)$ — начальные распределения). Каждое уравнение задачи Коши (29) является следствием прямого уравнения Колмогорова для МП смешанного типа; непрерывной составляющей марковского процесса соответствует оператор

$$\mathcal{L}_d p_i^\alpha(t,\vec{v}_i^\alpha) = \frac{1}{t}\vec{v}_i^\alpha \frac{\partial p_i^\alpha(t,\vec{v}_i^\alpha)}{\partial \vec{v}_i^\alpha} \tag{30}$$

и скачкообразной составляющей — оператор

$$\mathcal{L}_S p_i^\alpha(t,\vec{v}_i^\alpha) = \sum_{\alpha 1, i1, \dots} \left[ {}^{(0)}\mathcal{L}_i^\alpha(p_i^\alpha, p_{i1}^{\alpha 1}, \dots) +^{(+)} \mathcal{L}_i^\alpha(p_i^{\alpha_i}, p_{i1}^{\alpha 1}, \dots) +^{(-)} \mathcal{L}_i^\alpha(p_i^{\alpha_i}, p_{i1}^{\alpha 1}, \dots) \right], \tag{31}$$

компоненты которого отвечают столкновительным процессам парным упругим и неупругим, ионизации и рекомбинации. Физико-вероятностный аналог (стохастическую модель) однородно расширяющегося газа представим системой $N_a(M_\alpha)$ из конечного числа $N_a(M_\alpha) = \sum_{\alpha=0}^{M_\alpha} N^\alpha$ частиц ($N^\alpha$ — число частиц, отвечающее $a^\alpha$–компоненте газа), состояние которой описывается вектором

$$\vec{X} = \bigcup_{\alpha=0}^{M} \vec{X}^\alpha \tag{32}$$

$$\vec{X}_i^\alpha = \{N^\alpha; \vec{v}_1^\alpha, \vec{v}_2^\alpha, \dots, \vec{v}_{N^\alpha}^\alpha\}. \tag{33}$$

Вследствие стохастичности физико-химических процессов в разреженном газе эволюция вектора состояния (33) стохастической модели $N_a(M_\alpha)$ есть случайный процесс $\vec{X}(t)$, относящийся к марковским процессам смешанного типа, так что изменение состояния модели определяется решением задачи Коши для прямого уравнения Колмогорова–Феллера МП $\vec{X}(t)$ смешанного типа

$$\frac{\partial \varphi(t,\vec{X})}{\partial t} = \mathcal{K}_d \varphi(t,\vec{X}) + \mathcal{K}_S \varphi(t,\vec{X}), \qquad \varphi(t=t_0) =^{(O)} \varphi(X), \tag{34}$$

где $\varphi(t,\vec{X})$ — плотность вероятностного распределения состояния $\vec{X}$ в момент времени $t$ (${}^{(O)}\varphi(X)$ — начальное распределение). В (34) оператор $\mathcal{K}_d\varphi$ отвечает непрерывной составляющей случайного процесса $X(t)$ на основе (29)

$$\mathcal{K}_d\ \varphi(t,\vec{X}) = \sum_{\alpha=0}^{M_\alpha} \sum_{i}^{N_\alpha} \frac{1}{t}\vec{v}_i^\alpha \frac{\partial \varphi(t,\vec{X})}{\partial \vec{v}_i^\alpha}, \tag{35}$$

а оператор $\mathcal{K}_S$ — скачкообразной составляющей,

$$\mathcal{K}_S\ \varphi(t,\vec{X}) = \left[ {}^{(0)}\mathcal{K} +^{(+)} \mathcal{K} +^{(-)} \mathcal{K} \right]. \tag{36}$$

Алгоритмическая реализация модели $N_a(M_\alpha)$ основывается на решении уравнения (34) на дискретной сетке времени $\{t_\delta \geq t_0 :\ t_{\delta+1} = t_\delta + \Delta t_\delta, \quad \delta = 0, 1, \dots\}$ методом расщепления операторов непрерывной и скачкообразной составляющих марковского процесса $\vec{X}(t)$, что с другой стороны, соответствует расщеплению по физическим параметрам на бесстолкновительный разлет и пространственно-однородную столкновительную релаксацию.

Монте-Карловский алгоритм реализации вектора состояния модели $\vec{X}(t_\delta)$ на интервале $[t_\delta, t_{\delta+1}]$

$$\vec{X}(t_\delta) \to [[\vec{X}(t_\delta)]^S_{(\Delta t_\delta)}]^d_{(\Delta t_\delta)} = \mathbf{X}(t_{\delta+1}) \tag{37}$$

состоит из следующих этапов:

- пространственно-однородная релаксация вектора состояния $\vec{X}(t_\delta)$, происходящая в результате реализации скачкообразного МП на интервале $[t_\delta, t_{\delta+1}]$ и описываемого СДУ Ито по точечной мере; решение СДУ состоит из розыгрыша последовательности столкновений, по характеристикам которых строится пуассоновская мера, отражающая физико-химические процессы модели (28); далее на основе реализации марковской цепи $\vec{X}^{S(\Delta t_\delta)}$, эквивалентной процессу $\vec{X}(t)$ ($S(\Delta t_\delta)$ — число столкновений за время $\Delta t_\delta$), определяется время ожидания скачка МП и его величина, в итоге эволюция состояния модели за время $\Delta t_\delta$ имеет вид:

$$\mathbf{X}(t_\delta) \to \mathbf{X}^{S(\Delta t_\delta)} = [\mathbf{X}(t_\delta)]^S_{(\Delta t_\delta)}\,, \tag{38}$$

- бесстолкновительный однородный разлет, который моделируется на основе стохастического дифференциального уравнения

$$\frac{d\vec{v}_i^\alpha}{dt} = -\frac{1}{t}\vec{v}_i^\alpha, \qquad \vec{v}_i^\alpha|_{t=t_\delta} = \vec{v}_i^\alpha(t_\delta), \tag{39}$$

  соответствующего непрерывной составляющей процесса $\vec{X}(t)$ на интервале $[t_\delta, t_{\delta+1}]$ и определяемого операторами (30) и (35).

Тогда эволюция состояния модели $N_a(M^\alpha)$ за время $\Delta t_\delta$ вследствие бесстолкновительного однородного разлета определяется соотношениями

$$\vec{X}(t_\delta) \to \vec{X}(t_\delta, d(\Delta t_\delta)) = \left[\vec{X}(t_\delta)\right]_{d(\Delta t_\delta)}\,,$$

$$\vec{X}(t_\delta, d(\Delta t_\delta)) = \bigcup_{\alpha=0}^{M^\alpha} \vec{X}^\alpha(t_\delta, d(\Delta t_\delta)), \tag{40}$$

$$\vec{X}^\alpha(t_\Delta, d(\delta t_\delta)) = [N^\alpha(t_\delta;\ \vec{v}_1^\alpha(t_\delta, d(\Delta t_\delta)), \dots, \vec{v}_{N^\alpha}^\alpha(t_\delta, d(\Delta t_\delta))]\,,$$

где $\vec{v}_i^\alpha(t_\delta, d(\Delta t_\delta)) = \vec{v}_i^\alpha(t_\delta)(t_\delta/t_{\delta+1})$ — решение задачи (39).

Алгоритмическая реализация (40) стохастической модели аппроксимирует решение уравнения (35), а следовательно, и задачи (30) с точностью $\mathcal{O}(\Delta t_\delta + N^{-1})$. На основе статистики, накапливаемой повторением траекторий ${}^{(\beta)}\vec{X}(t),\ \beta = 1, 2, \ldots, B$, можно определить в численном эксперименте макроскопические характеристики газа как монтекарловские оценки моментов распределения $\varphi(t, \vec{X})$ с точностью $O(\Delta t_\delta + (NB)^{-1/2} + N^{-1})$.

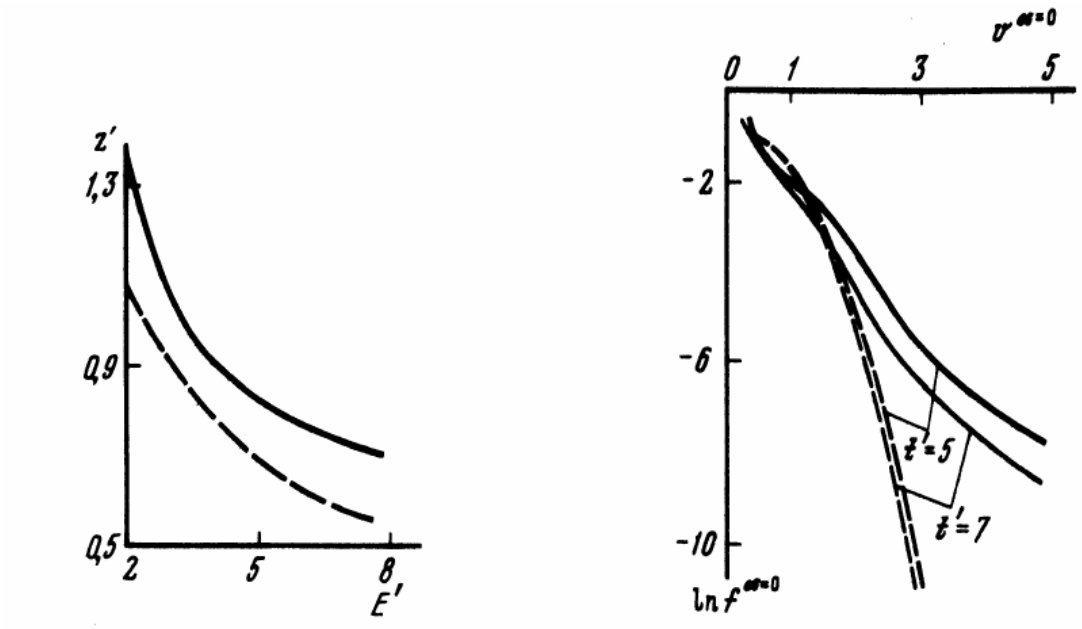


*Рис. 4.* Результаты расчета столкновительной релаксации в однородно расширяющемся сгустке частично ионизованного газа $O$: приведены для сравнения два варианта разлета с постоянной скоростью.

Расчет функций распределения электронов (ФРЭ), впервые осуществленный с помощью стохастического аналога, в модели [16] однородно расширяющегося частично ионизованного атомарного кислорода с потенциалом ионизации равным $E(\alpha \to \alpha^+)$ =13.6 эВ, при скорости разлета $u$, соответствующей температуре электронов в момент времени $t = t_0$, $u \sim \{T_e^0\}^{-1/2}$, позволил определить параметр модели однородного разлета $t^0$ и сравнить остаточную степень ионизации $z' = z/z(t_0)$ расширяющегося газа с атомарными ионами в оптически плотной и тонкой средах для $t' = t/t_0 = 7$ [16]. Отмеченное в расчетах нарушение баланса ионизационно-рекомбинационных процессов в результате охлаждения расширяющегося газа приводит к тому, что в процессах возбуждения и ионизации атомов образуются «сверхтепловые хвосты» ФРЭ по скоростям, которые, в свою очередь, «замораживаются» при дальнейшем разлете газа.

Приведенная схема расщепления по физическим процессам в случае моделирования однородно расширяющихся сред может быть распространена на стохастические модели, объединяющие скачкообразные и диффузионные МП, используя при этом уравнения уравнение Чепмена–Колмогорова. Алгоритмическая реализация модели $N_a(M_\alpha)$ основывается на решении кинетического

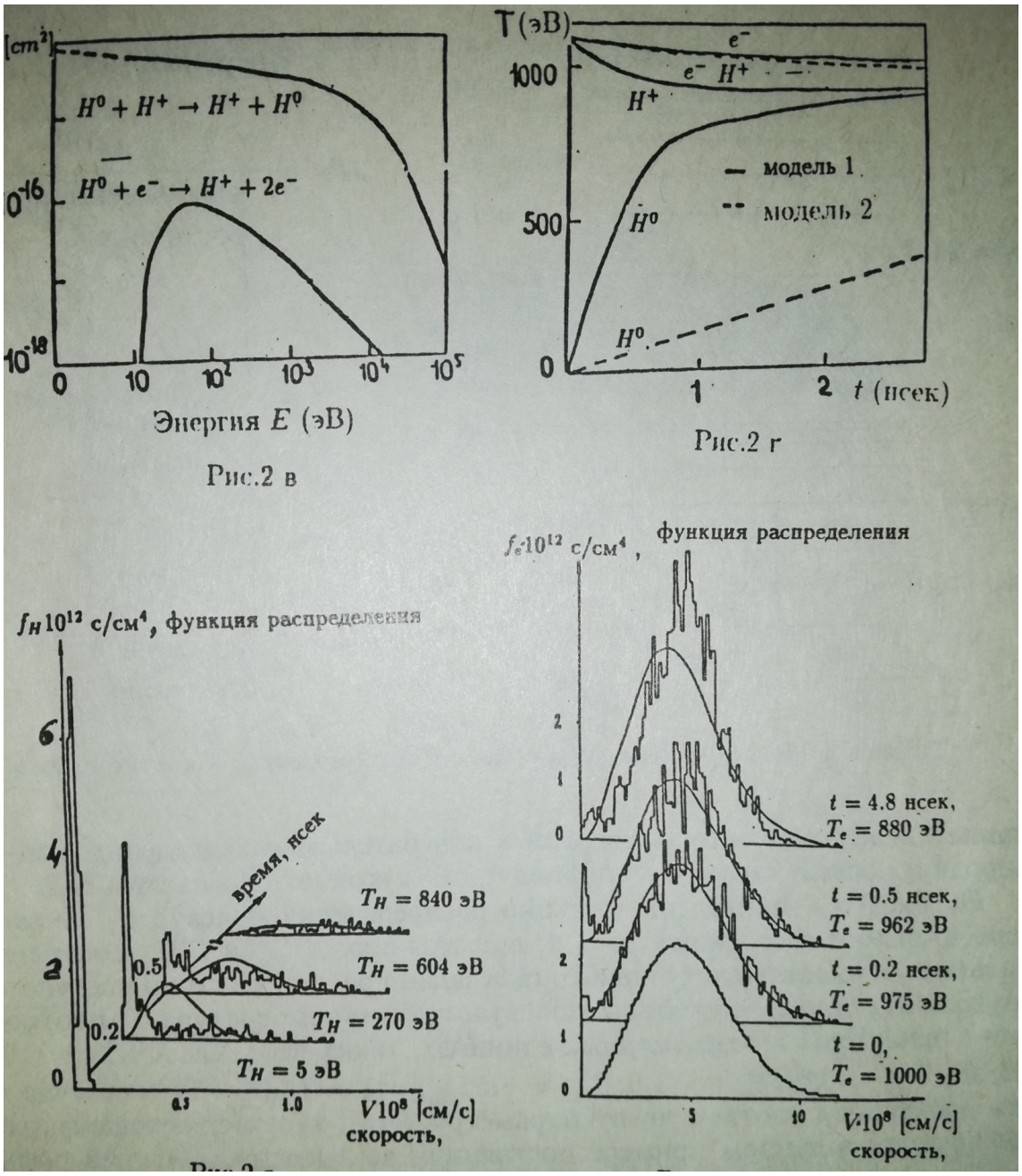


*Рис. 5.* Слева, сверху: сечения ионизации электронным ударом и др. в функции относительной энергии сталкивающихся атомов $H^-, H^0, e^-$. Гистограммы неравновесных ФР атомарного водорода (слева внизу) и электронов (справа внизу), нормированных на соответствующие моментам времени $t = 0.0, 0.2, 0.5, 4.8$ нсек плотности частично ионизованного газа, (справа сверху) изменение температур компонент смеси, сплошная линия соответствует расчету с сечением перезарядки, зависящим от энергии, пунктир соответствует расчету релаксации смеси атомов $H^-, H^0, e^-$, в которой резонансная перезарядка происходит с сечением $\sigma = \pi d_H^2$.

уравнения (34) на дискретной сетке времени $\{t_\delta \geq t_0 : \ t_{\delta+1} = t_\delta + \Delta t_\delta, \quad \delta = 0, 1, \ldots\}$ методом расщепления операторов непрерывной и скачкообразной со-

ставляющих марковского процесса $\vec{X}(t)$, что, с другой стороны, соответствует расщеплению по физическим параметрам на бесстолкновительный разлет и пространственно-однородную столкновительную релаксацию.

**6.1. Модель термализации нейтральных атомов в плазме.** Модель (28) была применена к расчету «релаксации» нейтрального газа $H^0$ «холодного» по отношению к плазме ТЯР. Такая модель рассматривалась в связи с проблемами внесения топлива («замороженной дейтериевой таблетки») в реактор. Было показано, что в течение нескольких нсек происходит нагрев нейтральных частиц плазмой в результате столкновений. Нейтральные частицы не будут удерживаться магнитным полем. На Рис.5. приведены гистограммы одночастичных ФР по скоростям частиц (в размерных ед.) для нейтральных атомов и электронов.

В разреженной химически активной плазме при ее формировании важную роль играет процесс резонансной перезарядки, имеющий для водорода сечение, на порядки большее, чем сечение ионизации, что может обеспечивать выход «горячих нейтралов» в диверторе ТЯР в процессе испарения таблетки. Для оценки эффективности неравновесных быстропротекающих процессов рассматривается две модельные задачи релаксации смеси $H^0, H^-, e^0$, ионы и электроны нагреты до $1keV$, концентрация $n_e(t=0) - n_i(t=0) - 19^{14}$см$^{-3}$, а нейтральная компонента имеет на порядок меньшую плотность $10^{13}$ см$^{-3}$ и $T_{H^0} = 1eV$, число траекторий $N = 4\dot{1}0^3$, модель использует модельные соотношение масс $m_e = 10^{-2}m_i; m_i = 1; m_H = 1,01m_i$. ФР атомарного водорода (на Рис.5. слева, внизу) и электронов (справа), нормированных на соответствующие моментам времени $t = 0.0, 0.2, 0.5, 4.8$ нсек плотности нейтральных и заряженных частиц в единице объема частично ионизованной смеси частиц, сплошной линией обозначены равновесные функции при $T(t), p(t), t = const$, нагрев нейтральных атомов происходит в результате резонансной перезарядки, в смеси частично ионизованного газа (слева), справа изменение температуры компонент смеси (осредненная кинетическая энергия на частицу) для столкновений в смеси с учетом резонансной перезарядки (сплошная линия), заметно появление горячих нейтралов, для сравнения приведена температура компонент, установившаяся в результате столкновительной релаксации смеси, в которой перезарядка происходит с сечением $\sigma = \pi d_H^2$(пунктир). Плотность нейтральной компоненты в расчете (1) уменьшается вдвое за 2 нсек. Скорость нагрева нейтральной компоненты такова, что через 0.5 нсек «горячими» становятся около 60 $\%$ общего числа частиц, Флуктуации в этом расчете связаны с ограничением числа моделирующих частиц ”пропорциональной”схемой решения СДУ. Схемы расчетов скачкообразных МП (включая «весовую» схему) и оценки точности будут приведены в соответствующем разделе «Материалов».

Продолжение Учебно-методических «Материалов» по темам неравновесной стадии фазовых переходов [24], нелинейной динамики осцилляторов [29] и

алгоритмов [25] численного метода стохастической молекулярной динамики готовится к изданию.

## Список литературы


[1] Самарский А.А. Институт математического моделирования: Что такое математическое моделирование Матем. моделирование, 1994, 6:11, 97–112.

[2] Колмогоров А.Н. // Math.Ann., 1931, 104, 415—458.-Русский перевод: Об аналитических методах в теории вероятностей.-Успехи математических наук, 1938, 5, 5—41.

[3] Леонтович М.А.Основные уравнения кинетической теории газов с точки зрения случайных процессов // ЖЭТФ.-1935, т.5, Вып.3-4, сс. 211-231.

[4] K. Ito, Stochastic integral, Proc. Imperial Acad., Tokyo 20 (1944) 519–524.

[5] Сигов Ю.С. «Вычислительный эксперимент: мост между прошлым и будущим физики плазмы. Избр. труды». // Сост. Змиевская Г.И., Левченко В.Д. — М.: Физматлит, НАУКА, 288 стр., 2001.

[6] Арсеньев А.А. Лекции о кинетических уравнениях. — М.:Наука, 1992.

[7] Змиевская Г.И. Численные стохастические модели неравновесных процессов // Математическое моделирование, — 1996, т.8, N11, с.3-40.

[8] Левченко В.Д. Явления самоорганизации в турбулентной плазме:диагностика и примеры. // в книге «Новое в синергетике. Взгляд в третье тысячелетие», Под. ред. Г.Г. Малинецкого. — 2002. М.:Наука. — с.159-185.

[9] Arnold L. «Random dynamic system». Springer Monographs in Mathematics, Springer, - 586 p. 1998.

[10] Климонтович Ю.Л. Нелинейное броуновское движение // УФН, 1994, т.164 N8, с 811-844.

[11] Аверина Т.А. Статистическое моделирование решений стохастических дифференциальных уравнений и систем со случайной структурой. — Новосибирск: Изд-во Сиб. отд-ния Рос. акад. наук,— 349 с., 2019.

[12] Змиевская Г.И., Бондарева А.Л. Кинетика образования пор и изменение свойств материалов в численных моделях. “Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования” т. 10, вып. 4, - С. 802-808, 2016.

[13] Змиевская Г.И. Стохастическая модель зарождения пор при облучении образца ионами инертного газа. «ИЗВЕСТИЯ РАН. Механика твердого тела», 2020 г. №1, С.140-151.

[14] Zmievskaya G.I. Nonequilibrium kinetics of the initial stage of a phase transition. «Physics of the solids», vol.62, pp. 42-47.

[15] Zmievskaya G. I., Bondareva A. L. Crystalline islands of semiconductor films // Plasma Physics Reports. — Vol. 37, no. 1. — P. 87–95, 2011.

[16] Шематович В.И., Змиевская Г.И., Пярнпуу А.А. Стохастическое моделирование однородно расширяющихся разреженных газов // ДАН СССР.-1982, Т.266, N3, С.573-576.

[17] Королёв А.Е., Яницкий В.Е. Прямое статистическое моделирование столкновительной релаксации в смесях газов с большим различием в концентрациях // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 23:3 (1983), 674–680.

[18] Ivanov A. System of monitoring results and algorithms for problems of numerical simulation// Automation and modern technologies 12 (2007), 29–34.

[19] Левченко В.Д. Синхронные параллельные алгоритмы как способ достижения эффективности вычислений: В кн. «Будущее прикладной математики. Лекции для молодых исследователей» // Под ред. Г. Г. Малинецкого. — М.: Едиторал УРСС. 2005. С. 213.

[20] Зельдович Я.Б. К теории образования новой фазы. Кавитация // ЖЭТФ. Т. 12. No 11–12. - С. 525. 1942.

[21] Берд Г.А. Молекулярная газовая динамика. — М.:Мир. пер.с англ.Bird G.A.Molecular Gas Dynamics // Clarendon Press. Oxford, — 1976.

[22] Гихман И.И., Скороход А.В. Стохастические дифференциальные уравнения и их приложения. Киев, Наукова Думка, 1982

[23] Kloeden P.E., Platen E. and Schurz H. Numerical solution of SDE through computer experiment. Springer-Verlag, Berlin, 1994, 292 p.

[24] Змиевская Г.И. Стохастическое моделирование неравновесных процессов.В кн. «Будущее прикладной математики. Лекции для молодых исследователей» // Под. ред. Г.Г. Малинецкого. — М.: Едиторал УРСС. 2008. С. 255.

[25] Артемьев С.С., Корнеев В.Д. Численное решение стохастических дифференциальных уравнений на суперкомпьютерах // Сиб. ЖВМ / РАН. Сиб. отд-ние. —Новосибирск, 2011. —Т. 14, No 1. —С. 5–17.

[26] Змиевская Г.И. Флуктуационная стадия фазового перехода. Энциклопедия низкотемпературной плазмы (Сер. Б). Ред. Фортов В.Е.: Т. VII. Матем. моделирование в низкотемпературной плазме. Кн. 3. Ред. Попов Ю.П. — М.: ЯНУС К, 2009.

[27] Никольский А.А. Простейшие точные решения уравнения Больцмана для движений разреженного газа // ДАН СССР. — 1963, 151, 2, С. 299-301.

[28] Артемьев С.С., Корнеев В.Д. Численное решение стохастических дифференциальных уравнений на суперкомпьютерах // Сиб. ЖВМ / РАН. Сиб. отд-ние. —Новосибирск, 2011. —Т. 14, No 1. —С. 5–17.

[29] Анищенко В.С., Владивасова Т.Е. Лекции по нелинейной динамике: учеб. пособие для вузов. - М.- Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2011.- 516 с.

## Список использованных сокращений

СДУ — стохастическое дифференциальное уравнение
ФПК — уравнение Фоккера–Планка–Колмогорова
КФБ — уравнение Колмогорова–Феллера–Больцмана
ФЭ — уравнение Колмогорова–Фоккера–Эйнштейна
МП — Марковский случайный процесс
ФР — функция распределения частиц (по скоростям, по размерам, по координатам и проч.)
ТЯР — термоядерный реактор
УНТ — углеродные нанотрубки
УТС — управляемый термоядерный синтез

## Содержание

1 Введение: Математическое моделирование и кинетическая теория . 4
2 Марковские случайные процессы, стохастические и кинетические уравнения . . . . . 13
3 Кинетическое уравнение Фоккера-Планка-Колмогорова для процессов диффузионного типа . . . . . 20
4 Модель дискретной среды . . . . . 24
5 Скачкообразные марковские процессы, модель Каца уравнения Больцмана . . . . . 26
6 Модель «однородного расширения в вакуум» газа, столкновения и химические реакции . . . . . 30
Список литературы . . . . . 37