

Секция 1. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ МИГРАЦИИ ПО СИСТЕМЕ ЦЕНТРОВ, ИМЕЮЩИХ ВНУТРЕННИЕ СОСТОЯНИЯ

О.Д. Асенчик (Гомель, Беларусь)

Задача о моделировании совместного движения некоторых агентов по системе центров, которые могут изменять свое состояние в результате взаимодействия с агентом, встречается во многих областях науки и техники. Некоторыми примерами таких задач являются: задача планирования обслуживания стационарных объектов передвижными бригадами, задачи миграции энергии электронного возбуждения по системе насыщающихся многоуровневых центров различной физической, химической или биологической природы (молекулы, ионы, комплексы), задача о переносе электронов (спинов) между узлами упорядоченной или неупорядоченной решетки в твердых телах. Использование для решения этого класса задач методов имитационного моделирования является совершенно адекватным подходом. Однако проведение имитационных испытаний для систем, содержащих большое количество обслуживающих и обслуживаемых элементов, может оказаться очень длительной процедурой. Если требуется решать задачи проектирования новых систем или оптимизации структуры уже существующих, нам представляется более перспективным подход, основанный на адекватной аппроксимации процессов, протекающих в системе, в виде совокупности соответствующих дифференциальных уравнений.

Рассмотрим систему, состоящую из N обслуживаемых центров и M обслуживающих агентов. Будем считать, что выполняется условие $N > M$. Обслуживаемый центр характеризуется тем, что может находиться в одном из трех состояний: "основном" (0), "метастабильном" (1) и "возбужденном" (2). Применительно к случаю обслуживания совокупности объектов передвижными бригадами, основное состояние можно назвать состоянием ожидания обслуживания, метастабильное состояние – состоянием, когда объект не требует обслуживания, и возбужденное состояние – состоянием, когда на объекте находится передвижная бригада и он обслуживается. Для заданного центра возможны переходы $2 \rightarrow 1, 1 \rightarrow 0, 0 \rightarrow 2$. Специфичным является то, что переход $2 \rightarrow 1$ индуцирует появление агента, который перемещается к другому центру, а переход $0 \rightarrow 2$ индуцируются агентом, пришедшим от другого центра. Агент перемещается от центра к центру, при этом он может переходить только на центры, находящиеся в основном состоянии. Таким образом, соседние центры "взаимодействуют" между собой посредством обмена агентами.

Состояние рассматриваемой системы в момент времени t будет описываться вектором

$$(\vec{k}, t) = (k_1(t), k_2(t), \dots, k_N(t)) = (k_1, k_2, \dots, k_N, t),$$

где k_i – номер состояния i -го центра, $k_i = 0, 1, 2, i = \overline{1, N}$. Все множество значений i для заданного вектора \vec{k} разобьем на три подмножества, отличающиеся номером состояния i -го центра: I^0, I^1, I^2 – подмножества номеров центров обслуживания, для которых

$k_i = 0, k_i = 1, k_i = 2$ соответственно. При этом количество элементов в подмножестве I^2 равно M .

В работе показано, что система дифференциальных уравнений (прямых уравнений Колмогорова) для функций $P(\vec{k}, t)$ – вероятностей реализации состояния \vec{k} в момент времени t , будет иметь следующую структуру:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P(\vec{k}, t) = & \sum_{i \in I^0} \left(- \sum_{j \in I^2} u_j^{0,2} w_{j,i} P(\vec{k}, t) + u_i^{1,0} P(\vec{k} + \vec{l}_i, t) \right) + \\ & \sum_{i \in I^1} \left(- u_i^{1,0} P(\vec{k}, t) + \sum_{j \in I^2} u_i^{2,1} w_{i,j} P(\vec{k} + \vec{l}_i - 2\vec{l}_j, t) \right) + \\ & \sum_{i \in I^2} \left(- \sum_{j \in I^1} u_i^{2,1} w_{i,j} P(\vec{k}, t) + \sum_{j \in I^0} u_i^{0,2} w_{j,i} P(\vec{k} - \vec{l}_i + 2\vec{l}_j, t) \right) \end{aligned} \quad (1)$$

с начальными условиями $P(\vec{k}, 0) = \delta_{\vec{k}, \vec{k}_0}$, где \vec{l}_j – вектор той же размерности, что и вектор \vec{k} , у которого j -я компонента равна 1, а все остальные равны 0; $u_i^{q,r}$ – средняя скорость перехода из состояния q в состояние r для i -го центра; $w_{i,j}$ – сетевая матрица, задающая вероятность перехода агента с i -го на j -й центр, $w_{i,i} = 0$; \vec{k}_0 – вектор начального состояния системы.

С ростом N количество уравнений в системе (1), равное $2^{(N-M)} C_N^{(N-M)}$, может стать очень большим. В настоящей работе предложена соответствующая система приближенный уравнений существенно меньшей размерности ($3N$) для вероятности $P_i(q, t)$ нахождения i -го центра в состоянии $q (q = 0, 1, 2)$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P_i(0, t) = & - \sum_{j=1}^N u_j^{0,2} w_{j,i} P_{j,i}(2, 0, t) + u_i^{1,0} P_i(1, t), \\ \frac{d}{dt}P_i(1, t) = & - u_i^{1,0} P_i(1, t) + \sum_{j=1}^N u_i^{2,1} w_{i,j} P_{i,j}(2, 0, t), \\ \sum_{q=0}^2 P_i(q, t) = & 1, \end{aligned} \quad (2)$$

с дополнительным условием $\sum_{i=1}^N P_i(2, t) = M$, где

$$P_i(q, t) = \sum_{\vec{k}} P(\vec{k}, t) \delta(\vec{k} \cdot \vec{l}_i - q), \quad P_{i,j}(q, r, t) = \sum_{\vec{k}} P(\vec{k}, t) \delta(\vec{k} \cdot \vec{l}_i - q) \delta(\vec{k} \cdot \vec{l}_j - r).$$

Система (2) представляет собой начало цепочки "взаимозацепляющихся" уравнений для совместных вероятностей многочастичных состояний. В работе предложен вариант "усечения" этой цепочки:

$$P_{i,j}(q, r, t) = P_i(q, t) P_j(r, t) g_{i,j}(q, r, t), \quad (3)$$

где функция $g_{i,j}(q, r, t)$ получается из решения системы (1) с $N = 2$ и $M = 1$.

Система (2), (3) представляют собой замкнутую систему нелинейных дифференциальных уравнений. Проведен численный анализ точности сделанного приближения путем сравнения решений, получаемых из (2)-(3), с соответствующими решениями, получаемыми из (1).

НЕКОТОРЫЕ КРАЕВЫЕ ЗАДАЧИ МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

С.Н. БАРАНОВСКАЯ, В.И. ЯШКИН (Минск, Беларусь)

Рассматриваются вопросы решения модели элюентной десорбции по Ленгмюру и построения алгоритмов координатных преобразований для аналитического исследования и визуализации в моделях микро- и нанoeлектроники.

1. Задачи, связанные с поверхностью полупроводников, возникают на стыке каталитической химии и физики полупроводников. Технологии полупроводникового приборостроения существенно зависят от свойств поверхности. В свою очередь, одна из важнейших задач химической промышленности – построение модели управления хемосорбционными и каталитическими свойствами поверхности. Будем рассматривать поверхность полупроводников как границу между газовой средой и твердым телом. Из первой среды действуют молекулы газа, а из второй – свободные электроны и дырки. В рамках теории Ленгмюра рассматривается задача кинетики элюентной десорбции.

Ограничивающей стадией кинетики десорбции чаще всего является внутридиффузионный перенос десорбированных молекул по порам сорбента. Рассчитать кинетику десорбции при таком механизме массопереноса можно, используя модель сорбента с бидисперсной структурой, поскольку ранее электронно-микроскопическим методом было установлено, что полисорбы по своему внутреннему строению обладают бидисперсным строением. Для эффективного применения сорбентов необходимы сведения о параметрах процесса регенерации и закономерностях массопереноса при элюентной (от лат. eluete – вымывать) десорбции веществ на этих сорбентах.

В рамках модели [1] сорбента с бидисперсной структурой смешанная задача для уравнения кинетики десорбции в ограниченном объеме в случае линейной изотермы десорбции имеет вид

$$\frac{\partial a(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial c(x, t)}{\partial t} - D_i \Delta u(x, t) = 0,$$

$$a = a_0 + \frac{A}{3\tau_a} \int_0^t [a(r, \xi) - a_0] \varphi\left(\frac{t - \xi}{\tau_a}\right) d\xi,$$

$$a = \Gamma cr^2 \frac{\partial c(r, t)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad c(r, 0) = c_0, \quad a(r, 0) = a_0,$$

где $a(r, t)$, $c(r, t)$ – локальные концентрации вещества соответственно в адсорбированном состоянии и жидкой фазе внутри сорбента; a_0 – начальное количество адсорбированного вещества; c_0 – концентрация адсорбированного вещества в жидкой фазе, соответствующая величине a_0 ; $A/3$ – относительный объем микропористых зон в единице объема частицы; τ_a – время диффузионной релаксации в микропористой зоне, $\tau_a = r_0^2/D_a$; r_0 – радиус микропористой сферической зоны; D_a и D_b – соответственно коэффициенты диффузии десорбирующего вещества в микропорах и транспортных порах (без учета сорбции на стенках транспортных пор).

2. В области теории и моделирования наноструктур за последние годы были получены важные результаты и они в основном связаны с использованием более мощных компьютеров и новых компьютерных программ и в меньшей степени с развитием новых теоретических представлений и моделей. Расширение возможностей вычислительной техники позволило объединить несколько разных подходов (например, методы молекулярной динамики и квантово-механические расчеты) и создать достаточно надежные схемы моделирования наноразмерных объектов. Моделирование с использованием графических возможностей компьютера требует построения математических алгоритмов изображений. При моделировании возникает необходимость перехода из одной системы координат в другую.

В процессе анализа инвариантов излучения применяются теоретико-множественный подход [2, 3]. Поток энергии, проходящий за единицу времени через заданную поверхность, можно представить мерой несчетного множества лучей, пересекающих эту поверхность и выходящих в поле излучения. Частный случай радиационного теплообмена между двумя телами – центрально-симметричные излучающие системы с движущимися относительно друг друга поверхностями. Рассмотрим электромагнитное поле в виде простейшей модели – сферы, расширяющейся со скоростью c относительно своего центра. В каждый момент времени t сфера представляет собой эквипотенциальную поверхность с одинаковым по всей сфере числом радиальных силовых линий. В этом случае по закону Фарадея электродвижущая сила в такой модели определяется отношением ΔN (изменением числа силовых линий N , проходящих через единицу площади) к произведению $c\Delta t$. Запишем уравнение Максвелла для ЭМП при наличии электрона, движущегося со скоростью $u < c$:

$$\operatorname{rot} \vec{H} = \frac{\partial \vec{E}}{\partial(ct)} + \rho \frac{u}{c}, \quad \operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{H}}{\partial(ct)}, \quad \operatorname{div} \vec{E} = \rho.$$

Строятся координатные преобразования для радиус-вектора скорости и времени. Полученные преобразования составляют форму уравнений Максвелла без изменений. Данная методика применена для задач прогнозирования стойкости КМОП ИС к воздействию ионизирующего излучения.

В частном случае получены результаты для модели кинетики релаксационных процессов в предположении о том, что временные характеристики латентной релаксации РИЗ определяются процессом диффузии H_2 . Поскольку времена реакций крекинга и образования поверхностных состояний с участием H_2 намного меньше характерных времен переноса водорода, можно считать [4], что скорости образования поверхностных состояний (N) и отжига положительного заряда p_i определяется мгновенной концентрацией водорода $n(d, t)$ у границы кремний – оксид ($x = d$, где d – расстояние от границы Si-SiO₂ до источника водорода): $\frac{\partial N}{\partial t} = kp_i n(d, t)$, где k – константа реакции. В одномерном приближении для концентрации молекулярного водорода n : $\frac{\partial n}{\partial t} = D_H \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$, где D_H – коэффициент диффузии водорода. Этот коэффициент можно рассматривать как функцию переменной T : $D_H(t) = D_{H0} e^{-\frac{E_a}{kT}}$, $E_a = 0.48$ эВ. Условие образования молекулярного водорода на границе $x = 0$ – $D_H = \frac{\partial n(0, t)}{\partial x} = GP(t)$, где G – поверхностная плотность водорода на единицу поглощенной дозы. При высокой эффективности хемосорбции условие на границе Si-SiO₂ может быть представлено в виде: $-D_H \frac{\partial n(0, t)}{\partial x} = kp_i n(d, t)$.

Литература

1. Фридман Л.Д., Подлеснюк В.В., Марутовский Р.М. *Кинетика элементарной десорбции органических веществ, адсорбированных синтетическими полимерными сорбентами* // Журн. физ. химии. 1990. Т. 64. С. 3118–3121.
2. Лебедев В.А. *Об инвариантности угловых коэффициентов некоторых излучающих систем* // Изв. СО АН СССР. 1979. Серия техн. наук. Вып. 3. С. 73–77.
3. Козлов В.П., Мандрик П.А. *Системы интегральных и дифференциальных уравнений с L-параметром в задачах математической физики и методы идентификации тепловых характеристик*. Минск, 2000.
4. Согоян А.В., Чумаков А.И., Никифоров А.Ю. *Подход к прогнозированию радиационной деградации параметров КМОП ИС с учетом сроков и условий эксплуатации* // Микроэлектроника. 1999. Т. 28. С. 263–275.

О КОМПЬЮТЕРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ПОЖАРОВ, ОБРАБОТКЕ И ВИЗУАЛИЗАЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ

Д.В. Баровик, В.И. Корзюк, В.Б. Таранчук (Минск, Беларусь)

Лесным пожаром называется явление неуправляемого многостадийного горения в открытом пространстве на покрытой лесом площади, когда имеют место взаимосвязанные процессы конвективного и радиационного переноса энергии, нагревания, сушки и пиролиза лесных горючих материалов (ЛГМ), а также горение газообразных и догорание конденсированных продуктов пиролиза ЛГМ. При математическом моделировании пожаров на территории, покрытой лесом, обычно принимают во внимание достаточно большой контрольный объем среды – зону пожара, внутри которой параметры состояния среды в результате обусловленных пожаром физико-химических превращений отличаются от невозмущенных значений, определяемых погодными условиями и типом растительности. Наиболее сильное изменение параметров состояния среды происходит в части зоны, называемой фронтом пожара. При лесных пожарах имеет место эффект задымленности территорий, возможно образование облаков над зоной пожара в результате конденсации водяного пара, образующегося при сгорании ЛГМ. Физико-химические процессы в зоне лесного пожара и тепло- и массоперенос в приземном слое атмосферы включают (см., например, [1, 2]) прогрев, сушку, пиролиз ЛГМ, сгорание продуктов пиролиза; подъем продуктов горения с возможными конденсацией и выпадением осадков, а с другой стороны, с возможными коагуляцией, седиментацией частиц. При математическом описании [1] будем считать, что лес в процессе пожара представляет собой многофазную многоярусную пористо-дисперсную пространственно-неоднородную среду, которая состоит из сухого органического вещества (объемная доля φ_1), воды в жидко-капельном состоянии (φ_2), связанной с этим веществом конденсированного продукта пиролиза (коксика, φ_3), конденсированного продукта горения коксика (пепла, φ_4), газовой фазы (φ_5), дисперсных частиц сажи (φ_6), золы (φ_7), капель воды (φ_8) над очагом лесного пожара. Примем, что элементы ЛГМ (тонкие веточки, хвоинки, листья) имеют одну температуру, а газовая и дисперсная фазы – другую; под влиянием ветра элементы среды колеблются, а эффект колебаний этих элементов (аэроупругость среды) сказывается только на значениях силы сопротивления и коэффициентов тепло- и массообмена элементов ЛГМ с газовой фазой, т. е. среда считается квазитвердой (почти недеформирующейся при порывах ветра). Тепловая энергия, выделившаяся во фрон-