



Физические и математические модели плазмы и плазмоподобных сред

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт
прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук
(Москва)

Физические и математические модели плазмы и плазмоподобных сред

Избранные научные труды сотрудников Федерального
государственного бюджетного учреждения науки Института
прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии
наук -участников Первого Совместного Российско-Итальянского
Семинара «Применение математических и физических моделей
конденсированных сред к сохранению культурных ценностей»

Под редакцией
Джузеппе Майно и Галины Змиевской

Physical and mathematical models of plasma and plasma-like media

Selected scientific works of the M.V. Keldysh Institute of applied
mathematics of Russian Academy of Sciences,
prepared for the First Russian-Italian Joint Seminar on Mathematical and
Physical Models Applications to Condensed Matter and Preservation of
the Cultural Heritage (Italy, Ravenna, 2011)

Edited by Giuseppe Maino (Italy, University of Bologna) and
Galina I. Zmievskaya (Russia, M.V. Keldysh Institute of applied
mathematics of RAS)

Москва, 2012

УДК 533.9, 51-73, 539.216.2

ББК 80

С 23

Сборник научных трудов сотрудников ИПМ им. М.В. Келдыша РАН и аспирантов НОЦ ИПМ «Физические и математические модели плазмы и плазмоподобных сред» (по материалам Первого Совместного Российско-Итальянского Семинара «Применение математических и физических моделей конденсированных сред к сохранению культурных ценностей», прошедшего в рамках 16-ой международной конференции по анализу и обработке изображений ICIAP 2011, Италия, Равенна, 2011). –М: ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 2012. – 110 с. –ISBN 978-5-98354-009-5

Под редакцией Дж. Майно (Италия, Болонский университет, председатель ICIAP 2011) и Г. Змиевской (Россия, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН)

В сборнике трудов представлены результаты актуальных научных исследований в области разработки новых численных методов и эффективных алгоритмов для современных вычислительных средств, а также результатов численных исследований, имеющих важные приложения. Рассмотрены задачи вычислительной нанофизики, такие как изучение свойств многослойных плазмоподобных сред (фотонного кристалла, технологических зеркал и их радиационных повреждений, материалов защитных покрытий), а также численный метод полноволнового прогнозирования результатов поиска полезных ископаемых, кинетическая плазмодинамическая модель оптимизации работы плазменных двигателей космических аппаратов, и др. модели неравновесных сред, которые могут быть использованы в диагностике повреждений объектов культурного наследия и их реставрации, в моделях защитных покрытий и методов их нанесения на поверхности с использованием плазменных потоков. Для научных работников и преподавателей высших учебных заведений.

Сборник научных трудов. – М.: ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 2012. – 110 с.

ISBN 978-5-98354-009-5

Selected scientific collection of articles of scientists and post-graduate students of M.V. Keldysh Institute of applied mathematics of Russian Academy of Sciences «Physical and mathematical models of plasma and plasma-like media» (on materials of the WORKSHOP «First Russian-Italian Joint Seminar on Mathematical and Physical Models Applications to Condensed Matter and Preservation of the Cultural Heritage». On the occasion of the 16th International Conference on Image Analysis and Processing - ICIAP 2011, Italy, Ravenna, 2011). – М: M.V. Keldysh Institute of applied mathematics of RAS, 2012. -110 p.

ISBN 978-5-98354-009-5

Edited by G. Maino (Italy, University of Bologna, chair of ICIAP) and G.I. Zmievskaya (Russia, M.V. Keldysh Institute of applied mathematics of RAS)

This collection of works contains the results of the relevant scientific research in the fields of new numerical methods and effective algorithms for modern computational systems development; as well as the results of numerical experiments with important applications. The computational nano-physics problems such as multilayered media (photonic crystals, technological mirror and their radiation corrosion, protective cover materials) properties investigation are considered, as well as fullwave simulation for the prediction of mineral exploration results, kinetic plasma model of spacecraft plasma engine performance optimization, and other models of unstable media which may be used for cultural heritage objects diagnostics and restoration, in protective coverings models and methods of their application to surfaces with plasma currents. For researchers and higher education institution professors.

© Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, 2012

© Змиевская Г.И., в.н.с. ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

Памяти Юрия Сергеевича Сигова (1934-1999)
и Франческо Премуды (1937-2004)

To memory of Yury Sigov (1934-1999)
and Francesco Premuda (1937-2004)

О сборнике

Сборник посвящен результатам численных экспериментов в области физики плазмы и плазмоподобных сред. Приведены многомерные 3D3V модели кинетики аномального переноса заряда в бесстолкновительной замагниченной плазме канала двигателя Холла и расчеты распространения электромагнитной волны в среде 3D3V со сложным пространственным распределением диэлектрической проницаемости. Решение этих задач стало возможно благодаря созданию новых эффективных скоростных алгоритмов LRnLA (Локально-Рекурсивные нелокально-Асинхронные), которые разработаны для решения задач нанооптики, плазмодинамики и сейсмологии. Вычислительные модели конденсации кристаллических порошков на подложке и вакансионно-газовой пористости, возникающей в кристаллической решетке твердых тел под воздействием радиационных потоков, связаны с созданием тонких пленок карбида кремния. Новые алгоритмы StochAn (Стохастических Аналогов) используют свойства Винеровских случайных процессов, описываемых системами стохастических дифференциальных уравнений Ито и квазилинейными уравнениями математической физики, расчеты проведены для неравновесных фазовых переходов в «открытой» физической системе. Численно решается уравнение Фоккера-Планка, моделирующего динамику невзаимодействующих осцилляторов с различными статистиками. Представленные модели и алгоритмы актуальны в современных приложениях численного прогнозирования результатов поиска полезных ископаемых сейсмоакустическими методами, в оптимизации работы плазменных двигателей космических аппаратов, в задачах вычислительной наноплазмы, таких как изучение свойств многослойных сред фотонного кристалла и повреждений металлических технологических зеркал, численное моделирование может найти применение в диагностике и предупреждении разрушения объектов культурного наследия, в создании новых материалов защитных покрытий и совершенствовании методов их нанесения.

Ключевые слова: Локально-рекурсивные нелокально-асинхронные алгоритмы, плазмодинамика, двигатель Холла, фотонный кристалл, сейсмоакустика, уравнение Колмогорова, стохастические дифференциальные уравнения, нелинейное Броуновское движение, стохастический резонанс, флуктуации, зародышеобразование, фазовый переход, пористость, самоорганизация

About selected scientific works

The collection is devoted to the results of numerical experiments in the field of physics of plasma and plasma-like media. See 3D3V kinetic model of anomalous charge transfer in a magnetized collisionless plasma channel of the engine Hall and calculations of the propagation of the electromagnetic waves in 3D3V environment with a complicated spatial distribution of dielectric permittivity. The solution of these problem has become possible thanks to the creation of new effective and high-speed algorithms LRnLA (Local-Recursive non-Local-Asynchronous), which is developed for the decision of problems of nanooptics, plasma dynamics, and seismology. Computational models of the both: Condensation of crystalline powder on to the substrate and vacancy-gas porosity, resulting in a crystal lattice of solids under the influence of radiation fluxes, connected with the creation of thin films of silicon carbide. New algorithms StochAn (Stochastic Analogues) use the properties of the Wiener random processes described by systems of stochastic differential Ito equations and quasi-linear equations of mathematical physics, the calculations are made for nonequilibrium phase transitions in the «open» physical system. The Fokker-Plank equation for the ensembles of non-interacting oscillators which obey different statistics is simulated numerically. Presented models and algorithms are the most relevant in modern applications of numerical prediction of the results of the search for mineral resources seismoacoustic methods, in optimization of plasma engines spacecraft, in problems of computing Nanophysics, such as the study of the properties of multi-layer media such as: photonic crystal as well as the damaging of metal mirrors, computer simulations methods are able to find application in diagnostics and prevention of the destruction of objects of cultural heritage, in the creation of new materials, protective coatings and improvement of the methods of their application.

Key words: Locally-recursive non-local-asynchronous algorithms, plasma dynamics, the engine Hall, photonic crystal, seismology acoustic, Kolmogorov equation, stochastic differential equations, nonlinear Brownian motion, stochastic resonance, fluctuations, nucleation, phase transition, porosity, self-organization.

Предисловие редактора (Россия)

Настоящий сборник трудов российских участников первого российско-итальянского семинара «Workshop First Russian-Italian Joint Seminar on Mathematical and Physical Models Applications to Condensed Matter and Preservation of the Cultural Heritage», состоявшегося в рамках «16 International Conference on Image Analysis and Processing-ICIAP 2011» в сентябре 2011 года в Равенне (Италия), составлен по материалам докладов участников семинара из России. Статьи сотрудников ИПМ им. М.В. Келдыша РАН и ФГУП ГНЦ РФ «ВНИИгеосистем», выпускников МИФИ, ныне аспирантов ИПМ, а также аспирантов базовой кафедры МФТИ в ИПМ посвящены новым методам и технологиям вычислительного эксперимента и моделям физических процессов. Изучение этих проблем актуально для современных технических и технологических приложений. Полученные результаты могут найти применение в задачах сохранения объектов культурного наследия (http://ec.europa.eu/research/environment/index_en.htm).

Вычислительный эксперимент в физике плазмы как новый раздел науки возник на пересечении математической физики, вычислительной математики и физики плазмы. Настоящий сборник продолжает и развивает труды Ю.С. Сигова [1,2], которые заложили основу дискретных моделей плазмы. На их основе построены кинетические комплексы программ для решения задач умеренной и сильной плазменной турбулентности. Развитие получили также модели плазмopodobных сред (гравитирующие системы, твердотельная и пылевая плазма). Редакторы сборника повятели его памяти Юрия Сергеевича Сигова* и Франческо Премуда**, который в 90-х годах стал инициатором договора между Университетом г. Болонья и нашим институтом. Состоявшийся в 2011 г. Семинар в г. Равенна стал продолжением доброго и плодотворного сотрудничества.

Настоящий сборник объединяет статьи, посвященные современным задачам вычислительной физики. Все представленные в сборнике задачи имеют различные области приложения, такие как плазменный двигатель, фотонный кристалл, многослойные структуры технологических зеркал и дефектообразование в них, численные модели систем осцилляторов с различными статистиками, задачи полноволнового моделирования распространения волн, использующееся в задачах сейсморазведки и поиска

*Ю.С. Сигов(1934-1999), Россия, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, профессор МФТИ, член правления Московского физического общества,
www.space-memorial.narod.ru/astro2/sigov.htm

**Francesco Premuda(1937-2004),Italy, Prof. of Bologna University, member of "International Society of Condensed Matter Nuclear Science" and " Italian Society for Industrial and Applied Mathematics" , CD-book: "Francesco Premuda".- Eds. Margherita Premuda & Paolo Vestrucci : Bologna, 10 Dec. 2009)

полезных ископаемых и др. Но все они объединяются теорией и практикой высокопроизводительных параллельных вычислений на современных компьютерах, а также кинетическим подходом к описанию моделируемых процессов на основе уравнений Максвелла, Власова-Максвелла, Колмогорова-Феллера, Смолуховского, Фоккера-Планка и др. Все работы сборника представляют конкретные количественные результаты средствами современного вычислительного эксперимента. Последние достижения численного эксперимента могут найти приложения в моделировании наносистем, в лазерной физике, нанооптике, материаловедении и в задачах сохранении культурных ценностей. Последняя проблема в настоящее время рассматривается как поле приложения усилий самых разных наук. Возникает потребность в новых материалах для реставрации и в специфических защитных покрытиях, в создании материалов с заданными свойствами. Также большое значение имеет изучение свойств многослойных сред, анализ процессов, вызывающих развитие пористости и разрушений в различных материалах в результате воздействия радиационных потоков, то есть «старение материалов» под действием внешних воздействий. Существует необходимость моделирования наночастиц заданного размера, участие которых в химических процессах восстановления поврежденных фресок уже нашло успешное применение [3]. Изучение физики коллоидных сред и эффективности их использования при реставрации является перспективной вычислительной задачей, подобной моделированию пылевой плазмы и созданию полномасштабных кинетических кодов плазмоподобных сред.

Проблемы диагностики радиационных дефектов в слоистых средах наномасштабных размеров и расчеты формирования зародышей пористости и трещин в кристаллической структуре плазмоподобной среды представлены в статье А.Л. Бондаревой и Г.И. Змиевской. Моделью является суперпозиция случайных процессов, ведущих к флуктуационной неустойчивости фазового перехода (образования пористости). Анализируется самоорганизация дефектов в «открытой физической системе». Те же авторы рассмотрели проблемы формирования наночастиц в плазме разряда и особенности кристаллизации зародышей химического соединения карбида кремния, представляющего интерес и как упрочняющее покрытие, и как полупроводник.

Статья А.Ю. Перепелкиной и В.Д. Левченко посвящена одной из фундаментальных проблем физики плазмы – аномальному переносу заряда в замагниченной плазме двигателя Холла. Описание сложных самосогласованных процессов динамики плазмы ведется без большинства используемых при решении аналогичных задач упрощающих предположений в реальные сроки. Это стало возможным благодаря тому, что авторами разработан многомерный кинетический код для конкретной конфигурации поля и плазмы, характерной для канала плазменного двигателя, применяемого в космической технике. Методики расчета и сложный компьютерный код можно в будущем применить для усовершенствования процессов нанесения покрытий различного назначения с использованием замагниченной плазмы.

Алгоритмы высокопроизводительного программного кинетического комплекса программ **LRnLA/Nano** (Локально- рекурсивный нелокально-асинхронный), разработанные для решения задач большой сложности для многих приложений, включающих задачи физики плазмы и нанофизики, нанооптики и сейсмоакустики, представлены в статье двух авторов: В.Д. Левченко и Т.В. Левченко. В ней дается краткий обзор решенных задач широкого профиля. Приведен пример перспективного и уже реализованного для практических целей расчета одной из задач сейсмоакустики, представляющих интерес для поиска полезных ископаемых, а также показана применимость кода в решении фундаментальных задач физики плазмы.

Статья А.В. Закирова и В.Д. Левченко посвящена моделированию распространения электромагнитных волн в наноматериалах в реальной трехмерной геометрии. Оригинальные алгоритмы позволяют произвести расчеты электромагнитного поля в среде со сложным пространственным распределением диэлектрической проницаемости (характерной для модели фотонного кристалла). Решение таких задач принципиально расширяет возможности конструирования новых метаматериалов и изучения свойств плазмоподобных сред с новыми свойствами.

В работе С.А.Хилкова и А.В. Иванова численно решено уравнение Фоккера-Планка, моделирующее динамику невзаимодействующих осцилляторов, сравниваются результаты расчетов со статистикой Больцмана и Бозе-Эйнштейна. Эта работа представляет большой интерес с фундаментальной точки зрения, на основе исследуемых явлений возможно создание новых типов детекторов.

Объединение статей в сборник призвано расширить представление читателя о современных кинетических моделях сложных явлений в плазме и плазмоподобных средах и дать представление об актуальных эффективных численных методах решения задач нанофизики, сейсмоакустики, плазмодинамики и нанооптики, развивающих технологии современного вычислительного эксперимента.

[1] Ю.С. Сигов *«Вычислительный эксперимент: мост между прошлым и будущим физики плазмы. Избранные труды»* Сост. Г.И. Змиевская, В.Д. Левченко. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001, 288 с.

[2] Дискретное моделирование плазмы / сборник научных трудов ИПМ им. М.В.Келдыша РАН. Под ред. Ю.С. Сигова— М., 1990

[3] P. Baglioni and R. Giorgi; *Soft and Hard Nanomaterials for Restoration and Conservation of Cultural Heritage; Soft Matter*, 2 (2006), pp. 293–303.

Змиевская Г.И.,
в.н.с. ИПМ им.М.В. Келдыша РАН,
оргкомитет ICIAP 2011, Ravenna , Italy, 14-16 September 2011

When Physics and Computer Science meet Art

Atomic and nuclear techniques are mainly used in archaeology and history of art for dating and determining the composition and modifications of materials used in the production of artifacts of particular interest. A close relationship exists between non-destructive multispectral techniques, digital imagery and digital picture processing; in particular, the digital image processing is shown to naturally complete traditional analysis techniques for non-destructive diagnostics of paintings such as radiography and reflectography in identifying the archaeological or artistic objects and the materials from which they are made, their state of repair, technical construction and decoration as well as datation. In particular, physical methods are often used assess fakes or late copies from a lost original. Therefore, fundamental and applied physics, and namely condensed- matter and nuclear physics together, can make noteworthy contributions to conservation education and research, in order to:

- Assess stronger foundations for the scientific approach to conservation;
- define a framework for a possible scientific theory for conserve on;
- understand and measure many natural phenomena and conservation induced effects;
- apply the existing physical techniques in the humanities field and develop new physical methods and instruments specifically for conservation;
- improve conservation methods and strategies.

Aim of the workshop is the promotion of scientific collaboration between our countries in the field of development, application and exploitation of mathematical and physical tools for the humanities and particularly for the study of condensed materials and surface physics in order to provide knowledge and preservation of the cultural heritage, image processing at monitoring of damages by time and ecological factors of objects of architecture and paintings, for archaeological and artistic investigations, for development of computer simulation, mathematical-physical methods for diagnostics and transport-diffusion processes of pollutants, deposition of thin films, applications of plasma and radiations in problems of increase of accuracy of diagnostics of an industrial tomography, etc.

prof. Giuseppe Maino
ENEA Research Director
Professor of Computer Science,
Faculty of Preservation of Cultural Heritage, University of Bologna,
Ravenna Campus

Аннотации статей

Численное моделирование кинетики возникновения пористости в многослойных средах

Г.И. Змиевская, А.Л. Бондарева

Аннотация. Созданы кинетическая и стохастическая модели образования дефектов в многослойных средах при воздействии потока инертного газа на них. Методики моделирования высокотемпературного блистеринга (образования вакансионно-газовых дефектов) в материалах усовершенствованы для расчетов возникновения и развития пористости и напряжений в слоистых средах, учитывая специфику присутствия границ, разделяющих тонкие слои металла и диэлектрика. Практическое применение волокнистой пористости кремния требует учета блистеринга. При решении стохастических дифференциальных уравнений модели блистеринга использована полунейная схема не ниже второго порядка точности в среднеквадратичном. В уравнения входят функционал-коэффициенты, полученные результаты анализируются по схеме перколяции.

Стохастические кинетические модели и алгоритмы в задачах оптимизации нанесения тонких пленок карбида кремния

Г.И. Змиевская, А.Л. Бондарева

Аннотация. В данной работе приводятся примеры численного моделирования образования порошков карбида кремния в плазме разряда и на поверхности субстрата Si(100). Анализируется создание условий для твердофазной эпитаксии пленок карбида кремния на кремниевом субстрате. Результаты могут быть использованы для оптимизации процесса создания покрытий с заданными свойствами, для контроля однородности и скорости нанесения и однородности тонкой пленки.

Кинетическая 3D модель замагниченной плазмы

А.Ю. Перепелкина, В.Д. Левченко

Аннотация. Численное моделирование нелинейных плазменных процессов необходимо во многих актуальных физических задачах. Цель настоящего исследования – это создание нового универсального высокоэффективного кода на основе 3D3V полностью кинетической самосогласованной модели плазмы для решения задач, неразрешимых ранее из-за ограничений вычислительных ресурсов. Одним из поводов для этой работы послужило изучение аномального переноса в канале холловского двигателя. Для этого выбрана полностью кинетическая 3D3V модель без использования распространенных калибровок физических параметров. Предложенная модель реализована в программном комплексе CFhall на основе высокоэффективных локально-рекурсивных нелокально-асинхронных алгоритмов. Проведено тестирование разработанного кода на задаче о распространении плазмы сквозь магнитное поле.

Численное моделирование уравнения Фоккера-Планка для ансамбля невзаимодействующих осцилляторов с различными статистиками

С.А. Хилков, А.В. Иванов

Аннотация. Ансамбли осцилляторов со статистиками Бозе или Ферми описаны с помощью уравнения Фоккера–Планка с нелинейностью в его правой части. Численное решение осуществляется явным монотонным методом конечных объемов с ограничителем. Эффективность метода подтверждается на ряде расчетов, позволяющих сравнить поведение осцилляторов со статистиками Бозе и Больцмана при низких температурах.

Эффективное трехмерное моделирование эволюции электромагнитных волн в актуальных задачах нанооптики

А.В. Закиров, В.Д. Левченко

Аннотация. Предлагается широкофункциональный программный код для моделирования произвольных оптических и электромагнитных устройств и материалов, таких как фотонные кристаллы, метаматериалы (материалы с отрицательным показателем преломления), скрывающие покрытия и другие различные структуры нанометрового масштаба. Код основан на использовании локально-рекурсивных нелокально-асинхронных Алгоритмах, которые позволяют достигать высокой эффективности программы. В данной работе предлагается реализация такого алгоритма для моделирования уравнений Максвелла. Имеется возможность задавать различные граничные условия, в том числе и PML (Perfectly Matched Layer, гран.условия идеально-согласованного слоя). Имеется возможность моделировать широкий набор различных сред (посредством задания различных материальных уравнений): бездисперсионные материалы, материалы с дисперсией, проводники, материалы с отрицательным показателем преломления, анизотропные, гиперболические среды, скрывающие покрытия, материалы с нелинейным откликом на амплитуду электрического и магнитного полей. Предлагаемый код также может быть применен для различной оптической диагностики в исследованиях и изучении культурных ценностей в искусстве и, к примеру, живописи. Таким образом имеется возможность имитировать оптические эксперименты над картинами, рисунками и другими предметами искусства.

Локально-рекурсивные нелокально-асинхронные алгоритмы

В.Д. Левченко, Т.В. Левченко

Аннотация. Статья является кратким обзором истории развития теории и приложений локально-рекурсивных нелокально-асинхронных алгоритмов — нового эффективного инструмента решения вычислительноемких и вычислительносложных задач полномасштабного моделирования физических сред на современных и перспективных компьютерах. Приводятся примеры решённых задач физики плазмы, нанофизики, сейсмологии и ряда других.

Послесловие: новые грани междисциплинарности

Г.Г. Малинецкий

Аннотация. Обсуждается связь моделей современной прикладной математики и междисциплинарных исследований, а также преемственность и традиции моделирования нелинейных процессов, нашедшие место в работах, вошедших в сборник, развивающие современные приложения вычислительной физики.

Abstracts of Papers

Numerical simulation of porosity development kinetics into multy-layer media

G.I. Zmievskaya, A.L. Bondareva

Abstract. Models of interaction between irradiation and multi-layers structures are worked out. In this paper irradiated subtracts are materials which are used in modern devices or will be used in projectable devices such as metal mirror for EUV-lithography. Kinetic and stochastic models of blisters formation in mediums consisting of several layers under influence of ions of inert gas are created. Methods of numerical simulation of high-temperature blistering are improved for simulation of formation and evaluation of porosity and stress in multi-layers structures with the account of internal boundaries between metal/ dielectric. Blistering under influence of chemical active gas is different from blistering under influence of inert gas. In this case, collisions between chemical active gas and pores walls must be taken into account. Simulation of fibrous porosity needs consideration of blistering with cylindrical pores. Half-implicit scheme not less than the second order of accuracy is used for solution of stochastic differential equations of blistering. Stochastic differential equations have functional-coefficients. Results of solution of stochastic differential equations are analyzed with used the scheme of percolation.

Optimization of thin films covers by means of stochastic kinetic models and algorithms development problems

G.I. Zmievskaya, A.L. Bondareva

Abstract. The mathematical model of the first-order phase transition due to fluctuation of thermodynamical parameters presented as system of equations of mathematical physics in partial derivatives of the Kolmogorov-Feller and Einstein-Smolukhovskiy and stochastic differential equations of Ito — Stratonovich. Computer simulation study of the nonlinear stage of nucleation can be used in the powders synthesis and thin films of silicon carbide. Model processes of condensation and crystallization are presented as superposition of Wiener random processes such as stochastic diffusion in phase space cluster sizes of nuclei and spatial their Brownian motion on the surface and in the volume of the substrate. The computations using the effective algorithms for stochastic differential equations with nonlinear coefficients are presented by kinetic functions of distribution clusters of nuclei from size and spatial coordinates for the conditions of numerical experiments, which meet the definition of the "open" physical system.

Fully kinetic 3D model of magnetized plasma

A.Yu. Perepelkina, V.D. Levchenko

Abstract The numerical simulation of plasma processes is essential in many relevant physical problems. The purpose of this study is the development of a novel multipurpose efficient code on the basis of 3D3V fully kinetic model of magnetized plasma in order to provide a solution for the problems, which were impossible to solve previously due to computational limitations. One of the problems in question is

the study of the anomalous transport in the Hall engine channel. For this purpose we choose a fully kinetic model without the popular parameter calibrations. The proposed model is implemented is a new Particle-in-Cell code CFHall with the use of highly effective Locally-Recursive non-Locally asynchronous algorithms. The testing of the code is carried out for the problem of plasma penetration through a magnetic field.

Numerical simulation of Fokker-Plank equation for the assembly of noninteracting oscillators with the Boze statistics

S.A. Khilkov, A.V. Ivanov

Abstract. Ensembles of oscillators which obey Fermi-Dirac and Bose-Einstein statistics is described in terms of the Fokker-Planck equation with non-linearity in it's right-hand side. Numerical solution was obtained by the explicit monotone finite volume method with the limiter. The efficiency of the algorithm is confirmed by a number of calculations, which allow us to compare the behavior of oscillators obeying Bose-Einstein and Boltzmann statistics at low temperatures.

The effective 3D modeling of electromagnetic waves' evolution in actual problems of nanooptics

A.V. Zakirov, V.D. Levchenko

Abstract. We offer the extensive program code for modeling up-to-date artificial optical and electromagnetic devices and materials such as photonic crystals, metamaterials (Left-Handed Materials), streamlined surfaces and other different nanoscale structures. The code is based on the Local-recursive nonlocal-anisochronous algorithm (LRnLA), which makes possible to reach the high rate of program's effectiveness. ``Effective" algorithm means such one, that has real rate coming up to theoretical. In the work the implementation of such algorithm is offered for Maxwell's equations' modeling. In the capacity of difference scheme the Finite-difference time-domain method (FDTD) is used. One may set different boundary conditions, including Perfectly Matched Layer (PML). It is developed the methods for modeling of different media types (by means of different material equations): dispersive and non-dispersive materials, conductors, materials with negative refractive index (Left-Handed Media), anisotropic and hyperbolic media, cloacking devices, nonlinear media. Our code also can be applied for different optical diagnostics in researching and examination of cultural heritage in art and painting. In such way we can simulate optical experiments involving pictures, paintings and other art objects.

Local Recursive non-Local Asynchronous Algorithms

V.D. Levchenko, T.V. Levchenko

Abstract. This paper is a brief story about the theory of Local Recursive non-Local Asynchronous (LRnLA) algorithms - a new efficient tool for solving problems, self-consistent model describing a system of hyperbolic equations, linear and nonlinear, on current and future computers. Features of the algorithm are shown on the

examples of the solution of particular problems of plasma physics, nanophysics, seismic and a number of others.

Afterword: new facets of interdisciplinarity

G.G. Malinetskii

Discusses the relationship models of modern applied mathematics and interdisciplinary research, as well as the continuity and tradition of modeling of non-linear processes, who found a place in the works included in the collection, developing modern applications of computational physics.

Численное моделирование кинетики возникновения пористости в многослойных средах

Г.И. Змиевская, А.Л. Бондарева

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт
прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук

Россия, 125047, Москва, Миусская пл., д.4

zmig@mail.ru, bal310775@yandex.ru

Аннотация. Созданы кинетическая и стохастическая модели образования дефектов в многослойных средах при воздействии потока инертного газа на них. Методики моделирования высокотемпературного блистеринга (образования вакансионно-газовых дефектов) в материалах усовершенствованы для расчетов возникновения и развития пористости и напряжений в слоистых средах, учитывая специфику присутствия границ, разделяющих тонкие слои металла и диэлектрика. Практическое применение волокнистой пористости кремния требует учета блистеринга. При решении стохастических дифференциальных уравнений модели блистеринга использована полуневная схема не ниже второго порядка точности в среднеквадратичном, в уравнения входят функционал-коэффициенты, полученные результаты анализируются по схеме перколяции.

Введение

Образование пористости и следующее за этим возникновение трещин являются одними из основных дефектов объектов культурного наследия, в том числе скульптур. Такие дефекты могут появляться под действием природных и/или антропогенных факторов. Формирование пор и трещин также характерно для различных технологических приборов, находящихся под воздействием агрессивных сред. Примером таких приборов могут служить технологические зеркала, применяемые в EUV-литографии и состоящие из нескольких чередующихся слоев молибдена /Mo/ и кремния /Si/. Разработка оборудования для EUV-литографии развивается весьма бурно. Однако разработка компонентов устройств отстает от ранее намеченного разработчиками графика, до конца не прояснены механизмы и вероятные последствия разрушения составляющих приборов при эксплуатации, в том числе механизмы и последствия разрушения многослойных технологических зеркал. В связи с этим проводятся исследования проблем, которые могут возникнуть при использовании серийных образцов. В том числе исследуется проблема

деградации многослойных технологических зеркал, применяемых для фокусировки глубокого ультрафиолетового излучения (излучения с длиной волны 13 нм). Эти зеркала находятся в среде, содержащей кроме всего прочего ксенон, который может проникать в слои зеркал, накапливаться там, вызывая образование блистеров (вакансионно-газовых образований) и последующее возникновение трещин. В экспериментах [1] было обнаружено формирование гелиевых нанопор в слое аморфного кремния, отмечено линейное упорядочение гелиевых нанопор в направлении падающего по нормали к поверхности образца потока ионов гелия, т.е. вглубь образца. Ранее было обнаружено, что в материалах, имеющих кристаллическую структуру, наблюдается образование цепочек блистеров, перпендикулярных падающему потоку [2-4]. В проведенных численных экспериментах в многослойных средах наблюдается формирование структур дефектов обоих типов: параллельных и перпендикулярных падающему потоку. Численно аналогичные задачи в основном решаются методами молекулярной динамики, либо методами на основе многокомпонентной гидродинамики и химической кинетики. Эти методы имеют существенные ограничения в их обосновании, а также они несовершенны в использовании вычислительных ресурсов. Характерные времена моделируемых процессов в таких приближениях много больше времен, на которых формируются зародыши и реализуются нелинейные механизмы фазовых переходов. При таких подходах затруднено исследование коротких импульсных воздействий. Следовательно, остаются не проясненными вопросы моделирования начальной стадии образования зародышей, когда может быть изучена зависимость процесса зародышеобразования от параметров эксперимента. Тем временем, именно образование зародышей – начальная стадия фазового перехода – во многом является определяющей для всего процесса возникновения и развития пористости и связанных с этим напряжений.

Созданы кинетическая и стохастическая модели образования дефектов при радиационном воздействии на слои металла и диэлектрика [5-22].

Разработаны методики моделирования возникновения и развития пористости и напряжений в слоистых средах, учитывающие специфику высокотемпературного блистеринга (образования в приповерхностном слое твердого тела вакансионно-газовых дефектов – блистеров, при облучении поверхности ионами газов). В качестве первого приближения источник мономеров рассчитывается по максвелловской функции распределения, характеризующей поток нейтрализованных атомов инертного газа. Проведены расчеты с модифицированными граничными условиями, отвечающие специфике переноса блистеров в слоистой среде. Межслойные и внешние границы, а также дефекты решеток типа дислокаций и границ зерен, поры (при рассмотрении пористой среды) являются стоками как для адатомов, так и для блистеров, при этом поток дефектов на нижнюю границу равен нулю. Проведены численные эксперименты с различными функциями проницаемости для блистеров каждой межслойной границы.

Кинетическая и стохастическая модели возникновения пористости

Модифицированная с учетом специфики многослойных сред модель кинетики блистеринга (образования вакансионно-газовых пор при облучении материала ионами газов) позволяет учесть ряд физических факторов неравновесного процесса кластеризации зародышей и их броуновской диффузии в кристаллической решетке и на поверхности, которые ни при термодинамическом моделировании, ни при использовании диффузионной равновесной химической кинетики не исследуются. Речь идет о кинетических функциях распределения /ФР/ дефектов по размерам и координатам в слоях образца, эволюция которых, следующая из вычислительных экспериментов, служит основой для нахождения моментов ФР (макроскопических характеристик, таких как пористость, напряжения, корреляционные функции и др.) на пространственно-временных масштабах развития флуктуационной неустойчивости фазового перехода. На временах флуктуационной стадии фазового перехода 1-ого рода образуются зародыши пор в кремниевом субстрате, структуры зародышей, формируются напряжения, вызывающие появление микротрещин. Разработанная модель блистеринга в многослойной среде и методика численного моделирования этого явления на начальной стадии фазового перехода 1-го рода отражают неравновесные свойства среды при образовании зародышей газовых пузырей при облучении образца потоком инертного газа. В термодинамическом подходе поток вакансий полагается равновесным, в то время как кинетический подход дает возможность учитывать неравновесность процесса порообразования и аморфизации порами слоя металла или диэлектрика. Моделирование ведется с применением кинетической теории зародышеобразования, уравнений математической физики в частных производных (Колмогорова-Феллера и Эйнштейна-Смолуховского), метода стохастического аналога. Модель расширяет возможности анализа причин как образования дефектов, так и создания новых материалов.

Вначале формируется вакансионная пора, которая потом заполняется как вакансиями, так и атомами газа. Причем атомы газа занимают вакансии и через некоторое время начинают преобладать в пузырьке – формируется газонаполненный блистер. Для моделирования изменения размера кластеров и их движения внутри образца используется модель броуновского движения /БД/, блистеры полагаются броуновскими частицами сферической формы и переменной массы. Из-за отличия характерных времен роста блистера (10^{-9} с) и его перемещения внутри образца (10^{-8} с) производится расщепление по физическим процессам и записываются кинетические уравнения для изменения размера блистера (уравнение Колмогорова-Феллера) и его миграции (уравнение Эйнштейна-Смолуховского).

В уравнения математической физики Колмогорова-Феллера и Эйнштейна-Смолуховского входят неравновесные функции распределения, зависящие от размера блистера, его координат в пространстве подложки $\{x, y, z\}$ и времени. Ось z направлена от облучаемой поверхности вглубь образца, оси x, y, z образуют Декартову систему координат. При записи кинетических

уравнений используются линейные операторы типа Фоккера-Планка, но нелинейные коэффициенты уравнений зависят от функции распределения блистеров, т.е. являются функционал-коэффициентами, делая решаемые уравнения квазилинейными.

Уравнение Колмогорова-Феллера для эволюции размера блистера в точке с координатой $\vec{r}$ имеет вид:

$$\partial f_r(g,t)/\partial t = \partial \left(D_g(g,t) \cdot \left(\partial f_r(g,t) / \partial g \right) \right) / \partial g + \frac{1}{kT} \partial \left(D_g(g,t) f_r(g,t) \cdot (\partial \Delta \Phi(g, \vec{r}, t) / \partial g) \right) / \partial g + S_\alpha - Q, \quad (1)$$

$$f_r(g,0) = f_{0g}, \quad df_r(g,t)/dg|_{g=2}=0, \quad f_r(g,t)|_{g<2}=0, \quad g>2$$

Уравнение Эйнштейна-Смолуховского для перемещения броуновской частицы с массой M_g , полученной из уравнения (1) записывается в виде:

$$\partial f_g(\vec{r},t)/\partial t = \partial \left[D_r(\vec{r},t) \cdot \left(\partial f_g(\vec{r},t) \right) / \partial \vec{r} \right] / \partial \vec{r} - \partial \left[f_g(\vec{r},t) \cdot \vec{F}(\vec{r},t) / (M_g \gamma) \right] / \partial \vec{r},$$

$$f_g(\vec{r},t)|_{t=0} = f_{0r}, \quad (2)$$

$$f_g(\vec{r},t)|_{x=x_{\text{left}}} = f_g(\vec{r},t)|_{x=x_{\text{right}}}, \quad f_g(\vec{r},t)|_{y=y_{\text{left}}} = f_g(\vec{r},t)|_{y=y_{\text{right}}},$$

здесь в (1) $S_\alpha(f_\alpha)$ – источник частиц, формирующих зародыш, f_α ФР мономеров газа и/или вакансий, $f_r(g,t)$ ФР зародышей по размерам в точке $\vec{r}$ объема решетки, g – размер блистера, измеряемый в единичных несжимаемых объемах атомов гелия и объемах свободных вакансий. Коэффициент диффузии в фазовом пространстве размеров зародышей $D_g = D_{g0} g^{2/3}$, а $\Delta \Phi(g, \vec{r}, t)$ – термодинамический потенциал образования зародыша. ФР БЧ с массой M_g по координатам кристаллической решетки обозначена в (2) $f_g(\vec{r}, t)$, где $\vec{r}$ –

радиус-вектор кластера в ортогональной системе координат ($r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$) в расчетной области следующего вида: $400a_{Si} \times 400a_{Si} \times (100a_{Si} + 30a_{Mo})$, где a_{Si} – параметр решетки Si , a_{Mo} – параметр решетки Mo .

Движение блистеров внутри решеток слоев происходит под действием самосогласованного потенциала косвенного упругого взаимодействия блистеров между собой с границами и дефектами решеток типа дислокаций, границ зерен и пор для пористой среды. В уравнении (2) $F_x = -\frac{\partial U(x, y, z)}{\partial x}$, где

$U(x,y,z)$ — потенциал взаимодействия блистеров между собой, с границами и дефектами решеток и пор для пористой среды [23-26]. Потенциал дальнегодействующий, знакопеременный, реализующийся через возмущение акустических фононов решеток обоих слоев и через фриделевские осцилляции электронной плотности, которые в случае сферической поверхности Ферми зависят от фермиевского импульса электронов, плотности их состояний на поверхности Ферми, и др. Такое взаимодействие является косвенным, его зависимость от взаимного расположения центров масс дефектов выводится в предположении слабой анизотропии решетки, в которой происходит кластеризация дефектов. Взаимодействие блистер-блистер, так же как

взаимодействие блистер-пора, рассматривается только внутри каждого слоя; взаимодействием между блистерами, расположенными в разных слоях, пренебрегается. По x и y используются периодические граничные условия на ФР и потенциал взаимодействия блистеров друг с другом в материалах решеток; на нижней необлучаемой границе реализуется условие $\Phi_R = 0$. При этом межслойные и внешние границы, а также дефекты решеток типа дислокаций и границ зерен, поры (при рассмотрении пористой среды) являются стоками как для адатомов, так и для блистеров. В численном эксперименте задается функция проницаемости для блистеров каждой межслойной границы. В качестве первого приближения источник мономеров рассчитывается по максвелловской функции распределения, характеризующей поток нейтрализованных атомов инертного газа.

При рассмотрении вакансионно-газовых пор энергия Гиббса образования зародыша записывается в виде:

$$\Delta\Phi = \Delta\Phi_{\text{ваканс}} + \Delta\Phi_{\text{газ}},$$

$$\Delta\Phi_{\text{ваканс}} = -(a_g - c_g)g_g + b_g g_g^{2/3} + \Delta\Phi_{r_g}, \quad (3)$$

$$\Delta\Phi_{\text{газ}} = -(a_z - c_z)g_z + b_z g_z^{2/3} + \Delta\Phi_{r_z}$$

здесь $a = \eta_a(\chi_\beta - \chi_\alpha)$, $(\chi_\beta - \chi_\alpha)$ — разность химических потенциалов фаз, η_a —

фактор формы, равный $\frac{2\pi}{3V_{\text{ваканс}}}$ для вакансий и $\frac{2\pi}{3V_{\text{газ}}}$ для газовой компоненты (здесь и далее $V_{\text{ваканс}}$ — объем вакансии и $V_{\text{газ}}$ — объем на атом газовой фазы).

Коэффициент $b = b_0(1 - 1/3 \cdot g^{-1/3})$, $b_0 = (36\pi)^{1/3} V^{2/3} \sigma_{\text{bl}}$ позволяет учесть сферичность поверхности блистера для малых блистеров, здесь V — объем вакансии или объем на атом газовой фазы соответственно, σ_{bl} — поверхностное натяжение на границе “вакансионно-газовый пузырек – решетка”, c — упругая реакция решетки на образование зародыша. Следует учесть, что c для кремния из-за хрупкости материала меньше c для металлов.

При достижении энергии Гиббса, необходимой для разрыва всех 14 связей одного атома в решетке Si , т.е. при выполнении условия $\frac{\Delta\Phi}{\Delta\Phi_{\text{разр}}} = k$, где k — целое

число, $k \geq 1$, происходит разрыв решетки, и объем блистера изменяется следующим образом: $V_{\text{блистер}} = V_{\text{блистер}} + 14 \cdot V_{\text{ваканс}}$, т.е. объем блистера увеличивается на объем вакансий, образовавшихся при разрывах связей. При разрыве связей скачкообразно уменьшается давление внутри блистера. В расчетах предполагается, что внутри кристалла энергии связей следующие: $Si-C$ 241 кДж/моль, $Si-Si$ 189 кДж/моль, т.е. $\Delta\Phi_{\text{разр}} = 3.01 \cdot 10^6$ Дж/моль.

$$\Delta\Phi_r = \Psi_r (k_x \cos(2\pi(x - \varphi_x)) + k_y \cos(2\pi(y - \varphi_y)) + k_z \cos(2\pi(z - \varphi_z))) \quad (4)$$

где $k_x, k_y, k_z, \varphi_x, \varphi_y, \varphi_z$ — факторы решетки, Ψ_r — модельный параметр.

Стохастический аналог может быть записан в виде

$$X = X_0 + \underbrace{\int_{t_0}^t H(X, \tau) d\tau}_{\text{снос}} + \underbrace{\int_{t_0}^t \sigma(X, \tau) dW(\tau)}_{\text{диффузия}} + X_{coll} \quad (5)$$

$$X|_{t=0} = X_0 = X(t=0), \quad t \in [t_0, T_{\text{finish}}],$$

где X – случайный процесс, $dW(t)$ – приращение винеровского случайного процесса, X_{coll} следует учитывать при рассмотрении химических превращений, когда используются уравнения Ито по точечной мере [5, 27, 28]. Равновесные химические реакции учитываются в модели путем включения их в термодинамический потенциал (свободную энергию Гиббса), входящий в уравнение Колмогорова-Феллера, аддитивно, с помощью составляющей, зависящей от констант химических реакций и площади поверхности блистера, а также введением зависимости всех остальных частей энергии Гиббса от концентраций составляющих, изменяющихся в процессе химической реакции.

Полученная система взаимосвязанных стохастических дифференциальных уравнений с функционал-коэффициентами решается модифицированным на квазилинейных случаях численным методом решения линейных СДУ с постоянными коэффициентами, т.е. используется полунейная схема не ниже второго порядка точности в среднеквадратичном решении системы взаимосвязанных стохастических дифференциальных уравнений с функционал-коэффициентами [29].

Разработана модель образования дефектов, принимающих форму волокон, для слоя диэлектрика, основанная на образовании из блистеров протяженных структур дефектов. Проведен анализ локальных напряжений в слоях вследствие развития блистеринга. В примерах расчета образования волокнистой пористости кремния использована схема перколяционного анализа для выявления протяженных структур дефектов. Точность перколяционного анализа составляет 1/4 среднего размера поры, характерной при данных физических параметрах. В результате объединения блистеров в протяженные структуры зародышей и формирования напряжений появляются микротрещины, которые потом могут быть заполнены различными продуктами химических соединений, например, карбидом кремния при помещении образца в среду, содержащую газ CO в результате химической реакции $2Si + CO \leftrightarrow SiC + SiO$ субстрата Si с угарным газом CO [30]. В водородосодержащей среде возможны образования силанов и соединения молибдена с водородом.

Полученные результаты и их обсуждение

Расчеты проведены в предположении отсутствия диффузии и реакций на границе, как если бы был нанесен мономолекулярный слой полиамида или др. пленка, через которую проходят только мономеры газа.

Основными результатами численных экспериментов являются:

1. Обнаружена самоорганизация блистеров, подчиняющаяся следующим положениям для стохастических динамических систем: открытости физической системы, стохастическому описанию движения частиц в дальнодействующем потенциале взаимодействия. Эффект проявляется в образовании структур дефектов. Вначале эти структуры перпендикулярны падающему потоку, а по мере аморфизации кристаллического кремния и образования пористости в *Si*, увеличивается глубина проникновения кластеров дефектов и возникают структуры дефектов параллельные падающему потоку. При планируемой далее обработке углеродосодержащим газом структуры дефектов будут заполняться карбидом кремния. Площадь поверхности волокнистых пор в образце кремния размером $1.9 \cdot 10^{-22} \text{ м}^3$ за время 10^{-4} с достигает 10^{-14} м^2 , а объем волокнистых пор – 10^{-23} м^3 .

2. Длина протяженных структур дефектов, параллельных падающему потоку, достигает $30 \div 35 \text{ нм}$ с предполагаемым раскрытием структуры около 10 нм (рис.1).

Рис. 2 иллюстрирует образование протяженных структур дефектов, параллельных и перпендикулярных падающему потоку, при температуре образца 900 К , доза облучения – 10^{16} ион/см^2 , энергия ионов ксенона – 5 кэВ . Число траекторий – 10^6 , длительность – 10^{-4} с . Толщина слоя *Mo* 94 Å , толщина слоя *Si* 543 Å .

На сечении двухслойного образца *Mo/Si* по границе раздела между *Mo* и *Si* (рис.2) наблюдается повышенная плотность дефектов: зеленым изображен бездефектный *Si*, черным – вакансионно-газовые поры. Температура 900 К и доза облучения 10^{16} ион/см^2 , энергия ионов ксенона 5 кэВ , число траекторий 10^6 . Толщина слоя *Mo* 94 Å , толщина слоя *Si* 543 Å . Как видно из рис. 2 при дальнейшем развитии блистеринга произойдет флекинг, т.е. отшелушивание верхнего слоя *Mo*.

3. Давление в вакансионно-газовых порах и в протяженных структурах дефектов может достигать значений 10^8 (при дозе облучения 10^{15} ион/см^2) $\div 10^{12} \text{ Па}$ (доза облучения 10^{17} ион/см^2). Как видно из представленных результатов (рис.2 и 3), максимум напряжения, так же как и максимум пористости, при температурах ниже 1000 К расположены в *Si* чуть ниже границы раздела *Mo/Si*, и основные напряжения лежат в плоскости, параллельной границе раздела *Mo/Si*. Напряжения, формирующиеся за время 10^{-4} с , наблюдаются в *Mo* от границы раздела слоев практически до облучаемой границы, а также в *Si* от границы раздела слоев до глубины $35\text{--}45 \text{ нм}$. Карта равных значений напряжений, создаваемых блистерами в некотором слое образца, приведена на рис.3 для температуры образца 900 К , дозы облучения 10^{16} ион/см^2 , энергии ионов ксенона 5 кэВ . Число траекторий 10^6 . Шкала соответствия цвета и значений приведена в правой части рисунка.

4. Зависимость длины протяженных структур дефектов от температуры образца носит нелинейный характер. Максимальная длина структур дефектов, параллельных падающему потоку, достигается при температуре ≈ 0.53 температуры плавления субстрата (кремния).
5. Выявлена нелинейная зависимость локализации протяженных структур дефектов от температуры. При увеличении температуры образца максимумы пористости и напряжений смещаются к границе раздела *Mo/Si*, где нарастает плотность дефектов, что наблюдается экспериментально. Так при уменьшении или увеличении температуры относительно приведенной выше (900 К для рис. 1) наблюдается уменьшение длины протяженных структур дефектов, параллельных падающему потоку. Причем при уменьшении температуры до 700 К максимум пористости наблюдается в *Si* чуть ниже границы раздела *Mo/Si*. Основная локализация протяженных структур дефектов при увеличении температуры до 1000 К наблюдается на границе раздела *Mo/Si*, а ширина пористого слоя достигает 30 нм. Рис. 4 и рис. 5 иллюстрируют смещение максимума пористости при увеличении температуры, рис. 6 – карта равных значений напряжений, создаваемых блистерами в некотором слое образца при температуре 1000 К. Рассматривался двухслойный образец *Mo/Si* с толщиной слоя *Mo* 94 Å, толщиной слоя *Si* 543 Å. Для всех рисунков энергия ионов ксенона 5 кэВ, доза облучения 10^{16} ион/см², число траекторий 10^6 , но для рис.4 температура 700 К, а для рис. 5,6 температура 1000 К.
6. При недостаточной дозе облучения не наблюдается образования протяженных структур дефектов, в то время как при увеличении дозы увеличивается плотность и протяженность таких структур. Рис. 7 и рис. 8 иллюстрируют этот вывод. Для обоих рисунков температура образца 1000 К, энергия ионов ксенона 5 кэВ, число траекторий 10^6 , длительность стадии 10^{-4} с. Однако для рис. 7 доза облучения 10^{15} ион/см², и не наблюдается образование структур, хотя блистеры образуются. Для рис. 8 доза облучения 10^{17} ион/см², и наблюдается большая плотность протяженных структур дефектов, притом сами структуры становятся протяженнее.
7. Образование шероховатости поверхности раздела *Mo/Si* после отшелушивания слоя *Mo* в результате блистеринга может быть использовано в качестве исходных данных в модели создания покрытий карбида кремния (при облучении поверхности смесью газов, содержащих CO) в присутствии наноразмерных металлических катализаторов *Mo*, оставшихся на поверхности *Si* после флехинга.

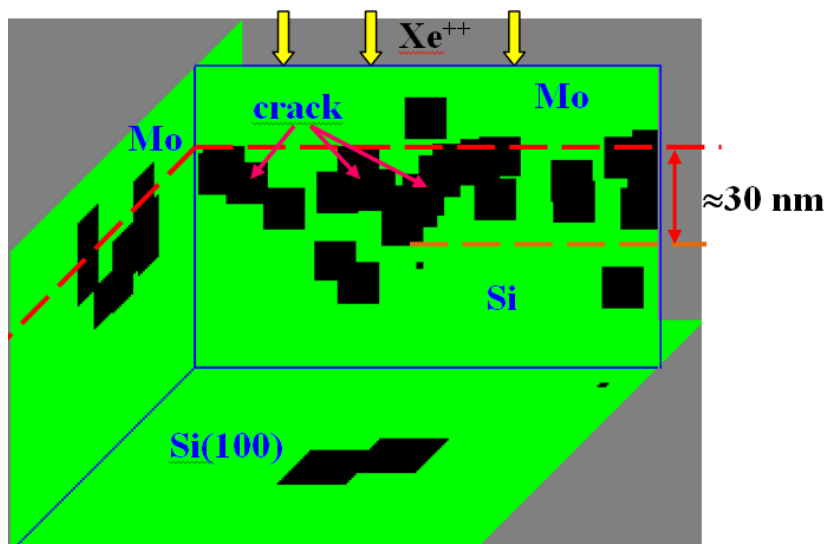


Рис.1. Иллюстрация образования вакансионно-газовых пузырей – блистеров, и образования протяженных структур дефектов. Черный цвет соответствует вакансионно- газовым дефектам, зеленый – материалу без дефектов

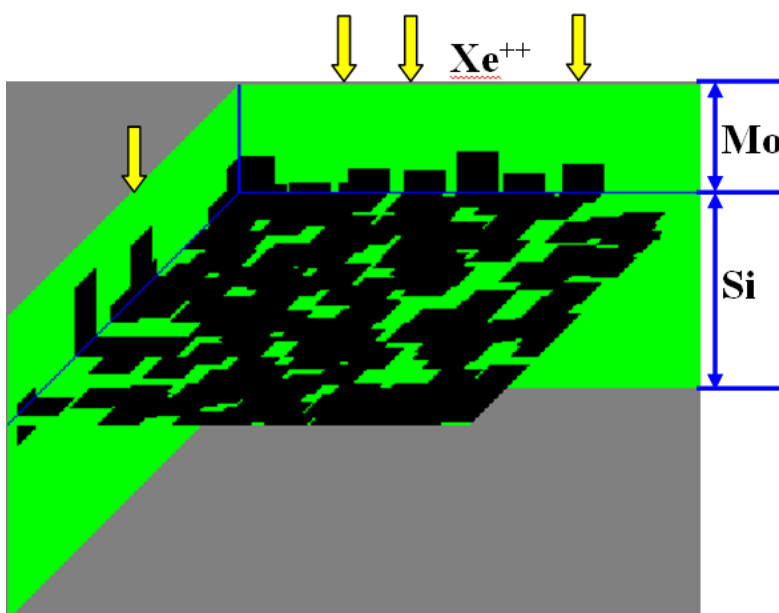


Рис.2. Иллюстрация образования вакансионно-газовых пузырей – блистеров, на границе раздела Mo/Si и возможности дальнейшего флекинга слоя Mo . Черный цвет соответствует вакансионно-газовым дефектам, зеленый – материалу без дефектов

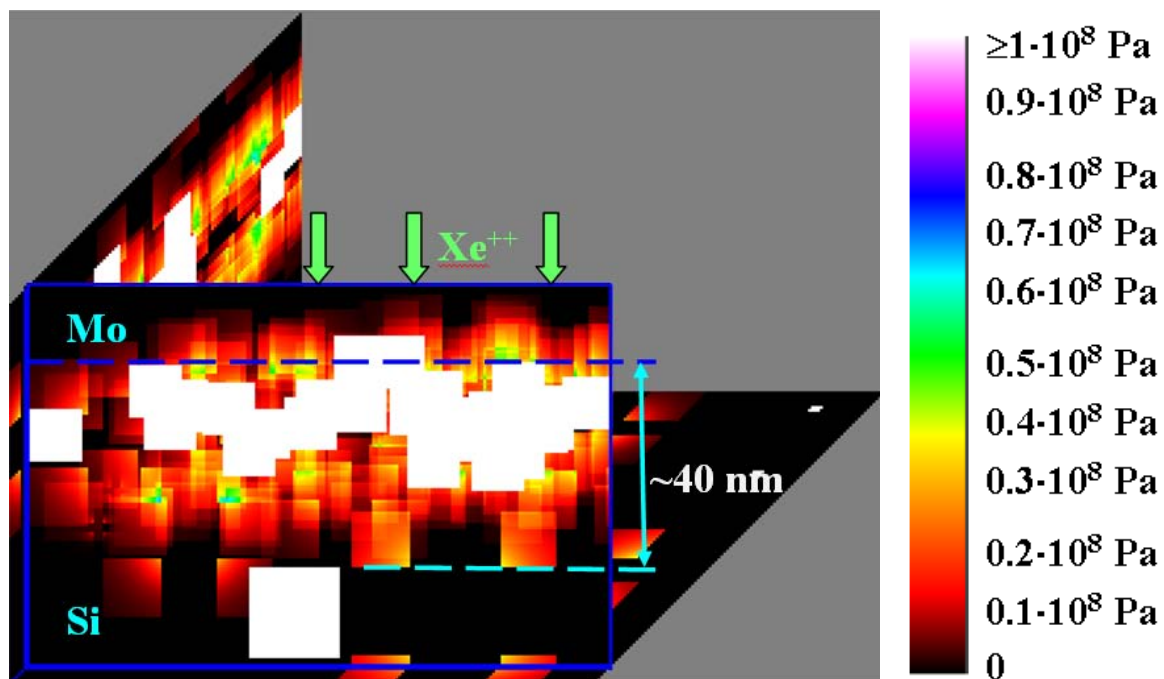


Рис.3. Карта равных значений напряжений, создаваемых блистерами в некотором слое образца. Шкала соответствия цвета и значений приведена в правой части рисунка

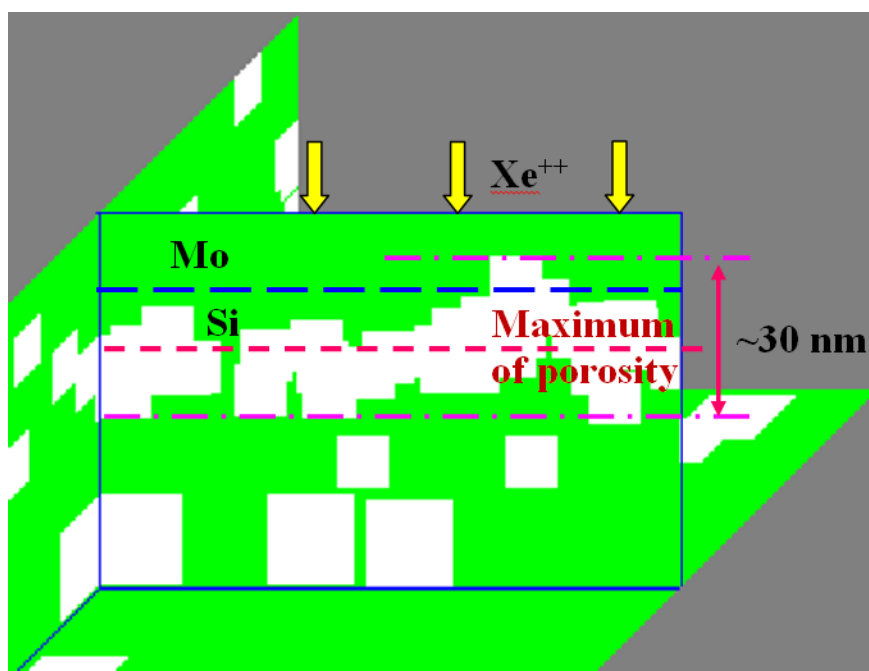


Рис.4. Иллюстрация образования вакансионно-газовых пузырей – блистеров, и образования протяженных структур дефектов при температуре 700 К. Белый цвет соответствует вакансионно-газовым дефектам, зеленый – материалу без дефектов

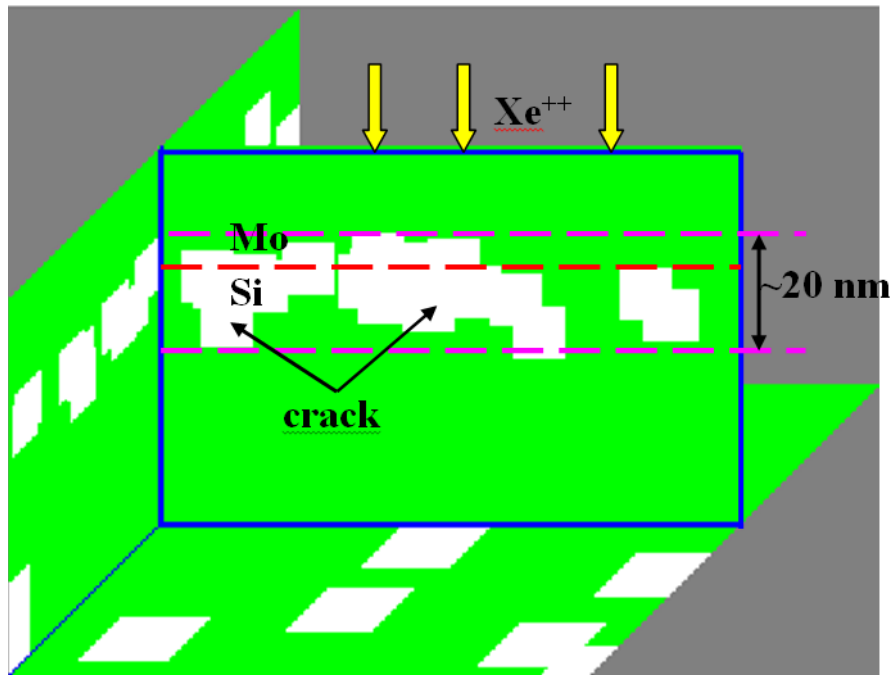


Рис.5. Иллюстрация образования вакансионно-газовых пузырей – блистеров, и образования протяженных структур дефектов при температуре 1000 К. Белый цвет соответствует вакансионно-газовым дефектам, зеленый – материалу без дефектов

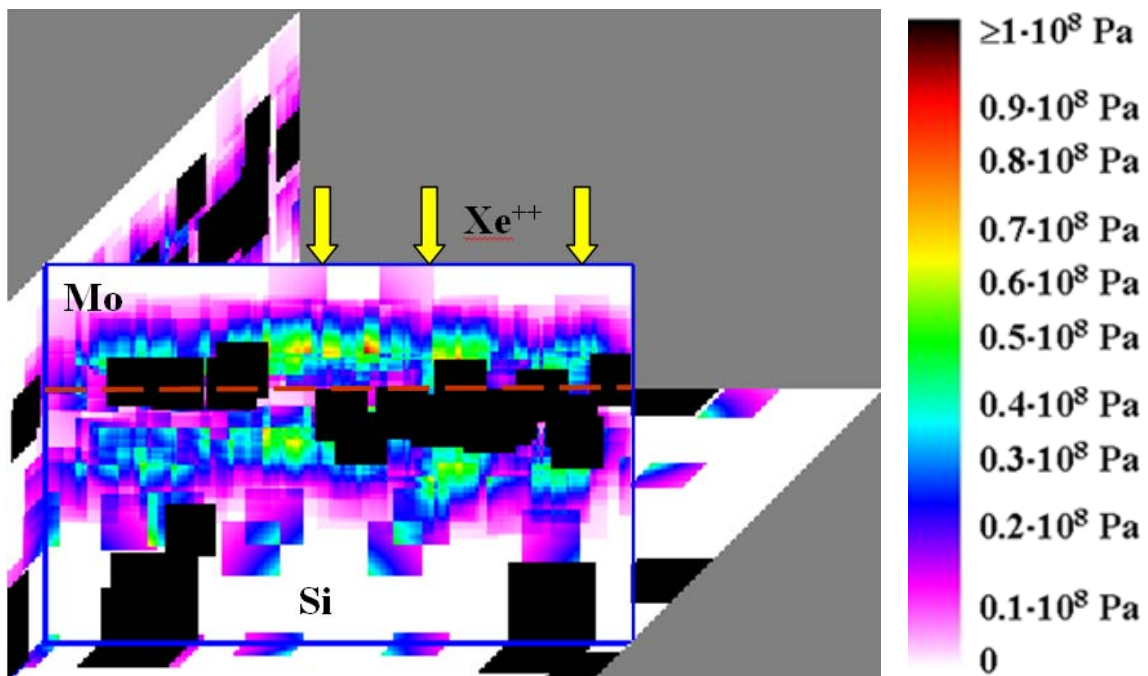


Рис.6. Карта равных значений напряжений, создаваемых блистерами в некотором слое образца при температуре 1000К. Шкала соответствия цвета и значений приведена в правой части рисунка

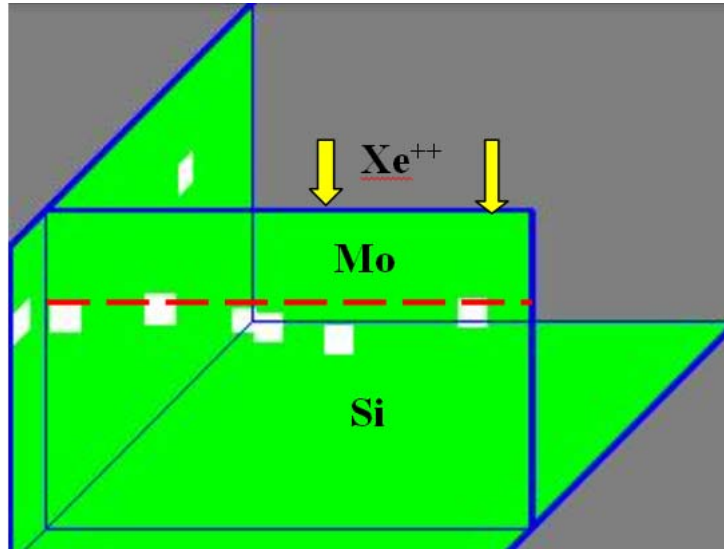


Рис.7. Иллюстрация блистеринга при дозе облучения 10^{15} ион/см². Белый цвет соответствует вакансионно-газовым дефектам, зеленый – материалу без дефектов

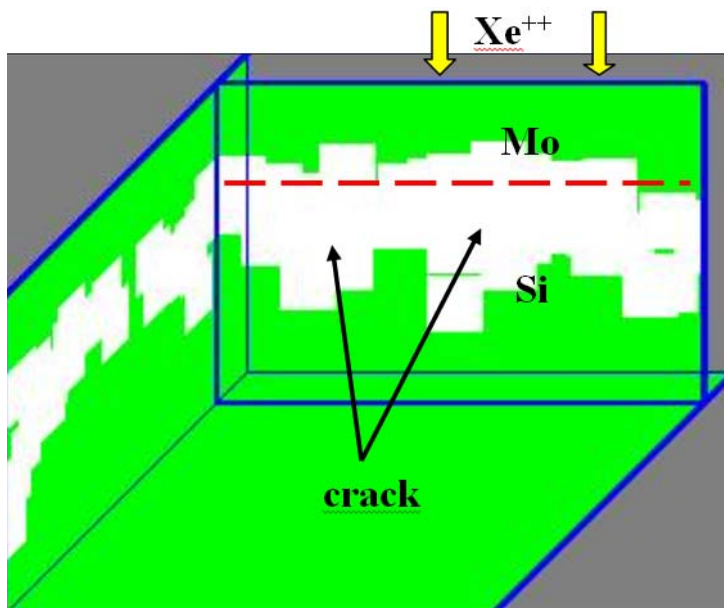


Рис.8. Иллюстрация блистеринга и возникновения структур блистеров при дозе облучения 10^{17} ион/см². Белый цвет соответствует вакансионно-газовым дефектам, зеленый – материалу без дефектов

Заключение

Созданы кинетическая и стохастическая модели образования дефектов при радиационном воздействии на слои металла и диэлектрика.

Разработаны методики моделирования возникновения и развития пористости и напряжений в слоистых средах, учитывающие специфику высокотемпературного блистеринга (образования в приповерхностном слое твердого тела вакансионно-газовых дефектов – блистеров, при облучении поверхности ионами газов).

Численные модели применимы для предсказания повреждений металлических зеркал перспективной литографии, при производстве метаматериалов, для оценки потоков плазмы на электроды и стенки плазмозифических устройств.

На основании численных экспериментов можно заключить, что:

1. На флуктуационной стадии фазового перехода сформированы слои повышенной пористости и напряжений.
2. Обнаружена самоорганизация блистеров. Эффект проявляется в образовании структур дефектов, вначале перпендикулярных падающему потоку, а затем и параллельных ему. По мере аморфизации кристаллического кремния и образования пористости увеличивается глубина проникновения кластеров дефектов и возникают структурированные дефектами слои.
3. Длина протяженных структур дефектов, параллельных падающему потоку, достигает 30 - 35 нм с предполагаемым раскрытием структуры около 10 нм.
4. Давление в вакансионно-газовых порах и в протяженных структурах дефектов может достигать значений 10^8 (при дозе облучения 10^{15} ион/см²) - 10^{12} Па (доза облучения 10^{17} ион/см²).
5. Зависимость длины протяженных структур дефектов от температуры образца носит нелинейный характер. Максимальная длина структур дефектов, параллельных падающему потоку, достигается при температуре 0,53 температуры плавления субстрата (кремния).
6. Выявлена нелинейная зависимость локализации протяженных структур дефектов от температуры.
7. При недостаточной дозе облучения протяженные структуры дефектов не образуются. При увеличении дозы облучения увеличивается плотность и протяженность таких структур.
8. Образование шероховатости поверхности раздела *Mo/Si* после отшелушивания слоя *Mo* в результате блистеринга может быть использовано в качестве исходных данных в модели создания покрытий карбида кремния (при облучении поверхности смесью газов, содержащих CO) в присутствии наноразмерных металлических катализаторов *Mo*, оставшихся на поверхности *Si* после флехинга.

Работа частично поддержана РФФИ грантами 11-01-00282, 12-01-00490-а, 12-01-00708-а, Отделением Математических Наук РАН, программа 3.5.

Литература

1. В.Ф. Реутов, А.С. Сохацкий «Упорядоченные гелиевые поры в аморфном кремнии, индуцированном облучением низкоэнергетическими ионами гелия» // Журнал технической физики, 2003, Т. 73, вып. 1, С. 73-78.
2. Н.В. Плешивец, А.И. Бажин «Вспучивание и шелушение поверхности (блистеринг и флекинг)».- Москва, Вузовская книга, 1998.
3. М.И. Гусева, Ю.В. Мартыненко «Эрозия поверхности материалов при облучении ускоренными частицами» // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. Харьков, ХФТИ, 1984, т.1. № 29, С. 187-200.
4. Л.Б. Беграмбеков, Ю.Б. Горбатов, В.Н. Тронин «Исследование блистерообразования на оптических материалах. Ионизирующее излучение и лазерные материалы» Под ред. Беграмбекова Л.Б, Девятко Ю.Н. – Москва: Энергоатомиздат, 1982.
5. G.I. Zmievskaya, A.L. Bondareva «Crystalline Islands of Semiconductor Films» // Plasma Physics Reports, 2011, V. 37, No. 1, pp. 87–95.
6. G. I. Zmievskaya “Stochastic analogs of nonequilibrium collision processes” // Plasma Phys. Rep., 1997, V.32., p.337.
7. G.I. Zmievskaya, A.L. Bondareva, V.D. Levchenko, T.V. Levchenko «A kinetic stochastic model of blistering and nanofilm islands deposition: self organization problem» // Journ. of Phys. D: Appl.Phys., 2007, 40, p. 4842–4849.
8. A.L. Bondareva, G.I. Zmievskaya «Computer Simulation of Blistering In Multilayer Mirrors for EUV Lithography» // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2010, V. 4, No. 3, pp. 480–487.
9. A. L. Bondareva and G. I. Zmievskaya «Stochastic model applied to plasma-surface interaction's simulation» // Eur. Phys. J. D: At. Mol. Opt. Plasma Phys., 2006, V.38. p. 143.
10. G. Zmievskaya, A. Bondareva, V. Levchenko, I. Goryachev, A. Perepelkina «Silicon Carbide Powder Computer Simulation» // ISPlasma2011 3rd International Symposium on Advanced Plasma Science and its Applications for Nitrides and Nanomaterials, March 6-9, 2011, Nagoya Institute of Technology, Nagoya, Japan, 2011, P4-078C, p. 214.
11. G.I. Zmievskaya, A.L. Bondareva «Modeling of the fluctuation stage of the high-temperature blistering» // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics (ISSN: 1062-8738), 2004, V. 68. N 3, pp. 378-382.
12. A.L. Bondareva, T.V. Levchenko, G.I. Zmievskaya «Computer Simulation Model for First-Order Phase Transition Fluctuation Stage» // Defect and Diffusion Forum, 2010, V. 297–301: Diffusion in Solids and Liquids V: Trans Tech Publications. Switzerland, pp. 502-507.
13. A.L. Bondareva, G.I. Zmievskaya «Kinetic Model of Blistering Into Multilayer Metal Mirrors» // 63rd Gaseous Electronics Conference & 7th International Conference on Reactive Plasmas (GEC/ICRP Meeting 2010). Ed.

- by Lab. de Phys. des Plasmas, Ecole Polytechnique-CNRS. October 4-8, 2010, Paris, France. (CD), 2010, KWP-078.
14. G.I. Zmievskaya, A.L. Bondareva «*Computer Simulation Model of Charged Nanoparticles Clustering and Powder Deposition*» // BULLETIN of the American Physical Society, October 2010. 63rd Gaseous Electronics Conference & 7th International Conference on Reactive Plasmas (GEC/ICRP Meeting 2010). Ed. by Lab. de Phys. des Plasmas, Ecole Polytechnique-CNRS. October 4-8, 2010, Paris, France, 2010, V. 55. N 7. p. 24.
 15. A.L. Bondareva, G.I. Zmievskaya «*Kinetic Model of Blistering Into Multy-Layer Metal Mirrors*» // BULLETIN of the American Physical Society, October 2010. 63rd Gaseous Electronics Conference & 7th International Conference on Reactive Plasmas (GEC/ICRP Meeting 2010). Ed. by Lab. de Phys. des Plasmas, Ecole Polytechnique-CNRS. October 4-8, 2010, Paris, France, 2010, V. 55. N 7. p. 122.
 16. G.I. Zmievskaya, A.L. Bondareva «*Porosity in solids: computer simulation of blistering at nucleation fluctuation stage*» // Proceeding of the 3rd International Conference of PLASMA- NanoTechnology & Science, March 11-12 2010, Ed. By Mejo Univ., Nagoya, Japan, 2010, P-48.
 17. G. I. Zmievskaya, T. V. Levchenko, and T. K. Soboleva «*Application of stochastic analog method for study of fluctuation stage of blistering*» // Teplofiz. Aeromekh., 2002, V.9. p. 365.
 18. G.I. Zmievskaya, L.V. In'kov, V.D. Levchenko, T.V. Levchenko «*The plasma scattering on metal drops near surface*» // Poverkhnost', 2004, No. 5. p.106.
 19. A.L. Bondareva, G.I. Zmievskaya «*Diagnostics of microporosity into multilayers solids*» // Workshop First Russian – Italian Joint Seminar on Mathematical and Physical Models Applications to Condensed Matter and Preservation of the Cultural Heritage, Ravenna, Italy, September 12-13 2011, 2011, p. 5.
 20. G.I. Zmievskaya «*Stochastic simulation method in both problems: Thin film islands chemical vapor deposition and radiation stimulated damaging*» // Workshop First Russian – Italian Joint Seminar on Mathematical and Physical Models Applications to Condensed Matter and Preservation of the Cultural Heritage, Ravenna, Italy, September 12-13 2011, 2011, p. 5.
 21. A.L. Bondareva, G.I. Zmievskaya «*Problems of solid-phase and gas-phase epitaxy of damaged surfaces*» // Workshop First Russian – Italian Joint Seminar on Mathematical and Physical Models Applications to Condensed Matter and Preservation of the Cultural Heritage, Ravenna, Italy, September 12-13, 2011, 2011, p. 6-7.
 22. G.I. Zmievskaya, A.L. Bondareva «*Thin Film Semiconductor Islands and Numerical Experiment*» // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2010, V. 4, No. 5, pp. 836–844.
 23. A. I. Morozov, A. S. Sigov «*Clustering of mobile defects and quantum diffusion in metals*» // Zh. Eksp. Teor. Fiz., 1989, V.95. p. 170.

24. A. I. Morosov, A. S. Sigov «*Clustering of mobile defects and quantum diffusion in metals*» // Solid State Commun. Vol.67. (1988), p. 841. [Sov. Phys. JETP, 1989, V.68. p. 97.
25. A. I. Morozov, P. A. Ovchenkov, A. S. Sigov «*Interaction of defects in crystal and processes of clustering*» // in book Discrete Plasma Simulation, Collection of Works of Appl. Math. Inst. AN SSSR, Ed. by Yu. S. Sigov (IPM, Moscow, 1990) [in Russian], 1990.
26. A. A. Berzin, A. I. Morozov, A. S. Sigov «*Diffusion of light atoms on the surface of the crystal and processes of clustering*» // Phys. Solid State , 1996, V. 38. p. 747.
27. В.А. Грибков, Г.И. Змиевская «*Экспериментальные и теоретические исследования кинетических процессов в сталкивающихся плазменных потоках и их приложения к физике лазеров*» в книге "Энциклопедия низкотемпературной плазмы." т. IX-2. "Радиационная плазмодинамика: физика, экспериментальные технологии, применения", серия Б, 2007, с. 517-540.
28. Г.И. Змиевская. «*Модель флуктуационной стадии фазового перехода*»// в кн. "Энциклопедии низкотемпературной плазмы" (Серия "Б") , Гл. ред. серии акад. В.Е.Фортов, Том VII "Математическое моделирование в низкотемпературной плазме" (третья книга). М., "ЯНУС-К", 2009, с.28.
29. S.S. Artem'ev, T.A. Averina «*Numerical analysis of systems of ordinary and stochastic differential equations*». Utrecht, The Netherlands, 1997. p. 176.
30. С.А. Кукушкин, А.В. Осипов «*Новый метод твердофазной эпитаксии карбида кремния на кремнии: модель и эксперимент*» // ФТТ, 2008, Т. 7, с. 1118.

Стохастические кинетические модели и алгоритмы в задачах оптимизации нанесения тонких пленок карбида кремния

Г.И. Змиевская, А.Л. Бондарева

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук,

Россия, 125047, Москва, Миусская пл., д.4

zmig@mail.ru, bal310775@yandex.ru

Аннотация. В данной работе приводятся примеры численного моделирования образования порошков карбида кремния в плазме разряда и на поверхности субстрата Si(100), а также осаждение кластеров на поверхность сопровождается твердофазную эпитаксию пленок карбида кремния на кремниевом субстрате. Результаты могут быть использованы для оптимизации процесса создания покрытий с заданными свойствами, для контроля однородности и скорости нанесения и однородности тонкой пленки.

Введение

Карбид кремния (SiC) как алмазоподобный материал покрытия известен достаточно давно. Электрофизические свойства делают его перспективным полупроводником. Один из способов получения этого материала - осаждение из газовой фазы на подложку. Несколько лет назад появилось сообщение об успешных способах твердофазной эпитаксии, состоящей в обработке поверхности Si и последующей его карбидизации. В качестве такой обработки может служить создание пористости в поверхностном слое поверхности (для экспериментальных методик напыления (CVD) чаще всего используется система пропан – силан - водород, а описание методики эксперимента по твердофазной эпитаксии ссылается на «ямки на поверхности и поры», способствующие протеканию карбидизации при взаимодействии подложки с газом CO).

Получение карбида кремния в виде порошка в плазме разряда или при воздействии на исходные компоненты высоких температур, достигаемых в плазматронах, также может быть рассмотрено на начальной неравновесной стадии методами численного моделирования начальной стадии формирования зародышей в результате происходящих физико-химических процессов фазового перехода, в результате которого образуется карбид кремния в соответствующем агрегатном состоянии.

В рамках данной задачи исследовалось несколько моделей получения зародышей порошков аморфного и кристаллического (кубического) поли типа SiC ($3C-SiC$):

1. непосредственно по механизму “пар–кристалл”;
2. по механизму “пар–жидкая капля–кристалл в плазме разряда;
3. по механизму “пар–жидкая капля (в разряде)–кристалл (при осаждении на поверхность)”;
4. по механизму “пар–кристалл (в разряде)–кристалл (при осаждении на поверхность)”.

Моделирование неравновесного зародышеобразования в задачах создания тонких пленок находится в развитии, поскольку востребованность численных моделей и теории сдерживалась ранее отсутствием устойчивых методов решения уравнений математической физики в частных производных.

Математическая модель

Математическое моделирование и вычислительный эксперимент описывает неравновесную стадию фазового перехода 1-го рода, в течение которой формируется распределение зародышей фазового перехода по размерам кластеров зародышей и координатам субстрата, на нем образуются островки конденсирующейся фазы в процессе осаждения тонкой пленки. Фундаментальный процесс зародышеобразования рассматривается как суперпозиция нескольких случайных процессов: кластеризации зародышей и броуновского движения кластеров с переменной массой, а также столкновений кластеров, изменяющих размер зародыша, столкновений молекул газа с зародышами, которые могут приводить к изменению химического состава кластера. Эти процессы стохастической природы характеризуют флуктуационную стадию гетерогенного фазового перехода 1-ого рода при нанесении тонкопленочных покрытий. При моделировании равновесные химические реакции и соотношение концентраций уже учтены в энергии Гиббса. Включение в модель физико-химических столкновительных процессов (типа ионизации-рекомбинации и др., нарушающих локальное термодинамическое равновесие) направлено на расширение возможностей модели учетом столкновений, которые приводят не только к флуктуациям в термодинамической системе (пар–зародыш фазового перехода), но и к более полному учету роли химических реакций, нарушающих равновесное соотношение концентраций молекул в кластере расплава (или кристаллического порошка). При газофазном напылении пленки SiC могут участвовать уже сформировавшиеся по составу зародыши карбида кремния. Также процесс химического превращения может быть результатом реакции, реализующейся при столкновении молекул углеродосодержащего газа с поверхностью кластера расплава кремния или его карбида. От состава (соотношения атомов кремния и углерода в кластере зародыша) зависит размер

зародыша кристаллизации и политип ($3C\text{-SiC}$, $4H\text{-SiC}$, $6H\text{-SiC}$ и др.) кристаллической решетки зародыша фазового перехода, формирующегося при понижении температуры расплавленных капель. Принципиальным вопросом в получении пленок карбида кремния для микроэлектроники является некомпенсированный заряд пленки и, значит, тип проводимости выращенных слоев SiC .

Характерное время образования зародышей не превышает миллисекунд, в течение этого времени формируется начальное распределение зародышей по размерам, далее зародыши на линейной стадии процесса роста частиц порошка или пленки будут расти пропорционально времени. Скачкообразные изменения размеров кластеров за счет столкновений и слияний зародышей при их броуновском движении идет с резко уменьшающейся скоростью при увеличении размеров зародышей. Зародыши движутся под действием косвенного упругого взаимодействия друг с другом в результате возмущения акустических фононов решетки. Кластеризация зародышей и их броуновское движение, а также воздействие на рост зародышей столкновений с углеродосодержащими газами (или кислородом, водородом и др.) являются неравновесными процессами: кластеризация и броуновское движение описаны уравнениями в частных производных. Для расчетов быстропротекающих, но разновременных процессов гетерогенного фазового перехода разработан метод стохастического аналога неравновесных процессов столкновительной и флуктуационно-обусловленной природы, который позволяет моделировать их с учетом кинетической теории столкновений упругих и неупругих, а также модели броуновского движения.

Численная модель дискретной среды включает в себя описание ее элементов и определение фазового пространства. Моделью задается изменение фазового пространства состояния: это могут быть скачкообразные либо диффузионные марковские случайные процессы (или их суперпозиция). Сформулированы уравнения стохастического аналога для дискретной среды: комплексной плазмы, содержащей заряженные кластеры, ионы, электроны, атомы (молекулы) газа или для пара, конденсирующегося в кластеры. Дискретная среда ограничивается островами размера g , являющимися кластерами зародышей фазового перехода и кристаллической решетки субстрата и др. Сформулированы законы сохранения физических величин, изменяющихся в результате столкновений, которые выполняются при расчете скоростей, импульсов, изменении числа частиц в кластере. Выбор пространственно-временных масштабов задачи связан с безразмерной формой записи уравнений математической физики в частных производных модели.

Стохастические дифференциальные уравнения Ито-Стратоновича выведены с учетом соотношений, устанавливающих строгое соответствие коэффициентов уравнений в частных производных, 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 получены кинетические функции распределения кластеров зародышей-капелек (островов жидкой или твердой фазы на субстрате).

В течение каждой стадии температура считается постоянной, т.к. мы используем уравнение Я.Б. Зельдовича, в котором образование зародышей новой фазы происходит в метастабильной системе.

К достоинствам стохастической модели зародышеобразования относятся строгая математическая база, квазилинейность решаемых уравнений, нестационарность зародышеобразования. Кинетические уравнения модели: Колмогорова–Феллера и Эйнштейна–Смолуховского, а также уравнения Леонтовича (модифицированного в 30-х годах 20 века уравнения Больцмана на случай ионизованного газа, в котором происходят химические превращения типа ионизации-рекомбинации) – решаются путем замены их уравнениями Ито–Стратоновича для стохастических динамических переменных g (размер кластера) и r (его координата в объеме или на поверхности). Расчеты методом стохастического аналога (в форме Ито–Стратоновича) связаны с реализацией численной модели винеровского случайного процесса.

В отличие от известного стационарного распределения Слезова–Лифшица зародышей по размерам появилась возможность численно промоделировать изменение распределения зародышей во времени порядка от нано- до миллисекунд. Учет коллективного дальнегодействующего упругого взаимодействия зародышей через возмущение акустических фононов решетки позволяет говорить о том, что это модели плазмоподобной среды. То, что эти модели описываются квазилинейными уравнениями математической физики и их стохастическими аналогами (стохастическими уравнениями Ито–Стратоновича), отличает эти задачи от задач молекулярной динамики и феноменологически сформулированных Ланжевеновских моделей, поскольку описанные модели опираются на строгие результаты существования и единственности решения стохастической задачи (при условии ограниченности и гладкости коэффициентов уравнений).

Численный эксперимент не подразумевает рассмотрения траекторий конкретных частиц, а представляет модель стохастических процессов и их суперпозиции, оценки математического ожидания и восстановления плотности вероятности (функции распределения) случайного процесса, учитывающего квазилинейность задачи и особенности формирования зародышей.

Модель согласована как с кинетическими кодами плазмы и пылевой плазмы, так и со стохастическими моделями столкновений, ведущих к плазмохимическим реакциям. В данной работе представлена новая модель флуктуационного формирования кристаллической фазы – одного из политипов карбида кремния, а также показана роль заряда на начальной стадии роста (или деградации размера) кластеров фазового перехода. Применение устойчивого численного метода к решению систем стохастических уравнений открывает новые возможности для рассмотрения получения SiC в плазме разряда.

Метод численного стохастического моделирования основан на теоремах, согласно которым плотность переходной вероятности Марковского случайного

процесса (МП) $X(t)$, являющегося решением СДУ Ито, удовлетворяет прямому уравнению Колмогорова. Кинетические уравнения, рассматриваемые как частные случаи уравнения Колмогорова, однозначно связаны с СДУ Ито. При этом плотность переходной вероятности МП интерпретируется как функция распределения, входящая в кинетическое уравнение, рассматриваемые физические столкновительные и флуктуационные процессы имеют один и тот же математический аналог – стохастический.

В модели фазового перехода 1-го рода (на флуктуационной стадии) важную роль играет то, как в энергии Гиббса формирования зародыша учтены физические факторы (объема, поверхности зародыша, и др.). Нелинейным образом сказывается на скорости зародышеобразования и распределении кластеров по поверхности субстрата и то, что это - заряженные кластеры карбида кремния в плазме радиочастотного разряда. Важны и другие физические факторы, например, состав (процентное соотношение концентраций $Si:C$) кластеров зародышей карбида кремния, а также температура и выбор сечения поверхностью решетки субстрата, на котором происходит образование зародышей.

Процесс кластеризации зародышей в плазме разряда упрощенно представлен конденсацией атомов Si в капли расплава, Капли расплава взаимодействуют с углеродосодержащим газом (карбидизация); процесс может быть равновесным и неравновесным, при понижении температуры скачком ниже температуры плавления кремния (или карбида кремния) происходит кристаллизация капель SiC . Зародышеобразование происходит либо в объеме разрядной камеры (на сетке), либо на поверхности субстрата.

Начальные размеры зародыша-капли расплава Si выбираются из области флуктуационной неустойчивости фазового перехода, определяемого экстремумами энергии Гиббса (производная по размеру кластера равна нулю), в случае конденсации нейтральных капель - это окрестность критического размера кластера при заданных термодинамических параметрах. В случае учета заряда кластера появляется минимум на поверхности равных значений функционала энергии Гиббса (ось ординат), зависящий от заряда на зародыше и размера зародыша. При рассмотренных физических параметрах он приходится на малые размеры зародышей.

Приведем вид стохастического уравнения для одной из переменных задачи – размера зародыша g :

$$g(t) = g(t_0) + \underbrace{\int_{t_0}^t H_g(f_g, f_r, \Delta\Phi) d\tau}_{drift} + \underbrace{\int_{t_0}^t \sigma(f_g, f_r) dW(\tau)}_{stochastic\ diffusion} + \underbrace{\int_{t_0}^t N_p d\tau}_{chemical\ reactions} \quad (1)$$

$$g_{t=0} = g_0, \quad t \in [t_0, T_{finish}], \quad g \geq 2,$$

здесь g – размер зародыша в числе атомов в нем, g_0 – начальный размер зародыша, f_g – функция распределения /ФР/ кластеров по размерам, f_r – ФР кластеров по поверхности субстрата, $W(t)$ – винеровский случайный процесс, N_p – скачки пуассоновской меры, которыми моделируются столкновения,

приводящие к химическим реакциям, $\Delta\Phi$ – изменение энергии Гиббса при образовании зародыша.

Модель энергии Гиббса образования кубического или гексагонального политипа зародыша кристалла карбида кремния:

$$\Delta\Phi = \Delta\Phi_{chem} + \Delta\Phi_{st} + \Delta\Phi_{rb} + \Delta\Phi_r, \quad (2)$$

здесь $\Delta\Phi_{chem} = -a_\Phi g$ здесь $a_\Phi = \eta_a(\chi_\beta - \chi_\alpha)$, $(\chi_\beta - \chi_\alpha)$ — разность химических потенциалов фаз (ими могут быть "пар-кристалл" или "расплав-кристалл"), η_a — фактор формы, зависящий от a_l кратчайшего расстояния между атомами в решетке SiC (параметр решетки: для 3C-SiC это 4.34 Å, для 4H-SiC и 6H-SiC 3.07 Å) и a_{st} характерного расстояния повторяемости структуры (для 3C-SiC это 4.34 Å, для 4H-SiC 10.053 Å, для 6H-SiC 15.11 Å).

$\Delta\Phi_{st} = bg^{2/3}$, $b = a_l \cdot a_{st} \cdot (\alpha\sigma_{SiC/p} + \sigma_{SiC/Si} - \sigma_{Si/p})$, где $\sigma_{SiC/p}$ — поверхностное натяжение на границе SiC – пар; $\sigma_{SiC/Si}$ — поверхностное натяжение на границе зародыш SiC – Si (подложка); $\sigma_{Si/p}$ — поверхностное натяжение на границе Si – пар; α — коэффициент, связанный с моделью политипа. Энергия, связанная с формированием ребер зародыша кристалла, записывается следующим образом: $\Delta\Phi_{rb} = d_1 g^{1/3} - d_2 g^{1/3} \lg(g)$, причем коэффициенты $d_1, d_2 \sim a_l \cdot a_{st} (\alpha\sigma_{SiC/p} + \beta(\sigma_{SiC/Si} - \sigma_{Si/p}))$, α, β — коэффициенты, определяемые конкретным политипом. Различие энергии образования зародыша над узлом или междоузлием кристаллической решетки учтены в $\Delta\Phi_r = \frac{\Psi}{\sqrt{g}} (2 - \cos(\frac{2\pi x}{a_x}) - \cos(\frac{2\pi y}{a_y}))$, где Ψ — модельный параметр,

a_x, a_y — параметры решетки подложки. Кинетические и стохастические уравнения более подробно описаны в [1-5]. Зародыши аморфного карбида кремния имеют форму шаровых сегментов с углом смачивания, определяемым исходя из закона Юнга. Для зародышей аморфного кремния можно записать изменение энергии Гиббса в виде: $\Delta\Phi = \Delta\Phi_{chem} + \Delta\Phi_{st} + \Delta\Phi_r$. Линейное натяжение на границе трех фаз, актуальное для размеров зародышей менее 0.1 мкм [6], в приведенных расчетах не учитывалось.

Для определения политипа SiC в твердой фазе использованы неравенства:

$$\Delta\Phi_{\text{расплавленного зародыша}} \geq \Delta\Phi_{3C-SiC}, \quad \Delta\Phi_{3C-SiC} < \Delta\Phi_{\text{гексагон}} \Rightarrow \text{образуется } 3C-SiC$$

$$\Delta\Phi_{\text{расплавленного зародыша}} > \Delta\Phi_{3C-SiC}, \quad \Delta\Phi_{3C-SiC} \geq \Delta\Phi_{\text{гексагон}} \Rightarrow \text{образуется гексагональный}$$

$$\Delta\Phi_{\text{расплавленного зародыша}} < \Delta\Phi_{3C-SiC}, \Delta\Phi_{\text{гексагон}} \Rightarrow \text{твердая фаза без наблюдаемого порядка}$$

Система СДУ решается модифицированным численным методом (ранее разработанным Артемьевым С.С. и Авериной Т.А. для линейных систем СДУ) не ниже второго порядка точности [7].

Если зародыши карбида кремния образуются на наклонной поверхности, изменение энергии Гиббса может быть записано в виде: $\Delta\Phi_\alpha = \Delta\Phi / (1 + \sin \alpha)$, где $\Delta\Phi_\alpha$ — изменение энергии Гиббса формирования зародышей SiC на наклонной поверхности, $\Delta\Phi$ — изменение энергии Гиббса формирования зародышей SiC на горизонтальной поверхности, α — угол наклона поверхности. График сравнения

изменения энергии Гиббса формирования зародышей карбида кремния на наклонной поверхности ($\Delta\Phi_\alpha$) и на горизонтальной поверхности ($\Delta\Phi$) представлен на рис.2 для углов наклона поверхности от 0 до $\pi/2$. Как видно из рис. 2, наиболее сильное влияние наклон поверхности на формирование зародышей карбида кремния оказывает при малых размерах зародышей; при дальнейшем увеличении размеров зародышей, вероятно, основную роль будет играть не изменение энергии Гиббса формирования зародыша, а соскальзывание зародыша как целого по наклонной плоскости.

Обычно [8] шероховатость поверхности измеряют как среднеквадратичное отклонение высоты

$$R_{gh} = \left(\frac{1}{N_x N_y} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} [z(x_i, y_j) - z_{av}]^2 \right)^{1/2},$$

где $z_{av} = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} z(x_i, y_j)$ – средняя высота.

Другим часто используемым параметром является среднее по модулю отклонение от средней высоты:

$$z_{av} = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} |z(x_i, y_j) - z_{av}|.$$

В работе [9] предложена новая методика измерения шероховатости. Плотность функции распределения по высотам неровностей поверхности h

может быть записана в виде $f(h) = \frac{2\sqrt{2/\pi}}{C_{2r} r_r} \exp\left[-\frac{2(h-h_c)^2}{r_r^2}\right]$, где C_{2r} , r_r , h_c –

модельные параметры, зависящие от угла β наклона грани неровности к нормали к поверхности подложки. Плотность функции распределения неровностей по модулям углов наклона грани неровности к нормали к поверхности подложки β может быть записана в виде

$$f(\beta) = \frac{\sqrt{2/\pi}}{C_{1r} \sigma_\beta} \exp\left(-\frac{(|\beta| - \beta_c)^2}{2\sigma_\beta^2}\right), \text{ где } \beta_c = 0.31118^\circ, \sigma_\beta = 0.25716^\circ, C_{1r} - \text{модельный}$$

параметр.

В предыдущих работах авторов шероховатость поверхности рассматривалась как результат блистеринга и флекинга и оценивалась как площадь поверхности, занятой дефектами, отнесенная к общей площади поверхности подложки [10].

Полученные результаты и их обсуждение

Влияние на процесс кластеризации флуктуационной неустойчивости фазового перехода приводит к появлению среди зародышей частиц с размерами

меньше критического размера нейтральных зародышей, что обеспечивает появление на флуктуационной стадии кластеров малых размеров (наряду с ростом размеров капель, которые дробятся, достигая размера, отвечающего условию Релеевской неустойчивости для капель расплава). На рис.3 приведен пример расчета временной эволюции ФР Ge на начальной стадии зародышеобразования. Если провести сечения фазовой плоскости {размер кластера, g ; время, t }, мы получим гистограммы ФР кластеров зародышей, которые показывают отличие от логнормального распределения зародышей по размерам (распределение Слезова-Лифшица) и содержат два максимума ФР, зависящей от размеров кластеров. Как видно из рис. 3, часть зародышей приобретает размер, характерный для локального минимума термодинамического потенциала образования зародыша (энергии Гиббса) за время 10^{-7} с. Положение локального минимума термодинамического потенциала образования зародыша обусловлено учетом в модели энергии Гиббса заряда частицы.

На рис.4 приведена гистограмма ФР кластеров зародышей расплава SiC. Температура зародыша в плазме 1500 К, давление паров Si – 0.86 Па, плотность заряда 94 ед.заряда/А², плотность кластеров в плазме разряда $-3 \cdot 10^5 \text{ см}^{-3}$, число траекторий решения СДУ – 10^6 , шаг по времени – 10^{-8} с, число временных шагов расчета составляет 10^4 . Отмечены два максимума на гистограмме ФР, зависящей от размера кластера зародыша. Результат сравнивался с экспериментом получения карбида кремния (см. ниже) и использован в качестве начального условия в модели получения кристаллического порошка. ФР зародышей расплава SiC (рис.4) используется в качестве начальной по процентному содержанию углерода в кластере SiC и начальных условий распределения зародышей SiC по числу единичных объемов в них, g . На рис. 5 приведен пример зависимости ФР $f(g, T_{fin})/f_0$ зародышей SiC, модель энергии Гиббса которых отвечает кристаллизации гексагонального поли типа решетки зародыша от линейного размера основания зародыша кристаллита Δa при заданном содержании углерода в карбиде кремния. График представлен для момента окончания флуктуационной стадии фазового перехода длительностью 10^{-4} с. Сумма ФР зародышей всех политипов с одним химическим составом (одинаковое, относительно стандартного, содержание углерода в карбиде кремния) нормирована на 1. Число траекторий, используемых в каждом расчете, – 10^6 . Размер поверхности субстрата Si(100) в расчете составляет $2.172 \cdot 10^{-7} \text{ Å} \times 2.172 \cdot 10^{-7} \text{ Å}$. Температура паров в зоне реакции – 1500 К, давление паров – 0.35 Па, температура подложки Si(100) – 1200 К.

Особое значение для газофазной эпитаксии карбида кремния на кремнии играет получение заряженных частиц-зародышей SiC в плазме высокочастотного разряда. В работе [11] при следующих параметрах разряда: давление 13.3 Па, температура газовой смеси при входе в зону реакции 300 К, частоте 13.56 МГц и составе газовой смеси – 30 долей аргона и 1 доля силана, наблюдается образование в центре установки через 1 с двух характерных размеров получаемых зародышей SiC, что соответствует двум максимумам на

функции распределения зародышей SiC от их размера. Таким образом, наиболее вероятные размеры (диаметр) зародышей карбида кремния в этом эксперименте следующие: 1 нм и 13-20 нм. Нами проведены численные эксперименты получения зародышей карбида кремния в момент окончания флуктуационной стадии (10^{-4} с) при следующих параметрах высокочастотного разряда: давление 0.35 Па, температура паров в зоне реакции 1500 К – которые также показывают сходные с экспериментом [11] результаты. А именно, в момент окончания флуктуационной стадии (10^{-4} с) наблюдается образование зародышей SiC двух характерных размеров: 0.4 нм и 7.5 нм для центра установки, что соответствует положению 1.3 см в [11] (рис. 6).

Заключение

Проведено численное исследование зародышеобразования карбида кремния как стохастической модели кластеризации зародышей и броуновского движения на основе разработанных программ решения квазилинейных уравнений математической физики с функционал-коэффициентами методом стохастического аналога в приложении к кристаллизации капель расплава карбида кремния с различным отношением $Si:C$ в кластере, образующемся в плазме разряда. Показана существенная зависимость от заряда на каплях расплава соотношения политипов кристаллических зародышей в порошках SiC при газофазном осаждении алмазоподобной пленки.

Работа частично поддержана РФФИ грантами 11-01-00282, 12-01-00490-а, 12-01-00708-а, Отделением Математических Наук РАН, программа 3.5.

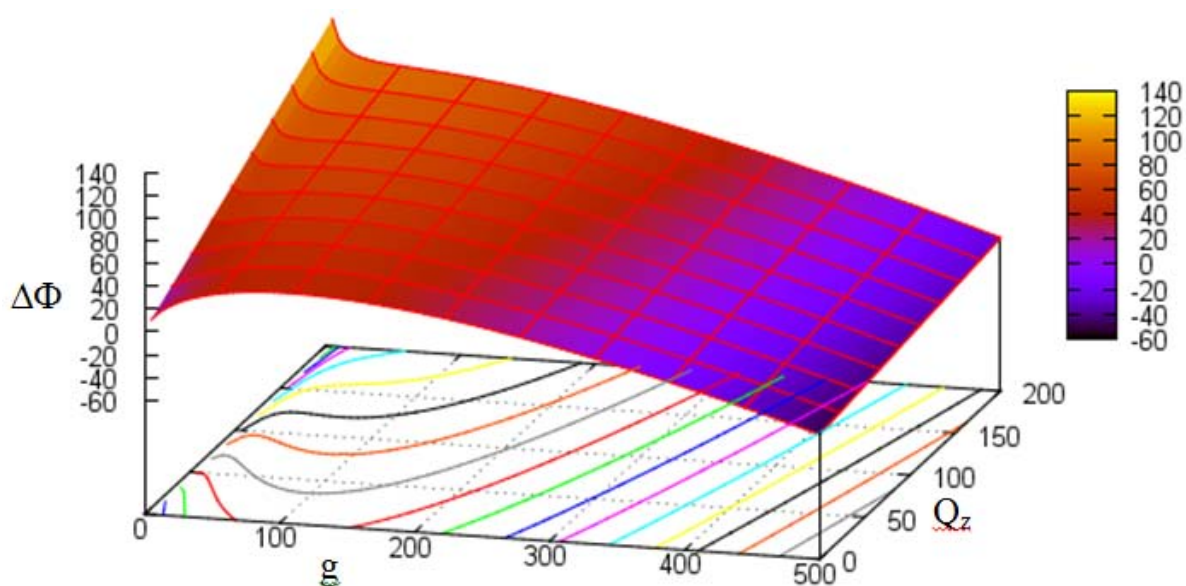


Рис.1. Изменение энергии Гиббса образования капли $\Delta\Phi$ расплава SiC в плазме радиочастотного разряда. Изменение энергии Гиббса приведено в кДж/моль, заряд кластера Q_z – в тысячах зарядов электрона, размер капли g приведен в единичных несжимаемых объемах Si . Шкала соответствия цвета и значения изменения энергии Гиббса приведена в правой части графика

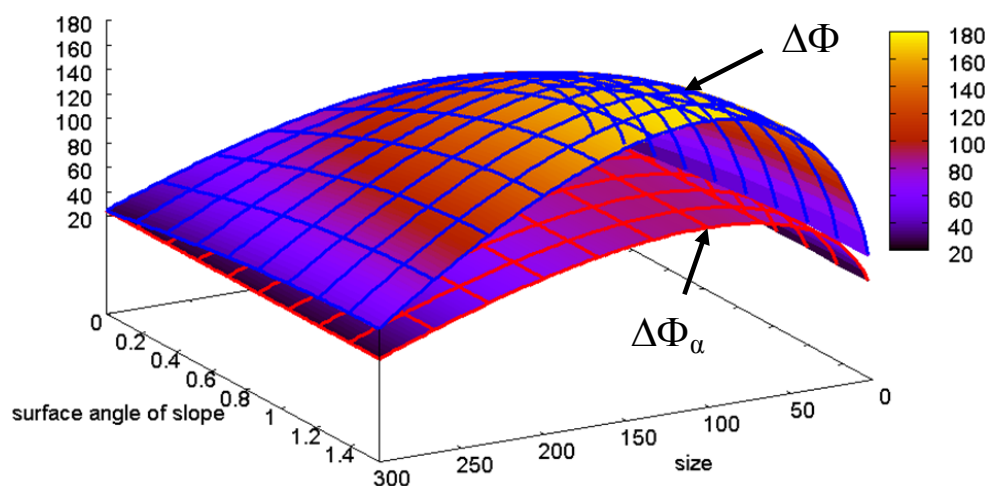


Рис.2. График сравнения изменения энергии Гиббса формирования зародышей карбида кремния на наклонной поверхности ($\Delta\Phi_\alpha$) и на горизонтальной поверхности ($\Delta\Phi$) для углов наклона поверхности от 0 до $\pi/2$

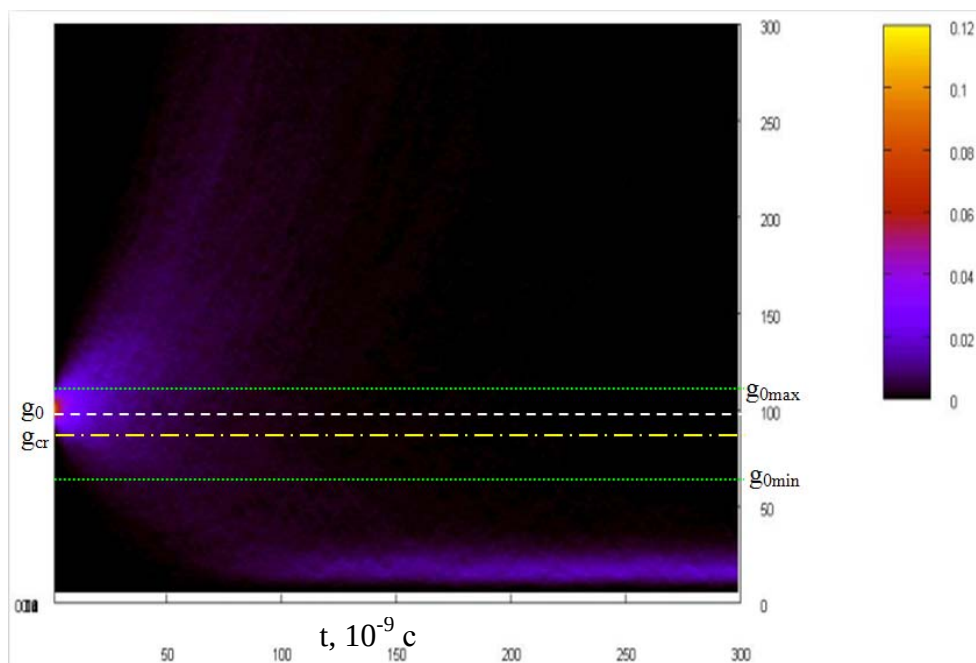


Рис.3. Цветовая визуализация ФР расплавленных заряженных капелек *Ge* в плазме разряда при следующих параметрах: температура 1802 К, давление 444 Па, заряд капелек $1.5 \cdot 10^5$ заряда электрона. Время отложено по оси абсцисс и измеряется в 10^{-9} с. Шкала соответствия цвета и значений ФР приведена в правой части графика. Белой штриховой линией показан начальный размер зародышей расплавленных капелек металла, желтой штрихпунктирной линией – критический размер зародыша, зелеными пунктирными линиями – область неустойчивости

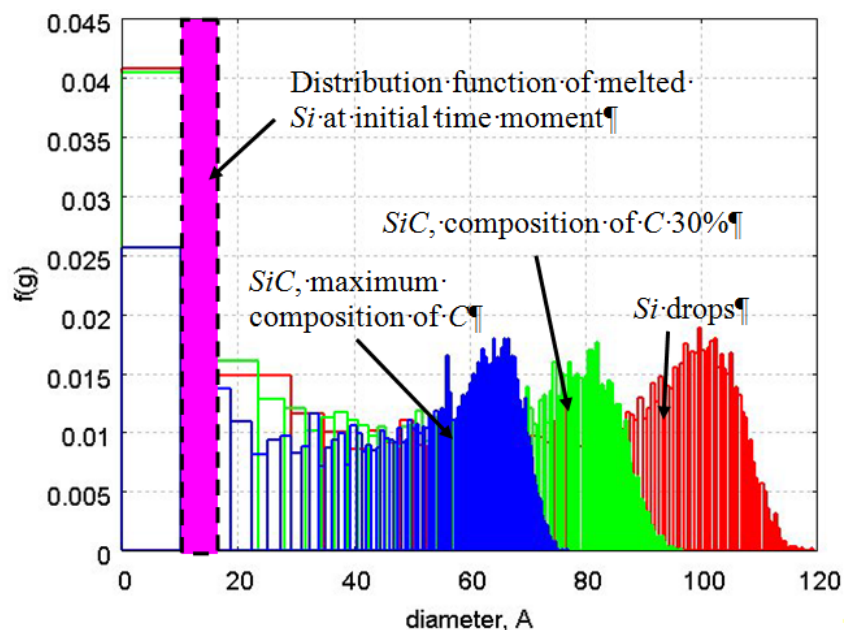


Рис.4. Функция распределения зародышей – капель расплава *SiC*, в плазме разряда в момент окончания флуктуационной стадии (10^{-4} с). По оси абсцисс отложен диаметр кластеров зародышей $\text{\AA}$. Начальное распределение заряженных расплавленных капель *Si* закрашено фиолетовым цветом и ограничено штриховой линией. Зеленой линией показана ФР зародышей *SiC* с содержанием углерода 30% относительно максимально возможного, красной линией – функция распределения капель расплава *Si* при тех же условиях, синей линией – функция распределения капелек *SiC* с максимально возможным содержанием углерода в карбиде кремния

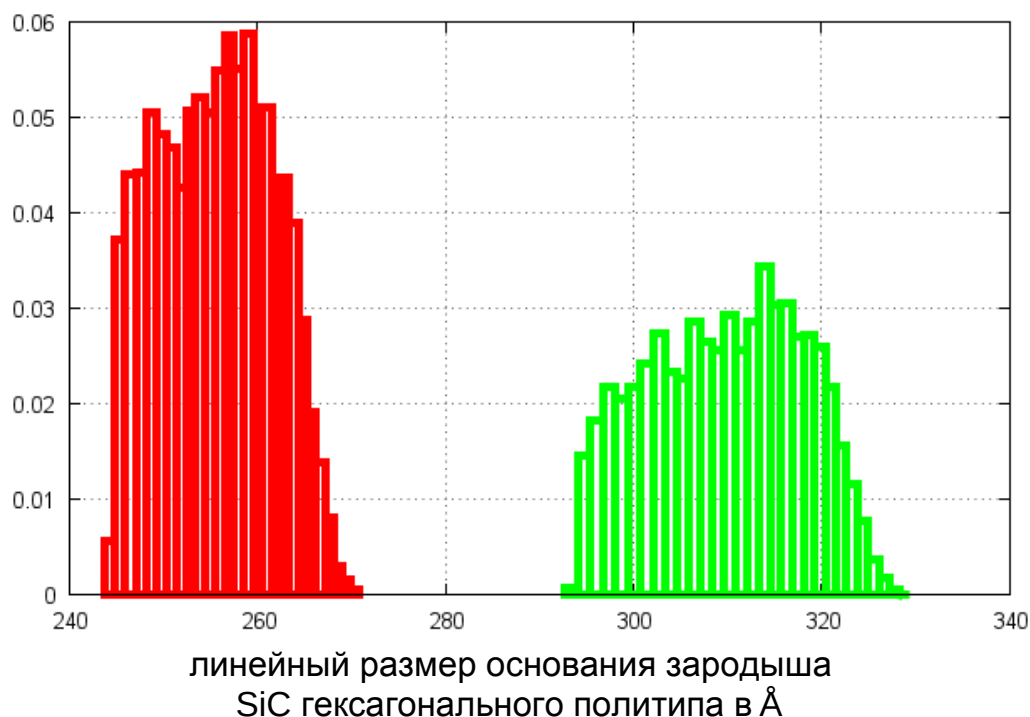


Рис.5. Зависимости ФР зародышей порошка SiC от линейных размеров оснований в Å для двух моделей содержания углерода в кластерах SiC при их осаждении на субстрат из плазмы разряда. По оси абсцисс отложен линейный размер основания в Å, для политапа 6H-SiC – это диаметр окружности, в которую вписан шестиугольник-основание. Красной линией показана функция распределения гексагональных зародышей SiC с максимально возможным содержанием углерода в карбиде кремния, зеленой линией – с содержанием углерода 30% относительно максимально возможного. По оси ординат отложена функция распределения зародышей $f(g, T_{fin})/f_0$ в момент окончания расчета (10^{-4} с). Гистограммы ФР построены с точностью ~ 1.7 Å

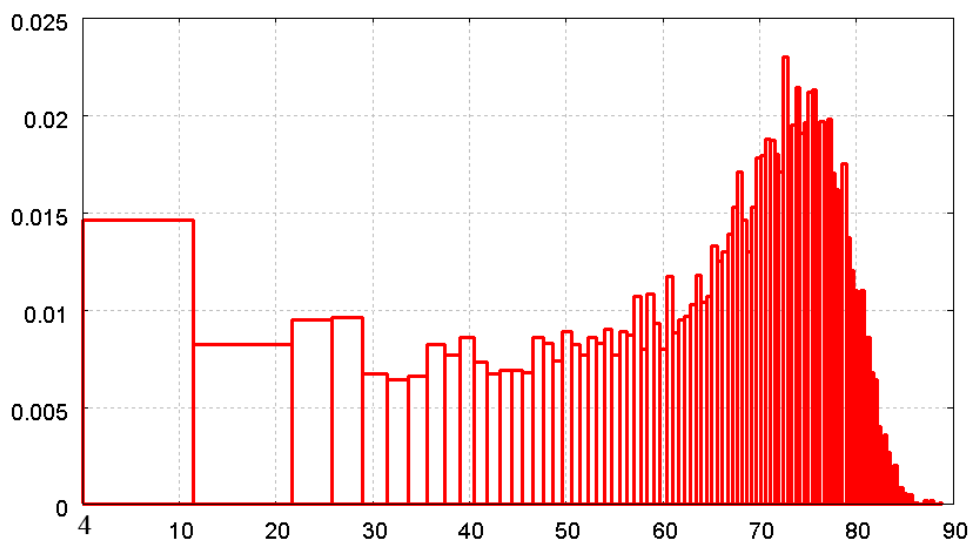


Рис. 6. ФР зародышей по размерам (диаметр в Å)

Литература

1. Г.И. Змиевская, А.Л. Бондарева «*Острова тонкой пленки полупроводника и численный эксперимент*»// Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2010, № 10, с. 50-58.
2. Г.И. Змиевская, А.Л. Бондарева «*Кристаллические острова тонких пленок полупроводника*»// Физика плазмы, 2011, т. 37, № 1, с. 93-102.
3. A.L. Bondareva, T.V. Levchenko, G.I. Zmievskaya «*Computer Simulation Model for First-Order Phase Transition Fluctuation Stage*»// Defect and Diffusion Forum. V. 297–301: Diffusion in Solids and Liquids V: Trans Tech Publications. Switzerland, 2010, p. 502-507.
4. Г.И. Змиевская, Л.В. Иньков, В.Д. Левченко, Т.В. Левченко «*Рассеяние плазмы на зародышах металлических капель вблизи поверхности*»// Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2004, №5, с.106.
5. G.I. Zmievskaya, A.L. Bondareva, V.D. Levchenko, T.V. Levchenko «*A kinetic stochastic model of blistering and nanofilm islands deposition: self organization problem*»// Journ. of Phys. D: Appl.Phys., 40, 4842–4849 (2007).
6. В.И. Ролдугин «*Физикохимия поверхности*» изд. Дом «Интеллект» г. Долгопрудный, 2008, 568 с.
7. S.S. Artem'ev, T.A. Averina «*Numerical analysis of systems of ordinary and stochastic differential equations.*» Utrecht, The Netherlands, 1997, p. 176.
8. О.Е. Герасимова, С.Ф. Борисов, С.П. Проценко «*Моделирование шероховатой поверхности*»// Математическое моделирование, 2004, т. 16, No 6, с. 40-43.
9. В.П. Мемнонов, П.Г. Ульянов «*Экспериментальная оценка параметров распределений для шероховатости поверхности в каналах наноразмеров*» // Журнал технической физики, 2011, т. 81, No 12, с. 104-109.
10. А.Л. Бондарева, Г.И. Змиевская «*Применение стохастических моделей к наномасштабным явлениям на поверхности*» // Нелинейность современного естествознания, под ред. Г.Г. Малинецкого, 2009, Москва, изд-во ЛКИ, с. 274- 302.
11. S. L. Girshick, A. M. Boies, P. Agarwal, J. Berndt, E. Kovacevic, L. Boufendi «*The Spatiotemporal Evolution of an RF Dusty Plasma: Comparison of Numerical Simulations and Experimental Measurements*»// 7th ICRP and 63rd GEC, October 4-8, 2010, Paris, France, VF3-005.

Трехмерная полностью кинетическая численная модель замагниченной плазмы на основе LRnLA алгоритмов

А.Ю. Перепёлкина, В.Д. Левченко

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук,

Россия, 125047, Москва, Миусская пл., д.4

mogmi@yandex.ru, vadimlevchenko@mail.ru

Аннотация. Численное моделирование нелинейных плазменных процессов необходимо во многих актуальных физических задачах. Цель настоящего исследования – это создание нового универсального высокоэффективного кода на основе 3D3V полностью кинетической самосогласованной модели плазмы для решения задач, неразрешимых ранее из-за ограничений вычислительных ресурсов. Одним из поводов для этой работы послужило изучение аномального переноса в канале холловского двигателя. Для этого выбрана полностью кинетическая 3D3V модель без использования распространенных калибровок физических параметров. Предложенная модель реализована в программном комплексе CFhall на основе высокоэффективных локально-рекурсивных нелокально-асинхронных алгоритмов. Проведено тестирование разработанного кода на задаче о распространении плазмы сквозь магнитное поле.

Введение

Численное моделирование нелинейных плазменных процессов необходимо во многих актуальных физических задачах. Для решения таких задач часто используется метод «частица-в-ячейке» (Particle-in-Cell — PIC) [1], однако сфера его применения ограничена из-за сравнительно высокой вычислительной сложности. Цель настоящего исследования – это создание нового универсального высокоэффективного кода на основе 3D3V полностью кинетической самосогласованной модели плазмы для решения задач, неразрешимых ранее из-за ограничений вычислительных ресурсов. Одним из поводов для этой работы послужило изучение аномального переноса в канале холловского двигателя.

Можно отметить, что кинетическое моделирование плазмы в холловском двигателе очень требовательно к вычислительным ресурсам. Необходимо разрешить высокочастотные процессы, а время моделирования должно быть достаточным, чтобы получить оценки выходных параметров. Исходя из

диапазона величин характерных частот и размеров процессов, протекающих в плазме холловского двигателя [2] (рис. 1), можно оценить, что необходимые число узлов пространственной сетки составляет $\sim(10^2)^d$, а число шагов по времени $\sim 10^7$ (d – размерность пространства).

Описание работы холловского двигателя требует также модели описания остальных необходимых процессов: ионизации, нейтрализации, пристеночной рекомбинации, аномальной диффузии, граничных условий т.д. Эти процессы еще более усложняют задачу, так что полностью трехмерного, полностью кинетического кода, адекватно описывающего физику процессов в холловском двигателе, до сих пор не существует.

Ранее было разработано множество кодов для моделирования плазмы холловского двигателя. Из-за высокой вычислительной сложности задачи эти модели используют упрощения, из-за которых моделирование плазменных неустойчивостей становится невозможным.

Во-первых, используется снижение размерности задачи. Современные полностью кинетические коды [3, 4, 5] используют размерность 2D3V, однако, так как обнаруженные экспериментально плазменные неустойчивости в канале холловского двигателя имеют трехмерный характер, выяснить причину возникновения аномальной проводимости в такой модели невозможно.

Вторым наиболее популярным способом ускорения вычислений в этой задаче является искусственная калибровка основных физических параметров [3, 4]. Например, искусственное изменение электрической проводимости вакуума увеличивает радиус Дебая плазмы и уменьшает плазменную частоту. Это приближение позволяет использовать большие шаги по времени и по пространству, на несколько порядков ускоряя расчеты. Искусственное изменение отношения масс электронов и ионов уменьшает пролетное время ионов, так что достаточно моделировать меньшие временные промежутки для получения выходных параметров. Эти приближения достаточно грубы с точки зрения моделирования физики плазмы, так как сдвигают порог возникновения плазменных неустойчивостей.

В подавляющем большинстве реализаций используется уравнение Пуассона для описания эволюции электромагнитных полей. Из-за этого магнитное поле в модели не входит в систему самосогласованных уравнений и считается постоянным. Для правильного описания работы холловского двигателя необходимо решать систему уравнений для самосогласованных электромагнитных полей, как минимум, в безызлучательном приближении. Более того, в большинстве реализаций, использующих уравнение Пуассона, из соображений численной устойчивости выбрана неявная схема с нелокальной зависимостью значения потенциала на следующем временном шаге от его значений на предыдущих шагах. Из-за этого подобные модели невозможно эффективно перевести на параллельную реализацию.

Также стоит отметить, что несмотря на то, что разработаны высокопроизводительные коды для моделирования плазмы методом «частица-в-ячейке», которые используют такие методы повышения эффективности

вычислений, как распределение нагрузки на процессоры [6, 7], адаптивные сетки, переменные шаги по времени, параллельная компиляция [6], гибкие структуры из независимых модулей [8, 9], при моделировании плазмы холловских двигателей редко используются даже параллельные вычисления.

Особенности разрабатываемой модели

В связи с тем, что описываемая система достаточно сложна, для первого этапа развития модели выбран минимальный набор моделируемых эффектов. В модели, представленной в этой работе, нет учета столкновений. Исходя из сравнения характерных времен столкновения и ионизации и характерных времен возникновения плазменных неустойчивостей, можно сказать, что это допущение является приемлемым на данном этапе. Так как допускается, что аномальный перенос возможен лишь за счет плазменных неустойчивостей, сильно упрощено описание граничных условий. Для моделирования динамики электромагнитных полей используются уравнения Максвелла:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} &= -\nabla \times \vec{E}, & \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} &= \nabla \times \vec{B} - \vec{j}, \\ \nabla \vec{B} &= 0, & \nabla \vec{E} &= \rho.\end{aligned}\tag{1}$$

Здесь и далее уравнения записаны в безразмерной системе единиц, удобной для численного моделирования. Масса измеряется в массах электрона; заряд – в зарядах электрона, скорости – в скоростях света, время – в обратных плазменных частотах электронов. Из этого выбора следует единица для полей и единица для размеров. В качестве начального этапа разработки программы используется бесстолкновительная модель плазмы. Поэтому для описания динамики плазмы используется кинетическое уравнение Власова:

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \vec{v}_\alpha \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{r}_\alpha} + \frac{e_\alpha}{m_\alpha \gamma} (\vec{v}_\alpha \times \vec{B} + \vec{E}) \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}_\alpha} = 0.\tag{2}$$

Плотность заряда и ток определяются как нулевой и первый моменты функции распределения частиц:

$$\rho = \sum_\alpha \int f_\alpha e_\alpha d\vec{v}, \quad \vec{j} = \sum_\alpha \int \vec{v} f_\alpha e_\alpha d\vec{v}.\tag{3}$$

Для правильного описания нелинейных процессов в плазме необходимо решать полную систему самосогласованных уравнений для кинетики плазмы и динамики электромагнитных полей. Помимо этого, для того чтобы было возможно наблюдать плазменные неустойчивости, необходимо отказаться от таких приближений, как искусственное изменение физических величин, и перейти к полностью трехмерной модели. Необходимо использовать наиболее действенные методы повышения эффективности вычислений. Важно выбрать такую численную схему, которая дополнительно допускает эффективную параллельную реализацию. Из этих соображений сделан вывод, что наиболее

подходящей для этой задачи является самосогласованная система уравнений Власова-Максвелла. Вычисление эволюции электромагнитных полей выполняется по схеме FDTD, для моделирования плазмы использован метод «частица-в-ячейке» [1].

При использовании эволюционных уравнений Максвелла из условия Куранта возникает условие на шаг по времени для полей

$$dt_{FLD} \leq \frac{dx}{\sqrt{3}c} . \quad (4)$$

Шаг пространственной сетки dx рационально выбрать по порядку равным радиусу Дебая. Временной шаг движения частиц должен быть достаточно мал, чтобы разрешить плазменные колебания, то есть быть в несколько раз меньше обратной плазменной частоты.:

$$dt_{PIC} \leq \frac{1}{\omega_e} . \quad (5)$$

Эти ограничения на временные шаги для полей и частиц отличны друг от друга на порядок, поэтому выгодно использовать в модели два различных временных шага: dt_{FLD} для обновления значений полей и dt_{PIC} для ускорения и движения макрочастиц и, соответственно, подсчета токов. Их соотношение в плазме холловского двигателя:

$$dt_{PIC} \sim 10dt_{FLD} . \quad (6)$$

Схема FDTD имеет второй порядок точности. С учетом этого, так как необходимо моделирование на больших временах, в методе «частица-в-ячейке» выбран порядок аппроксимации при взвешивании частиц на сетке, равный двум.

В рамках данной работы реализовано несколько видов граничных условий: периодические граничные условия, условия симметрии и граничные условия на идеальном проводнике. При использовании периодических граничных условий значения полей за границей принимаются равными соответствующим значениям у противоположной границы. При использовании двух других видов граничных условий используется метод отображений. Значения полей за границей считаются равными соответствующим значениям у границы с тем же или с противоположным знаком. Ниже приведена таблица, иллюстрирующая выбор знака полей. Индексом n обозначены поля, тангенциальные к границе, индексом τ – нормальные.

Таблица 1

	симметрия	проводник
E_τ	«+»	«-»
E_n	«-»	«+»
B_τ	«-»	«+»
B_n	«+»	«-»

Если вместо отражения задано поле, равное некоторой постоянной, или некоторая зависимость поля от времени и двух координат, то это условие будет соответствовать источнику полей на границе. Условия на токи также следуют из метода изображений.

Взаимодействие частиц со стенками считается упругим столкновением.

Предложенная модель реализована в комплексе программ CFHall [10]. Так как для описания нелинейных процессов необходимо отказаться от нефизичных приближений, снижающих вычислительную сложность задачи, необходимо достигнуть максимальной производительности вычислений за счет выбора высокоэффективных алгоритмов. Поэтому код программы написан с применением новейших локально-рекурсивных нелокально-асинхронных (LRnLA) алгоритмов [11]. Кроме того, для дальнейшего ускорения процесса вычислений использована векторизация [12].

Постановка задачи

При помощи разработанного на данный момент кода была исследована задача о проникновении плазмы сквозь магнитное поле. На начальном этапе исследуемой трехмерной областью выбран параллелепипед, изображенный на рис. 2. Боковые его грани представляют собой диэлектрик. На верхнюю и нижнюю грани накладываются периодические условия; на переднем и заднем торцах — граничные условия идеального проводника (металл).

В начальный момент плазма занимает половину области около левой границы по x , скорости частиц соответствуют распределению Максвелла с температурой 0.0025. В области задается внешний постоянный профиль магнитного поля вдоль оси y

$$B_y = B_0(1 - \cos(x))$$

и электрическое поле вдоль оси x . Электрическое поле задается равным нулю в плазме, чтобы исключить из рассмотрения процесс установления равновесия между плазмой и полем. Ненулевое значение E_x остается в области вакуума. Необходимо, чтобы в начальном условии электрическое поле было согласовано соотношением $\text{div}E = \rho$ с плотностью плазмы. Поэтому вводится заданное смещение $\delta = 0.1$ электронов относительно ионов в плазме, и из значения этого смещения, с учетом того что в области плазмы $E_x = 0$, посчитано необходимое значения поля. Профили по оси x выбранных таким образом полей изображены на рис. 3.

В такой постановке можно исследовать $E \times B$ ток, появление плазменных неустойчивостей и транспорт электронов к противоположной границе.

Тестирование

Исследовано три варианта для амплитуды магнитного поля, которые следуют из соотношения радиусов Лармора для электронов (r_e) и ионов (r_i) и размера области L . В выбранных безразмерных единицах граничными значениями полей, при которых $r_e \sim L$ и $r_i \sim L$, являются $B \sim 0.008$ и $B \sim 0.3$ соответственно. В

первом варианте вычислений максимальная амплитуда магнитного поля $B_0=5$ (вариант 1), $r_e < r_i < L$ и электроны и ионы замагничены, во втором – при $B_0=0.5$ (вариант 2) замагничены только электроны ($r_e < L < r_i$), и, наконец, при $B_0=0.05$ (вариант 3) ионы и электроны не замагничены, $L < r_e < r_i$.

Время моделирования составляет до 8000, размер области $6.4 \times 6.4 \times 6.0$ ($128 \times 128 \times 120$ ячеек). С использованием кода CFhall такие расчеты по времени занимают немногим более суток на одном процессоре.

В результате расчетов обнаружено, что проникновение плазмы сквозь магнитное поле имеет место во всех рассмотренных вариантах, однако изменение магнитного поля приводит к существенно различным механизмам проникновения. На рис. 4 изображены профили плотности электронов в момент времени для различных вариантов максимальных амплитуд полей. Одномерные графики получены усреднением по осям y и z .

В случае, когда магнитное поле настолько мало, что электроны не замагничены (вариант 3), электроны выходят из области, занимаемой плазмой, ускоряются электрическим полем и вытягивают за собой ионы.

В варианте 2 электроны замагничены. Они выходят из области, занимаемой плазмой, на величину ларморовского радиуса и создают отрицательно заряженное облако, которое ускоряет ионы в положительном направлении оси x . После начала продвижения ионов в область вакуума в плазме возникает возмущение, соответствующее распространению затухающего ионного звука в изотермической плазме. Это проиллюстрировано на рис. 5.

В варианте 1, в котором магнитное поле достаточно велико, ионы также становятся замагниченными, и за все время расчета плазма не доходит до противоположной границы области. Описанное поведение подтверждается изменением со временем суммарной плотности заряда (рис. 6)

В течение всего времени моделирования сохраняется квазинейтральность плазмы.

При распространении плазмы в области на границе плазма-вакуум наблюдаются азимутальные волны с фазовой скоростью, равной тепловой скорости электронов (рис. 7). Стоит отметить, что изначальная постановка задачи содержала лишь одномерные зависимости полей от пространства, поэтому этот результат показывает применимость кода для исследования трехмерных процессов.

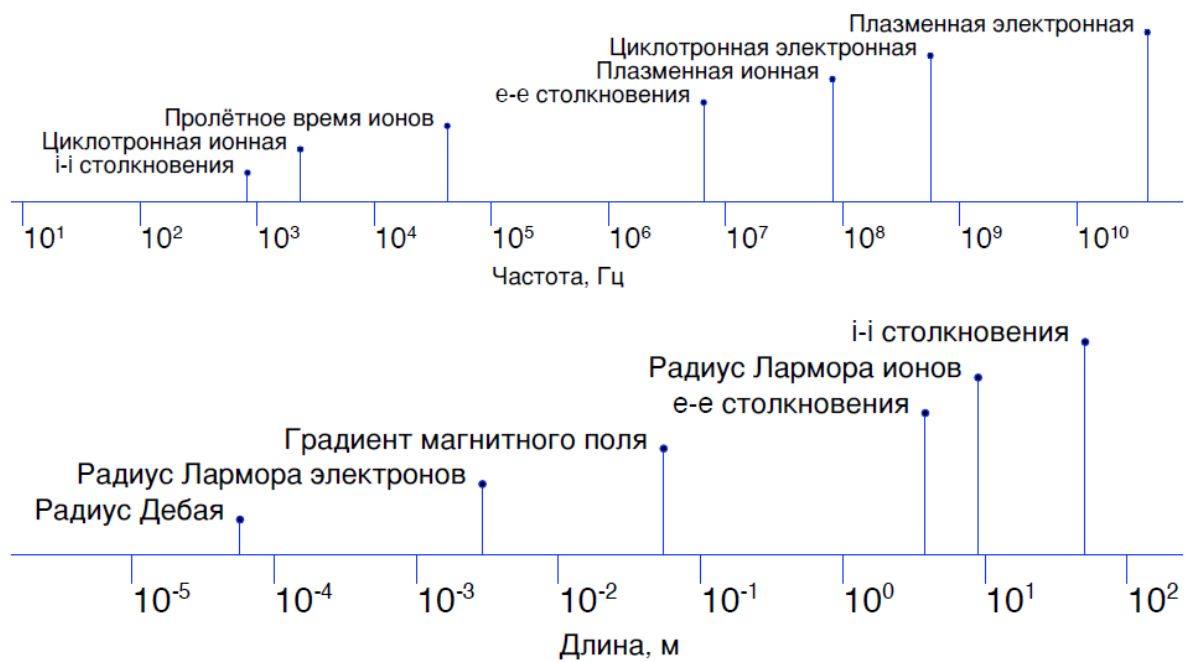


Рис.1. Масштабы характерных длин и частот процессов в плазме канала холловского двигателя

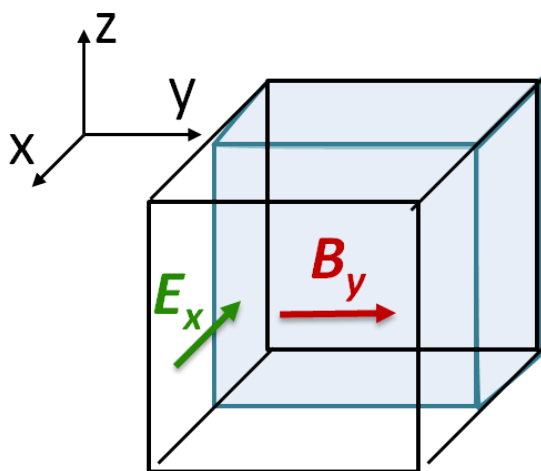


Рис. 2. Исследуемая трехмерная область

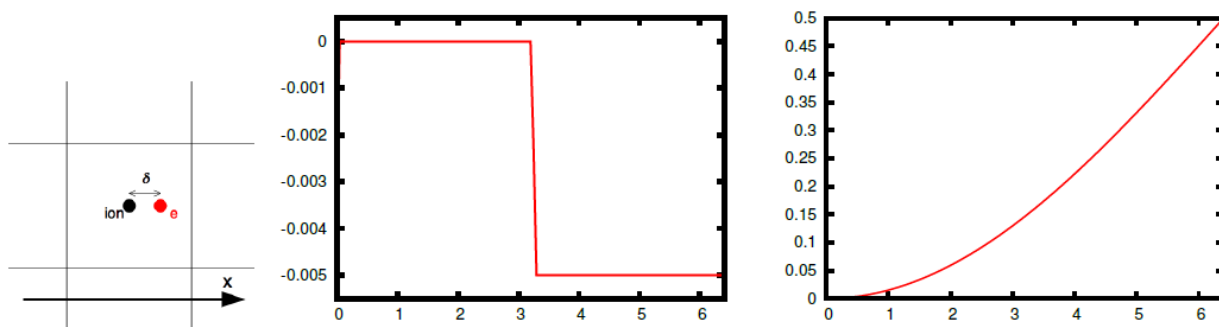


Рис.3. Профили вдоль оси x электрического и магнитного полей в области

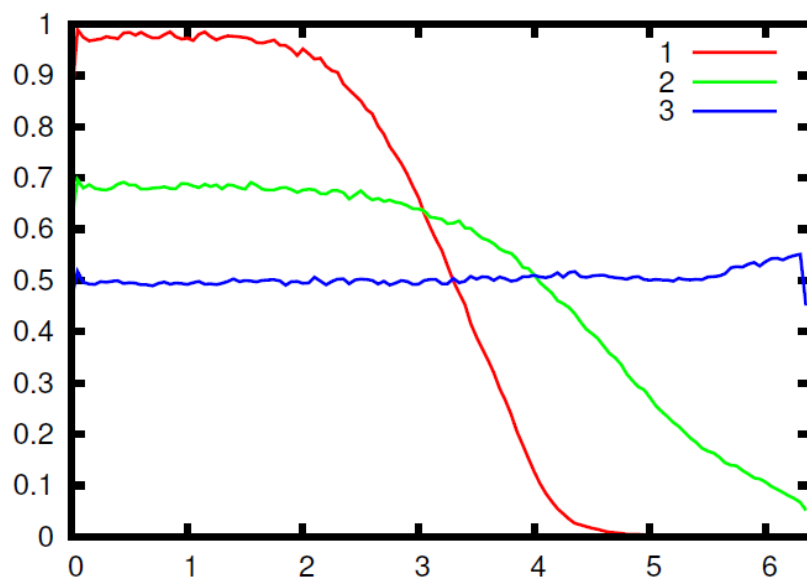


Рис. 4. Профили вдоль оси плотности ионов в момент времени для различных вариантов (по номеру) максимальных амплитуд полей

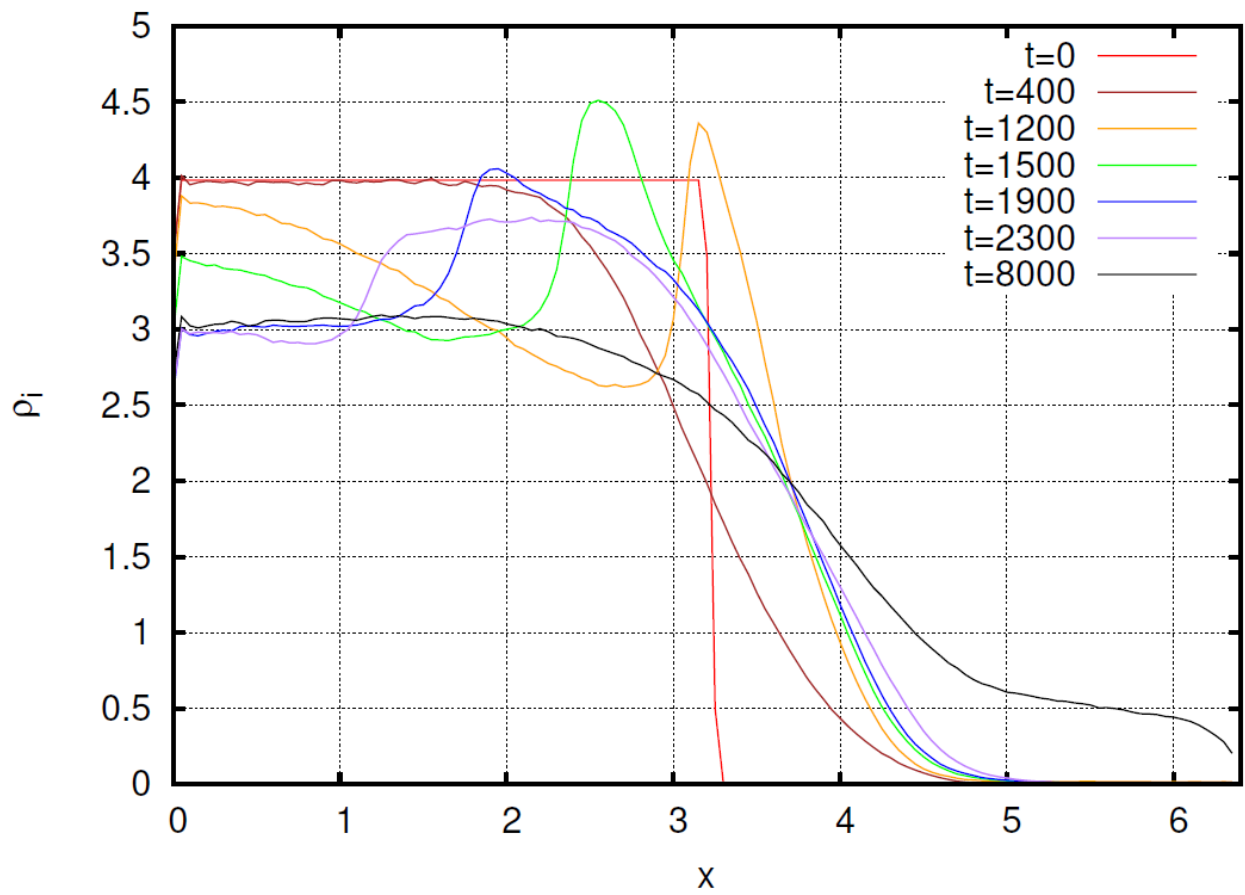


Рис. 5. Профили по оси x плотности ионов в моменты времени $t = 0, 400, 1200, 1500, 1900, 2300, 8000$. Максимальные амплитуды внешних полей

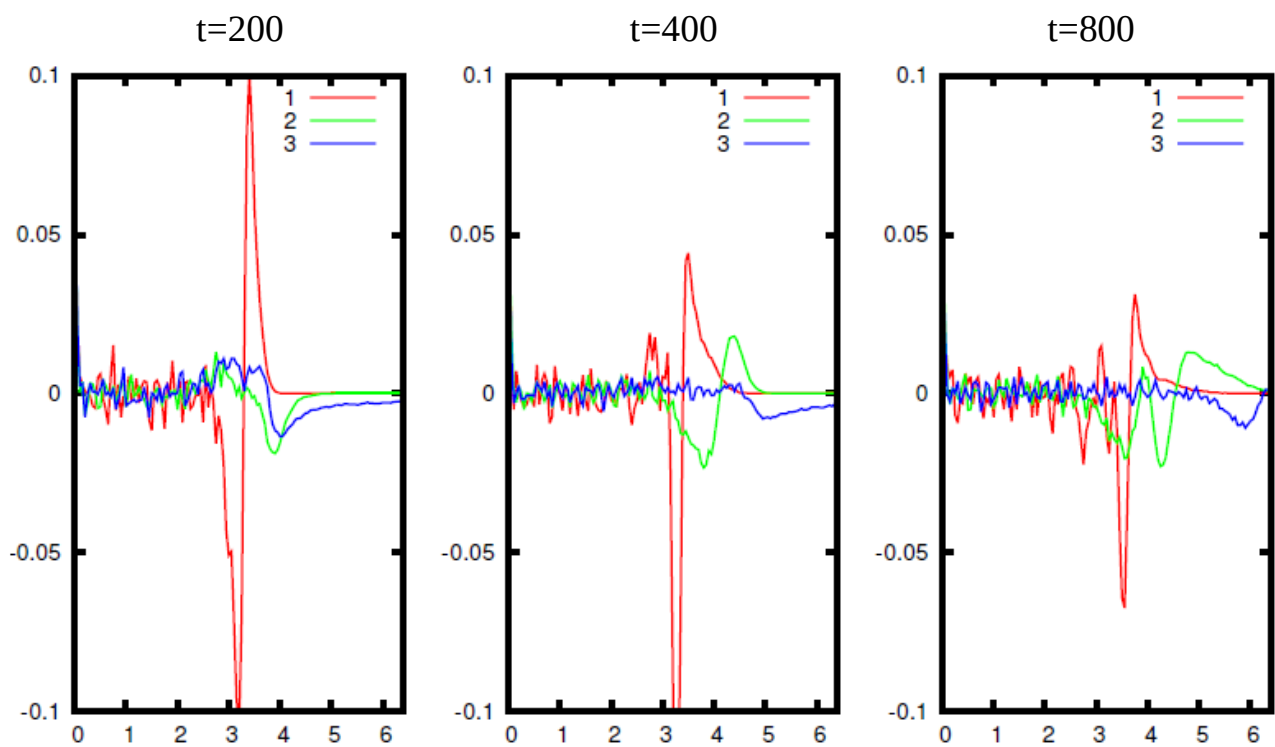


Рис. 6. Профиль по оси x суммарной плотности заряда для трех вариантов расчета в моменты времени

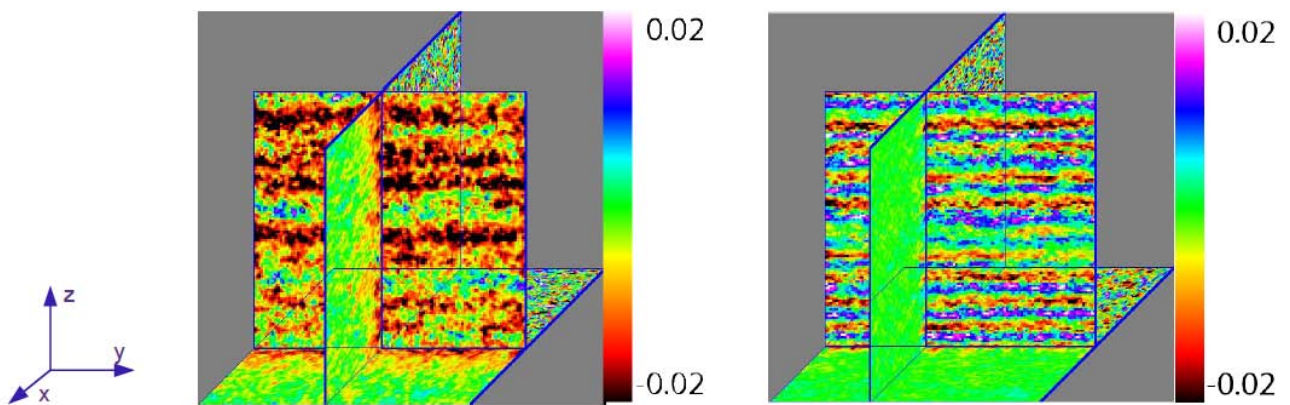


Рис. 7. Азимутальные колебания поля на границе вакуум-плазма. Цветом изображены поля E_x (слева) и E_z (справа)

Заключение

В результате работы разработан универсальный код для моделирования плазмы на основе полностью кинетической модели, в котором учтена возможность существенной разномасштабности задачи. Код основан на решении самосогласованной системы Власова-Максвелла, и для повышения точности моделирования в нем использован форм-фактор второго порядка точности.

Благодаря применению LRnLA алгоритмов, 3D3V моделирование проникновения плазмы через магнитное поле без искусственной калибровки физических параметров возможно за допустимые сроки.

В ходе тестирования исследовано 3 варианта постановки в зависимости от величины внешнего магнитного поля. В этих вариантах получено три различных режима распространения плазмы сквозь магнитное поле.

Проведенные тестовые расчеты показывают применимость программного комплекса при моделировании трехмерных процессов и его основное преимущество: при том что используется кинетическая модель без широко распространенных калибровок физических параметров, вычисления возможны за реальные сроки.

Дальнейшее улучшение производительности кода возможно за счет перехода на параллельные вычисления, а также использования векторизации не только для значений полей, но и для частиц.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 11-01-00282-а. Авторы благодарят Горячева И.А. за помощь в выборе безразмерных параметров.

Литература

1. Ю.С. Сигов «Вычислительный эксперимент: мост между прошлым и будущим физики плазмы. Избранные труды» Сост. Г.И. Змиевская, В.Д. Левченко. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. 288 с.
2. И.А. Горячев «Исследование высокочастотных процессов в плазме разрядного канала Холловского двигателя (ХД)», Магистерская диссертация, НИЯУ МИФИ, 2011.
3. J.M. Fox «Advances in Fully-Kinetic PIC Simulations of a Near Vacuum Hall Thruster and Other Plasma Systems.» PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, 2007.
4. Jr. J.J. Szabo «Fully Kinetic Numerical Modeling of a Plasma Thruster.» PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, 2001.
5. G. Laval, J.C. Adam, A.Heron «Study of stationary plasma thrusters using two-dimensional fully kinetic simulations.»// Physics of Plasmas, 2004, 11, number 1, p.295–305,.
6. V. Przebinda «Vertical optimization of particle in cell code.» Master's thesis, B.S. University of Colorado, 2003.

7. R. A. Fonseca, L. O. Silva, F. S. Tsung, V. K. Decyk, W. Lu, C. Ren, W. B. Mori, S. Deng, S. Lee, T. Katsouleas, and J. C. Adam «*OSIRIS: A three-dimensional, fully relativistic particle in cell code for modeling plasma based accelerators.*» Lecture Notes in Computer Science, 2002, 2331, p.342–351.
8. C. M. Celata, M. A. Furman, J.-L. Vay, D. P. Grote, “*Using WARP-POSINST for Calculation of the Electron Cloud in the ILC Positron Damping Ring Wigglers*” // Proceedings of ECLOUD 2007: International Workshop on Electron-Cloud Effects, Daegu, Korea, edited by H. Fukuma, E. S. Kim, K. Ohmi, KEK Proceedings 2007-10, 2007, p. 104-107.
9. A. Fiedman, D.P. Grote, D.A. Callahan, B.A. Langdon, and I. Haber «*3d particle simulation of beams using the warp code: transport around bends*» Part. Accel., 1992, 37-38, p. 131–139.
10. А.Ю. Перепёлкина «*Полностью кинетическая трехмерная модель плазмы холловского двигателя*», 2011, Магистерская диссертация, НИЯУ МИФИ.
11. В.Д. Левченко «*Асинхронные параллельные алгоритмы как способ достижения эффективности вычислений*» // Информационные технологии и вычислительные системы, 2005, 1, p.68.
12. В.Д. Левченко, А.В. Закиров «*Эффективный алгоритм для трехмерного моделирования распространения электромагнитных волн в фотонных кристаллах.*» Препринт ИПМ им. Келдыша РАН, 2005.

Численное моделирование уравнения Фоккера-Планка для ансамбля невзаимодействующих осцилляторов с различными статистиками

¹С.А. Хилков, ²А.В. Иванов

¹Московский физико-технический институт (государственный университет),
Россия, 141700, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский пер., 9.

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт
прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук

Россия, 125047, Москва, Миусская пл., д.4

ezz666@gmail.com, aiv.racs@gmail.com

Аннотация. Ансамбли осцилляторов со статистиками Бозе или Ферми описаны с помощью уравнения Фоккера–Планка с нелинейностью в его правой части. Численное решение осуществляется явным монотонным методом конечных объемов с ограничителем. Эффективность метода подтверждается на ряде расчетов, позволяющих сравнить поведение осцилляторов со статистиками Бозе и Больцмана при низких температурах.

Введение

В последнее время все более актуальным становится моделирование квантовых систем. Непосредственное их моделирование с помощью нестационарного уравнения Шредингера достаточно сложно и имеет ограниченную область применения. Поэтому большой интерес представляет создание альтернативных моделей, в частности моделей на основе УФП. Традиционно УФП описывает динамику систем, для которых равновесным распределением является распределение Больцмана, в то время как квантовая система в равновесии имеет распределение Бозе или Ферми. В данной работе предлагается феноменологическая модель на основе УФП, в которой в равновесии система имеет квантовую статистику. Подобные модели предоставляют возможность численного моделирования различных наноустройств, обеспечивая, с одной стороны, адекватное описание физических процессов с учетом температурных флуктуаций и имея, с другой стороны, приемлемую вычислительную сложность, допускающую проведение массовых расчетов для решения различных инженерных проблем и задач оптимизации.

В качестве такой системы мы будем рассматривать систему невзаимодействующих частиц с распределением Бозе–Эйнштейна, находящуюся в термостате температуры порядка температуры Бозе-

конденсации и помещенную в ангармонический потенциал. Подобные системы наблюдают в работах по исследованию Бозе-конденсата [1, 2]. В процессе охлаждения газ находится в оптической ловушке [3], являющейся внешним потенциалом, полученным в результате интерференции лазерных лучей.

Для численного решения УФП часто используют статистические методы, например, метод стохастического аналога [4]. Если его использовать для УФП с нелинейным членом, то придется восстанавливать функцию распределения по траекториям на каждом шаге по времени, поскольку функция распределения будет непосредственно входить в коэффициенты численной схемы. В этом случае для задания функции распределения с приемлемой точностью необходим слишком большой массив траекторий, что в итоге приводит к неприемлемой вычислительной сложности задачи. Для численного решения УФП с нелинейным членом в настоящей работе используется явный монотонный метод конечных объемов с ограничителем.

УФП для ансамбля осцилляторов со статистикой Бозе

В качестве отправной точки построения математической модели для ансамбля невзаимодействующих осцилляторов, находящихся в термостате, рассмотрим УФП с правой частью, обеспечивающей релаксацию к распределению Больцмана [5]:

$$\frac{\partial f(t, v, x)}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial U}{\partial x} \cdot \frac{\partial f}{\partial v} = \gamma \frac{\partial}{\partial v} \left[T \frac{\partial f}{\partial v} + v f \right], \quad (1)$$

где f — функция распределения ансамбля осцилляторов по координате x и скорости v , U — потенциал внешних сил, γ — коэффициент диссипации, T — температура термостата. Феноменологическое уравнение Фоккера–Планка, обеспечивающее релаксацию к распределениям Бозе или Ферми, получится, если умножить слагаемое, соответствующее диссипативному члену, в правой части уравнения на $1 \pm f$:

$$\frac{\partial f(t, v, x)}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial U}{\partial x} \cdot \frac{\partial f}{\partial v} = \gamma \frac{\partial}{\partial v} \left[T \frac{\partial f}{\partial v} + v f (1 \pm f) \right]. \quad (2)$$

Знак плюс соответствует статистике Бозе, а минус — Ферми. В этом легко убедиться, подставив в уравнение соответствующие распределения. Для левой части уравнения равновесным распределением будет любая функция энергии, конкретную форму этой функции определяет правая часть УФП.

Далее уравнение (1) будет называться линейным, а (2) — нелинейным.

Заметим, что оба уравнения сохраняют нормировку функции распределения:

$$\rho = \int_{-\infty}^{+\infty} \int f(x, v) dx dv = const. \quad (3)$$

Далее будем считать, что нормировка ρ равна числу частиц в системе, и использовать эти понятия как эквивалентные.

В тестовых расчетах рассматривалось три варианта потенциала внешних сил (рис. 1), описываемых выражением с двумя параметрами a и b :

$$U = \frac{a}{4}x^4 + \frac{b}{2}x^2$$

$$U = \begin{cases} U_0 = \frac{x^2}{2}, & b=1, \quad a=0; \\ U_1 = \frac{x^4}{4} - \frac{x^2}{2}, & b=-1, \quad a=1; \\ U_2 = \frac{x^4}{4} + \frac{x^2}{2}, & b=1, \quad a=1. \end{cases} \quad (4)$$

Численная схема

Построение явного монотонного метода конечных объёмов с ограничителем

Монотонность

Рассмотрим простейший вариант уравнения в частных производных — уравнение переноса:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -a \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (5)$$

где $a = \text{const} > 0$. Нас будет интересовать численное интегрирование на равномерной сетке правой части этого уравнения. Возьмем, например, схему второго порядка в центральных разностях:

$$u_t' = -\frac{a}{2\Delta x} \left[1 + \frac{u_{i+1} - u_i}{u_i - u_{i-1}} \right] (u_i - u_{i-1}). \quad (6)$$

Легко показать, например, методом гармоник, что при явном временном интегрировании эта схема является абсолютно неустойчивой. Это означает, что этот метод нельзя использовать для произвольных начальных условий. Тем не менее, в некоторых случаях он дает приемлемый результат.

Введем в рассмотрение понятие монотонности. Монотонность численного метода – это свойство, гарантирующее отсутствие «лишних», не физических, экстремумов в численном решении [6].

Можно показать, что эта схема будет монотонной, когда член в квадратных скобках положителен. Для удобства введем новое обозначение r_i , отношение градиентов:

$$r_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{u_i - u_{i-1}}. \quad (7)$$

Монотонность является достаточным условием устойчивости, что означает, что при выполнении во все моменты времени условия $1+r_i > 0$ во все моменты времени во всех точках расчетной области такую схему можно использовать.

Ограничители

Теперь рассмотрим схему против потока второго порядка. Разделим схему на два слагаемых: монотонную первого порядка (против потока) и немонотонную часть. Из монотонной части вынесем разность, соответствующую схеме против потока. Оставшийся множитель представим как функцию r_i , член, пропорциональный $1/r_i$, умножим на $\Psi(r_{i-1})$, свободный — на $\Psi(r_i)$, где $\Psi(r)$ — некоторая функция, которую мы будем называть ограничителем.

$$\begin{aligned} u_t' &= -\frac{a}{\Delta x}(u_i - u_{i-1}) - \frac{a}{\Delta x} \left[\frac{1}{2} \Psi(r_i)(u_i - u_{i-1}) - \frac{1}{2} \Psi(r_{i-1})(u_{i-1} - u_{i-2}) \right] = \\ &= -\frac{a}{\Delta x} \left[1 + \frac{1}{2} \Psi(r_i) - \frac{1}{2} \frac{\Psi(r_{i-1})}{r_{i-1}} \right] (u_i - u_{i-1}) \end{aligned}$$

Для монотонности явного численного метода достаточно выполнение условия:

$$\sigma < 1$$

$$\Psi(r) < \min\{2, 2r\}, \quad (8)$$

где $\sigma = \frac{ah}{\Delta x}$ — число Куранта, h - шаг по времени.

Кроме того, в работах [7] показано, что ограничители, для которых не выполняется неравенство

$$\Psi(r) \geq \min\{r, 1\}, \quad (9)$$

являются «чрезмерно сжимающими», превращая синусоиду в прямоугольные импульсы. Иногда, чтобы дополнительно сузить множество ограничителей, рассматривают свойство симметричности:

$$\Psi(r) = r \Psi\left(\frac{1}{r}\right) \quad (10)$$

и условие:

$$\Psi(1) = 1, \quad (11)$$

гарантирующее применение исходного метода на линейных участках. Мы также будем требовать выполнения условий (9-11).

Следует заметить, что использование ограничителя позволяет построить нелинейные схемы, реализующие «в обход» теоремы Годунова монотонный

метод второго порядка точности. Существенным минусом подобных схем является деформация решения в районе экстремумов.

Метод конечных объёмов

Для выполнения законов сохранения, в частности, в случае разрывов коэффициентов можно использовать метод конечных объёмов, строящийся на основе вычисления потоков через границы ячеек. Рассмотрим обобщенный вариант уравнения переноса:

$$u'_t + f'_x = 0, \quad (12)$$

где f — поток.

Для линейного уравнения переноса (5) поток вычисляется по формуле

$$f = au.$$

В одномерном случае на равномерной сетке можно записать схему:

$$u'_t = -\frac{1}{2\Delta x} [f_{i+0.5} - f_{i-0.5}]. \quad (13)$$

Как мы видим, метод пространственного интегрирования зависит только от интерполяции потока $f_{i+0.5}$ для всех ячеек сетки.

Численный метод для УФП со статистикой Больцмана

Интерполяция потоков

Мы будем использовать двумерный вариант метода конечных объёмов с ограничителем. Для этого для всех потоков g_i через границы ячейки мы должны задать интерполяцию $g_{i+0.5}$. Заметим, что у нас есть два типа потоков: потоки вдоль x и потоки вдоль v , индекс i нумерует ячейки по соответствующей координате. Суммарный поток через границу ячейки является суммой потоков в направлении, ортогональном границе. Поток по заданному направлению не единственен. Например, поток по v складывается из диссипации, диффузии и внешней силы. Выражение для численного потока $g_{i+0.5}$ имеет вид:

$$g_{i+0.5} = \begin{cases} g_i + 0.5(g_i - g_{i-1})\Psi(r_i), & \text{при } g_i \geq 0; \\ g_{i+1} + 0.5(g_{i+1} - g_{i+2})\Psi(r_{i+1}), & \text{при } g_i < 0. \end{cases} \quad (14)$$

Мы используем один ограничитель Ψ для всех потоков.

Исключение сделаем только для диффузии. Для диффузионного члена будем использовать постоянный поток:

$$d_i = \frac{\gamma T}{dv^2} (f_i - f_{i+1}). \quad (15)$$

Численный метод для УФП со статистикой Бозе

Диссипация

Поток для диссипативного члена в нелинейном (2) случае выражается формулой:

$$g_i = -vf(1 + f). \quad (16)$$

Численный поток для диссипации в уравнении (2) имеет вид (15), где:

$$g_i(x) = -v_i f(x, v_i)(1 + f(x, v_i)).$$

Ограничитель для численных методов

В наших задачах мы будем использовать ограничитель «Superbee» [8], который изображен на рис. 2. Под областью допустимых ограничителей понимается область, удовлетворяющая условиям (9-12).

Ограничитель задается формулой:

$$\Psi(r) = \max[0, \min(2r, 1), \min(r, 2)] . \quad (17)$$

Этот ограничитель интересен тем, что он не привносит дополнительной диффузии. С другой стороны, на непрерывных решениях его не рекомендуется использовать, так как он в достаточной степени является «сжимающим».

Описанная схема имеет второй порядок аппроксимации по пространству на гладких решениях и первый – на разрывах и экстремумах, так как мы используем явное временное интегрирование, порядок аппроксимации по времени — первый.

Устойчивость построенных численных схем

Достаточным условием устойчивости является монотонность. Так как мы используем явное интегрирование по времени, то условием устойчивости будет условие устойчивости схемы против потока, т.е. условие Куранта. В линейном случае (1) оно принимает вид:

$$1 > h \left[\frac{\max|v|}{dx} + \frac{\max|v| + \max|F|}{dv} + \frac{2\gamma T}{dv^2} - \gamma \right] . \quad (18)$$

В нелинейном случае (2) есть небольшое отличие:

$$1 > h \left[\frac{\max|v|}{dx} + \frac{\max|v(1 + f)| + \max|F|}{dv} + \frac{2\gamma T}{dv^2} - \gamma \right] . \quad (19)$$

Граничные условия

Условия на границах — нулевые, поэтому функция распределения «утекает» из области на каждом шаге по времени. Оценим равновесное значение оттока функции. Для простоты будем считать, что задача стартует с равновесной функции распределения. Шаг по времени для релаксационной задачи выбирается из соображения выполнения условий устойчивости.

Будем считать, что размер сетки по x равен M , а по y — N узлов. Тогда численный поток через границу области будет иметь вид:

$$\begin{aligned}
 D = & \frac{h}{dx} \sum_{v_i > 0} \left[f\left(\frac{Mdx}{2}, v_i\right) + f\left(-\frac{Mdx}{2}, -v_i\right) \right] v_i + \\
 & + \frac{h}{dv} \left[\sum_{x_i: F(x_i) > 0} f\left(x_i, -\frac{Ndv}{2}\right) F(x_i) - \sum_{x_i: F(x_i) < 0} f\left(x_i, \frac{Ndv}{2}\right) F(x_i) \right] + \\
 & + \frac{\hbar T}{dv^2} \sum_{i=0}^M \left[f\left(x_i, \frac{Ndv}{2}\right) + f\left(x_i, -\frac{Ndv}{2}\right) \right] \leq \\
 & \leq \frac{h dv (N+2) N}{4 dx} \max_{(x,v) \in G_v} \{f(x,v)\} + \left[F_s \frac{h}{dv} + \frac{2M\hbar T}{dv^2} \right] \max_{(x,v) \in G_x} \{f(x,v)\},
 \end{aligned}$$

где D — это число частиц, ушедших за границу области за шаг по времени, G_x — части границы, протяженные по x , G_v — части границы, протяженные по v , $F_s = \sum_{x_i} |F(x_i)|$.

Величину D можно оценить сверху, считая, что значение функции распределения на границе равняется максимальному по ней значению. Это значение можно оценить через равновесную функцию распределения.

В линейном случае равновесным распределением будет распределение Больцмана:

$$f(x, v) = C \exp\left[-\frac{E}{T}\right], \quad (20)$$

где $E = \frac{v^2}{2} + U$ — полная энергия, а C — константа нормировки.

В нелинейном случае (2) формула для потока через границу остаётся верной. Для оценки функции распределения на границе необходимо вычислять химический потенциал для заданного числа частиц.

Результаты моделирования

Аналитические оценки второго момента скорости

Для проверки адекватности численной схемы рассчитаем $\langle v^2 \rangle$. Известно, что установившееся распределение для системы, подчиняющейся уравнению (2), является распределением Бозе (или Ферми). Поэтому второй момент можно вычислить непосредственно для этих распределений и сравнить с численным результатом. Для статистики Больцмана несложно вычислить зависимость второго момента скорости от температуры и количества частиц. Распределение

Больцмана во внешнем потенциале распадается на два множителя: первый зависит только от координаты, второй — только от скорости. Кратный интеграл распадается на две части, причем координатная часть такая же, как и в самом распределении, поэтому:

$$\langle v^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho v^2}{\sqrt{2\pi T}} \exp\left[-\frac{v^2}{2T}\right] dv = \rho T. \quad (21)$$

Для распределений Бозе и Ферми второй момент приходится считать численно. Трудность состоит в определении значения химического потенциала μ , отвечающего заданному числу частиц ρ .

Для определения химического потенциала и второго момента скорости в нелинейном случае у нас есть система интегральных уравнений:

$$\rho = \iint_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx dv}{\exp\left[\frac{v^2/2 + U - \mu}{T}\right] \pm 1}, \quad (22)$$

$$\langle v^2 \rangle = \iint_{-\infty}^{+\infty} \frac{v^2 dx dv}{\exp\left[\frac{v^2/2 + U - \mu}{T}\right] \pm 1}. \quad (23)$$

Из уравнения (23) по известному числу частиц ρ мы вычисляем химический потенциал μ и, подставив его в уравнение (24), находим второй момент скорости.

В расчете мы использовали формулу Симпсона для вычисления интегралов и дихотомию для нахождения μ . Учитывая, что функция распределения не может быть отрицательной, $U + E - \mu \geq 0$, так как $E_{\min}=0$, значит $\mu_{\max}=U_{\min}$, откуда легко получить максимальное значение μ .

Для определения значения химического потенциала μ , соответствующего числу частиц, удобно использовать метод стрельбы, так как ρ монотонно зависит от μ . Полученные оценки представлены графически на рис. 3.

Для получения численных значений второго момента скорости мы моделируем релаксационную задачу в гармоническом потенциале U_0 . Время установления равновесной функции распределения порядка 5/γ. В качестве начального условия мы берём распределение Больцмана с температурой $T/2$. Сравнение теоретических и численных вторых моментов скорости, при числе частиц $\rho=20$, представлены на рис. 4.

Из рисунка видно, что в линейном случае для статистики Больцмана (2) вторые моменты скорости совпадают с хорошей точностью, а в нелинейном случае для статистики Бозе (2) в окрестности нуля температуры имеется постоянная относительная погрешность. Скорее всего, она вызвана тем, что ограничитель «Superbee» чрезмерно сжимает решение и не слишком подходит для этой задачи.

Порядок сходимости численной схемы для линейного случая

В линейном случае (1) можно оценить порядок сходимости численного метода. Зависимость погрешности второго момента скорости от шагов по x и v ($dx \sim dv$) показана на рис. 5. По наклону кривой метод сходится со вторым порядком точности.

Эволюция функций распределения

Проведены расчеты релаксации функции распределения в двухъямном потенциале U_2 для линейного и нелинейного случая. В качестве начального условия взята δ -функция распределения, т.е. все частицы имеют нулевую скорость и координату и находятся на «седле» потенциала. Температура термостата выбрана равной $T=0.3$, коэффициент диссипации $\gamma=0.1$, время счета $10/\gamma$, размер сетки $M \times N = 200 \times 201$, шаг по времени $h \approx 0.0003$, по фазовому пространству $dx \approx dv \approx 0.27$. Эволюция функций распределения в этих расчетах представлена на рис. 6. На всех графиках стоит автоматическое масштабирование функции распределения, значение которой обозначается цветом.

На рис. 6 видно существенное различие между ансамблями со статистикой Больцмана и Бозе. В линейном случае функция распределения разделяется на две части, каждая из которых приходит в свою яму. У функции распределения не более двух максимумов одновременно, начальная функция разделяется на два максимума сразу после старта.

В нелинейном случае, напротив, большая часть функции распределения остаётся долгое время на «седле» потенциала. Разделение частиц по ямам потенциала происходит без разбиения максимума функции распределения на две части. Пик в начальной точке со временем уменьшается, а в ямах появляются свои пики. На четвертой картинке для нелинейного случая видно одновременно три максимума функции распределения. Такое поведение функции распределения объясняется сильной диссипацией в окрестностях максимумов функции распределения, вызванной нелинейным членом.

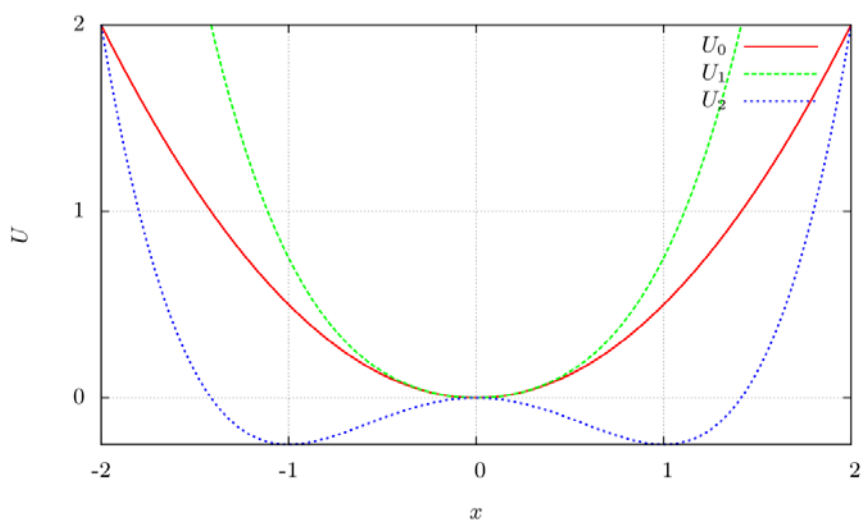


Рис. 1. Потенциалы внешних сил

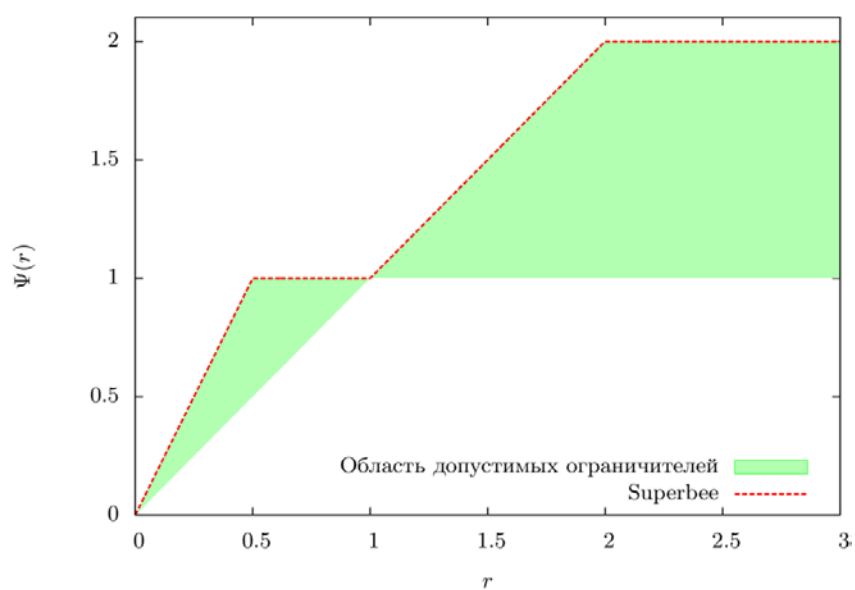


Рис. 2. График ограничителя «Superbee»

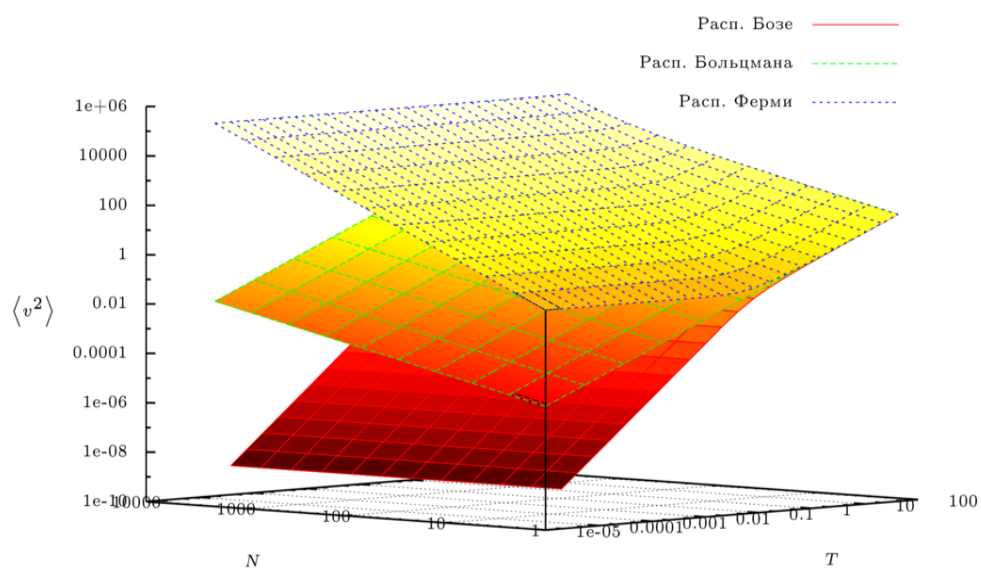


Рис. 3. Зависимость второго момента скорости $\langle v^2 \rangle$ от числа частиц N и температуры T в гармоническом потенциале для систем с распределениями Бозе, Больцмана и Ферми

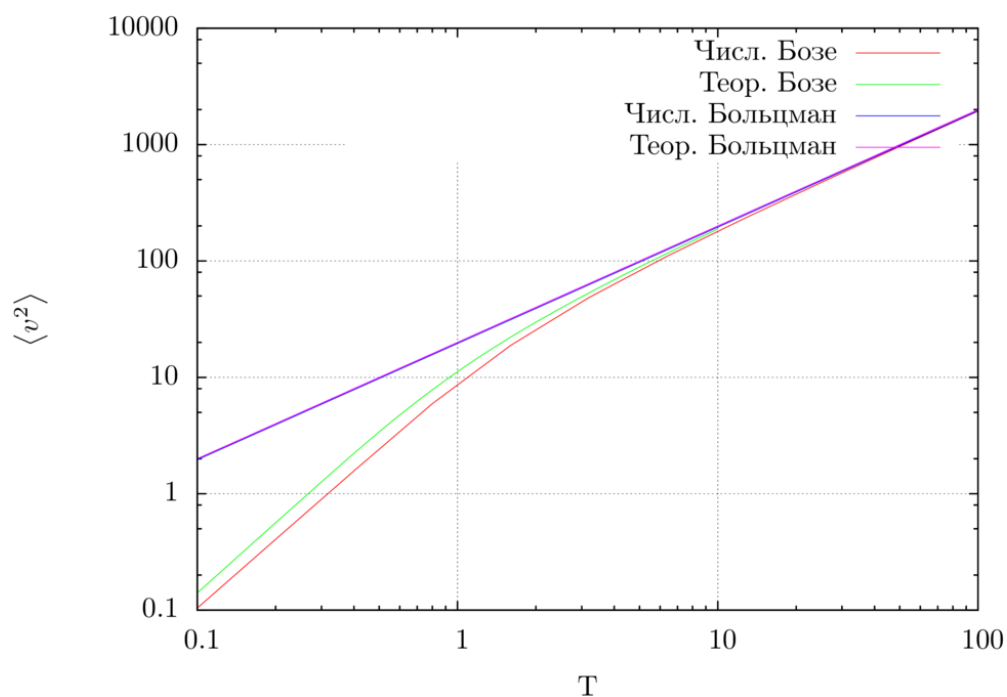


Рис. 4. Численные и теоретические зависимости второго момента скорости $\langle v^2 \rangle$ для установившегося распределения частиц $\rho = 20$

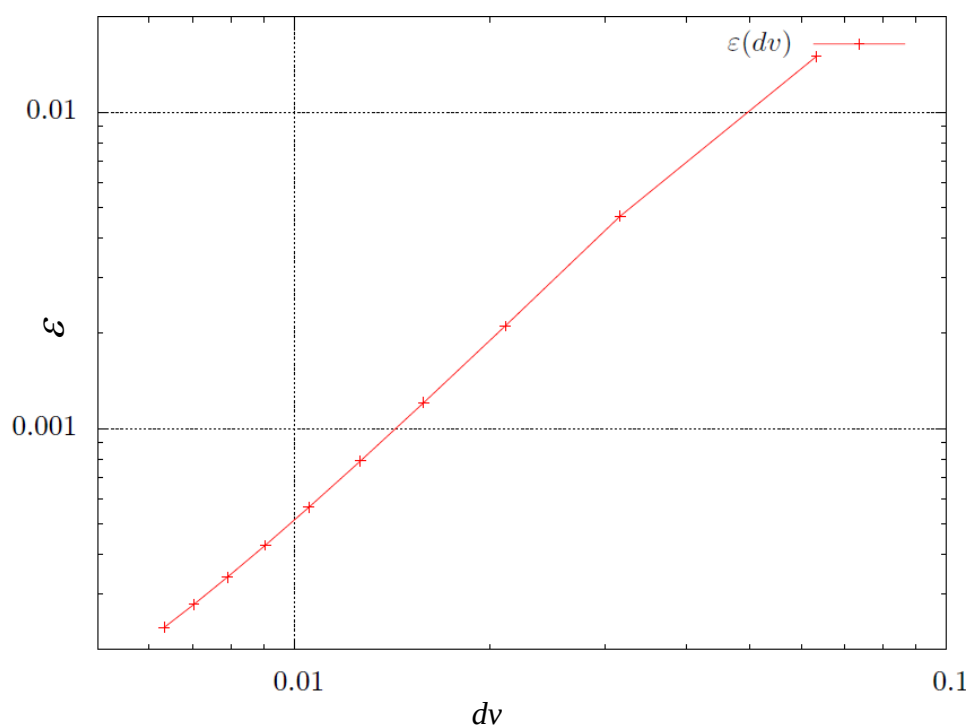


Рис. 5. Зависимость погрешности второго момента скорости $\epsilon = \frac{\langle v^2 \rangle_{\text{числ}} - \langle v^2 \rangle_{\text{теор}}}{\langle v^2 \rangle_{\text{теор}}}$ для установившегося распределения при числе частиц $N = 20$, температуре $T = 0.1$ для линейного случая (1)

Статистика Больцмана

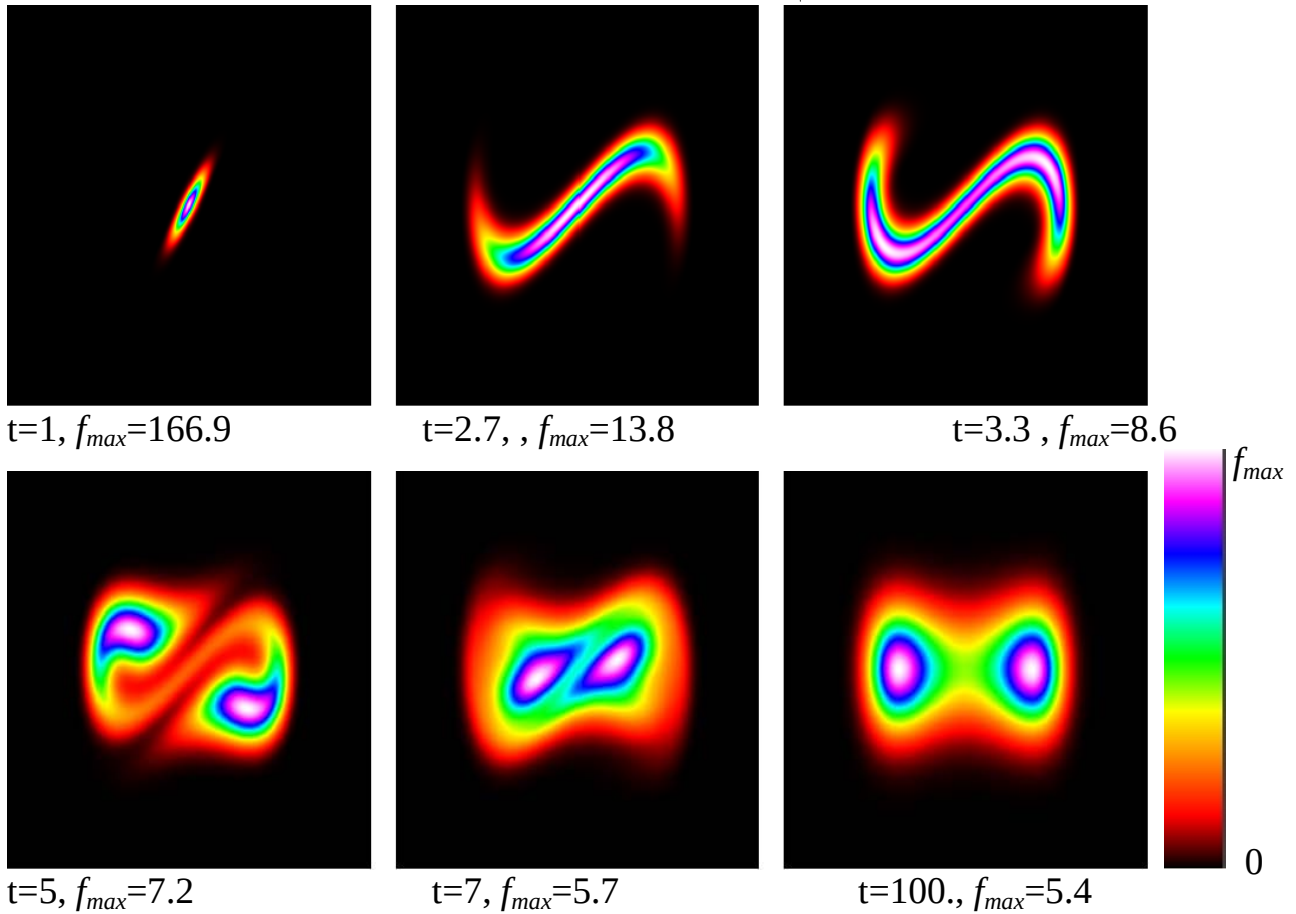


Рис. 6а. Функция распределения в двухъямном потенциале U_2 при температуре $T=0.4$ в разные моменты времени t . По горизонтали отложена координата x , по вертикали – v , цветом показаны значения функции распределения в автоматическом масштабе, своём для каждого графика. Шкала соответствия цвета и значений приведена на правой части графика

Статистика Бозе

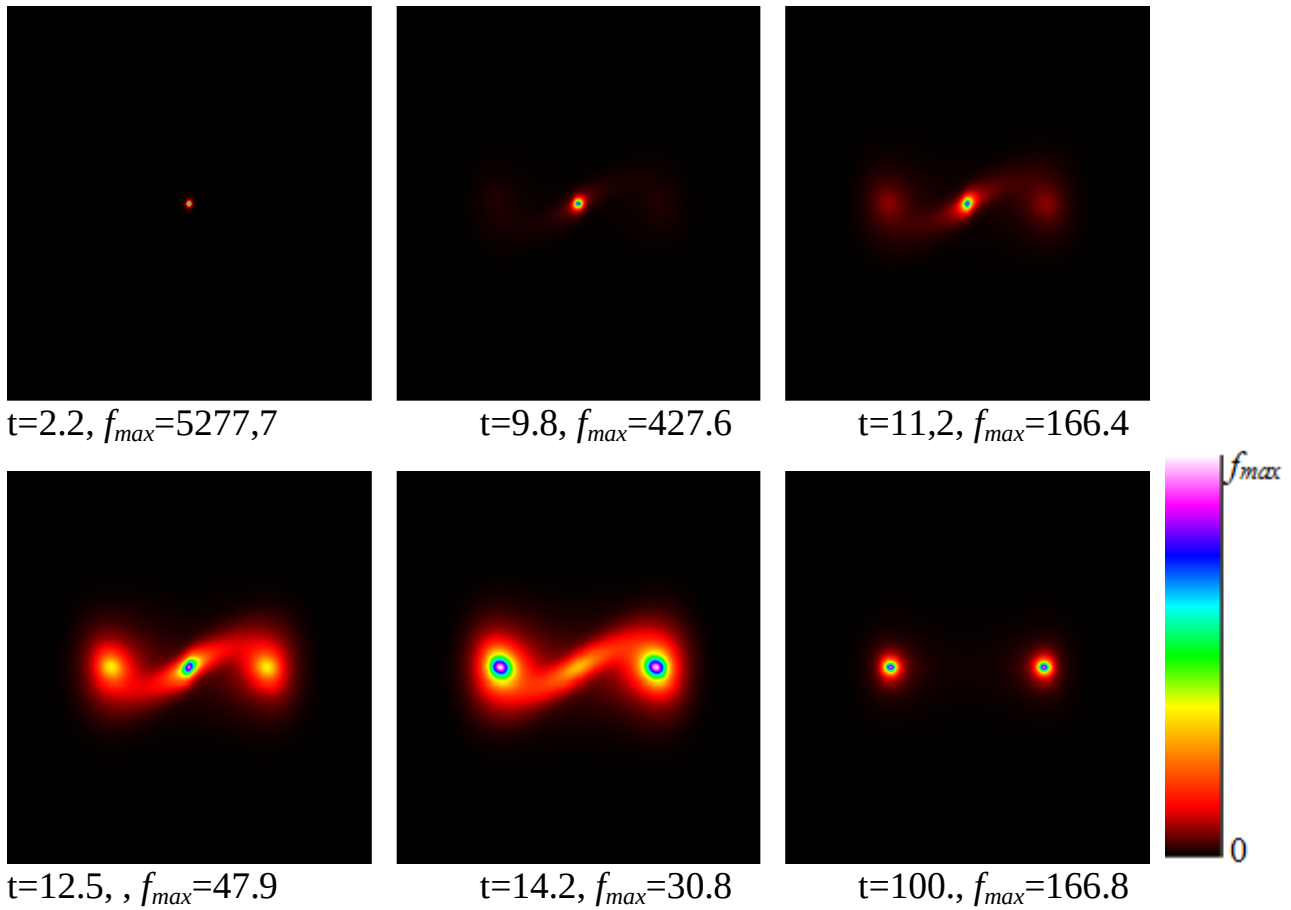


Рис. 6б. Функция распределения в двухъямном потенциале U_2 при температуре $T=0.4$ в разные моменты времени t . По горизонтали отложена координата x , по вертикали – v , цветом показаны значения функции распределения в автоматическом масштабе, своём для каждого графика. Шкала соответствия цвета и значений приведена на правой части графика

Заключение

Для феноменологической модели не взаимодействующего Бозе-газа (2) в потенциале внешних сил построен монотонный численный метод второго порядка на непрерывных решениях и первого порядка на разрывах и экстремумах. Проведены тестовые расчеты для релаксации газа Больцмана и газа Бозе. Показано, что метод для уравнения (1) имеет второй порядок сходимости (рис. 5). Температуры Бозе-конденсации, полученные теоретически и численно, совпадают, несмотря на постоянную относительную ошибку в районе $T=0$ (рис. 4). Для исключения этой ошибки предлагается использовать другие ограничители. Кроме того, получены существенные отличия в эволюции функции распределения при релаксации в линейном (1) и нелинейном случае (2) для температуры порядка температуры конденсации.

Литература

- [1] R. Gati, M. Albiez, J. Fölling, B. Hemmerling, M.K. Oberthaler «*Realization of a single Josephson junction for Bose-Einstein condensates*» //Applied Physics B-lasers and optics, 2006, V. 82, p. 207.
- [2] M. Albiez, R. Gati, J. Fölling, S. Hunsmann, M. Cristiani, M.K. Oberthaler «*Direct Observation of Tunneling and Nonlinear Self-Trapping in a single Bosonic Weak Link*» Phys. Rev. Lett., 2005, V. 95 010402 arXiv:cond-mat/0411757v4 [cond-mat.other] .
- [3] Н.Н. Колачевский «*Лазерное охлаждение редкоземельных атомов и прецизионные измерения*»// УФН, 2011, 181:8 , с. 896–903.
- [4] Г.И. Змиевская «*Численные стохастические модели неравновесных процессов*»// Математическое моделирование, 1996, Т. 8 №11. С. 3-40.
- [5] Ю.Л. Климонтович «*Статистическая теория открытых систем*» М.:ТОО«Янус», 1995, Т. 1, 624 с.
- [6] C. Hirsch «*Numerical Computation of Internal and External Flows*»// Fundamentals of Computational Fluid Dynamics Oxford: Elsevier, 2007. V. 1 696p
- [7] P.K. Sweby «*High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws*»// SIAM J. Num. Anal., 1984, 21 p. 995–1011.
- [8] P.L. Roe, M.J. Baines «*Asymptotic behavior of some non-linear schemes for linear advection*»// Proceedings of the Fifth GAMM Conference on Numerical Methods in Fluid Mechanics, Notes on Numerical Fluid Mechanics, 1983, V. 7, M. Pandoli and R. Piva (Eds.). Vieweg, p. 283.

Эффективное трехмерное моделирование эволюции электромагнитных волн в актуальных задачах нанооптики

¹А.В. Закиров, ²В.Д. Левченко

¹Московский физико-технический институт (государственный университет),
Россия, 141700, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский пер., 9.

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт
прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук,

Россия, 125047, Москва, Миусская пл., д.4

zakirovandrey@gmail.com, vadimlevchenko@mail.ru

Аннотация. Предлагается широкофункциональный программный код для моделирования произвольных оптических и электромагнитных устройств и материалов, таких как фотонные кристаллы, метаматериалы (материалы с отрицательным показателем преломления), скрывающие покрытия и другие различные структуры нанометрового масштаба. Код основан на использовании локально-рекурсивных нелокально-асинхронных алгоритмов, которые позволяют достигать высокой эффективности программы. В данной работе предлагается реализация такого алгоритма для моделирования уравнений Максвелла. Имеется возможность задавать различные граничные условия, в том числе и PML (Perfectly Matched Layer, гран. условия идеально согласованного слоя). Имеется возможность моделировать широкий набор различных сред (посредством задания различных материальных уравнений): бездисперсионные материалы, материалы с дисперсией, проводники, материалы с отрицательным показателем преломления, анизотропные, гиперболические среды, скрывающие покрытия, материалы с нелинейным откликом на амплитуду электрического и магнитного полей. Предлагаемый код также может быть применен для различной оптической диагностики в исследованиях и изучении культурных ценностей в искусстве, к примеру, живописи. Таким образом, имеется возможность имитировать оптические эксперименты над картинами, рисунками и другими предметами искусства.

Введение

Свет оказывает огромное воздействие на культурные объекты. Такое воздействие может быть вредно и даже опасно. Воздействие обычно зависит от

частоты света, к примеру, некоторые картины могут портиться от ультрафиолетового или инфракрасного излучения, при этом видимый свет не оказывает на них существенного разрушающего воздействия. Предсказать взаимодействие света с различными частями и слоями картины может оказаться довольно трудно. В этом случае необходимо провести численный эксперимент распространения света в картине для всего возможного спектра излучения. Такие численные эксперименты оказываются очень трудоёмки и нетривиальны из-за большого размера исследуемого объекта (по сравнению с длиной волны света) и высокой сложности материалов картины или рисунка. В первую очередь, необходима очень быстродействующая программа для такого моделирования. Такая программа также должна иметь широкую функциональность и гибкость. Для этого был разработан программный код для моделирования оптических процессов в современных устройствах (таких как фотонные кристаллы, метаматериалы и т.д.). Далее будут описаны задачи из этой области и методы, которыми мы будем их решать. Тут следует отметить, что моделирование распространения света в современных оптических устройствах и моделирование распространения света для памятников живописи очень похожи с точки зрения численного эксперимента.

Современные искусственные оптические устройства и материалы, такие как фотонные кристаллы, метаматериалы, материалы с отрицательным показателем преломления, обтекаемые покрытия, обычно являются очень сложными структурами. Аналитические теоретические расчеты распространения электромагнитных волн в этих средах возможны лишь в простых случаях при различных приближениях и ограничениях. Для численных алгоритмов возникают сложности при больших размерах счетной области. Это приводит к необходимости разработки эффективных алгоритмов и их реализации, потому что существующие системы [1,2], как правило, не могут эффективно рассчитывать трехмерные задачи, даже если предоставлены достаточные вычислительные ресурсы. “Эффективными” будем называть алгоритмы, которые имеют реальную производительность, приближенную к теоретической пиковой производительности вычислителя. В данной работе описана реализация такого алгоритма для моделирования уравнения Максвелла.

В качестве численной схемы используется схема FDTD (Finite-difference time-domain method [3]). В качестве алгоритма обхода графа зависимостей численной схемы (последовательность вычислений) используются локально-рекурсивные нелокально-асинхронные (LRnLA) алгоритмы [4], которые позволяют достигать высокой эффективности программы. Расчетная область состоит из ячеек Yee, которые образуют прямоугольный параллелепипед. Эта область окружена со всех сторон идеально согласованным слоем PML (Perfectly Matched Layer) [5]. Таким образом задаются граничные условия. Во многих случаях это необходимое требование для изучения ограниченных областей. На одной из граней между основной областью и PML расположен источник волн

(задается как ток в уравнениях Максвелла). Были разработаны способы для моделирования следующих сред:

- простые бездисперсионные материалы с действительными диэлектрической ε и магнитной μ проницаемостями, зависящими только от координаты в пространстве;
- материалы с дисперсией, описываемой моделью Друде, где $\varepsilon = 1 + \frac{e^2}{m} \sum \frac{N_k}{\omega_k^2 - \omega^2 + i\gamma_k \omega}$. Проводники и Материалы с отрицательным показателем преломления также моделируются посредством этой модели;
- анизотропные, гиперболические среды, скрывающие покрытия;
- материалы с нелинейным откликом на амплитуду электрического и магнитного полей.

Оптимизация программы позволяет использовать преимущества современных процессоров для ускорения расчетов и позволяет использовать много ядер процессора для единичного расчета без уменьшения эффективности. Эффективность расчетов во всех случаях не меньше 40% по отношению к теоретическому значению, полученному из тактовой частоты процессора, и практически не зависит от объема расчетной сетки. Благодаря таким результатам мы можем использовать существующий код для моделирования множества электромагнитных задач, актуальных сегодня.

Общая постановка задачи

Производится полноволновое трехмерное численное моделирование эволюции электромагнитного поля, описываемого уравнениями Максвелла, в ограниченной области с различными граничными условиями. Конкретная модель среды задается посредством материальных уравнений.

Уравнения Максвелла используются в дифференциальной записи:

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \quad \nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (1)$$

Размерность скорости света равна 1. Размерности остальных величин выбраны следующим образом:

$$[x, t, E, H] = d, 1/d, E_0, H_0,$$

здесь d – характерная длина в задаче, E_0 и H_0 – начальные амплитуды соответственно электрической и магнитных компонент волны в вакууме.

Эти уравнения необходимо дополнить материальными уравнениями, связывающими $\vec{E}$ с $\vec{D}$ и $\vec{H}$ с $\vec{B}$:

$$\vec{E} = f(\vec{D}), \quad \vec{H} = g(\vec{B}).$$

Конкретный вид функций f и g зависит от задаваемых материальных уравнений и, вообще говоря, может быть довольно сложным. Самым простым случаем является бездисперсионный диэлектрик: в этом случае $\vec{D} = \varepsilon \vec{E}$, $\vec{B} = \mu \vec{H}$.

Численная схема

Электромагнитное поле в задаче описывается значениями векторов электрического ($\vec{E}, \vec{D}$) и магнитного ($\vec{B}, \vec{H}$) полей, известных в заданные моменты времени. Изменения этих значений описываются явной численной схемой, аппроксимирующей уравнения Максвелла вкупе с материальными уравнениями.

В качестве явной разностной схемы используется FDTD. Этот метод позволяет найти значения компонент электромагнитного поля в последующие временные слои через значения на текущем временном слое. Ниже представлено краткое описание этого метода в удобном виде для численных расчетов.

Опишем этот метод для варианта простой модели бездисперсионного диэлектрика. Материальные уравнения в этом случае представляют собой линейную скалярную зависимость между напряженностью электрического поля и электрической индукцией, а также между напряженностью магнитного поля и магнитной индукцией, притом на эти зависимости влияет только пространственная координата.

Моделирование производится в трехмерной области $V = \{(x, y, z): 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b, 0 \leq z \leq c\}$. В этой области расположена пространственная и временная сетка ω_h^s :

$$\omega_h^s = \left\{ \begin{array}{l} x_i = ih_x, y_j = jh_y, z_k = kh_z, t_s = s\tau; \\ i = 0, 1, \dots, N_x; j = 0, 1, \dots, N_y; k = 0, 1, \dots, N_z; s = 0, 1, \dots \end{array} \right\}.$$

Значение сеточной функции F в точке (x_i, y_j, z_k) в момент времени t_s обозначим

как $F_{i,j,k}^s$. Таким образом, $F_{i,j,k}^s = F(ih_x, jh_y, kh_z, s\tau)$. Конечную разность $(F_{i,j,k}^s - F_{i,j,k}^{s-1})/\tau$ обозначим как $\Delta_t F_{i,j,k}^s$. Аналогично

$$\Delta_x F_{i,j,k}^s = (F_{i,j,k}^s - F_{i-1,j,k}^s)/h_x, \quad \Delta_y F_{i,j,k}^s = (F_{i,j,k}^s - F_{i,j-1,k}^s)/h_y,$$

$$\Delta_z F_{i,j,k}^s = (F_{i,j,k}^s - F_{i,j,k-1}^s)/h_z.$$

Суть FDTD-метода состоит в использовании решетки Yee (Yee lattice) [3], образующей расчетную сетку. На рис.1 приводится изображение одной ячейки этой решетки для трехмерного случая. Эта решетка представляет собой одну ячейку сетки, используемой в методе FDTD. Как видно из рисунка, все компоненты электромагнитного поля $E_x, E_y, E_z, H_x, H_y, H_z$ берутся в разных точках. Кроме этого, компоненты электрического поля $\vec{E}$ рассматриваются в моменты времени $s-0.5$, а магнитного $\vec{H}$ – в моменты s . Компоненты вектора $\vec{D}$ рассматриваются в тех же точках, что и соответствующие компоненты вектора $\vec{E}$. Аналогично для $\vec{B}$ и $\vec{H}$. Делается это для обеспечения 2-го

порядка точности разностной схемы и выполнения условий $\text{div } \vec{B} = 0$ и $\text{div } \vec{D} = 0$.

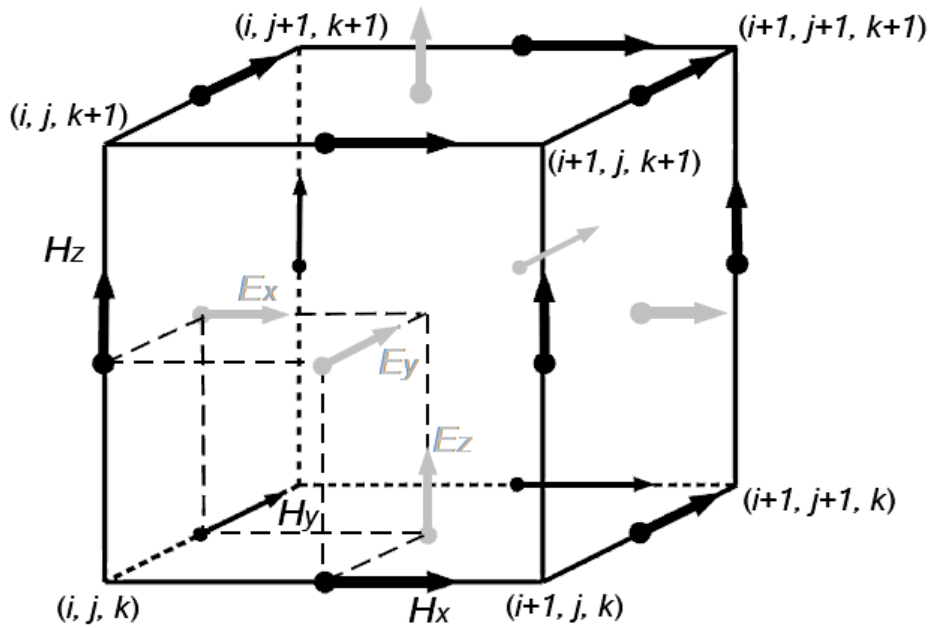


Рис. 1. Решетка Yee

Для примера рассмотрим два уравнения из шести (1). Используя схематичную запись рис.1, запишем разностный аналог этих уравнений:

$$\Delta_t (D_x)_{i,j+0.5,k+0.5}^{s+0.5} = \Delta_y (H_z)_{i,j+1,k+0.5}^s - \Delta_z (H_y)_{i,j+0.5,k+1}^s$$

$$\Delta_t (B_x)_{i+0.5,j,k}^{s+1} = \Delta_z (E_y)_{i+0.5,j,k+0.5}^{s+0.5} - \Delta_y (E_z)_{i+0.5,j+0.5,k}^{s+0.5}$$

Для остальных уравнений Максвелла (1) разностные формулы записываются аналогично.

Полученные уравнения позволяют построить следующим образом алгоритм решения:

- Значения поля $\vec{D}$ на временном слое $s+0.5$ находятся исходя из известных значений $\vec{D}$ на слое $s-0.5$ с использованием значений $\vec{H}$ на слое s .
- Затем с помощью материальных уравнений, описывающих связь между напряженностью электрического поля и электрической индукцией, находятся компоненты вектора $\vec{E}$ на временном слое $s+0.5$.
- Теперь опять с помощью уравнений Максвелла находятся значения $\vec{B}$ на слое $s+1$ исходя из значений $\vec{B}$ на слое s с использованием найденных на предыдущем шаге значений $\vec{E}$ на слое $s+0.5$.

- Опять с помощью материальных уравнений, описывающих уже связь между напряженностью магнитного поля и магнитной индукцией, находятся компоненты вектора $\vec{H}$ на временном слое $s+1$.
- Затем алгоритм повторяется.

Граничные условия

В уравнениях Максвелла и также в численной схеме касательные значения компонент электромагнитного поля на границе расчетной области оказываются неизвестными, и они, таким образом, должны быть заданы с помощью граничных условий. В настоящий момент реализованы следующие типы граничных условий на границе расчетной области:

Периодические граничные условия. Компоненты электромагнитного поля на противоположных сторонах расчетной области полагаются равными.

Отражающие граничные условия. Имеются 2 модели идеального отражения: отражение с нулевой тангенциальной компонентной электрического поля, либо магнитного.

Предопределенные значения. Неизвестные значения задаются в виде определенной функции в зависимости от координат и времени. Также возможен тривиальный случай (функция равна нулю).

Смешанные условия. Комбинация двух предыдущих типов.

Поглощающие граничные условия PML (Perfectly Matched Layer) [5].

Получаются при помощи добавления дополнительных ячеек расчетной области на сторонах соответствующих границ, в которых моделируется экспоненциальное затухание электромагнитной волны. Величина затухания зависит от удаления от границы и увеличивается при увеличении глубины PML. Эти поглощающие граничные условия позволяют моделировать распространение электромагнитного поля в ограниченной области с открытыми границами.

LRnLA алгоритм

Ключевым моментом в численной эффективности программного кода является использование локально-рекурсивных нелокально-асинхронных алгоритмов. Эти алгоритмы радикально увеличивают уровни хранения локальности данных в иерархической структуре памяти компьютера, а также увеличивают количество асинхронных подзадач. Таким образом, код позволяет решать задачи с большими размерами данных с эффективностью, приближенной к 100% для современных параллельных компьютеров с глубокой иерархией подсистемы памяти.

Семейство алгоритмов LRnLA основано на идее совместной пространственно-временной дискретизации, удовлетворяющей обобщенному графу зависимостей LRnLA (рис.2). Параметры локальности и асинхронности

подбираются исходя из различного способа композиции узлов графа зависимостей численной схемы в рекурсивные структуры. Такую стратегию максимизации локальности данных будем называть алгоритмом ConeFold. С другой стороны, максимизация асинхронности приводит к другому типу алгоритмов ChessFold. Совмещение обеих стратегий (балансировка между оптимальной локальностью и асинхронностью) называется алгоритмом TorreFold (рис.3).

В реализации алгоритмов используются специфические структуры данных (LRcube – рис.4, и nLANet), а также используется кодогенерация. Вычислительное ядро реализовано на языке C++, а интерфейс на языке Python. Соответствие между индексацией в традиционном хранении данных и в LRcube показано в таблице 1. Верхняя строка – пример двоичного представления индекса в обычной индексации массива, нижняя – этот же индекс в массиве LRcube. Цветом показано, к какой декартовой координате относится тот или иной 0 либо 1.

Примеры расчетов

Волновод в трехмерном фотонном кристалле

В качестве примера покажем распространение электромагнитной волны по волноводу из фотонного кристалла. Фотонный кристалл представляет собой диэлектрик $\epsilon=12$, в котором специальным образом периодически проделаны цилиндрические отверстия [6]. Кроме этого, в этом фотонном кристалле проделана дырка (волновод). На этот фотоннокристаллический волновод падает линейно поляризованная волна, представляющая собой волновой пакет с несущей частотой, соответствующей запрещенной зоне этого фотонного кристалла. На рис.7 показано распределение электрического поля в расчетной области в последующие моменты времени. Как видно, внутри волновода распространяется мода, причем ее групповая скорость достаточно низкая.

Призма из материала с отрицательным показателем преломления

Призма на рис. 8 состоит из метаматериала, у которого диэлектрическая и магнитная проницаемости ϵ и μ определяются следующим образом:

$$\epsilon = 1 - \frac{\omega_e^2}{\omega^2}, \quad \mu = 1 - \frac{\omega_m^2}{\omega^2}.$$

Для несущей частоты падающего волнового пакета показатель преломления призмы равен -1. Падающая волна не монохроматична, тем не менее на рис.9 хорошо наблюдается эффект отрицательного угла преломления света.

Изгиб волновода под прямым углом в фотонном кристалле

Обычные световые волноводы не позволяют менять направление света достаточно резко, для изменения направления необходим изгиб волновода под радиусом кривизны намного больше длины волны света. Волноводы на основе фотонных кристаллов лишены этого недостатка. На рис. 10 показано распределение диэлектрической проницаемости в расчетной области

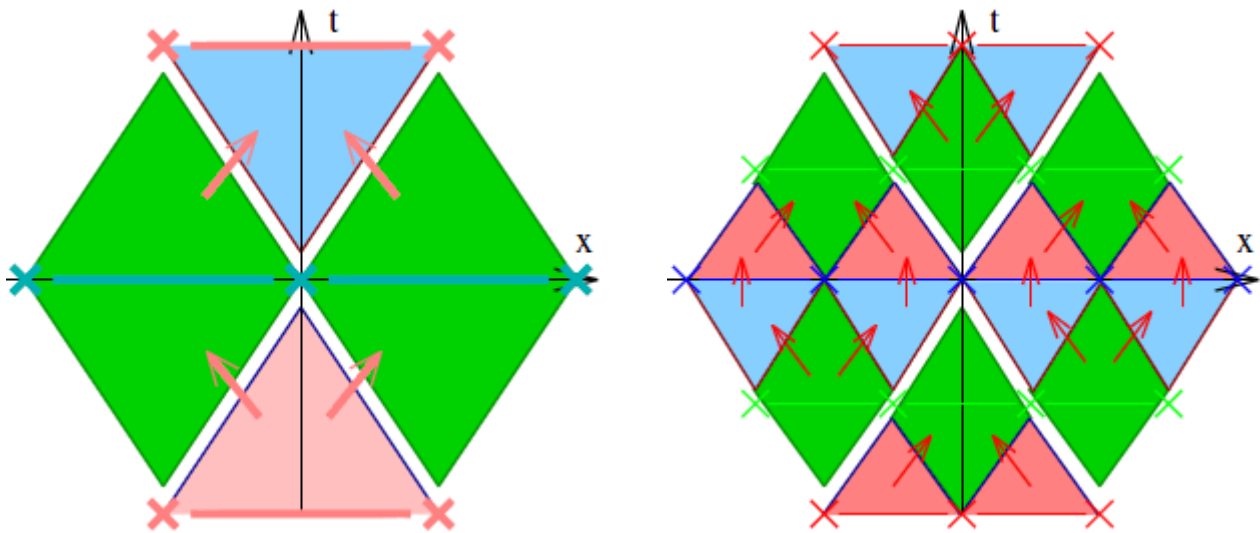


Рис. 2. Рекурсивная декомпозиция обобщенного графа зависимостей LRnLA в одномерном случае

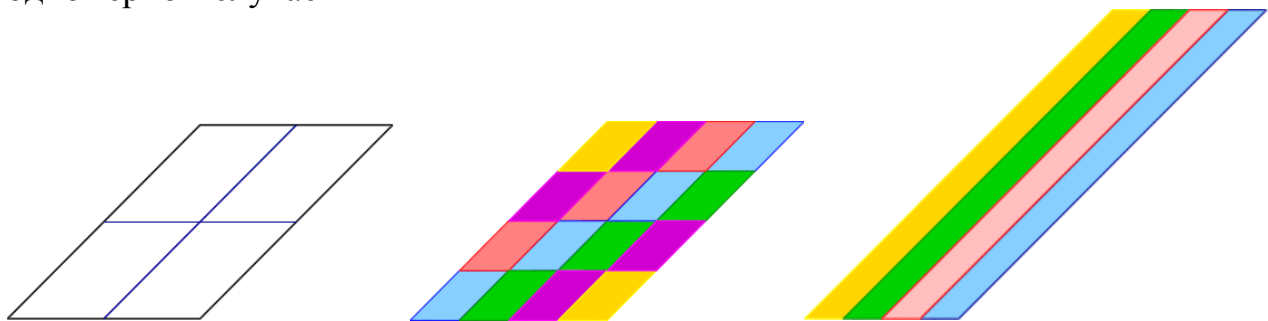


Рис. 3. Семейства алгоритмов LRnLA: ConeFold, ChessFold, TorreFold (одномерный случай)

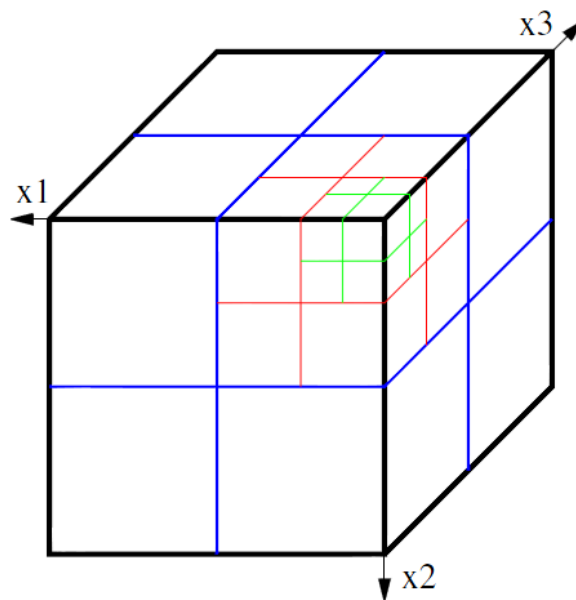


Рис. 4. LRcube

Таблица 1

110000101110100111011
100111011011000011101

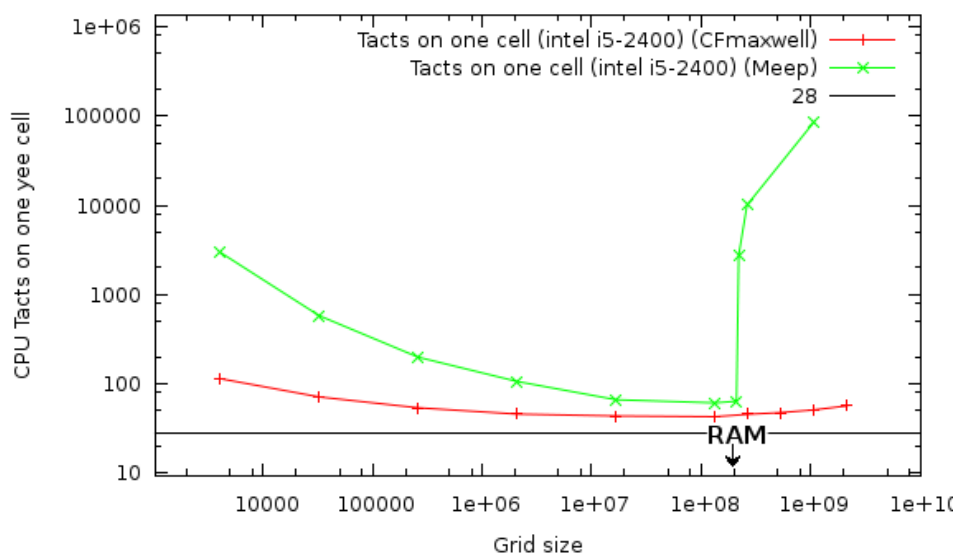


Рис. 5. Эффективность. Зависимость количества тактов на одну ячейку Yee от размера расчетной области. 28 тактов – оценочный теоретический предел.

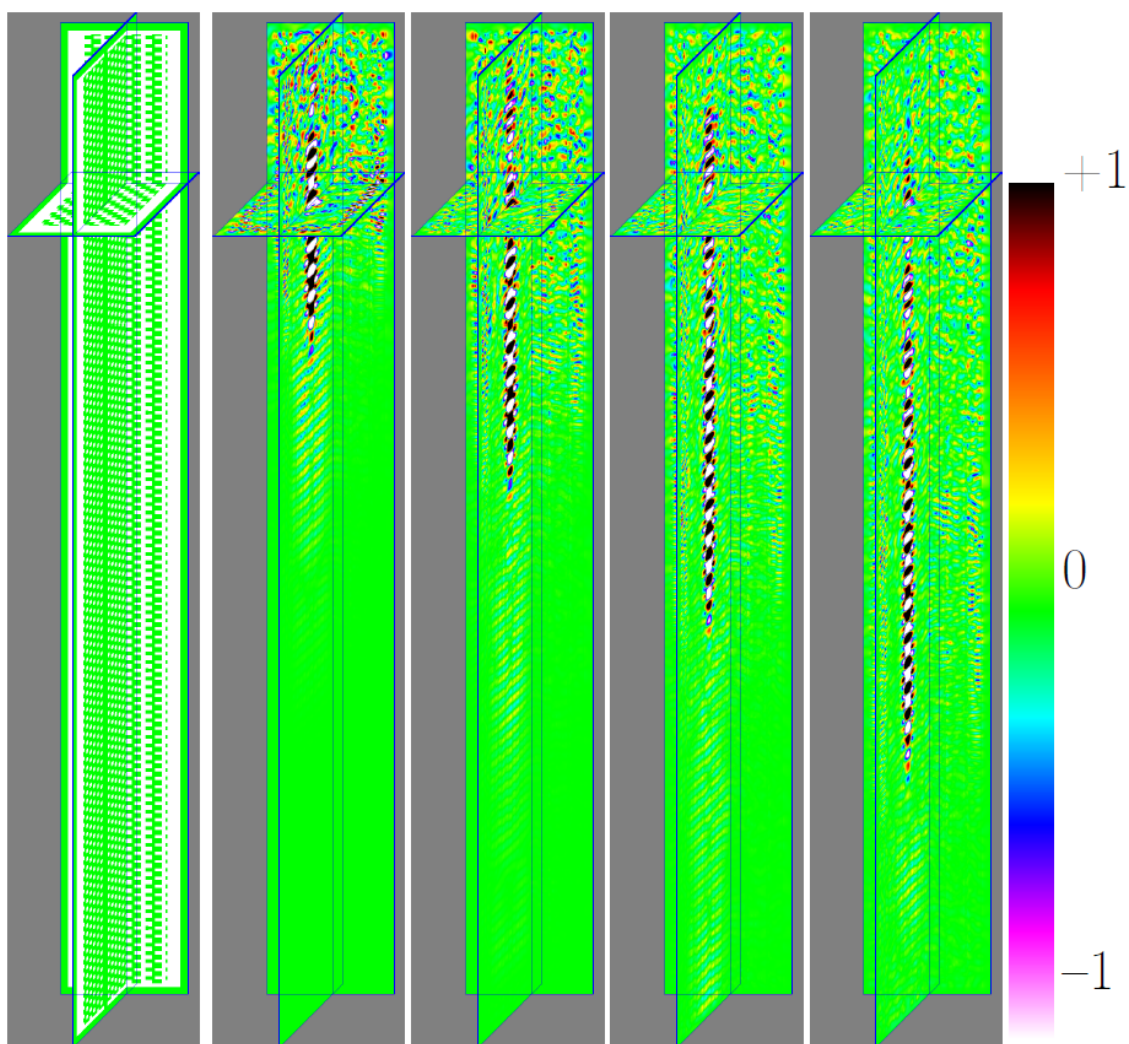


Рис. 6

Рис. 7

На рис. 6 показана структура волновода, белый цвет – диэлектрик, зеленый – вакуум. На рис. 7 приведено распределение компоненты поля E_x в различные моменты времени.

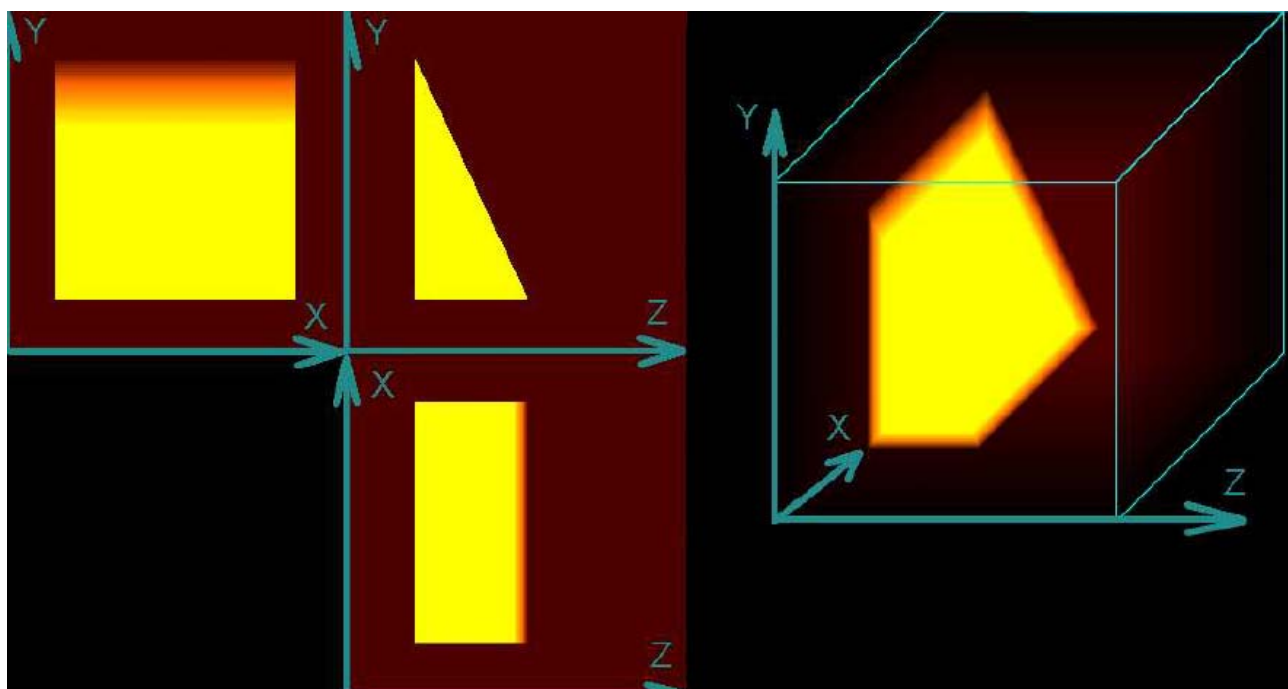


Рис. 8. Призма из материала с отрицательным показателем преломления

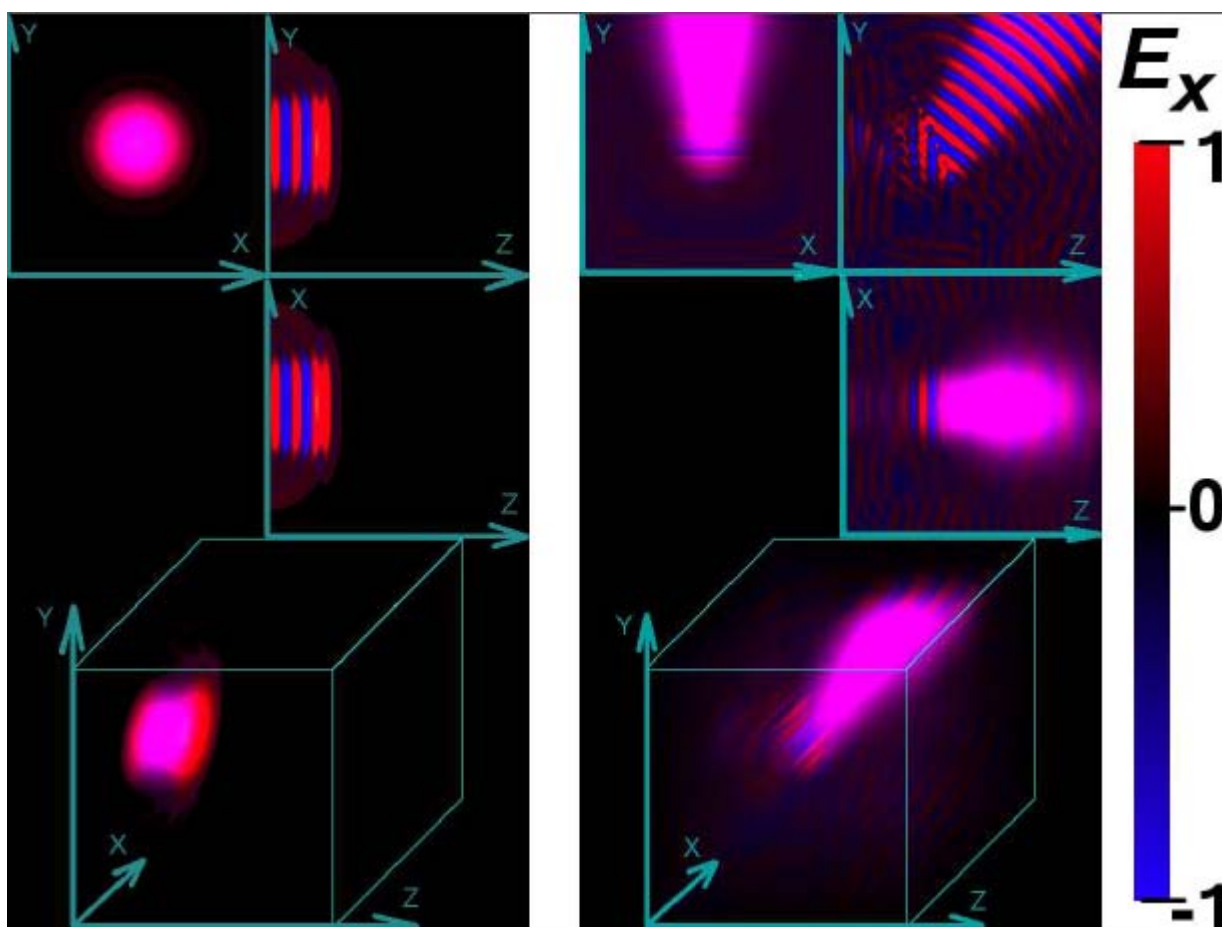


Рис. 9. Распределение электрического поля спустя некоторое время

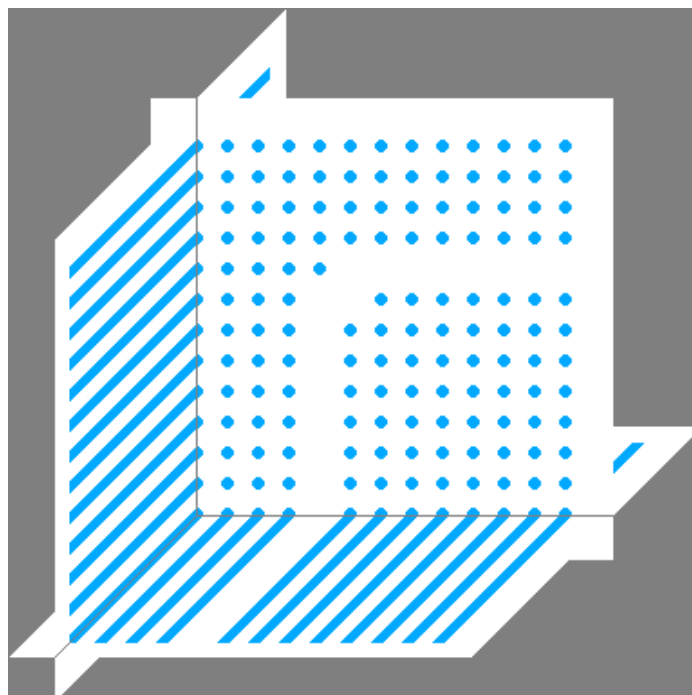


Рис. 10. Структура фотонного кристалла, белый цвет – воздух, синий – диэлектрик

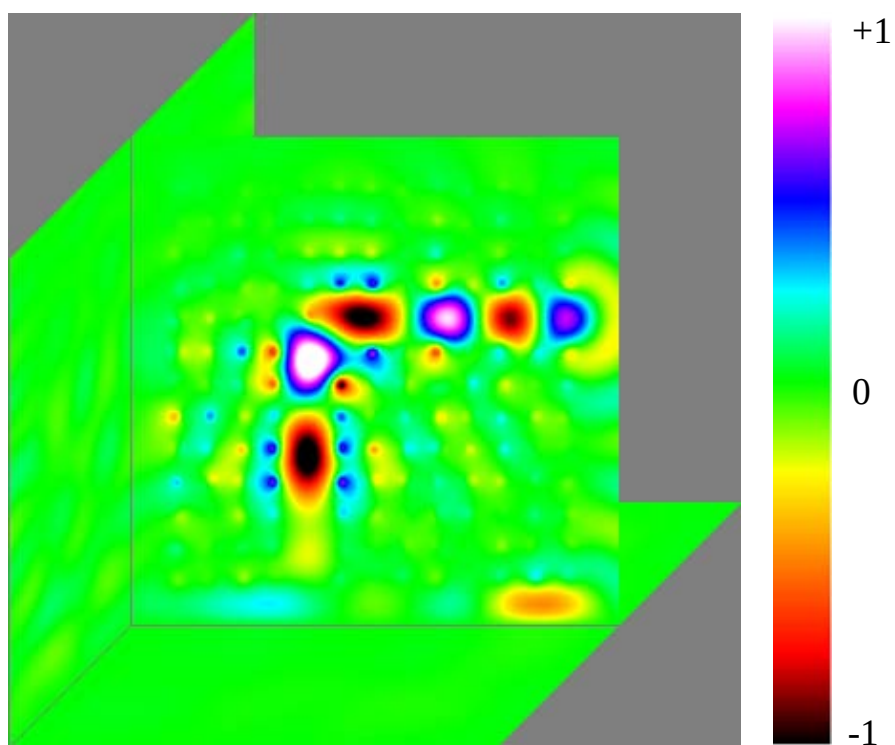


Рис. 11. Мгновенное распределение электрического поля в расчетной области

(изгиб волновода из двумерного фотонного кристалла). На рис. 11 показан мгновенный снимок распределения электрического поля в фотонном кристалле. Хорошо видно моду волновода, которая изгибается аналогично структуре волновода.

Заключение

Реализован программный код, с помощью которого можно моделировать эволюцию электромагнитного поля в среде с течением времени. Так как основной целью являлось приложение к задачам, требующим больших вычислительных ресурсов, то основным отличием кода от существующих аналогов является использование эффективных алгоритмов (в частности LRnLA). В данный момент программа развивается в сторону усложнения возможности моделирования различных сред с точки зрения возможного применения в большом классе задач электродинамики, таких как нелинейные материальные уравнения.

Таким образом, основным результатом на данный момент является возможность решения очень широкого класса сложных с вычислительной точки зрения задач в описанной выше модели.

В заключение следует отметить, что в данной области исследований (фотонные кристаллы, метаматериалы) численное моделирование сталкивается с теми же проблемами (большие размеры и сложные материалы), что и области задач моделирования распространения света в живописи, мозаиках, росписях и так далее. Путем незначительных изменений код может быть применен для использования в задачах сохранения культурного наследия и поможет лучше понять, как свет влияет на отдельные произведения искусства.

Литература

1. «Intel/CST solution profile», 2007. (<http://www.cst.com/>)
2. A. F. Oskooi, D. Roundyb, M. Ibanescua et al. «*Meep: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method*» // Computer Physics Communications, 2010, V. 181, p. 687–702.
3. A. Taflove, S. C. Hagness. «*Computational Electrodynamics: the Finite Difference Time-Domain Method*» 3rd edition. Norwood, MA: Artech House, 2005.
4. В.Д. Левченко «*Асинхронные параллельные алгоритмы как способ достижения эффективности вычислений*»// Информационные технологии и вычислительные системы, 2005, №1, с.68.
5. J.-P. Berenger «*A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves*»// Journal of Computational Physics, 1994, V.114, p.185-200.
6. Qi, Minghao, El. Lidorikis, P. T.Rakich, St.G.Johnson, J.D.Joannopoulos, Erich P.Ippen, and Henry I.Smith «*A three-dimentional optical photonic crystal with designed point defects*» // Nature, 2004, 429, p. 538-542.

Локально-рекурсивные нелокально-асинхронные алгоритмы

Т.В. Левченко¹, В.Д. Левченко²

¹ Федеральное государственное унитарное предприятие Государственный научный центр Российской Федерации ВНИИГЕОСИСТЕМ

Россия, 117105, Москва, Варшавское ш., 8

² Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук

Россия, 125047, Москва, Миусская пл., д.4

vadimlevchenko@mail.ru

Аннотация. Статья является кратким обзором истории развития теории и приложений локально-рекурсивных нелокально-асинхронных алгоритмов — нового эффективного инструмента решения вычислительноемких и вычислительносложных задач полномасштабного моделирования физических сред на современных и перспективных компьютерах. Приводятся примеры решённых задач физики плазмы, нанофизики, сейсмологии и ряда других.

Введение

В основе многих математических моделей различных областей физики, где необходимо полномасштабное моделирование, — в физике плазмы и плазмоподобных сред, в лазерной физике, нанооптике, радиоэлектронике, акустике, сейсмологии — лежит решение самосогласованной системы уравнений гиперболического типа, как линейных, так и нелинейных. Задачи эти являются вычислительносложными и вычислительноемкими.

В середине 90-х годов двадцатого века появился новый класс вычислительных средств, которые дали возможность продвижения в области вычислительного эксперимента в физике плазмы, заложенного в работах Сигова Ю.С. [1]. На основе объектно-ориентированной модели плазмы был создан программный комплекс SUR для решения задач умеренной и сильной плазменной турбулентности. Это позволило получить фундаментальные результаты по кинетике нелинейного взаимодействия частиц с когерентными волновыми пакетами в открытых пучково-плазменных системах [2].

Последующий анализ возможности использования такого подхода для других задач привел к разработке теории локально-рекурсивных нелокально-асинхронных (LRnLA) алгоритмов [3] и созданию семейства LRnLA кодов, позволяющих решать задачи на больших временах и пространственных масштабах.

В результате алгоритмы были реализованы для компьютеров различных классов (от персональных до суперкомпьютеров) и применены для решения

задач нанофизики (нанооптики и спинтроники) и сейсморазведки.

LRnLA алгоритмы

Для широко используемых стандартных алгоритмов, решающих систему конечно-разностных уравнений, включающих цикл по времени, пошаговая синхронизация требует переноса всех данных по всем уровням иерархии памяти десятки тысяч раз и такое же число барьерных синхронизаций каждого вычислительного потока (в методе разбиения области – со своими соседями). В результате для алгоритмов с пошаговой синхронизацией не доступны ни пиковая производительность в однопоточном режиме вычислений (из-за несоответствия темпа вычислений темпу обмена данными с нижними уровнями иерархии подсистемы памяти), ни асимптотическая изоэффективность вычислений при увеличении числа потоков (из-за разбалансировки вычислений в разных потоках и накладных расходов на их синхронизацию). Более того, затруднительной является даже адекватная оценка времени выполнения расчёта с заданными параметрами на конкретной вычислительной системе. На современном уровне прогнозируемая доступность высокопроизводительных вычислений пета- и эксафлопсного класса открывает возможности для более адекватного математического моделирования, при котором решены следующие проблемы: приблизиться к пиковой производительности в однопоточном режиме и на одном узле кластера, добиться асимптотической изоэффективности при наращивании числа узлов кластера, а также разработать модель вычислений для адекватной оценки времени проведения расчетов исходя из численных параметров.

Ключевой особенностью предлагаемого моделирования, позволяющей решить все три вышеуказанные проблемы, являются локально-рекурсивные нелокально-асинхронные алгоритмы вычислений. Использование этих алгоритмов при решении реальных задач полноволнового моделирования в описанной постановке позволяет приблизиться к пиковой производительности современных параллельных вычислительных систем с развитой иерархией подсистемы памяти. Алгоритмы LrnLA [3] существенно используют информационные структуры, характерные для задач с естественным ограничением максимальной скорости распространения возмущений, и благодаря этому число требуемых барьерных синхронизаций для данных снижается на 2-3 десятичных порядка, до нескольких десятков. Для численного решения подобных задач с максимальной эффективностью следует использовать явные численные схемы с локальным шаблоном, так как асимптотическая сложность этих методов совпадает с приведённой оценкой снизу. Конкретная численная схема при этом определяется таким образом, чтобы удовлетворить требованиям точности дискретного решения, в частности, фазовых и групповых скоростей для дискретной среды. Обычно подходят конечно-разностные схемы на сдвинутых сетках второго порядка аппроксимации по времени и второго (только для однородных сеток) или четвёртого порядка по координатам.

Обзор задач, решённых с помощью LRnLA алгоритмов

Семейство кодов SUR для кинетического моделирования плазмы

Созданная ранее объектно-ориентированная модель плазмы и семейство кодов SUR [1,4] позволили разработать кинетический код пылевой плазмы SUR/Dust [5], отличие которого от существовавших на тот момент аналогов состоит не только в размерности фазового пространства (3D3V), но и в оригинальном методе эффективного вычисления заряда на пыли и самосогласованного электростатического поля пылевой плазмы с учетом этого заряда [5]. Кинетический комплекс программ позволил оценить влияние пылевого слоя на рассеяние потока плазмы в приэлектродном слое дивертора ТЯР [6] в трансверсальном движении ионов направления.

Релятивистский параллельный кинетический электромагнитный 3D3V код SUR/MP [7] был использован в решении задач лазер-плазменного взаимодействия. Проведено моделирование взаимодействия мощного лазерного импульса со сверхкритической плазменной мишенью, исследована генерация филаментационной структуры магнитного поля внутри мишени и её зависимость от плотности мишени, отмечены явления гофрировки поверхности мишени и образования каналов ионной плотности на поздних стадиях взаимодействия как следствие развития филаментационной неустойчивости (рис.1).

Для ускорения заряженных частиц можно использовать кильватерные волны, возникающие при проникновении лазерного импульса в подкритическую плазму. Для получения моноэнергетического пучка ускоренных частиц с малой угловой расходимостью необходимо возбуждать кильватерные волны релятивистской амплитуды, сохраняющие квазиоднородную, плоскую структуру на максимально возможной длине. С другой стороны, мощность лазерных импульсов и длина ускорения должны лежать ниже порога самофокусировки. Исходя из этих ограничений, в работе [8] кильватерное поле возбуждалось длинной последовательностью коротких (по сравнению с длиной волны плазмы) слабoreлятивистских импульсов. Параметры последовательности импульсов подбирались таким образом, чтобы кильватерное поле возбуждалось в режиме резонанса, т.е. каждый следующий импульс максимально усиливал поле, возбужденное предыдущими. С другой стороны, пространственное ограничение лазерного импульса вызывает градиент интенсивности электрического поля не только в продольном направлении (что и вызывает кильватерное поле), но и в поперечном. Это приводит к искажению фронта и последующему опрокидыванию кильватерной волны. Используя импульсы с программируемым фронтом, в расчётах удалось получить кильватерные волны квазиплоской структуры, с напряженностью поля, превышающей порог опрокидывания в случае обыкновенных импульсов (рис.2).

Дальнейшее развитие кинетических моделей плазмы в виде кода CF/Hall позволяет решить задачу моделирования динамики плазмы в двигателе Холла в

самосогласованных электромагнитных полях (модель 3D3V) в реальной геометрии за разумное время расчета (см. статью А.Ю. Перепёлкина, В.Д. Левченко «Трёхмерная полностью кинетическая численная модель замагниченной плазмы на основе LRnLA алгоритмов» с. 44-54 настоящего сборника), оценка эффективности программного комплекса и первые результаты получены в 2011г. [9].

Приложения в нанофизике

Следующей реализацией такого подхода стало создание кинетического комплекса программ для численного решения задач нанооптики, спинтроники, наномодификации поверхности LRnLA/Nano. Он предназначен для проведения прямого полномасштабного моделирования существующих, разрабатываемых и перспективных наноструктурированных сред и сложных систем наноразмерных объектов с целью изучения механизмов и объяснения наблюдаемых свойств, поиска оптимальных конфигураций, проверки или обеспечения требуемых свойств.

Задачи сейсморазведки и геофизики

Задачи сейсморазведки традиционно считаются чрезвычайно требовательными к вычислительным ресурсам. Использование LRnLA алгоритмов позволит существенно продвинуться как в разработке новых методик, технологий обработки и интерпретации результатов сейсморазведки в целом, так и в решении реальных научно-практических задач, связанных с освоением нефтяных месторождений Восточной Сибири [13,14].

Математической основой моделирования динамики сейсмического поля в геологической среде являются уравнения теории упругости. Это система дифференциальных уравнений в частных производных гиперболического типа, где неизвестным является «сейсмическое поле», многомерные функции координат пространства и времени – вектор скорости смещений, а также тензоры деформаций и напряжений. Задача моделирования решается как задача Коши, то есть по заданному значению полей в модельной области в начальный момент времени, а также условиям на её границе рассчитывается временная эволюция сейсмического поля в каждой точке модельной области во все последующие моменты времени.

Для корректного решения система замыкается материальными уравнениями, устанавливающими связь между компонентами тензоров деформаций и напряжений. Одним из таких замыкающих уравнений может быть обобщённый закон Гука для неоднородной изо- или анизотропной среды, при необходимости с вязкими слагаемыми. Данные уравнения записываются для каждой точки модельной области, а входящие в них коэффициенты определяют сейсмофизические параметры среды.

Получаемая в расчёте информация о сейсмическом поле слишком велика даже для простого сохранения и заведомо избыточна. Для последующего анализа выводится лишь небольшая её часть, необходимая в каждом

конкретном эксперименте, а именно:

1. набор «мгновенных снимков» сейсмического поля – распределение полей по координатам внутри модельной области в фиксированные моменты времени с достаточно большим временным промежутком;
2. «синтетическая сейсмограмма», временная зависимость полей для ограниченного набора координат точек, соответствующих расстановке приёмников системы наблюдения, обычно на дневной поверхности. Синтетическую сейсмограмму одного такого расчёта можно непосредственно сопоставлять с многоканальной сейсмограммой полевой сейсморазведки, полученной от одного сейсмического воздействия. В практике сейсморазведки подобные воздействия повторяются многократно, сотни и тысячи раз для каждого объекта. Соответственно, такое же количество раз должна решаться и описанная выше задача Коши с различными начальными и/или граничными условиями.

Полученные при этом синтетические сейсмограммы и мгновенные снимки в дальнейшем анализируются визуально и автоматически в различных методиках обработки и интерпретации данных сейсморазведки. Принимая во внимание характерные частоты используемых в практике сейсморазведки источников и приёмников сигналов, глубины залегания целевых объектов и связанные с этим длины плеч расстановок системы наблюдения, требуемые параметры модели геосреды для одного расчёта должны быть заданы с дискретностью 10 м в кубе с длиной стороны 10 км, что дает порядка миллиарда ячеек.

Синтетические сейсмограммы сохраняются с интервалом порядка миллисекунды в течение десятков секунд или порядка 10^4 отсчётов по времени. В практике сейсморазведки подобные воздействия повторяются многократно, сотни и тысячи раз для каждого объекта. Соответственно, такое же количество раз должна решаться и описанная выше задача Коши с различными начальными и/или граничными условиями. Количество требуемых расчётов велико, но они могут выполняться независимо.

Представляемые методы и алгоритмы решения прямых задач сейсморазведки реализованы в виде программного кода SUR/Geo-Prime, развернутого на вычислительном кластере в ФГУП ВНИИгеосистем. Такой кластер состоит из 5 “тяжелых” вычислительных узлов, соединенных сетью InfiniBand. Каждый узел включает 4 12-ядерных процессора AMD Opteron 6174, 256GB оперативной памяти и дисковую подсистему RAID0 до 14 HDD.

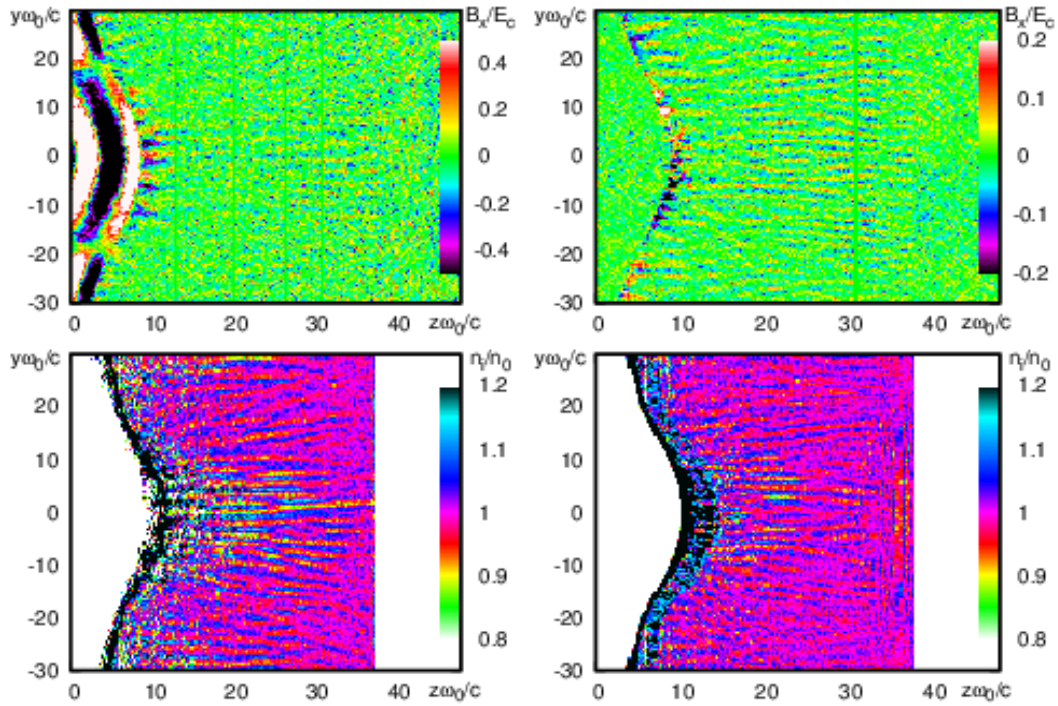


Рис.1. Филаментационная структура магнитного поля в момент времени $t\omega_0=320$ (сверху) и ионной плотности в момент времени $t\omega_0=560$ (снизу) при взаимодействии лазерного импульса (p и s — поляризация слева и справа соответственно)

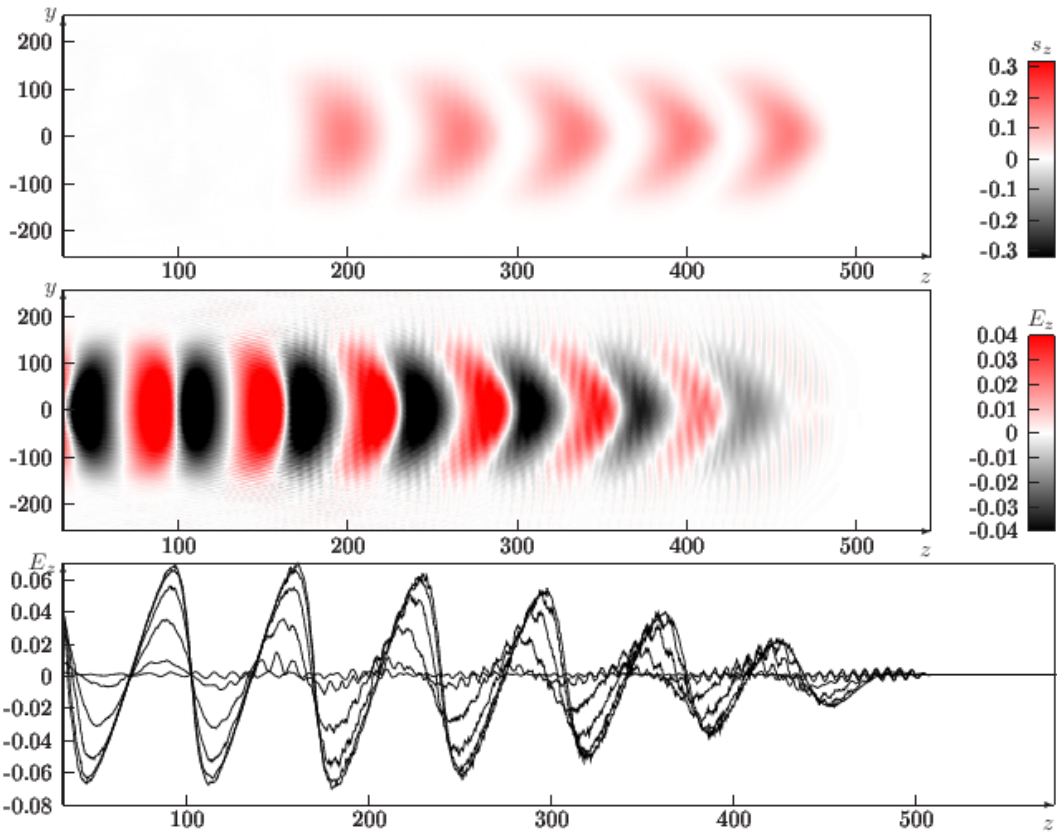


Рис.2. Результаты моделирования взаимодействия лазерных импульсов с изменяемой кривизной с плазмой. Сверху вниз: пространственная структура вектора Пойнтинга падающей последовательности импульсов; распределение продольной компоненты напряженности электрического поля возбуждаемой кильватерной волны; ее профили в различных поперечных сечениях

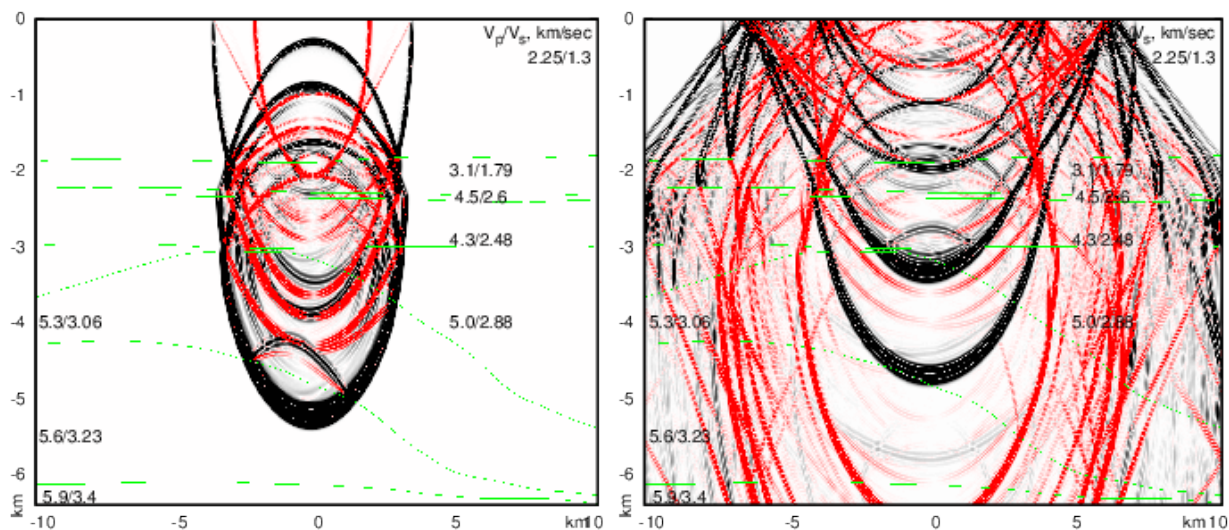


Рис.3. Мгновенные снимки волнового поля в глубинном разрезе для моментов времени $t=1.6$ и 3.2 сек. Цветом показана величина второго инварианта тензора напряжений (черный — продольные, красный — поперечные волны). Зелёными линиями показаны границы раздела слоев сейсмофизической модели, числами — значения продольных и поперечных скоростей

Заключение

История развития локально-рекурсивных нелокально-асинхронных алгоритмов оказалась современна развитию вычислительной техники. Как уже говорилось во введении, создание первого вычислительного кода SUR, использовавшего возможности LRnLA алгоритмов, было инициировано требованиями появившихся тогда вычислительных кластеров с развитой иерархией подсистемы памяти в каждом узле. Дальнейшее совершенствование компьютеров показало правильность выбранного пути. Созданная теория локально-рекурсивных нелокально-асинхронных алгоритмов, решённые и решаемые с помощью LRnLA кодов задачи показали их полную готовность не только к реалиям современных компьютеров, но и к тем требованиям ближайшего будущего, которые они в ближайшее время предъявят к вычислителям для своего эффективного использования: многоуровневому аппаратному параллелизму и нелокальности доступа к данным.

Работа частично поддержана грантами РФФИ 09-01-00798-а и 11-01-00282-а.

Литература

1. Ю.С. Сигов *«Вычислительный эксперимент: мост между прошлым и будущим физики плазмы. Избранные труды»* Сост. Г.И. Змиевская, В.Д. Левченко. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001, 288 с.
2. Ю.С. Сигов, В.Д. Левченко *«Когерентные явления при релаксации размытых электронных пучков в открытых плазменных системах»* // Физика Плазмы, 1997, Т.23, №4, с.325-342.
3. В.Д. Левченко *«Асинхронные параллельные алгоритмы как способ достижения эффективности вычислений»* // Информационные технологии и вычислительные системы, 2005, № 1, с. 68-83.
4. В.Д. Левченко *«Явления самоорганизации в турбулентной плазме диагностика и примеры»*// Новое в синергетике: взгляд в третье тысячелетие, Информатика: неограниченные возможности и возможные ограничения. М.:Наука, 2002, с.159-184.
5. Л.В. Иньков, В.Д. Левченко, Ю.С. Сигов *«Численное кинетическое моделирование динамических процессов в пылевой плазме»* // Прикладная Физика, 2000, № 3, с.138-145.
6. Г.И. Змиевская, Л.В. Иньков, В.Д. Левченко, Т.В. Левченко *«Рассеяние плазмы на зародышах металлических капель вблизи поверхности»* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2004, № 5, с. 106.
7. Н.В. Ёлкина, В.Д. Левченко *«Генерация филаментационной структуры магнитного поля в лазер-плазменном взаимодействии»* // Прикладная физика. 2003, № 5, с. 16-23.
8. Е.И. Калинникова, В.Д. Левченко *«Моделирование возбуждения квазиплоских кильватерных волн в плазме резонансной последовательностью лазерных импульсов с изменяемой формой*

- огибающей» // Физика Плазмы, 2008, Т. 34, № 4, с. 324.
9. A.Yu. Perepelkina, I.A. Goryachev, V.D. Levchenko. «Fully kinetic model of Hall thruster plasma dynamics based on LRnLA» // In 3rd International Symposium on Advanced Plasma Science and its Applications for Nitrides and Nanomaterials ISPlasma -2011), Nagoya, Japan, March 6-9 2011.
 10. А.В. Закиров, В.Д. Левченко «Трёхмерное моделирование эволюции во времени электромагнитного поля в актуальных задачах нанооптики» // Сборник трудов конференции «Фундаментальные проблемы оптики - 2010», СПб., 2010, с. 424.
 11. А.В. Закиров, В.Д. Левченко «Подбор оптимальных параметров идеально-согласованного слоя для задач нанооптики»// Математическое Моделирование, 2011, Т.23, №8, с.55-64.
 12. G.I. Zmievskaya, A.L. Bondareva, V.D. Levchenko, T.V. Levchenko «A kinetic stochastic model of blistering and nanofilm islands deposition: self organization problem»// J. Phys. D: Appl. Phys, 2007, V. 40, p. 4842-4849.
 13. А.В. Иванов, С.А. Каплан, А.В. Каракин, В.Д. Левченко, Т.В. Левченко, В.Е. Рок «Вычисление полного сейсмического волнового поля в геосреде на основе нового метода решения прямых задач сейсмоакустики» // Геоинформатика. 2006, №3, с.59-62.
 14. С.А. Каплан, В.Д. Левченко, В.Е. Рок, С.М. Глубоковских, Ю.А. Титова. «Оценка информативности данных сейсморазведки МВС на основе 3D моделирования полного волнового поля»// Геоинформатика. 2011, №1, с. 49-55.
 15. Д.Г. Левченко, В.Д. Левченко, А.В. Закиров «Динамическое полноволновое моделирование распространения штормовых микросейсм в океанической среде»// Океанология. 2011, Т.51, № 4, с. 723-733.

Послесловие: новые грани междисциплинарности

Г.Г. Малинецкий

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт
прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук

Россия, 125047, Москва, Миусская пл., д.4

В послесловии хочется обратить внимание только на один момент, который может оказаться не очевидным для читателей, впервые знакомящихся с этим кругом работ.

Этот сборник очень важен и для современной прикладной математики, и для междисциплинарных исследований. В науке, как в активно развивающейся системе, огромную роль играют новейшие результаты, последние достижения. Их значение и новизну обычно и подчеркивают. Однако не менее важен и другой аспект – это преемственность и традиция. Наука невозможна, если следующему поколению нельзя адресовать проблем, вопросов, надежд. Это связано с «вечными проблемами» прикладной математики: каждое поколение исследователей и компьютеров, видимо, будут по-своему решать системы линейных уравнений, задачи оптимизации или заниматься прогнозом. Кроме того, со временем меняется смысл изученных в прошлом проблем или принятых решений.

Отдел, работы сотрудников и аспирантов которого вошли в сборник – отдел моделирования нелинейных процессов – в его нынешнем виде связан с идеями, задачами и деятельностью член-корр. РАН, третьего директора ИПМ, Сергея Павловича Курдюмова¹. Этот выдающийся ученый в области прикладной математики, физики плазмы, междисциплинарных исследований полагал, что мы вступаем в нелинейный мир, несущий с собой огромные возможности и риски. К таким исследованиям приходят из разных областей. Например, основоположник теории самоорганизации Герман Хакен пришел из теории лазеров, Илья Пригожин – из термодинамики и химической кинетики. С.П.Курдюмов пришел из физики плазмы, которой Институт прикладной математики начал заниматься со времени своего основания в 1953 году. Эти работы привели к рождению вычислительной физики плазмы в нашей стране, к более глубокому пониманию физических процессов, происходящих в таких

¹ О научных задачах, связанных с рождением отдела и о «человеческом измерении этих проблем» подробно рассказывается в книгах Режимы с обострением. Эволюция идеи. Законы коэволюции сложных структур. – М.: Наука, 1998. – 225 с. (Кибернетика: неограниченные возможности и возможные ограничения)

Мне нужно быть: Памяти Сергея Павловича Курдюмова/ Ред. – сост. З.Е. Журавлева. М.: КРАСАНД. 2010 – 480 с.

системах, к созданию новых вычислительных алгоритмов, позволили реализовать ряд крупных научно-технических проектов.

Многие из этих работ выполнялись под руководством академиков А.Н.Тихонова, А.А.Самарского и других выдающихся учёных. Область изучавшихся задач была очень широка – от ядерных взрывов до процессов в солнечной короне, от проблем управляемого термоядерного синтеза до плазмохимии, от МГД-генераторов до взрывов сверхновых звезд. Было показано, что вычислительный эксперимент позволяет исследовать широкий класс плазменных неустойчивостей и открывать новые физические явления. Одно из них, открытое и изученное в ИПМ – образование структур в плазме, получивших название Т-слоёв – вошло в 1963 году в Государственный реестр открытий СССР.

По мысли С.П.Курдюмова, физика плазмы – прекрасный полигон для исследования механизмов и законов самоорганизации, развития и взаимодействия диссипативных структур в различных средах. При этом, наряду с достаточно подробными моделями, дающими количественное описание нелинейных процессов, всё большую роль начинали играть упрощенные модели дающие качественное представление об изучаемых объектах и позволяющих добиться их понимания.

Одним из ярких, важных и оригинальных направлений в ИПМ, в российской и мировой науке, стали работы по кинетическому описанию ряда процессов в плазме, выполненные выдающимся исследователем, блестящим физиком и прекрасным лектором, много лет преподававшим в МФТИ – Юрием Сергеевичем Сиговым, а также созданной им научной школой². Отличительной чертой работ этой научной школы было глубокое понимание природы исследуемых процессов, характерное для физиков-теоретиков, в сочетании с разработкой новых математических моделей и алгоритмов, ориентированных на предельные возможности существовавших компьютеров.

Когда С.П.Курдюмовым и Ю.С.Сиговым принималось решение о вхождение сектора, занимавшегося кинетическим моделированием процессов в плазме, в состав отдела, который занимается анализом законов организации диссипативных структур, опираясь на простейшие нелинейные модели, то основание представлялись следующими. Во-первых, «общее происхождение», связанное с численным анализом плазменных неустойчивостей. Во-вторых, общее понимание принципиальной роли нелинейности в исследуемых процессах. В-третьих, общность взглядов С.П.Курдюмова и Ю.С.Сигова на множество проблем от будущего науки, до образования, культуры, принципов, на которых должно строиться научное сообщество.

Этот сборник показывает, что принятое в те годы решение является ещё более мудрым и дальновидным, чем казалось еще недавно.

² Ю.С. Сигов *«Вычислительный эксперимент: мост между прошлым и будущим физики плазмы. Избранные труды»* Сост. Г.И. Змиевская, В.Д. Левченко. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001, 288 с.

В самом деле, фундаментальные естественные науки, в которых построены развитые теории и созданы основополагающие математические модели, очень часто связаны с фундаментальными уравнениями. Например, уравнение Навье–Стокса в гидродинамике, Шредингера в квантовой механике, Максвелла в электродинамике. Решения этих уравнений непосредственно описывают поведение конкретных физических объектов и могут сравниваться с экспериментом.

В междисциплинарных исследованиях также есть базовые математические модели. Но они отражают свойства многих систем. Описание каждого конкретного объекта на их основе, как правило, требует «доводки», учета осложняющихся явлений или факторов, учета особенностей исследуемой системы.

Например, для описания морфогенеза – одного из основополагающих явлений в биологии – выдающимся математиком Аланом Тьюрингом была предложена модель типа реакция–диффузия:

$$\begin{aligned} u_t &= D_1 \Delta u + f(u, v) \\ v_t &= D_2 \Delta v + g(u, v). \end{aligned}$$

Её изучение позволило выяснить, какие неустойчивости могут быть связаны с возникновением диссипативных структур и, в частности, с морфогенезом. Однако биологический смысл u и v , конкретные вещества, которые могут играть эту роль, нелинейные функции $f(u, v)$ и $g(u, v)$, границы применимости этой модели были выявлены через несколько десятилетий. Однако сама эта система (с теми неустойчивостями, которые она может демонстрировать) оказалось полезной и востребованной в огромном количестве научных дисциплин и конкретных моделей.

То же самое относится к модели тепловых структур

$$T_t = \operatorname{div}(k(\vec{r}, t) \operatorname{grad} T) + Q(\vec{r}, T).$$

Исследование этой модели в научной школе С.П.Курдюмова получило мировое признание. И полученные при изучении этой модели результаты, созданные новые математические методы, обнаруженные нелинейные эффекты далеко выходили за рамки описания тех физических процессов, для описания которых предлагалась модель.

Однако данный сборник показывает и ещё одну очень интересную возможность. Не преуменьшая важности, значимости и оригинальности других результатов, рассмотренных в сборнике, замечу, что центральным моментом, на мой взгляд, является схема моделирования физических процессов с конечной скоростью распространения области влияния того, что происходит в данной точке. Этот подход, который более 10 лет развивается В.Д.Левченко, представляется очень глубоким и универсальным.

Он включает и схему организации вычислительного процесса, и способ построения разностных схем, и оригинальный алгоритм хранения данных, и методы распараллеливания. При этом построенные на такой основе

вычислительные модели гибко учитывают архитектуру современных многопроцессорных систем, чтобы в наибольшей степени использовать их возможности. И если в начале развития этого подхода предполагаемые идеи опирались на теорию клеточных автоматов, то сейчас они дают новое видение вычислительных процессов в дискретных средах с конечной скоростью распространения возмущений. Вполне возможно, что именно эта «алгоритмическая общность» и может стать основой для «междисциплинарного подхода нового типа»

Вообще говоря, Стивен Уолфрем, Леон Чуа, другие энтузиасты клеточных автоматов (систем, в которых дискретны не только пространственные и временная компонента, но и сама исследуемая функция) именно с ними связывали новый подход к математическому моделированию³. В рамках этого подхода физические процессы сразу описываются на языке этих дискретных объектов, а не уравнений в частных производных. Однако мир клеточных автоматов оказался слишком широким. И кроме того проблема «перевода» результатов моделирования на «непрерывный язык», на котором сейчас мыслят физики, если решать ее в лоб, то оказывается весьма сложной. У нее много простых, но неэффективных решений. Кроме того «машины клеточных автоматов» оказались весьма далеки от используемых ныне суперкомпьютерных архитектур.

Подход В.Д.Левченко представляется очень удачным компромиссом между универсальностью, эффективностью и практической реализуемостью. Применение этого подхода к большим задачам, связанным с решением уравнений Максвелла, с изучением ряда сложных плазменных неустойчивостей и, особенно, к задачам сейсморазведки, показывает большой прикладной и междисциплинарный потенциал этого подхода. Стоит обратить внимание ещё на одну общую особенность работ, представленных в этом сборнике. Со времени создания первых компьютеров, их быстродействие увеличилось более, чем в 250 миллиардов раз. Суперкомпьютерные вычисления стали модным «трендом». И уже даже при защите дипломных все чаще звучат слова: «миллиард узлов на неструктурированных сетках». Однако при этом задач, посчитанных на суперкомпьютерах, и давших либо принципиальный научный результат, либо новое понимание, либо значимый экономический эффект, очень немного. Огромными открывающимися возможностями оказалось очень трудно распорядиться. Возник своеобразный «суперкомпьютерный тупик».

И в этом контексте ряд работ этого сборника представляет счастливое исключение. С одной стороны, это глубокое понимание физики процессов (что всегда отличало научную школу профессора Ю.С.Сигова). С другой

³ Эти идеи оказались весьма плодотворными не столько для математического моделирования процессов в сплошных средах, сколько для задач искусственного интеллекта (клеточные нейронные сети). – Майнцер К. Сложносистемное мышление: Материя, разум, человечество. Новый синтез. – М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2009. – 464 с. (Синергетика: от прошлого к будущему).

стороны, это ясное понимание «инженерной стороны» дела, представление о том, в каких приборах, системах, технологиях могут быть использованы результаты этих гигантских вычислений.

Остается надеяться, что работы данного сборника и их продолжение будут не только интересны и полезны научному сообществу, но со временем изменят и само представление о жанре междисциплинарных исследований.

Благодарности

Работы, представленные в сборнике выполнены при частичной поддержке РФФИ (гранты 11-01-00282, 12-01-00490, 12-01-00708) и программы ОМН РАН № 3.

Авторы выражают признательность Fondazione Flaminia и в частности Carla Rossi за помощь в организации Семинара.

Авторы благодарят Ordine della Casa Matha, NEREA-Aida и Meduproject за организационно- техническое сопровождение Семинара.

Авторы благодарят за участие в Семинаре: Marianna Panebarco, Panebarco & C. firm; Roberta Menghi (2); Mariapaola Monti (2), Marco Landi (2); Elena Nencini (2); Maurizio Indirli (1); Andrea Nanetti (Faculty Member, College Year in Athens, Greece); Lisa Volpe (1, 3); Bruni Stefania (1); Elena Candigliota(1); Francesco Immordino (1); Lorenzo Moretti (UTSISM, ENEA Bologna); Dante Abate (1); Graziano Furini (1); Samuele Pieratini (UTICT, ENEA Bologna); Augusto Screpanti (UTPRA, ENEA Roma), Matieo Angelini (3); Teresa Gambatesa (3); Chiara Massaia(3), E.O. Manucharants (ВНИИГЕОСИСТЕМ, Россия, Москва)

-
1. ENEA, the Italian Agency for new technologies, Energy and sustainable economic development;
 2. Faculty of Preservation of the Cultural Heritage, Bologna University, Ravenna site;
 3. “Bio-sustainable Architecture”, University of Bologna;

Acknowledgments

The appointment of Ravenna is the first in an annual series of workshops (to be held alternately in Italy and in Russia, in Moscow and St Petersburg) among young researchers-students and graduate students research fellows- and leading Italian and Russian experts, to establish scientific cooperation, internships, common educational activities on issues of frontier of condensed material, solid state physics and computer science, related to knowledge and conservation of works of art and archaeological artifacts. The initiative of this Seminar appears as a result of many years of collaboration between M.V. Keldysh Institute of applied mathematics of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia (www.keldysh.ru), Bologna University, Italy and ENEA Bologna, Italy and kind support of this idea by professor of culture heritage restoration, Donatella Biagi Maino.

We gratefully acknowledge support of Fondazione Flaminia and particularly the organizational help of Carla Rossi. We are also indebted to Ordine della Casa Matha, where the workshop was held, and to NEREA-Aida and Meduproject (<http://www.meduproject.com>) spin-off for continuous scientific, technical and management collaborations.

Organizations of scientific Program (Giuseppe Maino, Italy, and Galina Zmievsckaya, Russia) should like to thank all colleagues who presented at WORKSHOP contributions (Italy and Russia): -Marianna Panebarco, «VirtualLife» – an innovative virtual framework FP7-216064, Panebarco & C. firm; Roberta Menghi (2), postgraduated, guest researcher; Mariapaola Monti (2), postgraduated, guest researcher; Marco Landi (2); Elena Nencini (2); Maurizio Indirli (1); Andrea Nanetti (Faculty Member, College Year in Athens, Greece); Lisa Volpe (1) and (3); Bruni Stefania (1); Elena Candigliota(1); Francesco Immordino (1); Lorenzo Moretti (UTSISM, ENEA Bologna); Dante Abate (1); Graziano Furini (1); Samuele Pieratini (UTICT, ENEA Bologna); Augusto Screpanti (UTPRA, ENEA Roma), Matieo Angelini (3) student; Teresa Gambatesa (3) student; Chiara Massaia (3) student; V.D. Levchenko (5); T.V. Levchenko (7); E.O. Manucharants (7); A.L. Bondareva (5); A.Yu. Perepelkina (5) postgraduate student; A.V. Zakirov(6) postgraduate student; S.A. Khilkov (6) postgraduate student; A.V. Ivanov (5).

This work is partially supported by grants RFBR 11-01-00282, 12-01-00490, 12-01-00708, the Department of Mathematics of the Russian Academy of Sciences (program no. 3).

-
1. ENEA, the Italian Agency for new technologies, Energy and sustainable economic development;
 2. Faculty of Preservation of the Cultural Heritage, Bologna University, Ravenna site;
 3. “Bio-sustainable Architecture”, University of Bologna;
 4. Earth Sciences Department, Ferrara University;
 5. M.V. Keldysh Institute of applied mathematics of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia;
 6. Moscow Institute of Physics and Technology (SU), Dolgoprudnyi, Russia;
 7. VNI Geosystem Russian Federal Center, Moscow, Russia.

Приложение.

Список докладов участников первого российско-итальянского семинара «Workshop First Russian-Italian Joint Seminar on Mathematical and Physical Models Applications to Condensed Matter and Preservation of the Cultural Heritage»

1. Maino Giuseppe
When Physics and Computer Science meet Art
2. Zmievskaya Galina I. (KIAM*)
Stochastic simulation method in both problems: Thin film islands chemical vapor deposition and radiation stimulated damaging
3. Levchenko Vadim D. (KIAM*)
Full-scale computer simulation in physics on modern and perspective computers
4. Bondareva Anna L. (KIAM*), Zmievskaya Galina I. (KIAM*)
Diagnostics of microporosity into multilayers solids
5. Khilkov Sergey (student, MPTI**), Ivanov Anton V. (KIAM*)
Computer simulation of stochastic resonance in systems with Bose and Fermi statistics
6. Zakirov Andrey (postgraduate studies, MPTI**), Levchenko Vadim D. (KIAM*)
The effective 3D modeling of electromagnetic waves' evolution in actual problems of nano-optics
7. Bondareva Anna L. (KIAM*), Zmievskaya Galina I. (KIAM*)
Problems of solid-phase and gas-phase epitaxy of damaged surfaces
8. Gorjachev Ivan (postgraduated, KIAM*) and Levchenko Vadim D. (KIAM*)
The occurrence of the Hall current in a magnetized plasma during the deposition of thin films
9. Levchenko Tatjana V. and Manucharyants Elvira O. (VNI Geosystem Russian Federal Center)
First order phase transition at fluctuation stage in problem of cluster formation and water condensation into cracks
10. Manucharyants Elvira O. (VNI Geosystem Russian Federal Center)

Problem of percolation and protection of cultural monuments

11. Perepelkina Anastasia (postgraduate, KIAM*) and Levchenko Vadim D. (KIAM*)
Fully kinetic 3D model of magnetized plasma
12. Samylkin Alexander A. (postgraduate MePhI***, KIAM*) and Korolev Alexander E. (KIAM)
Weight Monte Carlo study of rarefied gas flows with coagulation
13. Khilkov Sergey (student, MPTI**) and Ivanov Anton V. (KIAM)
Algorithms and realization of high performance recursive grid on sphere
14. Panebarco Marianna
VirtualLife – an innovative virtual framework for promoting cultural heritage
15. Menghi Roberta (postgraduated, guest researcher, Faculty of Preservation of the cultural Heritage, University of Bologna, Ravenna site , 5, via Mariani, Ravenna, Italy)
Virtual reality models for the preservation of the Unesco historical and artistical heritage
16. Monti Mariapaola (postgraduated, guest researcher, Faculty of Preservation of the cultural Heritage, University of Bologna, Ravenna site , 5, via Mariani, Ravenna, Italy)
Image processing and a virtual restoration hypothesis for mosaics and their cartoons
17. Nanette Andrea (Faculty Member, College Year in Athens, Greece)
Engineering Historical Memory: the Italian documents and manuscripts of the Likhachev Collection in the Academy of Sciences of St-Petersburg
18. Volpe Lisa (Ph.D. Student, 1 and 3), Bruni Stefania (1), Maino Giuseppe (1 and 2) and Vaccaro Carmela (3)
ENEA, the Italian Agency for new technologies, energy and sustainable economic development, via Martiri di Monte Sole, 4 40129 – Bologna, Italy
Faculty of Preservation of the Cultural Heritage, Bologna University, Ravenna site, via Mariani, 5, 48100 Ravenna, Italy
Earth Sciences Department, Block B, Room 113, via Saragat, 1, Ferrara University - 44100 Ferrara, Italy
Diagnostic Investigation of Cultural Heritage

- 19.Landi Marco (postgraduated, guest researcher, Faculty of Preservation of the Cultural Heritage, University of Bologna, Ravenna site, 5, via Mariani, Ravenna, Italy)

Multispectral imaging and digital restoration for paintings documentation

20.Russian-Italian

- 21.Nencini Elena (postgraduated, guest researcher, Faculty of Preservation of the Cultural Heritage, University of Bologna, Ravenna site, 5, via Mariani, Ravenna, Italy)

From the physical restoration for preserving to the virtual restoration for enhancing

- 22.Maurizio Indirli, Elena Candigliota, Francesco Immordino, Lorenzo Moretti (UTSISM, ENEA Bologna), Dante Abate, Graziano Furini, Samuele Pierattini (UTICT, ENEA Bologna), Augusto Screpanti (UTPRA, ENEA Roma), Matteo Angelini, Teresa Gambatesa, Chiara Massaia (students of Master in “Bio-sustainable Architecture”, University of Bologna)

Multidisciplinary assessment of historic centres through remote sensing, direct survey and GIS approach

Авторы сборника



prof. Giuseppe Maino
ENEA Research Director
Professor of Computer Science,
Faculty of Preservation of Cultural Heritage,
University of Bologna,
Ravenna Campus



Галина Ивановна Змиевская
к.ф.-м.н.
в.н.с. ИПМ им.М.В. Келдыша РАН,
член оргкомитета ICIAP 2011, Ravenna , Italy, 14-16
September 2011



Вадим Дмитриевич Левченко
зам. рук. направления, зав. сектором 3 отдела
моделирования нелинейных процессов
к.ф.-м.н., доцент
с.н.с. ИПМ им.М.В. Келдыша РАН



Антон Валерьевич Иванов
к.ф.-м.н.
н.с. ИПМ им.М.В. Келдыша РАН



Анна Леонидовна Бондарева
к.ф.-м.н.
с.н.с. ИПМ им.М.В. Келдыша РАН



Анастасия Юрьевна Перепёлкина
Аспирант ИПМ им.М.В. Келдыша РАН



Андрей Владимирович Закиров
Аспирант Московского физико-технического
института государственного университета,



Сергей Андреевич Хилков
Аспирант Московского физико-технического
института государственного университета



Георгий Геннадьевич Малинецкий
Доктор физико-математических наук, профессор
Зев. Отделом Моделирования нелинейных
процессов ИПМ им.М.В. Келдыша РАН



Левченко Татьяна Викторовна,
К.ф.-м.н,
ведущий научный сотрудник ВНИИГеосистем

Оглавление

Contents

О сборнике	4
About selected scientific works	5
Предисловие редактора (Россия)	6
Foreword of Russian Editor	
When Physics and Computer Science meet Art	9
Аннотации статей	10
Abstracts of Papers	13
Численное моделирование кинетики возникновения пористости в многослойных средах	16
Numerical simulation of porosity development kinetics into multy-layer media	
Models of interaction between irradiation and multilayers mediums are worked out. Kinetic and stochastic models of blisters formation in multilayers mediums under influence of ions of inert gas are created. Example of multy-layer device are mirror for EUV-lithography	
Стохастические кинетические модели и алгоритмы в задачах оптимизации нанесения тонких пленок карбида кремния	32
Optimization of thin films covers by means of stochastic kinetic models and algorithms development problems	
The mathematical model of the first-order phase transition due to fluctuation of thermodynamical parameters presented as system of equations of mathematical physics in partial derivatives of the Kolmogorov-Feller and Einstein-Smolukhovskiy and stochastic differential equations of Ito — Stratonovich. Computer simulation study of the nonlinear stage of nucleation can be used in the powders synthesis and thin films of silicon carbide	
Трехмерная полностью кинетическая численная модель замагниченной плазмы на основе LRnLA алгоритмов	45
Fully kinetic 3D model of magnetized plasma	
The purpose of this paper is the development of a novel multipurpose efficient code on the basis of 3D3V fully kinetic model of magnetized plasma in order to	

provide a solution for the problems, which were impossible to solve previously due to computational limitations. One of the problems in question is the study of the anomalous transport in the Hall engine channel. For this purpose we choose a fully kinetic model without the popular parameter calibrations

Численное моделирование уравнения Фоккера-Планка для ансамбля невзаимодействующих осцилляторов с различными статистиками 57
Numerical simulation of Fokker-Planck equation for the ensembles of non-interacting oscillators which obey different statistics

Ensembles of oscillators which obey Fermi-Dirac and Bose-Einstein statistics is described in terms of the Fokker-Planck equation with non-linearity in it's right-hand side. Numerical solution was obtained by the explicit monotone finite volume method with the limiter

Эффективное трехмерное моделирование эволюции электромагнитных волн в актуальных задачах нанооптики 71
The effective 3D modelling of electromagnetic waves' evolution in actual problems of nanooptics

We offer the extensive program code for modeling up-to-date artificial optical and electromagnetic devices and materials such as photonic crystals, metamaterials (Left-Handed Materials), streamlined surfaces and other different nanoscale structures. The code is based on the Local-recursive nonlocal-anisochronous algorithm (LRnLA), which makes possible to reach the high rate of program's effectiveness. In the work the implementation of such algorithm is offered for Maxwell's equations' modeling. In the capacity of difference scheme the Finite-difference time-domain method (FDTD) is used. One may set different boundary conditions, including Perfectly Matched Layer (PML)

Локально-рекурсивные нелокально-асинхронные алгоритмы 83
Local Recursive non-Local Asynchronous Algorithms

This paper is a brief story about the theory of Local Recursive non-Local Asynchronous (LRnLA) algorithms - a new efficient tool for solving problems, self-consistent model describing a system of hyperbolic equations, linear and nonlinear, on current and future computers. Features of the algorithm are shown on the examples of the solution of particular problems of plasma physics, nanophysics, seismic and a number of others

Послесловие: новые грани междисциплинарности 92
Afterword: new facets of interdisciplinarity

Discusses the relationship models of modern applied mathematics and interdisciplinary research, as well as the continuity and tradition of modeling of non-linear processes, who found a place in the works included in the collection,

developing modern applications of computational physics

Благодарности..... 97

Acknowledgments..... 98

Приложение. 99

Список докладов участников первого российско-итальянского семинара
«Workshop First Russian-Italian Joint Seminar on Mathematical and Physical
Models Applications to Condensed Matter and Preservation of the Cultural
Heritage» 99

Авторы сборника..... 102

Authors

Физические и математические модели плазмы и плазмоподобных сред

Группа подготовки издания

Редактор *Г.И. Змиевская*

Редактор *G. Maino*

Зам. редактора *А.Л. Бондарева*

© Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, 2012

© Змиевская Г.И., в.н.с. ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

Подписано в печать 25.10.2012. Формат 60×84/16. Усл. печ. л. 6,8.

Тираж 200 экз. Заказ

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. 125047, Россия, Москва, Миусская пл., 4