

*Физико-математические науки***МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
СТОХАСТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

Гончар Л.И.

*Национальный минерально-сырьевой университет
«Горный», Санкт-Петербург,
e-mail: lgonchar91@mail.ru*

Целью статистического моделирования является воспроизведение функционирования вероятностной модели какого-либо процесса и оценка средних характеристик модели (математического ожидания величин, характеризующих систему, их дисперсии и ковариации). Наиболее известными вероятностными моделями являются модели теории массового обслуживания и статистической физики. Основой метода статистического моделирования является моделирование случайных величин с заданными распределениями и событий с заданными вероятностями. Для моделирования события A с вероятностью p достаточно моделировать случайную величины Y , равномерно распределенную в интервале $[0, 1]$. При попадании этой величины в интервал $[0, p]$ считают, что событие A появилось, а при попадании в интервал $[p, 1]$ – что событие A не появилось. В результате, статистические испытания сводятся к работе генератора случайных чисел, при этом не требуется вникать в сложность и уникальность изучаемых процессов, поэтому метод Монте–Карло не ограничен рамками каких-либо моделей, упрощений, предположений. Метод применяется при исследовании тех случайных процессов, которые в виду своей сложности не поддаются аналитическому рассмотрению, кроме того, он используется при проверке степени адекватности аналитических моделей, применяемых для описания конкретных явлений. Метод Монте–Карло широко применяется при исследовании операций, при отыскании оптимальных решений в условиях неопределенности, при решении сложных задач с множеством критериев.

Формирование покрытия на нейтральной подложке – стохастическое явление, которое зависит от размера частиц и их траектории, гидродинамики расплавленных частиц при распространении по подложкам сложных геометрических форм и скорости отвердевания нанесенного слоя. В зависимости от ряда факторов могут быть получены различные по структуре покрытия с разной степенью пористости и, следовательно, различными характеристиками. При моделировании роста покрытий на подложке метод простой выборки не позволяет формировать достаточно длинные траектории блуждания. Их генерация обрывается практически

на ранней стадии из-за того, что узел, который должен быть занят на очередном шаге, оказывается уже занятым на предыдущих шагах. В этом случае можно продлить блуждание за счет ведения ограничений и тем самым реализовать метод ограниченной выборки.

Для исследования процессов конденсации, испарения и миграции молекул по поверхности плотноупакованной решетки интенсивно используется моделирование с помощью метода Монте–Карло. Однако, анализ эффектов, связанных с осаждением анизотропных молекул, наличием кластеров на поверхности, размерами кластеров и возможностью коллективных перестроек в них по-прежнему является актуальной задачей. Целью моделирования являлось определение зависимости состава пленок оксида олова от различных параметров процесса осаждения.

Процесс обмена молекулами между падающим потоком и подложкой моделировался как выбор случайной ячейки на поверхности подложки и реализация какого-либо вероятностного события. Для определения реализуемого события формировалось три интервала событий: интервалы адсорбции (осаждения) частицы, ее десорбции и поверхностной диффузии. Средняя скорость осаждения определяется величиной падающего на подложку потока и параметром кристаллической решетки. Используемые циклические граничные условия позволяют моделировать процесс осаждения на бесконечно большой поверхности. Моделирование учитывает как процессы, связанные с изолированными молекулами (осаждение, десорбция, миграция, изменение конфигурации), так и с их комплексами (изменение конфигурации молекул всего кластера). Показано, что структура и состав пленки определяются энергиями взаимодействия молекул с подложкой и друг с другом, а также барьером диффузии. В результате моделирования появилась возможность получать оптимальные режимы осаждения покрытий с заранее заданным составом, а также степенью отклонения состава от стехиометрического значения.

Список литературы

1. Биндер К., Хеэман Д.В. Моделирование методом Монте–Карло в статистической физике. – М.: Наука. 1995. – 140 с.
2. Костишко Б.М., Шибяев П.В., Гончар Л.И. Моделирование топологии пленок, сформированных осаждением анизотропных молекул // Уч. записки Ульян. гос. ун-та. Сер. физ.– 1997. – №1(3). – С. 19–22.
3. Гончар Л.И., Гончар Р.В., Золотов А.В. Моделирование осаждения тонкой пленки на инертную подложку // Эффективность использования новых информационных технологий в учебном процессе (ЭНИТ-2000): материалы электронной научно-практической конференции. – Ульяновск, 2000. – С. 217.