

ПРИОРИТЕТНОЕ НАПРАВЛЕНИЕ 1.3.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА, ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ И РАСПРЕДЕЛЕННЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ

Программа 1.3.1. Методы вычислительной математики для задач математической физики (координатор акад. А. Н. Коновалов)

В Институте вычислительной математики и математической геофизики разработана имитационная трехмерная геометрическая модель роста кристаллических агрегатов на плоской бесконечной подложке в идеальных стационарных условиях без образования полостей. Имеются внешняя среда (раствор) и подложка — пластина из нейтрального материала. В начальный момент времени на подложке располагается набор неосприкасающихся зародышей кристаллов — выпуклых монокристаллов, усеченных подложкой (рис. 1). В процессе роста они разрастаются, вступают в контакт, образуют единый объект — кристаллический агрегат (рис. 2). Условия роста идеальные, т. е. постоянны плотность, перенасыщение, температура, давление и т. д. Модель поверхностно-гладкого роста (модель Франка) расширена на случай кристаллических агрегатов. Отметим, что кроме внешней формы агрегата строятся интерфейсы — поверхности, разделяющие отдельные индивиды, соответствующие зародышам (рис. 3). Выполнена программная реализация разработанной имитационной модели.

В том же Институте на основе двойственной постановки статической задачи теории упругости построены и обоснованы оптимальные адаптивные двухслойные (метод скорейшего спуска) и трехслойные (метод сопряженных градиентов) итерационные методы с неулучшаемыми оценками скорости сходимости.

Априорная спектральная информация при этом не используется.

Разработаны и исследованы различные весовые алгоритмы численного статистического моделирования с ветвлением траектории в случае, когда очередной весовой множитель превосходит единицу. В результате вес отдельной ветви не превосходит единицу и дисперсия оценки вычисляемого функционала конечна. Вопросы несмещенности и конечности дисперсии оценок решены на основе сформулированного в работе метода рекуррентного «частичного» осреднения. В качестве приложений рассмотрены оценки коэффициента размножения частиц и решения уравнения Гельмгольца. Изучена сравнительная трудоемкость метода «экспоненциального преобразования» с ветвлением для решения задач теории переноса излучения на основе перехода к мажорантному процессу Гальтона—Ватсона. В связи с этим получено выражение для второго момента полного числа частиц в докритическом процессе Гальтона—Ватсона. Дополнительно исследованы дисперсии весовых алгоритмов с ветвлением для решения интегральных уравнений со степенной нелинейностью.

Впервые получено аналитическое решение для дифракционного сигнала рентгеновского излучения на краевых и винтовых дислокациях с учетом их пространственных корреляций на основе применения предельной

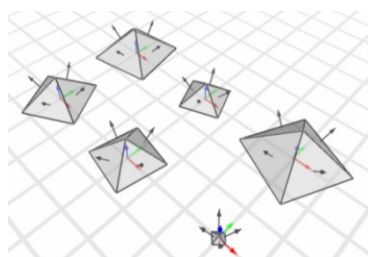


Рис. 1. Зародыши кристаллов на подложке, $t = 0$.

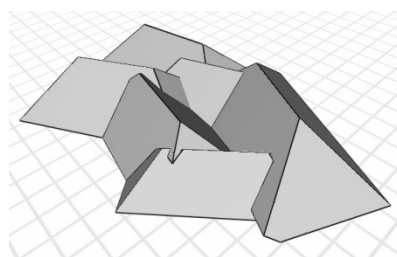


Рис. 2. Кристаллический агрегат — внешняя форма.

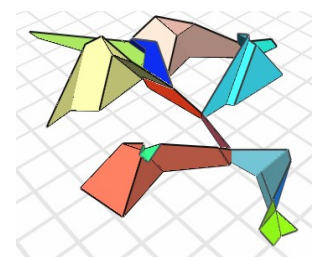


Рис. 3. Кристаллический агрегат — интерфейсы.

теоремы для пуассоновских и гауссовских случайных процессов. Построен общий алгоритм метода Монте-Карло для расчета таких сигналов для ансамблей дислокаций с произвольно заданными пространственными корреляциями. Как для аналитического решения, так и для решения, полученного на основе численного моделирования, было проведено эксперименты для различных кристаллических систем и получено хорошее согласие. Институтом вычислительной математики и математической геофизики совместно с Институтом твердо-

тельной электроники им. Пауля Друде (г. Берлин) исследованы различные варианты эпитаксии тонких пленок на основе данного алгоритма и экспериментальных измерений.

В Институте математики им. С. Л. Соболева получены новые оценки скорости сходимости градиентных методов решения обратных и некорректных задач.

Получены достаточные условия формосохранения (положительности, монотонности, выпуклости и т. д.) интерполяционного кубического сплайна.