

**Синергетика**



От прошлого  
к будущему

**№ 78**

Серия основана  
в 2002 г.

Председатель редколлегии  
профессор  
Г. Г. Малинецкий

Е. С. Куркина, А. Г. Makeев, Н. Л. Семендяева

# СТОХАСТИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ И НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА

## Моделирование методом Монте-Карло

### В ЗАДАЧАХ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ



URSS

**Е. С. Куркина  
А. Г. Макеев  
Н. Л. Семендяева**

# **СТОХАСТИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ И НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА**

**Моделирование методом  
Монте-Карло**

*В задачах  
химической кинетики*



**URSS  
МОСКВА**

**Куркина Елена Сергеевна,  
Макеев Алексей Геннадьевич,  
Семендяева Наталья Леонидовна**

**Стохастические процессы и нелинейная динамика: Моделирование методом Монте-Карло. В задачах химической кинетики. – М.: ЛЕНАНД, 2016. — 200 с. (Синергетика: от прошлого к будущему. № 78.)**

В книге изложены основные принципы построения стохастических моделей для решеточных систем. Проведена классификация методов Монте-Карло, рассмотрены базовые подходы к их алгоритмической реализации, выполнено сравнение эффективности алгоритмов. Описан гибридный кинетический метод Монте-Карло, совмещающий стохастические расчеты и стандартные численные методы, позволяющий изучать динамику сложных систем и проводить качественный анализ стационарных и периодических решений. Широкие возможности метода Монте-Карло продемонстрированы при моделировании процесса термодесорбции из неидеального адсорбционного слоя, а также при изучении разнообразных явлений самоорганизации в гетерогенных каталитических реакциях и в решеточной модели Лотки–Вольтерры. В приложениях приведены примеры Matlab-программ, реализующих кинетический метод Монте-Карло.

Книга может быть полезна студентам и аспирантам высших учебных заведений, а также широкому кругу специалистов, занимающихся математическим моделированием физико-химических и биологических систем.

Формат 60×90/16. Печ. л. 12,5. Зак. № АЛ-058.

Отпечатано в ООО «ЛЕНАНД».

117312, Москва, пр-т Шестидесятилетия Октября, 11А, стр. 11.

ISBN 978–5–9710–3460–5

© ЛЕНАНД, 2016

19994 ID 215838



9 785971 034605

НАУЧНАЯ И УЧЕБНАЯ ЛИТЕРАТУРА	
	E-mail: URSS@URSS.ru
	Каталог изданий в Интернете: <a href="http://URSS.ru">http://URSS.ru</a>
	Тел./факс (многоканальный): + 7 (499) 724 25 45
	URSS

Все права защищены. Никакая часть настоящей книги не может быть воспроизведена или передана в какой бы то ни было форме и какими бы то ни было средствами, будь то электронные или механические, включая фотокопирование и запись на магнитный носитель, а также размещение в Интернете, если на то нет письменного разрешения владельца.

## СОДЕРЖАНИЕ

От редакции .....	5
Предисловие .....	7
Введение .....	10
<b>Глава 1. Физико-химические модели реакций.....</b>	<b>12</b>
§1. Кинетическая схема реакции .....	12
§2. Модель многокомпонентного решёточного газа.....	13
§3. Скорости элементарных стадий в решёточных моделях.....	20
§4. Основное кинетическое уравнение .....	25
<b>Глава 2. Иерархическая система математических моделей.....</b>	<b>26</b>
§1. Микроуровень.....	27
§2. Мезоуровень .....	28
§3. Макроуровень.....	29
<b>Глава 3. Алгоритмы стохастического моделирования .....</b>	<b>32</b>
§1. Алгоритм Метрополиса.....	32
§2. Кинетические алгоритмы Монте-Карло .....	42
§3. Алгоритмы выбора события .....	51
<b>Глава 4. Генераторы случайных чисел.....</b>	<b>62</b>
§1. Метод середины квадрата .....	63
§2. Линейный конгруэнтный метод .....	64
§3. Вихрь Мерсенна .....	65
<b>Глава 5. Гибридный алгоритм для кинетической модели     решёточного газа.....</b>	<b>68</b>
<b>Глава 6. Примеры использования метода Монте-Карло в задачах     гетерогенного катализа. Термодесорбционные спектры.....</b>	<b>75</b>
§1. Математическое моделирование термодесорбции азота с поверхности иридия .....	78
§2. ТДС для квазиравновесного адсорбционного слоя.....	95

---

<b>Глава 7. Моделирование пространственно-временных структур с помощью метода Монте-Карло в задачах химической кинетики</b> .....	<b>111</b>
§1. Колебания и автоволны в модели STM реакции окисления CO....	113
§2. Решёточная модель Лотки-Вольтерры.....	145
<b>Заключение</b> .....	<b>165</b>
<b>Приложения</b>	
Приложение 1. Типы кристаллических структур металлов. Индексы Миллера .....	166
Приложение 2. Сверхструктуры в адсорбционном слое.....	169
Приложение 3. Программа LV_RSM .....	172
Приложение 4. Программа STM_KMC.....	180
Приложение 5. Программа STM_ODE.....	183
<b>Ответы к заданиям</b> .....	<b>185</b>
<b>Список литературы</b> .....	<b>194</b>