

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

Глава 7. Моделирование пространственно-временных структур с помощью метода Монте-Карло в задачах химической кинетики	111
§1. Колебания и автоволны в модели STM реакции окисления CO....	113
§2. Решёточная модель Лотки-Вольтерры.....	145
Заключение	165
Приложения	
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
Ответы к заданиям	185
Список литературы	194