УДК 519.6; 517.95

Параллельный алгоритм решения уравнения Кардара-Паризи-Цванга с источником на основе численной оценки континуального интеграла*

Рассадин А.Э.[1], Степанов А.В.[2]

Лаборатория бесконечномерного анализа и математической физики механико-математического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова[1], Чувашская государственная сельскохозяйственная академия[2]

Один из ключевых вопросов при внедрении нанотехнологий в практику — это вопрос о качестве поверхности твёрдого тела. Чтобы прояснить его, необходимы математические модели временной эволюции поверхности кристалла для различных технологических процессов. В настоящее время наиболее популярным феноменологическим уравнением, применяемым при описании роста кристаллов, является уравнение Кардара-Паризи-Цванга (КПЦ) [1]. Это уравнение было выведено в работе [2] для описания процесса роста поверхности твёрдого тела при эпитаксиальной технологии.

Мы будем рассматривать следующий вариант уравнения КПЦ [2]:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = c + \frac{c}{2}\left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2 + \nu\,\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + Q(x)\,, \tag{1}$$

где $h(x,t)$ — высота поверхности, обладающей цилиндрической образующей, c — скорость роста поверхности, ν — коэффициент поверхностной диффузии и $Q(x)$ — дополнительный источник напыляемого вещества в окрестности поверхности.

Уравнение (1) при $-\infty < x < +\infty$ необходимо дополнить начальным условием:

$$h(x,0) = h_0(x)\,, \tag{2}$$

соответствующим начальному профилю исследуемой поверхности.

Хорошо известно [1, 2], что уравнение КПЦ можно существенно упростить подстановкой вида:

$$h(x,t) = c\,t + \frac{2\,\nu}{c}\,\ln\varphi(x,t)\,, \tag{3}$$

сводящей исходное уравнение (1) к линейному параболическому уравнению для новой неизвестной функции $\varphi(x,t)$:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \nu\,\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + \frac{c\,Q(x)}{2\,\nu}\,\varphi\,, \tag{4}$$

однако начальное условие (2) заменой (3) трансформируется нелинейным образом:

$$\varphi(x,0) \equiv \varphi_0(x) = \exp\left(c\,\frac{h_0(x)}{2\,\nu}\right). \tag{5}$$

Если для уравнения (4) известна его функция Грина (ФГ) $G(x,\xi;t)$, то решение задачи Коши (4)-(5) записывается с её помощью следующим образом:

$$\varphi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(x,\xi;t)\,\varphi_0(\xi)\,d\xi\,. \tag{6}$$

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-08-01356-а.

При $t > 0$ ФГ $G(x, \xi; t)$ удовлетворяет уравнению:

$$\frac{\partial G}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 G}{\partial x^2} + \frac{c\,Q(x)}{2\,\nu}\,G\,, \tag{7}$$

совпадающему с уравнением (4) для функции $\varphi(x, t)$, а при $t = 0$ — начальному условию:

$$G(x, \xi; 0) = \delta(x - \xi)\,, \tag{8}$$

где $\delta(x - \xi)$ — дельта-функция Дирака [3].

При достаточно общих предположениях о функции $Q(x)$ точное решение уравнения (7) для ФГ с начальным условием (8) задаётся формулой Фейнмана-Каца [4]:

$$G(x, \xi; t) = \int_{C(t,\,x-\xi)} \exp\left[-\frac{c}{2\,\nu}\int_0^t Q(\xi + X(\tau))d\tau\right] d_{\,w(t,\,x-\xi)}X, \tag{9}$$

где $d_{\,w(t,\,x-\xi)}X$ — условная мера Винера, а $C(t,\, x - \xi)$ — пространство непрерывных на отрезке $[0,\, t]$ функций, удовлетворяющих условиям: $X(0) = 0$ и $X(t) = x - \xi$.

Для вычисления континуальных интегралов вида (9) существуют приближённые формулы, точные на множестве функциональных многочленов произвольной заданной степени [5], однако в данной работе для его оценки мы применим метод, который не требует глубокого знания функционального анализа, а именно, заметим, что для гауссовых функций $f^\sigma(x) = \frac{1}{\sqrt{2\,\pi}\,\sigma}\exp\left(-\frac{x^2}{2\,\sigma^2}\right)$ согласно [3]:

$$\lim_{\sigma\to 0+} f^\sigma(x - \xi) = \delta(x - \xi)\,, \tag{10}$$

то есть слабый предел последовательности функций $f^\sigma(x - \xi)$ в левой части формулы (10) даёт начальное условие (8) к уравнению (7) на ФГ.

Это означает, что если построить однопараметрическое семейство $G^\sigma(x, \xi; t)$ решений уравнения (7), удовлетворяющее начальному условию:

$$G^\sigma(x, \xi; 0) = f^\sigma(x - \xi)\,, \tag{11}$$

то ФГ $G(x, \xi; t)$ уравнения (7) есть не что иное как слабый предел последовательности функций $G^\sigma(x, \xi; t)$ при $\sigma \to 0+$.

Для нахождения функций $G^\sigma(x, \xi; t)$ перепишем уравнение (7) следующим образом:

$$\frac{\partial \ln G^\sigma}{\partial t} = \nu\,\left[\frac{\partial^2 \ln G^\sigma}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial \ln G^\sigma}{\partial x}\right)^2\right] + \frac{c\,Q(x)}{2\,\nu} \tag{12}$$

и используем метод степенных рядов [6], то есть будем искать решение уравнения (12) в виде:

$$\ln G^\sigma(x, \xi; t) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n^\sigma(t; \xi)\,x^n\,, \tag{13}$$

где $g_n^\sigma(t; \xi)$ — новые неизвестные функции.

Подставляя разложение (13) в уравнение (12), получим бесконечную систему обыкновенных дифференциальных уравнений на функции $g_n^\sigma(t; \xi)$:

$$\frac{\partial g_n^\sigma(t;\xi)}{\partial t} = \nu(n+1)(n+2)g_n^\sigma(t;\xi) + \nu\sum_{k=0}^{n}(k+1)(n-k+1)g_{k+1}^\sigma(t;\xi)g_{n-k+1}^\sigma(t;\xi) + \frac{c\,Q_n}{2\,\nu}\,, \tag{14}$$

где Q_n — это коэффициенты разложения в степенной ряд источника $Q(x)$:

$$Q(x) = \sum_{n=0}^{\infty} Q_n \, x^n \,, \tag{15}$$

а переменная ξ в этой системе играет роль параметра.

Начальные условия для системы уравнений (14) легко получаются из формулы (11):

$$g_0^\sigma(0;\xi) = \ln \frac{1}{\sqrt{2\,\pi}\,\sigma} - \frac{\xi^2}{2\,\sigma^2} \,, \; g_1^\sigma(0;\xi) = \frac{\xi}{2\,\sigma^2} \,, \; g_2^\sigma(0;\xi) = -\frac{1}{2\,\sigma^2} \,, \; g_n^\sigma(0;\xi) = 0 \;(n \geq 3) \,. \tag{16}$$

Для того, чтобы численно решить систему (14), её надо «оборвать», то есть положить $g_n^\sigma(t;\xi) \equiv 0$ при больших n $(n > N)$ — что согласуется с характером начальных условий (16) к ней.

Далее, пусть задано достаточно малое $\sigma > 0$, а начальное условие (5) обладает компактным носителем, таким, что supp $\varphi_0(x) \subset [-L, L]$, тогда для оценки ФГ по формуле:

$$\ln G(x,\xi;t) \approx \sum_{n=0}^{N} g_n^\sigma(t;\xi) \, x^n \,, \tag{17}$$

получающейся из степенного ряда (13) оставлением его N-частичной суммы, надо задать на отрезке $[-L, L]$ сетку по переменной ξ с N_ξ узлами и решить N_ξ идентичных систем из N обыкновенных дифференциальных уравнений, являющихся результатом усечения системы (14), с начальными условиями (16), меняющимися при переборе N_ξ значений ξ на этой сетке.

Таким образом, символическая запись приближённого численно-аналитического решения задачи Коши (4)-(5) имеет вид:

$$\varphi(x,t) \approx \int_{-L}^{L} \exp\left[\sum_{n=0}^{N} g_n^\sigma(t;\xi) \, x^n\right] \varphi_0(\xi) \, d\xi \,. \tag{18}$$

Эта запись имеет следующий смысл: пусть на отрезке $[-L_x, L_x]$ задана сетка по переменной x с N_x узлами, тогда в каждой точке этой сетки значение вспомогательной функции $\varphi(x,t)$ в заданный момент времени t вычисляется по квадратурной формуле [7], например, по формуле трапеций, применённой к правой части выражения (18). При этом если радиус сходимости степенного ряда (15) равен R, то, очевидно, должно выполняться неравенство $L_x \leq R$.

Численное решение усеченной системы удобно проводить с помощью технологии CUDA параллельного программирования корпорации NVIDIA. Для одновременного нахождения решений N_ξ таких систем можно использовать GRID-технологию [8]. Ту же технологию можно применить и для оценки интеграла (18), при этом сетка по переменной ξ может быть неравномерной. Значения же решения $h(x,t)$ исходного уравнения КПЦ на сетке по переменной x пересчитываются по значениям вспомогательной сеточной функции $\varphi(x,t)$ по формуле (3).

Таким образом, в докладе описан параллельный алгоритм решения уравнения КПЦ с источником, не зависящим от времени, на основе численной оценки континуального интеграла по условной мере Винера методом степенных рядов.

Литература

1. Gubinelli M., Perkowski N. KPZ Reloaded // Communications in Mathematical Physics. 2017. V. 349, № 1. P. 165-269.

2. Kardar M., Parisi G., Zhang Y. C. Dynamical scaling of growing interfaces // Physical Review Letters. 1986. V. 56. P. 889-892.

3. Владимиров В.С. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1988. 512 с.

4. Гельфанд И.М., Яглом А.М. Интегрирование в функциональных пространствах и его применения в квантовой физике // УМН. 1956. Т. 11, Вып. 1 (67). С. 77–114.

5. Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Шахбагян Р.Р. Об одном методе вычисления континуальных интегралов без решеточной дискретизации // Матем. моделирование. 1989. Т. 1, № 8. С. 139–157.

6. Красовский А.А. Фазовое пространство и статистическая теория динамических систем. М.: Наука, 1974. 232 с.

7. Никольский С.М. Квадратурные формулы. М.: Наука, 1974. 224 с.

8. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. СПб.: БХВ-Петербург, 2004. 608 с.

MSC2010 65Y05; 35K55

The parallel algorithm for solving of the Kardar-Parisi-Zhang equation with a source on the basis of numerical estimation of path integral

A.E. Rassadin[1], A.V. Stepanov[2]

Laboratory of infinite-dimensional analysis and mathematical physics, faculty of mechanics and mathematics, Lomonosov Moscow State University[1], Chuvash State Agricultural Academy[2]