

УДК: 519.6:536.2

## Построение и исследование непрерывной клеточно-автоматной модели процессов теплопроводности с фазовыми переходами первого рода

В. В. Жихаревич<sup>1,a</sup>, Л. М. Шумиляк<sup>1</sup>, Л. Т. Струтинская<sup>2</sup>, С. Э. Остапов<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Черновицкий факультет Национального технического университета «Харьковский политехнический институт», Украина, 58032, г. Черновцы, ул. Главная, д. 203а

<sup>2</sup> Институт термоэлектрики, Украина, 58029, г. Черновцы, ул. Науки, д. 1

<sup>3</sup> Черновицкий национальный университет имени Юрия Федьковича, Украина, 58012, г. Черновцы, ул. Коцюбинского, д. 2

E-mail: <sup>a</sup> vzhikhar@mail.ru

Получено 5 марта 2013 г.

В данной статье рассматриваются процессы теплопроводности, сопровождающиеся фазовыми переходами первого рода. При помощи клеточно-автоматного моделирования был исследован класс задач, имеющих широкое применение в практической деятельности. В работе приведены вычисления распределения температуры по глубине почвы в разные моменты времени для задачи промерзания влажного грунта. Другая задача — зонное выращивание — также смоделирована с помощью клеточных автоматов. Совпадение реальных и модельных параметров системы подтверждает целесообразность использования выбранного способа моделирования физических процессов.

Ключевые слова: фазовый переход первого рода, клеточный автомат, теплопроводность

## Construction and investigation of continuous cellular automata model of heat conductivity processes with first order phase transitions

V. V. Zhikharevich<sup>1</sup>, L. M. Shumylyak<sup>1</sup>, L. T. Strutinskaja<sup>2</sup>, S. E. Ostapov<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Chernivtsi faculty of national technical university

„Kharkiv polytechnic institute”, 203a Golovna str., Chernivtsi, 58032, Ukraine

<sup>2</sup> Institute of thermoelectrics, 1 Nauki str., Chernivtsi, 58029, Ukraine

<sup>3</sup> Chernivtsi National University named after Yuriy Fedkovych, 2 Kotsyubinskogo str., Chernivtsi, 58012, Ukraine

**Abstract.** — The process of heat conduction, accompanied by the first order phase transitions is discussed in this article. Using cellular automates simulation was investigated class of problems that have broad application in practice. In this paper we calculate the temperature distribution in the depth of the soil at different times for a problem of freezing of moist soil. Another task — zone growing — has been modeled by cellular automates too. The coincidence of real and modeling parameters of the system confirms the feasibility of using the selected method of modeling of physical processes.

Keywords: first order phase transition, a cellular automaton, the thermal conductivity

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2013, vol. 5, no. 2, pp. 141–152 (Russian).

## Введение

Идея клеточно-автоматного моделирования была предложена еще в 40-х годах прошлого века Дж. фон Нейманом, когда он работал над идеей цифровых автоматов, которые обладают способностью самовоспроизводства.

Клеточные автоматы — динамическая система, представляющая собой совокупность одинаковых клеток, одинаковым образом соединенных между собой. Все клетки образуют так называемую решетку клеточного автомата (клеточно-автоматное поле). Состояние каждой клетки определяется правилами взаимодействий, одинаковыми для всех клеток поля. Эти правила описывают изменения состояния каждой клетки в следующий момент времени в зависимости от состояния клетки и ее ближайших соседей.

С помощью клеточных автоматов, как показали работы последних лет, можно представлять биологические, физические, информационные процессы [Kalgin, 2011, Бандман, 2005], а также использовать их во многих других областях, где традиционные модели представляют собой уравнения в частных производных.

Несмотря на достаточно длительный период исследований клеточных автоматов, на сегодняшний день общей теории клеточных автоматов не сформировано. Но в то же время, достаточно успешное применение клеточных автоматов для моделирования разнообразных динамических систем, которые характеризуются близкодействием между составляющими элементами, демонстрирует перспективность этого направления.

Основной проблемой клеточно-автоматного моделирования различных процессов является проблема построения таких локальных правил микровзаимодействий, которые во время функционирования некоторого множества клеточных автоматов порождали ту или иную соответствующую макродинамику. Общих рецептов по решению этой проблемы нет, поэтому исследователи, занимающиеся клеточно-автоматным моделированием, полуинтуитивным путем формулируют соответствующие правила микровзаимодействий. Основной подход, используемый при этом — построение имитационной модели, описывающей близкодействия между составляющими элементами системы. Очевидно, что конкретная реализация имитационных моделей может быть весьма разнообразна. Есть успешные примеры построения одной и той же модели системы как в терминах дискретных клеточных автоматов, так и непрерывных. Это касается, в частности, и моделирования процессов теплопроводности и диффузии [Жихаревич, Шумиляк, 2012, Бандман, 2005].

Тема клеточных автоматов очень актуальна, так как область их применения практически безгранична, что может привести к разгадкам многих вопросов в окружающем мире. Несмотря на своеобразную неопределенность и неоднозначность, клеточные автоматы привлекают своей простотой, универсальностью и естественным параллелизмом.

В работе [Жихаревич, Шумиляк, 2012] продемонстрирована возможность клеточно-автоматного моделирования процессов теплопроводности для одномерного случая. Используя довольно простые правила взаимодействий, было получено количественное совпадение результатов клеточно-автоматного моделирования с аналитическим решением уравнения теплопроводности. Стремление дальнейшего усовершенствования предложенного клеточно-автоматного метода неизбежно приводит к необходимости учета процессов теплопроводности, сопровождающихся фазовыми переходами первого рода.

## Постановка задачи

Известно, что в процессе теплообмена с окружающей средой возможно изменение агрегатного состояния вещества. При этом происходит скачкообразное изменение как физических, так и тепловых характеристик материала. Нужно учесть, что фазовый переход сопровождается выделением или поглощением теплоты.

Решение такого рода задач имеет большое практическое значение во многих прикладных науках. Большое внимание исследователей в области физики твердого тела привлекает проблема изучения структурных параметров реальных материалов при фазовых переходах, имеющих различную физическую природу и различные пространственные масштабы.

Задача расчетов температурных полей системы, в которой имеют место фазовые переходы первого рода, относится к классу так называемой задачи Стефана — задачи с четкой границей раздела жидкой и твердой фаз. Здесь основная проблема заключается в описании движения границы раздела фаз между твердым телом и жидкостью.

Математическая формулировка задачи Стефана для трехмерного случая имеет вид:

$$\frac{\partial T_S(x, y, z, t)}{\partial t} = a_S \Delta T_S(x, y, z, t), \quad a_S = \frac{k_S}{c_S \rho_S}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial T_L(x, y, z, t)}{\partial t} = a_L \Delta T_L(x, y, z, t), \quad a_L = \frac{k_L}{c_L \rho_L}, \quad (2)$$

$$\left| k_S \nabla T_S(x, y, z, t) - k_L \nabla T_L(x, y, z, t) \right| = \left| H_{\text{пл}} \rho_{(L/S)} \frac{d\xi}{dt} \right|, \quad (3)$$

где  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  — оператор Лапласа;  $\nabla = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}$  — оператор Гамильтона;  $T_S$

и  $T_L$ ,  $a_S$  и  $a_L$ ,  $k_S$  и  $k_L$ ,  $c_S$  и  $c_L$ ,  $\rho_S$  и  $\rho_L$  — соответственно: температура, коэффициент теплопроводности, коэффициент теплоемкости, удельная плотность твердой и жидкой фаз;  $H_{\text{пл}}$  — скрытая теплота плавления;  $\xi$  — координата границы раздела двух фаз. В правой части уравнения (3) обозначение удельной плотности  $\rho_{(L/S)}$  означает, что выбирается соответствующее значение жидкой/твердой фазы в зависимости от направления процесса фазового перехода — кристаллизация/плавление.

## Описание клеточно-автоматной модели

Опишем структуру клеточно-автоматного (КА) поля в случае моделирования процессов теплопроводности с фазовыми переходами первого рода. Размерность поля соответствует размерности моделируемой системы. Рассмотрим для наглядности двумерное поле КА (рис. 1), которое содержит три слоя: 1 — температура клетки  $T$ ; 2 — внутренняя теплота  $H$ , которая учитывается при моделировании фазовых переходов; 3 — индекс вещества  $I$  (или состояния вещества: монокристалл, поликристалл, расплав), который учитывается при выборе значений коэффициентов теплопроводности, теплоемкости и плотности в соответствующей точке системы. Содержимое ячеек поля может принимать действительные непрерывные значения.

Площадь ячейки определяется размерностью клеточно-автоматного поля в соответствии с геометрическими размерами фрагмента моделируемой системы.



Рис. 1. Структура клеточно-автоматного поля для двумерной модели

Процесс моделирования представляет собой итерационный цикл клеточно-автоматных взаимодействий. При этом мы используем асинхронную схему взаимодействий клеточных автоматов. Данная схема предусматривает циклическое выполнение трех типичных шагов:

1. На клеточно-автоматном поле случайным образом выбирается некоторая клетка  $i = 1$  с целочисленными координатами  $x^1, y^1$ . При этом все клетки являются равновероятными относительно их выбора.

2. Случайным равновероятным образом выбирается некоторая соседняя клетка  $i = 2$  с целочисленными координатами  $x^2, y^2$ . В качестве схемы соседства в нашем случае принята окрестность Неймана, т. е. у клетки есть только четыре соседа:

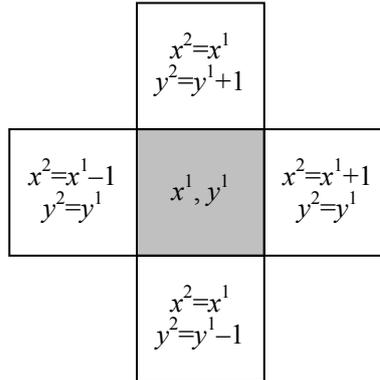


Рис. 2. Окрестность Неймана и координаты клеток для двухмерной модели.

3. Происходит клеточно-автоматное взаимодействие между двумя клетками.

Суть клеточно-автоматных взаимодействий заключается в модификации непрерывных значений соответствующих слоев клеток согласно следующей системе уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{ll} T^{i'} = T^i + (T_{\text{cp}} - T^i) a_{\text{cp}} / a_{\text{max}}; \\ \text{если } (T^{i'} > T_{\text{пл}}) \text{ и } (H^i < H_{\text{пл}}), & \text{то } \{H^{i'} = H^i + c_S^i (T^{i'} - T_{\text{пл}}); T^{i'} = T_{\text{пл}};\} \\ \text{если } (H^{i'} > H_{\text{пл}}), & \text{то } \{T^{i'} = T^i + (H^{i'} - H_{\text{пл}}) / c_L^i; H^{i'} = H_{\text{пл}};\} \\ \text{если } (T^{i'} < T_{\text{пл}}) \text{ и } (H^i > 0), & \text{то } \{H^{i'} = H^i + c_L^i (T^{i'} - T_{\text{пл}}); T^{i'} = T_{\text{пл}};\} \\ \text{если } (H^{i'} < 0), & \text{то } \{T^{i'} = T^i + H^{i'} / c_S^i; H^{i'} = 0;\} \end{array} \right. \quad (4)$$

$$a_{\text{cp}} = (a^1 + a^2) / 2; a^i = k^i / \rho^i c^i;$$

$$T_{\text{cp}} = \frac{w^1 T^1 + w^2 T^2}{w^1 + w^2}; w^i = \rho^i c^i.$$

Здесь  $i = 1, 2$  — значение индекса, который соответствует выбранной и соседней клетке с координатами  $(x^1, y^1)$  и  $(x^2, y^2)$  соответственно; штрихом отмечены значения в следующий момент времени.

Первое уравнение системы (4) представляет собой клеточно-автоматный аналог уравнения теплопроводности (1) и (2), который был исследован в работе [Жихаревич, Шумиляк, 2012], остальные уравнения системы (4) — аппроксимация уравнения (3), причем второе и третье уравнения системы (4) описывают процесс плавления, а четвертое и пятое — процесс кристаллизации.

Система уравнений (4) описывает изменение значений температуры и скрытой теплоты плавления соответствующих ячеек за время одного элементарного взаимодействия клеточных автоматов и является своеобразной аппроксимацией численного решения задачи Стефана (1–3). Совершенно очевидно, что для обеспечения адекватности процесса моделирования размер-

ность клеточно-автоматного поля должна быть как можно большей. С другой стороны, это неизбежно приведет к слишком долгому процессу моделирования. Здесь по аналогии с различными многочисленными схемами решения возникает проблема поиска компромисса между точностью решения и временем, необходимым для его получения.

Как было показано в работах [Шумиляк, Жихаревич, 2012; Жихаревич, Шумиляк, 2012], модельное время одного клеточно-автоматного взаимодействия зависит от размерности поля.

Для одномерной модели, поле которой имеет  $N_x$  клеток, время взаимодействия равно:

$$t_{1КА} = \frac{d_x^2}{a_{\max}} \frac{1}{2N_x^3}. \quad (5)$$

Для двумерной модели с размерностью  $N_x \times N_y$ , время взаимодействия равно:

$$t_{1КА} = \frac{d_x^2}{a_{\max}} \frac{1}{4N_x^3 N_y} = \frac{d_y^2}{a_{\max}} \frac{1}{4N_y^3 N_x}. \quad (6)$$

Для трехмерной модели с размерностью  $N_x \times N_y \times N_z$  время взаимодействия равно:

$$t_{1КА} = \frac{d_x^2}{a_{\max}} \frac{1}{6N_x^3 N_y N_z} = \frac{d_y^2}{a_{\max}} \frac{1}{6N_y^3 N_x N_z} = \frac{d_z^2}{a_{\max}} \frac{1}{6N_z^3 N_y N_x}, \quad (7)$$

где  $d_x$ ,  $d_y$  и  $d_z$  — размеры образца вдоль координаты  $x$ ,  $y$  и  $z$  соответственно.

Таким образом, чем больше размерность поля КА, тем большее количество клеточно-автоматных взаимодействий следует провести в течение некоторого модельного промежутка времени. Но с другой стороны, как было показано в работе [Жихаревич, Шумиляк, 2012], увеличивается также и точность расчетов.

## Результаты расчетов и их анализ

Продemonстрируем адекватность предложенного клеточно-автоматного подхода к моделированию тепловых процессов. Для начала рассмотрим процессы теплопроводности, которые не сопровождаются фазовыми переходами [Кузнецов, Шеремет, 2007].

Во многих важных практических задачах выполняется оценка температурных полей в многослойных деталях конструкций. Проанализируем процесс теплопереноса в образце, который представляет собой совокупность двух пластин с различными теплофизическими характеристиками (рис. 3). В качестве примера определим температурное поле через 30, 180 и 600 секунд. Толщину всей пластины примем равной  $L = 0,3$  м. Будем считать, что толщины составных частей одинаковы. Начальная температура (при  $t = 0$  секунд) во всем образце  $T = 10$  °С. Одна часть пластины (слева на рисунке 3) — сталь, а вторая часть (справа на рисунке 3) — медь. Параметры этих материалов занесены в таблицу 1. На границе  $x = 0$  поддерживается постоянная температура  $T = 100$  °С, а на границе  $x = L$  температура  $T = 50$  °С.

Таблица 1. Тепловые параметры материалов

	Сталь	Медь	Железо
Коэффициент теплопроводности, Вт/(м×°С)	46	384	71
Плотность, кг/м <sup>3</sup>	7800	8800	7900
Удельная теплоемкость, Дж/(кг×°С)	460	381	460

Результаты расчетов для одномерной ( $N_x = 500$ ), двумерной ( $N_x \times N_y = 500 \times 100$ ) и трехмерной ( $N_x \times N_y \times N_z = 500 \times 10 \times 10$ ) КА-моделей вдоль оси  $x$  показаны на рисунке 3, в пределах погрешности клеточно-автоматного «шума» [Жихаревич, Шумиляк, 2012] совпадают между

собой и с соответствующими результатами численного решения уравнений (1)–(3) для заданного образца [Кузнецов, Шеремет, 2007].

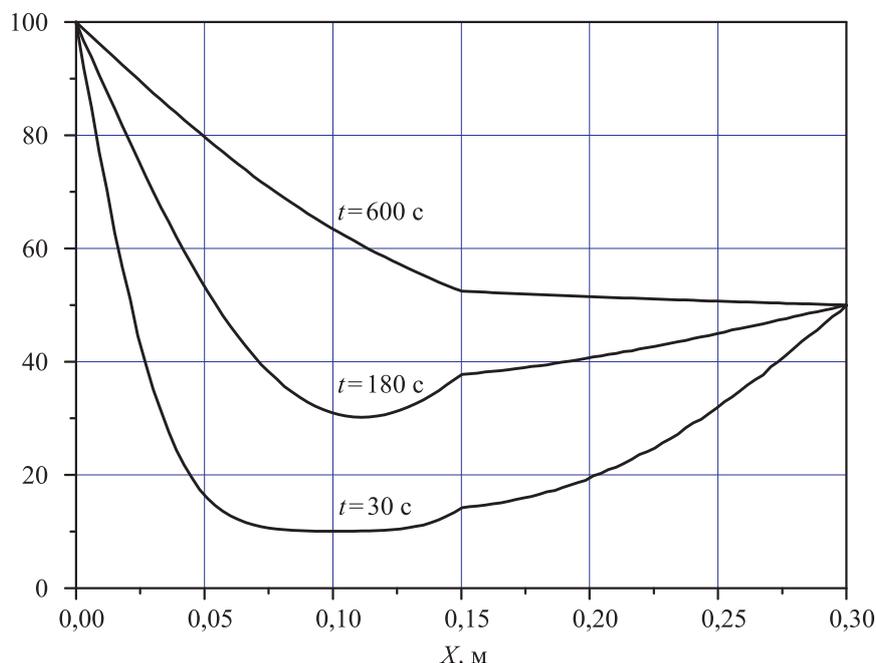


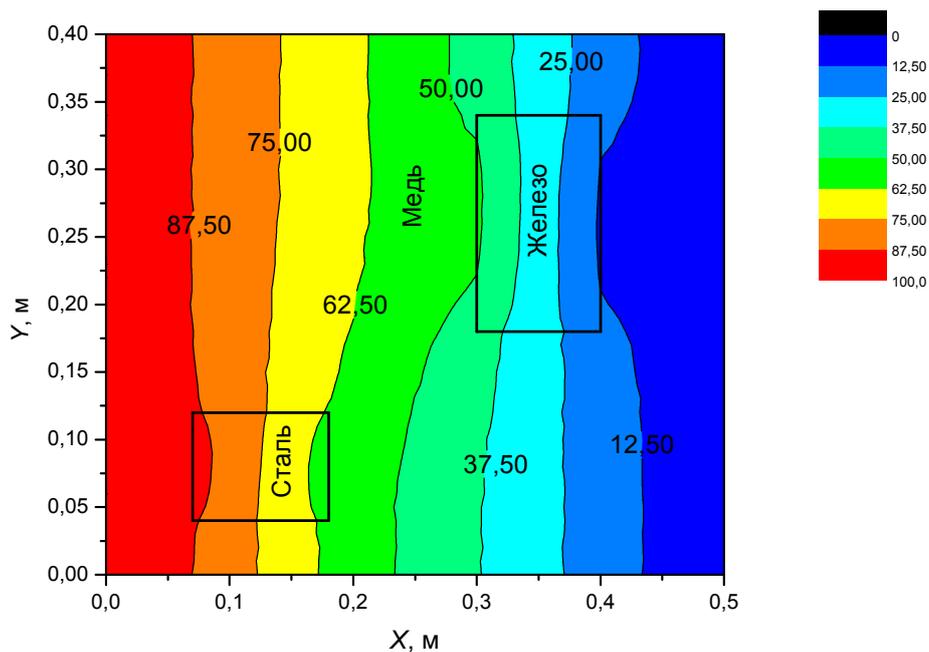
Рис. 3. Распределения температуры по толщине пластины в различные моменты времени (сталь — левая половина, медь — правая половина)

Проанализируем процесс теплопереноса в медной пластине, размерами  $L \times H = 0,5 \times 0,4$  м, которая содержит два включения (рис. 4). Материалы включений: сталь (с координатами:  $(0,07 < x < 0,18) \wedge (0,04 < y < 0,12)$ ) и железо (с координатами:  $(0,3 < x < 0,4) \wedge (0,18 < y < 0,34)$ ). Параметры этих материалов представлены в таблице 1. На вертикальных границах области решения поддерживаются постоянные температуры:  $T = 100$  °С при  $x = 0$  и  $T = 0$  °С при  $x = L$ . Горизонтальные границы являются адиабатическими. Начальная температура области решения  $T = 50$  °С. Результаты расчетов для двухмерной ( $N_x \times N_y = 250 \times 200$ ) и трехмерной ( $N_x \times N_y \times N_z = 250 \times 200 \times 10$ ) КА-моделей вдоль осей  $x$  и  $y$  изображены на рисунке 4, а также в пределах погрешности клеточно-автоматного «шума» [Жихаревич, Шумиляк, 2012] совпадают между собой и с соответствующими результатами численного решения уравнений (1)–(3) для заданного образца [Кузнецов, Шеремет, 2007].

Рассмотрим процессы теплопроводности, при которых имеют место фазовые переходы первого рода, то есть плавление или кристаллизация. При этом следует учитывать скрытую теплоту плавления материала.

Прежде всего, оценим справедливость системы уравнений (4) с точки зрения стационарного установившегося режима, при котором температура во всех точках образца выравнивается. Для этого решим следующую элементарную задачу. Пусть в замкнутой системе находится вода и лед одинаковой массы. В начальный момент времени вода нагрета до температуры  $T = 100$  °С, а лед находится при температуре плавления  $T = 0$  °С. Какая установится температура в системе в стационарном случае  $T_{уст}$ ? Очевидно, что  $T_{уст} = (C_v \cdot 100 - H_{пл}) / (2C_v)$ , где  $C_v$  — удельная теплоемкость воды,  $H_{пл}$  — теплота плавления льда. На основе данных, приведенных в таблице 2, можно получить:  $T_{уст} = 9, (523809)$  °С.

Проведя клеточно-автоматные расчеты, используя систему уравнений (4) для одномерного поля, содержащего 500 ячеек, было получено совпадение с приведенным значением  $T_{уст}$  до 12-й цифры после запятой.


 Рис. 4. Изотермы (°C) в пластине при  $t = 600$  с

Перейдем теперь к рассмотрению нестационарной задачи теплопроводности с учетом фазовых переходов первого рода, так называемой задаче Стефана. Сформулируем ее в классическом варианте задачи теплопроводности с подвижной границей раздела фаз — промерзание влажного грунта [Кузнецов, Шеремет, 2007].

Пусть влажный грунт находится в талом состоянии и имеет в начальный момент  $t = 0$  °C с равномерную температуру  $T = 20$  °C. Также в начальный момент времени на поверхности почвы мгновенно устанавливается температура ниже температуры заморзания  $T = -5$  °C. В результате будет образовываться промерзший слой переменной толщины  $\xi = f(t)$ . Его подвижная граница всегда имеет температуру заморзания. На этой границе происходит переход из одного агрегатного состояния в другое, на что требуется теплота перехода  $H_{пл}$ , (Дж/кг). Таким образом, граница  $x = \xi$  талой зоны имеет постоянную температуру заморзания, а тепловые условия на границе  $x = L$  примем адиабатическими. Коэффициенты переноса мерзлой и талой зон разные и отражены в таблице 2. Предполагается, что перенос тепла в почве происходит только вследствие теплопроводности. Примем глубину слоя почвы равной  $L = 0,3$  м.

Были проведены вычисления распределений температуры по глубине почвы в различные моменты времени ( $t = 4316$  с,  $t = 19464$  с,  $t = 90875$  с,  $t = 266246$  с), используя клеточно-автоматный подход. Результаты расчетов для одномерной ( $N_x = 500$ ), двухмерной ( $N_x \times N_y = 500 \times 100$ ) и трехмерной ( $N_x \times N_y \times N_z = 500 \times 10 \times 10$ ) КА-моделей вдоль оси  $x$  показаны на рисунке 5. В пределах погрешности клеточно-автоматного «шума» [Жихаревич, Шумиляк, 2012] модели различной размерности совпадают между собой и с соответствующими результатами численного решения уравнений (1)–(3) для заданной задачи промерзания влажного грунта [Кузнецов, Шеремет, 2007].

Еще одной важной с практической точки зрения задачей является моделирование процесса зонного выращивания полупроводниковых материалов, в частности теллурида висмута ( $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ), который используется в различных термоэлектрических приборах [Струтинская, Жихаревич, 2012].

Как известно, зонное выращивание — это метод изготовления материалов, который состоит в перемещении узкой расплавленной зоны вдоль твердого стержня из выращиваемого мате-

риала. При этом на одной поверхности раздела твердой и жидкой фаз (фронт кристаллизации) происходит кристаллизация материала, а на другой (фронт плавления) — подпитка зоны материалом.

Таблица 2. Тепловые параметры материалов

	Вода	Мерзлый грунт	Талый грунт
Коэффициент теплопроводности, Вт/(м×°С)	0,56	2,3	0,6
Плотность, кг/м <sup>3</sup>	1 000	917	1 000
Удельная теплоемкость, Дж/(кг×°С)	4 200	2 090	4 220
Температура плавления, °С	0	0	0
Теплота плавления / кристаллизации, Дж/кг	340 000	332 000	332 000

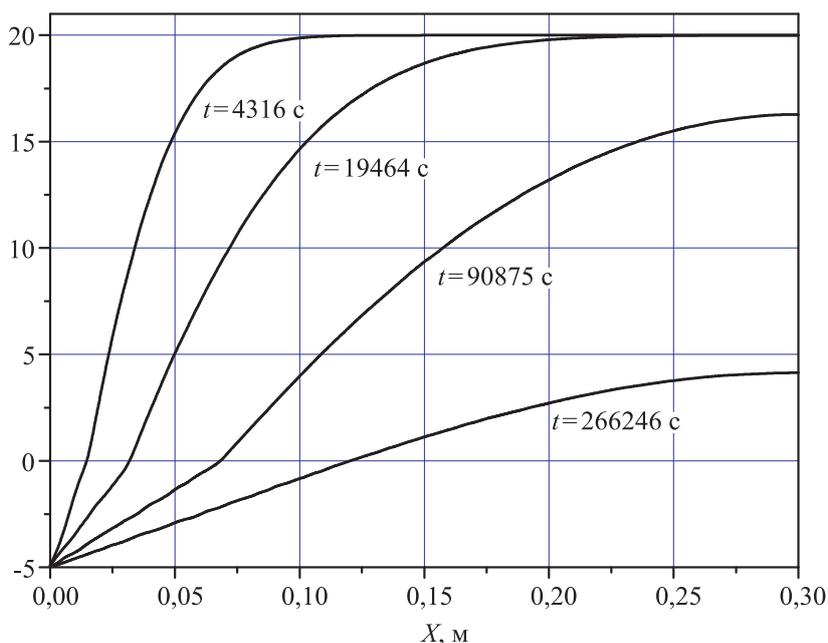


Рис. 5. Распределения температуры по глубине почвы

Обычно зонное выращивание материалов происходит в кварцевых ампулах цилиндрической формы. Для реализации клеточно-автоматной модели процесса выращивания весьма продуктивным является учет цилиндрической симметрии системы. Это делает возможным сведение трехмерной задачи теплопереноса к двумерной, что существенно сократит время получения результатов расчетов на фоне неизменности остальных параметров модели.

Совершенно очевидно, что нагрев или охлаждение цилиндра диаметром  $D$  будет происходить интенсивнее по сравнению с бруском квадратного сечения размером  $D \times D$ .

Рассмотрим пример охлаждения цилиндра диаметром 0,3 м, причем при охлаждении будет иметь место фазовый переход — кристаллизация. Пусть в начальный момент времени  $t = 0$  цилиндр нагрет до температуры  $T = 50$  °С. Также в начальный момент времени на боковой поверхности цилиндра мгновенно устанавливается температура ниже температуры кристаллизации  $T = -50$  °С. Тепловые параметры материала цилиндра примем аналогичными параметрам талого и замерзшего грунта (см. таблицу 2). На рисунке 6 показан пример температурного распределения в сечении цилиндра в момент времени  $t = 5000$  с. Границы цилиндра показаны пунктиром. Расчет проводился методом клеточных автоматов на поле размером  $N_x \times N_y = 200 \times 200$  клеток.

Систему, изображенную на рисунке 7 справа, можно рассматривать как одномерный образец, в крайних точках которого теплоемкость (или плотность) в  $\pi R$  раз больше, чем в центре. Или можно сказать наоборот: теплоемкость в центре в  $\pi R$  раз меньше, чем по бокам ( $\pi R$  — половина длины окружности радиусом  $R$ ).

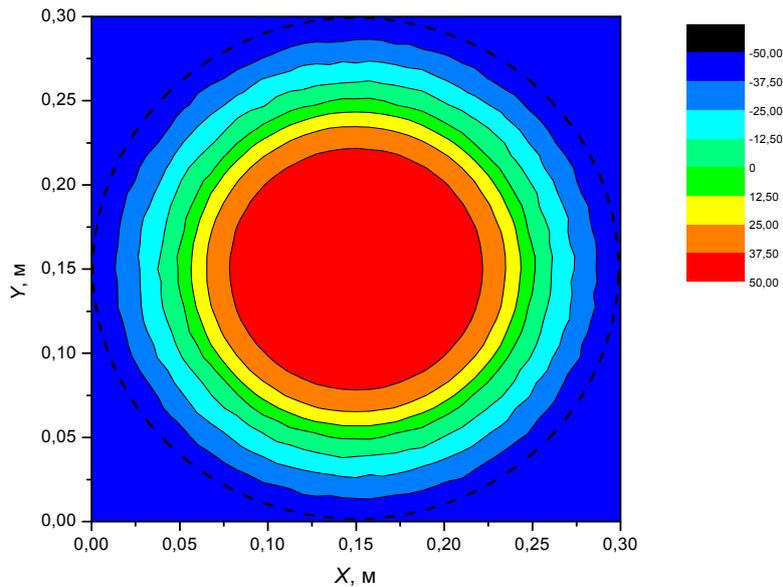


Рис. 6. Изотермы (°C) в сечении цилиндра (показаны пунктиром) при  $t = 5000$  с

Процесс перехода от двухмерной модели к одномерной схематично проиллюстрируем преобразованием круга в набор из множества секторов:

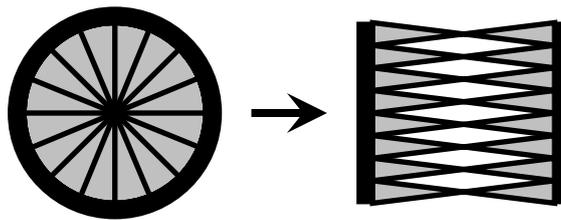


Рис. 7. Схематическое изображение преобразования круга в набор из множества секторов

Для учета этой особенности дополним выражение для «веса коэффициента» системы (4) множителем  $(1 + \pi R)$ . Итак, выражение примет вид:  $w^i = \rho^i c^i (1 + \pi R^i)$ , где  $R^i$  — расстояние от оси цилиндра (или центра круга) до  $i$ -й клетки.

Обратите внимание, что параметры  $a_{cp}$ ,  $a_{max}$ ,  $t_{1KA}$ ,  $H_{пл}$  не зависят от множителя  $(1 + \pi R)$ , поскольку тепловые параметры материала не изменяются. Зависимость  $T_{cp}$  от  $(1 + \pi R)$  можно объяснить своеобразным «искривлением пространства».

Для проверки нашего предположения проведем ряд вычислительных экспериментов по охлаждению бруска квадратного сечения  $D \times D$  и цилиндра диаметром  $D$ . Причем для бруска теплопередача происходит только через две противоположные стороны, другие две стороны находятся в адиабатических условиях. Рисунок 8 иллюстрирует существенные расхождения распределений температуры для бруска и цилиндра в различные моменты времени (тепловые параметры из таблицы 2). Но если при моделировании охлаждения бруска учесть множитель  $(1 + \pi R)$ , то температурные распределения полностью совпадут с соответствующими результатами для цилиндра!

Таким образом, заменив  $w^i = \rho^i c^i$  на  $w^i = \rho^i c^i (1 + \pi R^i)$  в системе (4) можно реализовать двухмерную клеточно-автоматную модель процесса зонного выращивания материалов в цилиндрически-симметричных кварцевых ампулах.

На рисунке 9 изображен пример моделирования процесса зонного выращивания  $Vi_2Te_3$ . Тепловые параметры  $Vi_2Te_3$  приведены в таблице 3, а параметры процесса следующие: темпе-

ратура нагревателя — 840 °С, температура холодильников — 30 °С, скорость роста (скорость перемещения нагревателей) — 200 мм/ч, высота фрагмента ампулы — 15 см, внутренняя толщина ампулы — 3 см, высота нагревателя — 5 см. Направление перемещения нагревателя — снизу вверх. В нижней части ампулы формируется монокристалл, а расплавленная зона подпитывается сверху поликристаллом. Размеры поля КА  $N_x \times N_y = 120 \times 600$  клеток.

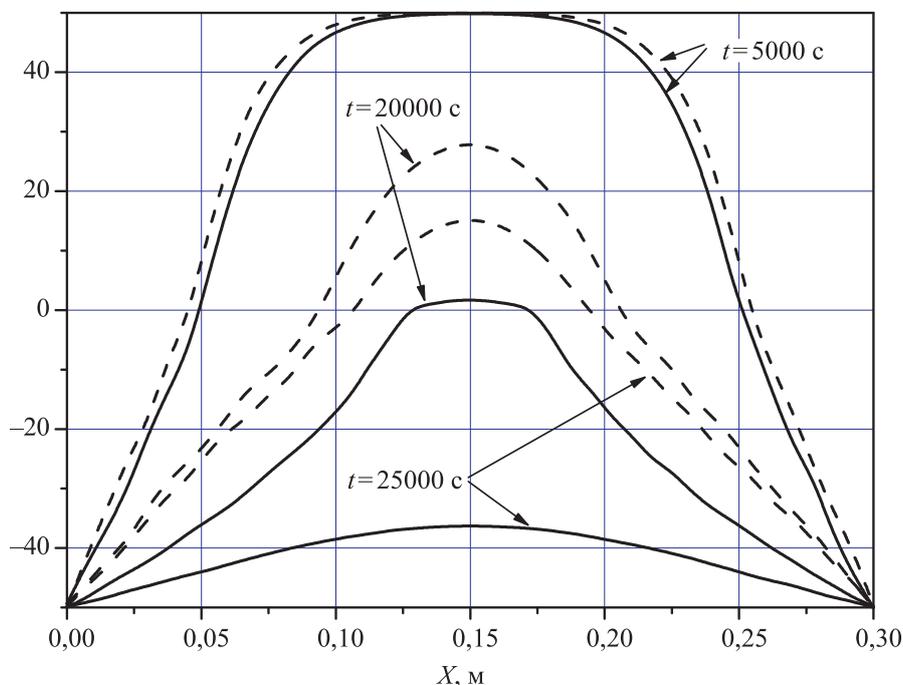


Рис. 8. Распределения температуры вдоль диагонали сечения цилиндра (сплошные линии) и вдоль сечения квадратного бруска (пунктирные линии)

Изменяя параметры процесса зонного выращивания  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , можно наблюдать различные формы фронта кристаллизации — выпуклые в сторону расплава, вогнутые или плоские. Очень важным, с технологической точки зрения, является формирование плоского фронта кристаллизации, который обеспечивает равномерность физических параметров вдоль поперечного сечения слитков. Равенство реальных и модельных параметров выращивания, при которых имеет место плоский фронт кристаллизации [Струтинская, Жихаревич, 2012], демонстрирует адекватность описанного клеточно-автоматного подхода.

Таблица 3. Тепловые параметры  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$

	Монокристалл	Поликристалл	Расплав
Коэффициент теплопроводности, Вт/(м×°С)	2	3	5
Плотность, кг/м <sup>3</sup>	7700	7600	7400
Удельная теплоемкость, Дж/(кг×°С)	300	300	330
Температура плавления, °С	585	585	585
Теплота плавления / кристаллизации, Дж/кг	300000	300000	300000

## Выводы

В литературе представлено мало альтернативных методов решения задач теплопроводности с фазовыми переходами первого рода. Описанный клеточно-автоматный алгоритм решения задачи Стефана был применен для моделирования процессов зонного выращивания кристаллов и для задачи промерзания грунта.

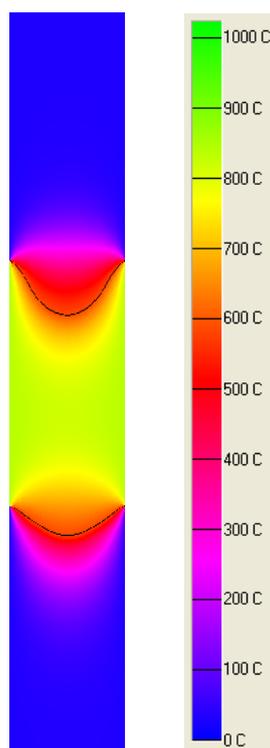


Рис. 9. Пример моделирования процесса зонного выращивания  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$

В данной работе было определено движение фронта промерзания и распределение температуры в промерзшей и талой зонах для задачи промерзания влажного грунта. Сравнительный анализ значений температур, рассчитанных по классическим численным методам (решение задачи Стефана) [Кузнецов, Шеремет, 2007], и температур, определенных согласно клеточно-автоматному методу, показал хорошее совпадение. Это позволяет получить гарантировано верный результат. Однако последний метод является более перспективным при рассмотрении задач со сложными граничными условиями.

Кроме того были определены параметры системы в задаче о зонной плавке полупроводникового материала, правдивость которых была подтверждена реальными испытаниями.

В дальнейшем возможно дополнение метода клеточных автоматов, которое позволит моделировать явление сегрегации примесей, т. е. неравномерного их распределения, при этом учесть зависимость температуры фазового перехода от состава и смоделировать неустойчивость фронта кристаллизации. Все эти задачи представляют особый интерес, так как до сих пор не разработаны в должной мере методы моделирования сложных явлений, происходящих при кристаллизации слитка.

## Список литературы

- Бандман О. Л. Клеточно-автоматные модели пространственной динамики // Системная информатика. — 2005. — Вып. 10. — С. 57–113.
- Жихаревич В. В., Шумиляк Л. М. Аппроксимация решения нестационарного уравнения теплопроводности методом вероятностных непрерывных асинхронных клеточных автоматов для одномерного случая // Компьютерные исследования и моделирование. — 2012. — Т. 4, № 2. — С. 293–301.
- Жихаревич В. В., Шумиляк Л. М. Моделирование тепловой динамики методом непрерывных асинхронных клеточных автоматов // Краевые задачи для дифференциальных уравнений: Сб. научн. раб. — 2012. — Вып. 21. — С. 183–192.

- Кузнецов Г. В., Шеремет М. А.* Разностные методы решения задач теплопроводности: учебное пособие. Томск: Изд-во ТПУ, 2007. — 172 с.
- Струтинская Л. Т., Жихаревич В. В.* Моделирование процесса роста термоэлектрического материала на основе  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  методом вертикальной зонной плавки // Термоэлектрика. — 2012. — № 2. — С. 79–87.
- Шумиляк Л. М., Жихаревич В. В.* Особенности моделирования процессов диффузии и теплопроводности методом непрерывных асинхронных клеточных автоматов // Тезисы докладов XX международной научно-практической конференции «Информационные технологии: наука, техника, технология, образование, здоровье» (MicroCAD-2012) г. Харьков (Украина), Ч. IV. 15–17 мая 2012. — С. 52.
- Kalgin K. V.* Domain Specific Language and Translator for Cellular Automata Models of Physico-Chemical Processes // Proc. of PaCT. — 2011. — P. 166–174.