



ИСПОЛЬЗОВАНИЕ НЕПРЕРЫВНЫХ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ В СИСТЕМАХ С ФАЗОВЫМИ ПЕРЕХОДАМИ ПЕРВОГО РОДА

Владимир Жихаревич, Лилия Шумиляк

Черновицкий факультет Национального технического университета
“Харьковский политехнический институт”, Украина, 58032,
г. Черновцы, ул. Главная, 203а
e-mail: vzhikhar@mail.ru, nizhnik@mail.ru

Резюме: Работа посвящена вопросам использования клеточно-автоматной модели для исследования некоторых базовых физических процессов. На примере моделирования процессов переноса тепла рассмотрены основные подходы и общая методология разработки клеточно-автоматных моделей. Показано, что данные модели могут стать альтернативой использованию классических дифференциальных уравнений. Доказано, что модель в виде системы клеточных автоматов является достаточно удобным инструментальным средством для исследования нелинейных задач теплопереноса и может описывать весьма сложное поведение системы, несмотря на простоту ее описания.

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

USE OF CONTINUOUS CELLULAR AUTOMATA FOR SIMULATION OF THERMAL CONDUCTIVITY IN SYSTEMS WITH FIRST ORDER PHASE TRANSITION

Vladimir Zhikharevich, Liliya Shumylyak

Chernivtsi Faculty of National Technical University
“Kharkiv Polytechnic Institute”,
Golovna Str., 203a, Chernivtsi, 58032, Ukraine
vzhikhar@mail.ru, nizhnik@mail.ru

Abstract: This paper is devoted to the use of cellular automata model for the study of some underlying physical processes. The basic approach and general methodology for the development of cellular automata models are examined through the example of heat transfer processes. It is shown that these models can be an alternative to the use of classical differential equations. It is proven that the model as a system of cellular automata is a good tool for the study of nonlinear problems of heat transfer and can describe a very complex behaviour of a system, despite the simplicity of its description.

Keywords: first order phase transition, cellular automata, thermal conductivity.

ВВЕДЕНИЕ

Проблема решения задач теплопроводности, особенно для случаев с нелинейными параметрами материалов, является достаточно актуальной. В большинстве таких задач общепринятым подходом является численное решение. Но когда речь идет о системах со сложными граничными условиями или фазовыми

переходами вещества, то вычислительная сложность подталкивает к поиску альтернативных методов. Клеточно-автоматный алгоритм легко справляется с описанием сложных систем.

В последние годы активно используются альтернативные подходы относительно численных методов в задачах теплопроводности и диффузии. При этом клеточно-автоматные

алгоритмы применяются достаточно успешно [1, 2]. Следует отметить, что при расчетах диффузионных процессов в большинстве случаев используют дискретные модели [3], а процессы теплопереноса аппроксимируются непрерывными моделями клеточных автоматов [4, 5].

Большое внимание исследователей в области физики твердого тела привлекает проблема изучения структурных параметров реальных материалов, имеющих различную физическую природу и различные пространственные масштабы. В таких случаях есть смысл использовать такие методы моделирования, которые легко описывают сложность геометрии системы [1]. Таким свойством обладает клеточно-автоматное моделирование. Целью данной работы является разработка модели непрерывных клеточных автоматов и использование ее для описания процессов теплопроводности, усложненных наличием фазового перехода первого рода.

Тема клеточных автоматов очень актуальна, так как область их применения практически безгранична, что может привести к разгадкам многих вопросов в окружающем мире.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Задача расчетов температурных полей системы, в которой имеют место фазовые переходы первого рода, относится к классу так называемой задачи Стефана.

Математическая формулировка задачи Стефана для трехмерного случая имеет вид:

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

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

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

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 , ρ_S и ρ_L – соответственно: температура, коэффициент теплопроводности, коэффициент теплопроводности, удельная теплоемкость, удельная плотность твердой и жидкой фаз; $H_{\text{пл}}$ – скрытая теплота плавления; ξ – 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/плавления.

Процессы теплопроводности, которые описывают уравнения (1)-(3) возможно смоделировать с помощью клеточно-автоматного метода. Но для организации количественных расчетов необходимо дать ответ на вопрос, сколько следует провести клеточно-автоматных взаимодействий, чтобы полученное температурное распределение можно было бы считать решением задачи в момент времени t .

2. ОПИСАНИЕ КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНОЙ МОДЕЛИ

Суть моделирования процессов теплопроводности с помощью клеточных автоматов заключается в следующем. Разобьем образец на совокупность одинаковых клеток, одинаковым образом соединенных между собой. Все клетки образуют, так называемую, решетку клеточного автомата. Решетки могут быть разной размерности (одно-, двух- или трехмерный массив) в зависимости от размерности моделируемой системы.

В случаях моделирования сложных явлений, сопровождающихся фазовыми переходами или другими преобразованиями, содержимое ячеек клеточно-автоматного поля может представлять собой отдельный линейный массив некоторых характеристик, ячейки которого, в свою очередь, кроме температуры (для моделирования теплопроводности) и концентрации (для процессов диффузии), могут содержать ряд других параметров, например, индекс состояния вещества, внутреннюю энергию и тому подобное.

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, например: 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.

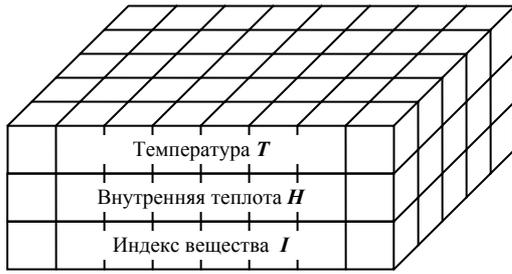


Рис. 1 – Структура клеточно-автоматного поля для двухмерной модели

Клеточные автоматы можно реализовать разными способами. В настоящей работе используется асинхронная схема 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.

3. Происходит клеточно-автоматное взаимодействие между двумя клетками.

Описанный метод непрерывных асинхронных клеточных автоматов может быть применен для решения задач теплопроводности. В частности это показано в работе [6].

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

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

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

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

где $i=1, 2$ – 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 [7], 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).

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ИХ АНАЛИЗ

Для подтверждения целесообразности моделирования процессов теплопроводности методом клеточных автоматов необходимо определить параметры, от которых зависит точность аппроксимации и их влияние на нее.

Для простоты рассмотрим одномерный однородный образец [7]. При этом коэффициент температуропроводности примем равным константе. В этом случае уравнение (1) примет вид:

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2}, \quad a = \frac{k}{c\rho}. \quad (5)$$

Из решения уравнения теплопроводности (5), на участке вещества длиной d выплывает некоторая величина – характерное время установления температуры в системе:

$$t_{счм} = \frac{d^2}{a}. \quad (6)$$

Попробуем оценить время одного клеточно-автоматного взаимодействия для описанного выше асинхронного подхода. Примем $d=1$, $a=1$. Тогда характерный размер одной клетки $d \sim 1/N$, где N – количество ячеек клеточно-автоматного поля. С другой стороны, вероятность выбора клетки для осуществления

акта взаимодействия также равняется $1/N$. То есть, для обеспечения выбора заданной клетки следует осуществить в среднем N выборов из общей совокупности. По аналогии с процессом массопереноса при диффузии, где коэффициент диффузии прямопропорционален количеству элементарных актов массопереноса на единицу времени, получим $a \sim N$. Учитывая формулу (6), получим:

$$t_{1KA} \sim \frac{1}{N^3}. \quad (7)$$

Подтвердить утверждение (7) можно при помощи вычислительного эксперимента, который заключается в сравнении клеточно-автоматной динамики при разном количестве ячеек клеточно-автоматного поля с конкретным решением уравнения (5). На основе данного эксперимента было построено семейство распределений температуры $T(x,t)$ в диапазоне $x \in [0,1]$ в разные моменты времени. Параллельно с расчетами проводилось клеточно-автоматное моделирование процесса теплопереноса. В случаях максимального подобия, которое анализировалось методом наименьших квадратов на наборе контрольных точек, фиксировалось количество клеточно-автоматных взаимодействий.

Анализируя результаты вычислительного эксперимента можно подтвердить справедливость зависимости (7), а также получить коэффициент пропорциональности.

Таким образом, время одного клеточно-автоматного взаимодействия для описанного метода составляет

– для одномерной модели, поле которой имеет N_x клеток:

$$t_{1KA} = \frac{d_x^2}{a_{\max}} \frac{1}{2N_x^3}, \quad (8)$$

– для двухмерной модели с размерностью $N_x \times N_y$:

$$t_{1KA} = \frac{d_x^2}{a_{\max}} \frac{1}{4N_x^3 N_y} = \frac{d_y^2}{a_{\max}} \frac{1}{4N_y^3 N_x}, \quad (9)$$

– для трехмерной модели ($N_x \times N_y \times N_z$):

$$t_{1KA} = \frac{d_x^2}{a_{\max}} \frac{1}{6N_x^3 N_y N_z} = \frac{d_y^2}{a_{\max}} \frac{1}{6N_y^3 N_x N_z} = \frac{d_z^2}{a_{\max}} \frac{1}{6N_z^3 N_y N_x}, \quad (10)$$

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

На рисунке 2 показана высокая степень совпадения решений, что подтверждает адекватность использования клеточно-автоматного подхода для аппроксимации решения нестационарного уравнения теплопроводности.

Из вышеизложенного можно сделать вывод о том, что для обеспечения адекватности процесса моделирования размерность клеточно-автоматного поля должна быть как можно большей. С другой стороны, это обязательно приведет к долговременному процессу моделирования. Следовательно, для решения этой проблемы нужен поиск компромисса между точностью решения и временем, необходимым для его получения. С этим недостатком предложенного метода можно справиться, используя параллельные вычисления [8], так как их принципы применимы к клеточным автоматам и позволяют существенно увеличить размеры модели.

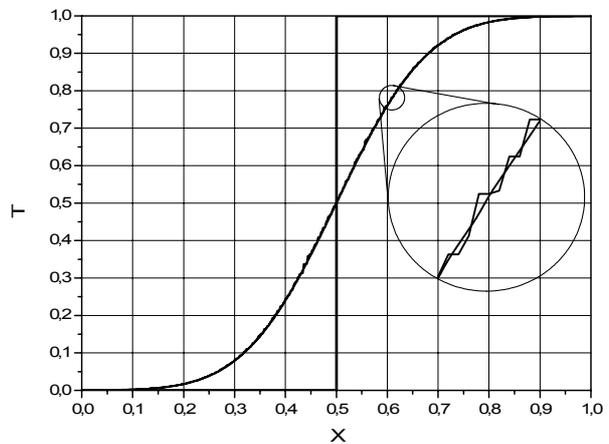


Рис. 2 – Распределение температуры в образце в момент времени $t = 0,01$ с ($N = 500$). Гладкая линия – решение по формуле (5), ломаная – клеточно-автоматное решение

Проводя аналогию КА-метода с методом Монте-Карло, нетрудно заметить похожую зависимость – чем больше время вычислений, тем точнее результат. При этом, как и в случае предложенной асинхронной вероятностной схемы выборки клеточных автоматов, в методе Монте-Карло тоже имеет место применение вероятностных механизмов. Но в отличие от метода Монте-Карло решения уравнений, метод

клеточных автоматов – это метод имитационного моделирования и с его помощью можно моделировать системы, которые невозможно описать в терминах теории дифференциальных уравнений [1].

Дальнейшее усовершенствование предложенного клеточно-автоматного метода приводит к необходимости учета процессов теплопроводности, сопровождающихся фазовыми переходами первого рода.

Рассмотрим нестационарную задачу процесса теплопроводности с фазовым переходом первого рода, то есть задачу Стефана на примере процессов плавление или кристаллизация. При этом следует учитывать скрытую теплоту плавления материала.

Классическим примером задачи теплопроводности с подвижной границей раздела фаз может служить промерзание влажного грунта [9, 10].

Пусть влажный грунт находится в талом состоянии. В начальный момент $t = 0$ с он имеет равномерную температуру $T = 20^\circ\text{C}$. Также на поверхности почвы в начальный момент времени мгновенно устанавливается температура ниже температуры замерзания $T = -5^\circ\text{C}$. В результате будет наблюдаться промерзание. Образующийся промерзший слой будет иметь переменную толщину $\xi = f(t)$. Его подвижная граница всегда имеет температуру замерзания. 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 замерзания, а тепловые условия на границе $x = L$ примем адиабатическими. Коэффициенты переноса мерзлой и талой зон разные. 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 ($N_x = 500$), 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 рис. 3. В пределах погрешности клеточно-автоматного “шума” [7] модели различной размерности совпадают между собой и с соответствующими результатами численного решения уравнений (1)–(3) для заданной задачи промерзания влажного грунта [9, 10].

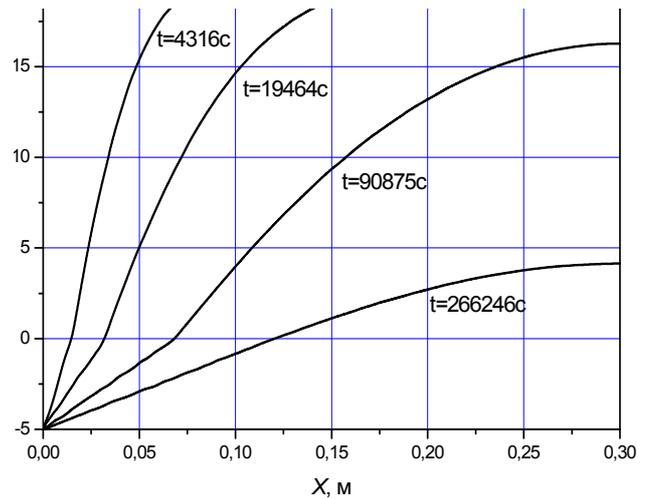


Рис. 3 – Распределения температуры по глубине почвы

Другим примером задачи Стефана является процесс зонного выращивания материалов. Смоделируем данный процесс на примере теллурида висмута (Bi_2Te_3) [11].

Метод зонной плавки заключается в перемещении узкой расплавленной зоны вдоль твердого стержня из выращиваемого материала. При этом на одной поверхности раздела твердой и жидкой фаз (фронте кристаллизации) происходит кристаллизация материала, а на другой (фронте плавления) – подпитка зоны материалом.

На практике зонное выращивание материалов зачастую происходит в кварцевых ампулах цилиндрической формы. Для реализации клеточно-автоматной модели процесса выращивания учет цилиндрической симметрии системы оказывается весьма продуктивным, так как дает возможность свести трехмерную модель к двумерной, что сократит вычислительное время при постоянстве остальных параметров модели.

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

Проиллюстрируем процесс перехода от двумерной модели к одномерной схематично преобразованием круга в набор из множества секторов:

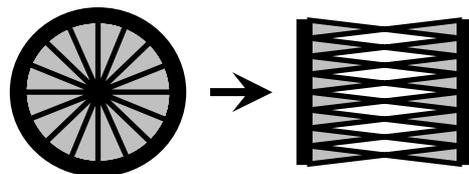


Рис. 4 – Схематическое изображение преобразования круга в набор из множества секторов

Систему, изображенную на рис. 4 справа, можно рассматривать как одномерный образец, в крайних точках которого теплоемкость (или плотность) в πR раз больше, чем в центре. πR – половина длины окружности радиусом R .

С учетом этой особенности выражение для “веса коэффициента” системы (4) приобретает множитель $(1 + \pi R)$. И так, 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 -той клетки.

Важно отметить, что параметры a_{cp} , a_{max} , t_{1KA} , $H_{пл}$ не зависят от множителя $(1 + \pi R)$. И это верно, поскольку тепловые параметры материала не изменяются. А 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. На рис. 5 очевидны существенные расхождения распределений температуры для бруска и цилиндра в различные моменты времени. Но при учете множителя $(1 + \pi R)$ температурные распределения для бруска полностью совпадут с соответствующими результатами для цилиндра!

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

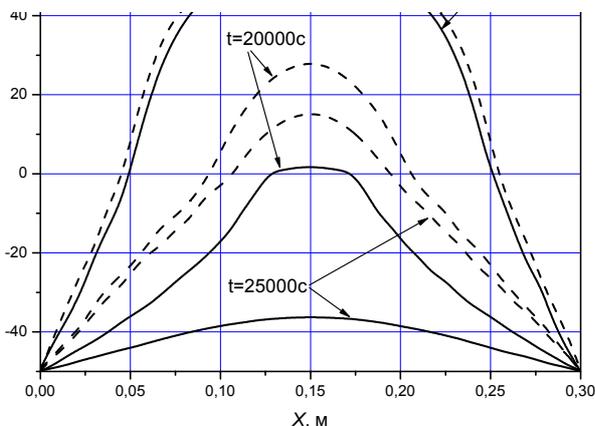


Рис. 5 – Распределения температуры вдоль диагонали сечения цилиндра (сплошные линии) и вдоль сечения квадратного бруска (пунктирные линии)

На рис. 6 изображен пример моделирования процесса зонного выращивания Bi_2Te_3 . Параметры процесса следующие: температура нагревателя – $840^\circ C$, температура холодильников – $30^\circ C$, 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.

Путем изменения параметров процесса зонного выращивания Bi_2Te_3 можно добиться различных форм фронта кристаллизации – выпуклых в сторону расплава, вогнутых или плоских. Особый интерес с технологической точки зрения, представляет формирование плоского фронта кристаллизации. При данной форме фронта кристаллизации обеспечивается равномерность физических параметров вдоль поперечного сечения слитков. Равенство реальных и модельных параметров выращивания, при которых имеет место плоский фронт кристаллизации [11] демонстрирует адекватность описанного клеточно-автоматного подхода.

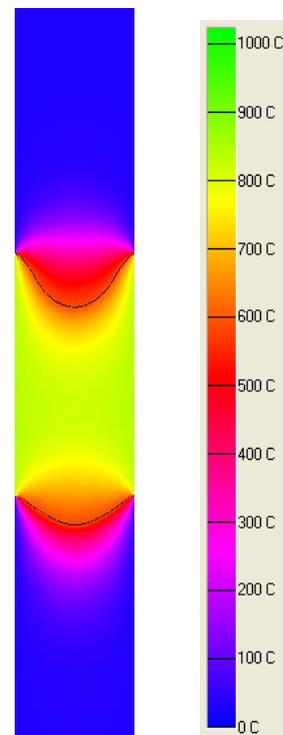


Рис. 6 – Пример моделирования процесса зонного выращивания Bi_2Te_3

4. ВЫВОДЫ

В данной работе показано, что выбор количества клеточных автоматов определяет

точность моделирования, а так же влияет (в степенной зависимости) на время расчетов. Причём, например, зависимость для одномерного случая кубическая, а для многомерных случаев степень ещё выше. Поэтому размерность КА поля следует выбирать из соотношения “количество: качество”.

Также была представлена модель клеточных автоматов, описывающая процессы теплопроводности, сопровождающиеся фазовыми переходами первого рода. Были получены и эмпирически подтверждены параметры, обеспечивающие плоский фронт кристаллизации при зонном выращивании полупроводниковых материалов, а также распределение температуры по глубине почвы в различные моменты времени для задачи промерзания влажного грунта.

Важно отметить, что предложенный метод является достойной альтернативой ранее известным численным методам решения задач Стефана и есть перспективным из-за своей универсальности и простоты. В дальнейшем возможно применение метода непрерывных клеточных автоматов для учета зависимости температуры фазового перехода от состава и моделирование неустойчивости фронта кристаллизации.

5. СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] O.L. Bandman, Cellular automata models of spatial dynamics, *System Informatics*, (10) (2005), pp. 57-113. (in Russian)
- [2] V.K. Vanag, Study of spatially extended dynamical systems using probabilistic cellular automaton, *Physical sciences progress*, (169) 5 (1999), pp. 481-505. (in Russian)
- [3] G.G. Malinetskiy, M.E. Stepantsov, Simulation of diffusion processes cellular automata with Margolus neighbourhood, *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, (36) 6 (1998), pp. 1017-1021. (in Russian)
- [4] S. Bobkov, Y.V. Voytko, Usage of cellular automata to model the nonlinear heat conduction problems, *Chemistry and Chemical Engineering*, (52) 11 (2009), pp. 126-128. (in Russian)
- [5] N.I. Limanova, E. Mamzin, S. Matveev, Modelling of heat transfer, *Bulletin of the Samara State Aerospace University*, (3) 19 (2009), pp. 265-269. (in Russian)
- [6] V.V. Zhikharevich, S.E. Ostapov, Simulation

of self-organization and evolution of systems by continuous asynchronous cellular automata, *Computing*, (8) 3 (2009), pp. 61-71. (in Russian)

- [7] V.V. Zhikharevich, L.M. Shumilyak, Approximation of the solution of the non-stationary equation of heat conductivity by the method of probabilistic continuous asynchronous cellular automats for a one-dimensional, *Computer studies and modeling*, (4) 2 (2012), pp. 293-301. (in Russian)
- [8] O.L. Bandman, Parallel implementation of cellular automata algorithms for simulation of spatial dynamics, *Sib. Journal. calculated. Math.*, (10) 4 (2007), pp. 335-348. (in Russian)
- [9] G.V. Kuznetsov, M.A. Sheremet, *Difference Methods for Solving of Heat Conduction: the Manual*, Tomsk: TPU, 2007, 172 p. (in Russian)
- [10] E.A. Arinshtein, Damp ground freezing, *Bulletin of the Tyumen State University*, (6) (2010), pp. 11-14. (in Russian)
- [11] L.T. Strutinskaya, V.V. Zhikharevich, Modeling of thermoelectric materials based on Vi_2Te_3 by vertical zone melting, *Thermoelectrics*, (2) (2012), pp. 79-87. (in Russian)



Владимир Викторович Жихаревич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры информационных систем Черновицкого факультета НТУ “ХПИ”.

Научные интересы: клеточно-автоматное моделирование, прикладные вопросы теории клеточных автоматов, теория самоорганизации систем (синергетика).



Лилия Михайловна Шумиляк, магистр физической и биомедицинской электроники, ассистент кафедры информационных систем Черновицкого факультета НТУ “ХПИ”.

Научные интересы: клеточно-автоматное моделирование.

USE OF CONTINUOUS CELLULAR AUTOMATA FOR SIMULATION OF THERMAL CONDUCTIVITY IN SYSTEMS WITH FIRST ORDER PHASE TRANSITION

Vladimir Zhikharevich, Liliya Shumylyak

Chernivtsi Faculty of National Technical University
 “Kharkiv Polytechnic Institute”,
 Golovna Str., 203a, Chernivtsi, 58032, Ukraine
 vzhikhar@mail.ru, nizhnik@mail.ru

Abstract: This paper is devoted to the use of cellular automata model for the study of some underlying physical processes. The basic approach and general methodology for the development of cellular automata models are examined through the example of heat transfer processes. It is shown that these models can be an alternative to the use of classical differential equations. It is proven that the model as a system of cellular automata is a good tool for the study of nonlinear problems of heat transfer and can describe a very complex behaviour of a system, despite the simplicity of its description.

Keywords: first order phase transition, cellular automata, thermal conductivity.

1. INTRODUCTION

The description of systems with complex boundary conditions or phase transition is difficult in many cases. This is due to the fact that a numerical solution of this problem is quite difficult to obtain because of the large number of calculations.

An example is the problem of describing such complex phenomena as evolution and self-organization, diffusion and thermal conductivity. Let us consider the last process, complicating by first order phase transition. This task belongs to the class of so-called Stefan problems.

2. DESCRIPTION OF CELLULAR AUTOMATA MODEL

A characteristic feature of these processes, due to which their mathematical models are nonlinear and difficult to solve, is the moving in time phase boundary, so that a number of different models studied analytically is very limited.

The essence of simulation of processes of thermal conductivity by cellular automata is to present a model as a set (array) of the same cells connected to each other the same way. All cells form a so-called lattice cellular automaton. In turn, the contents of cells-automatic field may be a single linear array of certain characteristics. This can be illustrated as

follows (fig. 1):

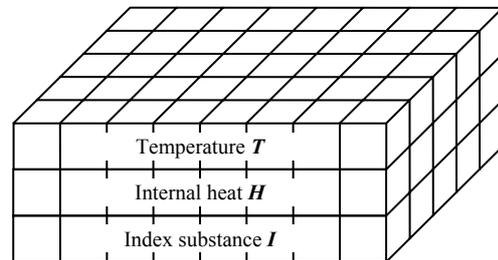


Fig. 1 - Structure of the cellular automaton field for a two-dimensional model

In this paper we use asynchronous scheme of interactions of cellular automata, providing cyclic execution of three typical steps:

1. Some cell $i = 1$ with integer coordinates x^1, y^1 is selected randomly on a cellular automata field.
2. A neighbouring cell $i = 2$ with integer coordinates x^2, y^2 is selected in an equiprobable way. The Neumann neighbourhood is accepted as a neighbourhood scheme in this case, i.e. a cell has only four neighbours.
3. A cellular automata interaction between the two cells takes place.

The parameters of the approximation accuracy were defined to demonstrate the appropriateness of thermal conductivity processes simulation by the selected method

It turned out that the computation time depends

on the number of cellular automata. And the accuracy is directly dependent on the dimension of a CA field. The paper shows that the time of one CA interaction is defined as follows (for the three-dimensional model with the dimension $N_x \times N_y \times N_z$):

$$t_{1KA} = \frac{d_x^2}{a_{\max}} \frac{1}{6N_x^3 N_y N_z} =$$

$$= \frac{d_y^2}{a_{\max}} \frac{1}{6N_y^3 N_x N_z} = \frac{d_z^2}{a_{\max}} \frac{1}{6N_z^3 N_y N_x},$$

where a - thermal diffusivity, d_x , d_y and d_z - size of the sample along the coordinates x , y and z , respectively. Lets proceed to consider a non-stationary task of the process of thermal conductivity with first order phase transition – freezing of moist soil, calculations of temperature distributions in the depth of the soil were performed at various time points ($t = 4316$ s, $t = 19\ 464$ s, $t = 90\ 875$ s, $t = 266246$ s), using the cellular-automata approach. The results of calculations for one-dimensional ($N_x = 500$), two-dimensional ($N_x \times N_y = 500 \times 100$) and three-dimensional ($N_x \times N_y \times N_z = 500 \times 10 \times 10$) CA models along the x axis are shown in Fig. 3. Models of different dimensions agree with one another and with the corresponding results of numerical solutions of equations (1)-(3) for a given problem of freezing of moist soil.

Another example of the Stefan problem was examined in this paper. The process of zone growing of materials was modelled on the example of bismuth telluride (Bi_2Te_3). In practice, zoned growing of materials often occurs in cylindrical form quartz ampoules. For realization of cellular automaton model of the growth process, the cylindrical symmetry of the system (by including the multiplier $(1 + \pi R)$) was taken into account, which made it possible to reduce a three-dimensional model to a two-dimensional one and by that reduce the computing time with other parameters of the model being constant (Fig. 4). Parameters that provide a flat crystallization front have also been obtained and empirically confirmed. Their receipt ensured uniformity of physical parameters along the cross-section of the ingots.

As a conclusion, we note that the proposed method can be a worthy alternative to the previously known classical methods of Stefan problems solving and has prospects due to its versatility and simplicity. It implies that the method of continuous cellular automata can be used for description of dependence of the phase transition temperature on composition

and modeling of instability of crystallization front.

6. REFERENCES

- [1] O.L. Bandman, Cellular automata models of spatial dynamics, *System Informatics*, (10) (2005), pp. 57-113. (in Russian)
- [2] V.K. Vanag, Study of spatially extended dynamical systems using probabilistic cellular automaton, *Physical sciences progress*, (169) 5 (1999), pp. 481-505. (in Russian)
- [3] G.G. Malinetskij, M.E. Stepanov, Simulation of diffusion processes cellular automata with Margolus neighbourhood, *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, (36) 6 (1998), pp. 1017-1021. (in Russian)
- [4] S. Bobkov, Y.V. Voytko, Usage of cellular automata to model the nonlinear heat conduction problems, *Chemistry and Chemical Engineering*, (52) 11 (2009), pp. 126-128. (in Russian)
- [5] N.I. Limanova, E. Mamzin, S. Matveev, Modelling of heat transfer, *Bulletin of the Samara State Aerospace University*, (3) 19 (2009), pp. 265-269. (in Russian)
- [6] V.V. Zhikharevich, S.E. Ostapov, Simulation of self-organization and evolution of systems by continuous asynchronous cellular automata, *Computing*, (8) 3 (2009), pp. 61-71. (in Russian)
- [7] V.V. Zhikharevich, L.M. Shumilyak, Approximation of the solution of the non-stationary equation of heat conductivity by the method of probabilistic continuous asynchronous cellular automats for a one-dimensional, *Computer studies and modeling*, (4) 2 (2012), pp. 293-301. (in Russian)
- [8] O.L. Bandman, Parallel implementation of cellular automata algorithms for simulation of spatial dynamics, *Sib. Journal. calculated. Math.*, (10) 4 (2007), pp. 335-348. (in Russian)
- [9] G.V. Kuznetsov, M.A. Sheremet, *Difference Methods for Solving of Heat Conduction: the Manual*, Tomsk: TPU, 2007, 172 p. (in Russian)
- [10] E.A. Arinshtein, Damp ground freezing, *Bulletin of the Tyumen State University*, (6) (2010), pp. 11-14. (in Russian)
- [11] L.T. Strutinskaya, V.V. Zhikharevich, Modeling of thermoelectric materials based on V_2Te_3 by vertical zone melting, *Thermoelectrics*, (2) (2012), pp. 79-87. (in Russian)