

ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДУ РУХОМИХ КЛІТИННИХ АВТОМАТІВ ПРИ МОДЕЛЮВАННІ ПРОЦЕСІВ РОСТУ КРИСТАЛІВ

Жихаревич В.В., Шумиляк Л.М.

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, м. Чернівці

В області технології отримання кристалів з розплавів досить активно використовуються різноманітні методи моделювання. Здебільшого ці методи передбачають врахування макропараметрів модельованих процесів. З іншого боку, при моделюванні росту кристалів природним було б врахувати особливості міжмолекулярних взаємодій. Такий підхід дав би можливість зокрема передбачати формування кристалічних площин залежно від орієнтації зародків у просторі, а також утворення дефектів різних типів (вакансії, заміщення, дислокації тощо). Крім того, в умовах концентраційного переохолодження та анізотропії росту, можна було б спостерігати формування дендритних кристалів.

Якщо для моделювання подібних процесів використовувати класичні клітинні автомати, то виникає необхідність представляти їх структуру у вигляді деякого зв'язаного списку дискретних елементів, що характеризуються координатами у просторі та особливостями взаємодії зі своїми сусідами. З іншого боку, власне самі ці елементи можна представити у вигляді окремих автоматів. Такий метод отримав назву *рухомих клітинних автоматів* – *Movable Cellular Automata* (MCA).

В даній роботі ми використали гібридний підхід щодо моделювання процесів росту кристалів з розплавів. Суть гібридизації полягала у суміщенні двох методів. Локальні мікрофрагменти речовини описувалися в термінах методу MCA, зокрема відображали координати центрів кристалізації, їх орієнтацію та геометрію міжмолекулярних взаємодій (кристалографію). Процеси ж теплопровідності, дифузії та сегрегації домішки описувалися в термінах розробленої нами моделі неперервних клітинних автоматів [1]. При цьому, в загальному випадку, клітинне поле є неоднорідним, що обумовило модифікацію процедури ідентифікації параметрів міжавтоматних взаємодій. Запропонований підхід продемонстрував адекватні результати на прикладах формування фракталоподібних дендритних кристалів під час росту [2].

Література:

1. Жихаревич В.В. Построение и исследование непрерывной клеточно-автоматной модели процессов теплопроводности с фазовыми переходами первого рода / В.В. Жихаревич, Л.М. Шумиляк, Л.Т. Струтинская, С.Э. Остапов // Компьютерные исследования и моделирование. – 2013. – Т. 5. – №.2. – С. 141-152.
2. Тарабаев Л.П. Физика кристаллизации. / Л.П. Тарабаев, В.О. Есин // К столетию Г.Г. Леммлейна. Сб. статей. – М.: Физматлит, 2002. – 285 с.