

Л.М. Шумиляк, В.В. Жихаревич, С.Е. Остапов

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, Чернівці

ДОСЛІДЖЕННЯ МЕТОДУ АСИНХРОННИХ КЛІТИННИХ АВТОМАТІВ ПРИ ЗАСТОСУВАННІ В ЗАДАЧАХ ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ

Робота присвячена питанням використання клітинно-автоматної моделі для дослідження деяких базових фізичних процесів. На прикладі моделювання процесів переносу тепла розглянуті основні підходи і загальна методологія розробки клітинно-автоматних моделей. Показано, що дані моделі можуть стати альтернативою використанню класичних диференціальних рівнянь. Доведено, що модель у вигляді системи клітинних автоматів є досить зручним інструментальним засобом для дослідження нелінійних задач теплопереносу і може описувати досить складну поведінку системи, незважаючи на простоту її опису. Розглянуто типові задачі теорії теплопровідності та їх розв'язки методом клітинних автоматів. Здійснено аналіз точності обчислень КА-методом. Проведене порівняння швидкості обчислень для задачі Стефана за допомогою КА-методу та відомих сіткових методів.

Ключові слова: фазовий перехід, клітинний автомат, теплопровідність.

Вступ

На основі уявлень сучасної фізики, явища природи взагалі і теплопровідності зокрема, можливо описати і дослідити на основі феноменологічного та статистичного методів. Феноменологічний метод опису процесу ігнорує мікроскопічну структуру речовини і розглядає її як суцільне середовище (континуум). Він дає можливість встановити деякі загальні співвідношення між параметрами, що характеризують досліджуване явище в цілому.

Інший шлях вивчення фізичних явищ базується на дослідженні внутрішньої структури речовини. Середовище розглядається як деяка фізична система, що складається з великої кількості мікрочастинок з заданими властивостями та законами їх взаємодії. Одержання макроскопічних характеристик по заданим мікроскопічним властивостям середовища складає основну задачу статистичного методу.

Вивчення будь-якого фізичного явища зводиться до встановлення залежності між величинами, що характеризують це явище. Для складних фізичних процесів, в яких основні величини можуть суттєво змінюватись в просторі і часі, встановити залежність між цими величинами дуже складно. В цих випадках в нагоді стає метод математичної фізики, який виходить з того, що обмежується проміжок часу і з усього простору розглядається лише елементарний об'єм. Це дозволяє в межах елементарного об'єму та вибраного малого інтервалу часу, знехтувати зміною деяких величин, що характеризують процес і суттєво спростити залежність між величинами.

Постановка задачі. Чисельний розв'язок рівняння теплопровідності є темою для багатьох наукових праць. В Еймс [1], К Мортон, Д. Купер [2] і Маєрс [3] пропонують математичне представлення

різницевих скінченних методів. Купер [2] застосовує впровадження сучасних технологій до розвитку теорії диференціальних рівнянь. Теоретичне дослідження процесів теплообміну в даний час значною мірою базується на їх чисельному моделюванні з використанням ЕОМ [4].

Таким чином, розвиток чисельних методів диференціальних рівнянь знаходиться на високому рівні, але вибір їх різновидів для апроксимації того чи іншого фізичного процесу є неоднозначним [5]. Крім того, необхідний аналіз стійкості і збіжності отриманого розв'язку може призвести до вимушеної зміни схеми чисельного розв'язку і повторного проведення розрахунків. А складні граничні умови, які часто зустрічаються при описі реальності, надають і без того громіздким розрахункам додаткової складності. Тому є актуальним саме пошук таких моделей, які не являються спрощеним розв'язком диференціальних рівнянь, а є їх альтернативою. Таким методом є метод клітинних автоматів (КА) [6]. Метою статті є визначення можливостей застосування клітинно-автоматного підходу в задачах теплопровідності, а також оцінка точності та швидкості обчислень при застосуванні побудованої КА-моделі.

Огляд літератури. Великий внесок у розвиток методу КА був зроблений С. Вольфрамом. В [7] він широко аргументує, що досягнення в області клітинних автоматів не є ізольованими, але досить стійкі і мають велике значення для всіх галузей науки. Ним було запропоновано 4 класи, на які можуть бути розділені всі клітинні автомати в залежності від типу їх еволюції. Такого роду визначення носять здебільшого якісний характер і їх можна по-різному інтерпретувати. Щодо тематики моделювання фазотворення за допомогою клітинних автоматів, мож-

на відзначити роботу [8], де наведені результати моделювання руху границь зерен, обумовленого мінімізацією збереженого обсягу енергії або ж кривизною. Також тут представлений приклад гібридної моделі, яка поєднує клітинні автомати з обчислювальним описом дифузії і розчинення осаду при аномальному зростанні зерен. Крім того, можна відзначити роботу [9], де з використанням клітинно-автоматної моделі проводяться розрахунки фазового перетворення аустеніт-ферит у сталях. Дослідники описують правила переходу для початку та подальшого зростання, з урахуванням внутрішніх змінних для кожної КА комірки. Була представлена якісна модель фазового переходу в рамках розвинених клітинних автоматів і зроблений аналіз чутливості моделі фазового перетворення аустеніту в ферит у мікро масштабі. Можливість опису за допомогою клітинних автоматів складних явищ і процесів дозволяє змодельовати не лише сам фазовий перехід в процесі кристалізації, а й ускладнити таку модель наявністю виникаючого при цьому концентраційного переохолодження, що не було змодельоване в попередніх роботах.

Опис КА моделі

Клітинні автомати є дискретними динамічними системами. КА використовує множини змінних, які взаємодіють тільки локально і одноманітно. Вони відносяться до моделей, які явно зводять макроскопічні явища до точно визначених мікроскопічних процесів. Кожна комірка клітинно-автоматного поля містить значення декількох характеристик речовини. Для нашого випадку це температура клітини T ; концентрація домішки C ; внутрішня теплота H , яка враховується при моделюванні фазових переходів та визначає відношення концентрації домішки у рідкій та твердій фазах. Стан клітини (значення характеристик) змінюється в залежності від стану сусідніх комірок.

Процес моделювання асинхронним КА-методом являє собою ітераційний цикл клітинно-автоматних взаємодій. При цьому ми використовуємо асинхронну схему взаємодій клітинних автоматів. Дана схема передбачає циклічне виконання трьох типових кроків [10]:

1. На клітинно-автоматному полі випадковим чином вибирається деяка клітина $i=1$ з цілочисельними координатами x^1, y^1, z^1 . При цьому всі клітини є рівноймовірними щодо їх вибору.

2. Випадковим рівноймовірним чином вибирається деяка сусідня клітка $i=2$ з цілочисельними координатами x^2, y^2, z^2 . В якості схеми сусідства прийнято окіл Неймана, тобто для двовимірного випадку у клітини є тільки чотири сусіда.

3. Відбувається клітинно-автоматна взаємодія між двома клітинами.

Аналіз отриманих результатів

Клітинно-автоматна взаємодія між 2 клітинами відбувається згідно системи рівнянь (1), що описують процес теплопровідності. Система ітераційних рівнянь отримана шляхом декомпозиції великої досліджуваної системи на маленькі частинки (співрозмірні з клітинами КА). Таким чином, в результаті масових взаємодій маленьких частинок вся система прямує до стану рівноваги.

$$\left\{ \begin{array}{l} T^{i'} = T^i + (T_{\text{сеп}} - T^i) A_{\text{сеп}} / M_{\text{max}}; \\ C^{i'} = C^i + (C_{\text{сеп}} - C^i) D_{\text{сеп}} / M_{\text{max}}; \\ \text{якщо } (T^{i'} > T_{\text{пл}}^i) \text{ та } (H^i < H_{\text{пл}}), \\ \text{тоді: } \{ H^{i'} = H^i + \Delta H^i; T^{i'} = T_{\text{пл}}^i \}; \\ \text{якщо } (H^i > H_{\text{пл}}), \\ \text{тоді: } \{ T^{i'} = T_{\text{пл}}^i + (H^i - H_{\text{пл}}) / q_L^i; H^{i'} = H_{\text{пл}} \}; \\ \text{якщо } (T^{i'} < T_{\text{пл}}^i) \text{ та } (H^i > 0), \\ \text{тоді: } \{ H^{i'} = H^i + \Delta H^i; T^{i'} = T_{\text{пл}}^i \}; \\ \text{якщо } (H^{i'} < 0), \\ \text{тоді: } \{ T^{i'} = T_{\text{пл}}^i + H^{i'} / q_S^i; H^{i'} = 0 \}; \\ H^{i'} = H^i + Z \Delta H^i D_{\text{сеп}} / M_{\text{max}}; \\ H^{(3-i)'} = H^{(3-i)} + Z \Delta H^i D_{\text{сеп}} / M_{\text{max}}; \end{array} \right. \quad (1)$$

$$T_{\text{сеп}} = \frac{w^1 T^1 + w^2 T^2}{w^1 + w^2};$$

$$w^i = \rho_L^i q_L^i \frac{H^i}{H_{\text{пл}}} + \rho_S^i q_S^i \left(1 - \frac{H^i}{H_{\text{пл}}} \right);$$

$$C_{\text{сеп}} = C_L \frac{H^i}{H_{\text{пл}}} + C_S \left(1 - \frac{H^i}{H_{\text{пл}}} \right); \quad C_L = \frac{C}{P_L + K_0 P_S};$$

$$C_S = K_0 C_L; \quad P_L = \frac{H^1 + H^2}{H_{\text{пл}}}; \quad P_S = 2 - P_L;$$

$$T_{\text{пл}}^i = T_L(C^i) \frac{H^i}{H_{\text{пл}}} + T_S(C^i) \left(1 - \frac{H^i}{H_{\text{пл}}} \right);$$

$$T_S(C) = T_{\text{пл}}(0) + \text{tg}(\alpha) C;$$

$$T_L(C) = T_{\text{пл}}(0) + \text{tg}(\alpha) C K_0;$$

$$C = C^1 + C^2; \quad A_{\text{сеп}} = \frac{A^1 + A^2}{2};$$

$$A^i = \frac{\eta_L^i}{\rho_L^i q_L^i} \frac{H^i}{H_{\text{пл}}} + \frac{\eta_S^i}{\rho_S^i q_S^i} \left(1 - \frac{H^i}{H_{\text{пл}}} \right); \quad \Delta H^i = H_{\text{пл}} \frac{\Delta T^i}{\Delta T_{\text{пл}}^i};$$

$$\Delta T^i = T^i - T_{\text{пл}}^i; \quad D_{\text{сеп}} = \frac{D^1 + D^2}{2};$$

$$D^i = D_L^i \frac{H^i}{H_{пл}} + D_S^i \left(1 - \frac{H^i}{H_{пл}} \right);$$

$$\Delta T_{пл}^i = \frac{H_{пл}}{q_{сер}^i} + T_L(C^i) - T_S(C^i); q_{сер}^i = \frac{q_L^i + q_S^i}{2};$$

$$M_{max} = \max(A_{max}, D_{max});$$

$$Z = \text{sign}(1 - K_0) \cdot \text{sign}(C^i - C^{(3-i)}).$$

Тут $i=1, 2$ – значення індексу, що відповідає вибраній та сусідній клітині відповідно; T – температура; A – коефіцієнт температуропровідності; η – коефіцієнт теплопровідності; q – питома теплоємність; ρ – питома густина; C – концентрація домішки; D – коефіцієнт дифузії домішки; нижніми індексами S та L позначено відповідні параметри для твердої та рідкої фаз; $H_{пл}$ – прихована теплота плавлення; $T_{пл}(0)$ – температура плавлення при нульовій концентрації домішки; K_0 – рівноважний коефіцієнт сегрегації домішки; $\text{tg}(\alpha)$ – тангенс кута нахилу концентраційної залежності температури плавлення (крива *Solidus*).

Для організації кількісних обчислень необхідно дати відповідь на питання, скільки слід провести клітинно-автоматних взаємодій, щоб отриманий температурний розподіл можна було б вважати розв'язком задачі в момент часу t . Тому отримано залежність між часом однієї клітинно-автоматної взаємодії та розмірністю клітинно-автоматного поля [10]:

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

де $t_{КА}$ – час однієї клітинно-автоматної взаємодії; N_x, N_y, N_z – розмірність клітинно-автоматного поля вздовж координати x, y та z відповідно; d_x, d_y та d_z – розміри зразка вздовж координати x, y та z відповідно.

Розглянемо проблему точності розв'язку задач теплопровідності методом неперервних асинхронних клітинних автоматів. Цілком очевидно, що, як і у випадку будь-яких інших чисельних методів, має місце залежність точності розв'язку від кількості клітин (вузлів), на які ділиться система.

Для дослідження запропонованої КА-моделі (1) оберемо задачу для одновимірного однорідного зразка [10]. При цьому коефіцієнт температуропровідності приймемо рівним константі. Також припустимо, що теплофізичні характеристики не залежать від температури. В такому випадку задача зводиться до розгляду теплопередачі через плоску нескінченну пластину або ізольований стержень.

В результаті порівняння цього КА-методу з відомим аналітичним розв'язком задачі, що розглядається [10], була отримана оцінка точності КА-рішення. Похибка КА-методу обраховувалась відносно точного розв'язку відповідно до формули для середньої абсолютної похибки ξ в процентах (MAPE):

$$\xi = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|Y_i - \tilde{Y}_i|}{Y_i} \cdot 100\%, \quad (3)$$

де Y – точне значення; \tilde{Y} – наближене значення.

Як видно з рис. 1, точність рішення залежить від кількості комірок клітинно-автоматного поля, а для великих розмірностей КА-поля похибка не перевищує декількох процентів.

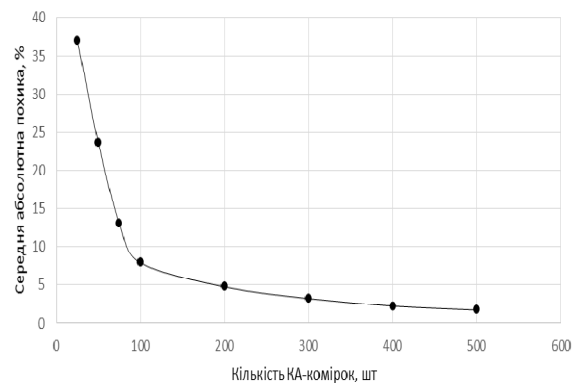


Рис. 1. Залежність похибки КА-обчислень від кількості комірок

Таким чином, кількість комірок КА-поля слід обирати з огляду на досягнення необхідної точності обчислень. Але, виходячи з аналізу рис. 1, збільшення розмірності КА-поля буде сильно впливати на точність лиш при малій кількості комірок. При великій кількості її збільшення має невеликий вплив на точність, але час обчислень значно збільшується.

Для дослідження запропонованої КА-моделі на стійкість та швидкість обчислень, оберемо більш складну задачу: нестационарну задачу теплопровідності із врахуванням фазових переходів першого роду, так звану задачу Стефана. При розгляді таких процесів (плавлення або кристалізація) слід враховувати приховану теплоту плавлення матеріалу [11–14]. Не враховуючи вплив концентрації домішки на температуру фазового переходу ($T_{пл}=\text{const}$), отримаємо спрощену систему (1), в якій перше рівняння досліджено раніше, друге, сьоме, восьме не беремо до уваги, третє та четверте описують процес плавлення, а п'яте і шосте – процес кристалізації. У класичному варіанті задача теплопровідності з рухомою межею розділу фаз – є задача промерзання вологого ґрунту. Для такої задачі теплопровідності було проведено порівняння запропонованого КА-методу з відомими кінцево-різницевиими (К-Р) мето-

дами на предмет стійкості рішення і швидкості проведення розрахунків при однаковій точності рішення при ідентичних системних параметрах, результати якого занесені в таблицю 1. Температурний розподіл визначається для моменту часу $t=1$ с. Час обчислення обирався середнім з 10 експериментів.

Таблиця 1
Порівняння КА-методу та методу кінцевих різниць

Метод	Кількість вузлів/ комірок, шт.	Стійкість	Тривалість обчислення, сек.
КА метод	50*10	+	0,27
К-Р явна схема	50*10	+	0,41
К-Р неявна схема	50*10	+	0,53
КА метод	100*10	+	1,19
К-Р явна схема	100*10	-	-
К-Р неявна схема	100*10	+	2,11
КА метод	500*10	+	129,7
К-Р явна схема	500*10	-	-
К-Р неявна схема	500*10	+	232,3

Порівняльна характеристика отриманих результатів дозволяє зробити висновок: незважаючи на те, що отримана схема запропонованої КА-моделі містить кількість комірок КА-поля рівну кількості

вузлів сітки при кінцево-різницевиx схемах, і температурні поля моделей мають хорошу відповідність, але при цьому швидкість обчислень КА-моделі приблизно у 2 рази більша. Явна кінцево-різницева схема виявилась нестійкою. На відміну від цього, для КА-моделі закон збереження енергії виконується, що забезпечує її абсолютну стійкість. Це дає підстави для проведення комп'ютерних експериментів на розробленій моделі по вирішенню різних задач теплопровідності.

Висновки

У запропонованій роботі використовується метод неперервних клітинних автоматів. Як було показано раніше в [10], розрахувавши час однієї КА взаємодії, можна відобразити не тільки якісну, але і кількісну сторону модельованого процесу. Це дає можливість визначити характеристики процесу в конкретні моменти часу.

Завдяки своїй простоті й універсальності даний метод є гідною альтернативою раніше відомим класичним методам вирішення задач теплопровідності, а швидкість обчислень КА-моделі приблизно у 2 рази більша ніж при використанні сіткових методів. У даній роботі представлено опис і дослідження результати застосування методу асинхронних клітинних автоматів для моделювання процесу теплопровідності.

Список літератури

1. Ames W. Numerical Methods for Partial Differential Equations / W. Ames. – Boston: Academic Press, 1992. – 380 p.
2. Coleman M.P. An Introductin to Partial Differential Equations with Matlab / M.P. Coleman. – Boston: Chapman & Hall/CRC, 2013. – 669 p.
3. Morton K.W. Numerical Solution of Partial Differential Equations: an Introduction / K.W. Morton, D.F. Mayers. – Cambridge: Cambridge University Press, 1994. – 278 p.
4. Колесникова С. Методы решения основных задач уравнений математической физики [уч. пособие] / С. Колесникова. – Москва, Россия: МФТИ, 2015. – 345 с.
5. Аринштейн Э.А., Промерзание влажного грунта / Э.А. Аринштейн // Вестник Тюменского государственного университета. – 2010. – № 6. – С. 11-14.
6. Бандман О.Л. Дискретное моделирование физико-химических процессов / О.Л. Бандман // Прикладная дискретная математика. – 2009. – № 3. – С. 33-49.
7. Wolfram S. A New Kind of Science / S. Wolfram. – Champaign, IL: Wolfram Media, 2002. –458 p.
8. Janssens K.G.F. An introductory review of cellular automata modeling of moving grain boundaries in polycrystalline materials / K.G.F. Janssens // Mathematics and Computers in Simulation. – 2010. – Vol. 80, Issue 7. – P. 1361-1381.
9. Golab R. Sensivity Analysis of the Cellular Automata Model for Austenite-Ferrite Phase Transformation in Steels / R. Golab, D. Bachniak, K. Bzowski, L. Madej // Applied Mathematics. – 2013. – 4. – P. 1531-1536.
10. Жихаревич В. Использование непрерывных клеточных автоматов для моделирования процессов теплопроводности в системах с фазовыми переходами первого рода / В. Жихаревич, Л. Шумиляк // International Journal of Computing. – 2013. – 12. – С. 142-150.
11. Ежовский Ю.К. Физико-химические основы технологии полупроводниковых материалов: учеб. пособие / Ю.К. Ежовский, О.В. Денисова. – СПб.: СЗТУ. – 2005. – 467 с.
12. Burton J.A. The Distribution of Solute in Crystals Growth from the Melt. Part I. Theoretical / J.A. Burton , R.C. Prim, W.P. Slichter // J.Chem. Phys. – 1991. – 21 (11). – P. 254-271.
13. 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. – 5(2). – С. 141-152.
14. Tiller W.A. The redistribution of solute atoms during the solidification of metals / W.A. Tiller, J.W. Rutter, K.A. Jackson, B. Chalmers // Acta Met. – 1953. – 8(4). – 428 p.

References

1. Ames, W. (1992), *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Academic Press, Boston, 380 p.
2. Coleman, M.P. (2013), *An Introduction to Partial Differential Equations with Matlab*, Chapman & Hall / CRC, Boston, 669 p.
3. Morton, K.W. and Mayers, D.F. (1994), *Numerical Solution of Partial Differential Equations: An Introduction*, Cambridge University Press, Cambridge, 278 p.
4. Kolesnikova, S. (2015), “Metody resheniya osnovnykh zadach uravneniy matematicheskoy fiziki: uch. posobie” [Methods for solving the basic problems of equations of mathematical physics], MIPT, Moscow, 345 p.
5. Arinshtein, E.A. (2010), “Promerzanie vlazhnogo grunta” [Freezing of wet soil], *Bulletin of the Tyumen State University*, No. 6, pp. 11-14.
6. Bandman, O.L. (2009), “Diskretnoe modelirovanie fiziko-himicheskikh processov” [Discrete modeling of physical and chemical processes], *Applied Discrete Mathematics*, No. 3, pp. 33-49.
7. Wolfram, S. (2002), *A New Kind of Science*, Wolfram Media, Champaign, IL., 458 p.
8. Janssens, K.G.F. (2010), An introductory review of cellular automata modeling of moving grain boundaries in polycrystalline materials, *Mathematics and Computers in Simulation*, Vol. 80(7), pp. 1361-1381.
9. Golab, R., Bachniak, D., Bzowski, K. and Madej, L. (2013), Sensivity Analysis of the Cellular Automaton Model for Austenite-Ferrite Phase Transformation in Steels, *Applied Mathematics*, No. 4, pp. 1531-1536.
10. Zhikharevich, V. and Shumilyak, L. (2013), “Ispol'zovanie nepreryvnykh kletochnykh avtomatov dlja modelirovaniya processov teploprovodnosti v sistemah s fazovymi perehodami pervogo roda” [The use of continuous cellular automata for modeling thermal conductivity processes in systems with first-order phase transitions], *International Journal of Computing*, No. 12, pp. 142-150.
11. Ezhovsky, Yu.K. and Denisova, O.V. (2005), “Fiziko-himicheskie osnovy tehnologii poluprovodnikovyykh materialov: ucheb. posobie” [Physicochemical basis of semiconductor materials technology], SZTU, St. Petersburg, 467 p.
12. Burton, J.A., Prim, R.C., and Slichter, W.P. (1991), The Distribution of Solute in Crystals Growth from the Melt. Part I. Theoretical, *J. Chem. Phys.*, 21 (11), pp. 254-271.
13. Zhikharevich, V.V., Shumilyak, L.M., Strutinskaya, L.T. and Ostapov, S.E. (2013), “Postroeniye y issledovaniye nepreryvnoi kletochno-avtomatnoi modeli protsessov teploprovodnosti s fazovimi perekhodami pervogo roda” [Construction and investigation of a continuous cellular automaton model of thermal conductivity processes with phase transitions of the first kind], *Computer studies and modeling*, 5 (2), pp.141-152.
14. Tiller, W.A., Rutter, J.W., Jackson, A.A. and Chalmers, B. (1953), The redistribution of solute atoms during the solidification of metals, *Acta Met.*, 8 (4), 428 p.

Надійшла до редколегії 15.01.2018

Схвалена до друку 20.03.2018

Відомості про авторів:**Шумиляк Лілія**

асистент кафедри Чернівецького національного університету ім. Ю. Федьковича,
Чернівці, Україна
<https://orcid.org/0000-0002-6593-7334>
e-mail: lshumilyak@gmail.com

Жихаревич Володимир

кандидат фізико-математичних наук доцент кафедри Чернівецького національного університету ім. Ю. Федьковича,
Чернівці, Україна
<https://orcid.org/0000-0003-4882-2954>
e-mail: vzhikhar81@gmail.com

Остапов Сергій

доктор фізико-математичних наук професор завідувач кафедри Чернівецького національного університету ім. Ю. Федьковича,
Чернівці, Україна
<https://orcid.org/0000-0002-4139-4152>
e-mail: sergey.ostapov@gmail.com

Information about the authors:**Liliya Shumilyak**

Assistant of Department of Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University,
Chernivtsi, Ukraine
<https://orcid.org/0000-0002-6593-7334>
e-mail: lshumilyak@gmail.com

Volodymyr Zhikharevich

Ph.D. Associate Professor of Department of Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University,
Chernivtsi, Ukraine
<https://orcid.org/0000-0003-4882-2954>
e-mail: vzhikhar81@gmail.com

Sergiy Ostapov

Doctor of Physics and Mathematics Sciences Professor Head of Department of Chernivtsi National University,
Chernivtsi, Ukraine
<https://orcid.org/0000-0002-4139-4152>
e-mail: sergey.ostapov@gmail.com

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДА АСИНХРОННЫХ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ В ЗАДАЧАХ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Л.М. Шумиляк, В.В. Жихаревич, С.Э. Остапов

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 достаточно сложное поведение системы, несмотря на простоту ее описания. Рассмотрены типовые задачи теории теплопроводности и их решения методом клеточных автоматов. Осуществлен анализ точности вычислений КА-методом. Проведено сравнение скорости вычислений для задачи Стефана с помощью КА-метода и известных сеточных методов.

Ключевые слова: фазовый переход, клеточный автомат, теплопроводность.

APPLICATION OF THE ASYNCHRONAL CELLULAR AUTOMATA METHOD IN THE HEAT CONDUCTIVITY PROBLEMS INVESTIGATION

L. Shumilyak, V. Zhikharevich, S. Ostapov

It is well known that many physical properties of crystalline materials obtained by the method of directed crystallization are determined by the distribution of impurity in the melt and its ability to accumulate in the form of separate grains, cells etc. This occurs due to concentrated overcooling and leads to deterioration of the mechanical, electrical and physical properties of the material. It is one of the reasons for their fragility. A series of experiments is needed to investigate the optimal conditions for the growth of semiconductor materials with required properties. The time required is not always available, and the labor and material resources cost is rather high. Therefore, in recent years great attention is paid to the development of the technology of process simulation.

The tasks of heterogeneous dynamical systems numerical simulation are very relevant today, since they allow observing the evolutionary patterns of such systems in real-time, especially when it comes to problems with nonlinear parameters of materials, complex boundary and initial conditions, phase transitions with moving limits, etc. In the vast majority of such cases, it is almost impossible to obtain analytical solutions, and classical based on difference schemes solution numerical methods may be unstable. The classical model of physical processes is based on differential equations. But practical application of it does not allow us to receive acceptable results. In real practical tasks it is often used in the simplest cases with a number of limitations and assumptions. In this regard, alternative approaches are increasingly popular in recent years. Widely used imitation or agent models, where each agent can be attributed their own rules of conduct. The method of cellular automata (CA) is one of such simulation approach. It provides not only a description of the physical properties of the material but also can provide for changes at the micro-level. In particular, heat transfer processes are naturally approximated by continuous models of cellular automata. Just creation of a qualitative model of the process, on the basis of computational experiments, allows to predict the properties of the resulting material.

Cellular automata are the most effectively used to describe the behavior of a system the collective behavior of which is determined by the local behavior of its constituent elements, when the system is highly heterogeneous, and averaging of variables throughout the system can hardly reflect its status adequately as a whole. Therefore, while modeling the melting process, accompanied by the first order phase transition, we chose the cellular automata technique.

The work is devoted to the use of cellular automaton model for the study of some basic physical processes. The main approaches and the general methodology of the development of cellular automata models are considered on the example of heat transfer processes modeling. It is shown that these models can become an alternative to the use of classical differential equations. It is proved that the model in the form of a system of cellular automata equations is a very convenient tool for nonlinear heat transfer problems studying and can describe a rather complicated system behavior, despite the simplicity of its description. The typical problems of the thermal conductivity theory and their solving by the cellular automata method are considered. The analysis of accuracy of calculations by the CA-method was carried out. A comparison of the computational speed for the Stefan problem with the help of the CA-method and known net methods has been made.

Keywords: phase transition, cellular automata, thermal conductivity.