

Міністерство освіти і науки України  
Вінницький національний технічний університет

ШУМИЛЯК ЛІЛІЯ МИХАЙЛІВНА

УДК 004.94; 536.2

**МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ КРИСТАЛІЗАЦІЇ  
СПЛАВІВ МЕТОДОМ НЕПЕРЕРВНИХ КЛІТИННИХ АВТОМАТІВ**

01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи

**АВТОРЕФЕРАТ**  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата технічних наук

Вінниця – 2018

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Чернівецькому національному університеті імені Юрія Федьковича Міністерства освіти і науки України.

**Науковий керівник:** доктор фізико-математичних наук, професор  
**Остапов Сергій Едуардович,**  
Чернівецький національний університет  
імені Юрія Федьковича,  
завідувач кафедри програмного забезпечення  
комп'ютерних систем.

**Офіційні опоненти:** доктор технічних наук, професор  
**Михальов Олександр Ілліч,**  
Національна металургійна академія України,  
завідувач кафедри інформаційних технологій і систем;

доктор технічних наук, професор  
**Лужецький Володимир Андрійович,**  
Вінницький національний технічний університет,  
завідувач кафедри захисту інформації.

Захист відбудеться «11» жовтня 2018 р. о 12 годині 30 хвилин на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 05.052.01 у Вінницькому національному технічному університеті за адресою: 21021, Україна, м. Вінниця, вул. Хмельницьке шосе, 95, ГНК, ауд. 210.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Вінницького національного технічного університету за адресою: 21021, Україна, м. Вінниця, вул. Хмельницьке шосе, 95, ГНК.

Автореферат розісланий «10» вересня 2018 р.

Учений секретар  
спеціалізованої вченої ради

С.М. Захарченко

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Обґрунтування вибору теми дослідження.** Задачі чисельного моделювання неоднорідних динамічних систем є досить актуальними на сьогодні, оскільки дозволяють спостерігати еволюційні закономірності таких систем в режимі реального часу, особливо коли мова йде про задачі із нелінійними параметрами матеріалів, складними граничними та початковими умовами, фазовими переходами з рухомими межами тощо. У переважній більшості таких випадків аналітичні розв'язки отримати майже неможливо, а класичні числові методи розв'язку, засновані на різницевих схемах, можуть бути нестійкими. Класична модель фізичних процесів ґрунтується на диференціальних рівняннях. Але практичне застосування її не дає змоги отримати прийнятні результати. В реальних практичних задачах вона часто застосовується у найпростіших випадках з низкою обмежень та припущень. У зв'язку з цим, останнім часом все більшої популярності набувають альтернативні підходи. Широко застосовуються гнучкі – імітаційні або агентні моделі, де кожному агенту можна приписати свої правила поведінки. Одним із таких підходів моделювання є метод клітинних автоматів (КА). Він забезпечує не тільки опис фізичних властивостей матеріалу, але й може передбачати зміни на мікрорівні. Зокрема, процеси теплопереносу природним чином апроксимуються неперервними моделями клітинних автоматів.

Розвиток електронної техніки залежить, насамперед, від характеристик матеріалів, що використовуються для її виробництва. Зростання вимог до якості багатокомпонентних сплавів зумовлює модернізацію існуючих технологій їх отримання. Досить актуальною задачею у виробництві кристалів є підвищення відсотку виходу корисного для подальшого використання матеріалу. Очевидно, що на цей відсоток впливають умови вирощування. Пошук оптимальних параметрів отримання матеріалів, звичайно, можна виконувати на основі реальних експериментів, але це призводить до додаткових економічних витрат. У той же час, побудова комп'ютерних моделей процесів отримання матеріалів та проведення над ними ряду обчислювальних оптимізаційних експериментів дозволяє значно скоротити ці витрати. Метод асинхронних неперервних клітинних автоматів дозволяє змоделювати не лише сам фазовий перехід у процесі кристалізації, а й врахувати домішкову підсистему. Саме характер розподілу домішки та форма фронту кристалізації визначають основні властивості вирощеного матеріалу. Запропонована модель дифузійних та теплових процесів із фазовими переходами, побудована за допомогою методу асинхронних клітинних автоматів, дає можливість дослідникам у рамках єдиної математичної моделі, представленій у вигляді системи ітераційних рівнянь, вирішити проблему емпіричного підбирання параметрів експерименту шляхом моделювання теплових процесів, не обмежуючись додатковими спрощеннями.

Теорія КА відома з 40-х рр. ХХ століття. Вперше ця ідея була запропонована Джоном фон Нейманом для опису процесів самовідтворення в біології і техніці. Серед класиків клітинно-автоматної теорії, які зробили

вагомий внесок у дослідження функціонування КА, варто відзначити таких вчених, як Г. Малинецький, О. Бандман, О. Михальов, К. Біндер, Ф. Мур, Т. Тоффоли, Н. Марголус, С. Вольфрам, Г. Гутовіц та багато інших.

Актуальністю даного дослідження є розробка нових засобів для збільшення ефективності процесу підбирання оптимальних часових та швидкісних параметрів процесу кристалізації сплавів шляхом застосування методів імітаційного моделювання.

Враховуючи все вищесказане, основною задачею дослідження є збільшення ефективності проведення процесу вирощування кристалів та прогнозування властивостей отриманого методом зонної плавки матеріалу в науково-дослідних лабораторіях та виробництві шляхом побудови асинхронної клітинно-автоматної моделі кристалізації сплавів та реалізації отриманої моделі в програмному продукті.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Робота виконується відповідно до планів науково-дослідницьких робіт кафедри програмного забезпечення комп'ютерних систем Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича за держбюджетною тематикою: «Математичне та програмне забезпечення обчислювальних систем» (Державний реєстраційний номер 0116U007046).

**Мета і завдання дослідження.** *Метою дослідження* є підвищення ефективності процесу вирощування кристалів шляхом моделювання його динаміки на основі розробки асинхронних клітинно-автоматних моделей дифузійних та теплових процесів з фазовими переходами першого роду.

Відповідно до поставленої мети в дисертаційній роботі розв'язуються такі основні *задачі*:

1. Провести аналіз існуючих методів моделювання дифузійних та теплових процесів з фазовими переходами, які дозволяють відслідковувати динаміку досліджуваних процесів і явищ.
2. Розробити асинхронну клітинно-автоматну модель, здатну представити не тільки якісну картину процесу теплопровідності, але й визначити кількісні параметри системи в конкретні моменти часу.
3. Змоделювати процес концентраційного переохолодження та продемонструвати комірчастий ріст кристалів.
4. Провести моделювання зерноутворення при рівномірному охолодженні розплаву методом клітинних автоматів.
5. Виконати аналіз адекватності застосування моделей теплових процесів, побудованих методом клітинних автоматів.
6. Розробити комплекс програм, що реалізують зазначену модель процесу теплопровідності методом неперервних клітинних автоматів для проведення обчислювальних експериментів з метою зменшення часових і трудових ресурсів.
7. Впровадити результати роботи у діяльність лабораторій та підприємств.

*Об'єкт дослідження:* дифузійні та теплові процеси з фазовими переходами при вирощуванні кристалів.

*Предмет дослідження:* асинхронна клітинно-автоматна модель теплових та дифузійних процесів.

**Методи дослідження:** в якості апарату досліджень застосовувалися наступні методи: методи теорії клітинних автоматів (для побудови КА-моделі процесу теплопровідності, дифузії та сегрегації); класичні обчислювальні методи: використовувалися аналітичні та числові методи розв'язання диференціальних рівнянь з частинними похідними; методи комп'ютерного моделювання (при створенні програмного продукту); методи комп'ютерного експерименту (для емпіричного підтвердження отриманих результатів).

**Наукова новизна отриманих результатів** полягає в наступному:

*вперше:*

- розроблена неперервна асинхронна клітинно-автоматна модель процесів теплопровідності та дифузії, яка дозволяє отримати розв'язок задачі теплопровідності в будь-який момент часу, що дає змогу визначити залежність часу однієї клітинно-автоматної взаємодії від розмірності клітинно-автоматного поля, розмірів та теплових параметрів модельованої системи;

- запропоновано клітинно-автоматну модель процесу кристалізації розплаву, яка дозволяє описати розподіл домішки у твердій та рідкій фазах та комірчастий ріст, і, на відміну від попередніх, дає змогу зафіксувати момент переходу до концентраційного переохолодження та визначити характер комірчастого росту;

- побудована клітинно-автоматна модель процесу росту зерен при рівномірному охолодженні бінарного розплаву, яка, на відміну від існуючих моделей, демонструє самовільне утворення зародку та динаміку росту зерен;

*набуло подальшого розвитку:*

- метод моделювання дифузійних та теплових процесів з урахуванням фазового переходу першого роду, що базується на моделі асинхронного клітинного автомату, який, на відміну від відомого методу, дозволяє отримати кількісні результати моделювання в будь-який момент часу.

*Достовірність результатів* обчислювальних експериментів для задачі моделювання процесів теплопровідності та дифузії підтверджується даними, отриманими при експериментальних дослідженнях.

Адекватність побудованих клітинно-автоматних моделей обумовлена узгодженням результатів досліджень з даними, представленими вітчизняними та зарубіжними літературними джерелами.

**Практичне значення отриманих результатів.** Удосконалено методику проведення технологічного процесу зонного вирощування кристалів шляхом застосування побудованих моделей дифузійних та теплових процесів для пошуку оптимальних умов отримання матеріалу, що дозволяє зменшити витрати на проведення реальних експериментів.

Результати теоретичних досліджень і розроблених моделей реалізовані у вигляді програмного продукту, який використовується як підтримка

технологічного процесу вирощування кристалів телуриду вісмуту у лабораторіях ТОВ «Інтерм», ТОВ «ВальСофт» та на кафедрі фізики напівпровідників і наноструктур Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича.

Результати дисертаційної роботи впроваджено:

– у ТОВ «Інтерм», де використовується для пошуку оптимальних режимів вирощування кристалів термоелектричного матеріалу, що приводить до зменшення часових та матеріальних ресурсів (акт впровадження від «17» січня 2018 р.);

– у ТОВ «ВальСофт», де використовується фреймворк для візуалізації процесів складних науково-технічних розрахунків (акт впровадження від «5» березня 2018 р.);

– у навчальний процес кафедри напівпровідників і наноструктур Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича в рамках навчальних курсів: «Новітня техніка і технології», «Автоматизація фізичних досліджень», «Фізика напівпровідників і діелектриків» (акт впровадження від «17» жовтня 2017 р.).

**Особистий внесок здобувача.** Усі наукові результати дисертації одержано автором самостійно.

У працях, надрукованих у співавторстві, автору належить таке: [1] – розробка клітинно-автоматної моделі процесу зерноутворення в малих об'ємах при рівномірному охолодженні; [2], [7] – розробка клітинно-автоматної моделі процесу теплопровідності з фазовим переходом; [3], [5] – розробка клітинно-автоматної моделі перерозподілу домішки при кристалізації; [4] – проведення аналізу методів та вибір найкращого з них, проведення аналізу адекватності КА-моделі; [6] – розробка клітинно-автоматної моделі процесу теплопровідності, аналіз та інтерпретації отриманих результатів; [8], [9] – розробка програмного продукту, особиста участь в апробації результатів дослідження; [10] – побудова КА-моделі процесу теплопровідності з врахуванням явища сегрегації, статистична обробка, узагальнення та аналіз отриманих даних.

**Апробація матеріалів дисертації.** Основні результати дисертаційного дослідження апробовані і впроваджені в ході практичної діяльності в ТОВ «Інтерм» (м. Чернівці).

Результати досліджень обговорювалися на всеукраїнських і міжнародних наукових конференціях. Зокрема на наукових конференціях: «Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я» (Харків, 2012, 2013, 2014, 2015); Third International Conference «High Performance Computing» (Київ, 2013); «Проблеми інформатики та комп'ютерної техніки» (Чернівці, 2014); «Проблеми інформатики та моделювання», (Одеса, 2015); міжнародній науковій конференції, присвяченій 80-річчю від дня народження М.П. Ленюка (Чернівці, 2016); «Інформатика, управління та штучний інтелект» (Харків, 2016); на наукових семінарах кафедри програмного забезпечення комп'ютерних систем та Інституту фізико-технічних та комп'ютерних наук Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича.

**Публікації.** По темі дисертації опубліковано 20 робіт, де представлені результати досліджень. З них 10 статей у рецензованих фахових виданнях (з них 1 – в журналі, що включений до наукометричної бази SCOPUS, 4 – в українських фахових виданнях, 1 – в українському виданні, що включене до наукометричної бази Index Copernicus International, 4 – в російських журналах, що включені до наукометричної бази RSCI на платформі Web of Science), в збірниках матеріалів міжнародних наукових конференцій – 10 робіт.

**Структура та обсяг дисертації.** Дисертація складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел і додатків. Дисертаційна робота має 43 рисунки, 8 таблиць, 3 додатки. Список використаних джерел містить 144 найменування. Загальний обсяг роботи складає 164 сторінки, обсяг основного тексту – 114 сторінок.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** показана актуальність тематики роботи, викладені цілі, методи та задачі дослідження, а також дана характеристика наукової новизни, практичного значення, апробацій та публікації результатів дисертації. Показано взаємозв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.

**Перший розділ** присвячений огляду наукової літератури з математичного моделювання теплових та дифузійних процесів.

Розглянуто аналітичні і чисельні методи розрахункового аналізу явищ теплопровідності та дифузії. Проаналізовані переваги і недоліки їх застосування. Відзначено, що в деяких задачах не завжди можливе застосування аналітичних методів. Зокрема, при виконанні конкретних розрахунків, особливо при великій кількості вхідних даних, процес отримання рішення значно ускладнюється, внаслідок чого неможливо отримати точний температурний розподіл. Тому в даний час, з огляду на розвиток обчислювальної техніки, перевага віддається програмним розрахунковим комплексам, що базуються на вирішенні складних фізичних завдань з використанням чисельних методів. Найбільш популярним серед них є метод скінченних різниць. Розглянуто різні типи схем, підходи, що використовуються для отримання чисельного розв'язку задач сітковими методами. Аналіз літературних джерел свідчить, що вибір різновидів чисельних методів розв'язку диференціальних рівнянь для апроксимації конкретного фізичного процесу є неоднозначним. 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.

Розглянуто питання врахування залежності температури фазового переходу від складу і моделювання нестійкості фронту кристалізації. Описані процеси, що відбуваються при фазових переходах в бінарних розчинах та розподіл домішок в кристалах при кристалізації, адже добре відомо, що багато

фізичних властивостей кристалічних матеріалів визначаються розподілом домішки в розплаві і її можливістю накопичуватися у вигляді окремих зерен, комірок і т.п., що викликає неоднорідність складу отриманого матеріалу. Тому закономірності розподілу домішки між розплавом і вирощуваним з нього кристалом, зміна концентрації домішки по довжині і діаметру кристала в залежності від умов вирощування мають першорядне значення.

Огляд досліджень показав, що відомі математичні моделі не в повній мірі здатні описати розподіл температурних полів для областей з рухомими межами. Тому запропоновано пошук таких моделей, які не являються спрощеним розв'язком диференціальних рівнянь, а є їх альтернативою. Цей факт дозволив сформулювати напрям досліджень, що ґрунтується на удосконаленні математичного моделювання теплових процесів за допомогою методу клітинних автоматів.

Наведена класифікація та основні напрямки сучасного розвитку клітинних автоматів. Проведено порівняння методу клітинних автоматів та звичайних диференціальних рівнянь, визначені переваги та недоліки використання цих методів. Зроблено висновок, що незважаючи на доволі складний процес побудови таких локальних правил мікрорезаємодій, які б під час функціонування певної кількості клітинних автоматів породжували ту чи іншу відповідну макродинаміку, існує ряд явищ, для яких застосування КА-моделювання виявляється прийнятнішим за використання чисельних методів розв'язку диференціальних рівнянь з частинними похідними. Зростаючий інтерес до цього методу моделювання дозволяє зробити висновок про те, що КА-метод моделювання являється потужним інструментом в наукових дослідженнях і здатен описати складну поведінку систем.

У **другому розділі** викладено загальні принципи побудови КА-моделей.

Висвітлено суть моделювання процесів теплопровідності за допомогою клітинних автоматів, яка полягає в наступному: зразок розбивається на сукупність однакових клітин, однаковим чином з'єднаних між собою. Всі комірки утворюють так звану решітку клітинного автомата. Решітки можуть бути різної розмірності (одно-, дво- або тривимірний масив) залежно від розмірності системи, що моделюється.

У випадках моделювання складних явищ, що супроводжуються фазовими переходами або іншими перетвореннями, вміст комірок клітинно-автоматного поля може являти собою окремий лінійний масив з  $m$  деяких характеристик. Можна сказати, що  $m$  – кількість параметрів мікрооб'єктів, які необхідно враховувати при моделюванні системи. Для нашого випадку основними є 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. В якості допоміжних характеристик використовуються координати клітини та інші фізико-хімічні характеристики матеріалу. На початку розрахунків теплової або дифузійної динаміки клітинно-автоматне поле ініціюється заданими значеннями температури, концентрації або інших характеристик, тобто задаються початкові



умови. Процес моделювання асинхронним методом являє собою ітераційний цикл клітинно-автоматних взаємодій і передбачає циклічне виконання трьох типових кроків:

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 клітина  $i = 2$  з цілочисельними координатами  $x^2, y^2, z^2$ . В якості схеми сусідства  $A(x, y, z)$  прийнято оточення Неймана, тобто для двовимірного випадку у клітини є тільки чотири сусіди.

3. Відбувається клітинно-автоматна взаємодія між двома клітинами.

Вміст клітин КА-поля може набувати дійсних неперервних значень.

Отримана система ітераційних рівнянь (1) 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.

Суть клітинно-автоматних взаємодій полягає у модифікації неперервних значень відповідних характеристик клітин. Нехай значення характеристик клітин в момент часу  $(t+1)$  позначається штрихом ( $'$ ), а в теперішній момент часу  $t$  – без штриха. Правило переходу клітинного автомата  $\Theta(\Omega(x, y, z, t), A(x, y, z))$ , за яким визначається значення характеристик клітини в новому стані  $\Omega(x, y, z, t + 1)$  має вигляд наступної системи рівнянь:

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

$$T_{\text{сер}} = \frac{w^1 T^1 + w^2 T^2}{w^1 + w^2}, \quad w^i = \rho_L^i q_L^i \frac{H^i}{H_{\text{пл}}^i} + \rho_S^i q_S^i \left( 1 - \frac{H^i}{H_{\text{пл}}^i} \right),$$

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

$$P_L = \frac{H^1 + H^2}{H_{\text{пл}}}, \quad P_S = 2 - P_L, \quad C = C^1 + C^2,$$

$$\begin{aligned}
M_{\max} &= \max(A_{\max}, D_{\max}), & T_{\text{пл}}^i &= T_L(C^i) \frac{H^i}{H_{\text{пл}}} + T_S(C^i) \left(1 - \frac{H^i}{H_{\text{пл}}}\right), \\
T_S(C) &= T_{\text{пл}}(0) + tg(\alpha)C, & T_L(C) &= T_{\text{пл}}(0) + tg(\alpha)CK_0, \\
A_{\text{сеп}} &= \frac{A^1 + A^2}{2}, & A^i &= \frac{\eta_L^i}{\rho_L^i q_L^i} \frac{H^i}{H_{\text{пл}}} + \frac{\eta_S^i}{\rho_S^i q_S^i} \left(1 - \frac{H^i}{H_{\text{пл}}}\right), \\
\Delta H^i &= H_{\text{пл}} \frac{\Delta T^i}{\Delta T_{\text{пл}}^i}, & \Delta T^i &= T^i - T_{\text{пл}}^i, & D_{\text{сеп}} &= \frac{D^1 + D^2}{2}, \\
D^i &= D_L^i \frac{H^i}{H_{\text{пл}}} + D_S^i \left(1 - \frac{H^i}{H_{\text{пл}}}\right), & \Delta T_{\text{пл}}^i &= \frac{H_{\text{пл}}}{q_{\text{сеп}}^i} + T_L(C^i) - T_S(C^i), \\
q_{\text{сеп}}^i &= \frac{q_L^i + q_S^i}{2}, & Z &= \text{sign}(1 - K_0) \cdot \text{sign}(C^i - C^{(3-i)}).
\end{aligned}$$

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

Зокрема, перше рівняння системи (1) по суті є клітинно-автоматною апроксимацією рівняння теплопровідності, друге – дифузії домішки. Третє та четверте рівняння описують процес плавлення, п'яте та шосте – процес кристалізації. Сьоме і восьме рівняння мають місце при відсутності градієнта температур, тобто при рівномірному охолодженні.

Знайдено час однієї клітинно-автоматної взаємодії шляхом проведення ряду обчислювальних експериментів, суть яких полягала у порівнянні клітинно-автоматної динаміки при різній кількості комірок  $N$  клітинно-автоматного поля із конкретним розв'язком нестационарного рівняння теплопровідності (дифузії). Таким чином, час однієї клітинно-автоматної взаємодії визначається так:

– для одновимірного випадку, коли КА-поле налічує  $N_x$  клітин, час взаємодії дорівнює:

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

– для двовимірного випадку, коли КА-поле налічує  $N_x \times N_y$  клітин, час взаємодії дорівнює:

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

– для тривимірного випадку, коли КА-поле налічує  $N_x \times N_y \times N_z$  клітин, час взаємодії дорівнює:

$$t_{1KA} = \frac{d_x^2}{M_{\max}} \frac{1}{6N_x^3 N_y N_z} = \frac{d_y^2}{M_{\max}} \frac{1}{6N_y^3 N_x N_z} = \frac{d_z^2}{M_{\max}} \frac{1}{6N_z^3 N_y N_x}, \quad (4)$$

де  $N_x, N_y, N_z$  – кількість комірок клітинно-автоматного поля вздовж осі  $x, y, z$  відповідно.

Аналізуючи рівняння (2-4), можна прийти до висновку, що збільшення розмірності поля КА веде до збільшення кількості клітинно-автоматних взаємодій, яку слід провести протягом деякого модельного проміжку часу, але при цьому також збільшується і точність розрахунків.

Цілком очевидно, що для забезпечення адекватності процесу моделювання, розмірність клітинно-автоматного поля повинна бути якомога більшою. З іншого боку, це неминуче призведе до занадто довгого процесу моделювання. Тут, за аналогією із різноманітними чисельними схемами розв'язку, виникає проблема пошуку компромісу між точністю розв'язку та часом, необхідним для його отримання. Тобто, вибір кількості клітинних автоматів визначає точність моделювання, а також впливає (у степеневій залежності) на час розрахунків. Причому, наприклад, залежність для одновимірного випадку кубічна, а для багатовимірних випадків ступінь ще вищий. Тому розмірність КА-поля слід вибирати зі співвідношення «кількість – якість».

**Третій розділ** присвячений апробації побудованої асинхронної клітинно-автоматної моделі дифузійних і теплових процесів із фазовими переходами.

Аналітичні методи дослідження рівнянь теплової динаміки розвиваються давно, але, незважаючи на це, існує обмежене число задач, які можуть бути вирішені аналітично. Оскільки такі рішення для процесів теплопровідності і дифузії можливі лише стосовно простих умов, то для можливості використання при практичних розрахунках результатів чисельних досліджень необхідно провести оцінку точності таких методів шляхом зіставлення отриманих результатів з аналітичними рішеннями для доволі спрощених, ідеалізованих випадків задач. А для встановлення точності отриманого розв'язку більш складних задач порівняння слід проводити з результатами експериментальних досліджень.

Для підтвердження адекватності моделі (1) проведено порівняння розв'язку, отриманого за допомогою КА-моделювання, з аналітичним і чисельним розв'язком для декількох варіантів задач.

Розглянуто випадок теплопровідності для одновимірного однорідного зразка з постійним коефіцієнтом температуропровідності. При цьому припускається, що теплофізичні характеристики не залежать від температури. В такому випадку задача зводиться до розгляду теплопередачі через плоску нескінченну пластину або ізольований стержень. Процес теплопровідності в цьому випадку описується диференціальним рівнянням і має аналітичний розв'язок, а система рівнянь (1), що описує клітинно-автоматну взаємодію, зводиться до одного (першого) рівняння, яке описує зважене усереднення

температури з часом. Отримані результати обчислювального експерименту на основі клітинних автоматів добре узгоджуються з результатами аналітичного розв'язку задачі теплопровідності (рис. 1), що підтверджує адекватність використання клітинно-автоматного підходу щодо апроксимації розв'язку нестационарного рівняння теплопровідності.

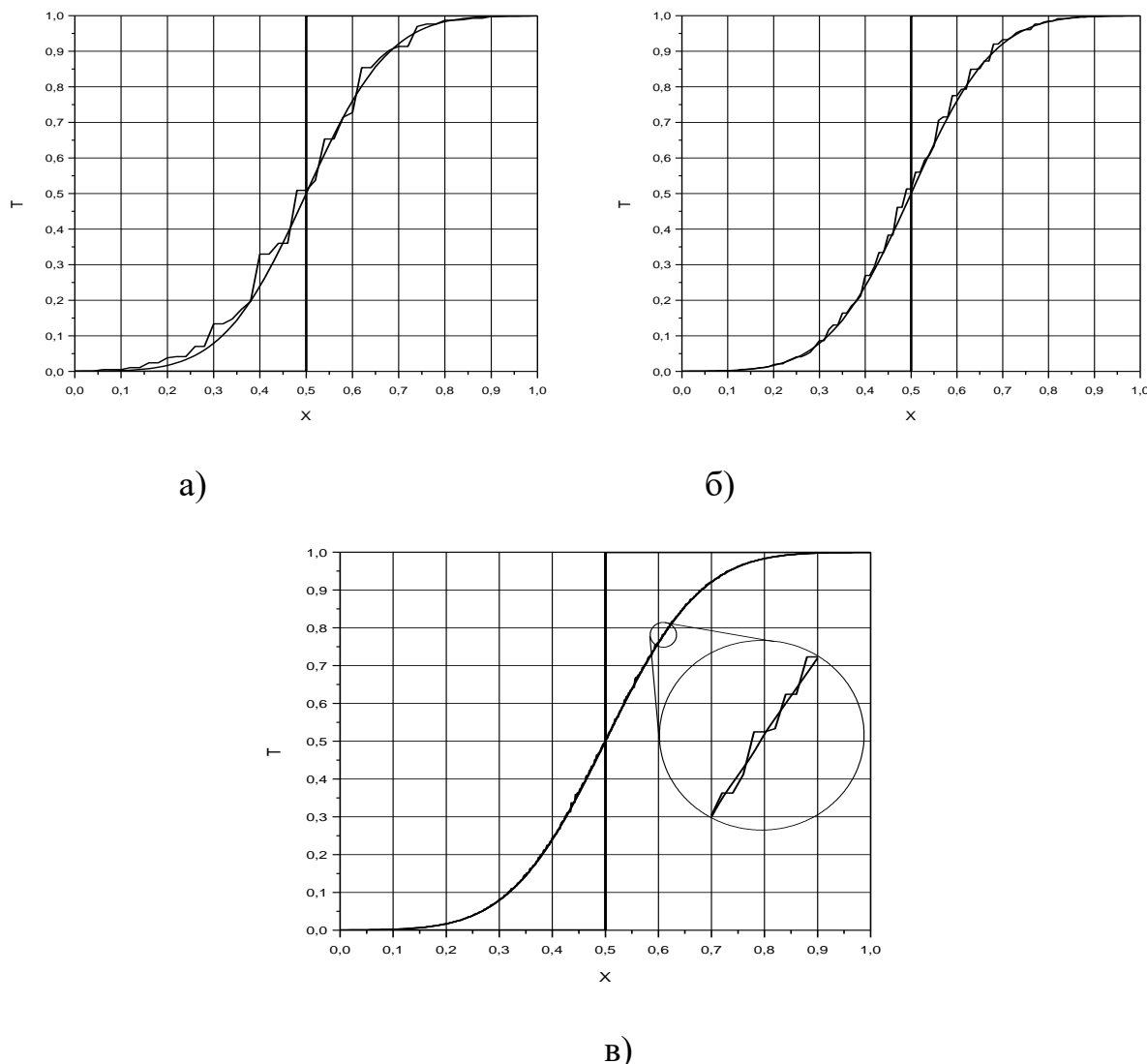


Рисунок 1 – Графік розподілу температури у зразку в момент часу  $t = 0,01$  с ( а)  $N = 50$ , б)  $N = 100$ , в)  $N = 500$ ).

Суцільна лінія – аналітичний розв'язок, ламана – клітинно-автоматний розв'язок. У правій частині рисунку в) – збільшений у десять разів фрагмент температурного розподілу

В результаті порівняння цих двох методів була отримана оцінка точності КА-рішення. Похибка КА-методу обчислювалась відносно аналітичного розв'язку відповідно до формули для середньої абсолютної похибки *MAPE*. Продемонстровано, що точність рішення залежить від кількості комірок клітинно-автоматного поля, а для великих розмірностей КА-поля похибка не перевищує декількох процентів (рис. 2).

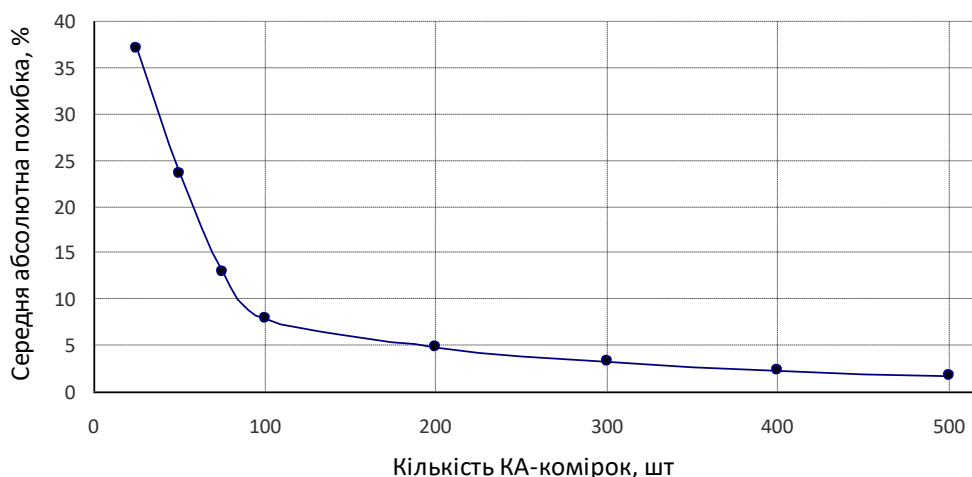


Рисунок 2 – Графік залежності похибки КА-обчислень від кількості комірок

Проведено апробацію моделі (1) на прикладі нестационарної задачі теплопровідності із врахуванням фазових переходів першого роду, так званій задачі Стефана. Класичним прикладом задачі теплопровідності з рухомою границею поділу фаз може служити задача промерзання вологого ґрунту.

Результати обчислювальних експериментів для одно-, дво- та тривимірної КА-моделей уздовж осі  $x$  у межах похибки клітинно-автоматного «шуму» збігаються між собою і з відповідними результатами чисельного рішення рівнянь теплопровідності для заданої задачі. Було проведено дослідження цих результатів на предмет стійкості рішення і швидкості проведення розрахунків з однаковою точністю рішення при ідентичних системних параметрах. Показано, що швидкість обчислень КА-методу приблизно у 2 рази більша за швидкість сіткових методів при однаковій кількості комірок КА-поля та кількості вузлів сітки при кінцево-різницевоїх схемах. Окрім цього, продемонстрована абсолютна стійкість КА-моделі на відміну від явної кінцево-різницевої схеми, де не виконується закон збереження енергії і спостерігається нестійка її поведінка.

При моделюванні сегрегації для побудови температурного розподілу у зразку враховується домішкова підсистема (вплив концентрації домішки на температуру плавлення). Для отримання якісної картини перерозподілу домішки необхідно зв'язати концентрації домішок твердої та рідкої фаз з відповідним відношенням внутрішньої теплоти та прихованої теплоти плавлення. В цьому випадку система рівнянь (1) майже не змінюється: не враховується лише напрямлений рух флуктуацій внутрішньої енергії, який описують останні 2 рівняння системи.

Проведено ряд обчислювальних експериментів, окремий приклад яких представлено на рис. 3. Наведені результати розрахунків розподілу відносної концентрації домішки вздовж фрагменту зразка в процесі кристалізації цілком узгоджуються із експериментальними даними.

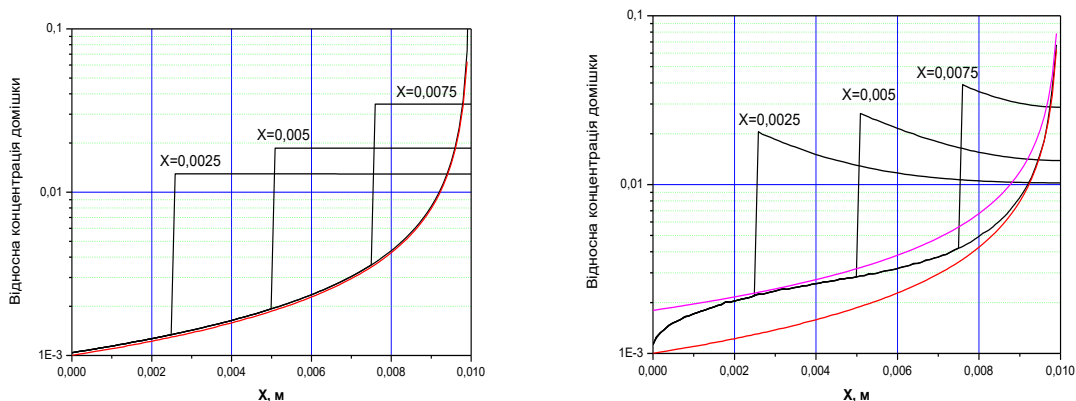


Рисунок 3 – Графік розподілу відносної концентрації домішки вздовж фрагменту зразка в процесі кристалізації (показано проміжні результати руху фронту кристалізації у трьох точках). Нижня крива – рівноважна кристалізація в умовах безмежно малої швидкості росту

Адекватність клітинно-автоматної моделі (1) було перевірено також на моделюванні явища концентраційного переохолодження при вирощуванні легованих кристалів, тобто розглянуто випадок, коли швидкість росту кристала більша критичної.

На рис. 4 зображено результати розрахунків відносної концентрації домішки (лівий графік) та розподілу температури (правий графік) вздовж зразка.

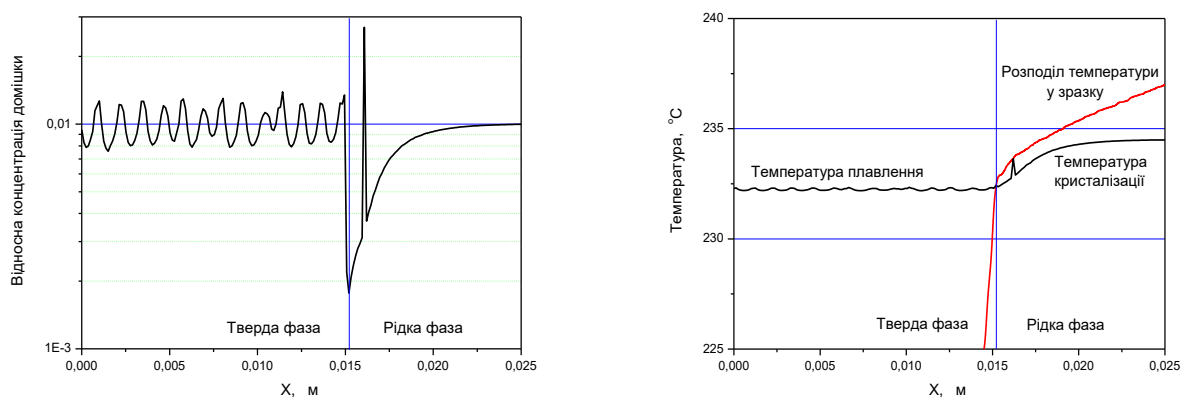


Рисунок 4 – Графіки розподілу відносної концентрації домішки (лівий графік) та температури у зразку, а також температури плавлення і кристалізації (правий графік).

Основні параметри процесу: градієнт температур  $G = 2 \text{ } ^\circ\text{C}/\text{см}$ ;  
 $D_L = 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$ ;  $V_{\text{крит}} = 30 \text{ мм}/\text{год}$ ;  $V = 100 \text{ мм}/\text{год}$

З рисунку видно, що перевищення швидкості росту  $V$  деякого критичного значення  $V_{крит}$  призводить до нестабільної поведінки фронту кристалізації, а отже й до нерівномірного розподілу домішки в твердій фазі.

В якості термодинамічних параметрів матеріалу було обрано параметри системи олово-сурма ( $Sn-Sb$ ), де олово – основний матеріал, а сурма – домішка з відносною концентрацією  $C_0 = 0,01$ , тобто 1%.

Представлені результати моделювання розподілу концентрації домішки у дво- або тривимірних випадках, де можна побачити різноманіття комірчастих структур (рис. 5).

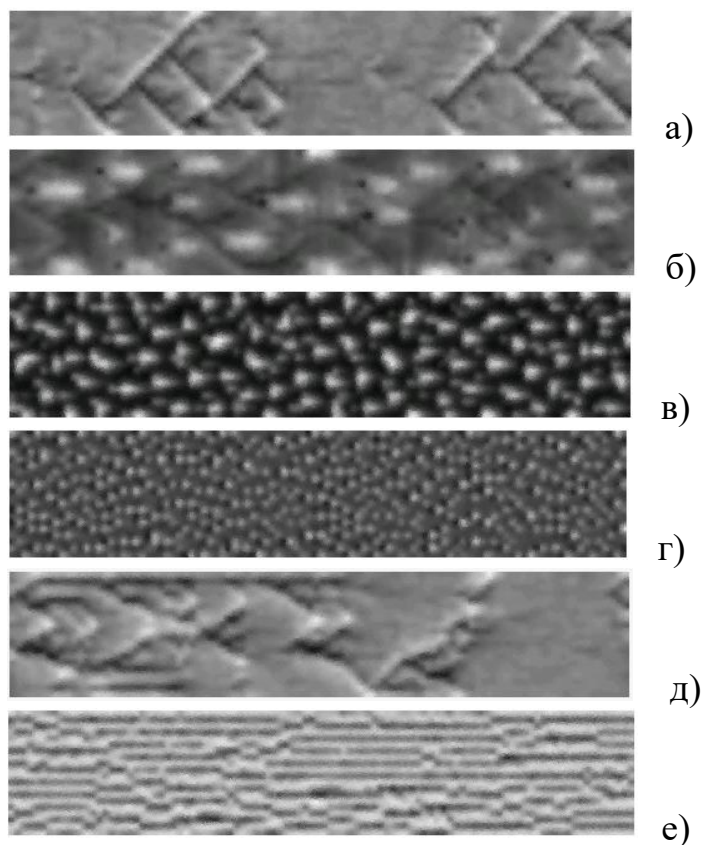


Рисунок 5 – Приклади різновидів нерівномірності розподілу концентрації домішки внаслідок концентраційного переохолодження (комірчастого росту кристалу)

Таблиця 1 – Основні параметри моделі для рис. 5.

Зразок:	а)	б)	в)	г)	д)	е)
$G, ^\circ\text{C}/\text{см}$	8	2	2	0,3	25	6
$D_L, \text{м}^2/\text{с}$	$10^{-7}$	$10^{-7}$	$10^{-8}$	$10^{-8}$	$10^{-8}$	$10^{-8}$
$V_{крит}, \text{мм}/\text{ГОД}$	125	30	2,5	0,5	40	10
$V, \text{мм}/\text{ГОД}$	100	100	100	100	30	30
$C_{\min}$	0,0089	0,0074	0,0019	0,0028	0,0086	0,0072
$C_{\max}$	0,0111	0,0143	0,0325	0,0259	0,0114	0,0117

З аналізу таблиці 1 та рис. 5 видно, що поява концентраційного переохолодження в процесі росту кристалів узгоджується з даними, описаними в наукових джерелах: чим більше фактична швидкість  $V$  перевищує критично допустиму  $V_{\text{крит}}$ , тим більш яскраво проявляється явище комірчастого росту.

Розглянуто приклади моделювання різновидів форми фронту кристалізації при концентраційному переохолодженні: поява зародків кристалізації в розплаві неподалік границі розділу фаз, комірчастий ріст твердої фази виключно з поверхні монолітного кристалу. Плоский фронт кристалізації і відсутність нерівномірності розподілу домішки у твердій фазі спостерігається при низьких швидкостях руху фронту кристалізації та високому градієнті температур на фронті кристалізації. У протилежному випадку буде мати місце явище концентраційного переохолодження. А знаходження оптимальних умов, тобто максимальної швидкості і найменшого градієнта, при яких не буде виникати концентраційне переохолодження є основою для підвищення економічної ефективності виробництва кристалів.

Для складних задач теплопровідності порівняння наближеного КА-рішення проводилося з практичними результатами, отриманими при експериментальних дослідженнях. Було проведено ряд контрольних експериментів. Отримано наступні результати: для підібраних параметрів процесу моделювання вирощування кристалу телуриду вісмуту ( $Bi_2Te_3$ ), при яких явище концентраційного переохолодження в моделі не виникало і спостерігався плоский фронт кристалізації, реальне відхилення фронту кристалізації від плоскої форми в результаті проведення лабораторних експериментів не перевищувало допустимого діапазону ( $\sim 7\%$ ). При використанні в якості домішки свинцю, який не застосовувався у виробництві раніше, було отримано злиток, розподіл  $Pb$  у якому не відрізняється більше  $5\%$  від розподілу, отриманому в результаті обчислювального експерименту.

Для моделювання динаміки утворення зародків та росту зерен було досліджено задачу рівномірного твердіння розплавів у малих об'ємах (рис. 6). Параметри обчислювальних експериментів: розміри КА-поля  $250 \times 250$ ; розміри однієї клітини –  $1$  мкм. Параметри матеріалу аналогічні параметрам алюмінію з домішкою міді. Проведено порівняння отриманих результатів моделювання з експериментальними даними, представленими в літературі. Аналізуючи результати обчислювальних експериментів, спостерігається зменшення розмірів зерен та збільшення їх густини зі збільшенням швидкості охолодження. Ці результати цілком узгоджуються з раніше описаною в літературі картиною процесу, де підтверджено той факт, що при однаковому значенні коефіцієнту дифузії при збільшенні швидкості охолодження розплав середня довжина дрейфу флуктуацій внутрішньої енергії зменшується, а отже і зменшуються середні розміри зерен та збільшується густина їх розподілу. Середні розміри зерен, отримані при КА-моделюванні не відрізняються від експериментальних більше ніж на  $10\%$  та спостерігається однакова динаміка зміни густини їх розподілу.



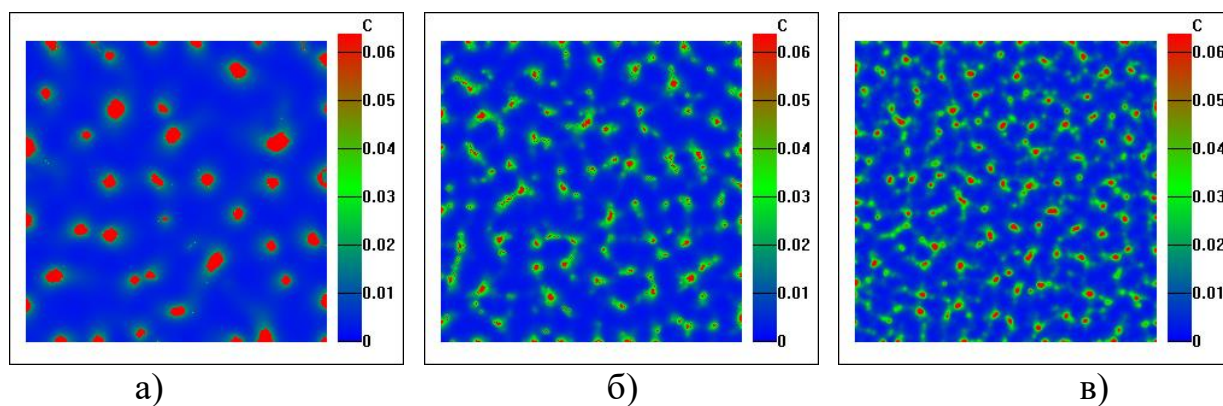


Рисунок 6 – Графік розподілу концентрації домішки при різних швидкостях охолодження розплаву, отриманий при КА-моделюванні:  
*a) – 0.1<sup>0</sup>C/c; б) – 1<sup>0</sup>C/c; в) – 10<sup>0</sup>C/c*

У **четвертому розділі** представлена реалізація комп'ютерної системи для збільшення ефективності процесу зонної плавки шляхом пошуку оптимальних умов вирощування, поліпшення точності регулювання температури росту термоелектричного матеріалу. Можливість пошуку оптимальних параметрів моделювання дозволяє отримати якісний злиток за максимально коротким часом (рис. 7). Використовуючи запропоновану програму моделювання та автоматизованого управління процесом зонної плавки можна визначити оптимальні параметри злитків з мінімумом розкиду складу.

Запропоновані шляхи оптимізації клітинно-автоматних обчислень програмними засобами. Оптимізація програмного коду шляхом використання асемблерних вставок вдвічі зменшила час виконання програми. Внаслідок внутрішнього паралелізму і локальності взаємодій КА-алгоритми легко і ефективно розпаралелюються. Це дозволяє ефективно використовувати можливості багатопроцесорної системи, що значно прискорює час розрахунку.

Поставлена задача застосування розробленої моделі на практиці була зведена до виявлення закону управління параметрами процесу. В результаті апроксимації оптимального закону керування, виявленого в процесі ітераційних обчислювальних експериментів над КА-моделлю процесу, було отримано найприйнятнішу стратегію управління температурою нагрівачів і швидкістю руху ампул, яка забезпечує мінімальний час вирощування злитку при оптимальній його якості.

Реалізовану комп'ютерну систему для моделювання, оптимізації та керування процесом зонного вирощування кристалів було апробовано на дільниці вирощування термоелектричного матеріалу ТОВ «Інтерм», м. Чернівці.

Проведено дослідження у двох напрямках: пошук параметрів нового виробничого процесу та оптимізація вже існуючого.

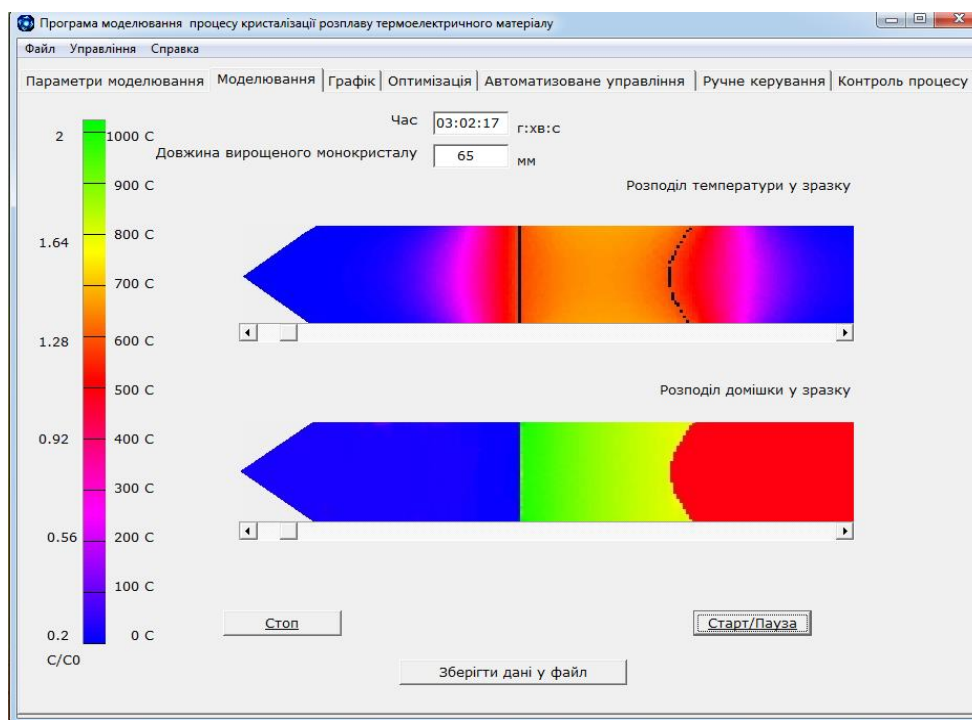


Рисунок 7 – Інтерфейс програми управління процесом вертикальної зонної плавки: вкладка моделювання процесу

Виробнича необхідність застосування матеріалів з новими властивостями зумовила запуск процесу вирощування телуриду сурми ( $Sb_2Te_3$ ). Застосовуючи розроблений програмний продукт, було знайдено параметри процесу, при яких спостерігається плоский фронт кристалізації, а швидкість вирощування є максимальною: швидкість вирощування  $V=18$  мм/год, температура нагрівачів  $T=760^{\circ}C$ . Проведене порівняння результатів КА-моделювання з експериментальними даними підтверджує правильність визначених параметрів процесу вирощування. Експериментально перевірено, що відхилення від визначених параметрів призводить до викривлення фронту кристалізації і погіршення якості отриманого злитку.

Другий напрямок обчислювального дослідження був зумовлений необхідністю оптимізації існуючого виробничого процесу вирощування телуриду вісмуту ( $Bi_2Te_3$ ) за рахунок пришвидшення процесу отримання злитку без втрати якості. Адже зменшення собівартості злитку при економії електроенергії веде до розширення ринку збуту продукції. В результаті застосування нового режиму було збережено властивості отриманого матеріалу, але при цьому швидкість вирощування вдалося збільшити з 16 до 20 мм/год.

Результати експлуатації системи для пошуку оптимальних параметрів процесу вирощування продемонстрували її практичну цінність. Зокрема, час вирощування телуриду вісмуту ( $Bi_2Te_3$ ) при середніх розмірах зразків 350x20 мм вдалося зменшити у середньому з 22 до 18 годин, тобто майже на 20%. При цьому явища концентраційного переохолодження не спостерігалось, оскільки у протилежному випадку, вирощені злитки були б крихкими та непридатними ані

до алмазної різки, ані до подальшого використання у термоелектричних елементах. Крім того, відхилення фронту кристалізації від плоскої форми також не перевищувало допустимого діапазону, що підтверджувалось вимірюваннями радіального розподілу питомої електропровідності та термо-е.р.с., які суттєво залежать від розподілу складу матеріалу. В той же час, відсоток виходу придатного матеріалу вздовж злитків майже не змінився: як і раніше, приблизно по 25 мм на початку та кінці злитків видалялися як браковані.

Окрім зменшення часу вирощування, описана система дозволяє проводити ряд обчислювальних експериментів відносно нових складів матеріалу і, тим самим, відмовитись від використання методу «спроб та помилок». Прогнозований економічний ефект від використання розробленої комп'ютерної системи по оцінках ТОВ «Інтерм» становитиме 10%.

## ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі поставлено і розв'язано актуальну науково-прикладну задачу розробки нових методів моделювання дифузійних та теплових процесів із фазовими переходами та впроваджено їх у лабораторії термоелектричного матеріалознавства, що дозволяє суттєво підвищити ефективність досліджень за рахунок зменшення вартості виробництва та скорочення часових витрат.

Основні результати дисертаційної роботи зводяться до наступного:

1. Проведений аналіз чисельних методів для задач, що розглядаються у дисертаційній роботі, продемонстрував універсальність методу КА, який, на відміну від класичних методів, може бути використаний з невеликими модифікаціями в усіх розглянутих випадках.

2. Досліджене і вирішене питання отримання кількісних результатів за допомогою методу асинхронних клітинних автоматів. Шляхом проведення ряду обчислювальних експериментів встановлений час однієї клітинно-автоматної взаємодії, який є функцією розмірності клітинно-автоматного поля, розмірів та теплових параметрів зразка. Представлена кількісна модель процесів теплопровідності та дифузії на основі клітинних автоматів, яка дозволяє отримати розв'язок задачі теплопровідності в реальний момент часу.

3. Вперше представлено і досліджено модель, побудовану методом неперервних асинхронних клітинних автоматів, для опису процесів кристалізації сплавів. Представлена модель описує процес сегрегації домішки при кристалізації, визначає розподіл домішки в розплаві. Побудована модель, на відміну від попередніх, дозволяє не тільки зафіксувати момент переходу до концентраційного переохолодження, але й визначити характер комірчастого росту.

4. Вперше побудована клітинно-автоматна модель для опису процесу росту зерен при рівномірному охолодженні розплаву, яка на відміну від існуючих, демонструє самовільне утворення зародку та динаміку росту зерен.

5. Проведено всебічне тестування побудованої моделі для підтвердження адекватності її застосування, що продемонструвало її високу

точність та гнучкість. Відповідність результатів моделювання запропонованим методом підтверджено порівнянням з відомими розв'язками таких класичних задач, як: задачі Стефана, поведінки міжфазної границі при фазових переходах I роду із врахуванням сегрегації, моделюванні комірчастого росту кристалів та росту зерен при рівномірному охолодженні розплаву.

6. За допомогою розробленого програмного продукту проведено комп'ютерні експерименти та отримано параметри виробничого процесу для вирощування нового за складом матеріалу ( $Sb_2Te_3$ ): швидкість вирощування  $V=18$  мм/год, температура нагрівачів  $T=760^{\circ}C$ , що дозволило уникнути проведення низки реальних експериментів з їх пошуку.

7. Удосконалено методику проведення технологічного процесу отримання термоелектричного матеріалу шляхом застосування побудованих моделей дифузійних та теплових процесів, що супроводжуються фазовими переходами I роду для пошуку оптимальних умов вирощування. Застосування розробленого програмного продукту для пошуку оптимальних параметрів проведення експерименту дозволило скоротити час вирощування методом зонної плавки злитків телуриду вісмуту ( $Bi_2Te_3$ ) при середніх розмірах зразків  $350 \times 20$  мм у середньому з 22 до 18 годин, тобто майже на 20%.

8. Результати роботи впроваджено у ТОВ «Інтерм», ТОВ «ВальСофт» та навчальний процес кафедри фізики напівпровідників і наноструктур Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича. Прогнозований економічний ефект від використання розробленої комп'ютерної системи за оцінками ТОВ «Інтерм» становитиме 10%.

## СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

- [1] L. Shumylyak, V. Zhikharevich, and S.Ostapov, "Modeling of impurities segregation phenomenon in the melt crystallization process by the continuous cellular automata technique", *Applied Mathematics and Computation*, Vol. 290, pp. 336-354, 2016.
- [2] В. Жихаревич, и Л. Шумиляк, "Использование непрерывных клеточных автоматов для моделирования процессов теплопроводности в системах с фазовыми переходами первого рода", *Международный научный журнал "Компьютинг"*, том 12(2), с. 142-150, 2013.
- [3] Л.М. Шумиляк, В.В. Жихаревич, та С.Е. Остапов, "Клітинно-автоматне моделювання перерозподілу домішки під час кристалізації розплаву", *Вісник Хмельницького національного університету*, № 1(257), с. 242-250, 2018.
- [4] Л. М. Шумиляк, В. В. Жихаревич, та С. Е. Остапов, "Дослідження методу асинхронних клітинних автоматів при застосуванні в задачах теплопровідності", *Системи обробки інформації*, № 1(152), с. 74-79, 2018.

- [5] Л.М. Шумиляк, В.В. Жихаревич, и С.Э. Остапов, “Моделирование явления сегрегации примеси в процессе кристаллизации расплава методом непрерывных клеточных автоматов”, *Прикладная дискретная математика*, № 1(31), с. 104-118, 2016.
- [6] В. В. Жихаревич, и Л. М. Шумиляк, “Аппроксимация решения нестационарного уравнения теплопроводности методом вероятностных непрерывных асинхронных клеточных автоматов для одномерного случая”, *Компьютерные исследования и моделирование*, т. 4(2), с. 293-301, 2012.
- [7] В.В. Жихаревич, Л.М. Шумиляк, Л.Т. Струтинская, и С.Э. Остапов, “Построение и исследование непрерывной клеточно-автоматной модели процессов теплопроводности с фазовыми переходами первого рода”, *Компьютерные исследования и моделирование*, т. 5(2), с. 141-152, 2013.
- [8] Л.М. Шумиляк, В.В. Жихаревич, та С.Е. Остапов, «Комп'ютерна система для моделювання, оптимізації та керування процесом зонного вирощування кристалів», *Науковий вісник Чернівецького університету “Комп'ютерні системи та компоненти”*, т. 6(1), с. 80-85, 2015.
- [9] В. Жихаревич, Л. Шумиляк, и С. Остапов, “Автоматизация управления процессом выращивания кристаллов при вертикальной зонной плавке”, *Автоматизированные технологии производства*, № 1(15), с. 36-42, 2017.
- [10] L. Shumylyak, V. Zhikharevich, and S. Ostapov, “Cellular automata modeling of impurities segregation in the melt crystallization process”, *International Journal of Computing*, Vol. 14(4), pp. 216-226, 2015.
- [11] L. Shumylyak, and V. Zhikharevich, “Application of Method of Continuous Asynchronous Cellular Automata for Simulation of Heat Conduction with First Order Phase Transitions”, in *Proc. Third International Conference “High Performance Computing”*, Kyiv, 2013, pp. 358–361.
- [12] Л.М. Шумиляк, та В.В. Жихаревич, “Особенности моделирования процессов диффузии та теплопроводности методом непрерывных асинхронных клеточных автоматов”, на *XX міжнародній науково-практичній конференції “Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я” (MicroCAD-2012)*, Харків, 2012, с. 52.
- [13] Л.М.Шумиляк, та В.В. Жихаревич, “Моделювання процесів теплопроводності із фазовими переходами першого роду методом непрерывных асинхронных клеточных автоматов”, на *XXI міжнародній науково-практичній конференції “Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я” (MicroCAD-2013)*, Харків, 2013, с. 56.
- [14] В.В. Жихаревич, та Л.М. Шумиляк, “Система пошуку оптимальних параметрів керування вирощуванням легованих матеріалів на основі клітинно-автоматної моделі процесу”, на *XXII міжнародній науково-*

*практичній конференції “Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров’я” (MicroCAD-2014), Харків, 2014, с. 237.*

- [15] В.В. Жихаревич, та Л.М. Шумиляк, “Побудова моделі процесу вирощування монокристалів за допомогою методу асинхронних клітинних автоматів для проведення оптимізаційних обчислювальних експериментів”, *на III міжнародній науково-практичній конференції “Проблеми інформатики та комп’ютерної техніки”*, Чернівці, 2014, с. 114-116.
- [16] В.В. Жихаревич, та Л.М. Шумиляк, “Використання методу рухомих клітинних автоматів при моделюванні процесів росту кристалів”, *на XXIII міжнародній науково-практичній конференції “Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров’я”*, Харків, 2015, с. 43.
- [17] Л.М. Шумиляк, та В.В. Жихаревич, “Дослідження умов виникнення концентраційного переохолодження за допомогою клітинно-автоматної моделі процесу зонної плавки матеріалу”, *на XV міжнародній науково-технічній конференції “Проблеми інформатики та моделювання”*, Одеса, 2015, с. 115.
- [18] В. В. Жихаревич, та Л. М. Шумиляк, “Особливості паралельної організації процесів клітинно-автоматного моделювання в операційній системі Windows”, *на міжнародній науково-практичній конференції “Проблеми інформатики та комп’ютерної техніки” (ПКТ-2016)*, Чернівці, 2016, с. 84.
- [19] В. Жихаревич, та Л. Шумиляк, “Оптимізація програми клітинно-автоматного моделювання зонного вирощування кристалів”, *на міжнародній науковій конференції, присвяченій 80-річчю від дня народження М.П. Ленюка*, Чернівці, 2016, с. 126-127.
- [20] Л. Шумиляк, та В. Жихаревич, “Шляхи прискорення клітинно-автоматних обчислень програмними засобами”, *на III міжнародній науково-технічній конференції “Інформатика, управління та штучний інтелект”*, Харків, 2016, с. 94.

## АНОТАЦІЯ

*Шумиляк Л.М.* Моделювання процесів кристалізації сплавів методом неперервних клітинних автоматів. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 «Математичне моделювання та обчислювальні методи». – Вінницький національний технічний університет, Міністерство освіти і науки України, Вінниця, 2018.

Дисертаційна робота присвячена розвитку та реалізації науково-практичних засад математичного моделювання технологічних процесів кристалізації бінарних сплавів за допомогою методу неперервних асинхронних клітинних автоматів.

Метою дослідження є підвищення ефективності процесу вирощування кристалів шляхом моделювання його динаміки на основі розробки асинхронних клітинно-автоматних моделей дифузійних та теплових явищ з фазовими переходами першого роду.

Здійснено імітаційне моделювання процесу направленої кристалізації розплавів з урахуванням сегрегації і залежності температури фазового переходу від складу матеріалу, що, за певних умов, може призводити до явища концентраційного переохолодження і нерівномірної геометрії фронту кристалізації. Отримана кількісна модель процесів теплопровідності та дифузії на основі неперервних клітинних автоматів, яка, на відміну від попередніх, дозволяє отримати розв'язок задачі теплопровідності в будь-який момент часу.

Проведене зіставлення вже відомих теоретичних і експериментальних даних та результатів чисельних розв'язків для декількох задач теплопровідності з відповідними результатами обчислювальних експериментів, що проводились із застосуванням методу асинхронних клітинних автоматів. Результати порівняння підтверджують адекватність представленої моделі та можливість її застосування на практиці.

Удосконалено методику проведення технологічного процесу отримання багатокомпонентних сплавів методом зонної плавки шляхом застосування алгоритму пошуку оптимальних умов вирощування.

Розроблений програмний продукт, який реалізує клітинно-автоматну модель процесу теплопровідності, покликаний підвищити ефективність виробництва якісного термоелектричного матеріалу шляхом проведення обчислювальних експериментів. Результати роботи впроваджено у ТОВ «Інтерм», ТОВ «ВальСофт» та навчальний процес кафедри фізики напівпровідників і наноструктур Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича.

**Ключові слова:** фазовий перехід першого роду, клітинний автомат, теплопровідність, сегрегація, фронт кристалізації, ріст зерен, зонна плавка.

## АННОТАЦИЯ

*Шумиляк Л.М.* Моделирование процессов кристаллизации сплавов методом непрерывных клеточных автоматов. – Квалификационный научный труд на правах рукописи.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 01.05.02 «Математическое моделирование и вычислительные методы». – Винницкий национальный технический университет, Министерство образования и науки Украины, Винница, 2018.

Диссертация посвящена развитию и реализации научно-практических основ математического моделирования технологических процессов кристаллизации бинарных сплавов при помощи метода непрерывных асинхронных клеточных автоматов.

Целью исследования является повышение эффективности процесса выращивания кристаллов путем моделирования его динамики на основе разработки асинхронных клеточно-автоматных моделей диффузных и тепловых явлений с фазовыми переходами первого рода.

Осуществлено имитационное моделирование процесса направленной кристаллизации расплавов с учетом сегрегации и зависимости температуры фазового перехода от состава материала, что, при определенных условиях, может приводить к явлению концентрационного переохлаждения и неравномерной геометрии фронта кристаллизации.

Получена количественная модель процессов теплопроводности и диффузии на основе непрерывных клеточных автоматов, которая, в отличие от предыдущих, позволяет получить решение задачи теплопроводности в любой момент времени.

Проведено сопоставление уже известных теоретических и экспериментальных данных и результатов численных решений для некоторых задач теплопроводности с соответствующими результатами вычислительных экспериментов, проводимых с применением метода асинхронных клеточных автоматов. Результаты сравнения подтверждают адекватность представленной модели и возможность ее применения на практике.

Усовершенствована методика проведения технологического процесса получения многокомпонентных сплавов методом зонной плавки путем применения алгоритма поиска оптимальных условий выращивания.

Разработанный программный продукт, реализующий клеточно-автоматную модель процесса теплопроводности, призван повысить эффективность производства качественного термоэлектрического материала путем проведения вычислительных экспериментов. Результаты работы внедрены в ООО «Интерм», ООО «ВальСофт» и учебный процесс кафедры физики полупроводников и наноструктур Черновицкого национального университета имени Юрия Федьковича.

**Ключевые слова:** фазовый переход первого рода, клеточный автомат, теплопроводность, сегрегация, фронт кристаллизации, рост зерен, зонная плавка.



## ABSTRACT

*Shumylyak L.M.* Continuous cellular automata modeling of alloy crystallization processes. – Qualification scientific work on the rights of manuscripts.

Thesis for obtaining the scientific degree of the Candidate of Technical Sciences in specialty 01.05.02 “The mathematical modeling and numerical methods”. – Vinnytsia National Technical University, Ministry of Education and Science of Ukraine, Vinnytsia, 2018.

This thesis describes development and implementation of scientific principles of mathematical modeling of first ordered phase transformations processes by using continuous asynchronous cellular automata method.

The purpose of this study is to increase efficiency of crystal growth process by modeling its dynamics based on the development of asynchronous cellular automaton models of diffusion and thermal phenomena with first-order phase transitions.

The actual scientific and applied objective of developing new methods for modeling diffusion and thermal processes with phase transitions and introducing them into the laboratory of semiconductor thermoelectric material science has been set and solved. This allows to significantly improve the efficiency of research by reducing cost and time.

A description of the method of cellular automata in the application to the diffusion and thermal processes simulation with phase transformations and the algorithm implementation of the asynchronous CA-approach. The calculation of one CA-interaction time, which enables to reflect not only the qualitative, but also the quantitative aspect of the modeled process, is present to determine the parameters of the process at specific moments in time. The CA-model for reproduction of the process of crystallization of binary solutions, taking into account the segregation and the dependence of the temperature of the phase transition from the composition of the material is presented. This, in case the critical crystal growth rate is exceeded, can lead to a concentration overcooling phenomenon and, accordingly, to the uneven geometry of the crystallization front. The CA-model is presented. It allows to simulate the process of crystals cell growth and the grains growth with uniform cooling of the melt.

A comparison of already known theoretical and experimental data and the results of numerical solutions for certain problems of thermal conductivity to the corresponding results of computational experiments carried out using the method of asynchronous cellular automata has been made.

The analysis of numerical methods for the objectives set in this thesis has demonstrated the universality of the CA-method which, unlike classical methods, can be used with minor modifications in all considered cases.

Simulation of the process of alloys directed crystallization was performed taking into account segregation and dependence of the phase transition temperature on the material. This can, under certain conditions, lead to concentrated overcooling and uneven geometry of crystallisation front.

A quantitative model of the processes of diffusion and heat conductivity through continuous cellular automata is obtained. This model, unlike previous ones, provides a solution to the problem of heat conductivity at any point in time.

Increase in the requirements towards quality of semiconductor materials leads to modernization of existing technologies to obtain them. An acute problem in the manufacture of various semiconductor materials obtained by zone melting is to increase the percentage of output of useful material for future use. Obviously, this percentage is influenced by growing conditions. Search for optimal parameters to obtain materials can usually be performed on the basis of actual experiments, but this leads to additional economic costs. At the same time, computer models building, obtaining and holding them over a number of computational experiments optimization can significantly reduce these costs.

A comprehensive testing of the constructed model was conducted to confirm the adequacy of its application. It demonstrated the high accuracy and flexibility of the proposed model. The correspondence of the simulation results to the method of continuous cellular automata was tested for the solution of the standard problem of heat conductivity with first order phase transition and diffusion, Stefan's problem for the interphase boundary behavior modeling, taking into account segregation, for modeling crystals cell growth and grain growth with uniform cooling of the melt.

Methodology for conducting a technological process to obtain multicomponent alloys by the method of zone melting was improved by application of the searching algorithm of optimal growing conditions.

The automated control of the experimental setup of zone cultivation has been performed. It makes it possible to cultivate crystals with high accuracy adherence to the necessary experimental conditions. This in its turn allows for obtaining output material that meets high quality requirements.

The software product is developed that runs cellular automata model of thermal conductivity and is intended to increase the efficiency of thermoelectric material quality through computational experiments. The results of the work have been introduced into "Intern" Ltd, "ValSoft" Ltd and to the educational process of the Department of Semiconductor Physics and Nanostructures of Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University.

**Keywords:** first order phase transition, cellular automata, heat conductivity, segregation, front of crystallization, grains growth, zone melting.

Підписано до друку 03.09.2018 р. Формат 60x84/16  
Папір офсетний. Наклад 100 прим. Зам. № 114.  
Виготівник: Яворський С.Н.  
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ЧЦ №18 від 17.03.2009 р.  
58000, м. Чернівці, вул. І. Франка, 20, оф.18, тел. 099 73 22 544

