

Жихаревич В.В.

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

Шумиляк Л.М.

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

Останов С.Е.

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

Д'яченко Л.І.

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

Миронів І.В.

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

КЛІТИННО-АВТОМАТНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТЕПЛОВИХ ПРОЦЕСІВ, ЩО ВИНИКАЮТЬ ПІД ЧАС КРИСТАЛІЗАЦІЇ СПЛАВІВ

Робота присвячена розвитку та реалізації науково-практичних засад математичного моделювання технологічних процесів кристалізації бінарних сплавів і підвищенню ефективності процесу вироцунвання кристалів шляхом моделювання його динаміки на основі розроблення асинхронних клітинно-автоматних моделей дифузійних і теплових явищ із фазовими переходами першого роду. Здійснено імітаційне моделювання процесу направленої кристалізації розплавів з урахуванням сегрегації й залежності температури фазового переходу від складу матеріалу, що за певних умов може призводити до явища концентраційного переохолодження й нерівномірної геометрії фронту кристалізації. Отримана кількісна модель процесів теплопровідності й дифузії на основі неперервних клітинних автоматів, яка, на відміну від попередніх, дає змогу мати розв'язок задачі теплопровідності в будь-який момент часу. Проведене зіставлення вже відомих теоретичних та експериментальних даних і результатів чисельних розв'язків для декількох задач теплопровідності з відповідними результатами обчислювальних експериментів, що проводилися із застосуванням методу асинхронних клітинних автоматів. Результати порівняння підтверджують адекватність представленої моделі та можливість її застосування на практиці. Удосконалено методіку проведення технологічного процесу отримання багатоконпонентних сплавів методом зонної плавки шляхом застосування алгоритму пошуку оптимальних умов вироцунвання. Розроблений програмний продукт, який реалізує клітинно-автоматну модель процесу теплопровідності, покликаний підвищити ефективність виробництва якісного термоелектричного матеріалу шляхом проведення обчислювальних експериментів.

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

Постановка проблеми. У сучасному світі імітаційне моделювання є ефективним засобом дослідження та проектування складних динамічних систем і процесів. Потреба в імітаційному моделюванні зростає у зв'язку з дорогими та/або неможливими дослідженнями над реальним об'єктом, а також через довготривалість проведення реального експерименту. Так, задачі чисельного моделювання неоднорідних динамічних систем дають змогу спостерігати еволюційні закономірності таких систем у режимі реального часу, особливо коли мова йде про задачі з нелі-

нійними параметрами матеріалів, складними граничними та початковими умовами, фазовими переходами з рухомими межами тощо. Але в 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. У реальних практичних задачах вона часто застосовується в найпростіших випадках з низкою обмежень

і припущень. У зв'язку з цим останнім часом усе 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 (далі – КА). Він не тільки забезпечує опис фізичних властивостей матеріалу, а й може передбачати зміни на мікрорівні. Зокрема, процеси теплоперенесення природним чином апроксимуються неперервними моделями клітинних автоматів [1, с. 126; 2, с. 267].

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Теорія КА відома з 40-х рр. ХХ століття. Уперше ця ідея запропонована Джоном фон Нейманом для опису процесів самовідтворення в біології й техніці. Цей метод застосовують у математиці та фізиці, а також у біології, економіці, соціології, інформатиці тощо через свою простоту. Так, вони широко застосовуються для моделювання еволюційних, імовірнісних, газо- та гідродинамічних процесів [3, с. 77].

Робота [4, с. 444] стала значним кроком у розвитку уявлень про концентраційне переохолодження. У ній не тільки обґрунтований «первісний» критерій концентраційного переохолодження, а й з урахуванням адекватності моделі також запропоновано його модифікований варіант [4, с. 447]. Проте практичного застосування видозмінений критерій концентраційного переохолодження не отримав. Досить актуальним завданням є опис рівномірного твердіння розплавів у малих об'ємах з метою дослідження динаміки утворення зародків і росту зерен [5, с. 5508; 6, с. 4772]. При цьому процесами теплопровідності зазвичай нехтують, оскільки розглядаються порівняно малі (1 мм) фрагменти зразків. Натомість досить суттєвим є врахування поверхневої енергії, кристалграфічної орієнтації та інших дрібнозернистих факторів.

Розвиток електронної техніки залежить насамперед від характеристик матеріалів, що використовуються для її виробництва. Зростання вимог до якості багатокомпонентних сплавів зумовлює модернізацію наявних технологій їх отримання. Досить актуальним завданням у виробництві кристалів є підвищення відсотка виходу корисного для подальшого використання матеріалу. Очевидно, що на цей відсоток впливають умови вирощування. Пошук оптимальних параметрів отримання матеріалів зазвичай можна виконувати на основі реальних експериментів, але це призводить до додаткових економічних витрат. Водночас

побудова комп'ютерних моделей процесів отримання матеріалів і проведення над ними низки обчислювальних оптимізаційних експериментів дає змогу значно скоротити ці витрати.

Постановка завдання. Актуальність роботи полягає в побудові клітинно-автоматної моделі процесу кристалізації сплавів шляхом застосування методів імітаційного моделювання. Метою дослідження є розроблення моделі дифузійних і теплових процесів з фазовими переходами, побудованої за допомогою методу асинхронних клітинних автоматів, яка б дала можливість дослідникам у рамках єдиної математичної моделі, представленої у вигляді системи ітераційних рівнянь, вирішити проблему емпіричного підбирання параметрів експерименту шляхом моделювання теплових процесів, не обмежуючись додатковими спрощеннями.

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

Виклад основного матеріалу дослідження. Сутність моделювання процесів теплопровідності за допомогою клітинних автоматів полягає в такому: зразок розбивається на сукупність однакових клітин, однаково чином з'єднаних між собою. Усі комірки утворюють так звану решітку клітинного автомата. Решітки можуть бути різної розмірності залежно від розмірності системи, що моделюється.

Уміст комірок клітинно-автоматного поля являє собою окремий лінійний масив з m деяких характеристик. Для нашого випадку основними є температура клітини T ; концентрація домішки C ; внутрішня теплота H , яка враховується під час моделювання фазових переходів і визначає відношення концентрації домішки в рідкій і твердій фазах. На початку розрахунків теплової або дифузійної динаміки клітинно-автоматне поле ініціюється заданими значеннями температури, концентрації або інших характеристик. Процес моделювання асинхронним методом являє собою ітераційний цикл клітинно-автоматних взаємодій і передбачає циклічне виконання трьох типових кроків:

1. На клітинно-автоматному полі випадковим рівноймовірним чином вибирається деяка клітина

$i = 1$ із цілочисельними координатами x_i, y_i, z_i .

2. Випадковим рівномірним чином вибирається деяка сусідня клітина $i = 2$ із цілочисельними координатами x_2, y_2, z_2 . Як схему сусідства прийнято окіл Неймана, тобто для двовимірного випадку в клітині є тільки чотири сусіда.

3. Відбувається клітинно-автоматна взаємодія між двома клітинами.

Уміст клітин КА-поля може набувати дійсних неперервних значень.

Шляхом декомпозиції великої досліджуваної системи на маленькі частинки (спільномірні з клітинами КА) отримана система ітераційних рівнянь (1).

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

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

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

Тут $i = 1, 2$ – значення індексу, що відповідає вибраній і сусідній клітині відповідно, T – темпе-

ратура, A – коефіцієнт температуропровідності, η – коефіцієнт теплопровідності, q – питома теплоємність, ρ – питома густина, C – концентрація домішки, D – коефіцієнт дифузії домішки. При цьому нижніми індексами S та L позначено відповідні параметри для твердої й рідкої фаз, також $H_{\text{пл}}^i$ – прихована теплота плавлення, $T_{\text{пл}}(0)$ – температура плавлення при нульовій концентрації домішки, K_0 – рівноважний коефіцієнт сегрегації домішки, $\text{tg}(\alpha)$ – тангенс кута нахилу концентраційної залежності температури плавлення (крива *Solidus*).

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 й шосте – процес кристалізації, сьоме й восьме рівняння мають місце за відсутності градієнта температур, тобто в разі рівномірного охолодження.

Знайдено час однієї клітинно-автоматної взаємодії шляхом проведення низка обчислювальних експериментів, сутність яких полягала в порівнянні клітинно-автоматної динаміки за різної кількості комірок N клітинно-автоматного поля з конкретним розв'язком нестационарного рівняння теплопровідності (дифузії). Отже, час однієї клітинно-автоматної взаємодії для тривимірного випадку, коли КА-поле налічує $N_x \times N_y \times N_z$ клітин, час взаємодії дорівнює:

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

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

Аналізуючи рівняння (2), можна дійти висновку, що збільшення розмірності поля КА призводить до збільшення кількості клітинно-автоматних взаємодій, яку варто провести протягом деякого модельного проміжку часу, але при цьому також збільшується й 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 з 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 на час розрахунків.

Для підтвердження адекватності моделі (1) проведемо порівняння розв'язку, отриманого за

допомогою КА-моделювання, з аналітичним і чисельним розв'язком для декількох варіантів задач.

Розглянемо випадок теплопровідності для одновимірного однорідного зразка з постійним коефіцієнтом температуропровідності. При цьому припустимо, що теплофізичні характеристики не залежать від температури. У такому випадку задача зводиться до розгляду теплопередачі через плоску нескінченну пластину або ізольований стержень. Процес теплопровідності в цьому разі описується диференціальним рівнянням і має аналітичний розв'язок [7, с. 11], 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.

Проведемо апробацію моделі (1) на прикладі нестационарної задачі теплопровідності з урахуванням фазових переходів першого роду, так званої задачі Стефана. Класичним прикладом задачі теплопровідності з рухомою границею поділу фаз може слугувати задача промерзання вологого ґрунту.

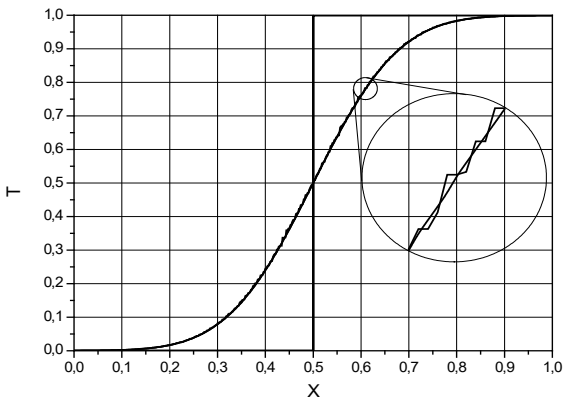


Рис. 1. Графік розподілу температури в зразку в момент часу $t = 0,01$ с, $N = 500$; суцільна лінія – аналітичний розв'язок, ламана – клітинно-автоматний розв'язок; у правій частині рисунка – збільшений у десять разів фрагмент температурного розподілу

Результати обчислювальних експериментів для КА-моделі вздовж осі x у межах похибки клітинно-автоматного «шуму» збігаються між собою й з відповідними результатами чисельного рішення

рівнянь теплопровідності для заданої задачі [8, с. 13]. Проведено дослідження цих результатів на предмет стійкості рішення й 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 й кількості вузлів сітки при кінцево-різницевих схемах. Окрім цього, отримана абсолютна стійкість КА-моделі, на відміну від явної кінцево-різницевої схеми, де не виконується закон збереження енергії і спостерігається нестійка її поведінка.

Під час моделювання сегрегації для побудови температурного розподілу в 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 й прихованої теплоти плавлення. У цьому разі система рівнянь (1) майже не змінюється: не враховується лише напрямлений рух флуктуацій внутрішньої енергії, який описують останні 2 рівняння системи.

Проведемо низку обчислювальних експериментів, окремий приклад яких представлено на рис. 2. Наведені результати розрахунків розподілу відносної концентрації домішки вздовж фрагменту зразка в процесі кристалізації цілком узгоджуються з експериментальними даними.

Адекватність клітинно-автоматної моделі (1) перевіримо також на моделюванні явища концентраційного переохолодження під час вирощування легованих кристалів, тобто розглянемо випадок, коли швидкість росту кристала більша за критичну (рис. 3).

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

Як термодинамічні параметри матеріалу обрано параметри системи олово-сурма ($Sn-Sb$), де олово – основний матеріал, а сурма – домішка з відносною концентрацією $C_0 = 0,01$, тобто 1%. Результати моделювання розподілу концентрації домішки у дво- або тривимірних випадках, де можна побачити різноманіття комірчастих структур, представлені на рис. 4.

З аналізу таблиці 1 і рис. 4 видно, що поява концентраційного переохолодження в процесі росту кристалів узгоджується з даними, описаними

в наукових джерелах: чим більша фактична швидкість V перевищує критично допустиму $V_{\text{крит}}$, тим більш яскраво проявляється явище комірчастого росту.

Розглянемо приклади моделювання різновидів форми фронту кристалізації під час концентраційного переохолодження: поява зародків кристалізації в розплаві неподалік границі розділу фаз, комірчастий ріст твердої фази виключно з поверхні монолітного кристалу. Плоский фронт кристалізації й відсутність нерівномірності розподілу домішки у

твердій фазі спостерігається при низьких швидкостях руху фронту кристалізації та високому градієнті температур на фронті кристалізації. У протилежному разі матиме місце явище концентраційного переохолодження. А знаходження оптимальних умов, тобто максимальної швидкості й найменшого градієнта, за яких не буде виникати концентраційне переохолодження, є основою для підвищення економічної ефективності виробництва кристалів.

Для складних задач теплопровідності порівняння наближеного КА-рішення проводилося

Таблиця 1

Основні параметри моделі для рис. 4.

Зразок:	а)	б)	в)	г)	д)	е)
$G, \text{ }^\circ\text{C}/\text{см}$	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}
$V_{\text{крит}}, \text{ мм}/\text{год}$	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

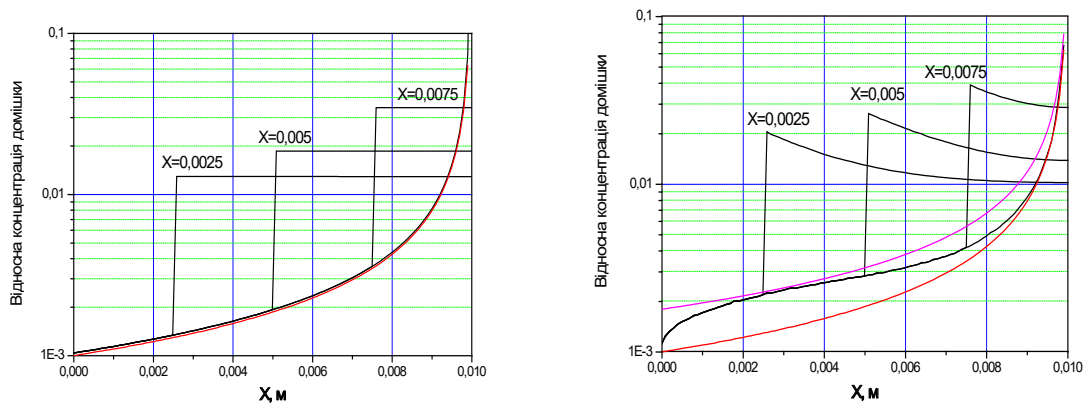


Рис. 2. Графік розподілу відносної концентрації домішки вздовж фрагменту зразка в процесі кристалізації; нижня крива – рівноважна кристалізація в умовах безмежно малої швидкості росту

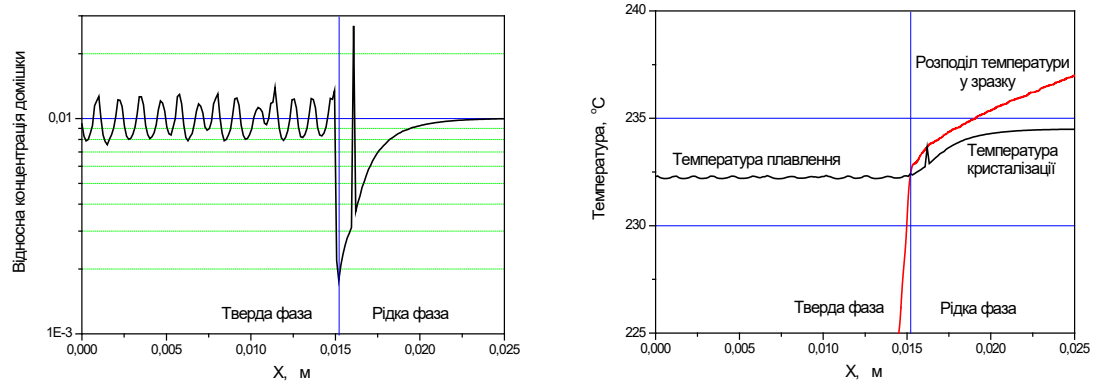


Рис. 3. Графіки розподілу відносної концентрації домішки (лівий графік) і температури в зразку, а також температури плавлення й кристалізації (правий графік); основні параметри процесу: градієнт температур $G = 2 \text{ }^\circ\text{C}/\text{см}$; $D_L = 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$; $V_{\text{крит}} = 30 \text{ мм}/\text{год}$; $V = 100 \text{ мм}/\text{год}$

з практичними результатами, отриманими під час експериментальних досліджень. Проведено низку контрольних експериментів. Отримано такі результати: для підібраних параметрів процесу моделювання вирощування кристалу телуриду вісмуту (Bi_2Te_3), за яких явище концентраційного переохолодження в моделі не виникало й спостерігався плоский фронт кристалізації, реальне відхилення фронту кристалізації від плоскої форми в результаті проведення лабораторних експериментів не перевищувало допустимого діапазону (~7%). Під час використання як домішки свинцю, який не застосовувався у виробництві раніше, отримано злиток, розподіл Pb у якому не відрізняється більше ніж на 5% від розподілу, отриманого в результаті обчислювального експерименту.

Для моделювання динаміки утворення зародків і росту зерен досліджено задачу рівномірного твердіння розплавів у малих об'ємах (рис. 6). Параметри обчислювальних експериментів: розміри КА-поля 250×250 ; розміри однієї клітини – 1 мкм. Параметри матеріалу аналогічні параметрам алюмінію з домішкою міді. Проведемо порівняння отриманих результатів моделювання з експериментальними даними, представленими в літературі [9, с. 60]. Аналізуючи результати обчислювальних експериментів, спостерігається зменшення розмірів зерен і збільшення їх густини зі збільшенням швидкості охолодження. Ці результати цілком узгоджуються з раніше описаною в літературі картиною процесу [9, с. 62], де підтверджено той факт, що при однаковому значенні коефіцієнта дифузії в разі збільшення швидкості охолодження розплаву середня довжина дрейфу флуктуацій внутрішньої енергії зменшується, а отже, і зменшуються середні розміри зерен і збільшується густина їх розподілу (рис. 5).

Розроблено комп'ютерну систему для збільшення ефективності процесу зонної плавки шляхом пошуку оптимальних умов вирощування, поліпшення точності регулювання температури росту термоелектричного матеріалу. Можливість пошуку оптимальних параметрів моделювання дає змогу отримати якісний злиток за максимально коротким часом (рис. 6). Використовуючи запропоновану програму моделювання та автоматизованого управління процесом зонної плавки, можемо визначити оптимальні параметри злитків з мінімумом розкиду складу. Результати експлуатації системи для пошуку оптимальних параметрів процесу вирощування продемонстрували її практичну цінність. Зокрема, час вирощування телуриду вісмуту (Bi_2Te_3) при середніх розмірах

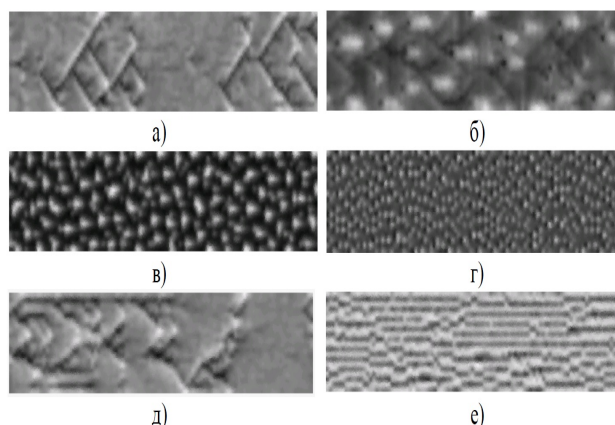


Рис. 4. Приклади різновидів нерівномірності розподілу концентрації домішки внаслідок концентраційного переохолодження (комірчастого росту кристалу)

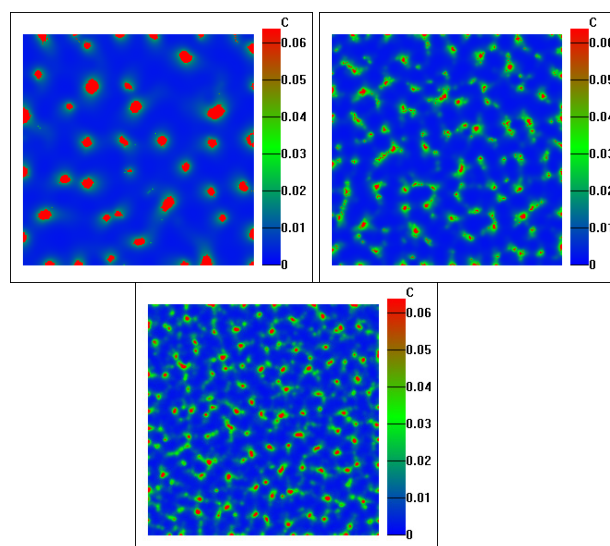


Рис. 5. Графік розподілу концентрації домішки при різних швидкостях охолодження розплаву, отриманий при КА-моделюванні: а) – 0,10 C/c; б) – 10 C/c; в) – 100 C/c

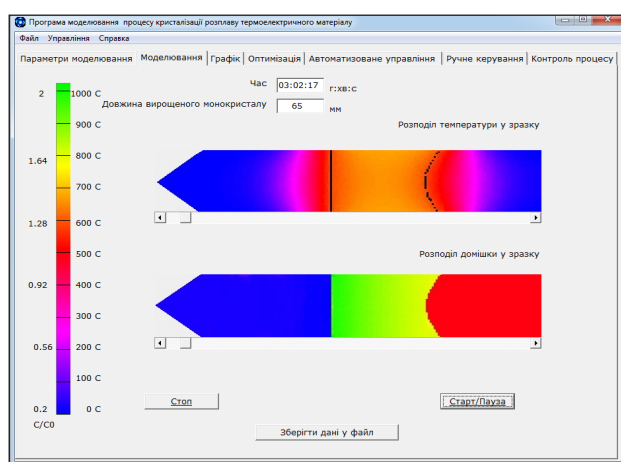


Рис. 6. Інтерфейс програми управління процесом вертикальної зонної плавки: вкладка моделювання процесу

зразків 350×20 мм вдалося зменшити в середньому з 22 до 18 годин, тобто майже на 20%.

При цьому явища концентраційного переохолодження не спостерігалось, оскільки в протилежному разі вирощені злитки були б крихкими та непридатними ані до алмазної різки, ані до подальшого використання в термоелектричних елементах. Крім того, відхилення фронту кристалізації від плоскої форми також не перевищувало допустимого діапазону, що підтверджувалося вимірюваннями радіального розподілу питомої електропровідності й термо-е.р.с., які суттєво залежать від розподілу складу матеріалу. Водночас 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 дає змогу проводити низку обчислювальних експериментів відносно нових складів матеріалу й тим самим відмовитися від використання методу «спроб і помилок».

Висновки. У роботі запропоновано застосування методу асинхронних клітинних автоматів для побудови імітаційної моделі процесів, що виникають під час кристалізації сплавів, перевірено й підтверджено адекватність її застосування та розроблено програмний продукт для використання в лабораторіях термоелектричного матеріалознавства, що дасть можливість суттєво підвищити ефективність досліджень за рахунок зменшення вартості виробництва та скорочення часових витрат.

Список літератури:

1. Бобков С.П., Войтко Ю.В. Использование систем клеточных автоматов для моделирования нелинейных задач теплопроводности. *Химия и химическая технология*. 2009. Том 52. № 11. С. 126–128.
2. Лиманова Н.И., Мамзин Е.А., Матвеев С.Г. Моделирование процессов теплообмена. *Вестник Самарского государственного аэрокосмического университета*. 2009. Вып. 3. № 19. С. 265–269.
3. Бандман О.Л. Клеточно-автоматные модели пространственной динамики. *Системная информатика*. 2005. Вып. 10. С. 57–113.
4. Mullins W.W., Sekerka R.F. Stability of a planar interface during solidification of a dilute binary alloy, *J. Appl. Phys.* 1964. V. 35. № 20. P. 444–451.
5. Zheng C., Raabe D. Interaction between recrystallization and phase transformation during intercritical annealing in a cold-rolled dual-phase steel: A cellular automaton model. *Acta Mater.* 2013. № 61. P. 5504–5517.
6. Zheng Ch., Raabe D., Li D. Prediction of post-dynamic austenite-to-ferrite transformation and reverse transformation in a low-carbon steel by cellular automaton modeling. *Acta Mater.* 2012. Vol. 60. P. 4768–4779.
7. Кузнецов Г.В., Шеремет М.А. Разностные методы решения задач теплопроводности : учебное пособие. Томск : ТПУ, 2007. 172 с.
8. Аринштейн Э.А. Промерзание влажного грунта, *Вестник Тюменского государственного университета*. 2010. № 6. С. 11–14.
9. Krupiński M., Labisz K., Dobrzański L., Rdzawski Z. Image analysis used for aluminium alloy microstructure investigation. *Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering*. 2010. Vol. 42. P. 58–65.

Zhikharevich V.V., Shumylyak L.M., Ostapov S.E., Diachenko L.I., Myroniv I.V. CELLULAR AUTOMATA SIMULATION OF THERMAL PROCESSES WHEN ALLOYS CRYSTALLIZATION

This work describes development and implementation of scientific principles of mathematical modeling of first ordered phase transformations processes and is presented 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. 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 crystallization 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. 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. 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.

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