

Мамзин Евгений Анатольевич

**Высокопроизводительные клеточные автоматы с ре-  
конфигурируемым шаблоном и их применение для мо-  
делирования неоднородных динамических систем**

05.13.18 – математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена в Тольяттинском государственном университете

Научный руководитель: доктор технических наук, доцент,  
Лиманова Наталия Игоревна

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
профессор, Лобанов Алексей Иванович  
  
доктор физико-математических наук,  
профессор, Леонтьев Виктор Леонтьевич

Ведущая организация: ГОУ ВПО «Самарский государственный  
университет», г. Самара

Защита диссертации состоится «30» июня 2011 года, в 13.00 часов, на заседании диссертационного совета Д 212.264.03 в ГОУ ВПО «Тольяттинский государственный университет» по адресу: 445667, Тольятти, ул. Белорусская, 14, Г-208 (зал заседаний).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Тольяттинского государственного университета.

Автореферат разослан «\_\_\_» мая 2011 г.

Учёный секретарь  
диссертационного совета  
Д 212.264.03



к.п.н. Пивнева С.В.

## Общая характеристика работы

### Актуальность темы

В диссертационной работе рассматриваются задачи численного моделирования неоднородных динамических систем. Эти задачи являются актуальными, так как позволяют проследить эволюционные закономерности подобных систем в режиме реального времени. Аналитическое решение дифференциальных уравнений, описывающих поведение таких систем, занимает продолжительное время, полученные решения могут получиться настолько сложными, что наблюдение динамики процессов в реальном режиме времени окажется невозможным. Математическое моделирование является мощным инструментом исследования сложных динамических систем, которые выступают в качестве моделей реальных физических процессов. Эффективное решение задач реальных размерностей требует применения высокопроизводительных средств вычислений и развития численных методов.

Одним из таких методов является метод клеточных автоматов. Наиболее эффективно клеточные автоматы используются для описания различных фазовых и бифуркационных переходов, где коллективное поведение системы определяется локальным поведением составляющих элементов. Например, они с успехом применяются в таких задачах как движение ансамблей живых организмов, моделирование различных физических явлений, начиная с элементарных явлений диффузии вещества и тепловых процессов и заканчивая явлениями, описываемыми уравнениями Навье-Стокса и Кортевега де Фриза, для расчета напряженности материалов, моделирования разрывов, деформаций и электрических явлений.

В настоящее время наибольшее применение клеточные автоматы нашли в задачах моделирования гидро- и газодинамических, эволюционных, поведенческих, колебательных и различных вероятностных процессов, что обусловлено сравнительной простотой их реализации, предрасположенностью к распараллеливанию и большими перспективами дальнейшего использования. Вопросам применения клеточных автоматов посвящены исследования многих отечественных и зарубежных учёных. Среди них Малинецкий Г.Г., Шакаева М.С., Лобанов А.И., Биндера К., von Neumann J., Martin O., Toffoli T., Margolus N., Wolfram S., Moore F., Cipra B., Gacs P., Gardner M., Gutowitz H. и др.

Однако известные клеточные автоматы не обладают достаточным быстродействием для моделирования неоднородных динамических систем задач в больших масштабах и на подробных сетках. Поэтому совершенствование данного численного метода является весьма перспективным.

Работы по теме диссертации выполнялись в рамках реализации аналитической ведомственной целевой программы Министерства образования и науки РФ «Развитие научного потенциала высшей школы (2009-2010 годы)» по мероприятию 1 (№ темы 1.2.09).

## **Цель работы**

Целью работы является повышение эффективности вычислений на основе клеточных автоматов за счет применения реконфигурируемых шаблонов и их использование для моделирования сложных динамических систем.

## **Основные задачи исследования**

- Разработка высокопроизводительных клеточных автоматов с реконфигурируемым шаблоном на регулярных сетках.
- Разработка дискретной математической модели поперечных колебаний поверхности вязкой жидкости без учета близости дна и ее программной реализации на основе метода клеточных автоматов.
- Разработка моделей формо- и порообразования в неравновесных малых металлических частицах на основе высокопроизводительного клеточного автомата.
- Разработка комплексов программ, реализующих указанные модели неоднородных динамических систем на основе метода высокопроизводительных клеточных автоматов с реконфигурируемым шаблоном.
- Проведение вычислительных экспериментов на основе разработанных моделей неоднородных динамических систем.

## **Объект исследования**

В качестве объектов исследования выбрано несколько конкретных задач моделирования неоднородных динамических систем:

1. Моделирование колебательных процессов на поверхности вязкой жидкости без учета близости дна.
2. Моделирование процессов формообразования пентагональных малых частиц, получаемых методом электролитической диссоциации.
3. Моделирование порообразования в неравновесных малых металлических частицах.

## **Предмет исследования**

Предметом исследования являются клеточные автоматы с реконфигурируемым шаблоном на регулярных сетках, возможность и эффективность применения реконфигурируемых шаблонов в методе клеточных автоматов в задачах моделирования неоднородных динамических систем.

## **Методы исследования**

В качестве аппарата исследований применялись методы вычислительной математики и математической физики, использовались методы численного анализа, математическое и компьютерное моделирование.

### **Научная новизна**

1. Предложен численный метод высокопроизводительных клеточных автоматов с реконфигурируемым шаблоном на гексагональной сетке.
2. Разработана дискретная математическая модель поперечных колебаний поверхности вязкой жидкости без учета близости дна с использованием предложенного метода.
3. Разработаны модели формо- и порообразования неравновесных малых металлических частиц на основе предложенного клеточного автомата с диффузионным механизмом релаксации, с учетом влияния неоднородного поля напряжений и тепловых флуктуаций.
4. Разработаны комплексы программ, реализующие модели неоднородных динамических систем на основе метода высокопроизводительных клеточных автоматов с реконфигурируемым шаблоном.
5. Проведены вычислительные эксперименты на основе разработанных моделей неоднородных динамических систем.

### **Практическая значимость исследования**

1. Разработанный метод высокопроизводительных клеточных автоматов с реконфигурируемым шаблоном позволяет повысить эффективность вычислений в задачах моделирования неоднородных динамических систем.
2. На примере разработанных комплексов программ продемонстрирована принципиальная возможность моделирования динамических систем, описываемых неоднородными гиперболическими и параболическими уравнениями, на основе предложенного метода численного моделирования клеточными автоматами с реконфигурируемым шаблоном.
3. На основе численного исследования моделей формо- и порообразования неравновесных малых металлических частиц получены эволюционные закономерности изменения пространственной конфигурации частицы с учетом влияния неоднородного поля напряжений и тепловых флуктуаций.

### **Достоверность результатов**

Достоверность результатов исследования быстродействия клеточных автоматов с реконфигурируемым шаблоном подтверждается данными, полученными на основе вычислительного эксперимента для задачи моделирования поперечных колебаний поверхности вязкой жидкости.

Адекватность моделей формо- и порообразования неравновесных малых металлических частиц, а также результаты вычислительных экспериментов, проведенных на их основе, подтверждаются данными экспериментальных исследований, представленных в отечественных и зарубежных литературных источниках. Результаты исследований обсуждались на Российских и международных научных конференциях.

### **Основные положения, выносимые на защиту**

1. Численный метод высокопроизводительных клеточных автоматов с реконфигурируемым шаблоном на гексагональной сетке.
2. Дискретная математическая модель поперечных колебаний поверхности вязкой жидкости без учета близости дна и ее реализация на основе метода клеточных автоматов с реконфигурируемым шаблоном.
3. Модели формо- и порообразования в неравновесных малых металлических частицах с учетом и влияния неоднородного поля напряжений и тепловых флуктуаций, разработанные на основе метода высокопроизводительных клеточных автоматов с реконфигурируемым шаблоном.
4. Комплексы программ, реализующие разработанные модели неоднородных динамических систем на основе предложенного метода.
5. Результаты вычислительных экспериментов на основе разработанных моделей неоднородных динамических систем.

### **Апробация работы**

Материалы, отражающие содержание диссертационной работы опубликованы. Результаты обсуждены и одобрены специалистами на следующих научных конференциях:

1. V Всесибирском конгрессе женщин-математиков (в день рождения С.В.Ковалевской) (Красноярск, 2008).
2. Международной междисциплинарной научной конференции «Четвертые Курдюмовские юбилейные чтения: «Синергетика в естественных науках» (Тверь, 2008).
3. XVII Международной конференции «Физика прочности и пластичности материалов» (Самара: СамГТУ, 2009).
4. Всероссийской конференции «Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях» (Москва, 2009).
5. Научно-практической конференции «Инновации в условиях развития информационно-коммуникационных технологий» (Сочи, 2008, 2009).
6. IV Международной школе «Физическое материаловедение» (Тольятти, 2009).
7. Седьмой Всероссийской научной конференции с международным участием «Математическое моделирование и краевые задачи» (Самара, 2010).
8. Второй Международной научной конференции «Моделирование нелинейных процессов и систем» (Москва, 2011).

### **Публикации**

По теме диссертации опубликовано 14 работ, из них 4 – в изданиях, рекомендованных ВАК.

## Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, 5 глав, и списка литературы, состоящего из 104 наименований источников отечественных и зарубежных авторов. Общий объем диссертации составляет 152 страницы.

## Основное содержание работы

В **первой главе** диссертации содержится описание задач моделирования неоднородных динамических систем и применяемых методов их решения, обзор и классификация клеточных автоматов.

В первом разделе рассматривается применение аналитического метода для решения задач моделирования неоднородных динамических систем.

Во втором разделе приводится решение задачи моделирования колебательных процессов поверхности жидкости конечноразностным методом.

Третий раздел содержит решение задач моделирования неоднородных динамических систем методом клеточных автоматов. Здесь приводится классификация клеточных автоматов, особенности, достоинства и недостатки использования. Рассматривается пример моделирования поперечных колебаний металлической струны с закрепленными концами и колебательных процессов на поверхности жидкости с помощью метода клеточных автоматов.

Четвертый раздел посвящен рассмотрению известных методов распараллеливания алгоритмов вычислений, основанных на локальности взаимодействий, таких как разностные схемы и клеточные автоматы.

**Вторая глава** посвящена способу усовершенствования метода клеточных автоматов за счет использования реконфигурируемых шаблонов.

Первый раздел посвящен рассмотрению работы клеточных автоматов на всех основных типах регулярных сеток.

Проведено исследование работы клеточных автоматов с использованием реконфигурируемого шаблона и без его использования для всех типов сеток:

- для клеточного автомата на квадратной сетке были рассмотрены двухтактные реконфигурируемые шаблоны для окрестностей Неймана и Мура,

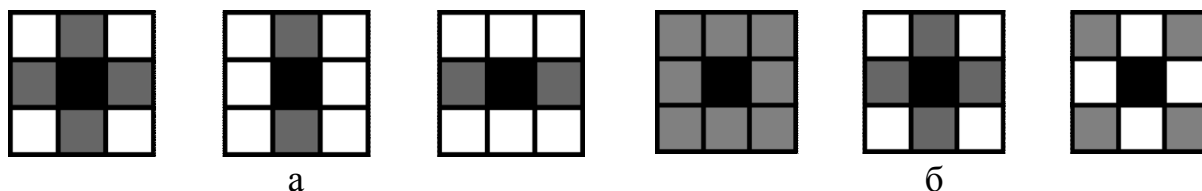


Рис. 1. Двухтактные реконфигурируемые шаблоны клеточного автомата на квадратной сетке для окрестности Неймана (а) и Мура (б)

- для клеточного автомата на гексагональной сетке рассмотрены двухтактный и трехтактный реконфигурируемые шаблоны.

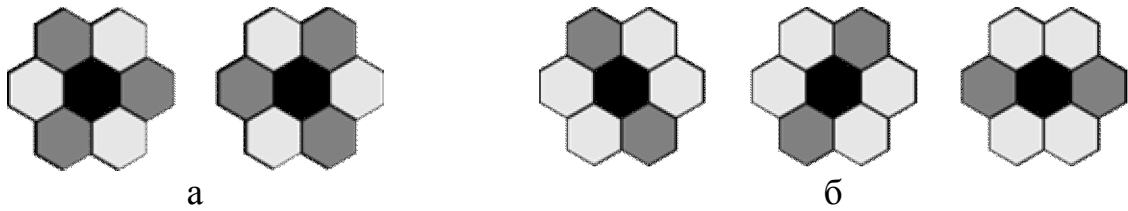


Рис. 2. Двухтактные (а) и трехтактные (б) реконфигурируемые шаблоны клеточного автомата на гексагональной сетке

- для клеточного автомата на треугольной сетке рассмотрен двухтактный реконфигурируемый шаблон для окрестности с двенадцатью соседними элементами.

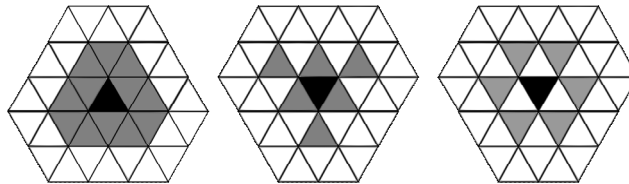


Рис. 3. Двухтактный реконфигурируемый шаблон клеточного автомата на треугольной сетке

Исследована эффективность использования двухтактных и трехтактных реконфигурируемых шаблонов. Результаты исследования приведены в диссертации.

Второй раздел содержит описание дискретной математической модели поперечных колебаний поверхности вязкой жидкости без учета близости дна на основе метода клеточных автоматов. Решение поставленной задачи основывается на представлении колебаний поверхности вязкой жидкости через локальные взаимодействия ячеек клеточного автомата.

Границы области моделирования являются неподвижными ячейками, в которых значения величин отклонения от положения равновесия  $u_{i,j}^t = 0$ , в остальных случаях значение данной величины определяется в два этапа:

1. на первом этапе рассчитывается скорость движения каждой ячейки моделируемой области. Для расчета с помощью клеточного автомата на квадратной сетке формула будет иметь следующий вид:

$$v_{i,j}^t = v_{i,j}^{t-1} + A \left( u_{i,j-1}^t + u_{i,j+1}^t + u_{i-1,j}^t + u_{i+1,j}^t - 4u_{i,j}^t \right) d\tau,$$

Здесь  $v_{i,j}^t, v_{i,j}^{t-1}$  - скорость движения ячейки с координатами  $i, j$  в момент времени  $t, t-1$  соответственно;  $u_{i,j}^t$  - величина отклонения амплитуды от положения равновесия ячейки с координатами  $i, j$  в момент времени  $t$ ;  $A$  - коэффициент, отражающий характер распространения волны;  $d\tau$  - элементарный временной интервал – продолжительность одной итерации;



$u_{i,j-1}^t, u_{i,j+1}^t, u_{i-1,j}^t, u_{i+1,j}^t$  - величины амплитуд колебаний соседних элементов окрестности Неймана.

- на втором этапе выполняется расчет отклонения от положения равновесия каждой ячейки моделируемой области. Для клеточного автомата на квадратной сетке:

$$u_{i,j}^t = u_{i,j}^{t-1} + v_{i,j}^t dt .$$

Данный клеточный автомат реализован на всех рассмотренных типах сеток с применением и без применения реконфигурируемых шаблонов.

**Третья глава** содержит результаты моделирования волновых процессов на поверхности вязкой жидкости без учета близости дна с помощью клеточных автоматов на всех типах регулярных сеток.

В первом разделе приведены результаты исследования эффективности полученных моделей колебаний поверхности вязкой жидкости на всех типах регулярных сеток без использования реконфигурируемых шаблонов и с их использованием. Исследование базируется на разработанной во второй главе модели поперечных колебаний поверхности вязкой жидкости.

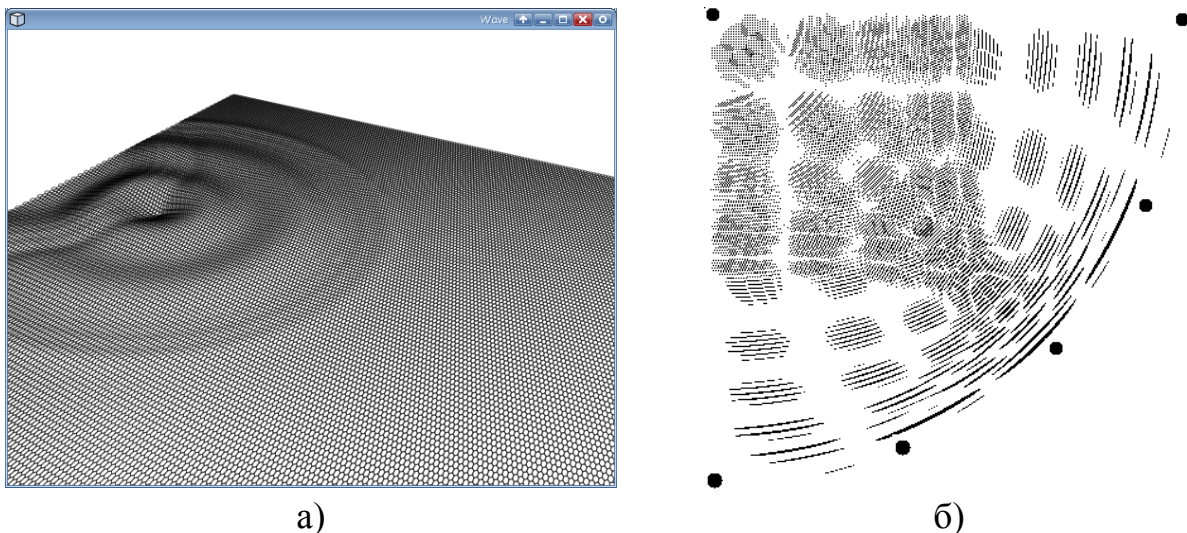


Рис. 4. Результат моделирования поперечных колебаний поверхности вязкой жидкости без учета близости дна: а – объемная визуализация, б – часть моделируемого пространства (вид сверху)

На рисунке 4(а) приведена объемная визуализация разработанной модели с помощью клеточного автомата на гексагональной сетке. На рисунке 4(б) представлена схема проведения вычислительного эксперимента для определения эффективности разработанных клеточных автоматов. Эксперимент начинается с отклонения амплитуды колебаний стартовой точки (в левом верхнем углу) от положения равновесия и продолжается до тех пор, пока расходящаяся волна не достигнет пяти точек вдоль фронта волны (см. Рис. 4(б)). Исследуемым параметром здесь является продолжительность расчетов для моделей на всех типах регулярных сеток для разных площадей области

моделирования. Результаты проведенных вычислительных экспериментов представлены на рисунках 5 и 6.

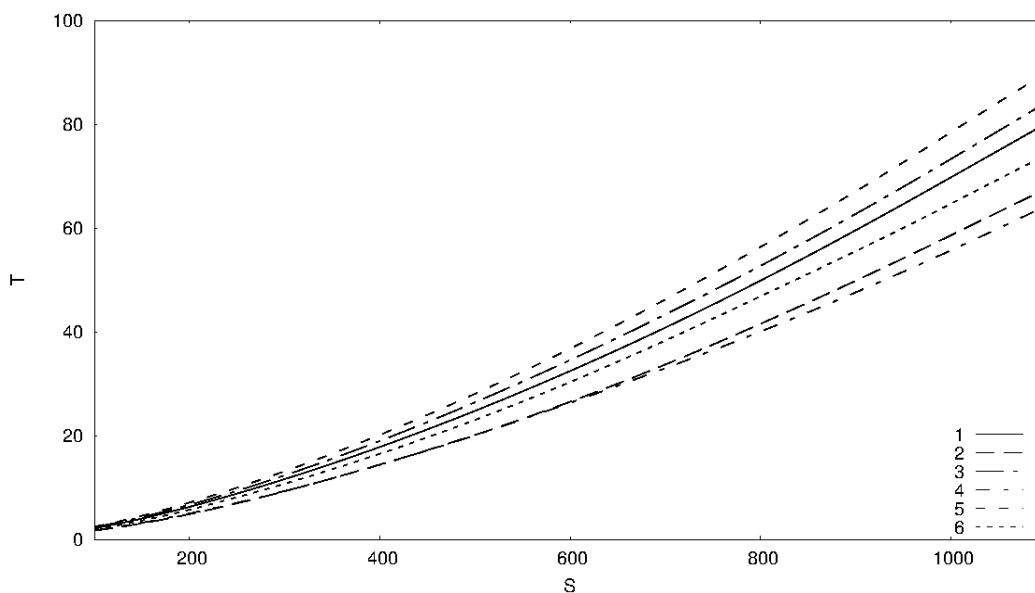


Рис. 5. График зависимости продолжительности расчетов от площади области моделирования

На рисунке 5 приведены результаты исследования быстродействия разработанных моделей для шести типов клеточных автоматов: 1 и 2 – квадратные клеточные автоматы с окрестностью Неймана без реконфигурируемого шаблона и с его использованием; 3 и 4 – шестигранные клеточные автоматы; 5 и 6 – четырехгранные клеточные автоматы с окрестностью Мура. Здесь время  $T$  измеряется в секундах, а под площадью  $S$  области моделирования понимается количество ячеек с порядком  $10^3$ .

Как видно из графика, наименьшей скоростью расчетов обладает клеточный автомат на квадратной сетке с окрестностью Мура, наибольшая скорость наблюдается в случае использования обычного клеточного автомата на квадратной сетке с окрестностью Неймана. Однако в случае использования реконфигурируемого шаблона, наиболее эффективным оказался клеточный автомат на гексагональной сетке с реконфигурируемым шаблоном.

Если за эффективность вычислений в данном случае взять отношение площади области моделирования к затраченному времени, то получим зависимость, представленную на рисунке 6.

Из графика видно, что эффективность клеточных автоматов на квадратной и гексагональной сетках с реконфигурируемыми шаблонами близки к друг другу, но при увеличении площади области моделирования эффективность гексагонального клеточного автомата начинает превышать эффективность клеточного автомата на квадратной сетке с окрестностью Неймана. Исходя из проведенных исследований, можно сделать вывод, что эффективность клеточного автомата на гексагональной сетке с использованием рекон-

фигурируемого шаблона на 20-23% превышает эффективность классического клеточного автомата на квадратной сетке.

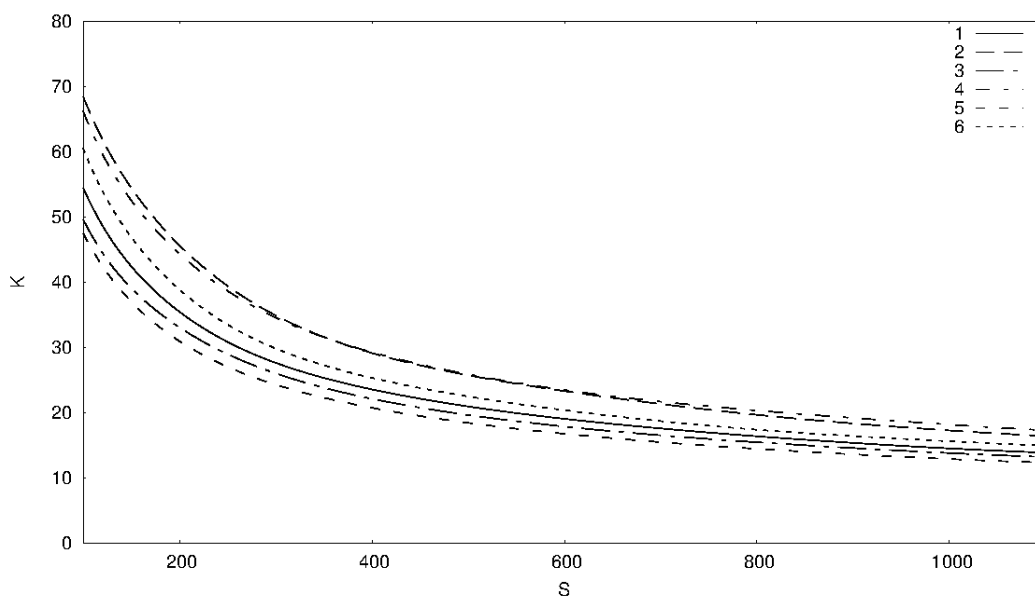


Рис. 6. График зависимости коэффициента эффективности разработанных клеточных автоматов от площади области моделирования

Второй раздел содержит результаты моделирования колебательных процессов на поверхности вязкой жидкости без учета близости дна с помощью метода клеточных автоматов на гексагональной сетке с двухтактным реконфигурируемым шаблоном.

**Четвертая глава** посвящена моделированию формо- и порообразования в неравновесных малых металлических частицах методом высокопроизводительных клеточных автоматов с реконфигурируемым шаблоном.

В первом разделе рассматривается физическая модель формо- и порообразования. Малые металлические частицы, образующиеся на начальных этапах процесса электрокристаллизации, являются неравновесными напряженными структурами с избыточной концентрацией дефектов вакансионного типа. Такие структуры вследствие термодинамической неустойчивости состояния будут релаксировать в метастабильное состояние, соответствующее одному из локальных минимумов термодинамического потенциала.

В работе рассматривались следующие физические модели релаксационных процессов, протекающих в них во время и после электрокристаллизации:

1. Модель структуры первого типа строилась на основе неоднородного уравнения диффузии без учета неоднородного поля напряжений, но с учетом стоков на дисклинационном ядре частицы и её поверхности. В основу моделирования релаксационных процессов была положена диффузионно-деформационная модель, согласно которой начальное состояние частицы ха-

рактируется избыточной концентрацией вакансий, неоднородным по объему значением коэффициента диффузии, что связано с наличием внутренних и внешних границ, на которых диффузия (самодиффузия) протекает гораздо активнее, чем в областях с кристаллической фазой. Рассмотрим неоднородное уравнение диффузии:

$$\frac{\partial C_v(\vec{r}, t)}{\partial t} = \text{div}(D_v(\vec{r}) \cdot \text{grad} C_v(\vec{r}, t)) + q_e(\vec{r}, t),$$

Здесь  $C_v(\vec{r}, t)$  - концентрация вакансий в точке с радиусом-вектором  $\vec{r}$  в момент времени  $t$ ,  $D_v(\vec{r})$  - коэффициент диффузии,  $q_e(\vec{r}, t)$  - плотность источника-стока, являющаяся заданной функцией.

Уравнение диффузии становится неоднородным, когда в объеме, где происходит чистая диффузия, имеются внешние источники-стоки диффундирующего компонента.

2. В модели структуры второго типа учитывалось распределение поля напряжений дисклинации. Соответствующее кинетическое уравнение можно записать в виде:

$$\frac{\partial C_v}{\partial t} = \text{div}(D_v(\vec{r}) \cdot \text{grad} C_v(\vec{r}, t)) - \alpha \cdot \text{grad}(\sigma(\vec{r})) + q_e(\vec{r}, t).$$

Здесь  $\alpha$  характеризует скорость вакансий на границе,  $\sigma(\vec{r})$  характеризует распределение механических напряжений по объему частицы.

Коэффициент самодиффузии экспоненциально зависит от температуры (соотношение Аррениуса):

$$D = D_0 \exp(-E_a / RT).$$

Здесь  $D_0$  - фактор диффузии,  $E_a$  - энергия активации,  $R$  - универсальная газовая постоянная.

Экспоненциальная зависимость коэффициентов самодиффузии от температуры наблюдается в широких температурных интервалах для подавляющего большинства твердых тел.

Выбор граничных и начальных условий определялся физикой процесса и морфологией частиц. Граничные условия задавались в зависимости от состояния поверхности частицы в начальный момент времени - ее температуры, структуры и свойств, граничащей с ней фазы. Простейший случай статических граничных условий - граничные условия 1-ого рода: внешняя поверхность - поверхность стока вакансий  $C_v(\vec{r}_b, t) = 0$ . Здесь  $\vec{r}_b$  задавалось уравнением поверхности частицы.

Метод клеточных автоматов позволяет реализовать динамические граничные условия. В этом случае массив клеток поверхности пересчитывается, при этом и форма, и свойства поверхности частицы в процессе диффузии изменяются. Граничные условия третьего рода позволяют отслеживать стоки на границах и являются более подходящими в условиях нестационарной диффузии:

$$(-D_v \cdot \text{grad} C_v(\vec{r}_b, t) \big|_{\vec{r}_b} \cdot \vec{n}) = \alpha \cdot C_v(\vec{r}_b, t).$$

Граничные условия третьего рода задаются при условии протекания процесса электроосаждения. Использовалась комбинация динамических гра-

ничных условий на поверхности частицы и потоковых на внутреннем дисклинационном стоке.

Во втором разделе приводится описание дискретной математической модели клеточного автомата для моделирования формообразования пентагональных малых металлических частиц. Процесс моделирования разделен на несколько этапов:

1. Анализ фазового состояния частицы на основе анализа текущего состояния ячеек клеточного автомата: кристаллическая фаза, аморфная фаза или образование поры. Вывод делается на основании текущего количества вакансий в ячейках моделируемой области.
2. Моделирование диффузии вакансий с учетом неоднородного распределения коэффициента диффузии по пяти межзеренным границам.

Данные границы образуются в процессе формообразования пентагональной частицы. Они располагаются таким образом, что угол между ними составляет 72 градуса. В центре частицы задавался сток вакансий, что обусловлено особенностью расположения точки пересечения межзеренных границ.

Расчет диффузии выполнялся по формуле:

$$n_{i,j}^{t+1} = n_{i,j}^t - D_{i,j} \cdot \frac{\sum_{k=1}^N n_k^t}{N}.$$

Здесь  $n_{i,j}^t$  – количество вакансий в ячейке  $i,j$ ;  $t$  – текущий момент времени,  $D_{i,j}$  – значение коэффициента диффузии в ячейке  $i,j$ ,  $n_k^t$  – количество вакансий в  $k$ -ой ячейке шаблона клеточного автомата;  $N$  – количество ячеек шаблона, принимающих участие в процессе расчета.

3. Моделирование движения вакансий по градиенту напряжений материала.

На данном этапе происходит расчет движения вакансий под действием неоднородного поля напряжений, сконцентрированным в геометрическом центре частицы и ослабевающим по мере удаления от него.

Здесь для каждой ячейки моделируемой области рассматривались соседние с ней ячейки. В зависимости от того, где больше оказывалась величина напряжений, туда осуществлялся перенос вакансий в количестве

$$C = K \cdot D_{i,j} \cdot |\sigma_{i,j} - \sigma_n|.$$

Здесь  $K$  – коэффициент, отражающий степень влияния данного вида переноса вакансий в системе относительно прочих видов переноса,  $D_{i,j}$  – коэффициент диффузии в текущей ячейке моделируемого пространства,  $|\sigma_{i,j} - \sigma_n|$  – абсолютная разность величин упругих напряжений в текущей и одной из соседних ячеек.

4. Моделирование тепловых флуктуаций вакансий с помощью вероятностного клеточного автомата.

В процессе формо- и порообразования нанообъектов, важную роль играют тепловые флуктуации частиц, поэтому их требуется учитывать при моделировании. Случайные блуждания вычислялись для всех четырех направ-

лений в аморфной матрице. Максимальное число вакансий  $n_{\max}$ , способных перейти в соседнюю ячейку пространства, зависело от числа вакансий в текущей ячейке и коэффициента тепловых флуктуаций  $Q$ :

$$n_{\max} = Q \cdot n_{i,j}.$$

#### 5. Пересчет распределения атомов вещества.

Так как в конечном итоге моделируется движение атомов вещества, а в основу модели заложено движение вакансий, то на данном этапе происходит пересчет количества вакансий вещества в число атомов, исходя из заданного изначально количества частиц в ячейке клеточного автомата. Именно на данном шаге происходит окончательная обработка состояния модели и подготовка данных для визуализации результата вычислений.

#### 6. Визуализация результата моделирования.

На последнем этапе осуществлялось отображение данных, полученных на предыдущих стадиях моделирования с использованием графических средств кросс-платформенного инструментария разработки программного обеспечения Qt.

В третьем разделе описываются особенности применения метода клеточных автоматов на гексагональной сетке и двухтактных реконфигурируемых шаблонов к разработанным моделям формо- и порообразования пентагональных малых металлических частиц. Приводятся вычислительные схемы алгоритмов для следующих этапов моделирования:

- а) Моделирование диффузии вакансий с учетом неоднородного распределения коэффициента диффузии по пяти межзеренным границам. Переход на клеточный автомат с гексагональной сеткой и двухтактным реконфигурируемым шаблоном позволил сократить суммарное количество вычислений и в конечном счете увеличить скорость работы клеточного автомата на 16%.
- б) Моделирование движения вакансий по градиенту напряжений в материале. Здесь в отличие от случая с квадратной элементарной ячейкой, на каждой итерации при расчетах учитываются только три соседних элемента, что позволяет дополнительно увеличить скорость вычислений на 10%.
- в) Моделирование тепловых флуктуаций вакансий вероятностным клеточным автоматом. В данном случае расчет случайного смещения вакансий происходит не по четырем соседним элементам как в случае обычного клеточного автомата на квадратной сетке, а по трем. Сокращение числа соседей на данном этапе оказало наибольший эффект на скорость вычислений и составило 23%. Обусловлено это тем, что функции нахождения случайных чисел являются наиболее ресурсоемкими и сокращение количества подобных вычислений положительно сказывается на производительности системы в целом.

В результате применения двухтактного реконфигурируемого шаблона на гексагональной сетке эффективность вычислений повысилась в сумме на

49% по сравнению с данной моделью, реализованной на квадратной сетке без использования реконфигурируемых шаблонов.

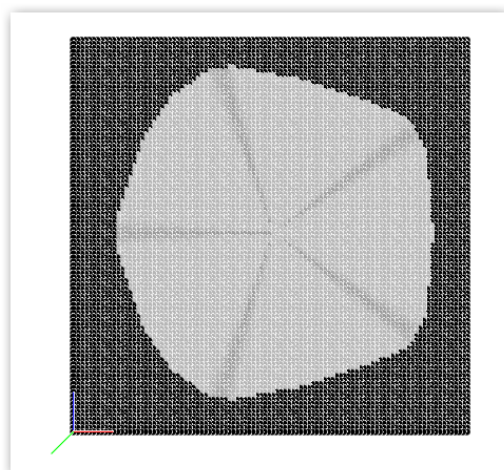
**Пятая глава** содержит результаты моделирования формо- и порообразования пентагональных малых металлических частиц предложенным клеточным автоматом с реконфигурируемым шаблоном.

В данной главе приведены результаты моделирования для трех процессов формообразования частиц:

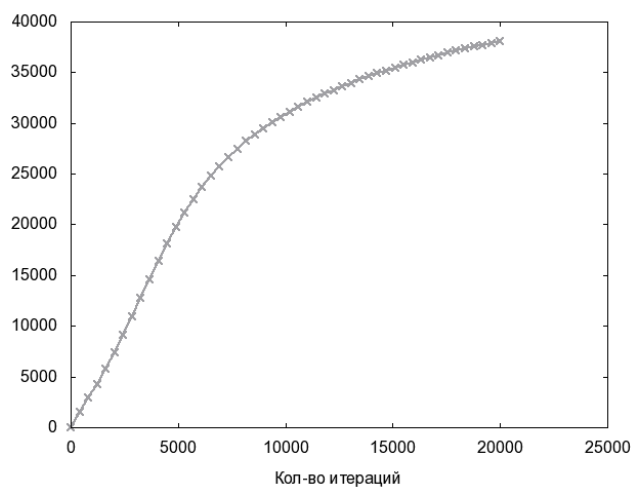
1. Формообразование пентагональной малой частицы без полостей. Основным механизмом релаксации в данном случае является диффузионный.

Вследствие неоднородности коэффициента диффузии, возникает поток вакансий, скорость которого определяется коэффициентом диффузии, а направление – положением стока вакансий.

Результатом компьютерного моделирования явилась модель пентагональной малой частицы, приведенная на рисунке 7(а), где представлено сечение декаэдра плоскостью, перпендикулярной оси симметрии пятого порядка и проходящей через центр декаэдра. Показано, что характер распределения коэффициента диффузии однозначно влияет на формообразование и эволюцию габитуса частицы.



а)



б)

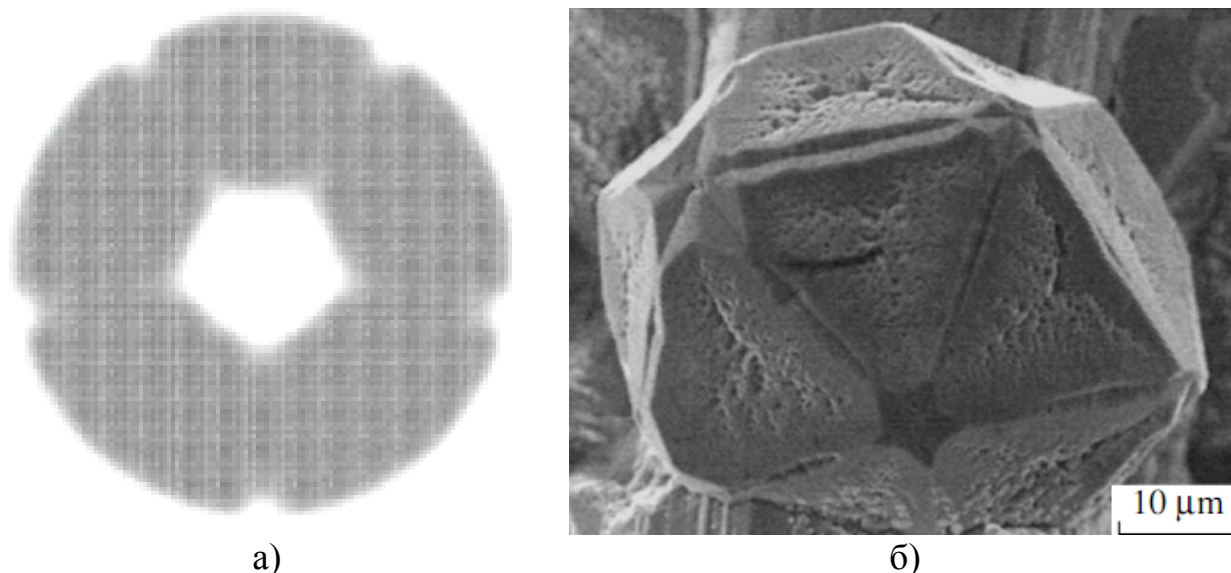
Рис. 7. Модель пентагональной малой частицы без полостей  
а – визуализация эволюции частицы; б – зависимость изменения площади сечения частицы от количества итераций

Процесс изменения размера частицы на этапе релаксации представлены на рисунке 7(б). График отражает зависимость площади сечения частицы от количества итераций, полученную в результате моделирования роста пентагональной малой частицы.

Данная модель является упрощенной и не учитывает влияния неоднородного поля напряжений, которое присуще всем наноструктурам на начальных этапах электрокристаллизации.

## 2. Эволюция частицы с учетом влияния неоднородного поля напряжений.

Рассмотрен процесс моделирования роста частицы с учетом поля напряжений. Пентагональная частица находится в аморфной матрице. При этом частица является напряженной структурой с неравновесными границами.



а) б)  
Рисунок 8. Процесс релаксации объемных напряжений в частице:  
а – визуализация эволюции частицы; б – фотография икосаэдрической частицы

На первом этапе в центре частицы образуется небольшая пора. Возникновение поры и ее рост происходит на начальном этапе релаксации напряжений. На рисунке 8(а) представлен момент времени через 10000 итераций после начала моделирования. Идет перестройка областей кристаллической фазы частицы вблизи границ с аморфной матрицей. Это свидетельствует об изменении внешней формы частицы в процессе релаксации. Как видно из рисунка 8(а), у частиц имеющих внутренние полости, могут появляться «канавки» на внешней поверхности вдоль ребер<sup>1</sup>. На рис. 8(б), приведена фотография икосаэдрической частицы, полученной экспериментально<sup>2</sup>.

## 3. Процесс порообразования в неравновесных малых частицах с учетом неоднородного поля напряжений материала и тепловых флуктуаций в аморфной фазе вещества.

Рассмотренная выше модель формо- и порообразования с учетом смещения вакансий по градиенту напряжений была дополнена эффектом тепловых флуктуаций частиц аморфной фазы вещества. При расчете модели были получены результаты, приведенные на рисунке 9. Из рисунка 9(а) видно, что в некоторых произвольных областях образуются поры малого размера и малые области вещества кристаллической фазы. Таким образом, малые области

<sup>1</sup> L.D. Marks, J. Cryst. Growth 61, 556 (193).

<sup>2</sup> I.S. Yasnikov. On Habit Modification in Pentagonal Small Particles // ISSN 1063-7850, Technical Physics Letters, 2008, Vol. 34, No. 11, pp. 944–945.



кристаллической фазы и поры имеют флуктуационное происхождение и могут как увеличиваться, так и уменьшаться вплоть до исчезновения с течением времени. Из рисунка видно, что в отличие от предыдущей модели без учета тепловых флуктуаций вещества получаемая структура представляет собой область кристаллической фазы, которая не является сплошной, а содержит некоторое количество хаотически расположенных пор разного размера.

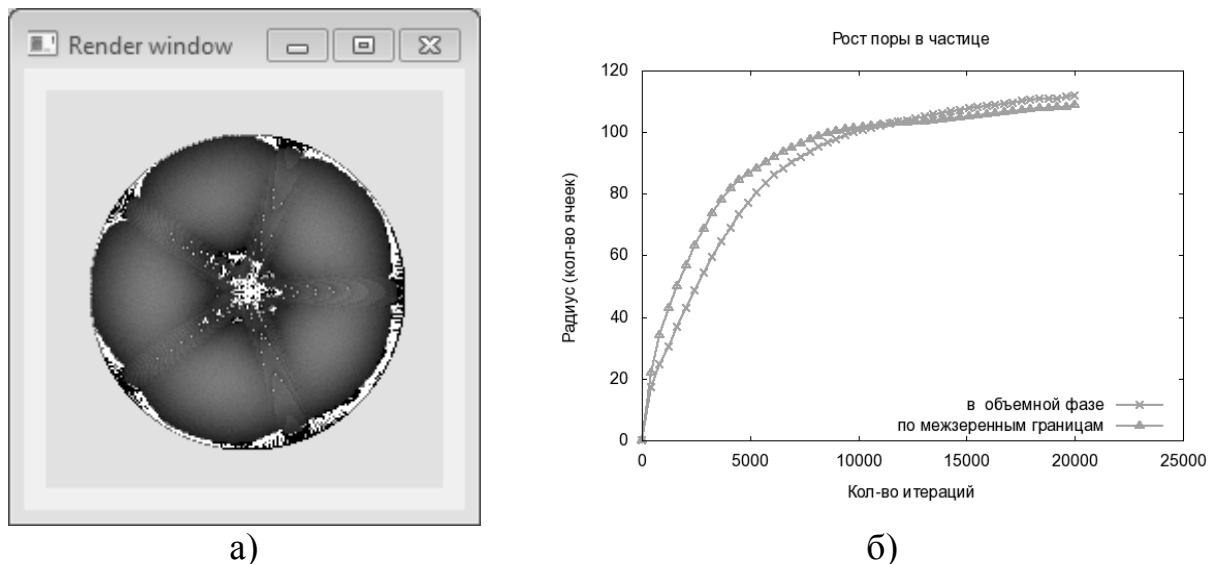


Рис. 9. Формообразование малой частицы с учетом тепловых флуктуаций: а – визуализация эволюции частицы в момент времени  $T=3000$  итераций; б – зависимость изменения радиуса поры от количества итераций

Наибольшим размером обладает центральная пора, которая вследствие флуктуаций заполняется несвязными группами атомов, образуя кристаллическое ядро или, так называемый «холодный мусор».

На рисунке 9(б) представлен график увеличения радиуса поры в процессе релаксации. Он отражает полученные зависимости радиуса поры от количества итераций в результате моделирования роста частицы. Здесь радиус измеряется количеством ячеек от центра частицы в газообразной фазе.

В процессе релаксации пора достигает предельного размера, то есть радиусы поры по направлениям межзеренных границ (максимальный радиус) и в объемной фазе (минимальный радиус) стремятся к своему пределу. Изменение скорости роста поры связано со сменой преобладающих в данный момент механизмов релаксации.

Полученную в результате моделирования и приведенную на рисунке 9(а) картину образования полостей в пентагональных малых частицах подтверждают экспериментальные исследования<sup>1,2</sup>, обнаружившие подобные полости после термообработки внутри икосаэдрических малых частиц металлов, что говорит об адекватности разработанных моделей.

<sup>1</sup> Ясников И.С., Викарчук А.А. К вопросу о существовании полостей в икосаэдрических малых металлических частицах электролитического происхождения // Письма в ЖЭТФ. – 2006. – Т. 83, № 1. – С. 46-49.

<sup>2</sup> A. L. Kolesnikova and A. E. Romanov, Pis'ma Zh. Tekh.Fiz. 33 (20), 73 (2007) [Tech. Phys. Lett.33, 886 (2007)].

## Основные результаты работы

1. Предложен численный метод высокопроизводительных клеточных автоматов, основанный на использовании реконфигурируемых шаблонов.
2. Разработаны клеточные автоматы с реконфигурируемым шаблоном на треугольной, квадратной и гексагональной сетках.
3. Разработана дискретная математическая модель поперечных колебаний поверхности вязкой жидкости без учета близости дна и ее программная реализация для клеточных автоматов на треугольной, квадратной и гексагональной сетках с использованием реконфигурируемых шаблонов.
4. На основе проведенного вычислительного эксперимента исследована эффективность разработанных клеточных автоматов для всех типов реконфигурируемых шаблонов. Выявлено, что при использовании клеточного автомата на гексагональной сетке с двухтактным реконфигурируемым шаблоном эффективность вычислений повышается на 23%.
5. Разработаны модели формо- и порообразования неравновесных малых металлических частиц на основе высокопроизводительного клеточного автомата на гексагональной сетке с применением двухтактного реконфигурируемого шаблона:
  - а) модель, учитывающая диффузионно-деформационный механизм формообразования;
  - б) модели с диффузионным механизмом перераспределения вакансий, с учетом влияния неоднородного поля напряжений в материале, а также с учетом влияния тепловых флуктуаций.
6. Разработан комплекс программ, реализующий рассмотренные варианты моделей формо- и порообразования в неравновесных малых металлических частиц. Применительно к данным моделям использование клеточных автоматов на гексагональной сетке с двухтактным реконфигурируемым шаблоном позволило увеличить эффективность вычислений на 49%.
7. Проведены вычислительные эксперименты на основе разработанных моделей формо- и порообразования. Получены зависимости изменения площади сечения и радиуса поры частицы от количества итераций в результате моделирования роста частицы. Разработанные модели и результаты вычислительных экспериментов подтверждают кристаллографические исследования, что говорит об адекватности разработанных моделей и полученных зависимостей.

## ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

### Публикации в изданиях, рекомендованных списком ВАК

1. Лиманова Н.И., Мамзин Е.А. Дискретная математическая модель детерминированного клеточного автомата и ее программная реализация // Информационные технологии, № 2, 2010. – С. 34 – 38.
2. Лиманова Н.И., Мамзин Е.А., Талалова Е.А., Викарчук А.А. Моделирование формообразования полостей в пентагональных малых частицах электролитического происхождения // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки, №2(19), 2009.– С. 209 – 216.
3. Лиманова Н.И., Мамзин Е.А., Матвеев С.Г. Моделирование процессов теплообмена // Вестник Сам. гос. аэрокосмич. ун-та им. акад. С.П.Королева. №3(19), 2009.– с.265 – 270.
4. Лиманова Н.И., Мамзин Е.А. Высокопроизводительные клеточные автоматы с реконфигурируемым шаблоном // Вектор науки Тольяттинского Государственного Университета, №1(15), 2011 – с. 28-30.

### Прочие публикации

5. Лиманова Н.И., Мамзин Е.А. Моделирование физических явлений на основе использования клеточных автоматов // V Всесибирский конгресс женщин-математиков (в день рождения С.В.Ковалевской): Материалы конференции, 15-18 января 2008 г. – Красноярск: РИО СФУ, 2008, с. 262 – 266.
6. Лиманова Н.И., Мамзин Е.А. Дискретное моделирование волновых процессов шестигранным клеточным автоматом // Материалы международной междисциплинарной научной конференции «Четвертые Курдюмовские Юбилейные чтения: «Синергетика в естественных науках» 10-13 апреля 2008 г. Тверь: ТГУ, 2008, с. 94 – 96.
7. Лиманова Н.И., Мамзин Е.А. Дискретное моделирование волновых процессов // Материалы научно-практической конференции «Инновации в условиях развития информационно-коммуникационных технологий». – М.: МГИЭМ, 2008. – с. 133 – 135.
8. Лиманова Н.И., Мамзин Е.А. Дискретное моделирование процесса диффузии в полупроводниках // Материалы Всероссийской научно-технической конференции «Актуальные проблемы радиоэлектроники и телекоммуникаций» 14-16 мая 2008 г. – Самара: СГАУ, 2008, с. 89-92.
9. Лиманова Н.И., Талалова Е.А., Мамзин Е.А., Викарчук А.А. Исследование формообразования полостей в пентагональных малых частицах электролитического происхождения // Физика прочности и пластичности материалов: Сб. тез. XVII Международной конф. – Самара: Сам-ГТУ, 2009. – С. 47.
10. Лиманова Н.И., Мамзин Е.А., Талалова Е.А., Викарчук А.А. Моделирование процессов формообразования полостей в пентагональных на-

- ночастичах // Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях: Тр. II Всероссийской конф. – М.: МИФИ, 2009. – С. 243 – 245.
11. Лиманова Н.И., Мамзин Е.А., Талалова Е.А. Дискретное моделирование формообразования частиц с пентагональной симметрией // Материалы научно-практической конференции «Инновации в условиях развития информационно-коммуникационных технологий» 1-10 октября 2009 г. – Сочи, 2009. – С. 124 – 127.
  12. Лиманова Н.И., Мамзин Е.А., Талалова Е.А., Викарчук А.А. Компьютерное моделирование процессов диффузии в нанобъектах электролитического происхождения // Сборник материалов IV Международной школы «Физическое материаловедение». – Тольятти: ТГУ, 2009. – с. 128-129.
  13. Лиманова Н.И., Мамзин Е.А. Дискретное моделирование процессов теплообмена в трубопроводах сложной формы // Тез. докл. МНТК, посв. Памяти Генерального конструктора Н.Д.Кузнецова «Проблемы и перспективы развития двигателестроения» – Самара: СГАУ, 2009. – С. 189.
  14. Лиманова Н.И., Талалова Е.А., Мамзин Е.А. Моделирование процессов образования полостей в неравновесных малых частицах // Математическое моделирование и краевые задачи: Тр. седьмой Всероссийской научной конференции с международным участием, Самара, 3 – 6 июня 2010 г., ч. 4. Самара: СамГТУ, 2010. – С. 116 – 119.