В.А. Кузьменко

ОПИСАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ В ДЕФОРМИРУЕМЫХ СРЕДАХ

In the article describes the behavior of cellular automata to expand and contract materials.

Клеточный автомат (КА) – набор клеток, образующих некоторую периодическую решетку с заданными правилами перехода, определяющими состояние клетки в следующий момент времени через состояние соседних клеток в текущий момент. Как правило, рассматриваются автоматы, где состояние определяется самой клеткой и ее ближайшими соседями. Обычно это кубическая решетка [1–3].

Клеточный автомат состоит из набора объектов (ячеек), зачастую образующих регулярную решетку. Состояние отдельно взятого i-го объекта (или ячейки) в момент времени t характеризуется некоторой переменной $N=N(\sigma_{ij}\ ,t,\ F_{external},\ F_{inside})$, которая может быть целым, действительным или комплексным числом либо представлять собой набор из нескольких чисел, где σ_{ij} – состояние соседних клеточных автоматов; t – время; $F_{external}$ – внешние силы; F_{inside} – внутренние силы. Рассматриваемые состояния ячеек изменяются синхронным образом через дискретные интервалы времени в соответствии с локальными правилами, которые могут зависеть от состояния переменных в ближайших соседних узлах. Со временем эти правила не меняются.

Отметим основные свойства классической модели клеточных автоматов.

Локальность правил. На новое состояние клетки могут влиять только элементы ее окрестности и сама клетка.

Однородность системы. Ни одна область решетки не может быть отлична от другой по каким-либо особенностям правила и т.п. Однако на практике решетка оказывается конечным множеством клеток (ведь невозможно выделить неограниченный объем данных). В результате могут возникнуть краевые эффекты: клетки, стоящие на границе решетки, будут отличны от остальных по числу соседей. Во избежание этого можно ввести периодические краевые условия.

Множество возможных состояний клетки конечно. Это условие необходимо, чтобы для получения нового состояния клетки требовалось конечное число операций. Отметим, что оно не мешает при решении прикладных задач использовать клетки для хранения чисел с плавающей точкой.

Значения во всех клетках меняются единовременно в конце итерации, а не по мере вычисления. В противном случае порядок перебора клеток решетки при совершении итерации существенно влиял бы на результат. Необходимо отметить, что на практике при решении определенных задач возникает потребность в отказе от последних трех свойств [1].

Алгоритм работы клеточного автомата

Используя теорию клеточных автоматов, опишем процесс усреднения плотности вещества между двумя ячейками. В общем случае ячейки содержат 4 класса веществ: расширяющееся вещество, сжимающееся вещество, по́ры и «препятствия». Стоит отметить, что последние необходимы для ограничения исследуемой области и придания некоторой формы расчетной области [3].

Усреднение плотности в ячейках описано отдельно для расширяющегося и сжимающегося вещества. Описано также усреднение на границе сред. Газовая фаза постепенно заполняется, а «препятствия» не меняют значения в своих ячейках.

Усреднение расширяющихся веществ.

Рассматриваем процесс усреднения на примере оксида алюминия. Вещество ***A*** (α-Al_2O_3) постепенно переходит в вещество ***B*** (γ-Al_2O_3). В некоторый момент времени происходит переход части вещества в другое вещество. Поскольку γ-Al_2O_3 больше в объеме α-Al_2O_3, то и вся ячейка при переходе ***A***→***B*** увеличивается в объеме, уменьшается ρ_n. В нашем случае увеличение объема провоцирует перетекание вещества в соседние ячейки [4].

В ходе анализа усреднения вещества между ячейками была выполнена классификация ячеек. В ячейках **I** рода образовалась γ-фаза. Ячейка **I** рода связана с ячейкой **II** рода, в которой γ-фаза не образовалась, но ячейка **II** рода может содержаться вещество ***B***, которое втекает, но не вытекает. Ячейка **III** рода содержит только вещество ***A***. В программе можно изменять вероятность перехода из ***A*** в ***B*** и количество вещества, перешедшего из ***A*** в ***B***.

Механизмы усреднения.

В нашем исследовании мы используем ячейки трех родов. Возможны пять комбинаций, каждая из которых имеет свои особенности (рис. 1).

Во всех случаях проводится аналогия с давлением в двух сосудах. Когда сосуды объединяют, давление в них становится одинаковым. В нашем случае происходит выравнивание общего количества материала в клетках, единственным отличием является разный процентный состав веществ в клетке.

При усреднении плотности расширяющихся веществ необходимо: 1) пропорционально усреднять фазы, входящие в кубические ячейки; 2) учитывать, что вещество B может «вытекать» только из ячеек, где оно образовалось.

Опишем каждую комбинацию, где

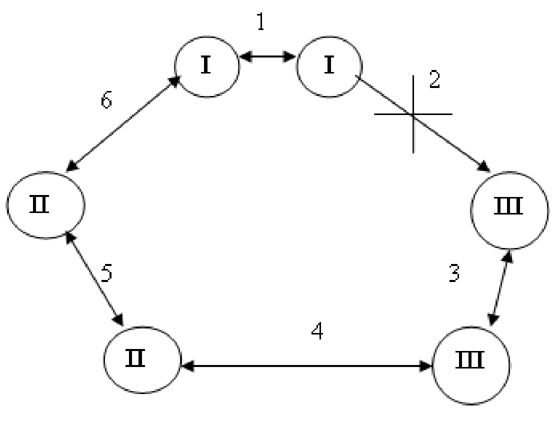

Рис. 1. Диаграмма взаимодействия расширяющихся ячеек.

A1, A2 – нормальная плотность α-фазы первой и второй клетки соответственно;

B1, B2 – нормальная плотность γ-фазы;

sA, sB – «среднее значение» фаз; 1) складываются вещества A1+A2 и B1+B2, берется среднее значение sA:=(A1+A2)/2, sB:=(B1+B2)/2 и присваивается каждой ячейке; 2) взаимодействия не существует по определению; 3) складываются вещества A1+A2, sA:=(A1+A2)/2 присваивается каждой ячейке; 4) определяется избыток вещества A в ячейке **II** рода. sA:=(A1+B1-1)/2. Определив избыток вещества, у ячейки **II** рода вычитаем sA, а к ячейке **III** рода прибавляем sA. В результате получаем две клетки с одинаковым количеством вещества; 5) предполагается, что вещество **B** не перетекает, так как ячейка **II** рода должна граничить с ячейкой, где произошел фазовый переход. Следовательно, передача вещества **B** ячейке **II** рода не происходит. sA:=(A1+B1+A2+B2)/2 A1:=sA-B1 A2:=sA-B2; 6) аналогично ситуации (1).

Все эти соотношения верны для расширяющихся веществ. Для сжимающихся веществ должны быть построены свои соотношения, которые отличны от расширяющихся [4].

Усреднение сжимающихся веществ.

Рассматриваем процесс усреднения на примере алюмосиликатов. Вещество ***A*** постепенно переходит в вещество ***B***. В некоторый момент времени происходит переход части вещества в другое вещество. Поскольку плотность ***A*** больше плотности ***B***, а при переходе ***A→B*** происходит сжатие объема, то образовавшиеся пустоты необходимо заполнить веществом из соседних клеток. Уменьшение объема в нашем случае есть перетекание вещества в соседние ячейки.

В ходе анализа перетекания (усреднения) вещества между ячейками, была выполнена классификация ячеек. В ячейках **I** рода произошел фазовый переход. В ячейке **II** рода фазовый переход не произошел. Установлено, что в случае усреднения плотности сжимающихся веществ необходимо определить ячейку с $\rho_n > 1$.

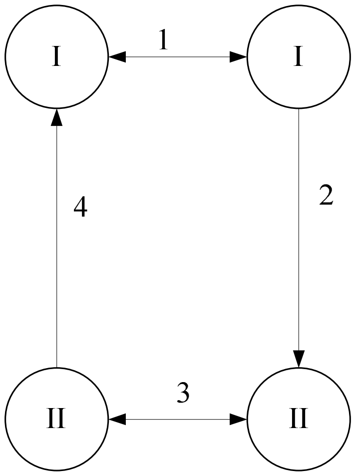

Рис.2. Диаграмма взаимодействия сжимающихся ячеек.

Избыток вещества делим на четыре части, получаем значение sD.

1, 2: A1:=A1+ sD, B1:=B1+ sD, а также A2:=A2- sD, B2:=B2- sD.

3, 4: передается только ***A*** фаза. sD содержит половину избыточного вещества. A1:=A1+ sD, A2:=A2- sD.

В данном случае основным принципом усреднения является одинаковая передача веществ каждой фазы. Избыточное вещество образуется на границе с расширяющимся веществом. В связи с этим необходимо разработать правила усреднения для клеточных автоматов, находящихся на границе двух сред.

<u>Усреднение двух фаз.</u>

Рассмотрим смешанный случай усреднения расширяющихся и сжимающихся веществ. В ячейке одновременно находится оксид алюминия и алюмосиликат. Мы не будем классифицировать ячейки по родам, так как число возможных комбинаций усредняемых веществ велико, а мы поставили перед собой задачу разработать общий принцип усреднения для данного типа ячеек.

Текущая ячейка ***A1***, содержащая одновременно оксид алюминия и алюмосиликат, сравнивается с соседней ячейкой ***A2***. В ячейке ***A2*** содержится либо алюмосиликат, либо оксид алюминия. В процессе усреднения между ячейками ***A1*** и ***A2*** передается именно та фаза, которую содержит ячейка ***A2***, причем процесс перетекания вещества может идти как в клетку ***A1***, так и в клетку ***A2***.

Возможен случай, когда ячейка ***A1*** целиком заполняется какой-либо одной фазой. Тогда ячейка меняет свой класс на сжимающуюся или расширяющуюся. Последнее условие добавлено не случайно, так как оно позволяет имитировать вытеснение алюмосиликата оксидом алюминия из своего местоположения в пространстве. Также это условие имитирует «движение» фаз вследствие их расширения или сжатия. Оксид алюминия может вытеснить алюмосиликат из своей ячейки, так как она расширяется.

Обоснование клеточного автомата с позиции тензорного исчисления

Вследствие фазового перехода **I** рода внутри клетки появляется внутреннее напряжение, и она начинает испытывать деформацию. Тензор деформации, представленный в формуле (1), является основной геометрической характеристикой деформированного состояния вещества [5]

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_k}\right) \equiv \frac{1}{2}\left(\nabla_i u_k + \nabla_k u_i\right), \qquad (1)$$

где u – вектор смещений.

Сумма диагональных элементов тензора ε_{ik}, т.е. величина ε_{kk}, равна относительному увеличению объема элемента среды при деформации [6]. Следовательно, полное изменение объема тела ΔV при деформации может быть записано в виде:

$$\Delta V = \int \varepsilon_{kk} dV . \qquad (2)$$

Рассмотрим формулу потока вакансий:

$$V_n = -\Omega j_n^0 , \qquad (3)$$

где Ω – атомный объем, j_n^0 – плотность потока вакансий на поверхности тела.

При деформации кристалла возникают силы упругости, стремящиеся восстановить начальную конфигурацию. В результате в твердом теле появляются механические напряжения, которые можно определить как силы, действующие на единичные площадки внутри кристалла. Тензор напряжений составляет $\sigma_{ik} = 2\mu\varepsilon_{ik}$, где μ – модуль сдвига [6].

Элементарный объем внутри напряженного тела должен оставаться в равновесии. Следовательно, необходимо выполнение условий равновесия напряжения на границе двух клеток $\sigma_{12} = \sigma_{21}$, $\sigma_{31} = \sigma_{13}$, $\sigma_{32} = \sigma_{23}$, или $\sigma_{ij}^1 = \sigma_{ij}^2$ [6].

На основании формул (1)-(3) можно сделать вывод, чтó происходит – «передача» атомов из одной клетки в другую или «перетекание» вещества из клетки в клетку. В результате система из двух клеток, имеющая одну общую грань, стремится уравновесить объем в клетках [4].

Заключение

Описанные выше правила удовлетворяют свойствам клеточных автоматов. Правила усреднения однозначно определяют состояние автомата в следующий момент времени:

локальность – каждая ячейка взаимодействует только с теми ячейками, с которыми у нее имеется общая грань;

однородность системы – данное свойство рассматриваем с той позиции, по которой для ячеек одного класса правила взаимодействия ячеек одинаковы. Между ячейками разных классов также определены правила поведения.

Множество возможных состояний ячейки конечно. Оно обусловлено дискретностью чисел в ЭВМ. Значения во всех клетках меняются единовременно.

---

1. Тоффоли Т., Марголус Н. Машины клеточных автоматов / пер. с англ. – М.: Мир, 1991. – 280 с.

2. Тарасевич Ю.Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы: Учебное пособие. – М.: Едиториал УРСС, 2002. – 112 с., ил.

3. Кузьменко В.А., Ванина Е.А. Анализ дефектообразования на основании теории перколяции // Современная наука и философия для будущего России: Материалы Всероссийской науч. конф. студентов-исследователей, преподавателей, аспирантов и молодых ученых (г. Благовещенск, 27-29 марта 2008 г.). – М.: Спутник+, 2008. – С. 176-180.

4. Кузьменко В.А., Ванина Е.А. Моделирование радиационного фазового перехода в корундовой керамике// Научно-технические ведомости СПбГПУ. Серия «Физико-математические науки». – 2009.–№ 3.– С. 7-10.

5. Козик В.В. Химия твердых неорганических веществ: Учебное пособие. Ч. 1. – Томск: Изд-во Томского ун-та, 1985. – 127с.

6. Акивис М.А., Гольдберг В.В. Тензорное исчисление. – М.: Наука. Глав. ред. физико-математической литературы, 1969. – 352 с., ил.