

## ДИСКРЕТНЫЕ МОДЕЛИ РЕАЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ

DOI 10.17223/20710410/12/10

УДК 621.391.1:004.7

КУМУЛЯТИВНЫЙ СИНТЕЗ: КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНАЯ МОДЕЛЬ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ НА СТАДИИ СХЛОПЫВАНИЯ ПОРОШКОВОЙ ОБЛИЦОВКИ<sup>1</sup>

О. Л. Бандман\*, С. А. Кинеловский\*\*

\* *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,  
г. Новосибирск, Россия*

\*\* *Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН,  
г. Новосибирск, Россия*

**E-mail:** bandman@ssd.ssc.ru, skin@hydro.nsc.ru

Предложена дискретная математическая модель, предназначенная для компьютерного моделирования физико-химических процессов в порошковой смеси под воздействием ударного давления, вызванного взрывом. Математическая модель представляет собой двумерный клеточный автомат типа «решеточный газ» с гексагональной структурой дискретного пространства в плоскости, перпендикулярной к оси формирующейся струи. Гранулы порошка имитируются «частицами» решеточного газа, имеющими разную массу для разных веществ и при столкновениях вступающих в химическую реакцию. Программная реализация эволюции клеточного автомата выполнена для пяти случаев, различающихся углами между воздействием ударной волны и осью образующейся струи. Моделирование проводилось для смеси порошков вольфрама и углерода. Результатами моделирования являются количества вольфрама, углерода и карбидов типа WC и W<sub>2</sub>C, получающихся на начальной стадии образования порошковой струи при воздействии взрыва. Сравнение результатов с полученными при натуральных испытаниях позволило определить основные параметры клеточно-автоматной модели.

**Ключевые слова:** компьютерное моделирование, клеточный автомат, решеточный газ, карбиды вольфрама.

**Введение**

Клеточно-автоматные (КА) модели пространственной динамики привлекают большое внимание, поскольку они способны отображать нелинейные и разрывные процессы и могут быть полезными там, где дифференциальные уравнения с частными производными оказываются бессильными [1, 2]. В основном это относится к процессам на микро- и наноуровнях, поскольку КА может оперировать дискретными событиями, такими, как перемещения, изменения состояний, химические превращения и другие взаимодействия между реальными или абстрактными частицами, иногда наделяя их скоростью движения в дискретном пространстве и дискретном времени. В частности, одной из наиболее развитых областей применения КА является так называемая КА-гидродинамика, получившая название «решеточный газ» (Lattice-Gas models) [3].

<sup>1</sup>Работа поддержана Программой фундаментальных исследований Президиума РАН 14-6, 2009, и Междисциплинарным интеграционным проектом ИП-32 СО РАН, 2009.

Поскольку кумулятивная струя может быть описана на основе гидродинамической модели [4], а химические превращения при взаимодействиях частиц являются дискретными событиями, представляется естественным использовать модель «решеточного газа», встроив в нее дискретные события химических взаимодействий между отталкивающимися частицами. На этих соображениях основывается предлагаемая КА-модель физико-химических процессов в порошковой струе, получающейся в устройстве, используемом для исследования кумулятивного синтеза новых наноструктурных соединений [5].

В работе формально и содержательно описана КА-модель (п. 1), дан алгоритм моделирования (п. 2) и, наконец, представлены результаты компьютерного моделирования процесса схлопывания облицовки из порошковой смеси вольфрама и углерода в соответствии с испытаниями, проводимыми в рамках создания методов кумулятивного синтеза новых материалов и структур в Институте гидродинамики СО РАН (п. 3).

### 1. КА-модель процесса схлопывания порошковой облицовки

Гидродинамическая КА-модель, называемая в российской научной литературе «решеточным газом», а в западной — FHP-моделью (по фамилиям авторов работы [3]), имитирует движение абстрактных частиц в дискретном пространстве гексагональной структуры, плотно заполненном клетками. В каждой клетке одновременно может находиться несколько частиц, каждая из которых снабжена вектором скорости, направленным в одном из шести направлений гексагональной решетки. Такое состояние клетки однозначно представляется булевым вектором, число компонент в котором  $n = 6$ . Массив состояний всех клеток называется глобальной конфигурацией. Смена глобальных конфигураций происходит синхронно во всех клетках одновременно и называется итерацией. Итерация разделена на две фазы: фазу сдвига и фазу столкновения. На фазе сдвига имитируется перемещение каждой частицы в соседнюю клетку по направлению скоростей движения частиц. На фазе столкновения происходит изменение состояний клетки, иногда с заданной вероятностью (рис. 1). Изменения состояний клеточного массива подчиняются законам сохранения массы и импульса.

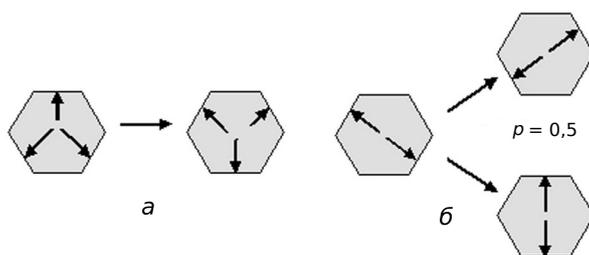


Рис. 1. Графическое изображение правил столкновения частиц в FHP-модели: *a* — детерминированные правила; *b* — вероятностные

FHP-модель является математическим описанием потока вязкой жидкости. Этот факт имеет строгое аналитическое доказательство [3]. Правомерность применения ее для моделирования процесса образования струи из порошковой смеси под действием взрыва с химическими взаимодействиями между частицами основывается на соединении известного опыта применения КА типа решеточного газа для потоков жидкостей и вероятностных кинетических моделей для химических реакций. Поскольку в этом случае аналитические доказательства соответствия модели и явления невозможны, то

параметры предлагаемой модели (правила и вероятности смены состояний КА) должны выбираться, исходя из данных натуральных испытаний. Последние на данном этапе исследований относятся к категории научного поиска и постоянного совершенствования, и, следовательно, то же самое должно происходить с моделью. С одной стороны, модель постоянно уточняет свои параметры на основе натуральных результатов. С другой стороны, результаты компьютерного моделирования помогают анализировать результаты испытаний, которые заключаются в следующем. Порошковая струя образуется при схлопывании конструкции, состоящей из двух конусных оболочек, между которыми засыпана смесь из измельченных вольфрама и углерода в пропорции 1:1 по объему [6]. Взрыв вещества за пределами внешнего конуса создает ударное давление на него. В результате порошок устремляется к оси конуса и образует струю, вытекающую в камеру, где она затем улавливается специальной ловушкой. На рис. 2 схематично даны продольный и поперечный разрезы конусных оболочек.

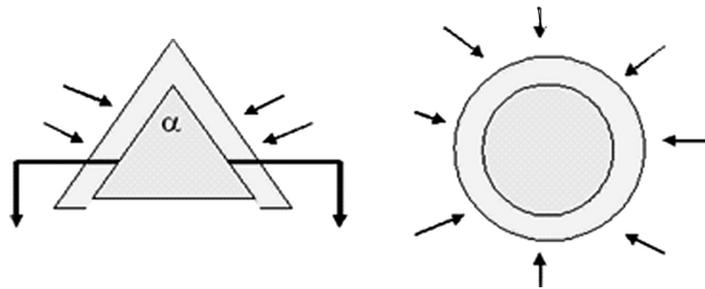


Рис. 2. Схематическое изображение схлопывающейся порошковой облицовки

Поскольку главная составляющая скорости движения частиц направлена от стенок конуса к его оси и происходящий процесс симметричен относительно оси конуса, то в первом приближении допустима двумерная аппроксимация процесса в виде проекции на плоскость, перпендикулярную оси конуса. Конкретные физические данные взяты из экспериментального исследования процессов кумулятивного синтеза в Институте гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН [6].

В основу построения КА-модели положены следующие принципы.

1) Каждой грануле ставится в соответствие модельная частица. В процессе участвуют три типа модельных частиц: частица углерода  $C$  с модельной массой  $m(C) = 1$ , частицы вольфрама  $W$ , карбида  $WC$  и карбида  $W_2C$  с модельными массами  $m(W) = 10$ ,  $m(WC) = 8$  и  $m(W_2C) = 9$  соответственно. Модельные массы выбраны так, чтобы их отношения были равны отношениям их физических масс, например  $m(C)/m(W) \approx M(C)/M(W)$ .

2) Структура дискретного пространства, в котором перемещаются частицы, — гексагональная. Каждая клетка имеет шесть соседей, расстояния между центрами клеток равны единице.

3) Состояние каждой клетки представлено вектором, в котором содержится информация о частицах, находящихся в клетке, с указанием направления скорости их движения.

4) Функционирование модели синхронное, т. е. на каждом итерационном шаге все клетки одновременно меняют свои состояния в соответствии с функциями переходов КА.

5) Итерационный шаг имеет две фазы: на фазе сдвига каждая частица перемещается в соседнюю клетку, на которую указывает вектор ее скорости. На фазе столкновения в клетке происходит изменение направлений скоростей и типов частиц.

6) Правила перехода в новые состояния строятся таким образом, чтобы при моделировании не нарушались законы сохранения массы и импульса.

7) При столкновениях частиц вольфрама с частицами углерода происходит химическая реакция, приводящая к образованию карбидов WC и  $W_2C$ . Вероятность образования того или иного типа карбида зависит от кинетической энергии столкновения, а также от энергии активации происходящих реакций и факторов, учитывающих расход энергии на другие преобразования.

Для формального описания КА-модели необходимо математически представить три понятия  $\langle A, X, \Theta \rangle$ , где  $A$  — алфавит состояний клеток,  $X$  — дискретное пространство и  $\Theta$  — набор функций переходов.

Алфавит состояний  $A$  — это множество векторов вида  $s = (s_{11}, s_{10}, \dots, s_g, \dots, s_0)$ . Каждая  $k$ -я пара  $(ss)_k = (s_{g+1}, s_g)$ , где  $k = g/2$ ,  $g \bmod 2 = 0$ , соответствует частице одного типа:

$(ss)_k = (0, 0)$  — частица отсутствует,

$(ss)_k = (0, 1)$  — присутствует частица C,

$(ss)_k = (1, 0)$  — присутствует частица W

при направлении их движения к соседней клетке с номером  $n_k$ . Так, например, состояние клетки  $s = (0, 1, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 1)$  означает, что в клетке находятся три частицы (C, —, W, —, —, C) (рис. 3).

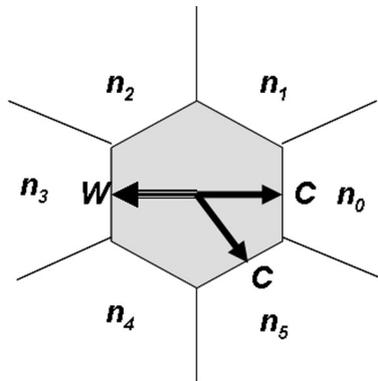


Рис. 3. Клетка, состояние которой равно  $s = (0, 1, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 1)$ , содержит одну частицу вольфрама и две частицы углерода

Каждое состояние клетки характеризуется суммарными модельными массой  $m(s)$  и импульсом  $\mathbf{p}(s)$ :

$$m(s) = \sum_{k=0}^5 m((ss)_k), \quad \mathbf{p}(s) = \sum_{k=0}^5 \mathbf{e}_k m((ss)_k),$$

где  $\mathbf{e}_k$ ,  $k = 0, \dots, 5$ , — единичные векторы скорости, направленные к центрам соседних клеток.

Дискретное клеточное пространство — это множество  $X$  координат клеток, которые фактически являются их именами. Пара  $(s_i, x_i)$ , в которой  $s_i \in A$ ,  $x_i \in X$ , является *клеткой*, а множество клеток  $\Omega$ , в котором все клетки имеют разные имена и  $|\Omega| = |X|$ , называется *клеточным массивом*. Далее имя произвольной клетки обозначается либо парой координат  $x = (i, j)$ , либо одним символом  $x$ , а множество соседей любой

клетки — множеством  $n(x) = \{n_0(x), \dots, n_5(x)\}$ . Координаты центров клеток в гексагональной структуре можно задавать по-разному. Здесь принят самый простой способ отображения гексагональной решетки на квадратную с растяжением оси  $j$ . Он состоит в том, что одному гексагону ставится в соответствие пара пикселей  $(i, j)$  и  $(i, j + 1)$ . Эти пары в четных и нечетных строках сдвинуты по отношению друг к другу (рис. 4). Такой способ отображения упрощает визуализацию процесса в клеточном массиве, так как обратное сжатие массива позволяет каждой клетке поставить в соответствие один пиксель на мониторе, интенсивность окраски которого соответствует исследуемой величине.

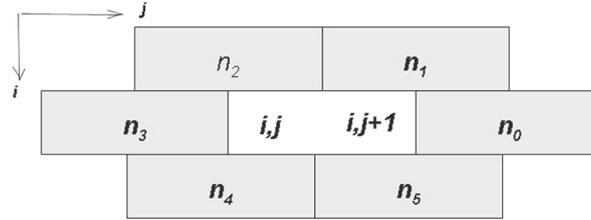


Рис. 4. Отображение гексагональной структуры на прямоугольную декартову решетку с растяжением по оси  $j$ . Клетка, содержащая два пикселя с координатами  $(i, j)$  и  $(i, j + 1)$ , и ее шесть соседей

Множество функций переходов  $\Theta = \Theta_{\text{сдв}} \cup \Theta_{\text{ст}}$  задаёт функционирование КА, изменяя состояние каждой клетки в зависимости от состояний ее соседей. Переход клетки в новое состояние происходит за две фазы: фазу сдвига и фазу столкновения, соответственно  $\Delta t = \Delta t_{\text{сдв}} + \Delta t_{\text{ст}}$ . Сдвиг означает перемещение частицы из клетки с именем  $x$  в соседнюю клетку  $n_k(x)$ , расположенную по направлению вектора ее скорости. Таким образом, каждая пара компонент вектора состояний после фазы сдвига, т. е. в момент  $t + \Delta t_{\text{сдв}}$ , равна

$$(ss)_k(x, t + \Delta t_{\text{сдв}}) = (ss)_k(n_{(k+3) \bmod 6}(x), t), \quad k = 0, \dots, 5.$$

Столкновение означает изменение состояния клетки с определенной вероятностью. В функции столкновения аргументами являются только компоненты состояния самой клетки, т. е.

$$s(x, t + \Delta t_{\text{ст}}) = \Theta_{\text{ст}}(s(x, t)).$$

Функции столкновения задаются соотношениями, имеющими вид подстановок, в которых каждому текущему состоянию ставится в соответствие несколько возможных новых, каждое из которых имеет свою вероятность. Если при столкновении химической реакции не происходит, то функция столкновения сохраняет массу и импульс в клетке, т. е.

$$m(s(x, t + \Delta t_{\text{ст}})) = m(s(x, t)), \quad \mathbf{p}(s(x, t + \Delta t_{\text{ст}})) = \mathbf{p}(s(x, t)). \quad (1)$$

Когда происходит химическая реакция, то законы сохранения соблюдаются для системы «в целом», так как полученные частицы карбидов из клеток удаляются, переходя в формирующуюся кумулятивную струю.

Применение функций сдвига и столкновения ко всем клеткам клеточного массива называется *итерацией*. Итерация переводит  $\Omega(t)$  в новое глобальное состояние  $\Omega(t + \Delta t)$ . Последовательность  $\Gamma = \Omega(0), \dots, \Omega(t), \dots, \Omega(\hat{T})$  называется *эволюцией* КА.

Если существует отображение  $\zeta : \Gamma \rightarrow F(\mathbf{y}, t')$ , то говорят, что КА моделирует процесс, который может быть представлен пространственно-временной функцией  $F(\mathbf{y}, t')$ , где  $\mathbf{y}$  — вектор координат в непрерывном пространстве, а  $t'$  — непрерывное время. Поскольку состояния клеток являются булевыми векторами, получение отображения  $\zeta$  требует осреднения модельных величин плотности (общей массы частиц в клетке) и скорости (средней величины и направления вектора скорости частиц). Осреднение выполняется по выбранной окрестности осреднения  $\text{Av}(x)$ , характеризуемой радиусом осреднения  $r \ll N$ :

$$\langle \rho(x) \rangle = \frac{1}{|\text{Av}(x)|} \sum_{x_i \in \text{Av}(x)} m(s(x_i)), \quad \langle \mathbf{u}(x) \rangle = \frac{1}{|\text{Av}(x)|} \sum_{x_i \in \text{Av}(x)} \mathbf{u}(s(x_i)), \quad x \in X.$$

## 2. Алгоритм моделирования

Компьютерное моделирование процессов в порошковой смеси для конкретного случая схлопывания конусной облицовки при воздействии взрыва (см. рис. 1) начинается с построения алгоритма функционирования КА, который затем легко преобразуется в программу. Процедура построения алгоритма состоит из следующих этапов:

- 1) определение параметров КА и его исходного состояния;
- 2) составление энергетического баланса событий и, на его основе, вычисление вероятностей выполнения функций переходов;
- 3) написание функций переходов КА.

*Параметры КА и его исходное состояние* определяются физическими данными объекта моделирования. Область моделирования вписывается в квадрат  $40 \times 40 \text{ мм}^2$ ; диаметр внешнего конуса в плоскости разреза — 28 мм, внутреннего — 22 мм. Размер частицы в порошке равен  $10^3 \text{ мкм}^3$ , пористость порошка — 0,5. Масса гранулы вольфрама  $M(W) = 19,3 \cdot 10^{-12} \text{ г}$ , углерода  $M(C) = 2,2 \cdot 10^{-12} \text{ г}$ . С учетом этих данных, а также возможностей персонального компьютера размеры клеточного пространства выбраны следующим образом:  $|X| = 400 \times 400$  гексагональных клеток, что потребовало массива размером  $400 \times 800$  квадратов и соответственно столько же пикселей для визуализации процесса в реальном вычислительном времени.

Клеточный массив разделен концентрическими окружностями на три области:  $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Omega_3$ . Область  $\Omega_1$  находится между внутренней стенкой камеры и внешней стенкой конуса с радиусом  $R_2 = 140$ . Она соответствует пространству, в котором находится взрывчатое вещество. Это пространство не входит в область моделирования, т. е. в него частицы типа С и W не проникают. Область  $\Omega_2$  между окружностями с радиусами  $R_2 = 140$  и  $R_3 = 110$  соответствует порошковой облицовке, где находится смесь частиц вольфрама и углерода в соотношении 1:1 по объёму. Исходное состояние этой области получается путем заполнения клеток случайными состояниями таким образом, чтобы осредненная плотность при одинаковом количестве частиц W и C была равна  $\langle \rho_0 \rangle = 0,5$ . Область  $\Omega_3$ , которая находится во внутреннем круге, заполнена условным «газом». Газ имитируется пространством с частицами углерода, плотность которых примерно в 100 раз меньше, чем плотность порошковой смеси:  $\langle \rho_{\text{gas}} \rangle = 0,17$ . Такая имитация газа позволяет не вводить ещё один тип частиц, принимая допущение, что наличие дополнительного малого числа частиц углерода не испортит картины образования карбида, а только дополнит плотность углерода, который в любом случае избыточен и не является измеряемым количеством.

*Энергетический баланс* предполагает вычисление соотношения производимой и расходуемой энергий при столкновениях частиц. Поскольку нас интересует количество

полученных карбидов, то баланс рассчитывается для сталкивающихся частиц С и W при выполнении одной из реакций  $r_i \in \text{Reac}$ , где  $\text{Reac} = \{r_1, r_2\}$ ;  $r_1 = W + C \rightarrow WC$ ;  $r_2 = W + W + C \rightarrow W_2C$ .

Реакция  $r_i \in \text{Reac}$  может произойти в клетке с состоянием  $s$ , если выполняется следующее условие:

$$Q(r_i)E(s) > E_a(r_i), \quad r_i \in \text{Reac}, \quad s \in A,$$

где  $E(s)$  — кинетическая энергия столкновения частиц реагентов в клетке с состоянием  $s$ ;  $E_a(r_i)$  — энергия активации реакции  $r_i$ ;  $Q(r_i)$  — так называемый *стерический коэффициент* реакции  $r_i$ , который в теории столкновений [7] определяется как отношение кинетической энергии сталкивающихся частиц к той энергии, которая на самом деле тратится на реакцию. Этот коэффициент всегда меньше единицы и зависит от формы и размеров частиц и свойств реагентов. Его величина известна (экспериментально измерена) для некоторых реакций в газах и жидкостях. Для нашего случая она не известна и является одним из тех параметров модели, которые должны быть установлены в процессе ее отладки. Вывод, который может быть сделан на основе литературных данных [7], позволяет предположить, что  $Q(r) = 0,5 \div 0,6$ .

Кинетическая энергия столкновения  $E(s)$  модельных частиц С и W, вступающих в реакцию, рассчитывается по известным формулам столкновения упругих шаров с разными массами:

$$E(s) = (M(W)v_W^2 + M(C)v_C^2) / 2,$$

где

$$v_W = v \frac{M(C)}{M(C) + M(W)}, \quad v_C = v \frac{M(W)}{M(C) + M(W)}$$

относительные скорости частиц, движущихся в системе, соответствующей состоянию клетки;  $v$  — скорость движения частиц до столкновения. Максимальное значение  $v_0$  скорость имеет в момент взрыва при  $t = 0$ . Значение  $v_0$  вычисляется, согласно [8], по следующей эмпирической формуле:

$$v_0 = D \frac{3r}{4r + 9} = 2,2 \cdot 10^3 \text{ м/с}, \quad (2)$$

где  $D = 7,5 \cdot 10^3 \text{ м/с}$  — скорость детонации;  $r = (\rho_{\text{ВВ}}\sigma_{\text{ВВ}})/(\rho_{\text{об}}\sigma_{\text{об}})$ ;  $\rho_{\text{ВВ}} = 1,65 \text{ г/см}^3$  и  $\rho_{\text{об}} = 9,15 \text{ г/см}^3$  — плотности взрывчатых веществ и порошковой смеси с учетом пористости;  $\sigma_{\text{ВВ}} = 2,6 \text{ см}$ ,  $\sigma_{\text{об}} = 0,3 \text{ см}$  — физические размеры ширины колец с взрывчатым веществом и порошком соответственно.

Значение кинетической энергии столкновения двух частиц «в лоб» при скоростях их движения, равных  $v_0$ , является максимальным:

$$E_{\text{max}} = \frac{1}{2} v_0^2 \frac{M(W) M(C)}{M(W) + M(C)} = 3,96 \cdot 10^{-9} \text{ Дж}. \quad (3)$$

Поскольку скорость направлена перпендикулярно к образующей конуса (т.е. под углом  $\alpha$  к плоскости моделирования) и модельные скорости частиц в клетке с состоянием  $s$  находятся под углом  $\beta(s)$ , то при расчете скорости следует ввести коэффициент

$$S(\alpha, \beta) = \cos \alpha \cos \beta(s).$$

Более того, при каждом столкновении происходит потеря скорости, связанная с тем, что частицы не являются абсолютно упругими. Этот фактор учитывается в механике

коэффициентом реституции COR (Coefficient Of Restitution [9]), который для исследуемого случая не известен и тоже является настраиваемым параметром. Поскольку COR следует учитывать при каждом столкновении, то влияние его накапливается со временем, т. е. на  $t$ -й итерации кинетическая энергия столкновения равна

$$E(s, t) = E_{\max}(s) \cdot S^2 \cdot \text{COR}^t.$$

Энергия активации реакций  $E_a(r_i)$  при столкновениях частиц определяется исходя из известных значений  $E_a(\text{WC}) = 35,2 \text{ кДж/моль}$  и  $E_a(\text{W}_2\text{C}) = 47,2 \text{ кДж/моль}$  и составляет для получения одной частицы WC или W<sub>2</sub>C энергию, равную

$$E_a(\text{WC}) = 1,4 \cdot 10^{-9} \text{ Дж/частица}, \quad E_a(\text{W}_2\text{C}) = 1,135 \cdot 10^{-9} \text{ Дж/частица}. \quad (4)$$

Вероятность выполнения реакции  $r_i \in \text{Reac}$  определяется величиной

$$P_{r_i}(s, t) = \frac{Q(r_i)E(s, t) - E_a(r_i)}{Q(r_i)E(s, t)}. \quad (5)$$

Функции переходов задаются выражениями, имеющими вид подстановок, в которых текущему состоянию ставится в соответствие несколько возможных новых, каждое из которых имеет свою вероятность. Поскольку число возможных состояний равно  $3^6$ , прямым перебором их составить чрезвычайно сложно. Приходится прибегать к некоторым приемам сокращения этой работы. Во-первых, учитываются только те переходы в новые состояния, которые удовлетворяют законам сохранения массы и импульса (1). Во-вторых, симметричная структура клеточного пространства позволяет написать функции только для одной конфигурации распределения частиц по направлениям, а остальные вычислять, используя симметрию гексагонов по формулам поворота, или, что то же самое, циклического сдвига компонентов вектора состояний.

Множество функций столкновения делится на две группы  $\Theta_{\text{ст}} = \Theta_{\text{дв}} \cup \Theta_{\text{реак}}$ . Первая группа содержит правила, ответственные за движение. В них участвуют частицы только одного типа. Очевидно, что в этих случаях никакая химическая реакция не возможна. Частицы только меняют направления своего движения, функции переходов из этой группы соответствуют классической ГНР-модели [3] и показаны на рис. 1.

Вторую, наибольшую по составу группу функций столкновений  $\Theta_{\text{реак}}$  составляют те, в которых возможны столкновения частиц типа C с частицами типа W и, следовательно, могут происходить химические реакции. К этой группе относятся переходы из состояний  $s \in A_{\text{реак}}$ ,  $A_{\text{реак}} \subseteq A$ , содержащих две инверсные друг другу пары  $(s, s)_k$  и  $(s, s)_{(k+h) \bmod 6}$ :

$$(ss)_k = \overline{ss}_{(k+h) \bmod 6}, \quad h \in \{2, 3, 4\}, \quad k = 0, 1, \dots, 5,$$

что соответствует столкновению частиц W и C при углах  $\beta = 120$  и  $180^\circ$ . Применение функции столкновения приводит к образованию одной частицы WC или половины частицы W<sub>2</sub>C и замене в векторе состояния  $s$  компонент  $(s, s)_k$  и  $(s, s)_{(k+h) \bmod 6}$  на  $(0, 0)$ . При этом счетчики образующихся карбидов увеличиваются на соответствующую величину.

Предполагается, что импульс, действующий на внешнюю оболочку, происходит мгновенно при  $t = 0$ . Это событие выражается только в том, что частицы в клеточном пространстве  $\Omega_2 \cup \Omega_3$  становятся активными. Далее все клетки действуют в соответствии со следующим итерационным алгоритмом.

Счетчики частиц WC, W и W<sub>2</sub>C устанавливаются в 0. На каждом итерационном шаге  $t$  над клеточным массивом  $\Omega(t)$  выполняются следующие действия.

1. Для всех клеток  $(s, x) \in \Omega_2(t) \cup \Omega_3(t)$  вычисляются новые значения  $(ss)_k$ ,  $k = 0, \dots, 5$ , компонент вектора  $s$ , и все клетки меняют состояния на полученные значения, переводя  $\Omega_2(t) \cup \Omega_3(t)$  в новое состояние  $\Omega_2(t + \Delta t_{\text{сдв}}) \cup \Omega_3(t + \Delta t_{\text{сдв}})$ .

2. Для каждой клетки  $(s, x) \in \Omega_2(t + \Delta t_{\text{сдв}}) \cup \Omega_3(t + \Delta t_{\text{сдв}})$  с состоянием  $s(x, t) \in A_{\text{реак}}$  вычисляется функция столкновения  $\Theta_{\text{реак}}$  с вероятностью (5), и счетчик соответствующих частиц увеличивается.

3. Для каждой клетки  $(s, x) \in \Omega_2(t + \Delta t_{\text{сдв}}) \cup \Omega_3(t + \Delta t_{\text{сдв}})$  с состоянием  $s(x, t) \notin A_{\text{реак}}$  вычисляется значение функции столкновения  $\Theta_{\text{дв}}$ .

4. Во всех клетках из  $\Omega_2(t + \Delta t_{\text{сдв}}) \cup \Omega_3(t + \Delta t_{\text{сдв}})$  производится замена состояний на вычисленные в пп. 2 и 3.

5. Значение  $t$  увеличивается на 1, и переход к п. 1.

Работа алгоритма заканчивается, когда значения счетчиков перестают изменяться. По значениям счетчиков легко определить количества полученных карбидов.

### 3. Результаты моделирования

Компьютерное моделирование производилось для пяти значений конусных углов:  $\alpha_1 = 15^\circ$ ,  $\alpha_2 = 22,5^\circ$ ,  $\alpha_3 = 30^\circ$ ,  $\alpha_4 = 37,5^\circ$ ,  $\alpha_5 = 45^\circ$ . Для всех случаев исходные состояния различались только углом  $\alpha$ . Значения начальной скорости (2), начальной кинетической энергии столкновения (3), энергии активации (4) для всех случаев приняты одинаковыми.

Реализация программы проводилась многократно для каждого случая с различными значениями стерического коэффициента  $Q(r_i)$  и коэффициента реституции COR:  $Q(r_i)$  изменялся от 0,45 до 0,55, COR — от 0,88 до 0,97 для обеих реакций. Сопоставление результатов моделирования с результатами натуральных испытаний [10] позволило определить значения этих коэффициентов (табл. 1).

Т а б л и ц а 1  
Полученные в результате моделирования  
значения коэффициентов  $Q$  и COR

$\alpha$	$Q(W + C)$	$Q(W + W + C)$	COR
$15^\circ, 22,5^\circ$	0,64	0,704	0,87
$30^\circ, 37,5^\circ$	0,51	0,56	0,96

Зависимости количества получаемых частиц карбидов от времени в процессе моделирования показывают (рис. 5), что химические реакции заканчиваются за 30 итераций, когда частицы еще находятся в начале пути к центру. Зависимости количества частиц полученных карбидов от конусного угла даны на рис. 6. В табл. 2 приведены результаты моделирования при значениях коэффициентов из табл. 1.

Сравнение полученных путем моделирования и путем физических испытаний значений WC/W( $T$ ) и W<sub>2</sub>C/W( $T$ ) в табл. 2 и 3 показывает, что максимальная разница равна  $\approx 15\%$ , а средняя ошибка не превышает 2%.

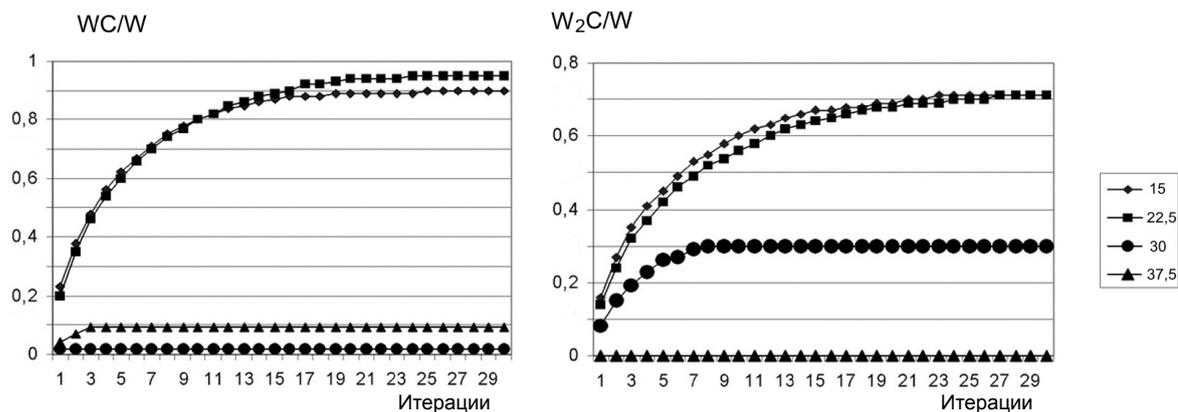


Рис. 5. Количества образующихся веществ по отношению к количеству остающегося вольфрама в зависимости от времени

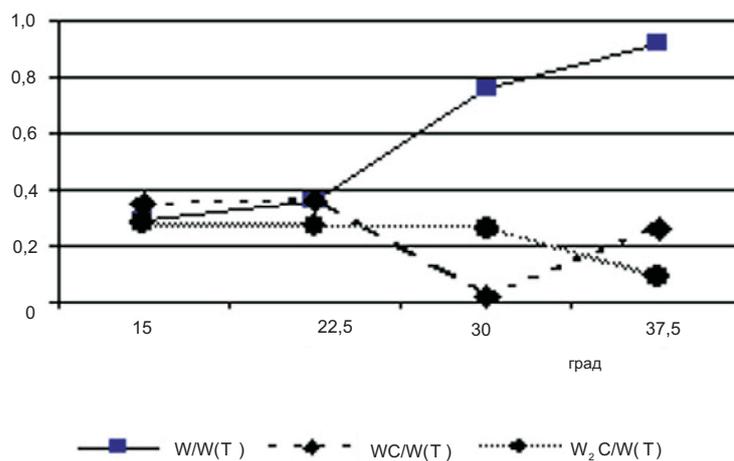


Рис. 6. Зависимости количества образовавшихся карбидов от конусного угла

Таблица 2

Полученные в результате моделирования значения веществ в отношении к исходному ( $W(0)$ ) и оставшемуся ( $W(T)$ ) количеству вольфрама

$\alpha$	$W(T)/W(0)$	$WC(T)/W(0)$	$W_2C/W(0)$	$WC/W(T)$	$W_2C/W(T)$
15°	0,484	0,344	0,273	0,896	0,71
22,5°	0,362	0,358	0,267	0,95	0,713
30°	0,757	0,018	0,259	0,025	0,298
37,5°	0,917	0,0	0,086	0,025	0,092
45°	0,999	0,0	0,0	0,0	0,0

Таблица 3

Полученные в результате физического испытания значения веществ в отношении к полученному количеству вольфрама  $W(T)$

$\alpha$	$WC/W(T)$	$W_2C/W(T)$
15°	$\approx 0,9$	$\approx 0,6$
22,5°	$\approx 1,1$	$\approx 0,75$
30°	$\approx 0,03$	$\approx 0,225$
37,5°	$< 0,025$	$< 0,1$
45°	0,0	0,0

### Заключение

Представленная КА-модель сложного физико-химического процесса в порошковой среде является новой модификацией КА-моделей решеточного газа, в которой впервые использованы правила переходов, моделирующие не только движение потока порошковых частиц, но и химические взаимодействия. Применение КА-модели для исследования процесса, происходящего в облицовке из порошковой смеси при воздействии взрыва, является частью работ, проводимых в рамках Междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН «Динамика структурно-фазовых состояний и фундаментальные основы синтеза нанокмпозитов в кумулятивных потоках». Несмотря на существенные допущения (двумерность, приближенный расчет вероятностей), результаты компьютерного моделирования и сравнение их с результатами натурных испытаний позволяют сделать вывод о возможности и полезности КА-моделирования для определения параметров планируемых физических испытаний, а также о необходимости совершенствования модели и уточнения ее параметров.

Авторы благодарны Ирине Анатольевне Панкратовой за полезные замечания и предложения при подготовке статьи к печати.

### ЛИТЕРАТУРА

1. *Simulating Complex Systems by Cellular Automata* / eds. A. G. Hoekstra, J. Kroc, P. M. A. Sloot. Berlin: Springer, 2010. 384 p.
2. Бандман О. Л. Клеточно-автоматные модели пространственной динамики // Системная информатика. Новосибирск: СО РАН, 2006. Вып. 10. С. 59–113.
3. Frish U., d'Humières D., Hasslacher B., et al. Lattice-Gas hydrodynamics in two and three dimensions // *Complex Systems*. 1987. V. 1. P. 49–707.
4. Лаврентьев М. А. Кумулятивный заряд и принципы его работы // *Успехи математических наук*. 1957. Т. XII. Вып. 4(76). С. 41–56.
5. Громилов С. А., Кинеловский С. А., Попов Ю. Н., Тришин Ю. А. О возможности физико-химических превращений веществ при кумулятивном нанесении покрытий // *ФГВ*. 1997. Т. 33. № 6. С. 127–130.
6. Кинеловский С. А., Громилов С. А. Особенности образования кристаллических фаз системы W–C–N в кумулятивном процессе // *ФГВ*. 2001. Т. 37. № 2. С. 135–139.
7. Berdnikov V. M. and Doktorov A. B. Steric factor diffusion-controlled chemical reactions // *Chem. Phys.* 1982. V. 69. No. 1–2. P. 205–212.
8. Кинеловский С. А. О неоднородном метании и соударении пластин // Сб. трудов VI Международного симпозиума «Использование энергии взрыва для производства металлических материалов с новыми свойствами». Готвальдов, ЧССР, 1985. С. 101–108.

9. Coefficients of Restitution The Physics Factbook. 2006. <http://hypertextbook.com/facts/2006/restitution.shtml>
10. Кедринский В. К., Кинеловский С. А., Кузавов В. Т., Корчагин М. А. Экспериментальное исследование синтеза соединений и фаз в кумулятивных течениях // Отчет по Интеграционному проекту 29 «Разработка научных основ кумулятивного синтеза новых наноструктурных соединений и покрытий методом встречных пучков и мишеней». Гл. 1. Новосибирск: ИГ СО РАН, 2009.