

УДК 546.791

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ УРАНА С ПОМОЩЬЮ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ

А.О. Очоа Бикэ, А.Г. Горюнов

e-mail: anthonob@tpu.ru, alex1479@tpu.ru Россия, г. Томск,
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Национальный исследовательский Томский
политехнический университет» (ФГАОУ ВО НИ ТПУ)

Настоящая работа посвящена исследованию процесса кристаллизации урана на основании клеточных автоматов. Процесс кристаллизации является сложным процессом сопровождающимся выделением твердой фазы в виде кристаллов. Определяющую роль в формировании свойства получаемого материала играют фазовые превращения и процессы тепломассопереноса, формирующие условия на границе раздела фаз. Для выращивания кристаллов и проведения процессов кристаллизации урана важным является проведение достаточно полных исследований в данной области. Заметная роль здесь отводится проведению теоретических исследований с использованием различных математических моделей [1].

Актуальность задачи связана с исследованием этого процесса и обнаружением методом виртуального эксперимента нестационарных режимов его протекания. Практическая необходимость реализации виртуального эксперимента связана со сложностями постановки реальных экспериментов и с недостатком знаний о процессе. Применение метода клеточных автоматов, при наличии информации о начальном состоянии объекта, позволяет проследить эволюцию системы (процесс кристаллизации). Такой подход учитывает реальную физику процесса, позволяя задавать сложные граничные условия, рассматривать сложные фазовые переходы с промежуточными соединениями, выдвигать различные гипотезы относительно формирования фаз и распределения полей концентраций и температур [2].

Задачей данной работы стала разработка математической модели роста кристалла урана при помощи клеточных автоматов. Диффузия и теплообмен взяты в качестве физической основы для моделирования роста кристалла.

Список литературы

1. Hesselbarth H.W., Göbel I.R//Acta Metall. Mater. 1991. Т. 39. № 9. С. 2135-2143.
2. Raabe D.//Ann. Rev. Mater. Sci. 2002. Т. 32. С. 53-76.