МОДЕЛИ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ПОРОШКОВЫХ СМЕСЯХ

Выполнила Чирва Полина, МТ8-82

Преподаватель: д.т.н. Курганова Ю.А.

ВИДЫ МОДЕЛЕЙ

ЭТАПЫ ПОСТРОЕНИЯ МОДЕЛЕЙ

- Изучение свойств объекта моделирования (теоретическое, экспериментальное) – анализ структуры технологического или физико-химического оператора:

$$\bar{y} = \Omega(\bar{x})$$

- Составление уравнений математического описания (МО) – синтез функционального оператора:

$$\bar{y} = \Phi\,(\bar{\mathrm{X}}, \bar{a})$$

- Построение алгоритма решения системы уравнений МО – моделирующего алгоритма МА.

$$\bar{y}^{\text{расч}} = \bar{\varphi}(\bar{\mathrm{X}}, \bar{a})$$

КЛЕТОЧНЫЕ АВТОМАТЫ

Клеточные автоматы являются дискретными динамическими системами, поведение которых полностью определяется в терминах локальных зависимостей. В значительной степени также обстоит дело для большого класса непрерывных динамических систем, определенных уравнениями в частных производных.

Пространство представлено равномерной сеткой, каждая ячейка или клетка которой содержит несколько битов данных; время идет вперед дискретными шагами, а законы мира выражаются единственным набором правил, скажем, небольшой справочной таблицей, по которой любая клетка на каждом шаге вычисляет своё новое состояние по состояниям её близких соседей. Таким образом, законы системы являются локальными и повсюду одинаковыми.

В случае исследования процессов, в которых носителями энергии являются гранулы порошка (далее называемые частицами) со средним диаметром ≃ 10 мкм, для моделирования процессов на участке мишени размерами 1 см2 необходим АКА размерами 1000 × 1000 клеток, что вполне реализуемо на современном персональном компьютере, а для по- лучения картины реаспределения вещества по всей мишени размерами 8 × 8 см2 до- статочно иметь 4-ядерный компьютер (например, с процессором типа Intel Core i7).

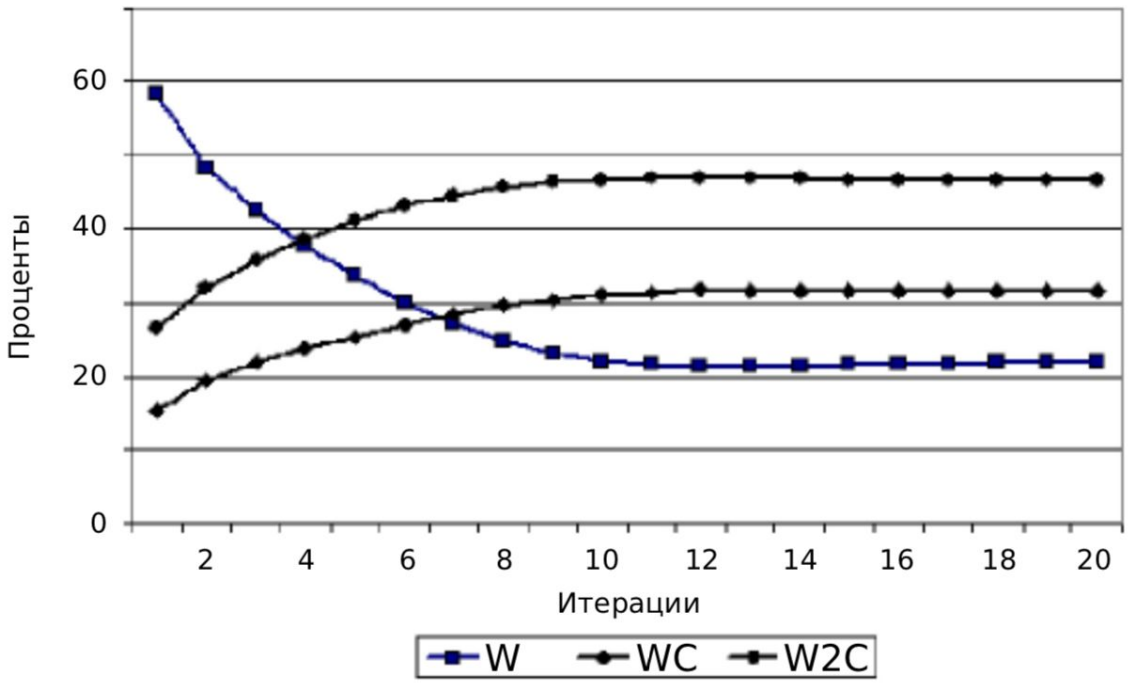
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ ПОРОШКОВОГО ПОКРЫТИЯ

Происходящие процессы:

- адсорбция вещества на поверхность металла;
- Химическаяреакция между веществом поверхности и веществом адсорбированной на неё частицы;
- проникание частицы в мишень на некоторую глубину;
- Перемещение вещества по поверхности покрытия на место с более низким уровнем энергии (диффузия);
- образование нехимического соединения между веществом поверхности и адсорбированной на него частицы порошка;
- десорбция (сублимация) вещества с поверхности.

ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

- Все гранулы порошка имеют одинаковый диаметр. В каждой клетке АКА может находиться не более одной гранулы. В клеточном автомате все клетки имеют размеры 1 × 1 × 1 при плотном прилегании клеток друг к другу.
- функции распределения скорости и плотности частиц по пространству и времени выражаются либо в виде таблиц, полученных путем компьютерного моделирования, либо в виде аппроксимирующих их функций
- Энергия расходуется на химическую реакцию между веществом упавшей частицы и соприкасающейся с ней на мишени, на деформацию поверхности при проникании упавшей частицы в глубь мишени, на выделение тепла и, возможно, на образование некоторого нехимического соединения.
- Перемещение частицы из одной клетки в другую (диффузия) происходит, если после этого перемещения энергия её связей с соседними частицами увеличивается



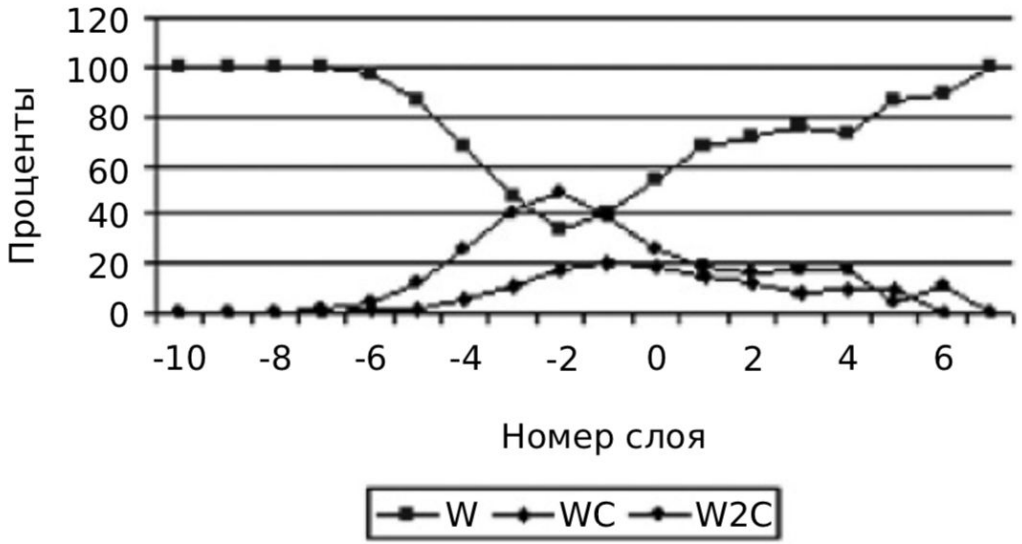


Рис. 2. Распределение веществ в покрытии по слоям

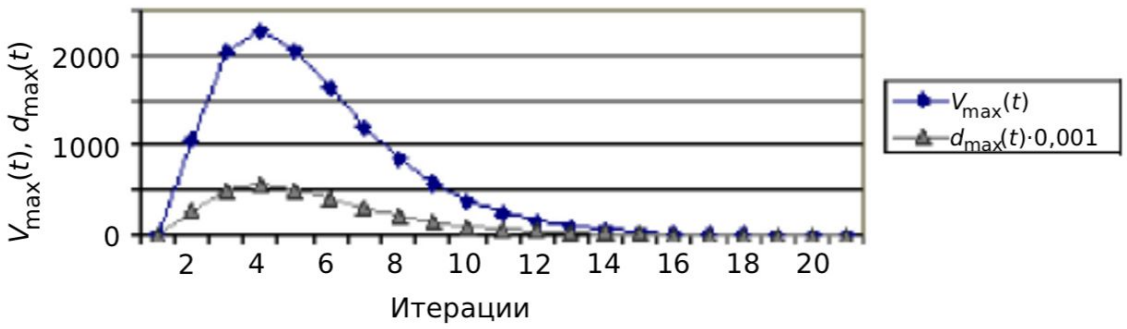


Рис. 3. Зависимость скорости и плотности в центре струи от времени ее касания с мишенью

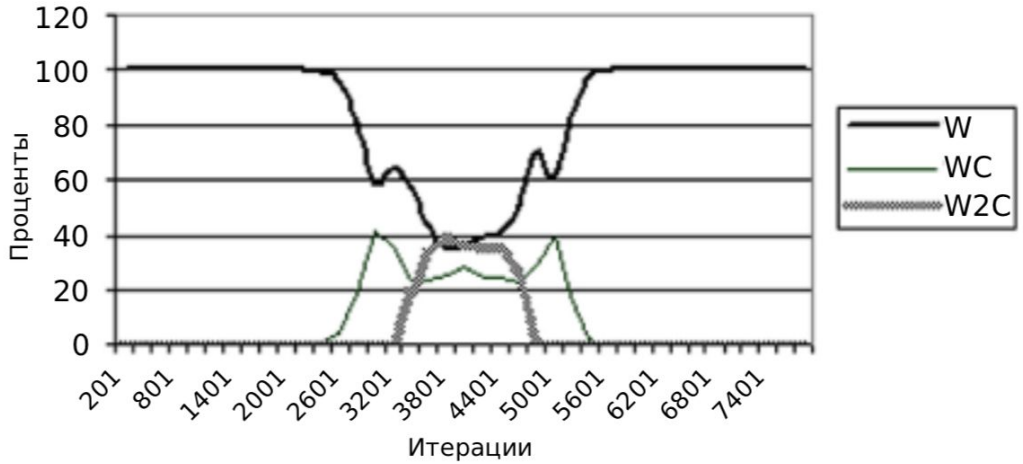


Рис. 4. Распределение веществ по пространству мишени после окончания процесса