

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ АДсорбЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ НА РЕАЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТЯХ МЕТОДОМ ВЕРОЯТНОСТНОГО КЛЕТОЧНОГО АВТОМАТА**

Агафонов А.Н.

Научный руководитель – д.т.н. Пиганов М.Н.

Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королева

В настоящей работе для моделирования адсорбционных процессов на реальных поверхностях предлагается использовать метод вероятностного клеточного автомата (ВКА).

При использовании метода ВКА для моделирования адсорбционно-десорбционных процессов поверхность адсорбента представляется в виде регулярной сети дискретных ячеек. Каждая ячейка соответствует одному "посадочному месту" на поверхности и может находиться в нескольких состояниях: быть занята одной адсорбированной частицей какого либо типа (в случае многокомпонентной газовой системы), либо оставаться пустой. Процессы адсорбции могут проходить в пустых ячейках, процессы десорбции - в занятых. Рассматриваемые состояния ячеек изменяются синхронным образом через дискретные интервалы времени в соответствии с локальными правилами, которые зависят от состояния ближайших соседних ячеек.

Был разработан ряд программ, моделирующих поведение одно- и двух компонентных адсорбционных систем. Разработка программного обеспечения велась в среде Visual C++ 6.0. и Delphi 6.0.

Примененная в данной работе модель представляет собой регулярную двумерную решетку ВКА. Решетка представляет собой модель поверхности, на которую происходит адсорбция веществ. Исходными данными для моделирования являются следующие величины: энергии активации протекания процессов адсорбции и десорбции, температура системы, давление газа, химический состав газа, исходное состояние поверхности и другие. Приняты следующие основные допущения: газовые компоненты описываются моделью идеального газа, учитывается состояние четырех ближайших к рассматриваемой ячеек, в системе протекают только процессы адсорбции и десорбции.

Дефекты, присущие реальной поверхности, учитываются при задании начальных параметров ячеек ВКА. Учитывается влияние следующих типов структурных дефектов поверхности: вакансии, инородные атомы внедрения, адсорбированные атомы примеси, кластеры примесных атомов на поверхности, линейные дислокации и др.

Разработанные программы позволяют получить следующие данные: пространственное распределение частиц по поверхности в различные моменты времени, изотермы адсорбции, процентное отношение занятых частицами различных типов ячеек к общему числу ячеек на которые разбивается поверхность, оценку степени сгруппированности частиц разных типов на поверхности и так далее.

Полученные результаты были использованы при построении моделей комплексных физических процессов. Разработанная программа может быть использована в учебном процессе для наглядной демонстрации протекания адсорбционных процессов.