**Российский Университет Дружбы Народов**

Факультет физико-математических и естественных наук.

**Проект по предмету**: математическое моделирование

Название проекта: Рост Дендритов.

Группа НКНбд-01-20

Участники проекта:

Дорук Мерич

Мухамедиар Адиль

Яссин Мохамад Аламин

Акуленко Максим

Москва. 2023г

**Рост Дендритов.**

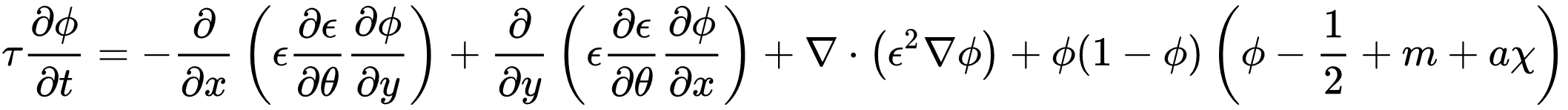
***Модель.***

Дендриты (от греч. δένδρον — дерево) — сложнокристаллические образования древовидной ветвящейся. Это определение очень удачное - дендриты действительно имеют  ветвящуюся структуру, похожую на деревце.

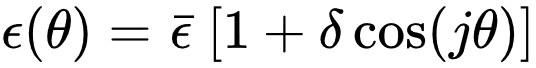
Дендрит является монокристаллом (т.е. одним кристаллом). **Схема формирования дендрита** представлена на рисунке. Сначала формируются оси первого порядка, потом на них зарождаются и растут оси второго порядка. Далее – третьего.

**Дендрит в металлургии** - характерная древовидная структура кристаллов, растущих по мере затвердевания расплавленного металла, форма, полученная более быстрым ростом вдоль энергетически выгодных кристаллографических направлений. Этот рост дендритов имеет большие последствия в отношении свойств материала.

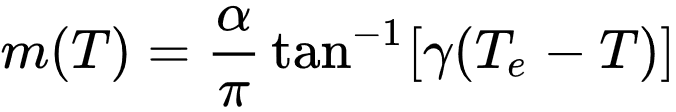
***ПРЕЗЕНТАЦИЯ ПО НАУЧНОЙ ПРОБЛЕМЕ.***

Первая вычислительная модель дендритного затвердевания была опубликована Кобаяши , который использовал модель фазового поля для решения двух связанных дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих эволюцию фазового поля: ф ( сф"="0 в жидкой фазе и ф "="1в твердой фазе) и температурное поле,ТЕЕ **T**, для чистого материала в двух измерениях: 

которое представляет собой уравнение Аллена-Кана с коэффициентом энергии анизотропного градиента:

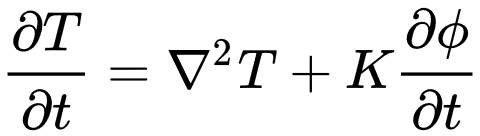


Где �¯ это среднее значение  � ,  �- угол между нормалью интерфейса и осью x и  и Д мъхжконстанты, представляющие силу и моду анизотропии соответственно.

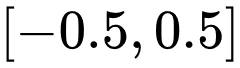
Параметр  м описывает термодинамическую движущую силу затвердевания, которую Кобаяши определяет для переохлажденного расплава как 

Где  � является константой между 0 и 1,  � является положительной константой, и  Те– безразмерная равновесная температура. Температура была безразмерной, так что равновесная температура равна  =1а Те"="1 начальная температура переохлажденного расплава равна .Т"="0

Уравнение эволюции для температурного поля имеет вид

∂Т∂т"="∇2Т+К∂ф∂т

и представляет собой просто уравнение теплопроводности с исходным членом из-за выделения скрытой теплоты при затвердевании, где ***К***К - константа, представляющая скрытую теплоту, нормированную на силу охлаждения.

Когда эта система эволюционирует численно, случайный шум, представляющий тепловые флуктуации, вводится в интерфейс через  ах срок, где  ваеличина шума и  х случайное число, равномерно распределенное по  .[−0,5,0,5]

***Теоретическое описание задачи.***

*1.Напишите программу, моделирующую теплопроводность. Задайте начальную температуру равной нулю везде, кроме центральной точки и посмотрите, как меняется распределение температуры.*

Для задачи исследования затвердевания необходимо определить начальные условия, граничные условия и уравнение, описывающее изменение температуры и распределение тепла в материале. Дополнительно необходимо учитывать изменение фазы материала при затвердевании и формирование дендритов. Величина начального переохлаждения S и капиллярный радиус λ могут оказывать влияние на форму образующихся дендритов. Для численного решения данной задачи можно использовать методы конечных разностей или конечных элементов, а также методы молекулярной динамики.

*2. Добавьте затвердевание, исследуйте влияние начального переохлаждения S и величины капиллярного радиуса λ на форму образующихся дендритов.*

Для задачи исследования зависимости от времени числа частиц в агрегате и его среднеквадратичного радиуса необходимо определить начальные условия, граничные условия и уравнение, описывающее движение частиц в агрегате. Изменение числа частиц и среднеквадратичного радиуса может быть связано с процессами диффузии, диссипации энергии и коллизий между частицами.

*3. Исследуйте зависимость от времени числа частиц в агрегате и его среднеквадратичного радиуса в разных режимах.*

Для задачи определения фрактальной размерности полученных образцов необходимо определить начальные условия, граничные условия и уравнение, описывающее формирование образцов. Фрактальная размерность может быть определена с использованием методов геометрической теории фракталов.

*4. Определите фрактальную размерность полученных образцов*

Для определения фрактальной размерности металлических дендритов можно использовать различные методы. Один из наиболее распространенных методов - это метод "ящиков", который основан на анализе количества ящиков, необходимых для покрытия фрактала при различных масштабах. Другой метод - это метод "сегментации", который основан на анализе отношения длины контура к площади объекта при различных масштабах.

*5. Исследуйте, как влияет величина теплового шума δ на вид образующихся агрегатов.*

Влияние теплового шума на формирование дендритов в металлах и сплавах может быть исследовано с помощью численного моделирования.  
  
Одним из способов численного моделирования дендритов является метод фазового поля, который описывает эволюцию интерфейса между твердой и жидкой фазами. Для моделирования теплового шума в этом методе может быть введено случайное возмущение температуры, которое соответствует флуктуациям температуры вследствие теплового шума. Для каждой реализации случайного возмущения можно рассчитать эволюцию дендрита и определить его форму.  
  
Другой метод численного моделирования, который может быть использован для исследования влияния теплового шума на формирование дендритов, - это метод молекулярной динамики (molecular dynamics method). Этот метод моделирует движение атомов в материале и может использоваться для расчета теплового шума. В этом методе можно рассчитать форму дендрита при различных уровнях теплового шума и сравнить результаты.

***Вывод:***

В течение презентации мы ознакомились с общими понятиями о том, что из себя представляют дендриты и о их структуре, а также затронули тему их первичного моделирования.

По итогу полученных знаний мы также проанализировали предстоящую работу и возможности использования тех или иных формул в решении плановых задач проекта

***Источники:***

1) Д. А. Медведев, А. Л. Куперштох, Э. Р. Прууэл, Н. П. Сатонкина, Д. И. Карпов МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И ЯВЛЕНИЙ НА ПК

2) А.И. Цаплин, И.Л. Никулин МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И ОБЪЕКТОВ В МЕТАЛЛУРГИИ

3) Р. Кобаяши, Physica D: нелинейные явления - https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/016727899390120P?via%3Dihub

4) О. В. Казак, П. К. Галенко, Д. В. Александров, Влияние конвективного потока на рост чистого и сплавного дендрита - https://www.mathnet.ru/links/ea18d90d894c1a8cce467174c75eb5aa/vuu540.pdf

5) Д.М.Васильев Физика кристаллография

https://www.geokniga.org/bookfiles/geokniga-fizicheskaya-kristallografiya.pdf

6) Александр С. Прохода ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕНДРИТНЫХ СТРУКТУР - https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1810/1810.01961.pdf