

# Групповой проект. Тема: Рост дендритов

## Этап 2

---

Артамонов Т. Е., Федорина Э. В., Морозов М. Е., Коротун И. И., Маслова А. С.

7 марта 2024

Российский Университет Дружбы Народов, Moscow, Russian Federation

## Информация

---

Студенты группы НКНбд-01-21

- Артамонов Тимофей Евгеньевич
- Федорина Эрнест Васильевич
- Морозов Михаил Евгеньвич
- Коротун Илья Игоревич
- Маслова Анастасия Сергеевна

## Вводная часть

---

## Второй этап проекта. Алгоритм решения задачи.

Алгоритм— это упорядоченный набор действий, который необходимо выполнить для решения поставленной задачи.

## Алгоритм

---

## Этап 1: Инициализация параметров симуляции

---

## Этап 1: Инициализация параметров симуляции

На первом этапе задается начальное состояние системы, включающее все необходимые физические параметры материала и начальные условия для симуляции. Этот этап критически важен для обеспечения корректности всего процесса моделирования.



## Определение параметров вещества:

- Плотность  $\rho$
- Удельная теплота плавления  $L$
- Теплоемкость при постоянном давлении  $C_p$
- Коэффициент теплопроводности  $\kappa$
- Температура плавления  $T_m$

### Титан

22	Ti
Титан Titanium	
(Ar)3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup>	

Атомный номер	22
Атомная масса	47,867
Плотность, кг/м³	4510
Температура плавления, °C	1668
Температура кипения, °C	
Теплоемкость, кДж/(кг·°C)	0,527
Электроотрицательность	1,5
Ковалентный радиус, Å	1,32
1-й ионизац. потенциал, эВ	6,83

## Задание начальных условий:

- Начальная температура расплава  $T_\infty$
- Безразмерное переохлаждение  $S$ : Вычисляется как  $S = \frac{c_p(T_m - T_\infty)}{L}$ , является ключевым фактором, определяющим начало процесса кристаллизации.

## Этап 2: Настройка симуляционной сетки

---

## Этап 2: Настройка симуляционной сетки

Создается симуляционная сетка, служащая пространством для моделирования роста дендритов. Этап включает подготовку сетки и начальную конфигурацию затравки кристаллизации.

- **Определение размера сетки  $N \times N$** , где  $N$  — количество узлов по каждому измерению. Размер сетки должен обеспечивать достаточную детализацию для визуализации роста дендритов и учитывать вычислительные ограничения.
- **Установка расстояния между узлами сетки  $h$** , влияющего на детализацию моделирования и точность результатов.

## Инициализация затравки:

- В центре сетки создается затравка, представляющая участок в твердой фазе. Размер и форма затравки могут варьироваться в зависимости от целей симуляции.

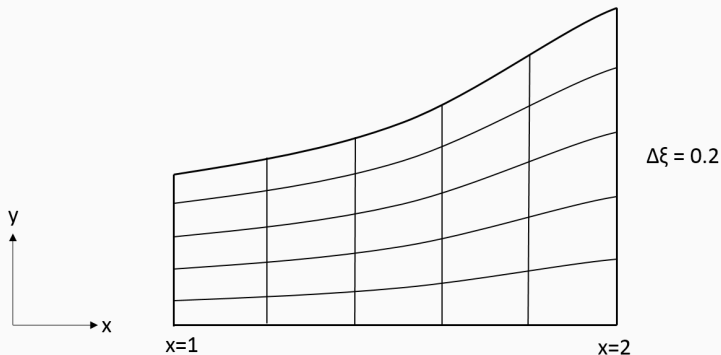


Рис. 2: Вычислительная сетка в физическом пространстве

### Этап 3: Расчет температурного поля

---

Моделирование распределения температуры в системе с течением времени, являющееся основой для анализа роста дендритов.



- Используется уравнение теплопроводности  $\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T$  для моделирования изменений температуры, учитывая приток тепла в систему и его распределение.

- Реализация численного метода, например, метода конечных разностей, для аппроксимации производных и расчета температуры в каждом узле сетки. Выбор временного шага  $\Delta t$  и пространственного шага  $h$  важен для стабильности и точности расчетов.

## Этап 4: Моделирование роста дендритов

---

На этом этапе реализуется моделирование роста дендритов на основе рассчитанных температурных полей и соответствующих физических законов.

- Скорость роста границы кристаллизации  $V$  определяется условием Стефана:  
$$V = \frac{\kappa}{\rho L} (\nabla T|_s - \nabla T|_l),$$
 что позволяет связать скорость роста с разницей градиентов температуры на границе фаз.
- Исходя из скорости  $V$ , происходит обновление положения границы кристаллизации, тем самым моделируя расширение твердой фазы.

- Условие Гиббса-Томсона корректирует температуру плавления на границе кристалла:

$T_b = T_m \left( 1 - \frac{\gamma T_m}{\rho L^2 R} \right)$ , учитывая кривизну границы и влияние поверхностного натяжения.

## Обновление температурного поля:

- После каждого этапа роста дендритов требуется пересчитать температурное поле, учитывая выделение или поглощение теплоты за счет фазового перехода.

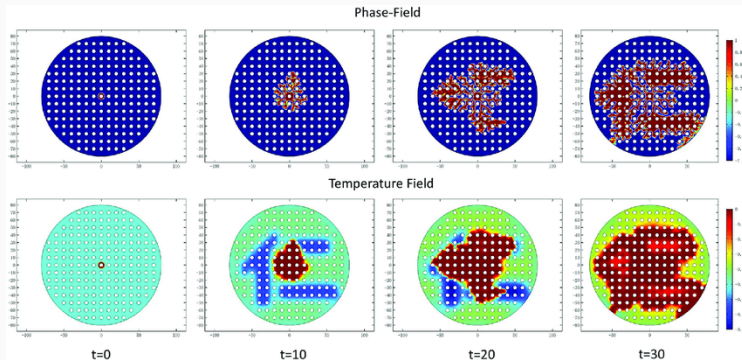


Рис. 3: Фазовое поле и соответствующее температурное поле дендритной структуры

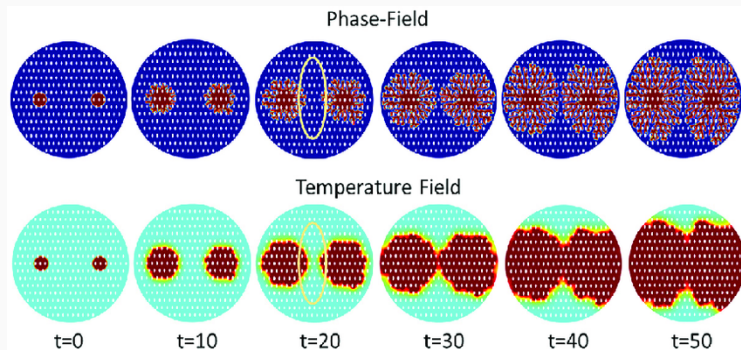


Рис. 4: Фазовое поле и соответствующее температурное поле дендритной структуры



## Этап 5: Анализ структуры дендритов

---

Проводится детальный анализ сформированных дендритных структур для оценки их свойств и сравнения с теоретическими и экспериментальными данными.

- Анализ формы, размеров и ветвления дендритов позволяет понять механизмы их роста и определить влияющие на это процессы.
- Использование методов измерения фрактальной размерности дает количественную оценку сложности структуры дендритов.

- Сопоставление результатов моделирования с экспериментальными данными по росту дендритов помогает проверить точность и надежность модели.

## Этап 6: Визуализация и оценка результатов

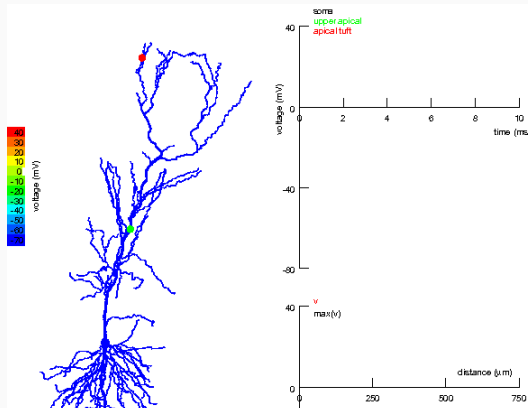
---

Заключительный этап проекта включает подготовку визуализации процесса роста дендритов и анализ полученных результатов.

- Использование графических инструментов для создания изображений и видео, демонстрирующих динамику роста дендритов и конечную структуру.
- Визуализация является ключевым элементом для наглядного представления исследования и помогает в анализе результатов.

## Анализ результатов и формулировка выводов:

- Оценка эффективности использованных методов моделирования, сопоставление с теоретическими предположениями и экспериментальными данными.
- Подготовка выводов о механизмах роста дендритов и возможных путях улучшения процессов материаловедения на основе результатов моделирования.





## Вывод

---

Представлен процесс разработки алгоритма моделирования роста дендритов, начиная с инициализации параметров симуляции и настройки симуляционной сетки, и заканчивая моделированием роста дендритов и анализом их структуры. Алгоритмы играют важную роль в решении задач, обеспечивая более эффективный и точный способ получения результатов, а каждый этап моделирования от инициализации параметров до анализа результатов имеет свою важную роль в создании полной картины процесса.