

# Групповой проект. Тема: Рост дендритов

## Этап 3

---

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 Евгеньевич
- Коротун Илья Игоревич
- Маслова Анастасия Сергеевна

## Вводная часть

---

На третьем этапе группового проекта нужно описать программную реализацию проекта. На прошлом этапе мы уже рассмотрели алгоритм, по которому мы будем двигаться при выполнении этого этапа. Приступим к описанию кода.

- `using Plots`: Библиотека для визуализации данных. В данном коде используем для создания тепловой карты, отображающей состояние сетки после симуляции роста дендритов.

`using Plots`

## Шаг 1 Параметры модели

Указываем основные параметры моделирования; в качестве примера был взят цезий:

```
const p = 1.873 # плотность
const t_melt = 28.7 # температура кристаллизации
const t0 = 29.8 # начальная температура границ кристалла
const c = 2180 # 0.218 кДж удельная теплоемкость
const L = 15742 # 15.742 удельная теплота плавления
const S = c * (t_melt - t0) / L # безразмерное переохлаждение
const k = 35.9 # теплопроводность
const N = 100 # размер сетки
```

```
const m = 3 # количество обновлений температуры за шаг
const x = k / (p * c) # коэффициент температуропроводности
const w = 1 / 2 # диагональный коэффициент
const y = 0.066 # поверхностное натяжение
const lambda = y * t_melt * c / (p * L^2)
const d = 0.1 # флуктуации температуры
```



## Шаг 2 Инициализация сетки

Создаем матрицу  $T$  размером  $N \times N$ , инициализируя ее нулями - она задает температуру на сетке. Задаем начальную затравочную область в виде квадрата с заданным радиусом и центром.

```
global T = fill(Float64(t0), N, N)
global n = zeros{Int, N, N}
center = N ÷ 2
radius = 5
for i in (center-radius):(center+radius)
    for j in (center-radius):(center+radius)
        if i > 0 && i <= N && j > 0 && j <= N
            T[i, j] = t_melt
            n[i, j] = 1 # устанавливаем в твердое состояние
        end
    end
end
```

### Шаг 3 Функция изменения температуры

Здесь мы используем уравнение теплопроводности.

```
function temperature_change!(T, N, m, x, w)
    T_tmp = copy(T)
    for i in 2:N-1
        for j in 2:N-1
            d2t = (T[i+1,j] + T[i-1,j] + T[i,j+1] + T[i,j-1] +
                    w * (T[i+1,j+1] + T[i+1,j-1] + T[i-1,j+1] + T[i-1,j-1])) /
            T_tmp[i, j] = T[i, j] + x * d2t / m
        end
    end
    T .= T_tmp
end
```

Следующие функции служат нам для того, чтобы посчитать радиус кривизны и реализовать замедление изменения температуры, связанного с поверхностным натяжением. На выступах число соседей у атомов меньше, чем во впадинах, поэтому атомам выгоднее заполнять впадины, восстанавливая ровную поверхность.

```
function count_curvature(n, i, j)
    n1 = n[i+1, j] + n[i, j+1] + n[i, j-1] + n[i-1, j]
    n2 = n[i+1, j+1] + w * n[i-1, j+1] + n[i-1, j-1] + n[i+1, j-1]
    R = 1 / (n1 + n2 - (5/2 + 5/2*w))
    return R
end

function gibbs_thomson(R)
    T_boundary = t_melt - lambda / (c * R)
    return T_boundary
end
```

## Шаг 5 Функция для подсчета соседей

Функция считает количество твердых соседей у клетки и необходима для реализации кристаллизации.

```
function has_solid_neighbor(n, i, j)
    neighbors = [
        n[i-1, j], n[i+1, j], n[i, j-1], n[i, j+1],
        n[i-1, j-1], n[i-1, j+1], n[i+1, j-1], n[i+1, j+1]
    ]
    return any(neighbors .== 1)
end
```

Функция, которая использует все функции описанные выше и меняет состояние ячейки.

```
function crystallise!(n, T, i, j)
    if has_solid_neighbor(n, i, j)
        R = count_curvature(n, i, j)
        T_boundary = gibbs_thomson(R)
        eta = 2 * rand() - 1
        if T[i, j] <= T_boundary * (1 + eta * d)
            n[i, j] = 1
        end
    end
end
```

Так как рост температуры происходит гораздо быстрее роста кристаллов, то мы должны несколько раз за итерацию обновлять температуру. Данный цикл реализует этот процесс.

```
const steps = 30000
for step in 1:steps
    for k in 1:m
        temperature_change!(T, N, m, x, w)
    end
    for i in 2:N-1
        for j in 2:N-1
            crystallise!(n, T, i, j)
        end
    end
end
end
```

## Шаг 8 График №1 модели

Рисуем график для нашей модели.

```
plot(heatmap(n), title = "Кристаллизация", color = :blues)
```

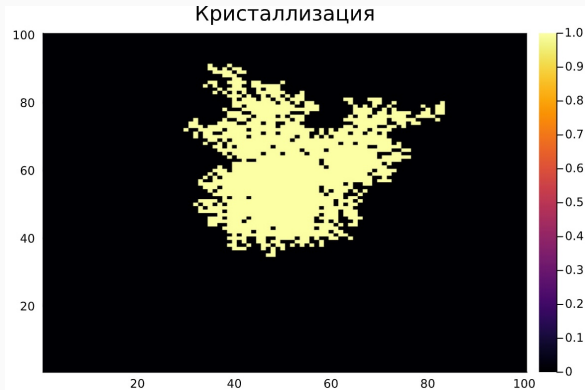


Рис. 1: Дендрит в форме дракончика



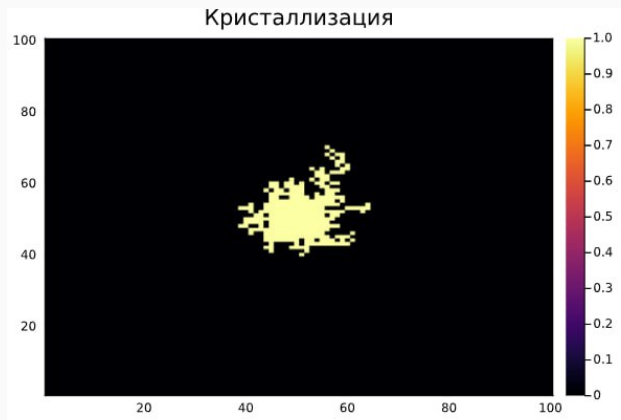


Рис. 2: Дендрит в форме лягушки с хвостом

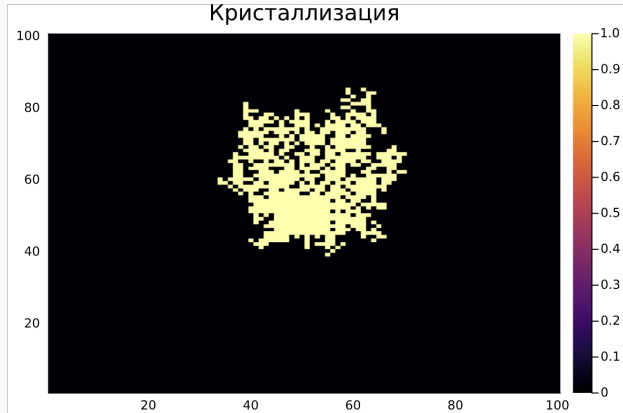


Рис. 3: Дендрит в форме ёжика

## Вывод

---

Модель роста дендритов, реализованная с использованием условия Гиббса-Томсона и уравнения теплопроводности, позволяет имитировать процесс затвердевания материала и формирования кристаллических структур. После завершения всех шагов симуляции, модель предоставляет визуализацию итогового состояния сетки с помощью тепловой карты.