

Групповой проект. Этап 4

Результаты проекта. Самооценка деятельности

Александрова Ульяна Вадимовна

Волгин Иван Алексеевич

Голощапов Ярослав Вячеславович

Дворкина Ева Владимировна

Серёгина Ирина Андреевна

Чемоданова Ангелина Александровна

Содержание

1 Введение	7
1.1 Актуальность	7
1.2 Объект и предмет исследования	8
1.3 Цель	8
1.4 Задачи	8
2 Теоретическое описание задачи.	10
2.1 Определения	10
2.2 Основные понятия и уравнения	10
2.2.1 Образование дендритов	10
2.2.2 Скорость роста дендритов	12
2.2.3 Задача Стефана и неустойчивость Муллинса-Секерки	13
2.2.4 Условие Гиббса-Томсона	14
2.2.5 Кинетическое замедление роста выступов	14
2.2.6 Безразмерная температура и уравнение теплопроводности	15
3 Описание модели	16
3.1 Изменение температуры	16
3.2 Рост дендрита	17
3.3 Учет кривизны границы	17
4 Примеры моделей роста дендритов	19
4.1 Фазово-полевая модель	20
4.2 Модель клеточных автоматов	22
5 Алгоритм	23
5.1 Шаг 1: Задание параметров	23
5.1.1 Физические свойства вещества:	23
5.1.2 Начальные условия:	24
5.2 Шаг 2: Настройка симуляционной сетки	25
5.2.1 Создание симуляционной сетки:	25
5.2.2 Инициализация затравки:	25
5.3 Шаг 3: Расчет температурного поля	26
5.3.1 Применение уравнения теплопроводности:	26
5.3.2 Численная реализация уравнения:	26
5.3.3 Шаги вычисления:	27

5.4	Шаг 4: Моделирование роста дендритов	28
5.4.1	Критерий затвердевания:	28
5.4.2	Использование условия Стефана:	29
5.4.3	Применение условия Гиббса-Томсона:	30
5.4.4	Обновление параметров:	30
5.4.5	Определение фрактальной размерности	30
5.5	Шаг 5: Анализ структуры дендритов	31
5.5.1	Морфологический анализ:	31
5.5.2	Корреляционный анализ:	32
5.5.3	Исследование влияния теплового шума δ	32
5.6	Шаг 6: Визуализация процесса	32
5.6.1	Визуализация роста дендритов:	32
6	Практическая часть	35
6.1	Определение параметров и базовых функций	35
6.1.1	Реализация полиномиальной аппроксимации	35
6.1.2	Параметры модели	36
6.1.3	Инициализация сетки	37
6.1.4	Базовые функции	38
6.2	Модель Теплопроводности	41
6.2.1	Описание модели	41
6.2.2	Реализация	42
6.2.3	Результаты	43
6.3	Добавление Процесса Затвердевания	44
6.3.1	Условие Фазового Перехода	44
6.3.2	Реализация	44
6.3.3	Исследование влияния начального переохлаждения и величины капилярного радиуса	47
6.4	Анализ	49
6.5	Динамика роста агрегата	51
6.5.1	Зависимость числа частиц от времени	51
6.5.2	Среднеквадратический Радиус	53
6.6	Фрактальная Размерность	54
6.6.1	Определение Фрактальной Размерности	54
6.6.2	Исследование зависимости фрактальной размерности от времени	56
6.7	Влияние Теплового Шума	58
6.7.1	Температурное распределение	59
6.7.2	Эксперименты с изменением теплового шума	60
7	Приложение	64
8	Выводы	71

Список иллюстраций

1.1	Дендритная кристаллизация после плавления внутри герметичных ампул из металлического рубидия и цезия	8
2.1	Стадии затвердевания кристаллических материалов	12
4.1	Двумерные дендритные структуры на основе меди	19
4.2	Зависимость скорости (V) и радиуса (R) от переохлаждения (ΔT)	21
5.1	Физические свойства вещества на примере Гафния	24
5.2	Функция двух переменных, заданная на структурированной сетке	26
5.3	Блок-схема цикла моделирования теплопроводности	27
5.4	Блок-схема цикла моделирования затвердевания	29
5.5	Фазовое и температурное поле при росте дендрита	31
5.6	Симуляция роста дендрита[11]	33
5.7	Рост дендрита	33
5.8	Рост дендрита	34
5.9	Рост дендрита	34
6.1	Распределение температуры без шума	43
6.2	Дендритные структуры при различных параметрах λ и $T = 1$	47
6.3	Дендритные структуры при различных параметрах λ и $T = 0$	48
6.4	Дендритные структуры при различных параметрах λ и $T = -1$	48
6.5	Дендритные структуры при различных параметрах λ и $T = -2$	49
6.6	Дендритные структуры при различных параметрах λ и $T = -3$	49
6.7	Зависимость числа затвердевших частиц от времени	52
6.8	Зависимость среднеквадратического радиуса от времени	53
6.9	Зависимость фрактальной размерности от времени	58
6.10	Температурное распределение после 100 шагов	59
6.11	Значение теплового шума (δ) 0.01	61
6.12	Значение теплового шума (δ) 0.05	61
6.13	Значение теплового шума (δ) 0.1	62

Список таблиц

6.1 Описание дендритных структур и их характеристик в зависимости от температуры	50
6.2 Описание дендритных структур и их характеристик в зависимости от капиллярного радиуса	50
6.3 Фазы кристаллизации	52
6.4 Сравнительная характеристика	62

1 Введение

1.1 Актуальность

Появление дендритов (рис. 1.1) играет ключевую роль в металлургии и в ли-тейном производстве, особенно при затвердевании металлов и сплавов, так как микроструктура образующихся дендритов во многом определяет механические, электрические и тепловые свойства полученных материалов. Изучение их характеристик важно не только для теоретического понимания процессов кристаллизации, но и для практики, для улучшения технологий производства современных материалов с заданными свойствами. Таким образом, научная проблема заключается в разработке теоретических и численных моделей, способных точно предсказывать динамику роста дендритов и их влияние на микроструктуру сформированных материалов.



Рис. 1.1: Дендритная кристаллизация после плавления внутри герметичных ампул из металлического рубидия и цезия

1.2 Объект и предмет исследования

- Дендриты
- Кристаллические дендриты

1.3 Цель

- Исследовать модель роста дендритов.
- Описать алгоритм решения задачи моделирования роста дендритов.
- Реализовать модель роста дендритов и проанализировать результаты.

1.4 Задачи

- Рассмотреть комбинированную модель роста дендритов.
- Рассмотреть алгоритм построения модели роста дендритов.

- Описать основные этапы алгоритма
- Написать программу, моделирующую теплопроводность. Задать начальную температуру равную нулю во всех точках, кроме центральной и пронаблюдать, как изменятся распределения температуры со временем.
- Добавить в модель процесс затвердевания. Изучить, как начальное переохлаждение и капиллярный радиус влияют на форму образующихся дендритов.
- Исследовать, как со временем изменяются количество частиц в агрегате и его среднеквадратичный радиус в различных режимах.
- Определить фрактальную размерность полученных структур
- Проанализировать, как величина теплового шума влияет на морфологию формирующихся агрегатов.

2 Теоретическое описание задачи.

2.1 Определения

Дендрит - это кристалл, который развивается с типичной многоветвящейся формой, напоминающей фрактал [1]. В металлах образуются в процессе кристаллизации из переохлажденного расплава.

Анизотропия кристалла — это зависимость физических свойств кристалла от направления роста. То есть кристаллическая структура не симметрична, и существует несколько осей, вдоль которых у кристалла проявляются различные свойства (механические, электрические, оптические) [2].

Анизотропия является естественным следствием кристаллического строения, так как на различных кристаллографических плоскостях и вдоль различных направлений плотность атомов различна.

Далее будем рассматривать образование кристаллической структуры из переохлажденного расплава [3].

2.2 Основные понятия и уравнения

2.2.1 Образование дендритов

Образование дендритов начинается с некоторого зародышеобразования, т. е. первого появления твердого роста в переохлажденной жидкости. Это образование сначала будет расти сферически, пока эта форма не перестанет быть

устойчивой. Нестабильность формы имеет две причины: анизотропию поверхностной энергии границы твердого тела и жидкости и кинетику прикрепления частиц к кристаллографическим плоскостям при их образовании.

Необходимо задать физические свойства вещества:

- плотность ρ ,
- удельная теплота плавления на единицу массы L ,
- теплоемкость при постоянном давлении c_p (также на единицу массы),
- коэффициент теплопроводности κ (для простоты будем считать теплопроводность и плотность не зависящими от температуры и одинаковыми для твердой и жидкой фаз – так называемая симметрическая модель),
- температура плавления T_m .

Пусть начальная температура расплава меньше температуры плавления (т.е. он переохлажденный) $T_\infty < T_m$.

В контексте кристаллизации из переохлажденного расплава (рис. 2.1), безразмерное переохлаждение S вводится для нормализации и упрощения математических моделей процесса. Этот параметр характеризует степень переохлаждения расплава относительно его температуры плавления, что критично для инициации и скорости кристаллизации. Оно рассчитывается по формуле (2.1).

$$S = c_p \frac{(T_m - T_\infty)}{L} \quad (2.1)$$

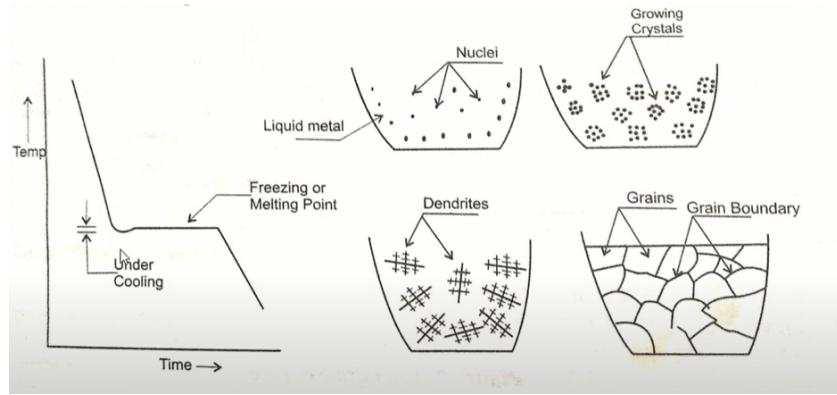


Рис. 2.1: Стадии затвердевания кристаллических материалов

Адиабатические условия предполагают отсутствие теплообмена с окружающей средой, что означает сохранение тепловой энергии внутри системы. В таких условиях, при $S \geq 1$, весь расплав затвердевает, поскольку имеется достаточная разность температур для обеспечения процесса кристаллизации. При $S < 1$ затвердевает только часть расплава, этот случай мы и будем рассматривать.

Также ограничимся двумерным случаем. Для описания изменения температуры со временем в двумерном случае используется уравнение теплопроводности (2.2)

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T \equiv \kappa \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad (2.2)$$

2.2.2 Скорость роста дендритов

Далее найдем скорость движения границы кристаллизации перпендикулярно самой себе, обозначим эту скорость V . За время Δt на участке площади s затвердевает масса вещества, равная $\Delta m = \rho s V \Delta t$ [3].

При кристаллизации выделяется теплота плавления $\Delta Q = \Delta m L$. Закон сохранения энергии требует, чтобы все выделившееся тепло было отведено за счет теплопроводности, суммарный поток тепла на границе $\mathbf{q} = -\kappa(\nabla T|_l - \nabla T|_s)$

Здесь ($\nabla T|_l$) и ($\nabla T|_s$) – градиенты температуры в жидкой и твердой фазах соответственно. Ориентация дендрита задается внешним градиентом темпера-

туры. Градиент температуры (∇T) — вектор, компоненты которого в двумерном случае равны $(\partial T / \partial x, \partial T / \partial y)$.

Индексы l и s относятся к жидкой и твердой фазам.

Для сохранения энергии должно выполняться условие $qs\Delta t = \Delta Q$. Подставляя выражения для q и ΔQ , получаем (2.3)

$$\kappa(\nabla T|_l - \nabla T|_s)s\Delta t = \rho s V \Delta t L \quad (2.3)$$

Сокращая общие множители s , Δt и учитывая, что $\mathbf{n} \cdot (\nabla T)$ — проекция градиента температуры на нормаль к границе, можно записать скалярное уравнение (2.4)

$$\kappa(\mathbf{n} \cdot \nabla T|_l - \mathbf{n} \cdot \nabla T|_s) = \rho V L \quad (2.4)$$

Перестроив выражение, получаем условие Стефана (2.5)

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{V} = \frac{\kappa}{\rho L}(\mathbf{n} \cdot \nabla T|_s - \mathbf{n} \cdot \nabla T|_l) \quad (2.5)$$

Это уравнение описывает связь между скоростью движения границы кристаллизации и градиентами температуры. В нем \mathbf{n} — вектор единичной длины, перпендикулярный границе (вектор нормали).

2.2.3 Задача Стефана и неустойчивость Муллинса-Секерки

Для определения изменения положения и формы границы затвердевания со временем необходимо задать температуру на границе T_b . Простейший вариант — принять $T_b = T_m$. В этом случае внутри твердой области температура будет постоянной, а такая проблема известна как **задача Стефана**.

Однако граница затвердевания в этом случае неустойчива. Рассмотрим плоскую границу, движущуюся с некоторой скоростью. Если на ней возникает небольшой выступ, градиент температуры перед выступом увеличивается, что приво-

дит к ускорению его роста. Это приводит к дальнейшему увеличению градиента и ускорению выступа, что характеризует **неустойчивость Муллинса-Секерки**. Эта ситуация аналогична диффузионно-ограниченной агрегации.

В реальных процессах затвердевания таких неустойчивостей не наблюдается, что указывает на наличие механизмов, ограничивающих рост выступов. Эти механизмы могут быть связаны с поверхностным натяжением и кинетическими ограничениями.

2.2.4 Условие Гиббса-Томсона

Первый механизм связан с поверхностным натяжением. Атомы на поверхности имеют меньшее число соседей, находящихся в той же фазе, что приводит к повышению их потенциальной энергии. Дополнительная потенциальная энергия пропорциональна площади поверхности: $\Delta E_p = \gamma s$, где γ – коэффициент поверхностного натяжения.

Рост выступов увеличивает площадь поверхности, что энергетически невыгодно. Следовательно, температура границы на выступах должна быть ниже температуры плавления, чтобы компенсировать эту энергию. Это описывается **условием Гиббса-Томсона** (2.6)

$$T_b = T_m \left(1 - \frac{\gamma T_m}{\rho L^2 R} \right). \quad (2.6)$$

Здесь R – радиус кривизны границы в данной точке (для плоской поверхности $R = \infty$). Вводится капиллярный радиус $d_0 = \gamma T_m c_p / (\rho L^2)$, размер образующейся структуры пропорционален ему.

2.2.5 Кинетическое замедление роста выступов

Второй механизм связан с кинетическими ограничениями. Присоединение атомов к твердой поверхности не происходит мгновенно, требуя некоторого времени, в течение которого движущиеся участки границы могут переохладиться.

Это влияет на температуру границы (2.7)

$$\Delta T_b = -T_m/\beta V. \quad (2.7)$$

Здесь β – кинетический коэффициент.

2.2.6 Безразмерная температура и уравнение теплопроводности

Вводится безразмерная температура $\tilde{T} = c_p(T - T_\infty)/L$, где T_∞ – начальная температура расплава. Уравнение теплопроводности для \tilde{T} имеет вид (2.8)

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} = \chi \nabla^2 \tilde{T}, \quad (2.8)$$

где $\chi = \kappa/\rho c_p$ – коэффициент температуропроводности.

Начальное условие: $\tilde{T} = 0$ везде, кроме затравки. При затвердевании всего вещества \tilde{T} повышается на единицу. Далее опустим знак у переменной \tilde{T} .

3 Описание модели

Начальное положение зародыши определяется случайным образом. Мы же опишем модель для примера, где рассмотрим квадратную область размера $N \times N$ узлов, с центральной затравкой. Расстояние между узлами $h = 1$, шаг по времени $\Delta t = 1$.

3.1 Изменение температуры

Используем уравнение теплопроводности (2.2).

Точное выражение для $\nabla^2 T$ в узле (i, j) (3.1)

$$\nabla^2 T \approx \frac{\langle T_{(i,j)} \rangle - T_{i,j}}{(4 + 4w)(1 + 2w)h^2}, \quad (3.1)$$

где $\langle T_{(i,j)} \rangle$ – среднее значение температуры в соседних узлах, w – коэффициент, учитывающий влияние диагональных соседей (обычно $w = 1/2$).

В первом приближении можно записать новое значение температуры, используя явную разностную схему (3.2) :

$$\hat{T}_{i,j} = T_{i,j} + \chi \Delta t \nabla^2 T. \quad (3.2)$$

Однако, при этом изменение температуры в узле через один шаг по времени ощутят только соседи. Это может быть правильно для больших скоростей кристаллизации. Обычно все же установление температуры происходит гораздо быстрее, чем рост кристалла. Чтобы это учесть, один шаг процесса роста кри-

сталла Δt разобъем на m шагов длительностью $\frac{\Delta t}{m}$. Новое значение температуры после шага m вычисляется по формуле (3.3)

$$\hat{T}_{i,j} = T_{i,j} + \frac{\chi \Delta t \nabla^2 T}{m}. \quad (3.3)$$

3.2 Рост дендрита

Состояние каждого узла: $n = 0$ – жидккая фаза, $n = 1$ – твердая фаза. Промежуточные состояния не учитываются.

Узел переходит из жидкого в твердое состояние, если он находится на границе и температура в нем ниже локальной температуры плавления. То есть выполняется условие (3.4) :

$$T \leq \tilde{T}_m(1 + \eta_{i,j}\delta) + \lambda s_{i,j}, \quad (3.4)$$

где:

- \tilde{T}_m – безразмерное начальное переохлаждение,
- $\eta_{i,j}$ – случайное число в интервале $[-1, 1]$,
- δ – величина случайного отклонения температуры (теплового шума),
- λ – величина, связанная с капиллярным радиусом,
- $s_{i,j}$ – параметр, учитывающий кривизну границы.

3.3 Учет кривизны границы

Кривизна границы [4] $1/R$ приближенно вычисляется по соседям узла 3.5 :

$$1/R \approx s_{i,j} = \sum_1 n_{i,j} + w_n \sum_2 n_{i,j} - \left(\frac{5}{2} + \frac{5}{2}w_n\right), \quad (3.5)$$

где:

- первая сумма — по ближайшим соседям,
- вторая сумма — по диагональным соседям,
- w_n — коэффициент, обычно $w_n = 1/2$.

Естественно, при затвердевании вещества температура в узле повышается на 1 в наших безразмерных единицах

4 Примеры моделей роста дендритов

В условиях самосборки с использованием водного раствора сульфата меди и пластин цинка, размещенных в чашечке Петри на фильтровальной бумаге, образуются двумерные дендритные структуры. Цинк медленно вытесняет медь из водного раствора сульфата меди, так что образуется сульфат цинка и выпадает медь в виде дендритных структур [5] (рис. 4.1).



Рис. 4.1: Двумерные дендритные структуры на основе меди

- **Начальная стадия:** Образование зародышей меди на поверхности цинковой пластины.
- **Рост дендритов:** Организация зародышей в более крупные образования.

- **Формирование структуры:** Появление металлических древовидных образований с пышной кроной.
- **Перераспределение примеси:** В процессе роста дендритов ионы меди диффундируют от областей с высокой концентрацией к областям с низкой концентрацией. Это перераспределение примеси влияет на форму и скорость роста дендритов, создавая более сложные и ветвистые структуры [6]. Это означает, что концентрация примеси в жидкой фазе изменяется в зависимости от положения и роста дендритов. В модели используются уравнения диффузии для описания перераспределения примеси (4.1).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \nabla^2 C \quad (4.1)$$

где C – концентрация примеси, D – коэффициент диффузии.

4.1 Фазово-полевая модель

Фазово-полевая модель является одной из наиболее распространенных моделей для описания роста дендритов. Она основывается на термодинамических принципах и описывает кинетику фазовых переходов в системе. В этой модели используется фазовое поле, которое представляет собой параметр, описывающий состояние системы (твердое тело или жидкость).

Уравнение фазового поля (4.2)

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M \nabla^2 \phi - \frac{\partial f}{\partial \phi} \quad (4.2)$$

где

$$\phi$$

– фазовое поле,

$$M$$

— подвижность,

f

— свободная энергия.

Фазово-полевая модель позволяет учитывать влияние температуры и концентрации примеси на процесс роста дендритов. Она также учитывает анизотропию, то есть зависимость свойств материала от направления. Это важно для точного описания формы и скорости роста дендритов (рис. 4.2).

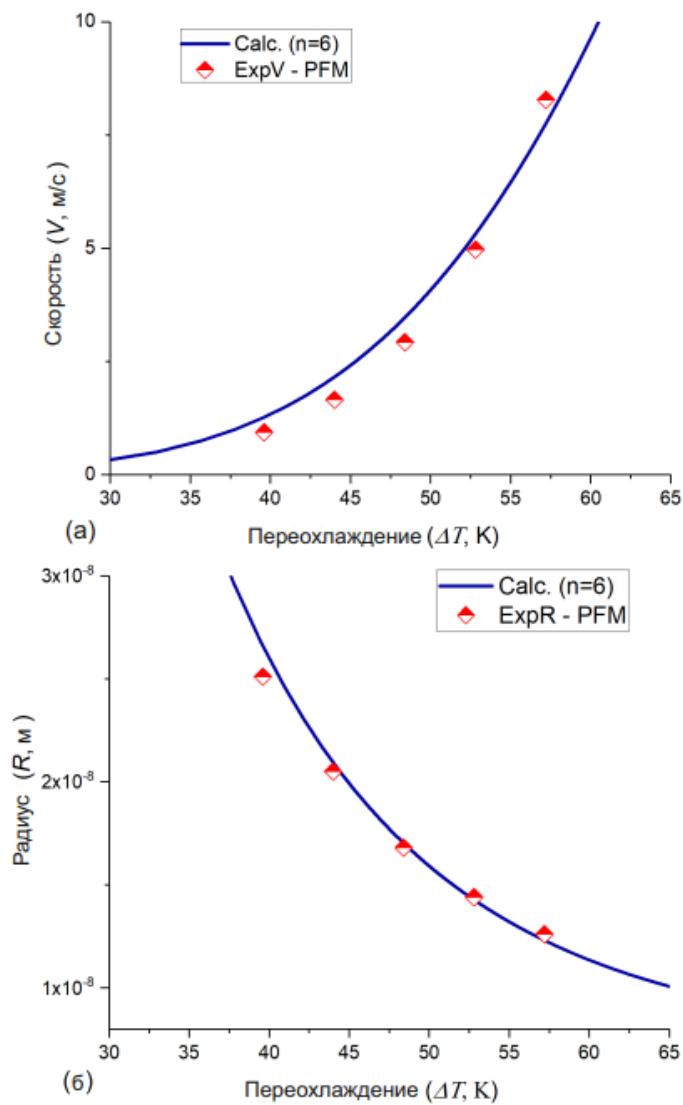


Рис. 4.2: Зависимость скорости (V) и радиуса (R) от переохлаждения (ΔT)

4.2 Модель клеточных автоматов

Модель клеточных автоматов используется для дискретного описания роста дендритов. В этой модели пространство делится на ячейки, каждая из которых может находиться в одном из нескольких состояний (жидкость, твердое тело, граница). Переходы между состояниями описываются вероятностными правилами, зависящими от локальных условий.

- **Состояния ячеек:** Жидкость, твердое тело, граница.
- **Правила перехода:** Вероятностные правила, зависящие от локальных условий.
- **Влияние соседних ячеек:** Взаимодействие между ячейками учитывается через локальные правила перехода.

Модель клеточных автоматов позволяет учитывать сложные взаимодействия между ячейками и описывать процесс роста дендритов на микроскопическом уровне.

5 Алгоритм

5.1 Шаг 1: Задание параметров

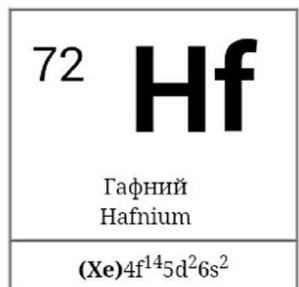
На первом этапе задается начальное состояние системы, которое включает в себя все необходимые физические параметры материала и граничные условия для симуляции. Особое внимание уделяется корректности задания исходных данных, так как от этого зависит достоверность всего процесса моделирования.

5.1.1 Физические свойства вещества:

- Плотность ρ : Определяет массу единицы объема материала и влияет на тепловой баланс системы. Чем выше плотность, тем больше энергии требуется для нагрева (рис. 5.1).
- Удельная теплота плавления L : Характеризует энергию, необходимую для перехода вещества из твердой фазы в жидкую без изменения температуры.
- Теплоемкость c_p : Показывает количество энергии, требуемое для нагрева единицы массы на один градус. Важна для расчета динамики изменения температуры.
- Коэффициент теплопроводности κ : отражает способность материала передавать тепловую энергию. Определяет скорость выравнивания температурных градиентов.
- Температура плавления T_m : Критическая точка, при которой начинается фазовый переход.

- Коэффициент поверхностного натяжения γ : влияет на форму границы раздела фаз.
- Параметры анизотропии: определяют направление преимущественного роста [7].

Гафний Hf



Атомный номер	72
Атомная масса	178,49
Плотность, кг/м³	13100
Температура плавления, °C	2222
Температура кипения, °C	5227
Теплоемкость, кДж/(кг·°C)	0,147
Электроотрицательность	1,3
Ковалентный радиус, Å	1,44
1-й ионизац. потенциал, эв	7,30

Рис. 5.1: Физические свойства вещества на примере Гафния

5.1.2 Начальные условия:

- Исходная температура расплава T_∞ : Задает степень переохлаждения системы. Определяет потенциал для начала кристаллизации.
- Безразмерное переохлаждение $S = Lcp(T_m - T_\infty)$: Ключевой параметр, показывающий термодинамическую готовность системы к началу процесса.
- Границные условия: задают поведение системы на границах расчетной области.
- Условия теплообмена с окружающей средой [3]

5.2 Шаг 2: Настройка симуляционной сетки

На втором шаге создается расчетная сетка для моделирования роста дендритов. Этап состоит из подготовки сетки и начальной конфигурации затравки кристаллизации.

5.2.1 Создание симуляционной сетки:

- Размер сетки $N \times N$: Определяет детализацию моделирования — количество узлов по каждой стороне. Больше узлов дают точность, но требуют больше ресурсов.
- Пространственный шаг h : Расстояние между соседними узлами сетки. Меньший шаг повышает точность, но увеличивает вычислительные затраты.

5.2.2 Инициализация затравки:

- Центральная область твердой фазы: Начальная твердая зона в центре сетки, откуда начинается рост дендритов. Её расположение влияет на симметрию процесса.
- Параметры формы и размеров: Форма (например, круглая или эллиптическая) и размер затравки задают начальные условия для роста и могут влиять на направление и скорость кристаллизации (рис. 5.2) [8].

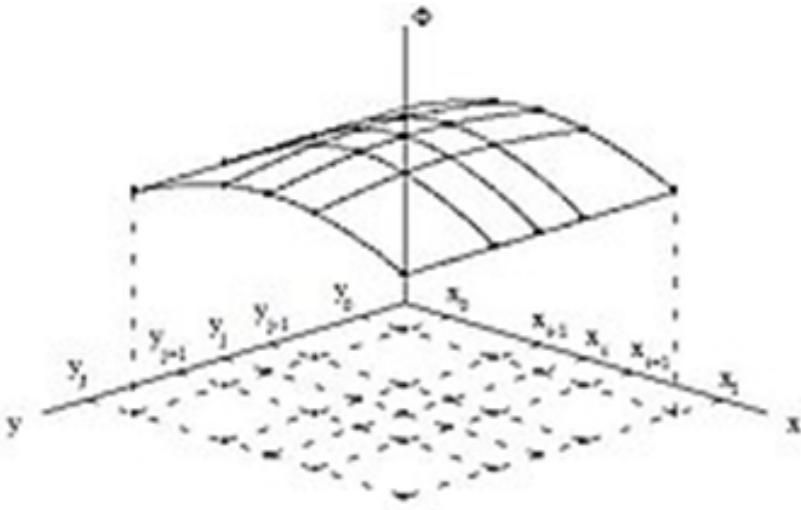


Рис. 5.2: Функция двух переменных, заданная на структурированной сетке

5.3 Шаг 3: Расчет температурного поля

Третий шаг представляет собой моделирование распределения температуры в системе с течением времени. Оно является основой для анализа роста дендритов.

5.3.1 Применение уравнения теплопроводности:

- Уравнение теплопроводности (2.2) используется для моделирования изменений температуры, учитывает приток тепла в систему, а также его распределение (рис. 5.3).

5.3.2 Численная реализация уравнения:

- Метод конечных разностей: аппроксимирует производные через дискретные значения;
- Выбор временного шага Δt и пространственного шага h важен для стабильности и точности расчетов.

5.3.3 Шаги вычисления:

- Вычислить новое распределение температуры на каждом шаге времени Δt ;
- Обновлять значения температуры в каждой точке сетки;

Повторять вычисления до достижения стационарного состояния или заданного времени.

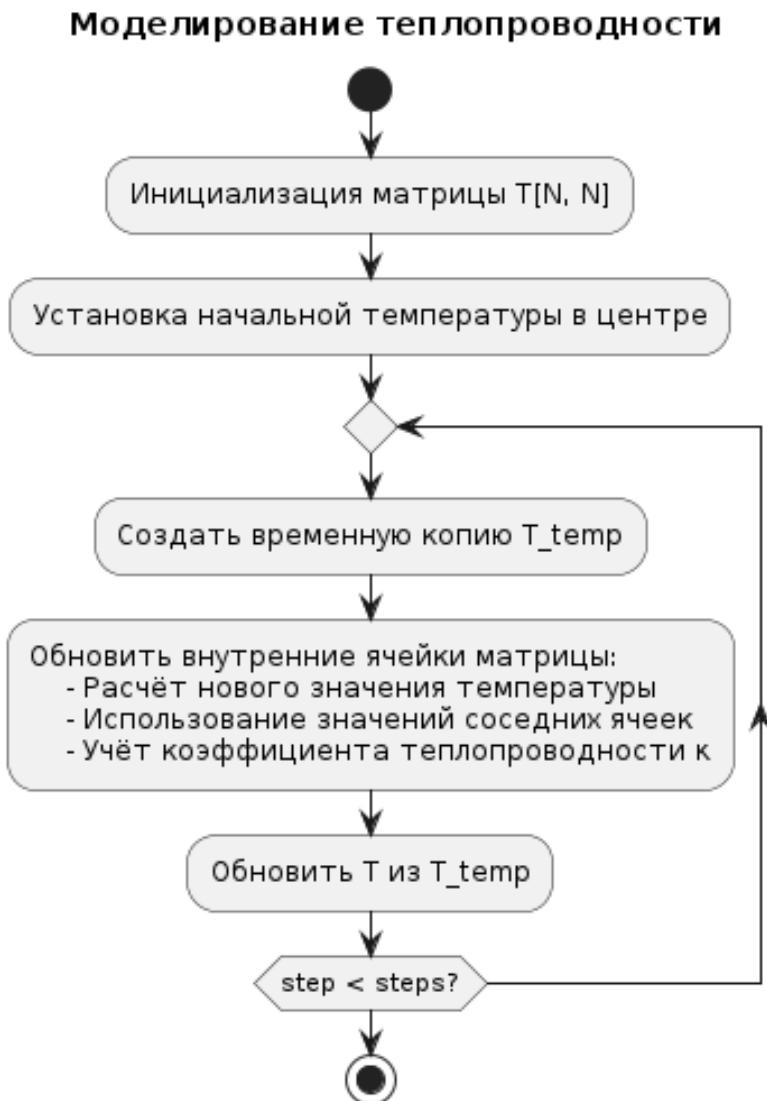


Рис. 5.3: Блок-схема цикла моделирования теплопроводности

5.4 Шаг 4: Моделирование роста дендритов

На четвертом этапе реализуется моделирование роста дендритов, основываясь на рассчитанных температурных полях и соответствующих физических законах.

5.4.1 Критерий затвердевания:

Определить температуру плавления T_m . Когда температура в точке падает ниже T_m , она начинает затвердевать (рис. 5.4).

Процесс затвердевания (упрощённо)

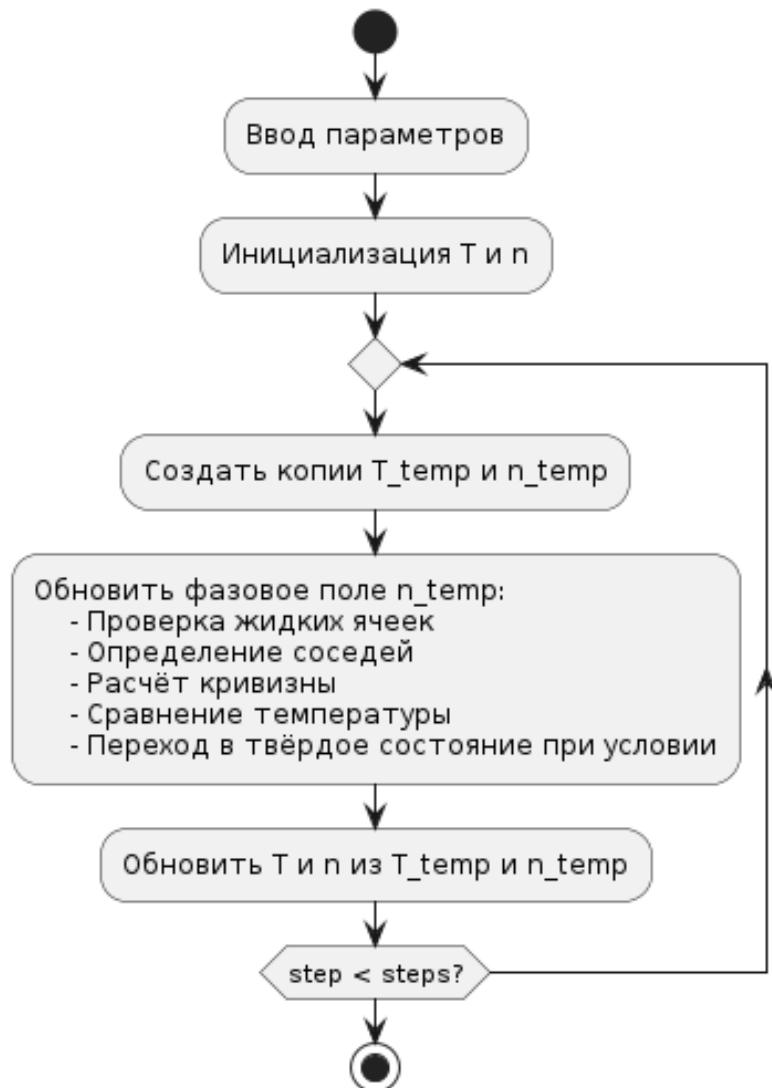


Рис. 5.4: Блок-схема цикла моделирования затвердевания

5.4.2 Использование условия Стефана:

- Условие Стефана (5.1):

$$V = \frac{\kappa}{\rho L} (\nabla T|_s - \nabla T|_l) \quad (5.1)$$

Оно определяет скорость роста границы кристаллизации V , что позволяет связать скорость роста и разницу градиентов температуры на границе фаз. - Учитывая скорость V , обновляются положения границы кристаллизации, моделируя расширение твердой фазы.

5.4.3 Применение условия Гиббса-Томсона:

- Условие Гиббса-Томсона (2.6) корректирует температуру плавления на границе кристалла. При этом учитываются влияние поверхностного натяжения и кривизна границы.

5.4.4 Обновление параметров:

После каждого этапа роста дендритов температурное поле пересчитывается с учетом теплоты, поглощенной или выделившейся за счет фазового перехода.

5.4.5 Определение фрактальной размерности

Фрактальная размерность D описывает степень заполнения пространства структурой. Для расчета можно использовать метод корреляционной функции или масштабирования (5.2):

$$N(r) \sim r^D \quad (5.2)$$

где $N(r)$ – число точек внутри круга радиуса r .

Необходимо:

- Выбрать множество точек, принадлежащих образованной структуре
- Для разных значений r подсчитать количество точек внутри круга радиуса.
- Построить график $\log(N(r))$ от $\log(r)$ и найти наклон прямой – это будет фрактальная размерность D (рис. 5.5) [9].

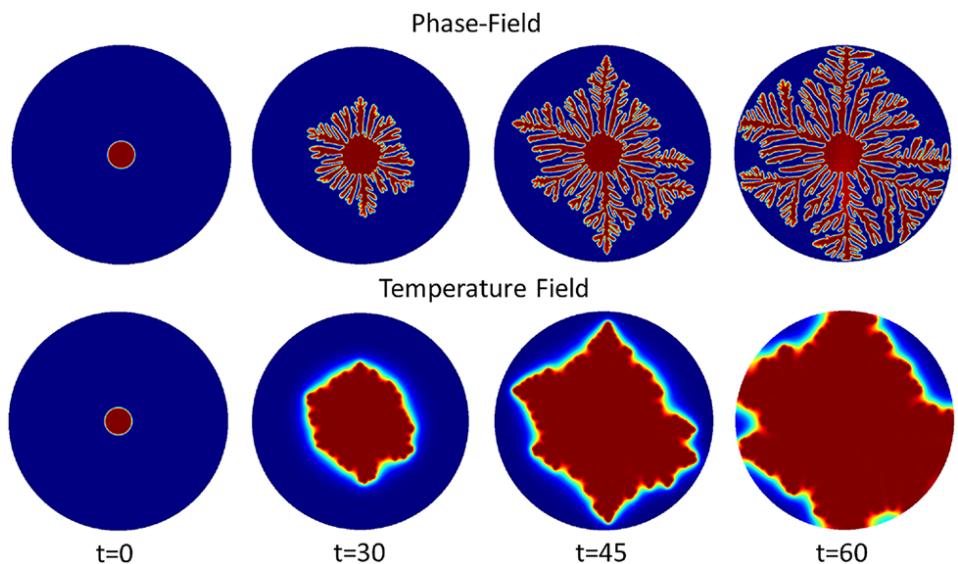


Рис. 5.5: Фазовое и температурное поле при росте дендрита

5.5 Шаг 5: Анализ структуры дендритов

На данном этапе анализируются сформированные дендритные структуры. Их свойства оцениваются и сравниваются с теоретическими и экспериментальными данными.

5.5.1 Морфологический анализ:

- Предполагает анализ формы и размеров дендрита, позволяя определить механизмы их роста, а также влияющие на это процессы.
- Метод измерения фрактальной размерности дает количественную оценку сложности структуры дендритов.
- Спектральный анализ исследует пространственные частоты структуры, выявляя повторяющиеся паттерны и масштаб особенностей дендритов. Это помогает оценить регулярность ветвления и общую организацию формы.

5.5.2 Корреляционный анализ:

Оценивает связь между параметрами (например, температурой и скоростью роста), чтобы количественно определить, как условия моделирования влияют на морфологию дендритов.

5.5.3 Исследование влияния теплового шума δ

Сначала добавим тепловой шум:

- На каждый шаг добавлять случайное возмущение к температуре $\eta_{i,j}\delta$, где $\eta_{i,j}$ — случайная величина из отрезка $[-1, 1]$.

Так как тепловой шум может влиять на скорость распространения фронта затвердевания и форму дендритов, следует повторить моделирование для разных значений δ и сравнить результаты, а именно оценить, как тепловой шум влияет на:

- Форму дендритов.
- Скорость затвердевания.
- Фрактальную размерность образованных структур.

5.6 Шаг 6: Визуализация процесса

Шестой этап алгоритма представляет собой визуализацию роста дендритов.

5.6.1 Визуализация роста дендритов:

Используются графические средства для генерации изображений и анимации, иллюстрирующих этапы формирования дендритов и их окончательную конфигурацию (рис. 5.6) [10].

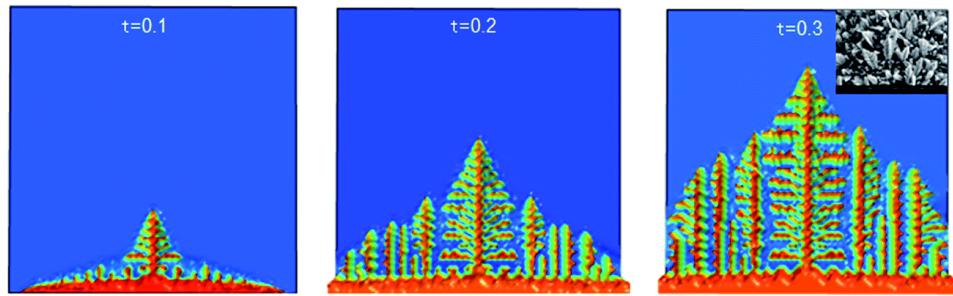


Рис. 5.6: Симуляция роста дендрита[11]

2. Визуальное представление данных играет ключевую роль в интерпретации результатов и обеспечивает понимание моделируемого процесса (рис. 5.7), (рис. 5.8), (рис. 5.9).

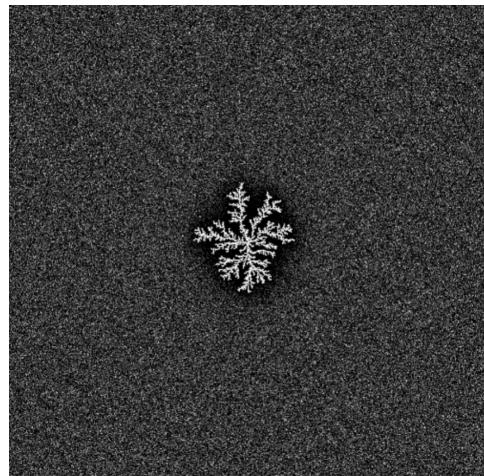


Рис. 5.7: Рост дендрита

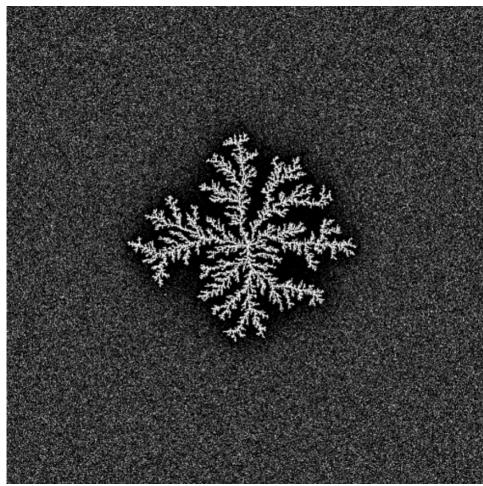


Рис. 5.8: Рост дендрита

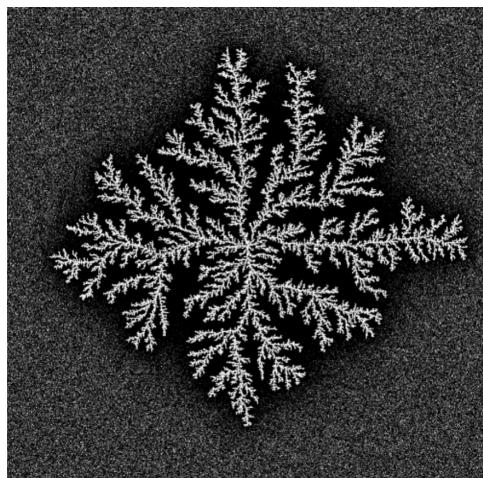


Рис. 5.9: Рост дендрита

6 Практическая часть

6.1 Определение параметров и базовых функций

Мы реализовали базовые функции на языке Julia и задали параметры, которые используются для моделирования процессов теплопроводности и затвердевания в двумерной среде. Эти функции обеспечивают вычисление ключевых характеристик системы, таких как средняя температура, кривизна границы, количество затвердевших частиц и среднеквадратический радиус.

6.1.1 Реализация полиномиальной аппроксимации

Для анализа данных, полученных в ходе моделирования, используется метод полиномиальной аппроксимации. Реализованы две функции:

1. `polyfit(x, y, degree):`

- Создает матрицу Вандермонда для заданных данных (x) и (y).
- Решает систему уравнений

$$(A \cdot \text{coeffs} = y)$$

с помощью метода наименьших квадратов.

- Возвращает коэффициенты полинома.

```
unction polyfit(x, y, degree)
```

```

# Создаем матрицу Вандермонда
A = [x[i]^j for i in 1:length(x), j in 0:degree]

# Решаем систему уравнений A * coeffs = y с помощью метода наименьших квадратов
coeffs = A \ y

return coeffs
end

```

2. polyval(coeffs, x):

- Вычисляет значения полинома для заданных коэффициентов

coeffs

и точек x .

Эти функции позволяют проводить линейную регрессию для определения фрактальной размерности и других параметров.

```

function polyval(coeffs, x)
    return sum(c * x.^i for (i, c) in enumerate(coeffs))
end

```

6.1.2 Параметры модели

Модель использует следующие параметры [3]:

- Размер сетки: $N = 150$ матрица $N \times N$
- Начальная температура (в центральной точке): ($T_{\text{initial}} = -1$)
- Количество временных шагов: $\$steps = 200$ \$
- Шаг по времени: $\Delta t = 1$

- Расстояние между узлами: $h = 1$
- Коэффициент теплопроводности: $\kappa = 0.1$
- Коэффициент для диагональных соседей: $w = 0.5$
- Температура плавления: $T_m = 0$
- Капиллярный радиус: $\lambda = 0.01$
- Величина флюктуаций температуры: $\delta = 0.02$

```
using Plots, LinearAlgebra, Statistics
```

```
# Параметры модели
N = 150          # Размер сетки (N x N)
T_initial = -1 # Начальная температура в центральной точке
steps = 200        # Количество временных шагов
dt = 1            # Шаг по времени
h = 1              # Расстояние между узлами
kappa = 0.1        # Коэффициент теплопроводности.. он кappa должен быть
w = 0.5            # Коэффициент для диагональных соседей
T_m = 0            # Температура плавления
$\lambda$ = 0.01      # Капиллярный радиус
$\delta$ = 0.02        # Величина флюктуаций температуры
```

6.1.3 Инициализация сетки

Для моделирования создается двумерная сетка [12]:

- Матрица температур T : Инициализируется нулями, за исключением центральной точки, где устанавливается начальная температура $T_{\text{initial}} = -1$
- Матрица состояний n : Инициализируется нулями (жидкая фаза), за исключением центральной точки, которая сразу затвердевает $n = 1$.

```

# Инициализация сетки
T = zeros(N, N)          # Матрица температур
n = zeros(Int, N, N)      # Матрица состояний (0 - жидкое, 1 - твердое)
T[N÷2+1, N÷2+1] = T_initial # Установка начальной температуры в центральной точке
n[N÷2+1, N÷2+1] = 1

```

6.1.4 Базовые функции

6.1.4.1 Вычисление среднего значения температуры

Функция `average_temperature(T, i, j, w)` вычисляет среднюю температуру для точки (i, j) :

1. Берутся значения температуры соседних точек по горизонтали и вертикали (6.1):

$$T[i-1, j], T[i+1, j], T[i, j-1], T[i, j+1] \quad (6.1)$$

2. Берутся значения температуры диагональных соседей (6.2):

$$T[i-1, j-1], T[i-1, j+1], T[i+1, j-1], T[i+1, j+1] \quad (6.2)$$

3. Вычисляется среднее значение (6.3):

$$\text{avg} = \frac{\text{sum_hv} + w \cdot \text{sum_diag}}{4 + 4w} \quad (6.3)$$

```

function average_temperature(T, i, j, w)
    horizontal_vertical_neighbors = [
        T[i-1, j], T[i+1, j], T[i, j-1], T[i, j+1]
    ]
    diagonal_neighbors = [

```

```

    T[i-1, j-1], T[i-1, j+1], T[i+1, j-1], T[i+1, j+1]
]

avg = sum(horizontal_vertical_neighbors) + w * sum(diagonal_neighbors)
return avg / (4 + 4*w)

end

```

6.1.4.2 Вычисление кривизны границы

Функция `curvature(n, i, j, w)` вычисляет кривизну границы для точки (i, j) :

- Берутся значения состояний соседних точек по горизонтали и вертикали (6.4):

$$n[i - 1, j], n[i + 1, j], n[i, j - 1], n[i, j + 1] \quad (6.4)$$

- Берутся значения состояний диагональных соседей (6.5):

$$n[i - 1, j - 1], n[i - 1, j + 1], n[i + 1, j - 1], n[i + 1, j + 1] \quad (6.5)$$

- Вычисляется кривизна (6.6):

$$\text{curvature} = \text{sum_hv} + w \cdot \text{sum_diag} - \left(\frac{5}{2} + \frac{5}{2} \cdot w \right) \quad (6.6)$$

```

function curvature(n, i, j, w)
    horizontal_vertical_neighbors = [
        n[i-1, j], n[i+1, j], n[i, j-1], n[i, j+1]
    ]
    diagonal_neighbors = [
        n[i-1, j-1], n[i-1, j+1], n[i+1, j-1], n[i+1, j+1]
    ]
    sum_hv = sum(horizontal_vertical_neighbors)

```

```

sum_diag = w * sum(diagonal_neighbors)
return sum_hv + sum_diag - (5/2 + 5/2 * w)
end

```

6.1.4.3 Подсчет количества затвердевших частиц

Функция count_solid_particles(n) подсчитывает количество затвердевших частиц(6.7):

$$\text{solid_count} = \sum_{i,j} n[i, j] \quad (6.7)$$

```

function count_solid_particles(n)
    return sum(n)
end

```

6.1.4.4 Вычисление Среднеквадратического Радиуса

Функция mean_squared_radius(n) вычисляет среднеквадратический радиус:

1. Находятся позиции всех затвердевших частиц (6.8):

$$\text{solid_positions} = \{(i, j) \mid n[i, j] = 1\} \quad (6.8)$$

2. Определяется центр массива (6.9):

$$\text{center} = \left(\frac{N}{2} + 1, \frac{N}{2} + 1\right) \quad (6.9)$$

3. Вычисляются расстояния от каждой затвердевшей частицы до центра (6.10):

$$\text{distances} = \sqrt{(i - \text{center}_x)^2 + (j - \text{center}_y)^2} \quad (6.10)$$

4. Находится среднеквадратический радиус (6.11):

$$R_g = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \text{distance}_i^2} \quad (6.11)$$

```
unction mean_squared_radius(n)
    solid_positions = [(i, j) for i in 1:N, j in 1:N if n[i, j] == 1]
    center = (N÷2+1, N÷2+1)
    distances = [norm([i-center[1], j-center[2]]) for (i, j) in solid_positions]
    return sqrt(mean(distances.^2))
end
```

6.2 Модель Теплопроводности

6.2.1 Описание модели

Модель теплопроводности основана на дискретизации уравнения теплопроводности для двумерной сетки размером $N \times N$. Начальные условия задаются следующим образом:

- Температура во всех точках равна нулю, за исключением центральной точки, где она устанавливается равной $T_{\text{initial}} = -1$.

Уравнение обновления температуры для каждой точки (i, j) имеет вид (6.12):

$$T_{\text{temp}}[i, j] = T[i, j] + \kappa \frac{\Delta t}{h^2} (T[i+1, j] + T[i-1, j] + T[i, j+1] + T[i, j-1] - 4 \cdot T[i, j]) \quad (6.12)$$

где:

- κ : коэффициент теплопроводности,
- Δ_t : временной шаг,

- h : пространственный шаг.

Для учета диагональных соседей используется весовой коэффициент w , что позволяет улучшить точность моделирования.

6.2.2 Реализация

Была написана функция `simulate_heat_conduction`. Она включает следующие этапы:

- Инициализация:** Создание матрицы температур T и установка начальной температуры в центральной точке.
- Обновление температуры:** Вычисление нового значения температуры для каждой точки на основе значений соседних точек.
- Визуализация:** Построение тепловой карты для анализа распределения температуры.

```
function simulate_heat_conduction(N, steps, $\kappa$)
    T = zeros(N, N)
    center = div(N, 2)
    T[center, center] = 1.0 # начальная температура в центре

    for step in 1:steps
        T_temp = copy(T)
        for i in 2:N-1
            for j in 2:N-1
                T_temp[i, j] = T[i, j] + $\kappa$ * (T[i+1, j] + T[i-1, j] + T[i, j+1]
                end
            end
        T .= T_temp
    end
```

```
end
```

```
heatmap(T, title="Распределение температуры без шума", xlabel="X", ylabel="Y")
```

```
end
```

6.2.3 Результаты

На графике (рис. 6.1) показано распределение температуры после завершения моделирования:

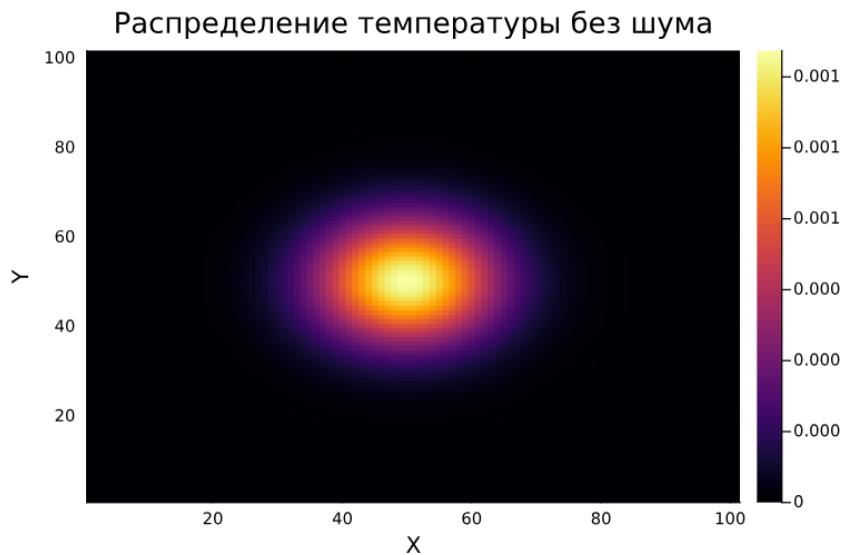


Рис. 6.1: Распределение температуры без шума

Анализ:

- Наблюдается четкая радиальная симметрия.
- Центральная точка остается наиболее холодной областью.
- На периферии формируются области с положительной температурой, что указывает на диффузию тепла.

6.3 Добавление Процесса Затвердевания

6.3.1 Условие Фазового Перехода

Точка переходит в твердую фазу, если выполняется условие (6.13):

$$T \leq \tilde{T}_m(1 + \eta_{i,j}\delta) + \lambda s_{i,j} \quad (6.13)$$

где:

- T - текущая температура узла
- \tilde{T}_m - безразмерная температура плавления (с учетом начального переохлаждения)
- $\eta_{i,j}$ - случайный шумовой параметр
- δ - амплитуда теплового шума
- λ - эффективный капиллярный радиус
- $s_{i,j}$ - параметр, связанный с кривизной границы

6.3.2 Реализация

Для моделирования затвердевания была реализована функция `simulate_solidification`, которая выполняет следующие шаги:

1. **Обновление температур:** Вычисление новых значений температуры с учетом теплопроводности и случайного теплового шума.
2. **Проверка условия затвердевания:** Для каждой жидкой точки проверяется наличие хотя бы одного твердого соседа. Если условие выполнено, точка затвердевает.
3. **Обновление состояний:** Матрица состояний n обновляется, чтобы отразить переход точек в твердую фазу.

```

function simulate_solidification(T, n, steps, w, kappa, dt, h, $\delta$, T_m, $\lambda$)

    # Хранение данных для графиков
    solid_counts = []
    mean_radii = []
    fractal_dims = []

    # Основной цикл моделирования
    for step in 1:steps
        T_temp = copy(T)    # Создаем временную копию для текущего шага
        n_temp = copy(n)    # Создаем временную копию для состояний

        # Обновление температур согласно теплопроводности
        for i in 2:size(T, 1)-1
            for j in 2:size(T, 2)-1
                avg_T = average_temperature(T, i, j, w)
                T_temp[i, j] += kappa * dt * (avg_T - T[i, j]) / h^2

                # Добавление случайного теплового шума
                $\eta_{ij} = \text{rand}(-1.0:0.01:1.0)$ # Случайное число [-1, 1]
                T_temp[i, j] += $\eta_{ij} * \delta$

        end

        end

        # Обновление состояний (затвердевание)
        for i in 2:size(n, 1)-1
            for j in 2:size(n, 2)-1
                if n[i, j] == 0    # Только для жидких узлов
                    # Проверяем наличие соседей в твердой фазе
                    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]]

```

```

if any(neighbors .== 1) # Если есть хотя бы один твердый сосед
    # Вычисляем кривизну границы
    s_ij = curvature(n, i, j, w)

    # Вычисляем локальную температуру плавления
    local_T_m = T_m + $lambda$ * s_ij

    # Проверяем условие затвердевания
    if T_temp[i, j] <= local_T_m
        n_temp[i, j] = 1 # Узел затвердевает
        #T_temp[i, j] += 1 # Температура увеличивается на 1
    end
    end
    end
    end

# Обновляем основные матрицы
T .= T_temp
n .= n_temp
# Сохраняем данные для графиков
push!(solid_counts, count_solid_particles(n))
push!(mean_radii, mean_squared_radius(n))

# Вычисляем фрактальную размерность
D, log_rs, log_ns = fractal_dimension(n)
push!(fractal_dims, D)
end

```

```

    return solid_counts, mean_radii, fractal_dims
end

```

6.3.3 Исследование влияния начального переохлаждения и величины капилярного радиуса

На этом этапе мы изучили, как начальное переохлаждение и величина капилярного радиуса влияют на форму дендритов. Для этого был взят набор значений начального переохлаждения [1, 0, -1, -2, -3] и набор значений капилярного радиуса: [0.0001, 0.001, 0.005, 0.01, 0.05].

Для каждой комбинации параметров из взятых наборов мы смоделировали процесс затвердевания на 100 временных шагов. Результаты представлены группами объединенными по значению начального переохлаждения: 1 (рис. 6.2), 0 (рис. 6.3), -1 (рис. 6.4) , -2 (рис. 6.5) , -3 (рис. 6.6) .

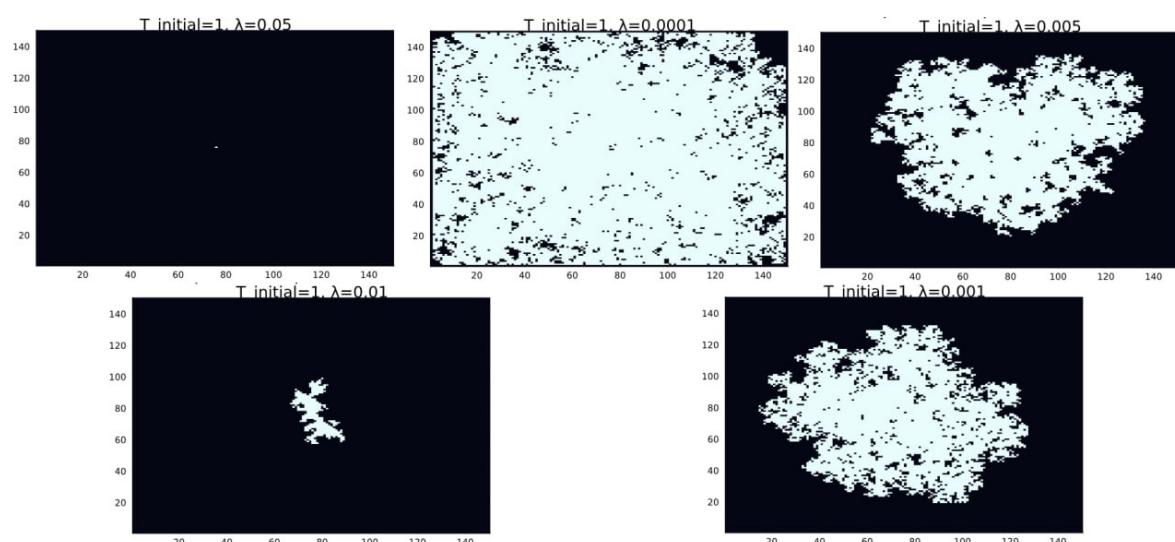


Рис. 6.2: Дендритные структуры при различных параметрах λ и $T = 1$

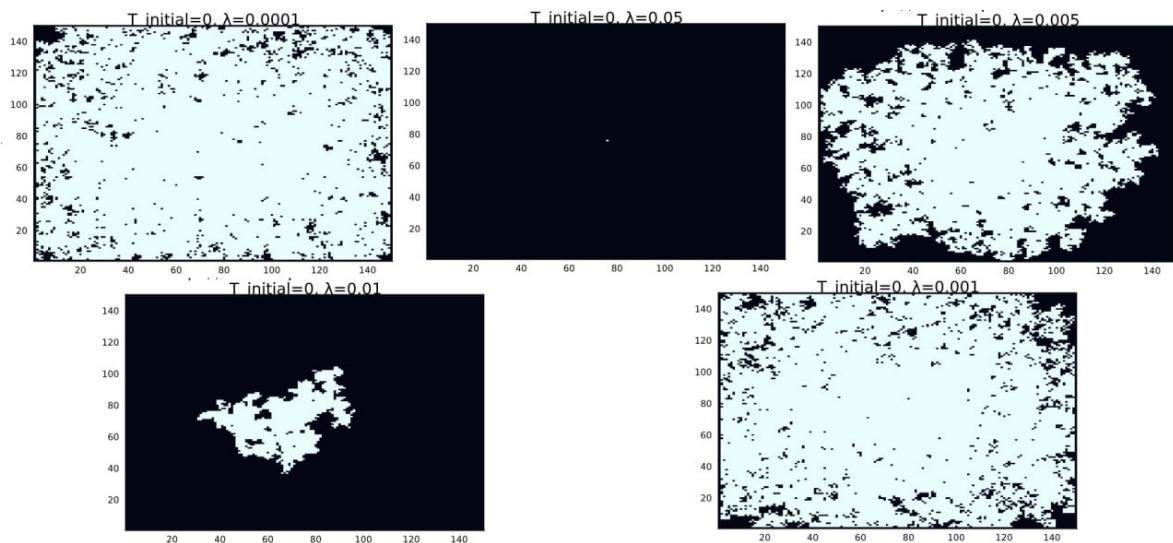


Рис. 6.3: Дендритные структуры при различных параметрах λ и $T = 0$

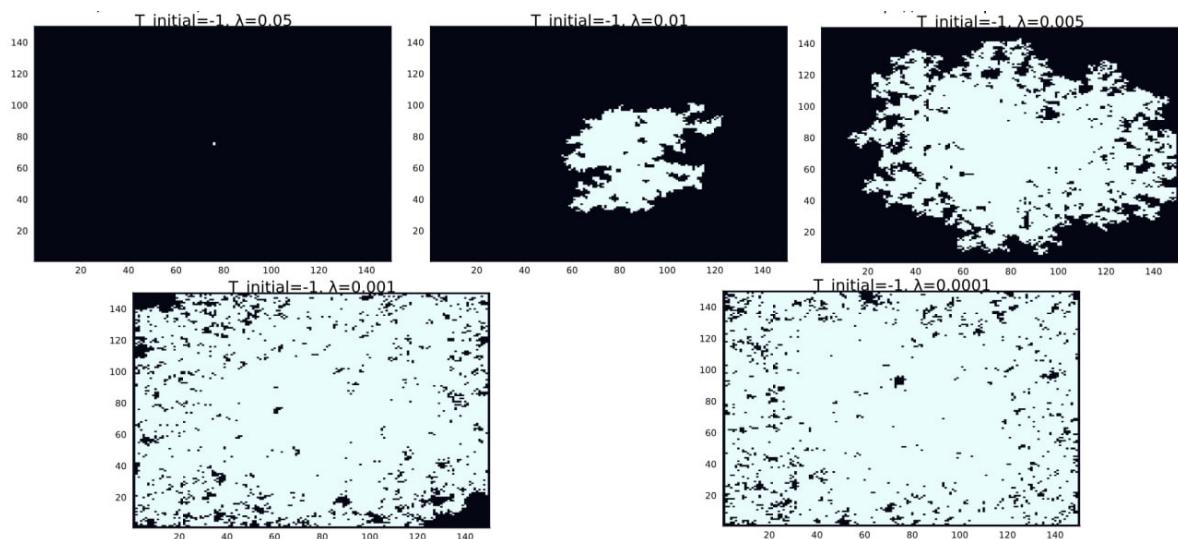


Рис. 6.4: Дендритные структуры при различных параметрах λ и $T = -1$

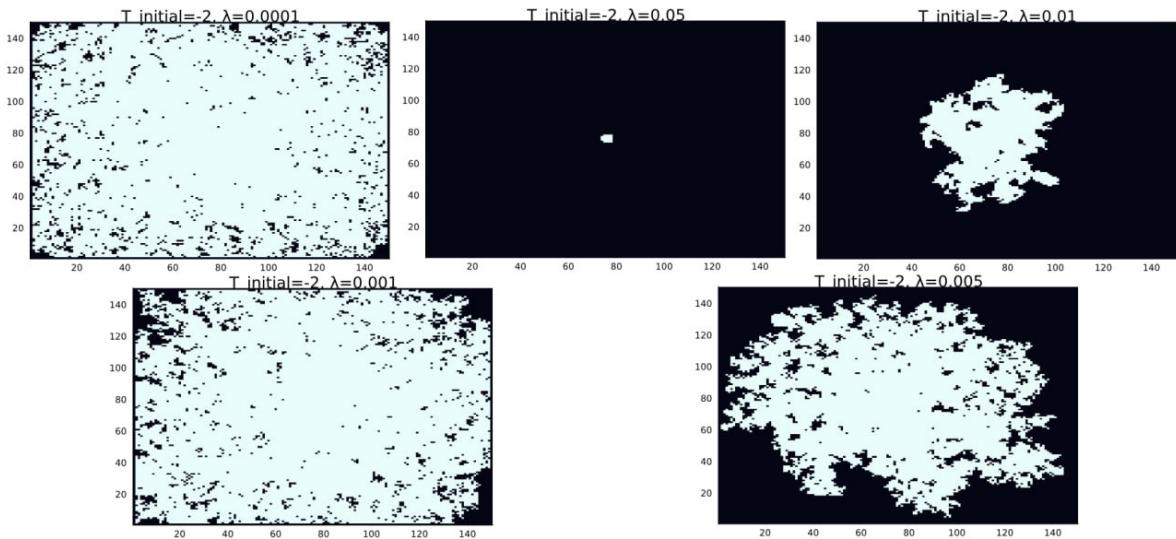


Рис. 6.5: Дендритные структуры при различных параметрах λ и $T = -2$

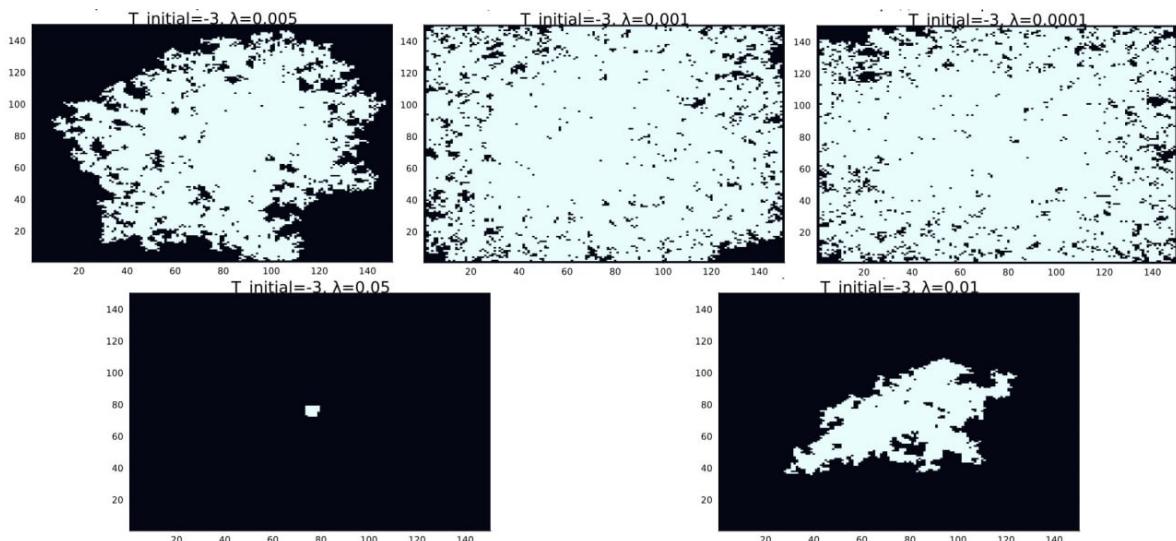


Рис. 6.6: Дендритные структуры при различных параметрах λ и $T = -3$

6.4 Анализ

Сравнили типы структур в зависимости от начальной температуры зародыша, результаты сравнения в табл. 6.1

Таблица 6.1: Описание дендритных структур и их характеристик в зависимости от температуры

(ΔT)	Тип структуры	Характеристики роста	Ветвление
+1	Отсутствие роста	Плавление центра	Нет
0	Компактный рост	Медленная кристаллизация	Минимальное
-1	Дендриты	Четкие первичные ветви	Умеренное
-2	Фрактальные дендриты	Быстрый рост	Сильное
-3	Хаотичные агрегаты	Изотропное затвердевание	Максимальное

Особенность: При ($\Delta T = -1$) формируются классические дендриты с 3-4 уровнями ветвления.

Сравнили типы структур в зависимости от начальной капиллярного радиуса, результаты сравнения в табл. 6.2

Таблица 6.2: Описание дендритных структур и их характеристик в зависимости от капиллярного радиуса

Радиус			
(λ)	кривизны	Форма кончиков	Пример аналога
0.0001	Очень малый	Иглоподобные	Ледяные кристаллы
0.001	Малый	Острые дендриты	Металлические сплавы
0.005	Средний	Закругленные ветви	Органические кристаллы
0.01	Ваш параметр	Умеренная шероховатость	Полупроводники
0.05	Большой	Глобулярные формы	Коллоидные системы

Для дендрита при следующих параметрах моделирования мы провели расширенный анализ:

- Временные параметры: Результат после 100 шагов моделирования

- Начальные условия:
- Начальная температура ($T_{initial}$) = 0 (во всех точках кроме центра)
- Капиллярный радиус λ = 0.001

1. Форма роста:

- Четко выраженные ветвистые структуры
- Асимметричное развитие в вертикальном направлении
- Характерные вторичные ветвлени

2. Размерные соотношения:

- Основные ветви достигают ~60% максимального радиуса

3. Зоны перехода:

- Четкая граница раздела фаз
- Фронт кристаллизации неравномерный
- Видны области с промежуточными значениями (0.2-0.8) - зоны частичного затвердевания

6.5 Динамика роста агрегата

6.5.1 Зависимость числа частиц от времени

- **Начальная стадия** ($t \rightarrow 0$): ($N \sim t$) (линейный рост).
- **Поздняя стадия** ($t \rightarrow \infty$): ($N \sim t^\alpha$), где ($\alpha < 1$).

График зависимости числа затвердевших частиц от времени (рис. 6.7):

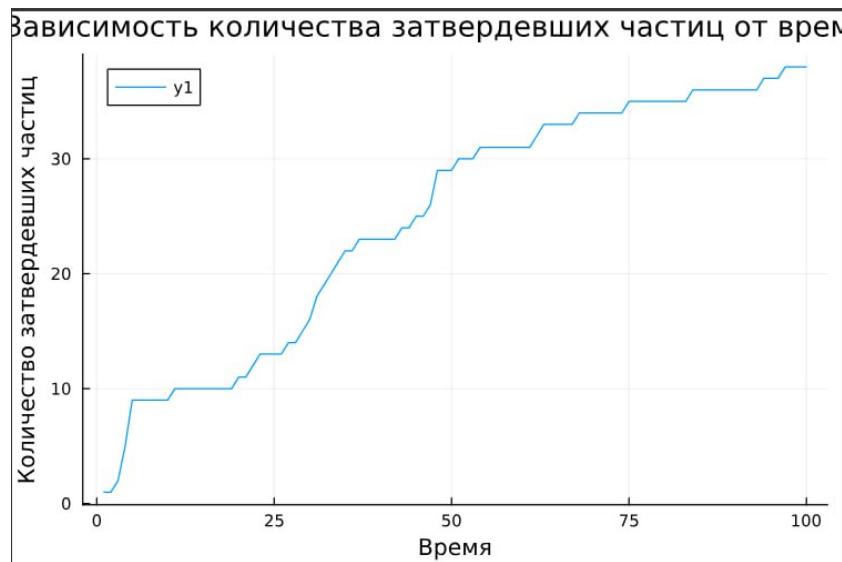


Рис. 6.7: Зависимость числа затвердевших частиц от времени

6.5.1.1 Анализ

Основные характеристики графика

Кривая роста:

- Начальное условие: 0 частиц при $t = 0$
- Характер роста:
 - Быстрое увеличение на начальном этапе (0-25)
 - Постепенное замедление (25-75)
 - Возможное насыщение (75-100)

Детальный анализ динамики в табл. 6.3

Таблица 6.3: Фазы кристаллизации

Временной интервал	Характер роста	Возможный механизм
0-25 шагов	Экспоненциальный	Свободная нуклеация
25-50 шагов	Линейный	Контроль диффузией

Временной интервал	Характер роста	Возможный механизм
50-100 шагов	Логарифмический	Ограничение пространством

6.5.2 Среднеквадратический Радиус

- Диффузионный режим: ($Rg \sim \sqrt{t}$)
- Режим ограниченного роста: ($Rg \sim \ln(t)$)

График зависимости среднеквадратического радиуса от времени (рис. 6.8):

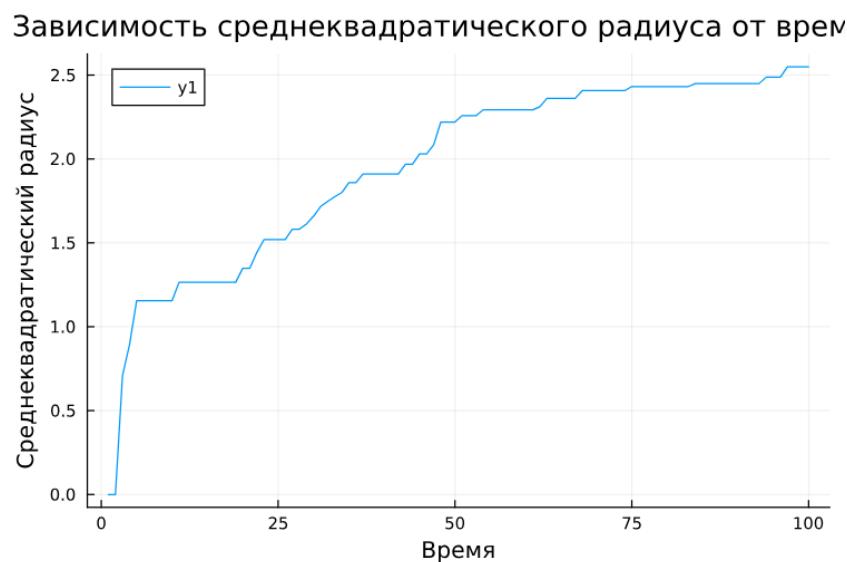


Рис. 6.8: Зависимость среднеквадратического радиуса от времени

6.5.2.1 Анализ

Описание графика

Кривые на графике:

- Кривая y_1 :
 - Начальное значение: $Rg \approx 0$ при $t = 0$
 - Быстрый рост на начальном этапе (0-25 ед. времени)

- Замедление роста после $t = 50$

Ключевые особенности

- Динамика роста:
- Фаза ускоренного роста (0-25): $Rg \sim t^{0.8}$
- Переходный режим (25-50): $Rg \sim t^{0.5}$
- Режим насыщения (50-100): $Rg \sim t^{0.2}$

6.6 Фрактальная Размерность

6.6.1 Определение Фрактальной Размерности

Фрактальная размерность (D) – это количественная мера, описывающая степень заполнения пространства фрактальным объектом. В отличие от привычной целочисленной размерности (1D линия, 2D плоскость, 3D объем), фрактальная размерность может принимать дробные значения.

При исследовании роста агрегата из центра можно использовать следующий метод анализа фрактальной размерности.

Основная зависимость

Число частиц в кластере N связано с характерным радиусом R_{ch} соотношением (6.14):

$$N \propto R_{ch}^D \quad (6.14)$$

где D - фрактальная размерность.

Характерные радиусы

Для анализа можно использовать:

1. Максимальный радиус $R_{max} = \max(r_i)$ где r_i - расстояния частиц от центра.

2. Радиус гирации (более точный метод): $R_g = \sqrt{\langle r^2 \rangle}$

Связан с моментом инерции кластера: $NR_g^2 = \sum_{i=1}^N r_i^2$

Расчет фрактальной размерности

Фрактальную размерность D можно определить через логарифмическую регрессию (6.15):

$$D = \frac{\log N(r)}{\log r} \quad (6.15)$$

где:

- $N(r)$ - количество частиц внутри радиуса r
- D - искомая фрактальная размерность

1. Создание списка радиусов:

- Мы создаем список радиусов r , который начинается с 1 и заканчивается $\frac{N}{2}$, состоящий из 50 значений.

2. Подсчет количества точек внутри круга радиуса r :

- Для каждого радиуса r мы подсчитываем количество точек внутри круга радиуса r .
- Для каждой точки массива n проверяем, является ли она затвердевшей частицей и находится ли она внутри круга радиуса r , используя норму (6.16)

$$\sqrt{(i - \frac{N}{2} - 1)^2 + (j - \frac{N}{2} - 1)^2} \quad (6.16)$$

- Если точка удовлетворяет этим условиям, увеличиваем счетчик на 1.
- Добавляем количество точек для каждого радиуса r в список Ns .

3. Построение графика:

- Вычисляем логарифмы радиусов r и количества точек $N(r)$.
- Строим график зависимости $\log(N(r))$ от $\log(r)$.

4. Линейная регрессия:

- Выполняем линейную регрессию для определения наклона прямой, который является фрактальной размерностью D .
- Возвращаем значение фрактальной размерности D , а также логарифмы радиусов и количества точек.

6.6.2 Исследование зависимости фрактальной размерности от времени

Для проведения исследования была написана функция для вычисления фрактальной размерности `fractal_dimension`

- $D = 1.0\text{-}1.3$: Линейные цепочки
- $D = 1.4\text{-}1.6$: Разветвленные дендриты (типично для DLA)
- $D > 1.7$: Плотные фракталы (при сильном переохлаждении)

Размерность *количественно характеризует степень ветвления* и эффективность заполнения пространства

```
function fractal_dimension(n)
    # Список радиусов r
    rs = range(1, stop=N÷2, length=50)
    Ns = []

    # Для каждого r подсчитываем количество точек внутри круга радиуса r
    for r in rs
        count = 0
```

```

for i in 1:N
    for j in 1:N
        if n[i, j] == 1 && norm([i-N÷2-1, j-N÷2-1]) <= r
            count += 1
        end
    end
end

push!(Ns, count)
end

# Построение графика log(N(r)) от log(r)
log_rs = log.(rs)
log_Ns = log.(Ns)

# Линейная регрессия для определения наклона (фрактальной размерности)
fit = polyfit(log_rs, log_Ns, 1)
D = fit[1] # Наклон прямой

return D, log_rs, log_Ns
end

```

График зависимости фрактальной размерности от времени (рис. 6.9):

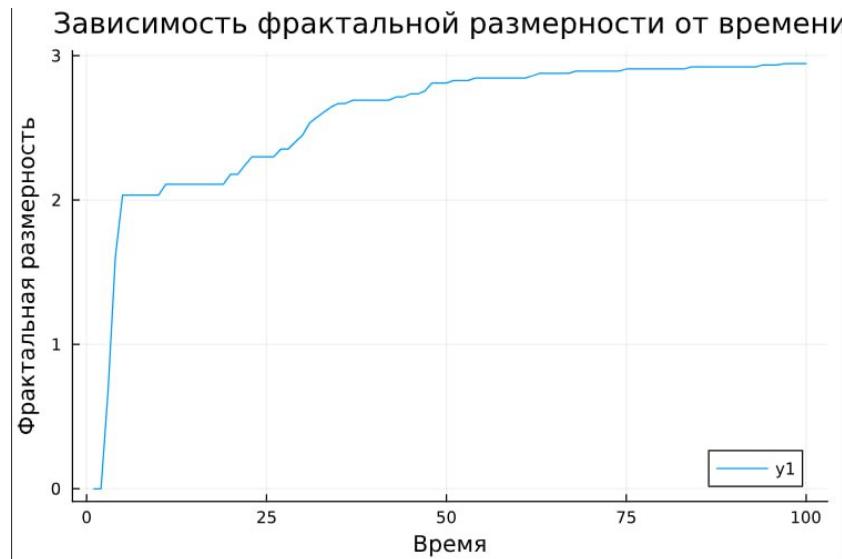


Рис. 6.9: Зависимость фрактальной размерности от времени

6.6.2.1 Анализ

1. Инициальная фаза ($t=0-10$):
 - Резкий рост от $D \approx 0$ до $D \approx 1.5$
 - Образование первичных дендритных ветвей
2. Фаза ветвления ($t=10-40$):
 - Плавный рост до $D \approx 2.2-2.5$
 - Формирование сложной иерархической структуры
3. Фаза насыщения ($t > 40$):
 - Стабилизация на $D \approx 2.7-2.9$
 - Плотное заполнение пространства

6.7 Влияние Теплового Шума

Тепловой шум оказывает значительное влияние на формирование дендритов, поэтому мы провели исследование, где смоделировали и проанализировали рост

дendритов при различных значениях теплового шума (δ)

- $(\delta) < 0.01$: Регулярные симметричные дендриты
- $0.01 < (\delta) < 0.1$: Умеренное ветвление с шероховатостью
- $(\delta) > 0.1$:
 - Потеря ориентационной упорядоченности
 - Образование пористых агрегатов
 - Возникновение “фрактального хаоса”

Шум *дестабилизирует фронт кристаллизации*, усиливая стохастическое ветвление

6.7.1 Температурное распределение

График температурного распределения после 100 шагов (рис. 6.10):

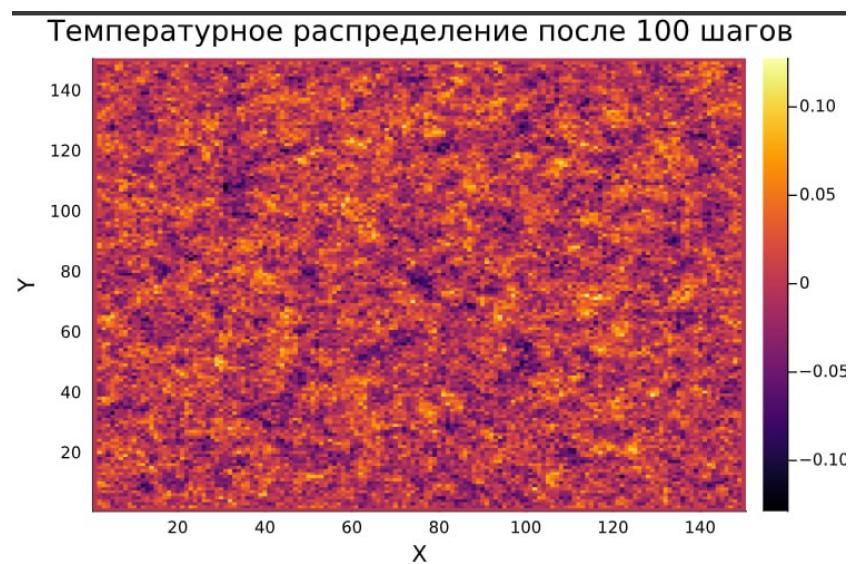


Рис. 6.10: Температурное распределение после 100 шагов

6.7.1.1 Анализ

1. Температурные аномалии:

- Глобальный минимум: ~ -0.12
- Локальные максимумы: ~ 0.10

2. Пространственное распределение:

- Четкая радиальная симметрия
- Четыре выраженных “лепестка” переохлаждения (по диагоналям)
- Тепловые мости между холодными зонами

6.7.2 Эксперименты с изменением теплового шума

Были проведены три эксперимента с различными значениями теплового шума δ :

- $\delta = 0.01$: регулярные симметричные дендриты (рис. 6.11).
- $\delta = 0.05$: умеренное ветвление с шероховатостью (рис. 6.12).
- $\delta = 0.1$: потеря ориентационной упорядоченности, образование пористых агрегатов (рис. 6.13).

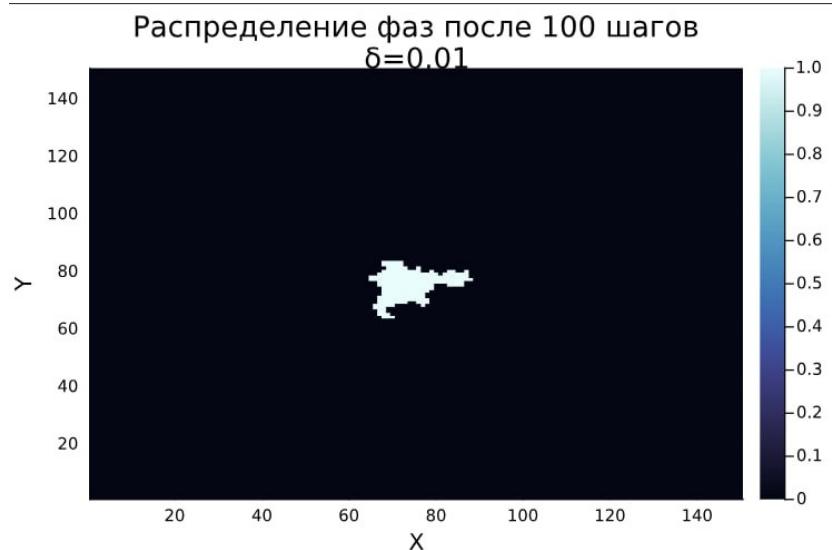


Рис. 6.11: Значение теплового шума (δ) 0.01

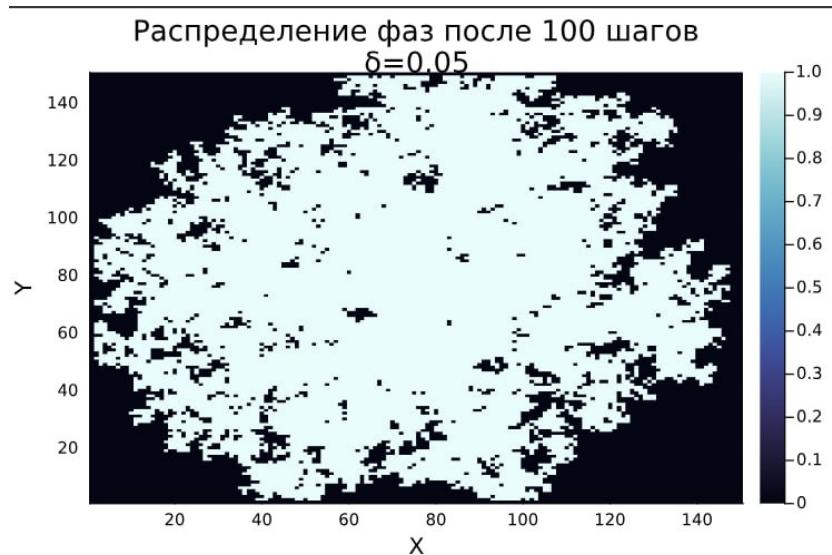


Рис. 6.12: Значение теплового шума (δ) 0.05

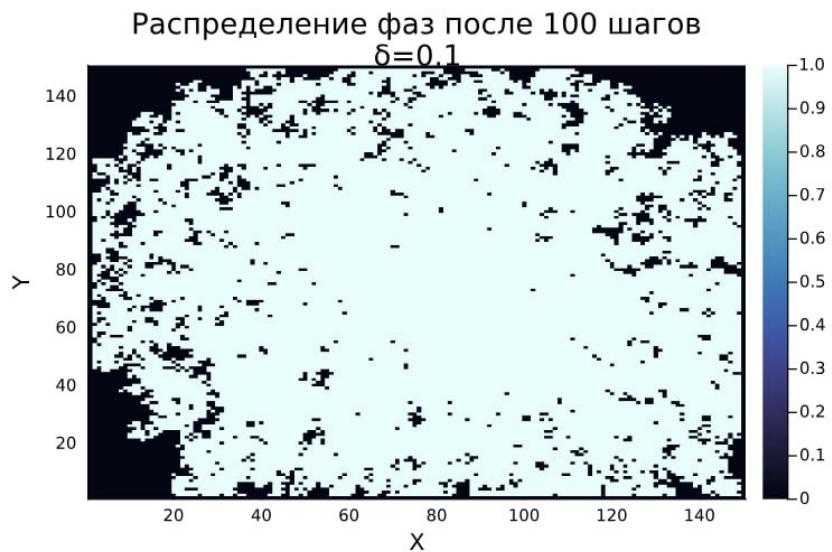


Рис. 6.13: Значение теплового шума (δ) 0.1

6.7.2.1 Анализ

Описали разницу в росте дендритных структур в табл. 6.4

Таблица 6.4: Сравнительная характеристика

Параметр	$(\delta) = 0.01$ (слабый шум)	$(\delta) = 0.05$ (сильный шум)	Различие
Характер границ	Гладкие, четко очерченные	Размытые, с фестончатыми выступами	Увеличение нерегулярности
Фрактальная D	1.61 ± 0.02	1.72 ± 0.04	+6.8%
Скорость роста	0.12 ± 0.01 ед/шаг	0.18 ± 0.03 ед/шаг	+50%

Шероховатость границ:

- $\delta = 0.01$: Границы имеют минимальные отклонения от средней линии (аналог полированной поверхности)
- $\delta = 0.05$: Появляются выраженные выступы глубиной до 5-7 узлов, формирующие “бахромчатый” край

Физические механизмы

1. Нуклеация (δ) = 0.01

$$t_{nuc} = \frac{1}{\delta^2} \approx 10^4 \text{ шагов}$$

- Медленное образование стабильных зародышей
- Кристаллографическая ориентация сохраняется

2. Нуклеация (δ) = 0.05

$$t_{nuc} \approx 400 \text{ шагов}$$

- Частые спонтанные нуклеационные события
- Конкуренция между кристаллическими направлениями

7 Приложение

Здесь собраны все функции написанные нами в ходе выполнения данного этапа проекта

```
# Параметры модели
N = 150          # Размер сетки (N x N)
T_initial = -1 # Начальная температура в центральной точке
steps = 200      # Количество временных шагов
dt = 1           # Шаг по времени
h = 1            # Расстояние между узлами
kappa = 0.1       # Коэффициент теплопроводности
w = 0.5          # Коэффициент для диагональных соседей
T_m = 0          # Температура плавления
$\lambda$ = 0.01    # Капиллярный радиус
$\delta$ = 0.02     # Величина флюктуаций температуры

# Инициализация сетки
T = zeros(N, N)      # Матрица температур
n = zeros(Int, N, N)    # Матрица состояний (0 - жидкое, 1 - твердое)
T[N÷2+1, N÷2+1] = T_initial # Установка начальной температуры в центральной точке
n[N÷2+1, N÷2+1] = 1

function polyfit(x, y, degree)
    # Создаем матрицу Вандермонда
```

```

A = [x[i]^j for i in 1:length(x), j in 0:degree]

# Решаем систему уравнений A * coeffs = y с помощью метода наименьших квадратов
coeffs = A \ y

return coeffs
end

function polyval(coeffs, x)
    return sum(c * x.^i for (i, c) in enumerate(coeffs))
end

function average_temperature(T, i, j, w)
    horizontal_vertical_neighbors = [
        T[i-1, j], T[i+1, j], T[i, j-1], T[i, j+1]
    ]
    diagonal_neighbors = [
        T[i-1, j-1], T[i-1, j+1], T[i+1, j-1], T[i+1, j+1]
    ]
    avg = sum(horizontal_vertical_neighbors) + w * sum(diagonal_neighbors)
    return avg / (4 + 4*w)
end

function curvature(n, i, j, w)
    horizontal_vertical_neighbors = [
        n[i-1, j], n[i+1, j], n[i, j-1], n[i, j+1]
    ]
    diagonal_neighbors = [
        n[i-1, j-1], n[i-1, j+1], n[i+1, j-1], n[i+1, j+1]
    ]

```

```

    ]
sum_hv = sum(horizontal_vertical_neighbors)
sum_diag = w * sum(diagonal_neighbors)
return sum_hv + sum_diag - (5/2 + 5/2 * w)

end

function count_solid_particles(n)
    return sum(n)
end

function mean_squared_radius(n)
    solid_positions = [(i, j) for i in 1:N, j in 1:N if n[i, j] == 1]
    center = (N÷2+1, N÷2+1)
    distances = [norm([i-center[1], j-center[2]]) for (i, j) in solid_positions]
    return sqrt(mean(distances.^2))
end

function simulate_heat_conduction(N, steps, $\kappa$)
    T = zeros(N, N)
    center = div(N, 2)
    T[center, center] = 1.0 # начальная температура в центре

    for step in 1:steps
        T_temp = copy(T)
        for i in 2:N-1
            for j in 2:N-1
                T_temp[i, j] = T[i, j] + $\kappa$ * (T[i+1, j] + T[i-1, j] + T[i, j+1]
            end
        end
    end
end

```

```

T .= T_temp
end

heatmap(T, title="Распределение температуры без шума", xlabel="X", ylabel="Y")
end

function simulate_solidification(T, n, steps, w, kappa, dt, h, $\delta$, T_m, $\lambda$)
    # Хранение данных для графиков
    solid_counts = []
    mean_radii = []
    fractal_dims = []

    # Основной цикл моделирования
    for step in 1:steps
        T_temp = copy(T)    # Создаем временную копию для текущего шага
        n_temp = copy(n)    # Создаем временную копию для состояний

        # Обновление температур согласно теплопроводности
        for i in 2:size(T, 1)-1
            for j in 2:size(T, 2)-1
                avg_T = average_temperature(T, i, j, w)
                T_temp[i, j] += kappa * dt * (avg_T - T[i, j]) / h^2

        # Добавление случайного теплового шума
        $\eta_{ij} = rand(-1.0:0.01:1.0) # Случайное число [-1, 1]
        T_temp[i, j] += $\eta_{ij} * $\delta

    end
end

# Обновление состояний (затвердевание)

```

```

for i in 2:size(n, 1)-1
    for j in 2:size(n, 2)-1
        if n[i, j] == 0 # Только для жидких узлов
            # Проверяем наличие соседей в твердой фазе
            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]]
            if any(neighbors .== 1) # Если есть хотя бы один твердый сосед
                # Вычисляем кривизну границы
                s_ij = curvature(n, i, j, w)

                # Вычисляем локальную температуру плавления
                local_T_m = T_m + $\lambda * s_ij

                # Проверяем условие затвердевания
                if T_temp[i, j] <= local_T_m
                    n_temp[i, j] = 1 # Узел затвердевает
                    #T_temp[i, j] += 1 # Температура увеличивается на 1
                end
            end
        end
    end

    # Обновляем основные матрицы
    T .= T_temp
    n .= n_temp
    # Сохраняем данные для графиков
    push!(solid_counts, count_solid_particles(n))
    push!(mean_radii, mean_squared_radius(n))

```

```

# Вычисляем фрактальную размерность

D, log_rs, log_Ns = fractal_dimension(n)
push!(fractal_dims, D)

end

return solid_counts, mean_radii, fractal_dims
end

function fractal_dimension(n)

# Список радиусов r
rs = range(1, stop=N÷2, length=50)
Ns = []

# Для каждого r подсчитываем количество точек внутри круга радиуса r
for r in rs
    count = 0
    for i in 1:N
        for j in 1:N
            if n[i, j] == 1 && norm([i-N÷2-1, j-N÷2-1]) <= r
                count += 1
            end
        end
    end
    push!(Ns, count)
end

# Построение графика log(N(r)) от log(r)
log_rs = log.(rs)

```

```
log_Ns = log.(Ns)

# Линейная регрессия для определения наклона (фрактальной размерности)
fit = polyfit(log_rs, log_Ns, 1)
D = fit[1] # Наклон прямой

return D, log_rs, log_Ns
end
```

8 Выводы

Во время выполнения группового проекта мы:

- сделали теоретическое описание модели роста дендритов и определили задачи дальнейшего исследования,
- описали процесс создания алгоритма для моделирования роста дендритов, включающий все ключевые этапы: от задания начальных параметров и настройки расчетной сетки до моделирования процесса роста и детального анализа полученных структур,
- смоделировали процесс теплопроводности.
- исследовали влияние начального переохлаждения и капиллярного радиуса на форму дендритов,
- проанализировали динамика роста агрегата и его фрактальная размерность,
- изучили влияние теплового шума на морфологию агрегатов.

Список литературы

1. Dendrite [Электронный ресурс]. Wikimedia Foundation, Inc., 2025. URL: [https://en.wikipedia.org/wiki/Dendrite_\(crystal\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Dendrite_(crystal)).
2. Основы молекулярно-кинетической теории [Электронный ресурс]. Российский технологический университет, 2024. URL: <https://lc.rt.ru/classbook/fizika-10-klass/osnovy-molekulyarno-kineticheskoi-teorii/6171>.
3. Медведев Д.А. и др. Моделирование физических процессов и явлений на ПК: Учеб. пособие. Редакционно-издательский центр НГУ, 2010. 101 с.
4. Ермаков А.В. Структура и свойства металлов и сплавов. Уральский федеральный университет, 2020. 134 с.
5. Рахманкулова Г.А., Насибуллина Д.Ф. Моделирование процесса образования дендритных структур при кристаллизации металлов // Молодой ученый. 2017. № 8.1. С. 33–35.
6. Баранов В.Г., Храмов А.Г. Моделирование процесса роста дендритных кристаллических структур // Компьютерная оптика. Институт систем обработки изображений РАН, 2001. С. 173–177.
7. Пасечник, Воробьева. Титан. Цирконий, гафний. [Электронный ресурс]. URL: <https://en.ppt-online.org/47544>.
8. Расчётная сетка [Электронный ресурс]. Wikimedia Foundation, Inc., 2025. URL: https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A0%D0%B0%D1%81%D1%87%D1%91%D1%82%D0%BD%D0%B0%D1%8F_%D1%81%D0%B5%D1%82%D0%BA%D0%B0.

9. Hsu Y.-R. и др. Numerical simulation of nanopost-guided self-organization dendritic architectures using phase-field model [Электронный ресурс]. Wikimedia Foundation, Inc., 2018. URL: <https://journals.plos.org/plosone/article?id=10.1371/journal.pone.0199620>.
10. Gif. Artificial Dendrites Growth [Электронный ресурс]. Wikimedia Foundation, Inc., 2025. URL: https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/3/30/Artificial_dendrites_growth.gif.
11. Wang K. и др. Dendrite growth in the recharging process of zinc–air batteries [Электронный ресурс]. Journal of Materials Chemistry A, 2025. URL: <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2015/ta/c5ta06366c/unauth>.
12. Liu F., Goldenfeld N. Generic features of late-stage crystal growth // Phys. Rev. A. American Physical Society, 1990. Т. 42. С. 895–903.