

Групповой проект. Этап 2

Алгоритм решения задачи Рост дендритов

Александрова Ульяна Вадимовна

Волгин Иван Алексеевич

Голощапов Ярослав Вячеславович

Дворкина Ева Владимировна

Серёгина Ирина Андреевна

Чемоданова Ангелина Александровна

Содержание

1 Введение	4
1.1 Цели	4
1.2 Задачи	4
2 Алгоритмы	5
2.1 Шаг 1: Описание алгоритма	5
2.1.1 Физические свойства вещества:	5
2.1.2 Начальные условия:	6
2.2 Шаг 2: Настройка симуляционной сетки	7
2.2.1 Создание симуляционной сетки:	7
2.2.2 Инициализация затравки:	7
2.3 Шаг 3: Расчет температурного поля	8
2.3.1 Применение уравнения теплопроводности:	8
2.3.2 Численная реализация уравнения:	8
2.3.3 Шаги алгоритма:	9
2.4 Шаг 4: Моделирование роста дендритов	9
2.4.1 Критерий затвердевания:	9
2.4.2 Использование условия Стефана:	9
2.4.3 Применение условия Гиббса-Томсона:	10
2.4.4 Обновление параметров:	10
2.4.5 Определение фрактальной размерности	10
2.5 Шаг 5: Анализ структуры дендритов	11
2.5.1 Морфологический анализ:	11
2.5.2 Корреляционный анализ:	12
2.5.3 Исследование влияния теплового шума δ	12
2.6 Шаг 6: Визуализация процесса	12
2.6.1 Визуализация роста дендритов:	12
3 Вывод	15
Список литературы	16

Список иллюстраций

2.1	Физические свойства вещества на примере Гафния	6
2.2	Функция двух переменных Φ , заданная на структурированной сетке	8
2.3	Фазовое и температурное поле при росте дендрита	11
2.4	Симуляция роста дендрита[6]	13
2.5	Рост дендрита	13
2.6	Рост дендрита	14
2.7	Рост дендрита	14

1 Введение

На втором этапе группового проекта описывается алгоритм решения задачи моделирования кристаллизации.

Алгоритм - систематизированная последовательность действий, необходимых для достижения поставленной цели. В контексте научных исследований алгоритмы важны не только для повышения эффективности вычислений, но и для обеспечения воспроизводимости результатов, что является фундаментальным требованием научного метода.

1.1 Цели

Описать алгоритм решения задачи моделирования роста дендритов.

1.2 Задачи

Описать алгоритм решения задачи моделирования роста дендритов.

2 Алгоритмы

2.1 Шаг 1: Описание алгоритма

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.

2.1.1 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. 2.1).
- 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 [1].

Гафний Hf

<div>72 Hf</div> <div>Гафний Hafnium</div> <div>(Xe)4f¹⁴5d²6s²</div>	Атомный номер	72
	Атомная масса	178,49
	Плотность, кг/м ³	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. 2.1: Физические свойства вещества на примере Гафния

2.1.2 Начальные условия:

- Исходная температура расплава T_{∞} : Задаёт 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.
- Граничные условия: задают поведение системы на границах расчетной области.
- Условия теплообмена с окружающей средой [2]

2.2 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.

2.2.1 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.

2.2.2 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. 2.2) [3].

- Выбор временного шага Δt и пространственного шага h важен для стабильности и точности расчетов.

2.3.3 Шаги алгоритма:

- Вычислить новое распределение температуры на каждом шаге времени t ;
- Обновлять значения температуры в каждой точке сетки;
- Повторять вычисления до достижения стационарного состояния или заданного времени.

2.4 Шаг 4: Моделирование роста дендритов

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

2.4.1 Критерий затвердевания:

Определить температуру плавления T когда температура в точке падает ниже T_m , она начинает затвердевать.

2.4.2 Использование условия Стефана:

- Условие Стефана (2.2):

$$V = \frac{\kappa}{\rho L} (\nabla T|_s - \nabla T|_l) \quad (2.2)$$

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.

2.4.3 Применение условия Гиббса-Томсона:

- Условие Гиббса-Томсона (2.3):

$$T_b = T_m \left(1 - \frac{\gamma T_m}{\rho L^2 R} \right) \quad (2.3)$$

корректирует температуру плавления на границе кристалла. При этом учитываются влияние поверхностного натяжения и кривизна границы.

2.4.4 Обновление параметров:

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

2.4.5 Определение фрактальной размерности

Фрактальная размерность D описывает степень заполнения пространства структурой. Для расчета можно использовать метод корреляционной функции или масштабирования (2.4):

$$N(r) \sim r^D \quad (2.4)$$

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. 2.3) [4].

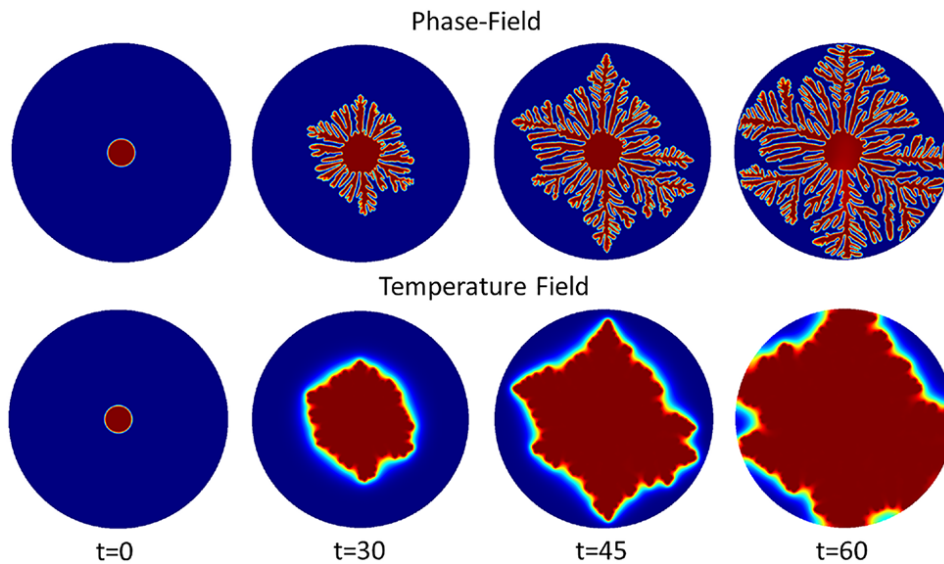


Рис. 2.3: Фазовое и температурное поле при росте дендрита

2.5 Шаг 5: Анализ структуры дендритов

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

2.5.1 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.

2.5.2 Корреляционный анализ:

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

2.5.3 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.

2.6 Шаг 6: Визуализация процесса

Шестой этап алгоритма представляет собой визуализацию роста дендритов.

2.6.1 Визуализация роста дендритов:

1. Применение графических средств для генерации изображений и анимации, иллюстрирующих этапы формирования дендритов и их окончательную конфигурацию (рис. 2.4) [5].

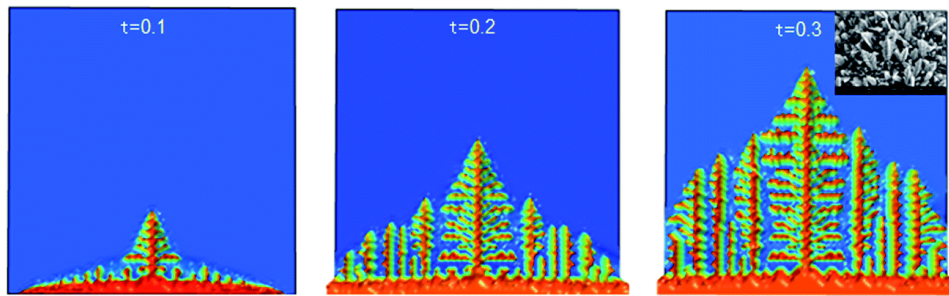


Рис. 2.4: Симуляция роста дендрита[6]

2. Визуальное представление данных играет ключевую роль в интерпретации результатов и обеспечивает понимание моделируемого процесса (рис. 2.5), (рис. 2.6), (рис. 2.7).

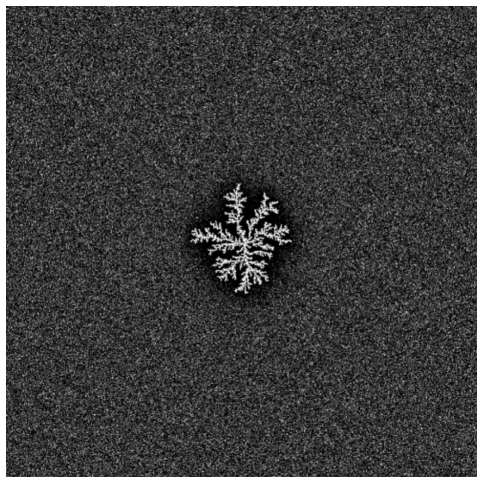


Рис. 2.5: Рост дендрита

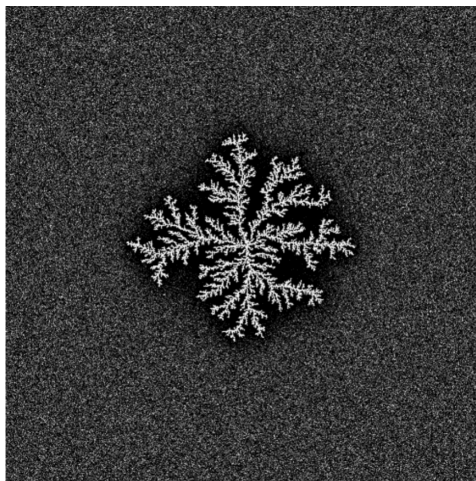


Рис. 2.6: Рост дендрита

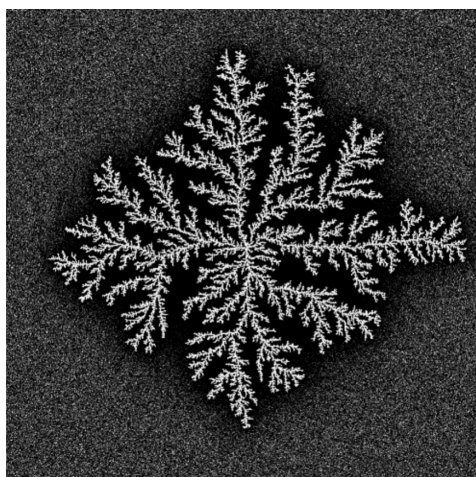


Рис. 2.7: Рост дендрита

3 Вывод

Во втором этапе группового проекта был описан 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.

Использование алгоритмов позволяет решать задачи более эффективно и точно, каждый этап вносит важный вклад в формирование целостного понимания исследуемого явления.

Список литературы

1. Пасечник, Воробьева. Титан. Цирконий, гафний. [Электронный ресурс]. URL: <https://en.ppt-online.org/47544>.
2. Медведев Д.А. и др. Моделирование физических процессов и явлений на ПК: Учеб. пособие. Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т., 2010. 101 с.
3. 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.
4. 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>.
5. Gif. Artificial Dendrites Growth [Электронный ресурс]. Wikimedia Foundation, Inc., 2025. URL: https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/3/30/Artificial_dendrites_growth.gif.
6. 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>.