

Алгоритм решения задачи Рост дендритов

Групповой проект. Этап 2

Дворкина Е.В., Чемоданова А.А., Серёгина И.А., Волгин И.А., Александрова У.В., Голощапов Я.В.

9 апреля 2025

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

- Александрова Ульяна Вадимовна
- Волгин Иван Алексеевич
- Голощапов Ярослав Вячеславович
- Дворкина Ева Владимировна
- Серёгина Ирина Андреевна
- Чемоданова Ангелина Александровна

- Волгин Иван Алексеевич
- студент учебной группы НФИбд-01-22
- Российский университет дружбы народов
- <https://github.com/iavolgin>



- Чемоданова Ангелина Александровна
- студент учебной группы НФИбд-02-22
- Российский университет дружбы народов
- <https://github.com/aachemodanova>



- Описать алгоритм решения задачи моделирования роста дендритов

Описание алгоритма

Шаг 1: Задание начальных условий

- Плотность ρ
- Удельная теплота плавления L
- Теплоемкость $ср$
- Коэффициент теплопроводности κ
- Температура плавления T_m
- Коэффициент поверхностного натяжения γ
- Параметры анизотропии

Гафний Hf

72	Hf	Атомный номер	72
	Гафний	Атомная масса	178,49
	Hafnium	Плотность, кг/м³	13100
	(Xe)4f ¹⁴ 5d ² 6s ²	Температура плавления, °C	2222
		Температура кипения, °C	5227
		Теплоемкость, кДж/(кг·°C)	0,147
		Электроотрицательность	1,3
		Ковалентный радиус, Å	1,44
		1-й ионизаци. потенциал, эВ	7,30

Рис. 1: Физические свойства вещества на примере Гафния

Начальные условия:

- Исходная температура расплава T_∞
- Безразмерное переохлаждение $S = Lcp(T_m - T_\infty)$
- Граничные условия
- Условия теплообмена с окружающей средой

Шаг 2: Настройка симуляционной сетки и инициализация затравки

- Размер сетки $N \times N$
- Пространственный шаг h
- Центральная область твердой фазы
- Параметры формы и размеров

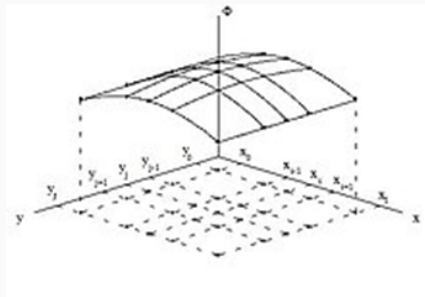


Рис. 2: Функция двух переменных Φ , заданная на структурированной сетке

- Уравнение теплопроводности

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T \quad (1)$$

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

- 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.

Шаг 4: Моделирование роста дендритов

Критерий затвердевания: Когда температура в точке падает ниже температуры плавления T_m , вещество в точке начинает затвердевать.

Условие Стефана:

$$V = \frac{\kappa}{\rho L} (\nabla T|_s - \nabla T|_l) \quad (2)$$

Условие Гиббса-Томсона:

$$T_b = T_m \left(1 - \frac{\gamma T_m}{\rho L^2 R} \right) \quad (3)$$

$$N(r) \sim r^D \quad (4)$$

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

- Выбрать множество точек, принадлежащих образованной структуре
- Для разных значений r подсчитать количество точек внутри круга
- Построить график $\log(N(r))$ от $\log(r)$

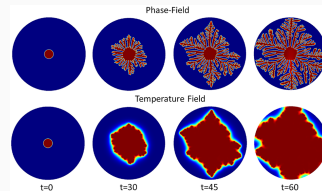


Рис. 3: Фазовое и температурное поле при росте дендрита

- Морфологический анализ
- Корреляционный анализ

- Добавлять случайное возмущение к температуре $\eta_{i,j}\delta$, где $\eta_{i,j}$ — случайная величина из отрезка $[-1, 1]$.
- Повторить моделирование для разных δ
- Сравнить результаты

Шаг 6: Визуализация процесса

Применение графических средств для иллюстраций этапов формирования дендритов

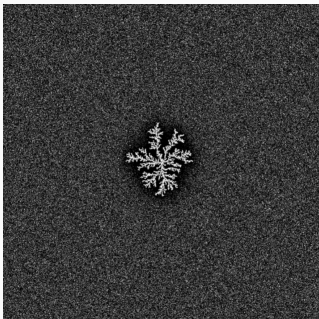


Рис. 4: Рост дендрита

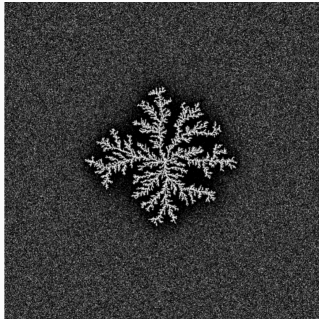


Рис. 5: Рост дендрита

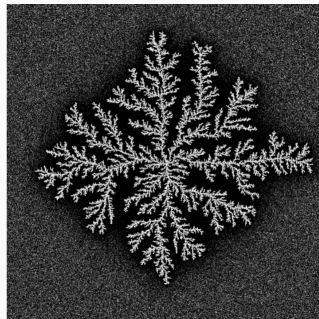


Рис. 6: Рост дендрита

Описали алгоритм моделирования роста дендритов, включающий все ключевые этапы.