Групповой проект. Этап 3

Описание программной реализации

Дворкина Е.В.

Чемоданова А.А.

Серёгина И.А.

Волгин И.А.

Александрова У.В.

Голощапов Я.В.

Содержание

# 1 Введение

Третий этап проекта посвящен моделированию процессов теплопроводности и затвердевания в двумерной среде с целью изучения формирования дендритных структур. Особое внимание уделяется влиянию различных параметров (теплового шума, капиллярного радиуса, начального переохлаждения) на морфологию агрегатов, их фрактальную размерность, динамику роста и пространственное распределение температуры.

## 1.1 Актуальность

Появление дендритов играет ключевую роль в металлургии и литейном производстве, особенно при затвердевании металлов и сплавов, поскольку микроструктура образующихся дендритов во многом определяет механические, электрические и термические свойства получаемых материалов. Изучение их характеристик важно не только для теоретического понимания процессов кристаллизации, но и для практики, для совершенствования технологий производства современных материалов с заданными свойствами.

## 1.2 Объект исследования

* Дендриты
* Кристаллические дендриты

## 1.3 Цели

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

# 2 Практическая часть

## 2.1 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.

### 2.1.1 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 и .
   * Решает систему уравнений
   * 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

1. polyval(coeffs, x):
   * Вычисляет значения полинома для заданных коэффициентов
   * и точек .

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

### 2.1.2 Параметры модели

Модель использует следующие параметры [1] :

* Размер сетки: матрица
* Начальная температура (в центральной точке):
* Количество временных шагов: $ = 200 $
* Шаг по времени:
* Расстояние между узлами:
* Коэффициент теплопроводности:
* Коэффициент для диагональных соседей:
* Температура плавления:
* Капиллярный радиус:
* Величина флуктуаций температуры:

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 каппа должен быть  
w = 0.5 # Коэффициент для диагональных соседей  
T\_m = 0 # Температура плавления  
$\lambda$ = 0.01 # Капиллярный радиус  
$\delta$ = 0.02 # Величина флуктуаций температуры

### 2.1.3 Инициализация сетки

Для моделирования создается двумерная сетка [2] :

* Матрица температур : Инициализируется нулями, за исключением центральной точки, где устанавливается начальная температура
* Матрица состояний : Инициализируется нулями (жидкая фаза), за исключением центральной точки, которая сразу затвердевает .

# 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

### 2.1.4 Базовые функции

#### 2.1.4.1 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 (1):

1. Берутся значения температуры диагональных соседей (2):

1. Вычисляется среднее значение (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

#### 2.1.4.2 Вычисление кривизны границы

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

1. Берутся значения состояний соседних точек по горизонтали и вертикали (4):

1. Берутся значения состояний диагональных соседей (5):

1. Вычисляется кривизна (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

#### 2.1.4.3 Подсчет количества затвердевших частиц

Функция count\_solid\_particles(n) подсчитывает количество затвердевших частиц(7):

function count\_solid\_particles(n)  
 return sum(n)  
end

#### 2.1.4.4 Вычисление Среднеквадратического Радиуса

Функция mean\_squared\_radius(n) вычисляет среднеквадратический радиус:

1. Находятся позиции всех затвердевших частиц (8):

1. Определяется центр массива (9):

1. Вычисляются расстояния от каждой затвердевшей частицы до центра (10):

1. Находится среднеквадратический радиус (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

## 2.2 Модель Теплопроводности

### 2.2.1 Описание модели

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

* Температура во всех точках равна нулю, за исключением центральной точки, где она устанавливается равной .

Уравнение обновления температуры для каждой точки имеет вид (12):

где:

* : коэффициент теплопроводности,
* : временной шаг,
* : пространственный шаг.

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

### 2.2.2 Реализация

Была написана функция simulate\_heat\_conduction. Она включает следующие этапы:

1. **Инициализация**: Создание матрицы температур и установка начальной температуры в центральной точке.
2. **Обновление температуры**: Вычисление нового значения температуры для каждой точки на основе значений соседних точек.
3. **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] + T[i, j-1] - 4 \* T[i, j])  
 end  
 end  
 T .= T\_temp  
 end  
  
 heatmap(T, title="Распределение температуры без шума", xlabel="X", ylabel="Y")  
end

### 2.2.3 Результаты

На графике (рис. 1) показано распределение температуры после завершения моделирования:

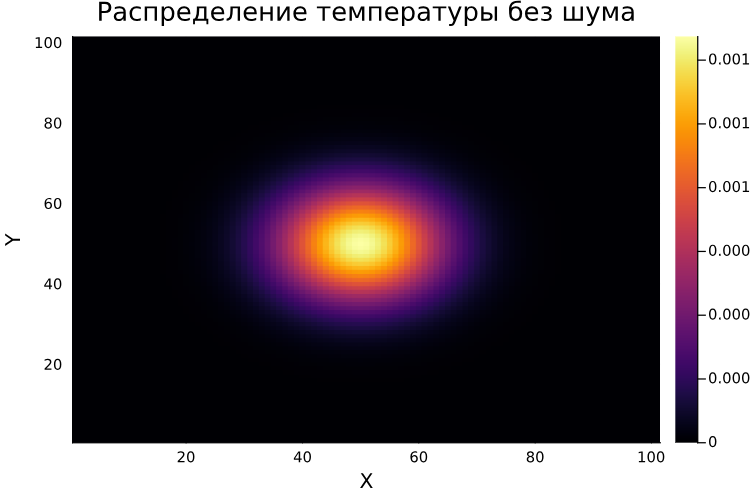


Рис. 1: Распределение температуры без шума

**Анализ**:

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

## 2.3 Добавление Процесса Затвердевания

### 2.3.1 Условие Фазового Перехода

Точка переходит в твердую фазу, если выполняется условие (13):

где:

* - текущая температура узла
* - безразмерная температура плавления (с учетом начального переохлаждения)
* - случайный шумовой параметр
* - амплитуда теплового шума
* - эффективный капиллярный радиус
* - параметр, связанный с кривизной границы

### 2.3.2 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 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 = 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  
 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

### 2.3.3 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. 2), 0 (рис. 3), -1 (рис. 4) , -2 (рис. 5) , -3 (рис. 6) .

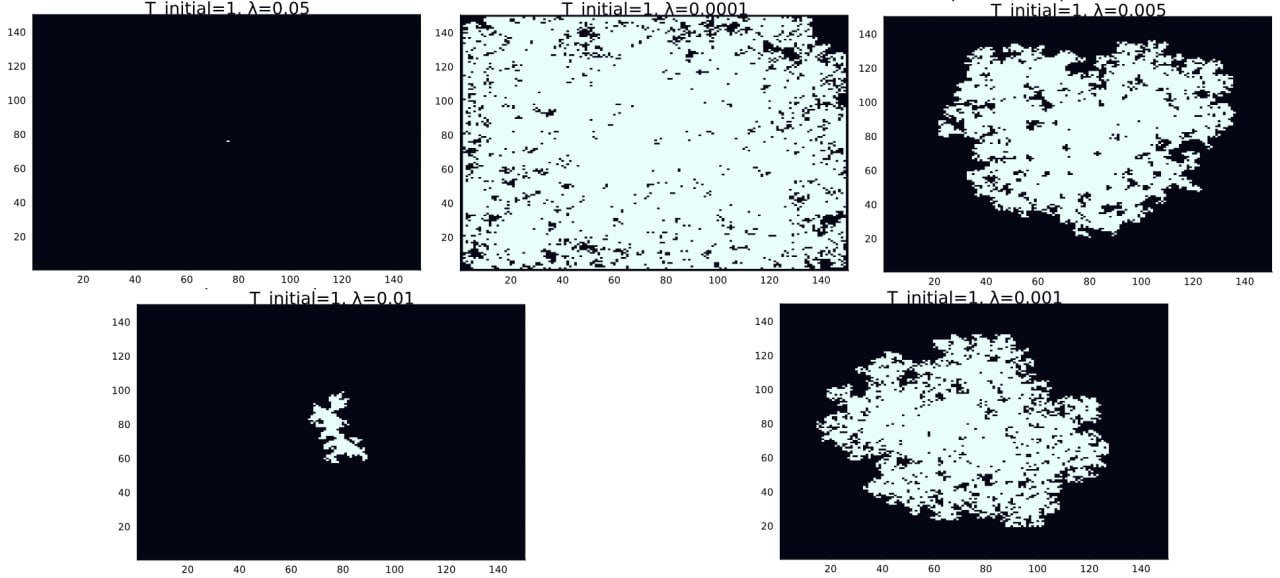


Рис. 2: Дендритные структуры при различных параметрах lambda и T = 1

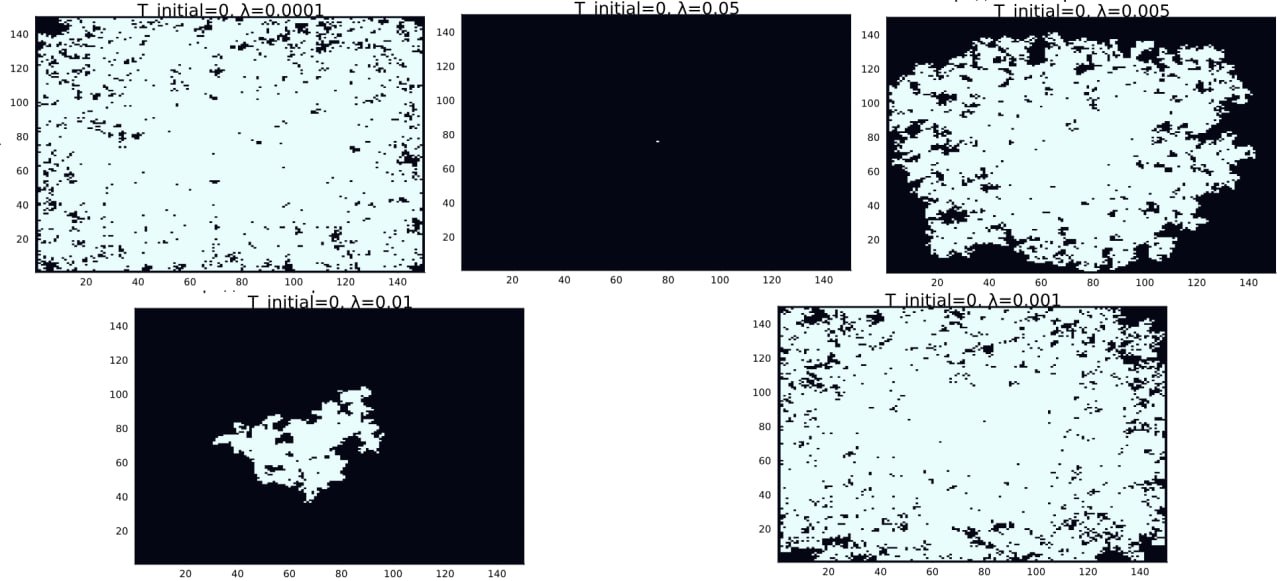


Рис. 3: Дендритные структуры при различных параметрах lambda и T = 0

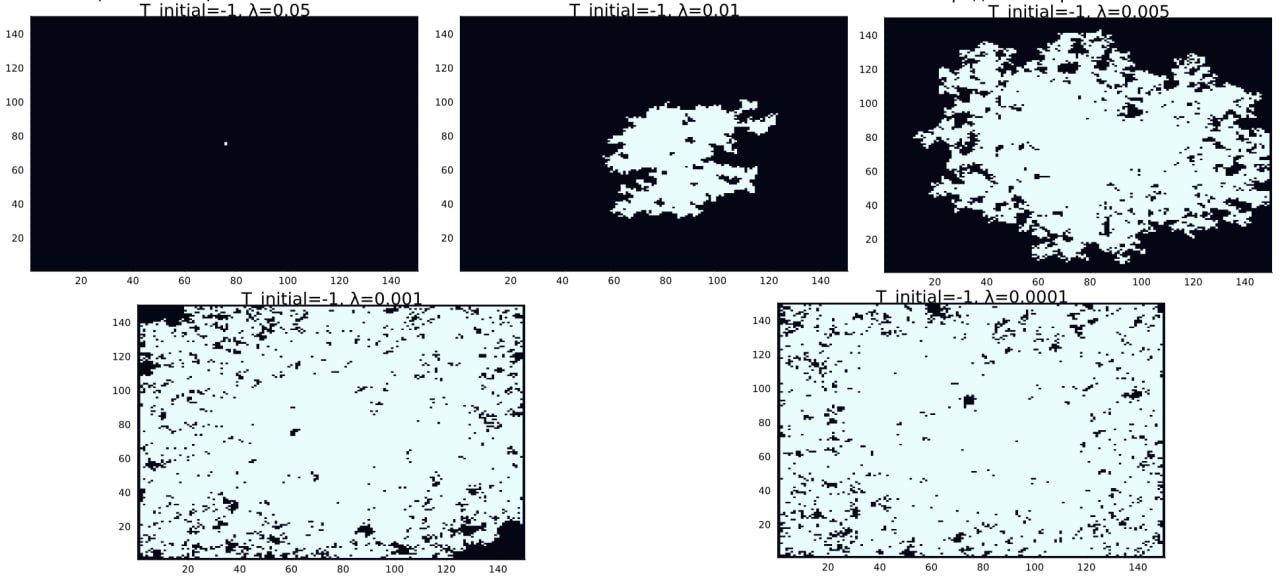


Рис. 4: Дендритные структуры при различных параметрах lambda и T = -1

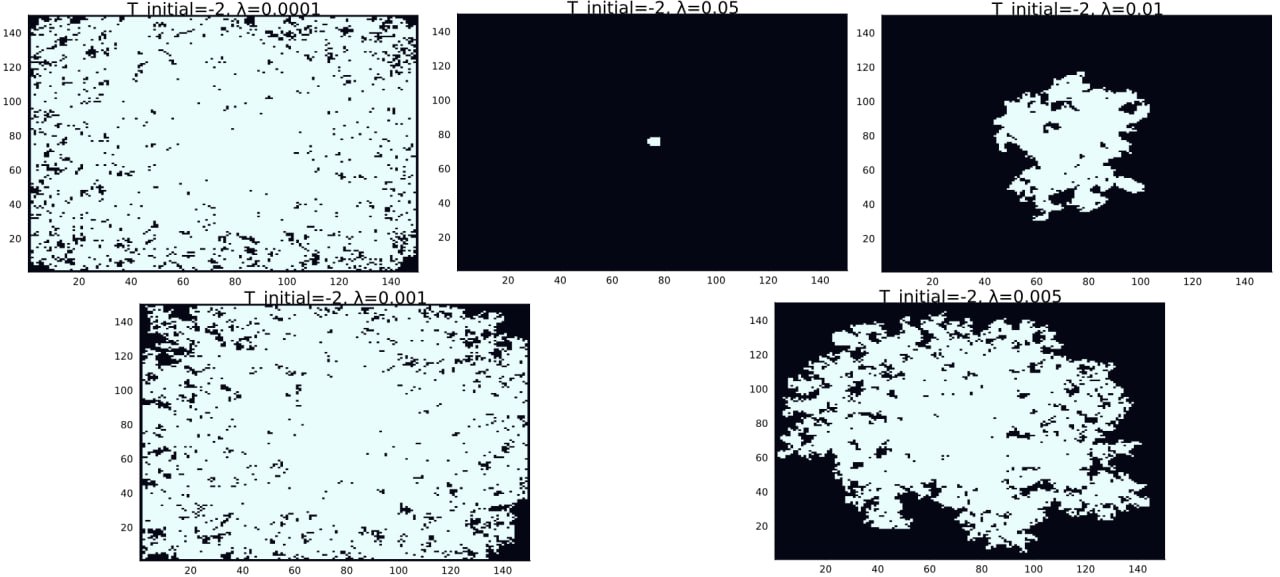


Рис. 5: Дендритные структуры при различных параметрах lambda и T = -2

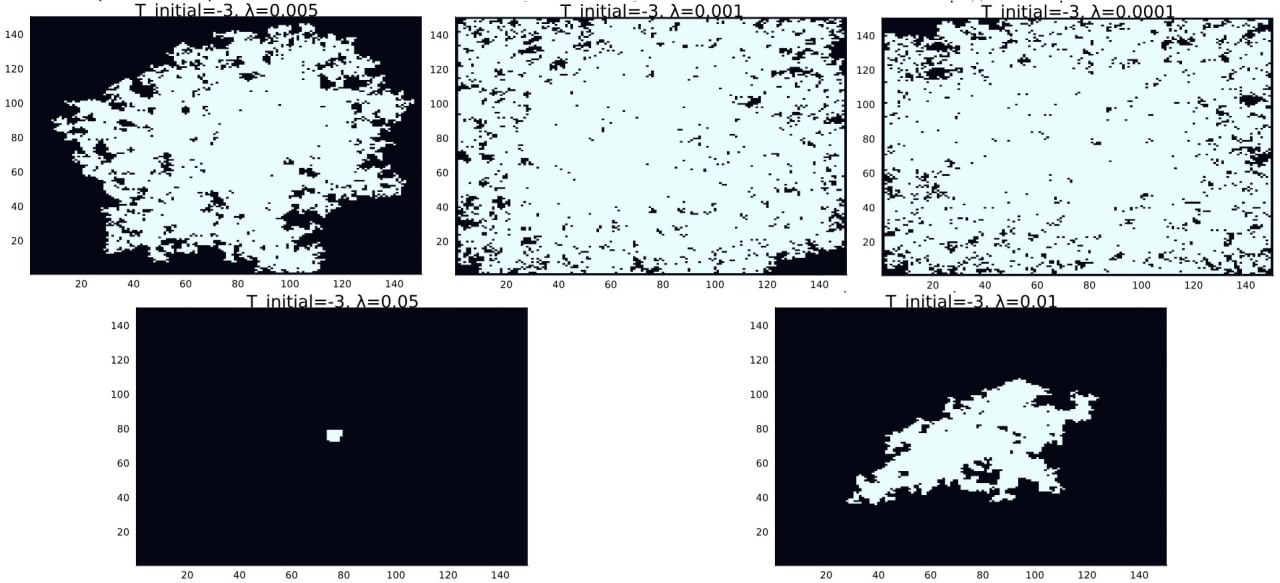


Рис. 6: Дендритные структуры при различных параметрах lambda и T = -3

## 2.4 Анализ

Сравнили типы структур в зависимости от начальной температуры зародыша, результаты сравнения в табл. 1

Таблица 1: Описание дендритных структур и их характеристик в зависимости от температуры

|  | 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 формируются классические дендриты с 3-4 уровнями ветвления.

Сравнили типы структур в зависимости от начальной капиллярного радиуса, результаты сравнения в табл. 2

Таблица 2: Описание дендритных структур и их характеристик в зависимости от капиллярного радиуса

|  | Радиус 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 (во всех точках кроме центра)
  + Капиллярный радиус

1. Форма роста:
   * Четко выраженные ветвистые структуры
   * Асимметричное развитие в вертикальном направлении
   * Характерные вторичные ветвления
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

## 2.5 Динамика роста агрегата

### 2.5.1 Зависимость числа частиц от времени

* **Начальная стадия** : (линейный рост).
* **Поздняя стадия** : , где .

График зависимости числа затвердевших частиц от времени (рис. 7):

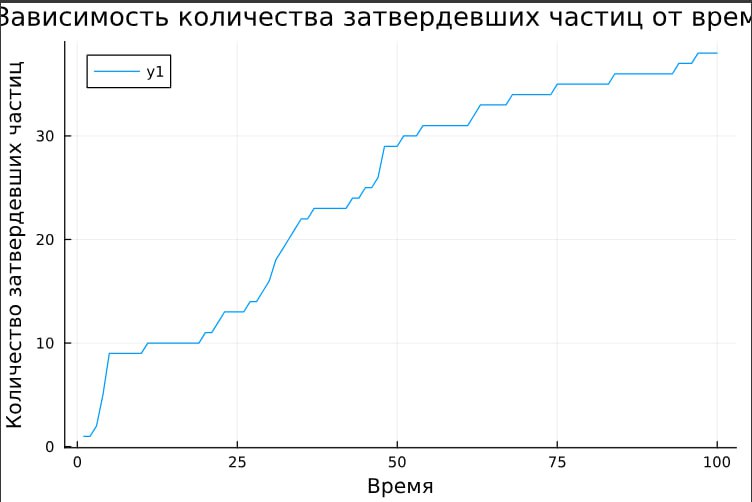


Рис. 7: Зависимость числа затвердевших частиц от времени

#### 2.5.1.1 Анализ

**Основные характеристики графика**

Кривая роста:

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

**Детальный анализ динамики** в табл. 3

Таблица 3: Фазы кристаллизации

| Временной интервал | Характер роста | Возможный механизм |
| --- | --- | --- |
| 0-25 шагов | Экспоненциальный | Свободная нуклеация |
| 25-50 шагов | Линейный | Контроль диффузией |
| 50-100 шагов | Логарифмический | Ограничение пространством |

### 2.5.2 Среднеквадратический Радиус

* Диффузионный режим:
* Режим ограниченного роста:

График зависимости среднеквадратического радиуса от времени (рис. 8):

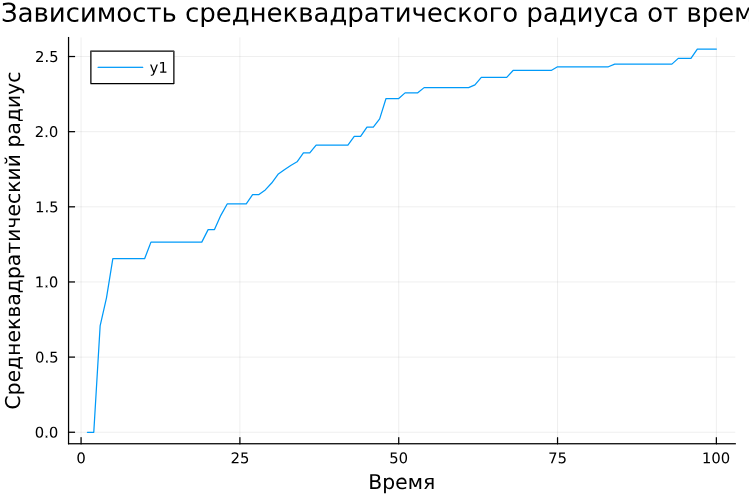


Рис. 8: Зависимость среднеквадратического радиуса от времени

#### 2.5.2.1 Анализ

**Описание графика**

Кривые на графике:

* Кривая :
  + Начальное значение: при
  + Быстрый рост на начальном этапе (0-25 ед. времени)
  + Замедление роста после

**Ключевые особенности**

* Динамика роста:
* Фаза ускоренного роста (0-25):
* Переходный режим (25-50):
* Режим насыщения (50-100):

## 2.6 Фрактальная Размерность

### 2.6.1 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 связано с характерным радиусом соотношением (14):

где D - фрактальная размерность.

**Характерные радиусы**

Для анализа можно использовать:

1. Максимальный радиус где - расстояния частиц от центра.
2. Радиус гирации (более точный метод):

* Связан с моментом инерции кластера:

**Расчет фрактальной размерности**

Фрактальную размерность D можно определить через логарифмическую регрессию (15):

где:

* - количество частиц внутри радиуса
* - искомая фрактальная размерность

1. Создание списка радиусов:
   * Мы создаем список радиусов , который начинается с 1 и заканчивается , состоящий из 50 значений.
2. Подсчет количества точек внутри круга радиуса :
   * Для каждого радиуса мы подсчитываем количество точек внутри круга радиуса .
   * Для каждой точки массива проверяем, является ли она затвердевшей частицей и находится ли она внутри круга радиуса , используя норму (16)

* + Если точка удовлетворяет этим условиям, увеличиваем счетчик на 1.
  + Добавляем количество точек для каждого радиуса в список .

1. Построение графика:
   * Вычисляем логарифмы радиусов и количества точек .
   * Строим график зависимости от .
2. Линейная регрессия:
   * Выполняем линейную регрессию для определения наклона прямой, который является фрактальной размерностью .
   * Возвращаем значение фрактальной размерности , а также логарифмы радиусов и количества точек.

### 2.6.2 Иссиледование зависимости фрактальной размерности от времени

Для проведения исследования была написана функция для вычисления фрактальной размерности fractal\_dimension

* D = 1.0-1.3: Линейные цепочки
* D = 1.4-1.6: 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. 9):

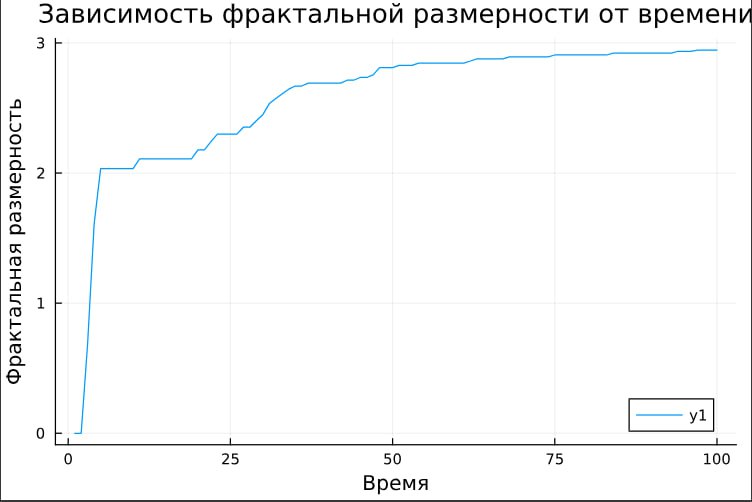


Рис. 9: Зависимость фрактальной размерности от времени

#### 2.6.2.1 Анализ

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

## 2.7 Влияние Теплового Шума

Тепловой шум оказывает значительное влияние на формирование дендритов, поэтому мы провели исследование, где смоделировали и проанализировали рост дендритов при различных значениях теплового шума ()

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

Шум *дестабилизирует фронт кристаллизации*, усиливая стохастическое ветвление

### 2.7.1 Температурное распределение

График температурного распределения после 100 шагов (рис. 10):

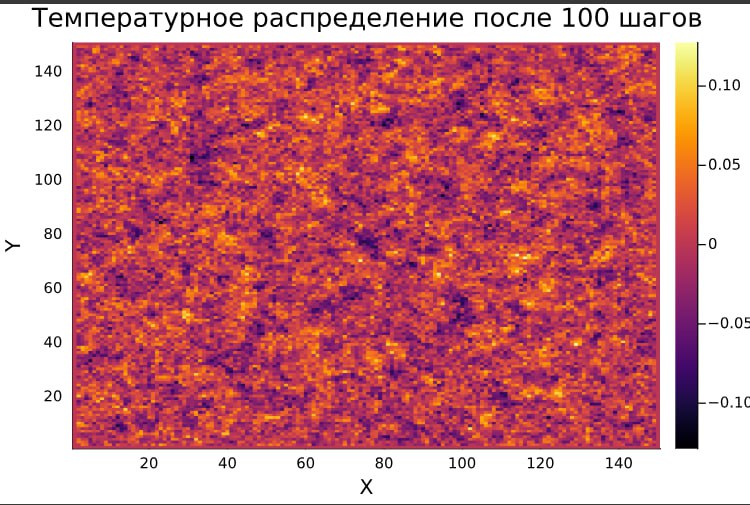


Рис. 10: Температурное распределение после 100 шагов

#### 2.7.1.1 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 мосты между холодными зонами

### 2.7.2 Эксперименты с изменением теплового шума

Были проведены три эксперимента с различными значениями теплового шума :

* = 0.01: регулярные симметричные дендриты (рис. 11).
* = 0.05: умеренное ветвление с шероховатостью (рис. 12).
* = 0.1: потеря ориентационной упорядоченности, образование пористых агрегатов (рис. 13).

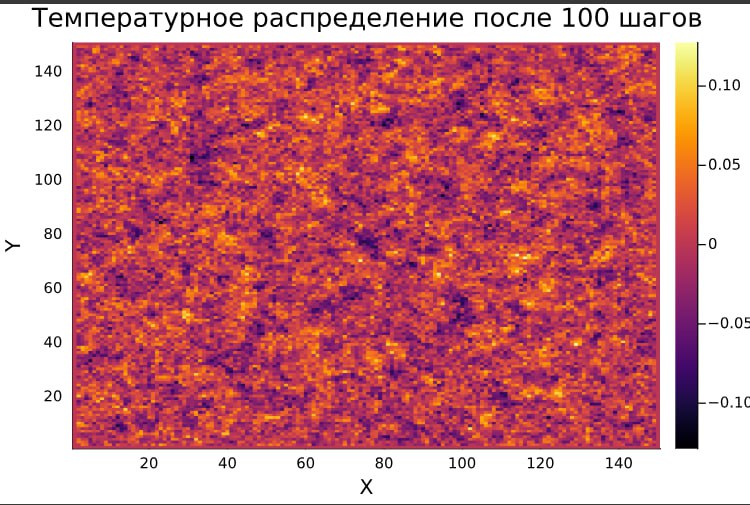


Рис. 11: Значение теплового шума () 0.01

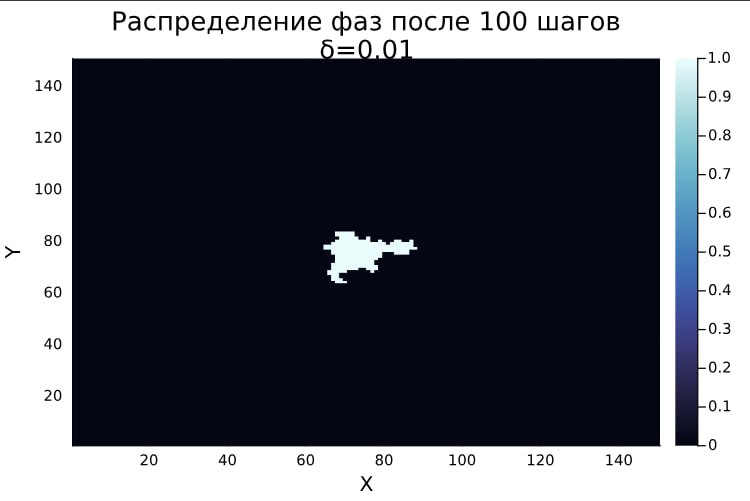


Рис. 12: Значение теплового шума () 0.05

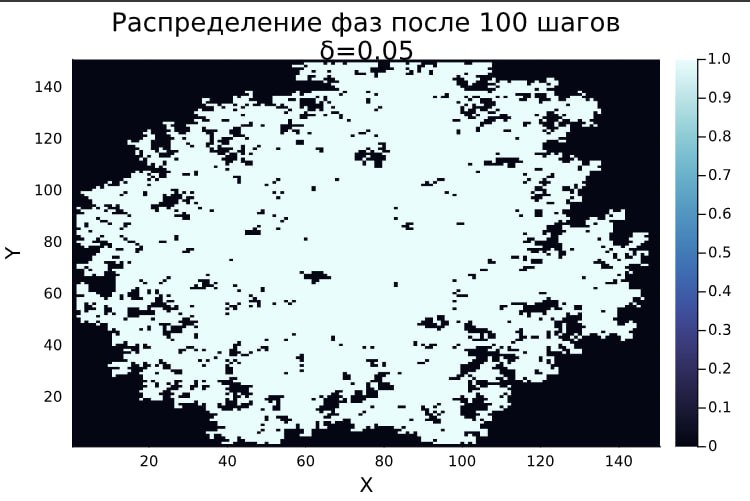


Рис. 13: Значение теплового шума () 0.1

#### 2.7.2.1 Анализ

Описали разницу в росте дендритных структур в табл. 4

Таблица 4: Сравнительная характеристика

| Параметр | (слабый шум) | (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:**

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

**Физические механизмы**

1. Нуклеация

* Медленное образование стабильных зародышей
* Кристаллографическая ориентация сохраняется

1. Нуклеация

* Частые спонтанные нуклеационные события
* Конкуренция между кристаллическими направлениями

# 3 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 флуктуаций 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] + T[i, j-1] - 4 \* T[i, j])  
 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  
 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

# 4 Выводы

В ходе работы были выполнены следующие задачи:

1. Смоделирован процесс теплопроводности.
2. Исследовано влияние начального переохлаждения и капиллярного радиуса на форму дендритов.
3. Проанализирована динамика роста агрегата и его фрактальная размерность.
4. Изучено влияние теплового шума на морфологию агрегатов.

Результаты показывают, что:

* Тепловой шум значительно влияет на структуру дендритов, увеличивая их нерегулярность и скорость роста.

# Список литературы

1. Медведев Д.А. и др. Моделирование физических процессов и явлений на ПК: Учеб. пособие. Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т., 2010. 101 с.

2. Liu F., Goldenfeld N. [Generic features of late-stage crystal growth](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.42.895) // Phys. Rev. A. American Physical Society, 1990. Т. 42. С. 895–903.