Рост дендритов

Этап №1

Миронов Д. А. Павлова П. А. Матюшкин Д. В.

21 февраля 2024

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

Цели и задачи

Целью проекта является математическое моделирование дендритного роста.

Задачи проекта:

1. Изучить теоретическую информацию о дендритах и о моделях их роста.
2. Разработать алгоритм, который включает в себя:
   - моделирование теплопроводности;
   - исследование влияние начального переохлаждения S и величины капиллярного радиуса λ на форму образующихся дендритов;
   - исследование зависимость от времени числа частиц в агрегате и его среднеквадратичного радиуса в разных режимах;
   - определение фрактальной размерности полученных образцов;
   - иследвание влияния величины теплового шума δ на вид образующихся агрегатов;
3. Написать комплексы программ по разработанному алгоритму;

Описание явления роста дендритов

Дендриты - это маленькие ветвистые образования, похожие на деревья или ветви, которые могут появляться в разных системах, от нервных клеток до кристаллов в металлах.

Самые распространённые структуры морозных узоров — дендриты (рис. 1).

Рис. 1: Пример дентритов

Модель роста дентритов

Пусть у нас есть квадратная область размера N × N узлов, в центре которой задана некоторая затравка (небольшая затвердевшая область, на границе которой происходит дальнейшая кристаллизация).
Расстояние между узлами по горизонтали и вертикали обозначим h, а шаг по времени Δt.

- $h = 1$
- $\Delta t = 1$

Уравнение теплопроводности

Изменение температуры со временем описывается уравнением теплопроводности:

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

Свойства вещества:

- ρ - плотность
- c_p - теплоемкость при постоянном давлении
- κ - коэффициент теплопроводности
- T - температура плавления

Среднее значение

Величина $\nabla^2 T$ в узле (i, j) может быть записана как разница среднего значения температуры в соседних узлах $\langle T_{(i,j)} \rangle$ и температуры в самом узле, $\nabla^2 T \approx (\langle T_{(i,j)} \rangle - T_{(i,j)})/h^2$.

Общая формула среднего значения:

$$\langle T_{(i,j)} \rangle = (T_{(i+1,j)} + T_{(i-1,j)} + T_{(i,j+1)} + T_{(i,j-1)} +$$

$$+ w(T_{(i+1,j+1)} + T_{(i+1,j-1)} + T_{(i-1,j+1)} + T_{(i-1,j-1)}))/(4 + 4w)$$

Коэффициент $0 \leq w < 1$ учитывает влияние диагональных соседей.

Среднее значение

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

Новое значение температуры после каждого такого шага вычисляется как $\widehat{T_{(i,j)}} = T_{(i,j)} + \chi \Delta t \nabla^2 T / m$, такая схема устойчива при $\chi \Delta t / (m h^2) < 1/4$.

Состояние каждого узла n:

- $n = 0$ соответствует жидкой фазе
- $n = 1$ - твердой

Промежуточные состояния учитывать не будем.

Всего может быть четыре ближайших соседа и четыре диагональных. Разумно считать, что граница плоская, когда $n = 1$ у пяти соседей

$$1/R \approx s_{i,j} = \sum_{1} n_{i,j} + w_n \sum_{2} n_{i,j} - (\frac{5}{2} + \frac{5}{2} w_n)$$

Здесь первая сумма – по ближайшим соседям, вторая – по диагональным. Коэффициент $0 \leq w_n \leq 1$ учитывает ослабление влияния соседей с ростом расстояния.

Тепловой шум

Необходимо еще учитывать тепловой шум. В простейшем случае можно прибавлять к температуре в узле некоторую случайную добавку $\eta_{i,j}\delta$, где $\eta_{i,j}\delta$ - случайное число, равномерно распределенное в интервале [–1,1], а δ — величина флуктуаций температуры.

Узел, расположенный на границе, меняет свое состояние с жидкого на твердое, если

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

- T_m - температура плавления
- $\widetilde{T}_m$ - безразмерное начальное переохлаждение
- λ - капиллярный радиус

Литературный обзор исследований о росте дендритов

Исследования роста дендритов проводились многими учеными по различным причинам, включая понимание нейронального развития, механизмов нейропластичности и поиска методов лечения неврологических расстройств.

- Сэлман Уолдс (S. Ramón y Cajal)
- Лорд Адриан (Edgar Douglas Adrian)
- Карла Шатц (Carla J. Shatz)
- Лилианна Сталь (Liliana S. Stal)
- Джон Доэрти (John Donoghue)

Заключение

На данном этапе мы рассмотрели теоретическое описание задачи, описание модели и литературный обзор.