

DOI: 10.25728/avtprom.2024.01.11

Карабчевский В.В., Казакова А.С. (Донецкий национальный технический университет)

Геометрическое моделирование процессов образования и роста кристаллов

Выполнен анализ существующих методов моделирования кристаллизации в различных средах, особое внимание уделено методам и алгоритмам моделирования и визуализации геометрической структуры материалов. Рассмотрены векторный и воксельный методы моделирования, обосновано преимущество комбинированного векторно-воксельного метода геометрического моделирования кристаллизации чистых металлов и сплавов, основанного на геометрических особенностях формирования кристаллов, учете изменения формы зародыша в процессе роста. На основании предложенного алгоритма создан программный комплекс, позволяющий в процессе моделирования кристаллизации металлов и сплавов варьировать скорость зарождения кристаллов, изменять размер зародышей кристаллов и их огранку, задавать соотношение скоростей роста различных кристаллографических граней, учитывать влияние изменения температуры на скорость роста кристаллизованных областей. Применение такого комплекса позволит прогнозировать свойства сплавов для различных исходных данных, возможно его применение для моделирования процессов кристаллизации и в других областях.

Ключевые слова: кристаллизация, структурообразование, геометрическое моделирование, воксель.

Карабчевский Виталий Владиславович – канд. техн. наук, доцент, заведующий кафедрой «Компьютерное моделирование и дизайн»,
Казакова Анна Сергеевна – аспирант Донецкий национальный технический университет.

Список литературы

- 1. Ruan C., Ouyang J., Liu S., Zhang L. Computer modeling of isothermal crystallization in short fiber reinforced composites // Computers & Chemical Engineering. – 2011. – Vol. 35, Issue 11. – P. 2306-2317.*
- 2. Yin H. Modeling of dendrite growth with cellular automaton method in the solidification of alloys / Mississippi State University. ProQuest Dissertations and Theses. – 2010. – 194 p.*
- 3. Koichi Motma, Fujio Izumi. VESTA: a three-dimensional visualization system for electronic and structural analysis. [Электронный ресурс] // Journal of Applied Crystallography, Vol. 44, Issue 6, December 2011, Pages 1272-1276.*
- 4. Никаноров А.В. Сравнительный анализ компьютерных программ для моделирования литейных процессов // Вестник ИрГТУ. 2018. №11 (142). URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/sravnitelnyy-analiz-kompyuternykh-programm-dlya-modelirovaniya-liteynykh-protsessov>*
- 5. Бреднихина А.Ю. Разработка средств геометрического моделирования и научной визуализации для поддержки обучения и исследований в области кристаллографии: автореферат дис. ... канд. техн. наук: 05.13.18 / Ин-т вычисл. математики и мат. геофизики. – Новосибирск, 2009. – 16 с. (автореферат диссертации).*
- 6. Шаскольская М.П. Кристаллография. Учебник для вузов. – М.: Высш. школа, 1976. – 391 с.*
- 7. Карабчевский В.В., Пашинская А.В. Моделирование и визуализация процесса кристаллообразования в расплавах // Тр. конференции «Геометрическое и компьютерное моделирование». – Харьков: ХДУХТ, 2009 – С. 51-56.*
- 8. Карабчевский В.В., Пашинская А.В. Геометрическое моделирование роста кристаллов в расплавах // Межведомственный научно-технический сборник "Прикладная геометрия и инженерная графика". Вып.85. – К: КНУБА, 2010. – С. 19-24.*
- 9. Карабчевский В.В., Пашинская А.В. Методы моделирования роста кристаллов в расплавах // Научные труды*

Донецкого национального технического университета. – Донецк: ДонНТУ, 2010. – Вып.11(164). – С. 165-171. (серия: Информатика, кибернетика и вычислительная техника).

10. *Карабчевский В.В., Пашинская А.В.* Особенности воксельной модели процесса роста многогранников. // Межведомственный научно-технический сборник «Прикладная геометрия и инженерная графика». Вып. 87. – К.:КНУБА, 2011 г. – С. 149-153.

11. *Пашинская А.В.* Компьютерное моделирование роста и взаимодействия многогранников // Межведомственный научно-технический сборник "Техническая эстетика и дизайн". Вып.89. – К.: КНУБА, 2012. – С. 166-170.

12. *Пашинская А.В.* Геометрическое моделирование в изучении процессов структурообразования при кристаллизации металлов и сплавов // *Металлургические процессы и оборудование*. Международный научно-технический и производственный журнал. 2013. №2. С. 32-38. __

Karabchevsky V.V., Kazakova A.S. Geometric modeling of crystal formation and growth processes

An analysis of existing methods for modeling crystallization in various environments was carried out, special attention was paid to methods and algorithms for modeling and visualizing the geometric structure of materials. Vector and voxel modeling methods are considered, the advantage of the combined vector-voxel method of geometric modeling of crystallization of pure metals and alloys, based on the geometric features of crystal formation and taking into account the change in the shape of the nucleus during the growth process, is substantiated. Based on the proposed algorithm, a software package has been created that allows, in the process of modeling the crystallization of metals and alloys, to vary the rate of crystal nucleation, change the size of crystal nuclei and their cutting, set the ratio of growth rates of various crystallographic faces, and take into account the effect of temperature changes on the growth rate of crystallized areas. The use of such a complex will make it possible to predict the properties of alloys for various initial data; it can be used to simulate crystallization processes in other areas.

Keywords: crystallization, structure formation, geometric modeling, voxel.