

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ**

**СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**

Кафедра прикладної математики та моделювання складних систем

Допущено до захисту

Завідувач кафедри ПМ та МСС

\_\_\_\_\_ Коплик І.В.

(підпис)

«\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

**КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА**

на здобуття освітнього ступеня «магістр»

спеціальність 113 «Прикладна математика»

освітньо-професійна програма «Наука про дані та моделювання складних систем»

тема роботи «Дослідження впливу параметрів взаємодії на динаміку росту та статистичні властивості зернистої мікроструктури в рамках комп'ютерного моделювання.»

Здобувача (ки) групи ПМ.м-31 Яковенко Анастасії Юріївни

Кваліфікаційна робота містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело.

\_\_\_\_\_ Анастасія ЯКОВЕНКО

Керівник кандидат фізико-математичних наук, доцент

Дворніченко Аліна Василівна \_\_\_\_\_

# СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

**Факультет** електроніки та інформаційних технологій  
**Кафедра** прикладної математики та моделювання складних систем  
**Рівень вищої освіти** другий (магістр)  
**Галузь знань** 11 Математика та статистика  
**Спеціальність** 113 Прикладна математика  
**Освітня програма** освітньо-професійна «Наука про дані та моделювання складних систем»

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри ПМтаМСС

Коплик І.В.

«\_\_» \_\_\_\_\_ 2024 р.

## ЗАВДАННЯ

### НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ ЗДОБУВАЧУ ВИЩОЇ ОСВІТИ

Яковенко Анастасія Юріївна

1. Тема роботи: «Дослідження впливу параметрів взаємодії на динаміку росту та статистичні властивості зернистої мікроструктури в рамках комп'ютерного моделювання.»

Керівник роботи: Дворніченко А.В., кандидат фіз.-мат. наук, доцент

затверджено наказом по факультету ЕлІТ від «\_\_» \_\_\_\_\_ 2024 р. № \_\_\_\_\_

2. Термін подання роботи студентом: «1» грудня 2024 р.

3. Вихідні данні до роботи: В рамках процедури числового моделювання дослідити вплив параметрів потенціалу вільної енергії на динаміку формування та росту зеренної структури, а також на статистичні властивості сформованої мікроструктури. Розрахувати залежності середнього лінійного розміру сформованих стаціонарних зерен та їх відносної густини від енергетичних констант. З'ясувати умови контролювання динамікою зміни мікроструктури та її статистичними характеристиками.

4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, що їх належить розробити): Математичні моделі та реалізація комп'ютерного експерименту. Аналіз отриманих результатів. Висновки.

5. Перелік графічного матеріалу: Ілюстрації результатів комп'ютерного експерименту.

6. Консультанти до проекту (роботи), із значенням розділів проекту, що стосується їх

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		Завдання видав	Завдання прийняв

7. Дата видачі завдання «21» жовтня 2024 р.

### КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ п/п	Назва етапів кваліфікаційної роботи	Термін виконання	Примітка
1	Огляд літератури на тему«Дослідження впливу параметрів взаємодії на динаміку росту та статистичні властивості зернистої мікроструктури в рамках комп'ютерного моделювання.»	21.10-28.10	Виконано
2	Дослідження математичні моделі та реалізація комп'ютерного експерименту	29.10-20.11	Виконано
3	Аналіз отриманих результатів	21.11-27.11	Виконано
4	Оформлення кваліфікаційної роботи	28.11-03.12	Виконано

Здобувач вищої освіти

\_\_\_\_\_

(підпис)

Яковенко А.Ю.

Керівник роботи

\_\_\_\_\_

(підпис)

Дворніченко А.В.

## АНОТАЦІЯ

**Кваліфікаційна робота:** 77 с., 4 рисунків, 6 таблиці, 19 джерела.

**Мета роботи:** дослідження впливу параметрів взаємодії на динаміку росту та статистичні властивості зернистої мікроструктури в рамках комп'ютерного моделювання. Аналіз змін кількості та розміру зерен залежно від параметрів вільної енергії.

**Об'єкт дослідження:** зерниста мікроструктура матеріалів у процесі еволюції.

**Предмет дослідження:** вплив параметрів взаємодії в рамках моделі фазового поля на процеси росту та формування зернистої мікроструктури.

**Методи навчання:** чисельне моделювання з використанням рівнянь математичної фізики, які описують динаміку фазового поля. Моделювання проводилось на двовимірних ґратках із варіацією параметрів потенціалу вільної енергії. Аналіз результатів включає побудову графіків динаміки зміни середнього розміру та кількості зерен, а також їх візуалізацію у форматі .vtk для подальшого аналізу.

**Ключові слова:** ФАЗОВЕ ПОЛЕ, ЗЕРНИСТА СТРУКТУРА, ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ, ВІЛЬНА ЕНЕРГІЯ, ГРАНИЧНІ ЗАДАЧІ, ПАРАМЕТРИ ВЗАЄМОДІЇ.

## ЗМІСТ

1. Вступ.....	6
2. Мета роботи.....	9
3. Опис зерна в матеріалах.....	12
3.1 Застосування досліджень про зерна.....	15
4. Модель фазового поля.....	18
4.1 Модифікація моделі.....	21
5. Чисельна реалізація.....	23
5.1 Параметр порядку як інструмент аналізу багатозернових систем....	25
5.2 Роль параметрів енергії поверхні зерна та енергії взаємодії зерен.....	27
6. Програмна реалізація.....	30
7. Результати роботи програми.....	31
8. Розподіл розмірів зерен.....	36
8.1 Фіксоване значення параметра енергії поверхні зерна.....	37
8.2 Фіксоване значення параметра енергії взаємодії зерен .....	41
9. Висновки.....	45
10. Список використаної літератури.....	47
11. Додаток А.....	49

## ВСТУП

Зерно — це маленька частинка кристалічної структури в матеріалі. Кожне зерно це область, де атоми впорядковані у певному порядку, але цей порядок може відрізнятися у сусідніх зернах, тобто в кожному зерні фіксується свій власний, унікальний порядок розташування атомів. По параметрам зерен можна зробити висновки що до властивостей матеріалів.

Кожне зерно відокремлене одне від одного перегородкою. Місце, де зустрічаються два зерна, називається границею зерен. Ці границі є важливими, бо вони визначають, як матеріал буде поводитись: чи буде він міцним, гнучким, чи зможе витримувати високі температури тощо Міжзернова границя – це поверхня розділу двох зерен в полікристалічному матеріалі. Ці границі являються дефектом кристалічної структури та мають тенденцію до зниженої теплопровідності та зниженої температуропровідності. Міжзернові границі розділяють на малокутові та висококутові.

Більшість металів в нормальних умовах мають кристалічну структуру. Метал складається з кристалів, при цьому кристали мають характерні кристалічні решітки, саме із їх груп сформовані зерна. Зерна набагато більші об'єкти, які об'єднались та створили структуру. Наприклад, метал, з якого зроблений кожен телефон або автомобіль, складається з таких зерен. Чим менші зерна, тим метал зазвичай міцніший, але може стати менш гнучким. Тому вивчення зерен допомагає створювати матеріали з потрібними властивостями.

Дослідження мікроструктури матеріалів є одним із ключових напрямів сучасної матеріалознавчої науки. Мікроструктура матеріалів складається з множини зерен — областей, у яких атоми впорядковані у певній кристалічній решітці. Властивості цих зерен, зокрема їх форма, розмір, орієнтація та взаємне розташування, значною мірою визначають макроскопічні характеристики матеріалу, такі як міцність, пластичність, теплопровідність та

електропровідність. Крім того, процеси росту і взаємодії зерен впливають на утворення границь між ними, які відіграють ключову роль у визначенні механічних властивостей, оскільки саме ці границі є областями з підвищеною енергією та дефектами структури. Саме тому вивчення еволюції зернистої мікроструктури є фундаментальним завданням, яке має прикладне значення для розробки нових матеріалів із прогнозованими властивостями.

Ріст зерен у полікристалічних структурах є складним динамічним процесом, який залежить від багатьох фізичних і хімічних факторів. Основними рушійними силами цього процесу є енергія границь зерен, температурний градієнт, внутрішні напруження та зовнішні впливи, такі як механічне навантаження чи електромагнітне поле. Важливим параметром є також коефіцієнт мобільності границь зерен, який визначає швидкість їх руху у відповідь на діючі сили. Аналізуючи ці фактори, можна зрозуміти механізми, що керують процесами росту зерен, а також їхній вплив на формування кінцевої мікроструктури. Завдяки прогресу в комп'ютерних технологіях з'явилася можливість досліджувати ці процеси за допомогою чисельного моделювання, що дозволяє імітувати поведінку зернистої мікроструктури в умовах, які складно чи неможливо реалізувати експериментально.

Такий підхід є особливо корисним для вивчення взаємозв'язку між параметрами взаємодії зерен та їх еволюцією в часі, оскільки він забезпечує можливість контролювати всі параметри системи, змінювати їх незалежно один від одного та детально аналізувати отримані результати. Таким чином, чисельне моделювання стає потужним інструментом для прогнозування поведінки матеріалів і оптимізації їх властивостей.

Метод фазового поля є ефективним підходом для дослідження процесів росту зерен та еволюції мікроструктури матеріалів. Його використання у вивченні динаміки росту зерен і статистичних характеристик дозволяє точно й надійно моделювати складні фізичні явища.

Дослідження росту зерен та еволюції мікроструктури матеріалів є важливою складовою сучасного матеріалознавства, що дозволяє розробляти нові матеріали з прогнозованими властивостями. Використання чисельного моделювання, зокрема методу фазового поля, відкриває нові можливості для більш детального розуміння механізмів взаємодії між зернами, а також впливу різних фізичних параметрів на формування та динаміку мікроструктури.

Запропонований підхід є потужним інструментом для дослідження складних фізичних процесів, оскільки забезпечує високу точність і адаптивність для різних умов. Проведення таких досліджень сприяє не лише фундаментальному розумінню природи полікристалічних матеріалів, але й вирішенню прикладних задач у промисловості, зокрема в розробці новітніх сплавів, кераміки та композитів.

Ця робота спрямована на аналіз впливу параметрів взаємодії на динаміку росту зерен і статистичні характеристики мікроструктури. Отримані результати не лише доповнять теоретичну базу знань у цій галузі, але й матимуть значний практичний потенціал для оптимізації властивостей матеріалів.



## МЕТА РОБОТИ

Метою даної магістерської роботи є вивчення впливу параметрів взаємодії на динаміку росту зерен та їх статистичні властивості. Особлива увага приділяється кількісному аналізу залежності кількості зерен, їх розмірів та розподілу розмірів від таких параметрів, як енергія границь і коефіцієнт мобільності. Дослідження виконуються з використанням комп'ютерного моделювання, що дозволяє реалізувати широке варіювання параметрів та глибоко аналізувати результати.

Задача дослідження впливу параметрів потенціалу вільної енергії на процес формування та росту зеренної структури, а також на статистичні властивості отриманої мікроструктури.

Для виконання роботи необхідно дослідити динаміку росту зерен при різних заданих параметрах. Необхідно застосувати числове моделювання для аналізу структури, як параметри потенціалу вільної енергії впливають на формування зерен, їх ріст та взаємодію між ними в умовах змінних температур і інших зовнішніх факторів. Розрахувати статистичні характеристики зеренної структури. Визначити залежності середнього лінійного розміру сформованих стаціонарних зерен та їх відносної густини від енергетичних параметрів моделі. Виконання даної роботи дозволить отримати точну картину взаємозв'язку між енергетичними характеристиками і результатами формування зерен. Визначити умови контролювання мікроструктури, тобто, з'ясувати, як зміна параметрів потенціалу вільної енергії та інших умов може впливати на динаміку зміни мікроструктури і її статистичні характеристики.

Дослідження на тему «Дослідження впливу параметрів взаємодії на динаміку росту та статистичні властивості зернистої мікроструктури в рамках комп'ютерного моделювання» має широкий спектр можливих напрямів, які охоплюють як фундаментальні аспекти, так і прикладні задачі.

Насамперед, це дослідження може бути спрямоване на вивчення фізичних механізмів росту зерен, де основною метою є аналіз впливу параметрів моделі, таких як енергетичні коефіцієнти чи параметри потенціалу вільної енергії, на динаміку еволюції зернистої структури. Результати такого аналізу дозволяють зрозуміти основи процесів, що лежать в основі термічної обробки, зварювання чи пластичної деформації матеріалів. Це, у свою чергу, відкриває можливості для покращення властивостей матеріалів за допомогою контролю мікроструктури.

Також, іншим важливим напрямом є оптимізація параметрів, що впливають на формування матеріалу. Завданням є визначення таких значень параметрів, які забезпечують бажані характеристики матеріалів, наприклад зменшення кількості дефектів, підвищення міцності чи забезпечення однорідності мікроструктури. Завдяки цьому можна прогнозувати поведінку матеріалів у різних умовах і створювати нові матеріали з покращеними властивостями.

Особливе місце в роботі займає статистичний аналіз мікроструктури. Дослідження спрямоване на оцінку кількості зерен, їх розмірів і розподілу цих параметрів у залежності від різних факторів. Статистичний підхід дозволяє виявити закономірності у формуванні зернистої структури, що є важливим для передбачення властивостей матеріалів і їхньої поведінки в реальних умовах експлуатації.

Крім того, в ході дослідження важливим є розробка та вдосконалення методів моделювання. Зокрема, йдеться про чисельні методи, такі як метод фазового поля, що забезпечують точне моделювання процесів із мінімальними витратами обчислювальних ресурсів. Це відкриває можливості для швидшого аналізу складних систем і використання результатів у суміжних наукових завданнях.

Прикладний аспект дослідження включає можливість використання отриманих результатів для вдосконалення виробничих процесів у таких галузях, як авіаційна, автомобільна чи електронна промисловість. Зокрема, це може включати рекомендації щодо вибору параметрів термічної обробки, зварювання чи інших технологічних процесів для отримання матеріалів із заданими властивостями.

На завершення, важливим напрямом роботи є побудова експериментальних залежностей для перевірки теоретичних моделей. Порівняння отриманих у моделюванні результатів із експериментальними даними дозволяє верифікувати модель і зробити її більш точною та адаптованою до реальних умов.

Загальною метою роботи є вивчення впливу параметрів потенціалу вільної енергії на процеси формування та росту зеренної структури матеріалу. Моделювання дозволить дослідити, як ці параметри визначають статистичні властивості мікроструктури, а також виявити умови, які контролюють її динамічні зміни.

## ЗЕРНА В МАТЕРІАЛАХ

Зерна в матеріалах — це маленькі, однорідні ділянки матеріалу, що утворюються під час його кристалізації або твердження. Зерна утворюються шляхом кристалізації: коли рідина охолоджується і перетворюється на тверде тіло, в її структурі починають формуватися маленькі кристали, саме ці кристали зростають, і утворюють більші області, які прийнято називати зернами. Зерна в матеріалах є дрібними кристалічними областями, що утворюють полікристалічну структуру. Кожне зерно має власну кристалографічну орієнтацію, а межі між зернами, які називаються границями зерен, характеризуються порушенням періодичної атомної структури. Дослідження зерен і їхніх властивостей має вирішальне значення для матеріалознавства, адже саме розміри, форма, орієнтація та розподіл зерен визначають механічні, теплові, електричні й інші характеристики матеріалів.

Кожне зерно це структура, яка має певну орієнтацію атомів або молекул, і часто має вигляд шестигранної чи кубічної форми. Зерно являє собою область, де атоми розташовані у впорядкованій періодичній структурі, однак між сусідніми зернами орієнтація кристалічної ґратки змінюється, утворюючи границі зерен. Зерна відокремлені одне від одного певними перегородками. Ці перегородки називають межами зерен - це кордони між окремими зернами в матеріалі, де з'єднуються різні кристалічні області з різною орієнтацією атомів або молекул. Ці межі є важливими структурними елементами матеріалу, і вони впливають на його фізичні та механічні властивості. Як правило, межі зерен складну форму, і часто є нерівними, оскільки їх форма залежить від процесу утворення та росту зерен. Звичайно, ці межі мають певні механічні властивості: межі зерен є перешкодою для руху дислокацій (дефектів у кристалічній решітці), тому чим більше меж зерен у матеріалі, тим він зазвичай міцніший. Це є основним принципом "ефекту зміцнення через дрібнозернисту структуру", коли менші зерна роблять матеріал більш стійким до деформації. ежі зерен суттєво впливають на властивості матеріалів: вони підвищують міцність через

обмеження руху дислокацій, але водночас можуть знижувати електропровідність через розсіяння електронів. Розмір зерен є одним із ключових параметрів, що визначають властивості матеріалів. У дрібнозернистих структурах спостерігається висока міцність, проте знижена пластичність, тоді як крупнозернисті матеріали зазвичай мають кращу пластичність, але менш міцні. Розмір зерен залежить від умов виготовлення матеріалу, таких як температура, швидкість охолодження чи тривалість термічної обробки.

Однак, на межах зерен можуть також виникати тріщини, що знижують пластичність матеріалу. В матеріалах з великою кількістю дрібних зерен, межі можуть сприяти розповсюдженню тріщин, знижуючи їх здатність витримувати навантаження. Межі зерен часто є слабкими точками для впливу агресивних хімічних речовин, що може призводити до корозії або зниження міцності матеріалу. Межі зерен можуть також впливати на теплопровідність матеріалу, оскільки вони можуть перешкоджати руху теплових хвиль через матеріал. У металах, таких як сталеві сплави, межі зерен можуть бути дуже важливими для визначення якості матеріалу. Зміна розміру зерен, наприклад, через обробку металу або термічну обробку, може значно змінити його міцність і стійкість до пошкоджень.

Самі ж зерна можна уявити як маленькі шматочки матеріалу, що мають одну орієнтацію атомів всередині, але можуть мати різну орієнтацію по відношенню до сусідніх зерен. Це як множина маленьких плиток мозаїки, де кожна плитка має свій малюнок, але всі плитки разом формують єдину поверхню.

Як саме зерна впливають на властивості матеріалу питання важливе, проте, не менш цікаве. Чим менші зерна, тим міцнішим може бути матеріал, оскільки межі між зернами можуть перешкоджати поширенню дефектів, що призводить до зміцнення. Важливим фактором, що впливає на розмір і форму зерен, є температура. Підвищення температури сприяє росту зерен за рахунок

активізації атомної дифузії. Механічна деформація, навпаки, може подрібнювати зерна, створюючи нові субструктури. Крім того, хімічний склад матеріалу, зокрема наявність легуючих елементів, також впливає на рухливість меж зерен і динаміку їх росту. Зерна мають великий вплив на властивості матеріалу, наприклад, його твердість, пластичність, електричні та теплові властивості. Зменшення розміру зерен може зробити матеріал більш стійким до деформації, оскільки малі зерна створюють більше меж, через які дефекти не можуть легко проходити.

Таким чином, зерна є фундаментальним елементом полікристалічних матеріалів, і їх дослідження сприяє розвитку матеріалознавства, розробці нових матеріалів і вдосконаленню існуючих технологій. Зерна — це основні структурні одиниці в матеріалах, що визначають їх властивості. Розмір і форма зерен можуть значно вплинути на те, як матеріал поводитиметься при навантаженні, його міцність та інші важливі характеристики. Тому контроль над розмірами зерен і їх структурою є важливим аспектом при виготовленні та обробці матеріалів.

## ПРАКТИЧНЕ ЗАСТОСУВАННЯ ДОСЛІДЖЕНЬ ПРО ЗЕРНА

Вивчення зернистої структури матеріалів має надзвичайно широке практичне значення, оскільки воно впливає на властивості матеріалів, які ми використовуємо у повсякденному житті, а також на розробку новітніх технологій. Розмір, форма, орієнтація та розподіл зерен визначають механічні, електричні, теплові та хімічні характеристики матеріалів, що робить дослідження в цій галузі критично важливими для багатьох сфер діяльності.

Будівельна галузь активно використовує знання про зернисту структуру. Зерна металів, бетону, сталі, цемент із дрібнозернистою структурою демонструє високу міцність та стійкість до розтріскування. Вивчення зерен допомагає зробити матеріали міцними та довговічними. Наприклад, у бетоні, з розміром зерен можна змінювати його міцність та стійкість до навантажень. Для металевих конструкцій важливо, щоб зерна були добре вирівняні, щоб матеріал не лопався і не зношувався швидко.

У металургії контроль розміру та форми зерен дозволяє створювати сплави із заданими властивостями. У виробництві сталей, сплавів і металів для різних виробів. Мала або велика кількість і розмір зерен може змінювати міцність та пластичність металу. Наприклад, метал з меншими зернами буде міцнішим і витривалішим до зносу, а метал з більшими зернами буде більш гнучким і легким у обробці.

В автомобілебудуванні матеріали з контрольованою зернистою структурою сприяють зниженню ваги транспортних засобів, підвищенню їхньої міцності та енергоефективності. Наприклад, сплави алюмінію з дрібнозернистою структурою ідеально підходять для виготовлення легких, але міцних кузовних деталей. У двигунах, трансмісіях, підшипниках та інших деталях. Для виробництва деталей, що піддаються великим навантаженням, потрібен метал з правильними властивостями зерен. Це дозволяє зробити матеріал більш міцним, що підвищує надійність і довговічність автомобіля.

В галузі авіації та космонавтики знання про зерна допомагають у виготовлення легких і міцних деталей для літаків, ракет, космічних апаратів. Для таких технологій важливі матеріали, які мають низьку масу і високу міцність. Зерна в матеріалах допомагають досягти цих властивостей, а також забезпечують стійкість до високих температур та надвеликих навантажень.

Також, в галузі енергетики постійно використовують дослідження зернової структури, а саме, в атомних реакторах, сонячних панелях, батареях для акумуляторів. Вивчення зерен допомагає створювати матеріали, які витримують високі температури і зберігають енергію на тривалий час, що важливо для енергетичних установок та енергозберігаючих технологій.

У медицині знання про зернисту структуру дозволяє створювати та виготовляти медичні інструменти, протези, імпланти. У медицині важливо, щоб матеріали були біосумісними, не викликали відторгнення та довговічними. Вивчення зерен дозволяє оптимізувати властивості матеріалів для кращого застосування в організмі людини. Також хірургічні інструменти виготовляються з матеріалів із високою міцністю та корозійною стійкістю, що забезпечує їх ефективність і надійність.

В електроніці контроль структури зерен є вирішальним для забезпечення стабільної роботи мікросхем та напівпровідникових пристроїв. У виробництві електронних пристроїв, наприклад, для чіпів, сенсорів. Для створення ефективних і надійних матеріалів в електроніці потрібні дрібні зерна, щоб покращити провідність та точність роботи пристроїв.

Полікристалічний кремній, який використовується у сонячних панелях, забезпечує ефективність перетворення енергії завдяки оптимізованому розміру зерен. У виготовленні матеріалів для сонячних батарей. Зерна в матеріалах сонячних панелей впливають на їх ефективність і здатність перетворювати сонячне світло в енергію.



Сучасні нанотехнології також спираються на концепцію управління зернами. Ультрадрібнозернисті матеріали відкривають можливості для створення суперміцних металів, теплоізоляційних матеріалів і покриттів для високотехнологічних застосувань. Таким чином, вивчення зерен у матеріалах є основою для багатьох інноваційних рішень у різних галузях. Зерна використовуються практично в кожній галузі, від будівництва до медицини, оскільки від розміру та кількості зерен залежить, як матеріал буде себе поводити під час використання. Чим краще ми розуміємо зерна і їх властивості, тим точніше можемо створювати матеріали, які потрібні для конкретних завдань. Це знання сприяє покращенню властивостей матеріалів, створенню нових технологій та підвищенню ефективності продуктів, які ми використовуємо щодня.

## МОДЕЛЬ ФАЗОВОГО ПОЛЯ

Метод фазового поля є одним із найефективніших підходів для вивчення росту зерен у матеріалах, який дозволяє моделювати складні процеси зміни мікроструктури з використанням математичних та чисельних методів.

Зростання зерен є важливим процесом у матеріалознавстві, оскільки визначає багато механічних, термічних та інших властивостей матеріалів, таких як твердість, міцність, пластичність і корозійну стійкість.

Фазове поле в даному контексті є безрозмірним параметром, який описує стан кожної точки простору. Це поле може мати значення від 0 до 1, де 0 відповідає одному стану (наприклад, рідкому), а 1 — іншому (твердому). Проміжні значення фазового поля описують границі між різними фазами. Завдяки цьому методу не потрібно відстежувати окремі межі зерен або фазові переходи, що значно спрощує модель і дозволяє зосередитись на динаміці змін у просторі та часі.

В основі методу лежить функція вільної енергії, яка включає терміни для опису об'ємної енергії та енергії межі між фазами. За допомогою варіаційних рівнянь, отриманих з цієї функції, можна моделювати еволюцію фазового поля в часі, що відображає процеси росту та взаємодії зерен.

Одним із основних застосувань методу фазового поля є моделювання росту зерен у полікристалічних матеріалах. Процес росту зерен, або їхньої кристалізації, зазвичай супроводжується зменшенням числа зерен за рахунок їх злиття, а також зміною форми та розміру окремих зерен. Метод дозволяє відстежувати ці зміни на мікроскопічному рівні та аналізувати їхній вплив на макроскопічні властивості матеріалу, такі як його міцність або стійкість до тріщин.

Особливістю методу є можливість врахування складних фізичних ефектів, таких як анізотропія зерен, вплив зовнішніх полів або температурних

градієнтів на процес росту. Це робить метод фазового поля особливо корисним для досліджень в умовах, де традиційні методи, які вимагають явного відстеження меж зерен, не можуть бути застосовані або є надто складними.

Модель фазового поля (Phase Field Model, PFM) — це потужний інструмент, який використовується для опису змін у фазових переходах в матеріалах та різних фізичних процесах, де є межі або фазові переходи між різними станами. Це чисельний підхід, який дозволяє вивчати динаміку фазових змін у складних системах, таких як кристалізація, рост зерен, мікроструктурні зміни в матеріалах та багато інших. Модель фазового поля є числовим підходом для опису динаміки фазових переходів та мікроструктурних змін у матеріалах. Її особливістю є використання параметра порядку, який безперервно змінюється в просторі й часі та визначає фазовий стан системи. Ця модель дозволяє уникнути явного відстеження меж зерен, оскільки межі виникають природним шляхом, коли параметр порядку змінюється між значеннями, що відповідають різним фазам.

У моделі кожна зернина описується одним параметром порядку  $\eta_i$  — це параметр порядку для  $i$ -го зерна, який приймає значення одного для визначеного зерна та значення нуль в інших зернах. Еволюція параметрів порядку, що описуються незбереженими Рівняння Алена–Кана у вигляді

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = -L_i \frac{\delta F}{\delta \eta_i}, i = 1, 2, \dots, N \quad (4.1)$$

де  $L_i$  — коефіцієнт рухливості,  $\frac{\delta F}{\delta \eta_i}$  — це варіація вільної енергії функціоналу  $F$  за параметром  $\eta_i$ , що описує сили, які діють на кожне зерно і змінюють його властивості, а  $F$  — функціонал вільної енергії, який приймається як

$$F = \int_V \left[ f(\eta_1, \eta_2 \dots \eta_N) + \sum_i^N \frac{k_i}{2} |\nabla \eta_i|^2 \right] dv \quad (4.2)$$

де  $k_i$  — енергетичні коефіцієнти градієнта  $f$  — локальна густина вільної енергії,  $f(\eta_1, \eta_2 \dots \eta_N)$  представляє локальну густину вільної енергії, яка залежить від значень параметрів порядку  $\eta_i$  для всіх зерен,

$\sum_i^N \frac{k_i}{2} |\nabla \eta_i|^2$  це енергія градієнта, яка враховує зміни параметрів порядку у просторі (тобто, різницю в орієнтаціях між сусідніми зернами).

Густина вільної енергії для опису зернистої структури має вигляд:

$$f(\eta_1, \eta_2 \dots \eta_N) = \sum_i^N \left( -\frac{A}{2} \eta_i^2 + \frac{B}{4} \eta_i^4 \right) + \sum_i^N \sum_{i \neq j}^N \eta_i^2 \eta_j^2 \quad (4.3)$$

$\frac{A}{2} \eta_i^2$  - термін, який відповідає за енергію, пов'язану з параметром порядку кожного зерна,

$\frac{B}{4} \eta_i^4$  – нелінійний термін, який обмежує значення параметра порядку, зокрема забезпечує стабільність моделі,

$\sum_{i \neq j}^N \eta_i^2 \eta_j^2$  – це взаємодія між зернами, яка моделює взаємодію між сусідніми зернами.

A і B — додатні константи, які контролюють характеристики взаємодії між зернами та їх еволюцією. Вони впливають на стабільність і форму фазових переходів у системі.

Завдяки своїй гнучкості та здатності моделювати різні фізичні процеси, метод фазового поля знайшов широке застосування в матеріалознавстві, зокрема для дослідження процесів кристалізації, росту та злиття зерен, а також для аналізу їхнього впливу на механічні властивості матеріалів. Цей метод став важливим інструментом для розробки нових матеріалів, оскільки дозволяє прогнозувати їх поведінку ще до того, як вони будуть синтезовані експериментально.

## МОДИФІКАЦІЯ МОДЕЛІ

У даній моделі зерна розглядаються як ділянки з різними фазовими станами, а їх взаємодія описується за допомогою функцій вільної енергії, що враховують енергетичні ефекти на межах зерен. З метою модифікації моделі фазового поля для вивчення впливу параметрів взаємодії на динаміку росту зерен, необхідно внести зміни до параметрів  $A$  та  $B$ , які визначають характер взаємодії між зернами, а також зафіксувати інші параметри, що контролюють еволюцію зернистої мікроструктури, такі як параметри мобільності ( $mobil$ ) і коефіцієнт взаємодії ( $gcoef$ ).

Параметр  $mobil$  встановлюється рівним 2, що відповідає рухливості фазового поля. Цей параметр регулює швидкість еволюції параметра порядку  $\eta$  в кожному зерні, що безпосередньо впливає на швидкість змін у структурі матеріалу в залежності від енергії, що на нього діє. Чим вищий параметр  $mobil$ , тим швидше відбувається змінювання структури, що дозволяє вивчати поведінку матеріалу на різних етапах його розвитку, таких як стадія кристалізації чи зростання зерен.

Параметр  $gcoef$ , що дорівнює 0,1, відповідає за коефіцієнт взаємодії між зернами або за силу градієнта для локальної густини енергії на межах зерен. У даній модифікації моделі цей параметр залишається незмінним, оскільки основною метою є дослідження залежності між кількістю та розмірами зерен при варіаціях параметрів  $A$  і  $B$ , що дозволяє зосередитися на їхньому впливі на структуру матеріалу.

Параметри  $A$  та  $B$  змінюються в межах інтервалу від 0,5 до 2,5, тобто  $A \in [0,5, 2,5]$  і  $B \in [0,5, 2,5]$ . Це дозволяє вивчити, як ці параметри, що описують потенціал взаємодії між зернами, впливають на процеси зростання зерен і зміну їхніх розмірів та кількості. Модифікація цих параметрів є важливою для того, щоб зрозуміти, як зміни в умовах моделювання можуть вплинути на кінцеву структуру матеріалу.

Задача полягає в тому, щоб дослідити залежність між кількістю та розмірами зерен при різних значеннях параметрів  $A$  і  $B$ . Це дозволяє з'ясувати, як варіації у параметрах взаємодії між зернами можуть впливати на кінцеву мікроструктуру, а також на механізми, які керують ростом і злиттям зерен. За допомогою цієї модифікації можна вивчати, як зміни в параметрах  $A$  та  $B$  змінюють динаміку процесів росту зерен, їх стабільність і взаємодію, що є важливим для розуміння механізмів кристалізації та формування структури матеріалу.

Вільна енергія в моделі залишається незмінною, що дозволяє зберегти загальну структуру моделювання, однак модифікація параметрів  $A$  і  $B$  дозволяє глибше аналізувати, як саме ці зміни впливають на процеси, які керують ростом зерен, а також на статистичні властивості зернистої мікроструктури. Це допомагає сформулювати більш точні уявлення про механізми, що визначають розподіл розмірів зерен, їх взаємодію та зміну кількості на різних етапах розвитку матеріалу.

Отже, зміна параметрів  $A$  та  $B$  дає змогу не тільки отримати більш точне уявлення про процеси росту та взаємодії зерен, але й дозволяє глибше зрозуміти фізичні та термодинамічні принципи, які визначають поведінку матеріалу в різних умовах, що є важливим для подальших досліджень у галузі матеріалознавства та для розробки нових матеріалів з заданими властивостями.

## ЧИСЕЛЬНА РЕАЛІЗАЦІЯ

Модель фазового поля описується системою диференціальних рівнянь, що описують еволюцію параметрів порядку  $\eta_i$ , а також функціоналом вільної енергії. Чисельна реалізація полягає в розв'язанні рівняння Алена–Кана для кожного зерна

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = -L_i \frac{\delta F}{\delta \eta_i}, i = 1, 2, \dots, N \quad (5.1)$$

де  $L_i$  — коефіцієнт рухливості.

Підставляючи рівняння 4.2 і 4.3 у рівняння 5.1, керівним рівнянням для еволюції стає

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = -L_i \left( -A\eta_i + B\eta_i^3 + 2\eta_i \sum_{i \neq j}^N \eta_j^2 - k_i \nabla^2 \eta_i \right), i = 1, 2, \dots, N \quad (5.2)$$

Також, в варіюванні параметрів  $A$ ,  $B$ ,  $\text{mobil}$ ,  $\text{gcoef}$ , щоб вивчити вплив цих параметрів на динаміку та статистику зернистої структури. Розрахункова область  $V$  представляється двовимірною сіткою  $N_x \times N_y$ , де  $N_x, N_y$  — кількість вузлів у напрямку  $x$  і  $y$ .

Під час еволюції зерен, зокрема їхнього зростання, об'єднання чи зміни форми, можуть виникати зміни в параметрах моделі фазового поля. Хоча основна формула для вільної енергії залишається незмінною, є кілька аспектів, які потребують врахування змін, щоб коректно описати процеси, що відбуваються.

Зміни в межах зерен, зокрема при їх злитті чи зростанні, можуть призводити до змін у геометрії меж зерен. Це важливо, оскільки енергія межі залежить від її кривизни. Під час злиття або зростання зерен, межі змінюють свої параметри, що впливає на загальну енергію системи. Оскільки енергія межі

зерна пов'язана з його кривизною, необхідно коригувати ці терміни у рівняннях, щоб правильно описати зміни, що відбуваються.

Також важливо враховувати зміни в енергії між зернами під час їх злиття або зростання. Взаємодія між зернами визначається коефіцієнтами, які описують енергію взаємодії. Коли зерна зливаються, змінюються їхні відносини і можуть виникати нові аномалії в цих взаємодіях. Це потребує коригування коефіцієнтів для енергії взаємодії та взаємозв'язку між зернами. Крім того, розміри та форми зерен під час зростання можуть змінювати ці коефіцієнти, тому важливо враховувати, як ці параметри змінюються в процесі еволюції.

Не менш важливим є врахування анізотропії росту зерен, що означає неоднакове зростання зерен в різних напрямках. Це явище може бути описане додатковими термінами у рівнянні для вільної енергії, які будуть залежати від напрямку росту. Врахування анізотропії дозволяє точніше моделювати фізичні процеси, що відбуваються під час росту зерен.

Крім того, при злитті зерен можуть змінюватися граничні умови для фазового поля. Коли два зерна зливаються в одне, структура фазового поля може зазнати змін, оскільки нове зерно формуватиметься таким чином, щоб мінімізувати загальну енергію системи. Це вимагає постійної корекції граничних умов у процесі еволюції.



## ПАРАМЕТР ПОРЯДКУ ЯК ІНСТРУМЕНТ АНАЛІЗУ БАГАТОЗЕРНОВИХ СИСТЕМ

З метою інтерпретації зеренної структури у якості одного узагальненого параметра порядку використовується ще одна формула. Одним із ключових інструментів для дослідження зеренної структури матеріалів є використання узагальненого параметра порядку  $\Phi(r)$ . Цей параметр визначається за формулою:

$$\Phi(r) = \sum_{i=1}^N \eta_i^2(r)$$

де  $\Phi(r)$  є функцією просторової координати  $r$ , а  $\eta_i(r)$  описує стан  $i$ -го зерна в точці  $r$ . Значення  $\eta_i(r)$  змінюється від максимального (зазвичай 1) всередині зерна до мінімального (зазвичай 0) на його межах. Загальна кількість зерен у системі позначається як  $N$ .

Фізичний зміст цієї формули полягає у тому, що  $\Phi(r)$  відображає розподіл зерен у матеріалі. У внутрішніх областях зерен, де  $\eta_i(r)$  близьке до 1 для одного зерна і близьке до 0 для інших,  $\Phi(r)$  набуває високих значень. На межах між зернами, де кілька параметрів порядку  $\eta_i(r)$  одночасно приймають проміжні значення,  $\Phi(r)$  зменшується. Таким чином, цей параметр дозволяє чітко ідентифікувати області зерен та межі між ними.

Використання  $\Phi(r)$  як узагальненого параметра порядку є зручним з кількох причин. По-перше, він дозволяє ефективно описати складні багатозернові системи за допомогою одного математичного виразу. Це значно спрощує аналіз і дозволяє уникнути надмірного використання локальних параметрів. По-друге, така математична модель дає змогу легко інтерпретувати результати моделювання, що є важливим для досліджень мікроструктури матеріалів.

Практичне застосування параметра порядку  $\Phi(r)$  багатогранне. По-перше, він дозволяє визначити кількість зерен у матеріалі, аналізуючи максимуми  $\Phi(r)$ . По-друге, середній розмір зерен можна оцінити шляхом обчислення площ або об'ємів, де  $\Phi(r)$  перевищує певний поріг (наприклад, половину максимального значення). По-третє, розподіл  $\Phi(r)$  у просторі дозволяє оцінити густину меж зерен і їхні характеристики, що є важливим для прогнозування механічних властивостей матеріалу.

Обґрунтування вибору параметра порядку  $\Phi(r)$  полягає у його універсальності та здатності інтегрувати інформацію про зеренну структуру. Наприклад, коли  $\eta_i(r)$  приймає максимальні значення всередині зерна та мінімальні на межах, це дозволяє чітко визначити межі зерен та їх взаємодії. У складних багатозернових системах, де зерна часто мають неправильну форму та нерівномірний розподіл, використання саме цієї формули забезпечує високу точність аналізу.

Таким чином, Цей параметр приймає максимальне значення в області існування зерен та мінімальне на межі зерен. Аналіз цього параметра порядку дозволяє проаналізувати зернисту структуру, порахувати кількість зерен та їх середній розмір. Параметр порядку  $\Phi(r)$  є потужним інструментом для аналізу багатозернових систем, що поєднує простоту математичного опису із можливістю точного аналізу характеристик зерен. Його застосування є ключовим для розуміння процесів росту зерен, їхньої взаємодії та впливу на механічні властивості матеріалів.

## РОЛЬ ПАРАМЕТРІВ ЕНЕРГІЇ ПОВЕРХНІ ЗЕРНА ТА ЕНЕРГІЇ ВЗАЄМОДІЇ ЗЕРЕН

У моделі фазового поля параметри  $A$  і  $B$  відіграють ключову роль у формуванні та еволюції зернистої структури, оскільки вони визначають форму локальної вільної енергії  $f(\eta_i)$ , яка описує стабільність і взаємодію зерен. Параметри  $A$  та  $B$  важливі у моделі фазового поля, яка використовується для моделювання росту та еволюції зернистої структури. Вони входять до рівняння вільної енергії системи та визначають взаємодію між зернами, стабільність меж зерен і динаміку їхнього розвитку. Аналіз цих параметрів дає змогу глибше зрозуміти механізми, які визначають формування мікроструктури матеріалів.

Параметр  $A$  впливає на локальну вільну енергію системи та визначає співвідношення між стабільністю зерен і енергією їхніх меж. Він регулює енергетичну різницю між внутрішньою частиною зерна, де параметр порядку  $\eta_i$  наближається до максимального значення (близького до 1), та його межами, де  $\eta_i$  є мінімальним (практично дорівнює 0). Параметр  $A$  відповідає за енергетичний внесок, що сприяє формуванню зерен. Фізична роль  $A$  задає енергетичну стабільність зерен. При великих  $A$  зерна утворюються швидше, але мають тенденцію до меншої стабільності. Збільшення  $A$  сприяє швидшому зростанню зерен і може призводити до формування більших зерен, натомість, зменшення  $A$  уповільнює ріст зерен, збільшуючи вплив конкурентних ефектів між ними.

Параметр  $B$  характеризує нелінійні ефекти у рівнянні вільної енергії та впливає на взаємодію між сусідніми зернами. Його величина визначає, наскільки чіткими будуть межі зерен і наскільки інтенсивно вони взаємодіятимуть між собою. Параметр  $B$  визначає насичення і стабілізацію зерен та додає нелінійність до вільної енергії.  $B$  впливає на взаємодію зерен, забезпечуючи рівновагу між енергетичними ефектами. Збільшення  $B$  стабілізує зерна, обмежуючи їх ріст. Може призводити до більш рівномірного розподілу

зерен, в той час як, зменшення В дозволяє зернам легше зростати, що може призводити до формування більших і менш стабільних зерен.

Взаємодія параметрів А та В визначає характер розвитку зеренистої структури. Наприклад, високі значення обох параметрів забезпечують утворення стабільної та однорідної структури з чітко визначеними межами зерен. Низькі значення А та В сприяють динамічному росту зерен, злиттю їхніх меж і формуванню неоднорідної структури. Комбінація високого А та низького В може стимулювати утворення великих зерен із плавними межами. Таким чином, варіювання цих параметрів дозволяє моделювати різноманітні режими еволюції зерен, залежно від бажаних властивостей матеріалу.

При великому А і малому В зерна ростуть швидше, але можуть бути нерівномірними за розміром через нестабільність. При малому А і великому В зростання зерен сповільнюється, що сприяє формуванню більш однорідної структури.

При великому А (висока енергія формування) зерна утворюються легше, що може призвести до більшої їх кількості на ранніх етапах. При великому В кількість зерен стабілізується, оскільки злиття зерен відбувається повільніше.

Малий В сприяє активнішому злиттю зерен через зменшення стабілізуючого ефекту. Великий В уповільнює динаміку злиття, зберігаючи більшу кількість окремих зерен.

Практичне значення аналізу параметрів А та В полягає в можливості дослідження впливу термодинамічних і кінетичних факторів на розвиток зеренної структури. Змінюючи значення цих параметрів у межах  $A \in [0.5, 2.5]$  та  $B \in [0.5, 2.5]$  можна вивчати залежність між кількістю зерен, їхніми розмірами та характеристиками меж. Це дозволяє створювати моделі для різних типів матеріалів, таких як метали, кераміка чи полімери, а також прогнозувати їхні властивості на основі мікроструктури.

Таким чином, можна зробити висновок що параметри  $A$  та  $B$  є ключовими регуляторами процесу еволюції зеренної структури. Їх аналіз і варіювання є невід'ємною частиною моделювання, спрямованого на оптимізацію мікроструктури матеріалів та покращення їхніх експлуатаційних характеристик.

## ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ

Для виконання даної роботи було використано код що базується на моделі фазового поля для опису еволюції зернистої мікроструктури. Реалізація відбувалась в програмному середовищі MATLAB. MATLAB має кілька переваг, які роблять його особливо зручним для задач чисельного моделювання, таких як дослідження зернистих структур за допомогою моделі фазового поля. Було обрано саме це програмне середовище тому що MATLAB створений для математичних та інженерних розрахунків, тому його синтаксис дуже природний для роботи з рівняннями та матрицями. Також у MATLAB легко працювати з матричними операціями, які є основою моделювання фазового поля. Він дозволяє швидко будувати високоякісні графіки та візуалізувати мікроструктури в процесі моделювання.

Для виконання роботи програми було створено декілька функцій, які викликаються в основній частині. Програма Matlab готує вхідний файл для полікристалів моделювання на основі тесселяції Вороного. Для реалізації було використано оптимізовану версію `fd_ca_v2.m`, функції `init_grain_micro.m`, `free_energ_ca_v2.m`, `write_vtk_grid_values.m`, `laplacian.m`. Функція `write_vtk_grid_values.m` записує файли `vtk` на кожному кроці, в яких міститься інформація про середній розмір зерен, їх кількість, загальну площу зерна.

Для програмної реалізації даного завдання було початкове визначення параметрів та сітки (її розмірність), час моделювання та крок по часу, а також зафіксовані основні параметри. Також програма генерує зображення для подальшого аналізу результатів.

Основна частина програми `main.m` викликає решту функцій та фіксує вихідні значення. Всі частини програми та функції представлені у додатку А до кваліфікаційної роботи.

## РЕЗУЛЬТАТИ

Результати роботи програми зафіксувалися при фіксованому параметрі  $B$  та варійованому параметрі  $A$  та навпаки. Для варійованих параметрів обиралися три довільні значення в діапазоні  $(0,5; 2,5)$ , а саме : 0.5, 1.5, 2.5.

### Фіксоване значення $B$ та варійоване $A$

Під час моделювання динаміки росту зеренної структури в рамках методу фазового поля було проведено дослідження залежності мікроструктури від параметрів моделі, зокрема  $A=1.5$  та  $B$ , яке змінювалося в трьох значеннях:  $B=0.5$ ,  $B=1.5$ ,  $B=2.5$ . Аналіз проводився на трьох часових етапах моделювання: початковий (Step = 100), проміжний (Step = 500) та фінальний (Step = 1000), що дозволило оцінити еволюцію зерен у часі.

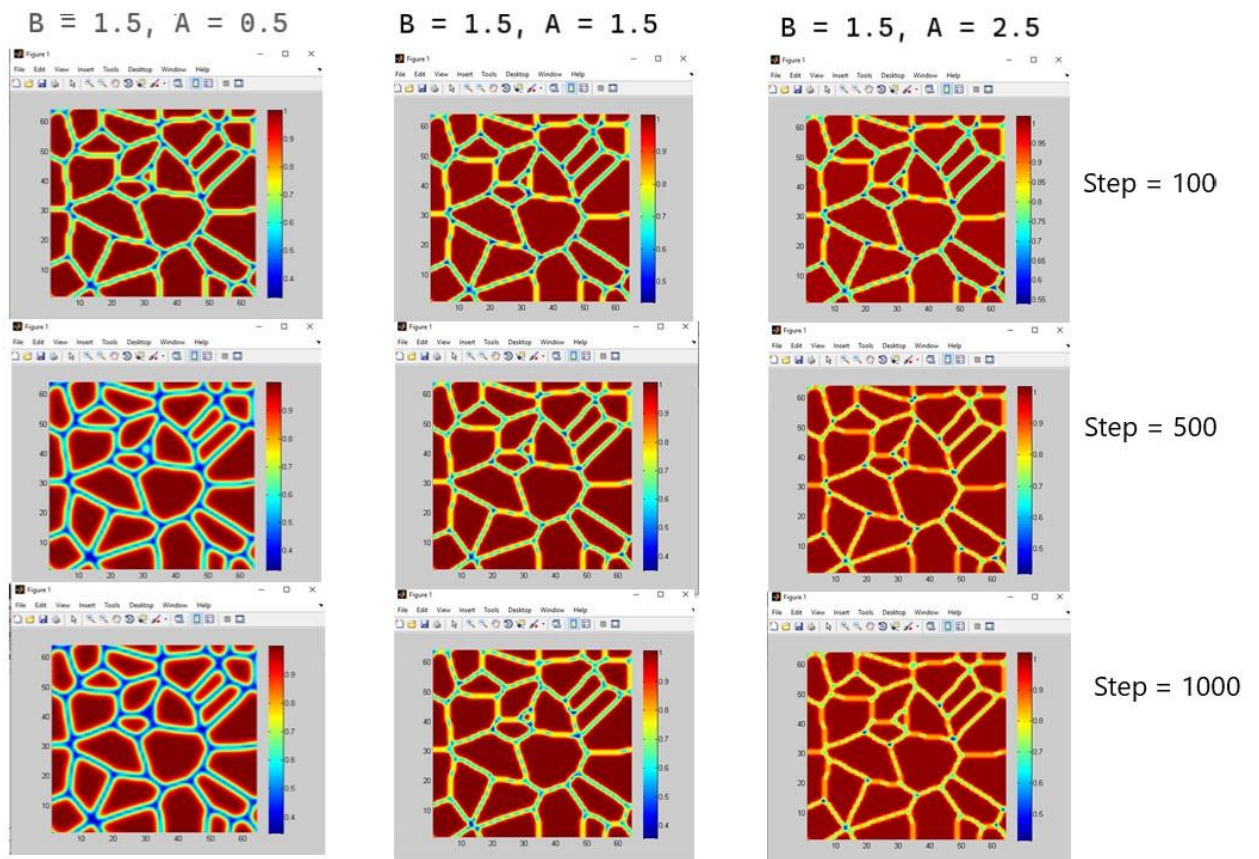


Рисунок 7.1. – Результат роботи програми при різних значеннях енергії взаємодії зерен. Фіксоване значення параметра  $A$  та варійоване  $B$

На початковому етапі моделювання (Step = 100) спостерігається початкове формування зерен. Для всіх значень параметра  $B$  зерна мають схожі контури, однак зі збільшенням значення  $B$  структура зерен стає більш чіткою, а межі – виразнішими. На цьому етапі процеси зародження зерен визначаються основними термодинамічними умовами моделі, і вплив параметра  $BVV$  проявляється у посиленні чіткості меж зерен.

На середньому етапі моделювання (Step = 500) зерна починають набувати стабільнішої форми. При малих значеннях  $B$  ( $B=0.5$ ) структура характеризується наявністю значної кількості дрібних фрагментів, що вказує на зростання нестабільності меж зерен. Натомість для більших значень  $B$  ( $B=1.5$ ,  $B=2.5$ ) структура зерен стає впорядкованішою, а їхні межі – стійкішими. Цей етап ілюструє перехід зерен до більш стабільного стану, де параметр  $B$  відіграє вирішальну роль у формуванні чітких і впорядкованих меж.

На фінальному етапі моделювання (Step = 1000) зерна досягають стану стабілізації. Зі збільшенням параметра  $BVV$  спостерігається тенденція до укрупнення зерен, що пов'язано із посиленням взаємодії між зернами та зменшенням кількості дрібних фрагментів. Натомість зменшення  $B$  ( $B=0.5$ ) призводить до більш хаотичного розподілу зерен, що є наслідком низької стабільності меж та інтенсивного процесу остальдового дозрівання, коли великі зерна поглинають менші.

Отже, результати моделювання показали, що параметр  $B$  суттєво впливає на динаміку росту та кінцеву структуру зерен. Великі значення  $B$  сприяють укрупненню зерен і формуванню впорядкованої мікроструктури, тоді як малі значення  $B$  призводять до хаотичного розподілу зерен і збільшення їхньої кількості. Аналіз часових етапів дозволив відстежити еволюцію зеренної структури в динаміці, що важливо для подальшого розуміння механізмів формування мікроструктури матеріалів.



## Фіксоване значення $A$ та варійоване $B$

У процесі моделювання росту зеренної структури методом фазового поля було досліджено вплив параметрів  $A$  та  $B$  на динаміку формування та стабілізації зерен. У цьому випадку параметр  $B$  фіксовано на значенні  $B=1.5$ , тоді як  $A$  змінювався у межах  $A=0.5$ ,  $A=1.5$  та  $A=2.5$ . Аналіз проводився на трьох часових етапах: початковий (Step = 100), проміжний (Step = 500) та фінальний (Step = 1000), що дозволило оцінити динаміку змін мікроструктури. Візуалізацію продемонстровано на рисунку 7.2

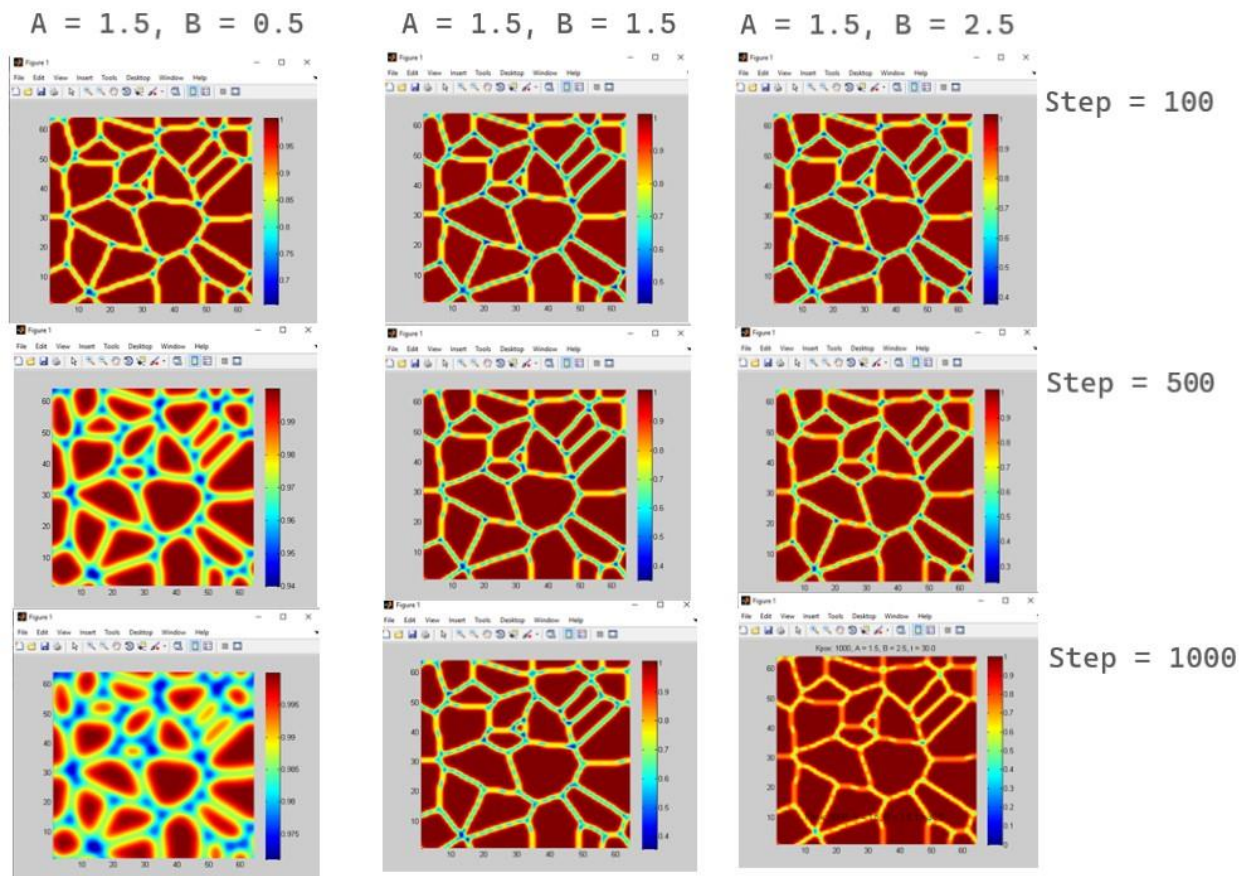


Рисунок 7.2. Результат роботи програми при різних значеннях енергії взаємодії зерен. Фіксований параметр  $A$  та варійований  $B$

На початковому етапі моделювання (Step = 100) відбувається формування зерен, яке значно залежить від значення параметра  $A$ . При малих значеннях  $A$  ( $A=0.5$ ) зерна характеризуються меншою щільністю та нерівномірним

розподілом, що вказує на низьку енергію взаємодії між елементами мікроструктури. У той час, як для більших значень  $A$  ( $A=1.5$ ,  $A=2.5$ ) контури зерен стають більш помітними, а їх розподіл – більш рівномірним, що свідчить про посилення впливу енергії на процеси самоорганізації структури.

На середньому етапі моделювання (Step = 500) спостерігається укрупнення та часткова стабілізація зерен. Зі зростанням  $A$  зерна стають більш однорідними та впорядкованими. При малих значеннях  $A$  структура залишається більш хаотичною, з великою кількістю дрібних зерен, які не встигають об'єднатися у більші утворення. Це свідчить про те, що параметр  $A$  значно впливає на еволюцію меж зерен та їх стабільність.

На фінальному етапі моделювання (Step = 1000) зерна досягають стаціонарного стану. Для великих значень  $A$  ( $A=2.5$ ) спостерігаються чіткі межі зерен, які мають більші розміри та більш впорядковану структуру. Натомість при малих значеннях  $A$  ( $A=0.5$ ) структура залишається дрібнозернистою та хаотичною, із слабкими межами між зернами.

Отримані результати наочно демонструють, як зміна параметрів  $A$  та  $B$  впливає на динаміку росту зерен і формування кінцевої мікроструктури. Зменшення значення  $A$  сприяє формуванню дрібнозернистих структур, що може бути корисним у випадках, коли потрібна підвищена міцність матеріалу через збільшення кількості меж зерен. З іншого боку, збільшення  $A$  сприяє стабілізації та укрупненню зерен, що дозволяє досягти одноріднішої структури, яка може забезпечувати інші бажані властивості, такі як покращена провідність або знижена крихкість. Описані залежності є важливими для оптимізації структури матеріалів із заданими характеристиками та можуть бути використані у практичному матеріалознавстві.

Ці два зображення демонструють зміну зеренної структури у процесі моделювання залежно від параметрів  $A$  та  $B$ , використовуючи метод фазового поля. Візуальні результати показують, що зміна параметрів взаємодії  $A$  та  $B$

суттєво впливає на динаміку росту зерен і кінцеву мікроструктуру. Зменшення  $A$  сприяє формуванню більш дрібнозернистих структур, тоді як збільшення  $B$  стабілізує межі зерен, що призводить до одноріднішого розподілу розмірів. Описані залежності можуть бути використані для оптимізації структури матеріалів із заданими властивостями.

## РОЗПОДІЛ ПАРАМЕТРІВ ЗЕРЕН

При виконанні роботи програми для чисельного моделювання зернистої мікроструктури були сформовані файли у форматі .vtk (Visualization Toolkit), які використовуються для збереження даних результатів моделювання в стандартному форматі. Формат .vtk є широко використовуваним для візуалізації наукових і інженерних даних, оскільки він підтримує зручне збереження інформації про просторові структури та дозволяє передавати дані про різні властивості матеріалу.

Ці файли містять детальну інформацію про еволюцію зернистої мікроструктури, включаючи просторове розташування зерен, їх розміри, а також інші характеристики, які змінюються в процесі моделювання, наприклад, енергетичні параметри та параметри взаємодії між зернами. Збереження цих даних у файлах .vtk дає змогу здійснити точний аналіз отриманих результатів та побудувати візуалізацію структури на різних етапах моделювання.

На основі інформації, що міститься в .vtk файлах, можна визначити такі ключові параметри зернистої структури, як середній розмір зерен, їх кількість та розподіл, а також проаналізувати зміну цих характеристик залежно від змінних параметрів моделювання, таких як значення параметрів  $A$  та  $B$ . Важливим аспектом є також можливість порівняння результатів для різних умов, що дозволяє виявити вплив параметрів на динаміку росту зерен, їх об'єднання, а також зміни в межах зерен.

Цей підхід дає змогу здійснити детальний аналіз не лише кінцевої мікроструктури, але й процесу її формування, що є важливим для розуміння фізичних механізмів, які лежать в основі росту та взаємодії зерен у матеріалах. Завдяки використанню формату .vtk можна провести подальший аналіз і візуалізацію даних, що дозволяє дослідникам і інженерам оптимізувати параметри моделювання для досягнення бажаних матеріальних властивостей, таких як міцність, стійкість до зносу або інші характеристики матеріалів.

## ФІКСОВАНЕ ЗНАЧЕННЯ ПАРАМЕТРА ЕНЕРГІЇ ПОВЕРХНІ ЗЕРЕН

Перетворивши отримані дані ми отримали зручні результати на основі яких було побудовано графіки залежності розміру зерен від кроку моделювання та залежність кількості зерен від кроку моделювання. Дані про середній розмір зерна та їх кількість було занесено у таблиці (представлені нижче), на основі яких були побудовані графіки залежності.

<b>A</b>	<b>B</b>	<b>size</b>	<b>number</b>	<b>step</b>
1,5	0,5	0,97	1	100
		0,49	2	200
		0,49	2	300
		0,37	3	400
		0,53	2	500
		0,52	2	600
		0,233	5	700
		0,182	7	800
		0,163	10	900
		0,158	10	1000

Таблиця 8.1.1 – Дані для A=1,5 B=0,5

<b>A</b>	<b>B</b>	<b>size</b>	<b>number</b>	<b>step</b>
1,5	1,5	0,263	5	100
		0,264	5	200
		0,264	5	300
		0,316	4	400
		0,5	2	500
		0,5	2	600
		0,5	2	700
		0,95	1	800
		0,94	1	900
		0,53	2	1000

Таблиця 8.1.2 – Дані для A=1,5 B=1,5

A	B	size	number	step
1,5	2,5	0,263	5	100
		0,264	5	200
		0,317	4	300
		0,95	1	400
		0,95	1	500
		0,5	2	600
		0,5	2	700
		0,5	2	800
		0,95	1	900
		0,95	1	1000

Таблиця 8.1.3 – Дані для A=1,5 B=2,5

На основі отриманих даних було побудовано графіки залежностей

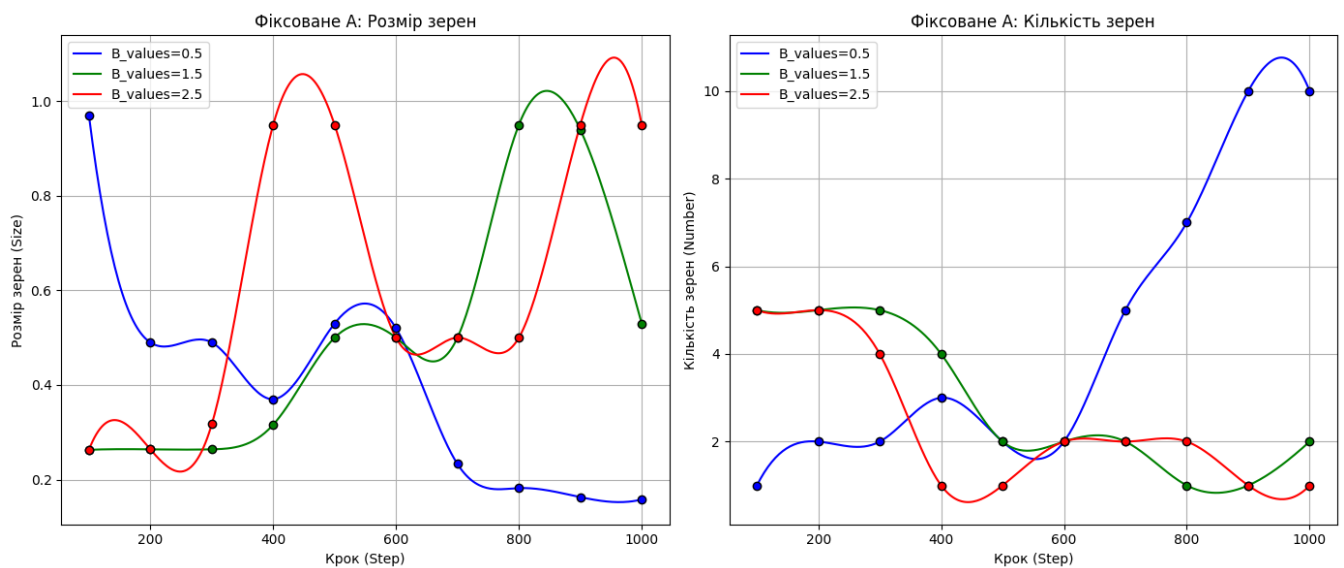


Рисунок 8.1 - Залежності середнього розміру зерен та їх кількості при різних значеннях енергії взаємодії зерен (Фіксоване A)

З отриманих результатів випливає, що при малих значеннях енергії взаємодії зерен їх кількість зростає з часом, тоді як середній розмір зменшується. Це пояснюється не достатньою взаємодією між зернами для їх об'єднання і може інтерпретуватися як процес фрагментації матеріалу. При підвищених значеннях енергії взаємодії зерен їх середній розмір збільшується з часом а кількість зменшується, що відповідає процесу росту зерен у часі. Такий

процес є дифузійним і отже при великих часах моделювання в системі зашиться одне зерно.

Для кожного фіксованого значення параметра  $A$  спостерігається, що збільшення параметра  $B$  сприяє прискореному укрупненню зерен. Коли  $B=2.5$ , зерна досягають найбільшого розміру на значно меншій кількості кроків порівняно з  $B=0.5$  чи  $B=1.5$ . Це підтверджується графіками, які показують зміну середнього розміру зерен за різних значень  $B$ , коли параметр  $A$  залишається сталим.

При  $B=0.5$  зерна спочатку мають невеликий розмір, який стабілізується до 500-го кроку. Після цього починається їх поступовий ріст, але зерна не досягають максимального значення. При  $B=1.5$  процес зростання зерен відбувається швидше, з початком збільшення їхнього розміру після 400-го кроку. При  $B=2.5$  середній розмір зерен починає зростати практично одразу, досягаючи свого максимального значення вже на 600-му кроці.

Параметр  $B$  має значний вплив на локальні властивості матеріалу, такі як внутрішнє тертя та кількість дефектів у зернах. При низьких значеннях  $B$  зерна ростуть повільно, що призводить до менш виражених змін в їхньому розмірі. Вищі значення  $B$  сприяють подоланню енергетичних бар'єрів для росту зерен, що прискорює цей процес.

Крім того, при великих значеннях  $B$  спостерігається різке зменшення кількості зерен через агрегацію. При малих значеннях  $B$  зміни кількості зерен є менш вираженими, і процес стабілізації числа зерен відбувається більш поступово.

Що стосується кількості зерен, графік, що ілюструє її залежність від  $B$ , показує наступні тенденції: при  $B=0.5$  кількість зерен залишається високою до 600-го кроку, а потім різко зменшується до 1-2 зерен. При  $B=1.5$  система швидше втрачає зерна, і їх кількість починає зменшуватися вже після 400-го

кроку. При  $V=2.5$  кількість зерен починає зменшуватися майже з самого початку, і до 300-го кроку залишається лише кілька зерен.

Осциляції на залежностях пов'язані з невеликим розміром обчислювальної ґратки та реалізацією одного експерименту для кожного набору параметрів. Збільшення розміру системи та кількості експериментів дозволить провести усереднення та отримати монотонні залежності



## ФІКСОВАНЕ ЗНАЧЕННЯ ПАРАМЕТРА ЕНЕРГІЇ ВЗАЄМОДІЇ ЗЕРЕН

Для фіксованого значення параметра В було виконано те саме: побудовано графіки залежності розміру зерен від кроку моделювання та залежність кількості зерен від кроку моделювання. Дані про середній розмір зерна та їх кількість було занесено у таблиці (представлені нижче), на основі яких були побудовані графіки залежності.

<b>A</b>	<b>B</b>	<b>size</b>	<b>number</b>	<b>step</b>
0,5	1,5	0,207	9	100
		0,143	33	200
		0,14	33	300
		0,139	33	400
		0,139	33	500
		0,142	32	600
		0,142	32	700
		0,142	32	800
		0,142	32	900
		0,142	32	1000

Таблиця 8.2.1 – Дані для В=1,5 А=0,5

<b>A</b>	<b>B</b>	<b>size</b>	<b>number</b>	<b>step</b>
1,5	1,5	0,263	5	100
		0,264	5	200
		0,264	5	300
		0,316	4	400
		0,5	2	500
		0,5	2	600
		0,5	2	700
		0,95	1	800
		0,94	1	900
		0,53	2	1000

Таблиця 8.2.2 – Дані для В=1,5 А=1,5

A	B	size	number	step
2,5	1,5	0,263	5	100
		0,96	1	200
		0,97	1	300
		0,98	1	400
		0,99	1	500
		0,97	1	600
		0,96	1	700
		0,97	1	800
		0,97	1	900
		0,99	1	1000

Таблиця 8.2.3 – Дані для B=1,5 A=2,5

Для фіксованого значення B було проведено аналогічні операції:  
побудовано графіки залежностей

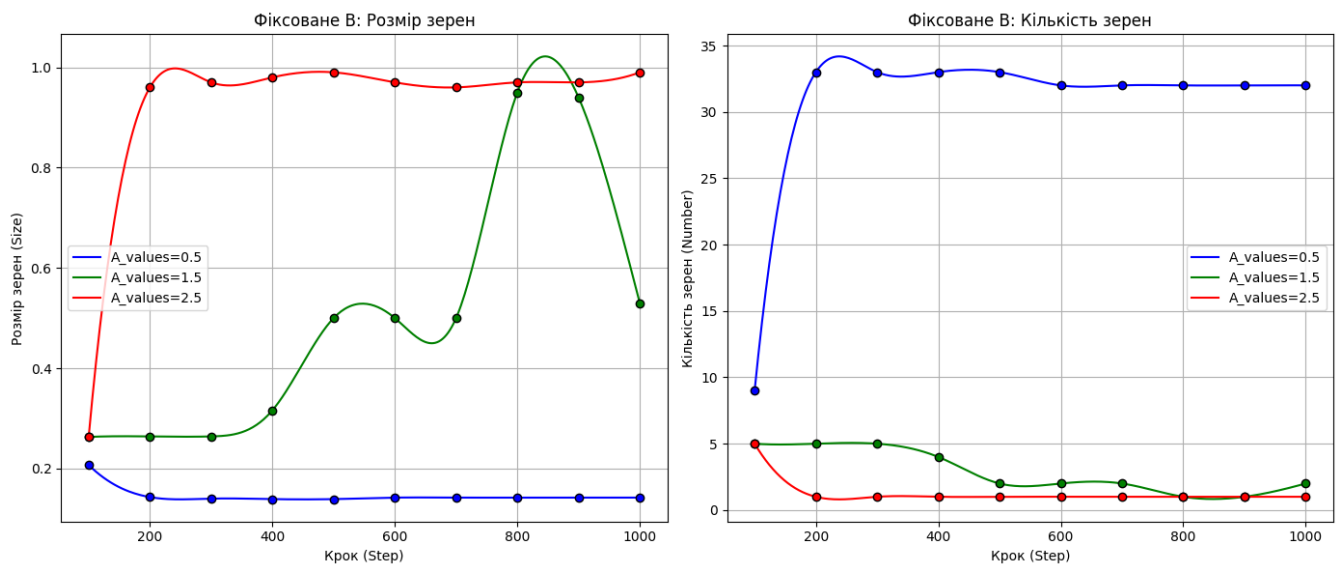


Рисунок 8.2 - Залежності середнього розміру зерен та їх кількості при різних значеннях енергії взаємодії зерен (Фіксоване B)

З отриманих результатів видно, що у випадку малих значень енергії поверхні зерен також реалізується процес фрагментації, коли кількість зерен з часом зростає (на невеликих часових масштабах) та стабілізується при збільшенні часу моделювання. При цьому середній розмір спочатку зменшується та приймає постійне значення при великих часах моделювання. При помірних значеннях енергії поверхні зерен приводить до зміни сценарію

мікроструктурних перетворень, коли зерна зростають у розмірах і їх кількість зменшується. При великих значеннях енергії поверхні зерен цей процес суттєво прискорюється і в системі реалізується одне зерно вже на початкових стадіях моделювання.

Розмір зерен змінюється залежно від значення параметра  $A$ , що впливає на міграцію границь зерен та їх ріст. При  $A=0.5$  графік показує плавне зростання та коливання розміру зерен, що вказує на обмежену міграцію границь зерен і слабку рушійну силу для їх росту. Це можна пояснити низькою енергією границь, яка обмежує активність коалесценції і, відповідно, ріст зерен.

Для  $A=1.5$  спостерігається більш активне збільшення розміру зерен, яке починається після 400-го кроку. Це свідчить про більш інтенсивний процес коалесценції, коли границі зерен стають рухливішими, що сприяє злиттю дрібних зерен у більші. Зі збільшенням значення  $A$ , зерна стають стабільними і досягають максимальної величини швидше.

При  $A=2.5$  розмір зерен зростає майже лінійно після 200-го кроку і досягає максимального значення на завершальних етапах моделювання. Це вказує на домінування нормального процесу росту зерен, коли енергія границь забезпечує активне злиття зерен за сильного рушійного впливу.

Параметр  $A$  є важливим показником, що відповідає за енергію або температурний вплив на систему. Вищі значення  $A$  забезпечують більшу енергію для системи, що активізує процеси агломерації зерен і сприяє більш швидкому їх росту. Низькі значення  $A$ , навпаки, обмежують рухливість границь, що веде до збереження дрібнозернистої структури протягом тривалого часу.

Що стосується кількості зерен, то при малих значеннях  $A$  (наприклад, при  $A=0.5$ ) кількість зерен зменшується поступово з часом, але стабілізується на певному рівні. Це свідчить про повільний процес коалесценції зерен, де дрібні

зерна залишаються в системі довше. Для  $A=2.5$  кількість зерен зменшується швидше, і вже до 400-го кроку залишається лише 1-2 зерна, що свідчить про агрегацію зерен до більших одиниць.

Зменшення кількості зерен корелює з їхнім середнім розміром. Вищі значення  $A$  створюють умови для швидкого розчинення дрібних зерен і приєднання їх до більших, що є класичним проявом процесу Оствальдового дозрівання. Цей процес відомий тим, що зерна з меншим радіусом поступово розчиняються і додаються до більших зерен, що зменшує загальну енергію системи і сприяє досягненню стабільної зернистої структури.

Осциляції на залежностях пов'язані з невеликим розміром обчислювальної ґратки та реалізацією одного експерименту для кожного набору параметрів. Збільшення розміру системи та кількості експериментів дозволить провести усереднення та отримати монотонні залежності.

Обидва набори графіків демонструють, як вибір параметрів  $A$  та  $B$  впливає на кінетику формування зерен у матеріалі. Зі збільшенням одного з параметрів спостерігається злиття зерен, що призводить до збільшення їх розміру, але зменшення кількості. Ці залежності важливі для моделювання структурних змін у матеріалах.

## ВИСНОВКИ

У даній роботі було проведено дослідження впливу енергії поверхні зерен та енергії взаємодії зерен на динаміку росту та статистичні властивості зернистої мікроструктури в рамках комп'ютерного моделювання за допомогою моделі фазового поля, також було досліджено вплив параметрів взаємодії  $A$  та  $B$  на динаміку росту та статистичні властивості зернистої мікроструктури в рамках моделі фазового поля. Також були проведені чисельні експерименти дозволили отримати ряд важливих результатів, що мають теоретичну та практичну значущість.

Зокрема, було встановлено, що параметр  $A$  визначає інтенсивність фазових перетворень, а його збільшення сприяє пришвидшенню укрупнення зерен і підвищенню однорідності структури. Параметр  $B$  впливає на стабільність та конкуренцію між зернами: при його вищих значеннях динаміка укрупнення сповільнюється, що дозволяє отримати більш стійкі мікроструктури.

Візуалізація отриманих результатів у вигляді гістограм розподілу розмірів зерен та залежностей кількості зерен від часу підтвердила ефективність методу фазового поля для моделювання процесів мікроструктурної еволюції. Продемонстровані залежності також вказують на можливість управління властивостями матеріалів шляхом вибору параметрів моделі.

Отримані результати мають практичну значущість для матеріалознавства. Вони можуть бути використані для прогнозування та оптимізації технологічних процесів термообробки, що сприятиме створенню матеріалів із заданими механічними, термічними та іншими властивостями.

Таким чином, робота продемонструвала ефективність підходу моделювання мікроструктурної еволюції за допомогою методу фазового поля та внесла вклад у розвиток комп'ютерних методів дослідження матеріалів.

Дослідження впливу параметрів А та В на динаміку росту та статистичні властивості зернистої мікроструктури показало можливість керування характеристиками матеріалів через комп'ютерне моделювання. Використання методу фазового поля підтвердило свою ефективність для таких задач, що має велике значення в матеріалознавстві та суміжних галузях.

У перспективі можливе розширення дослідження на тривимірні системи, що дозволить більш точно моделювати реальні фізичні процеси, де характерні взаємодії зерен і їх розвиток відбуваються в усіх трьох просторових вимірах. Тривимірне моделювання надасть змогу вивчити більш складні структури та явища, які неможливо точно відтворити в двовимірних моделях, наприклад, ефекти, пов'язані з об'ємними деформаціями або більш детальними взаємодіями між зернами в об'ємних матеріалах. Крім того, інтеграція чисельних моделей із експериментальними даними дасть можливість покращити точність та надійність отриманих результатів, а також підтвердити теоретичні прогнози. Зіставлення чисельних даних із реальними експериментами дозволить коригувати параметри моделі, що сприятиме її оптимізації і підвищенню прогностичних можливостей. Це, в свою чергу, відкриває нові перспективи для застосування моделей у практичних задачах, таких як оптимізація матеріалів для промислових процесів, розробка нових сплавів або дослідження механізмів, що лежать в основі матеріалознавства.

## Список використаної літератури

1. Кушнір, Р. М., & Кушнір, Л. Р. (2016). *Методи і моделі обчислювального матеріалознавства*. Львів: Видавництво Львівської політехніки.
2. Гнатюк, С. А., та ін. (2017). *Фізичне матеріалознавство: комп'ютерне моделювання*. Київ: НАН України.
3. Іванов, В. О. (2019). *Комп'ютерне моделювання мікроструктури металів*. Вінниця: ВНТУ.
4. Frolov, T., & Asta, M. (2018). *Grain Boundary Kinetics: A Molecular Dynamics Study*. *Acta Materialia*, 144, 497–506.
5. Mason, J. K., & Schuh, C. A. (2020). *Thermodynamic and Kinetic Aspects of Grain Growth*. *Journal of Materials Science*, 55(4), 1531–1544.
6. Chen, L. Q. (2002). *Phase-Field Models for Microstructure Evolution*. *Annual Review of Materials Research*, 32, 113–140.
7. Moelans, N., Blanpain, B., & Wollants, P. (2008). *An Introduction to Phase-Field Modeling of Microstructure Evolution*. *Calphad*, 32(2), 268–294.
8. Warren, J. A., & Boettinger, W. J. (1995). *Prediction of Grain Structure Evolution Using Phase-Field Models*. *Acta Metallurgica*, 43(2), 689–703.
9. Martin, G., & Bellon, P. (1997). *Driven Alloys: From Physics to Materials Science*. *Solid State Physics*, 50, 189–331.
10. Tang, M., Carter, W. C., & Cannon, R. M. (2006). *Grain Boundary Diffusion and Structural Transitions in Binary Alloys*. *Physical Review B*, 73(2), 024102.
11. Haataja, M., & Provatas, N. (2008). *The Role of Mobility and Anisotropy in Grain Growth Simulations*. *Computational Materials Science*, 44(2), 704–710.
12. Srolovitz, D. J. (1989). *Grain Growth and the Evolution of Microstructure*. *Progress in Materials Science*, 28(1), 89–165.
13. Bhadeshia, H. K. D. H. (2001). *Phase Transformations in Metals and Alloys*. CRC Press. Porter, D. A., & Easterling, K. E. (2009). *Phase Transformations in Metals and Alloys*. CRC Press, 3rd Edition.

14. Steinbach, I. (2009). *Phase-Field Models in Materials Science*. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 17(7), 073001.
15. Humphreys, F. J., & Hatherly, M. (2012). *Recrystallization and Related Annealing Phenomena*. Elsevier.
16. Raabe, D. (2004). *Computational Materials Science: The Simulation of Materials Microstructures and Properties*. Wiley-VCH.
17. Torquato, S. (2002). *Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties*. Springer.
18. Elder, K. R., & Grant, M. (2004). *Modeling the Elastic and Plastic Deformations in Polycrystalline Materials*. Physical Review E, 70(5), 051605.
19. Zhang, Y., Wang, Y., & Chen, L. Q. (2005). *Phase-Field Modeling of Defect Dynamics in Materials Science*. Annual Review of Materials Research, 35, 173–200.



## Додаток А

```
main.m                                     NxNy = Nx * Ny;

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%      dx = 0.5;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%      dy = 0.5;

% FINITE DIFFERENCE
PHASE-FIELD

% CODE FOR SOLVING
ALLEN-CAHN EQUATION                       % Параметри інтеграції за
                                            часом

% (OPTIMIZED FOR
MATLAB/OCTAVE)                             nstep = 1000;

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%      nprint = 100;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%      dtime = 0.005;
%                                           ttime = 0.0;

% Початковий час для                      % Фіксовані матеріальні
обчислення                                 параметри

time0 = clock();                           mobil = 2;

                                            grcoef = 0.1;

% Параметри комірки
моделювання                                % Значення параметрів A і B

Nx = 64;                                    A_values = linspace(0.5, 2.5, 3);

Ny = 64;                                    B_values = linspace(0.5, 2.5, 3);
```

% Поріг для визначення зерен

threshold = 0.5;

% Масиви для збереження  
результатів

num\_grains\_A\_fixed = zeros(5,  
1); % для фіксованого B

avg\_size\_A\_fixed = zeros(5, 1);  
% для фіксованого B

num\_grains\_B\_fixed = zeros(5,  
1); % для фіксованого A

avg\_size\_B\_fixed = zeros(5, 1);  
% для фіксованого A

% Цикл по значенням A при  
фіксованому B

for i = 1:3

A = 0.5 + (i-1)\*1.0; % Вибір  
значень A в інтервалі (0.5; 2.5)

B = 1.5; % Фіксоване  
значення B

% Симуляція з новими  
значеннями A та B

[etas, ngrain, glist] =  
init\_grain\_micro(Nx, Ny, dx, dy,  
2, 2); % Генерація початкової  
зернистої структури

% Отримання шаблону  
Лапласіана

[grad] = laplacian(Nx, Ny, dx,  
dy);

% Ініціалізація масиву для  
параметра eta

eta = zeros(Nx \* Ny, 1);

% Основний цикл еволюції

for istep = 1:nstep

ttime = ttime + dtime;

for igrain = 1:ngrain

```

if glist(igrain) == 1                                % Оновлення значень
                                                    eta
    eta = etas(:, igrain);
                                                    etas(:, igrain) = eta;

    % Обчислення
похідної вільної енергії                                % Перевірка об'ємної
                                                    фракції зерна

    dfdeta =
free_energ_fd_ca_v2(Nx, Ny,                            grain_sum = sum(eta) /
ngrain, etas, eta, igrain, A, B);                       NxNy;

                                                    if grain_sum <= 0.001

    % Інтегрування за                                glist(igrain) = 0;
часом                                                    fprintf('Зерно %5d
                                                    ліквідовано\n', igrain);

    eta = eta - dtime *
mobil * (dfdeta - grcoef * grad *
eta);                                                    end

                                                    end

    % Обмеження
значень eta                                                    end

    eta(eta >= 0.9999) =
0.9999;                                                    % Збереження стану при
                                                    кожному nprint-му кроці

    eta(eta < 0.00001) =
0.00001;                                                    if mod(istep, nprint) == 0

                                                    fprintf('Крок: %5d для A
= %.1f, B = %.1f\n', istep, A, B);

```

```

eta2 = reshape(sum(etas
.^ 2, 2), [Nx, Ny]);

title(sprintf('Крок: %d, A
= %.1f, B = %.1f, t = %.1f' ,
istep, A, B, ttime));

clf;

text (10,10, max(Z1(:)),
sprintf('Крок: %d, A = %.1f, B =
%.1f, t = %.1f' , istep, A, B,
ttime) , 'Color' , 'black' ,
'FontSize', 12);

% Візуалізація

hold off;

[X0, Y0] =
meshgrid(1:Nx, 1:Ny);

[X1, Y1] =
meshgrid(1:0.1:Nx);

Z1 = interp2(X0, Y0,
eta2, X1, Y1, 'cubic');

SF = surf(X1, Y1, Z1);

colormap jet;

shading interp;

colorbar;

axis([1 Nx 1 Ny]);

view(0, 90);

drawnow();

caxis([0 1]);

% Запис у файл VTK

write_vtk_grid(Nx, Ny,
dx, dy, istep, eta2);

end

% Збереження стану при t
= 1000

if ttime >= 1000

filename =
sprintf('structure_A_%.1f_B_%.
1f.mat', A, B);

save(filename, 'etas', 'A',
'B', 'Nx', 'Ny', 'ttime');

```

```
fprintf('Структура  
збережена у файлі: %s\n',  
filename);
```

```
% Підрахунок кількості  
зерен та їх розміру
```

```
% Поріг для  
класифікації зерен
```

```
binary_eta = eta2 >  
threshold;
```

```
% Пошук зв'язних  
компонент (зерна)
```

```
[L, num_labels] =  
bwlable(binary_eta, 8); % 8-  
сусідність
```

```
grain_sizes =  
zeros(num_labels, 1);
```

```
% Обчислення площі  
кожного зерна
```

```
for i = 1:num_labels
```

```
grain_sizes(i) =  
sum(L(:) == i); % Площа зерна  
(кількість пікселів)
```

```
end
```

```
% Обчислення  
середнього розміру зерна
```

```
mean_grain_size =  
mean(grain_sizes);
```

```
num_grains =  
num_labels;
```

```
fprintf('Кількість зерен:  
%d, Середній розмір зерен:  
%.2f\n', num_grains,  
mean_grain_size);
```

```
% Збереження даних  
про кількість і розміри зерен
```

```
save(sprintf('grain_stats_A_%.1f  
_B_%.1f.mat', A, B),  
'num_grains', 'mean_grain_size',  
'grain_sizes');
```

```

        break; % Вихід з циклу
часу, щоб не перевищити t =
1000

    end

end

end
end

```

```

% Цикл по значеннях В при
фіксованому А

for i = 1:3

    A = 1.5; % Фіксоване
значення А

    B = 0.5 + (i-1)*1.0; % Вибір
значень В в інтервалі (0.5; 2.5)

    % Симуляція з новими
значеннями А та В

    [etas, ngrain, glist] =
init_grain_micro(Nx, Ny, dx, dy,
2, 2); % Генерація початкової
зернистої структури

```

```

% Отримання шаблону
Лапласіана

[grad] = laplacian(Nx, Ny, dx,
dy);

% Ініціалізація масиву для
параметра eta

eta = zeros(Nx * Ny, 1);

% Основний цикл еволюції

for istep = 1:nstep

    ttime = ttime + dtime;

    for igrain = 1:ngrain

        if glist(igrain) == 1

            eta = etas(:, igrain);

            % Обчислення
похідної вільної енергії

            dfdeta =
free_energ_fd_ca_v2(Nx, Ny,
ngrain, etas, eta, igrain, A, B);

```

```

glist(igrain) = 0;

% Інтегрування за
часом
    eta = eta - dtime *
mobil * (dfdeta - grcoef * grad *
eta);

% Обмеження
значень eta
    eta(eta >= 0.9999) =
0.9999;
    eta(eta < 0.00001) =
0.00001;

% Оновлення значень
eta
    etas(:, igrain) = eta;

% Перевірка об'ємної
фракції зерна
    grain_sum = sum(eta) /
NxNy;

    if grain_sum <= 0.001

glist(igrain) = 0;
    fprintf('Зерно %5d
ліквідовано\n', igrain);
    end
    end
    end

% Збереження стану при
кожному nprint-му кроці
    if mod(istep, nprint) == 0
        fprintf('Крок: %5d для A
= %.1f, B = %.1f\n', istep, A, B);
        eta2 = reshape(sum(etas
.^ 2, 2), [Nx, Ny]);
    end

% Візуалізація
    hold off;
    [X0, Y0] =
meshgrid(1:Nx, 1:Ny);
    [X1, Y1] =
meshgrid(1:0.1:Nx);

```

```

        Z1 = interp2(X0, Y0,
eta2, X1, Y1, 'cubic');

        SF = surf(X1, Y1, Z1);

        colormap jet;

        shading interp;

        colorbar;

        axis([1 Nx 1 Ny]);

        view(0, 90);

        drawnow();

        caxis([0 1]);

        title(sprintf('Крок: %d,
A = %.1f, B = %.1f, t = %.1f',
istep, A, B, ttime));

        text (10,10, max(Z1(:)),
sprintf('Крок: %d, A = %.1f, B =
%.1f, t = %.1f', istep, A, B,
ttime) , 'Color', 'black' ,
'FontSize', 12);

        % Запис у файл VTK

        write_vtk_grid(Nx, Ny,
dx, dy, istep, eta2);

        end

        % Збереження стану при t
= 1000

        if ttime >= 1000

            filename =
sprintf('structure_A_%.1f_B_%.
1f.mat', A, B);

            save(filename, 'etas', 'A',
'B', 'Nx', 'Ny', 'ttime');

            fprintf('Структура
збережена у файлі: %s\n',
filename);

            % Підрахунок кількості
зерен та їх розміру

            % Поріг для
класифікації зерен

            binary_eta = eta2 >
threshold;

            % Пошук зв'язних
компонент (зерна)

```



```

[L, num_labels] =
bwlabel(binary_eta, 8); % 8-
сусідність

grain_sizes =
zeros(num_labels, 1);

% Обчислення площі
кожного зерна

for i = 1:num_labels

    grain_sizes(i) =
sum(L(:) == i); % Площа зерна
(кількість пікселів)

end

% Обчислення
середнього розміру зерна

mean_grain_size =
mean(grain_sizes);

num_grains =
num_labels;

fprintf('Кількість зерен:
%d, Середній розмір зерен:
%.2f\n', num_grains,
mean_grain_size);

% Збереження даних
про кількість і розміри зерен

save(sprintf('grain_stats_A_%.1f
_B_%.1f.mat', A, B),
'num_grains', 'mean_grain_size',
'grain_sizes');

break; % Вихід з циклу
часу, щоб не перевищити t =
1000

end

end

end

fd_ca_v2.m

function [dfdeta] =
free_energ_fd_ca_v2(Nx, Ny,
ngrain, etas, eta, igrain, A, B)

% Розмірність: Nx, Ny —
кількість точок сітки по осях X
та Y

```

```

% etas — розмірність Nx *
Ny * ngrain, етапи енергії

% eta — значення для
кожної точки сітки

% igrain — вектор для
кожної точки, який визначає
значення зерна

% A, B — параметри для
потенціалу, залежні від моделі

dfdeta = zeros(Nx, Ny);

for i = 1:Nx

    for j = 1:Ny

        % Оцінка зміни вільної
енергії для кожної точки

        % Потрібно
використати дані A, B, eta і
etas для обчислень

        % Формула для зміни
енергії може бути іншою в
залежності від вашої моделі

        dfdeta(i, j) = A * eta(i, j)
+ B * sum(etas(i, j, :));

end

end

end

function [dfdeta] =
free_energ_fd_ca_v2(Nx, Ny,
ngrain, etas, eta, igrain, A, B)

% Параметри A та B
передаються як аргументи
функції для можливості їх
зміни

NxNy = Nx * Ny;

sum = zeros(NxNy, 1);

% Обчислення суми
квадратів етапів для інших
зерен

for jgrain = 1:ngrain

    if jgrain ~= igrain

        sum = sum + etas(:,
jgrain).^2;

    end

end

end

```

```

% Обчислення похідної від
вільної енергії

dfdelta = A * (2.0 * B * eta .*
sum + eta.^3 - eta);

end

init_grain_micro:

function [etas,ngrain,glist]
=init_grain_micro(Nx,Ny,dx,dy,i
flag,isolve)

format long;

if(iflag == 2);

    in =fopen('grain_25.inp','r');

end

%-----

% generate two grains

%-----

if(iflag == 1)

    ngrain =2;

    %-etas(, 1) first grain

    %-etas(, 2) second grain

```

```

x0 = Nx/2;

y0 = Ny/2;

radius = 14.0; % radius of
second grain

for i=1:Nx

    for j=1:Ny

        ii=(i-1)*Nx+j;

        if(isolve == 2)

            etas(ii,1)=1.0;

            etas(ii,2)=0.0;

        else

            etas(i,j,1) =1.0;

            etas(i,j,2) =0.0;

        end

        xlength =sqrt((i-
x0)^2+(j-y0)^2);

        if(xlength <= radius);

            if(isolve == 2)

                etas(ii,1)=0.0;

                etas(ii,2)=1.0;

```

```

else
    etas(i,j,1)=0.0;
    etas(i,j,2)=1.0;
end
end %if
end %j
end %i
end %iflag
%-----
% generate
polycrystalmicrostructure %
%-----
if(iflag == 2)
    %-----
    % read the data generated
    from voroni_1.m
    %-----
    twopi=8.0*atan(1.0);
    epsilon=1.0e-4;
    ndime=2;
    nvpoint = fscanff(in,'%d',1);
    nvnode = fscanff(in,'%d',1);
    nvelem = fscanff(in,'%d',1);
    ngrain = fscanff(in,'%d',1);
    for ipoin=1:nvpoint
        jpoint =fscanff(in,'%d',1);
        dummy =fscanff(in,'%lf
        %lf',[2,1]);
        for idime=1:ndime
            vcord(jpoint,idime)=dummy(idime);
        end;
    end
    for ielem=1:nvelem
        jelem=fscanff(in,'%d',1);
        dummy=fscanff(in,'%d',[nvnode+
        1,1]);

```

```

for inode=1:nvnode+1
    gx(i)=i*dx;
end
vlnods(ielem,inode)=dummy(inode);
end
end
%-----
for ielem=1:nvelem
    jnode=0;
    for inode=1:nvnode
        knode=vlnods(ielem,inode);
        if(knode ~= 0)
            jnode = jnode + 1;
        end
    end
    nnode2(ielem)=jnode;
end
%-----
% form the grid%-----
for i=1:Nx
    for j=1:Ny
        gy(j)=j*dy;
    end %-----
    % initialize order parameters
    %-----
    for i=1:Nx
        for j=1:Ny
            for igrain=1:ngrain
                if(isolve == 2)
                    ii=(i-1)*Nx+j;
                    etas(ii,igrain)=0.0;
                else
                    etas(i,j,igrain) =0.0;
                end
            end
        end %igrain
    end %j
end %i%--%--

```

```

for i=1:Nx
    p1x =xv1-gx(i);

    for j=1:Ny
        p1y =yv1-gy(j);

        ii=(i-1)*Nx+j;

        p2x =xv2-gx(i);

        for ielem=1:nvelem
            p2y =yv2-gy(j);

igrain=vlnodes(ielem,nvnode+1);
        x1=sqrt(p1x*p1x+p1y*p1y);

        theta =0.0;
        x2=sqrt(p2x*p2x+p2y*p2y);

        mnode = nnode2(ielem);
        if(x1*x2 <= epsilon)

            for inode=1:mnode
                theta=twopi;

            knode=vlnodes(ielem,inode);
            else

                xv1 =vcord(knode,1);
                tx1=((p1x*p2x+p1y*p2y)/(x1*x
                yv1 =vcord(knode,2);
                2));

            end

            jnode=vlnodes(ielem,inode+1);
            if(abs(tx1) >=1.0)

                tx1=0.9999999999;

            jnode
            end
            =vlnodes(ielem,1);

            end
            theta=theta+acos(tx1);

            xv2=vcord(jnode,1);
            end %inode

            yv2=vcord(jnode,2);

```

```

        if(abs(theta-twopi) <=
epsilon)
            if(isolve == 2)
                etas(ii,igrain) =1.0;
            else
                etas(i,j,igrain)=1.0;
            end
        end
    end
end % ielem

end %i

end %j%-----

end %iflag

%--- initialize glist:

for igrain=1:ngrain

    glist(igrain) =1.0;

end

end %endfunction

laplacian:

function [grad]
=laplacian(nx,ny,dx,dy)

        format long;

        nxny=nx*ny;

        r=zeros(1,nx);

        r(1:2)=[2,-1];

        T=toeplitz(r);

        E=speye(nx);

        grad=-(kron(T,E)+kron(E,T));

        %-- for periodic boundaries

        for i=1:nx

            ii=(i-1)*nx+1;

            jj=ii+nx-1;

            grad(ii,jj)=1.0;

            grad(jj,ii)=1.0;

            kk=nxny-nx+i;

            grad(i,kk)=1.0;

            grad(kk,i)=1.0;

        end

        grad = grad /(dx*dy);

    end %endfunction

```

```

voronoi_1:

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

% Generation of polycrystal %

% grain microstructure %

% with Voronoi tessellation %

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

out=fopen('Voronoi_vertices.out','
w');

out1=fopen('plot_1.out','w');

out2=fopen('final_plot.p','w');

out3=fopen('original_points.out','
w');

out4=fopen('cell_1.out','w');

out5=fopen('grain_25.inp','w');

%----

%%% number of initial grains

ngrain = 100;

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

npoin=25;

xmax=32.0;

ymax=32.0;

x0 =0.0;

y0 =0.0;

extra = 2.0;

%-----

% generate random points

% for voronoi tessellation

%-----

rand('state',7)

x =xmax*rand(npoin,1);

y =ymax*rand(npoin,1);

%-----

% Duplicate the points for
symmetry:

%-----

```



```

for ipoin=1:npoin
    jpoin=npoin*4+ipoin;
    x(jpoin)=x(ipoin)+xmax;
    y(jpoin)=y(ipoin)+ymax;
end
%---
for ipoin=1:npoin
    jpoin=npoin*5+ipoin;
    x(jpoin)=x(ipoin);
    y(jpoin)=y(ipoin)+ymax;
end
%---
for ipoin=1:npoin
    jpoin=npoin*2+ipoin;
    x(jpoin)=x(ipoin)+xmax;
    y(jpoin)=y(ipoin)-ymax;
end
%---
for ipoin=1:npoin
    jpoin=npoin*3+ipoin;
    x(jpoin)=x(ipoin)+xmax;
    y(jpoin)=y(ipoin);
end
%---
for ipoin=1:npoin
    jpoin=npoin*6+ipoin;
    x(jpoin)=x(ipoin)-xmax;
    y(jpoin)=y(ipoin)+ymax;
end
%---
for ipoin=1:npoin
    jpoin=npoin*7+ipoin;

```

```

x(jpoin)=x(ipoin)-xmax;

y(jpoin)=y(ipoin);

end

%---

for ipoin=1:npoin

    jpoin=npoin*8+ipoin;

    x(jpoin)=x(ipoin)-xmax;

    y(jpoin)=y(ipoin)-ymax;

end

%%--- Print-out original
random points: %%

for i=1:npoin

    fprintf(out3,'%4.6e
%14.6e\n',x(i),y(i));

end

%%-- Print the simulation
cellcoordinates: %%

fprintf(out4,'%14.6e
%14.6e\n',x0,y0);

fprintf(out4,'%14.6e
%14.6e\n',xmax,y0);

fprintf(out4,'%14.6e
%14.6e\n',xmax,ymax);

fprintf(out4,'%14.6e
%14.6e\n',x0,ymax);

fprintf(out4,'%14.6e
%14.6e\n',x0,y0);

%=====
===

%--- generate voronoi diagram

%=====
===

[c,f] = voronoin([x,y]);

%-----

%- rearrange voronoin output

%- for their connectivity

%-----

nvelem =size(f);

ncount=0;

```

```

for i=1:nvelem
    flag=1;
    vnodes =f{i,:};
    nnode=size(vnodes,2);
    for j=1:nnode
        if(vnodes(j) == 1)
            flag=0;
        end
    end
    if(flag == 1)
        ncount = ncount+1;
        for j=1:nnode
            lnods(ncount,j)=vnodes(j);
        end
    end
end

%-----

% print voronoi results to file

```

```

% to be viewed later in
Voronoi_vertices.out

%-----

for i=1:ncount
    fprintf(out,'# i %d\n',i);
    nnode=size(lnods,2);
    for j=1:nnode
        kk = lnods(i,j);
        if(kk ~= 0)
            fprintf(out,'% 14.6e
% 14.6e\n',c(kk, 1),c(kk,2));
        end
    end
end

kk = lnods(i,1);
fprintf(out,'% 14.6e
% 14.6e\n',c(kk,1),c(kk,2));

fprintf(out,'\n');

end

```

```

end
end %j

if(flag == 1)
    nelem=nelem+1;
    jnode=0;
    for j=1:nnode
        kk=lnods(i,j);
        if(kk ~=0 )
            jnode=jnode+1;
            lnods2(nelem,jnode)
            =lnods(i,j);
        end
    end %j
end %j

nnode2(nelem)=jnode;
end % iflag

end %icount

%=====
===

% Clip far outside voronoi
elements
% from the simulation cell

%=====
===

nelem=0;

for i=1:ncount
    flag=0;
    for j=1:nnode
        kk = lnods(i,j);
        if(kk ~= 0)
            if(c(kk,1) >= -extra &&
c(kk,1)<= xmax+ extra)
                if(c(kk,2) >= -extra
&& c(kk,2)<= ymax+ extra)
                    flag=1;
                end
            end
        end
    end
end

% Assign grain numbers to
% voronoi elements

```

```

%=====
===
twopi =8.0*atan(1.0);
epsilon=1.0e-4;
for isector=1:9
    for ipoin=1:npoin
        jpoин=(isector-
1)*npoin+ipoin;
        for ielem=1:nelem
            theta=0.0;
            nnode=nnode2(ielem);
            for inode=1:nnode
                kk
=lnods2(ielem,inode);
                xv1=c(kk,1);
                yv1=c(kk,2);
                jnode=inode+1;
                if( inode == nnode)
                    jnode=1;
                end
                end
                jj=lnods2(ielem,jnode);
                xv2=c(jj,1);
                yv2=c(jj,2);
                p2x =(xv1-x(jpoин));
                p2y =(yv1-y(jpoин));
                p1x =(xv2-x(jpoин));
                p1y =(yv2-y(jpoин));
                x1=sqrt(p1x*p1x+p1y*p1y);
                x2=sqrt(p2x*p2x+p2y*p2y);
                if(x1*x2 <= epsilon)
                    theta=twopi;
                else
                    tx1=((p1x*p2x+p1y*p2y)/(x1*x
2));
                    if(abs(tx1) >=1.0)
                        tx1=0.9999999999;
                    end
                end
            end
        end
    end
end

```

```

theta=theta+acos(tx1);
                                fprintf(out5,' %5d %14.6e
                                %14.6e\n', i,c(i,1),c(i,2));

                                end

                                end %inode

                                if(abs(theta-twopi) <=
                                epsilon)

                                igrain(ielem)=ipoin;

                                end

                                end % ielem

                                end % ipoin

end

%%-----

%% print out as input file

%%-----

[nn1,nn2]=size(c);

nnode=size(lnods2,2);

                                for i=1:nelem

                                fprintf(out1,'# i %d
                                %d\n',i,nnode2( i));

                                nnode=size(lnods2,2);

                                ncount=0;

                                xcod =0.0;

                                fprintf(out5,'%5d %5d %5d
                                %5d\n',(nn1-1),nnode,nelem,
                                ngrain);

                                for i=2:nn1

```

```

ycod =0.0;
%nnode = nnode2(ielem);

for j=1:nnode

    kk = lnods2(i,j);

    fprintf(out1,'# %5d
%5d\n',j,kk);

    if(kk ~= 0)

        fprintf(out1,'%14.6e
%14.6e\n',c(kk,1),c(kk,2));

        ncount=ncount+1;

        xcod =xcod +c(kk,1);

        ycod =ycod +c(kk,2);

    end

end

kk = lnods2(i,1);

fprintf(out1,'%14.6e
%14.6e\n',c(kk,1),c(kk,2));

fprintf(out1,'\n');

xcod =xcod/ncount;

ycod =ycod/ncount;

fprintf(out2,'set label');

fprintf(out2,'');

fprintf(out2,'%d',igrain(i));

fprintf(out2,' at');

fprintf(out2,'%14.6e ,
%14.6e\n',xcod+1.5,ycod+1.5);

fprintf(out2,'\n');

end

fprintf(out2,'plot "plot_1.out" w
1, "cell_1.out" w
1,"original_points.out"\n');

%=====
===

write_vtk_grid:

```

```

function write_vtk_grid(Nx, Ny,
dx, dy, istep, data1)

    % Запис результатів у VTK
    файл

    fname =
sprintf('grains_time_%d.vtk',
istep);

    out = fopen(fname, 'w');

    npoint = Nx * Ny;

    % Header

    fprintf(out, '# vtk DataFile
Version 2.0\n');

    fprintf(out, 'time_%d.vtk\n',
istep);

    fprintf(out, 'ASCII\n');

    fprintf(out, 'DATASET
STRUCTURED_GRID\n');

    fprintf(out, 'DIMENSIONS
%d %d 1\n', Nx, Ny);

    fprintf(out, 'POINTS %d
float\n', npoint);

    % Координати точок сітки

    for i = 1:Nx

        for j = 1:Ny

            x = (i - 1) * dx;

            y = (j - 1) * dy;

            fprintf(out, '%14.6e
%14.6e 0.0\n', x, y);

        end

    end

    % Запис значень

    fprintf(out, 'POINT_DATA
%d\n', npoint);

    fprintf(out, 'SCALARS CON
float 1\n');

    fprintf(out,
'LOOKUP_TABLE default\n');

    for i = 1:Nx

        for j = 1:Ny

```



```
        fprintf(out, '%14.6e\n',  
data1(i, j));  
        fclose(out);  
    end  
end
```

```

import matplotlib.pyplot as plt

# Введення даних вручну
# Фіксоване A, змінюється B
fixed_A_data = {
    "B_values": [0.5, 1.5, 2.5],
    "steps": [
        [100, 200, 300, 400, 500,
         600, 700, 800, 900, 1000], # кроки
        для B=0.5
        [100, 200, 300, 400, 500,
         600, 700, 800, 900, 1000], # кроки
        для B=1.5
        [100, 200, 300, 400, 500,
         600, 700, 800, 900, 1000] # кроки
        для B=2.5
    ],
    "sizes": [
        [0.97, 0.49, 0.49, 0.37,
         0.53, 0.52, 0.233, 0.182, 0.163,
         0.158], # Розміри зерен для B=0.5
        [0.263, 0.264, 0.264,
         0.316, 0.5, 0.5, 0.5, 0.95, 0.94,
         0.53], # Розміри зерен для
        B=1.5
        [0.263, 0.264, 0.317, 0.95,
         0.95, 0.5, 0.5, 0.5, 0.95,
         0.95] # Розміри зерен для
        B=2.5
    ],
    "numbers": [
        [1, 2, 2, 3, 2, 2, 5, 7,
         10, 10], # Кількість зерен для
        B=0.5
        [5, 5, 5, 4, 2, 2, 2, 1, 1,
         2], # Кількість зерен для B=1.5
        [5, 5, 4, 1, 1, 2, 2, 2, 1,
         1] # Кількість зерен для B=2.5
    ]
}

# Фіксоване B, змінюється A
fixed_B_data = {
    "A_values": [0.5, 1.5, 2.5],
    "steps": [
        [100, 200, 300, 400, 500,
         600, 700, 800, 900, 1000], # кроки
        для A=0.5
        [100, 200, 300, 400, 500,
         600, 700, 800, 900, 1000], # кроки
        для A=1.5
        [100, 200, 300, 400, 500,
         600, 700, 800, 900, 1000], # кроки
        для A=2.5
    ],
    "sizes": [
        [0.207, 0.143, 0.140,
         0.139, 0.139, 0.142, 0.142, 0.142,
         0.142, 0.142], # Розміри зерен
        для A=0.5
        [0.263, 0.264, 0.264,
         0.316, 0.5, 0.5, 0.5, 0.95, 0.94,
         0.53], # Розміри зерен для
        A=1.5
        [0.263, 0.96, 0.97, 0.98,
         0.99, 0.97, 0.96, 0.97, 0.97,
         0.99] # Розміри зерен для A=2.5
    ],
    "numbers": [
        [9, 33, 33, 33, 33, 32, 32, 32, 32,
         32], # Кількість зерен для A=0.5
        [5, 5, 5, 4, 2, 2, 2, 1, 1, 2], #
        Кількість зерен для A=1.5
        [5, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1] #
        Кількість зерен для A=2.5
    ]
}

# Функція для визначення кольору
залежно від параметра
def get_color(value):
    if value == 0.5:
        return 'blue'
    elif value == 1.5:
        return 'green'
    elif value == 2.5:
        return 'red'
    else:
        return 'black' # Якщо
з'являться інші значення

# Функція для побудови графіків
def plot_data(data, fixed_param,
varying_param, title_prefix):
    plt.figure(figsize=(14, 6))

    # Графік розміру зерен

```

```

plt.subplot(1, 2, 1)
for i, param_value in
enumerate(data[varying_param]):
    color =
get_color(param_value) #
Визначення кольору
    plt.plot(data["steps"][i],
data["sizes"][i],
label=f"{varying_param}={param_valu
e}", color=color)
    plt.xlabel("Крок (Step)")
    plt.ylabel("Розмір зерен
(Size)")
    plt.title(f"{title_prefix}:
Розмір зерен")
    plt.legend()
    plt.grid(True)

# Графік кількості зерен
plt.subplot(1, 2, 2)
for i, param_value in
enumerate(data[varying_param]):
    color =
get_color(param_value) #
Визначення кольору
    plt.plot(data["steps"][i],
data["numbers"][i],
label=f"{varying_param}={param_valu
e}", color=color)
    plt.xlabel("Крок (Step)")
    plt.ylabel("Кількість зерен
(Number)")
    plt.title(f"{title_prefix}:
Кількість зерен")
    plt.legend()
    plt.grid(True)

plt.tight_layout()
plt.show()

# Побудова графіків
plot_data(fixed_A_data,
fixed_param="A",
varying_param="B_values",
title_prefix="Фіксоване A")
plot_data(fixed_B_data,
fixed_param="B",
varying_param="A_values",
title_prefix="Фіксоване B")

import matplotlib.pyplot as plt

import numpy as np
from scipy.interpolate import
make_interp_spline

# Функція для побудови графіків із
згладженням і маркерами
def
plot_smoothed_data_with_markers(dat
a, fixed_param, varying_param,
title_prefix):
    plt.figure(figsize=(14, 6))

    # Графік розміру зерен
    plt.subplot(1, 2, 1)
    for i, param_value in
enumerate(data[varying_param]):
        steps =
np.array(data["steps"][i])
        sizes =
np.array(data["sizes"][i])

        # Згладження кривої розміру
зерен
        spline_steps =
np.linspace(steps.min(),
steps.max(), 300) # Щільна сітка
для плавності
        spline_sizes =
make_interp_spline(steps,
sizes)(spline_steps)

        # Кольори для різних
значень параметра
        color = 'blue' if
param_value == 0.5 else 'green' if
param_value == 1.5 else 'red'

        # Побудова згладженої лінії
plt.plot(spline_steps,
spline_sizes,
label=f"{varying_param}={param_valu
e}", color=color)

        # Додавання точок
plt.scatter(steps, sizes,
color=color, edgcolor='black',
zorder=5)

    plt.xlabel("Крок (Step)")
    plt.ylabel("Розмір зерен
(Size)")

```

```

plt.title(f"{title_prefix}:
Розмір зерен")
plt.legend()
plt.grid(True)

# Графік кількості зерен
plt.subplot(1, 2, 2)
for i, param_value in
enumerate(data[varying_param]):
    steps =
np.array(data["steps"][i])
    numbers =
np.array(data["numbers"][i])

    # Згладження кривої
кількості зерен
    spline_steps =
np.linspace(steps.min(),
steps.max(), 300)
    spline_numbers =
make_interp_spline(steps,
numbers)(spline_steps)

    # Кольори для різних
значень параметра
    color = 'blue' if
param_value == 0.5 else 'green' if
param_value == 1.5 else 'red'

    # Побудова згладженої лінії

plt.plot(spline_steps,
spline_numbers,
label=f"{varying_param}={param_valu
e}", color=color)
    # Додавання точок
    plt.scatter(steps, numbers,
color=color, edgecolor='black',
zorder=5)

    plt.xlabel("Крок (Step)")
    plt.ylabel("Кількість зерен
(Number)")
    plt.title(f"{title_prefix}:
Кількість зерен")
    plt.legend()
    plt.grid(True)

plt.tight_layout()
plt.show()

# Побудова графіків зі згладженням
і маркерами
plot_smoothed_data_with_markers(fix
ed_A_data, fixed_param="A",
varying_param="B_values",
title_prefix="Фіксоване A")
plot_smoothed_data_with_markers(fix
ed_B_data, fixed_param="B",
varying_param="A_values",
title_prefix="Фіксоване B")

```

