

Růst omega fáze v metastabilních slitinách: numerické simulace pomocí metody fázového pole

Adam Dvořák

Obhajoba bakalářské práce

11. září 2024

Téma práce:

- Srovnání modelů popisující fázové transformace
- Semi-analytické odvození kvalitativních vlastností modelů
- Numerické ověření kvalitativních vlastností
- Numerické simulace pro více fází

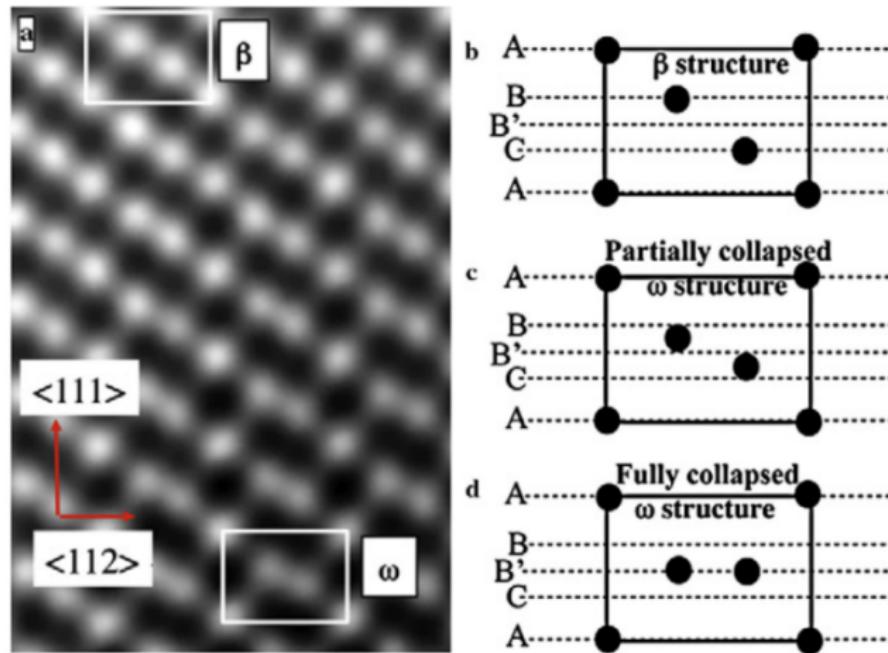
Fáze β a ω

- Zkoumáme fázové transformace fáze $\beta \rightarrow \omega$ v metastabilních slitinách (Titan, Zr–Nb slitinách)
- Využití například v leteckém průmyslu a medicíně
- Fáze ω vzniké kalením při teplotě 500°C
- Formuje se v podobě částic velkých několik nanometrů, které se nedotýkají
- Fáze ω je prekurzor pro fázi α která zpevňuje materiál
- Fáze ω má hexagonální strukturu ¹

¹V práci je uvedena chybně i trigonální symetrie, upřesnění symetrie na konci prezentace.

Přechod fáze β na ω

Fázový přechod je postupný, proto je vhodné použít metodu fázového pole



Animace přechodu β na ω

Metoda fázového pole

- Metoda fázového pole slouží k popisu fázových transformací
- Fázové proměnné $\eta_i : \Omega \rightarrow [0, 1]$
- Fázová proměnná η_i reprezentuje objemový zlomek fáze ω_i
- Cílem je získat vývoj fázových proměnných v čase

Energie tělesa

Celková energie tělesa

$$\Psi = \int_{\Omega} (\psi_{phas} + \psi_{el} + \psi_{bar} + \psi_{grad}) dV$$

Energie rozhraní

$$\psi_{int} = \psi_{bar} + \psi_{grad}$$

Chemická (algebraická) část energie

$$\psi_{chem} = \psi_{phas} + \psi_{bar}$$

- γ – Energie rozhraní mezi fázemi
- ℓ a δ – Parametry šířky rozhraní
- ϕ – Rozdíl fázové energie mezi β a ω
- E – Youngův modulus ν – Poissonův poměr
- $\epsilon_1 = 0.00162$ a $\epsilon_2 = 0.00543$ – Elastické parametry

Model Double obstacle

Energie rozhraní pro dvě fáze

$$\psi_{int} = \gamma \left(\frac{4\ell}{\pi} |\nabla \eta|^2 + \frac{4}{\pi \ell} \eta (1 - \eta) \right)$$

Fázová energie pro dvě fáze

$$\psi_{phas} = \phi \eta$$

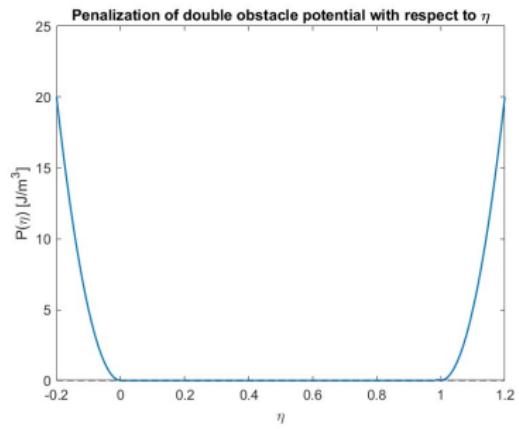
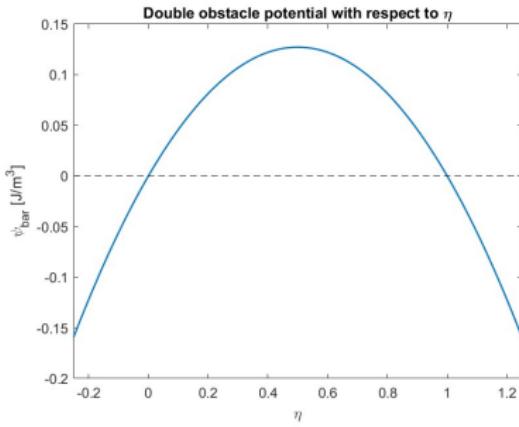
Energie rozhraní pro více fází

$$\psi_{int} = \sum_{i=0}^N \sum_{j>i}^N \frac{4\gamma_{ij}}{\pi \ell_{ij}} (\eta_i \eta_j - \ell_{ij}^2 \nabla \eta_i \cdot \nabla \eta_j), \quad \text{kde} \quad \eta_0 = 1 - \sum_{i=1}^N \eta_i$$

Fázová energie pro více fází

$$\psi_{phas} = \sum_{i=1}^N \phi_i \eta_i$$

Double obstacle a penalizace



Landau model

Chemická energie

$$\psi_{chem} = \frac{A}{2}\eta^2 - \frac{B}{3}\eta^3 + \frac{C}{4}\eta^4$$

Kde $A = 24\gamma/\delta$, $B = 3A - 12\phi$ a $C = 2A - 12\phi$. Lze rozložit na

$$\psi_{bar} = \frac{A}{2}(\eta^2 - 2\eta^3 + \eta^4) \quad a \quad \psi_{phas} = (4\eta^3 - 3\eta^4)\phi$$

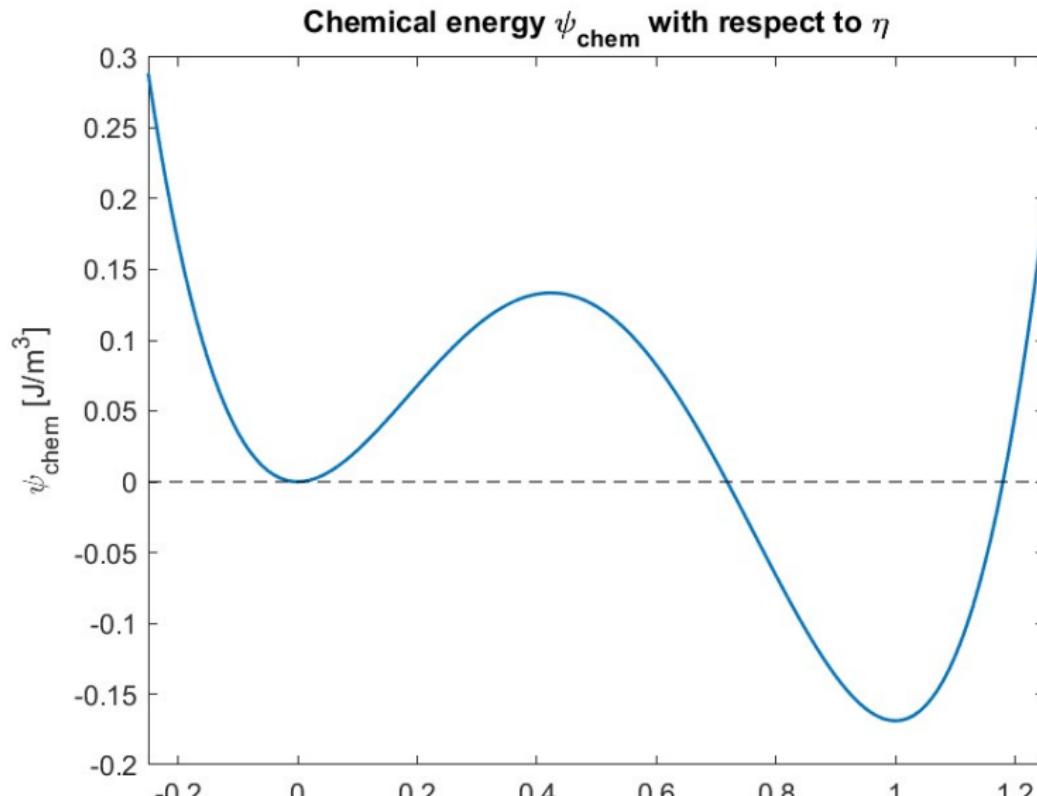
Chemická energie pro více fází

$$\psi_{chem} = \frac{A}{2} \left(\sum_{i=1}^N \eta_i^2 \right) - \frac{B}{3} \left(\sum_{i=1}^N \eta_i^3 \right) + \frac{C}{4} \left(\sum_{i=1}^N \eta_i^2 \right)^2$$

Gradientová energie pro více fází

$$\psi_{grad} = \frac{\beta}{2} \sum_{p=1}^N |\nabla \eta_p|^2, \quad \beta = \frac{3\gamma\delta}{2}$$

Chemická energie, Landau



Elastická energie

Transformační část tenzoru malých deformací pro jednotlivé varianty ω

$$\mathbf{U}_1^t = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \epsilon_2 & \epsilon_2 \\ \epsilon_2 & \epsilon_1 & \epsilon_2 \\ \epsilon_2 & \epsilon_2 & \epsilon_1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{U}_2^t = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & -\epsilon_2 & -\epsilon_2 \\ -\epsilon_2 & \epsilon_1 & \epsilon_2 \\ -\epsilon_2 & \epsilon_2 & \epsilon_1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{U}_3^t = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & -\epsilon_2 & \epsilon_2 \\ -\epsilon_2 & \epsilon_1 & -\epsilon_2 \\ \epsilon_2 & -\epsilon_2 & \epsilon_1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{U}_4^t = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \epsilon_2 & -\epsilon_2 \\ \epsilon_2 & \epsilon_1 & -\epsilon_2 \\ -\epsilon_2 & -\epsilon_2 & \epsilon_1 \end{pmatrix}.$$

Elastický tenzor

$$\epsilon^{el}(\eta_i, \nabla \mathbf{u}) = \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) - \mathbf{U}^t(\eta_i) \quad \text{kde} \quad \mathbf{U}^t(\eta_i) = \sum_{i=1}^N \eta_i \mathbf{U}_i^t$$

Elastická energie popsána modelem linearizované elasticity ve 3D

$$\psi_{el} = \frac{E}{2(1+\nu)} \left[|\epsilon^{el}|^2 + \frac{\nu}{1-2\nu} \text{tr}^2(\epsilon^{el}) \right]$$

Řídící rovnice – Ginzburg-Landau

Vývoj fázových proměnných je dán Ginzburg-Landau rovnicí

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = -L \frac{\delta \Psi}{\delta \eta_i(\mathbf{r}, t)} \quad \text{na } \Omega$$

Ekvilibrium podmínka

$$\nabla \cdot \frac{\partial \psi_{el}}{\partial \nabla \mathbf{u}} = 0 \quad \text{na } \Omega$$

Což je ekvivalentní s

$$\frac{\delta \Pi}{\delta \dot{\eta}_i} = 0, \quad \frac{\delta \Pi}{\delta \dot{\mathbf{u}}} = \mathbf{0} \quad \text{kde} \quad \Pi = \Psi + \int_{\Omega} \frac{1}{2L} \sum_{i=1}^N \dot{\eta}_i^2 dV.$$

Numerická implementace

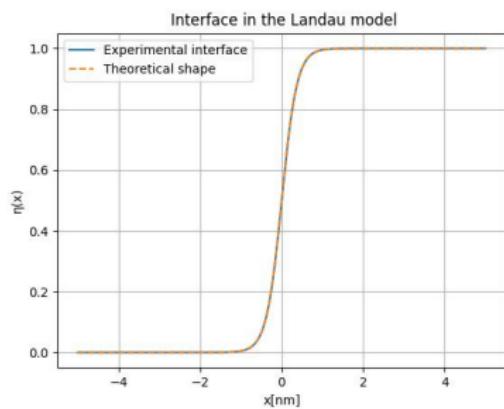
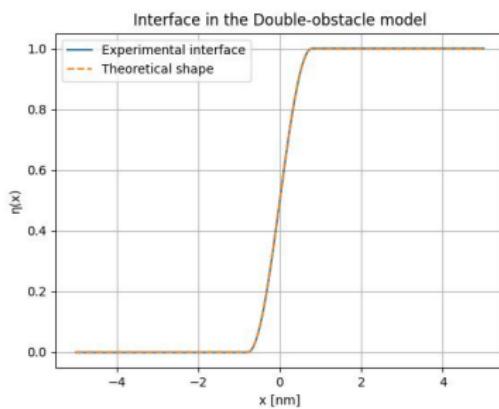
- Rovnice byla řešena na úsečce, čtverci nebo krychli metodou konečných elementů
- Rovnoměrná diskretizace
- Aproximace neznámých funkcí pomocí bilinear Q_1 elements

$$a_0 + a_1x + a_2y + a_3xy$$

- Nelineární problém byl řešen Newtonovou metodou pomocí SNES solver z knihovny PETSc
- Výsledný lineární systém byl řešen přímým řešičem MUMPS

Tvary rozhraní ve srovnání s numerickým experimentem

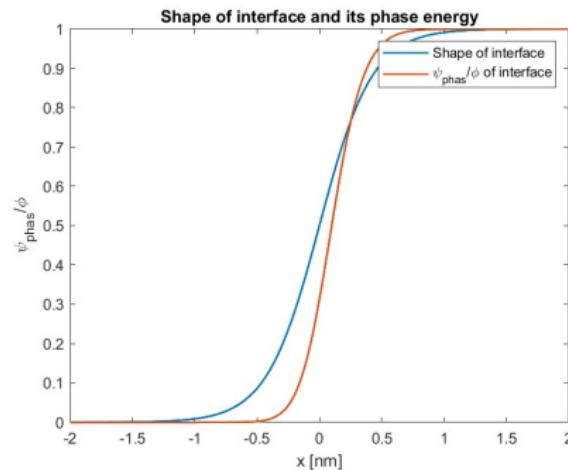
Tvar rozhranní je dán ve stacionární 1D situaci Euler-Lagrangeovu rovnící



Posunutí fázové energie u modelu Landau

Korekce x^* způsobená nelineární fázovou energií

$$\psi_{phas} = (4\eta^3 - 3\eta^4)\phi$$



Fázová energie je posunuta směrem k ω fázi o $x^* = 0.102$ nm

Kritický poloměr

Počáteční podmínka

$$\eta(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & |\mathbf{r}| < r, \\ 0 & |\mathbf{r}| \geq r. \end{cases}$$

Celková energie, zanedbáme ψ_{el}

$$\Psi = \int_{\Omega} (\psi_{int} + \psi_{phas}) \, dV = 2\pi r\gamma + \pi r^2\phi$$

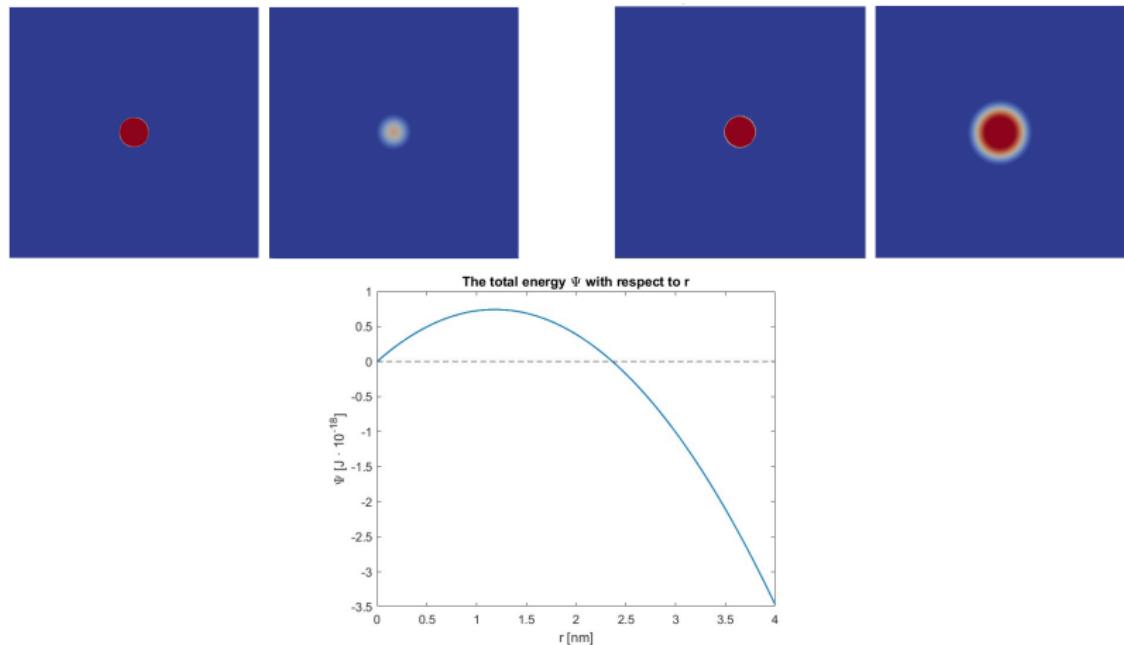
Kritický poloměr

$$r = -\frac{\gamma}{\phi}$$

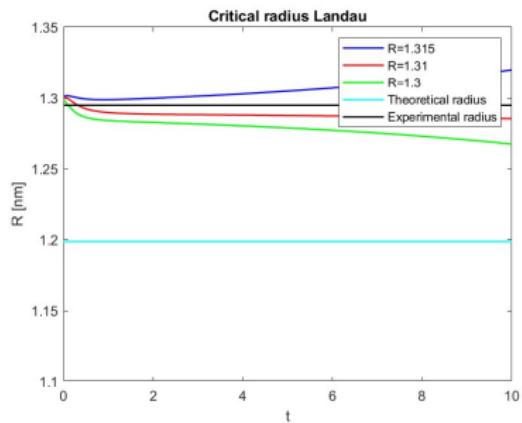
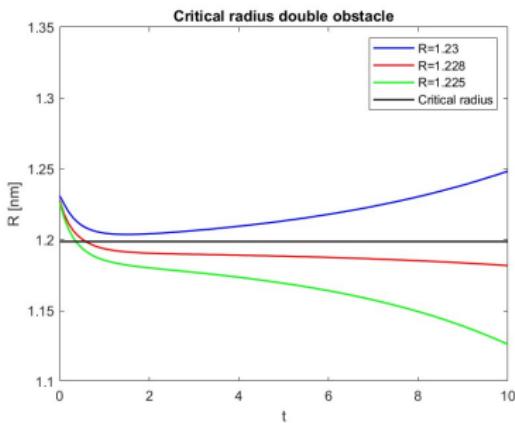
S korekcí způsobenou posunutím fázové energie v modelu Landau

$$r_L = -\frac{\gamma}{\phi} + x^*$$

Energie v závislosti na r



Kritický poloměr určený numericky



Rychlosť šíření rozhraní kruhové fáze

Přidáním disipace lze odvodit rychlosť šíření kruhového rozhraní

$$\Pi = \Psi_{int} + \Psi_{phas} + D = 2\pi r\gamma + \pi r^2\phi + 2\pi r\mathcal{D} \quad \text{kde} \quad \mathcal{D} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\dot{\eta}^2}{2L} d\xi$$

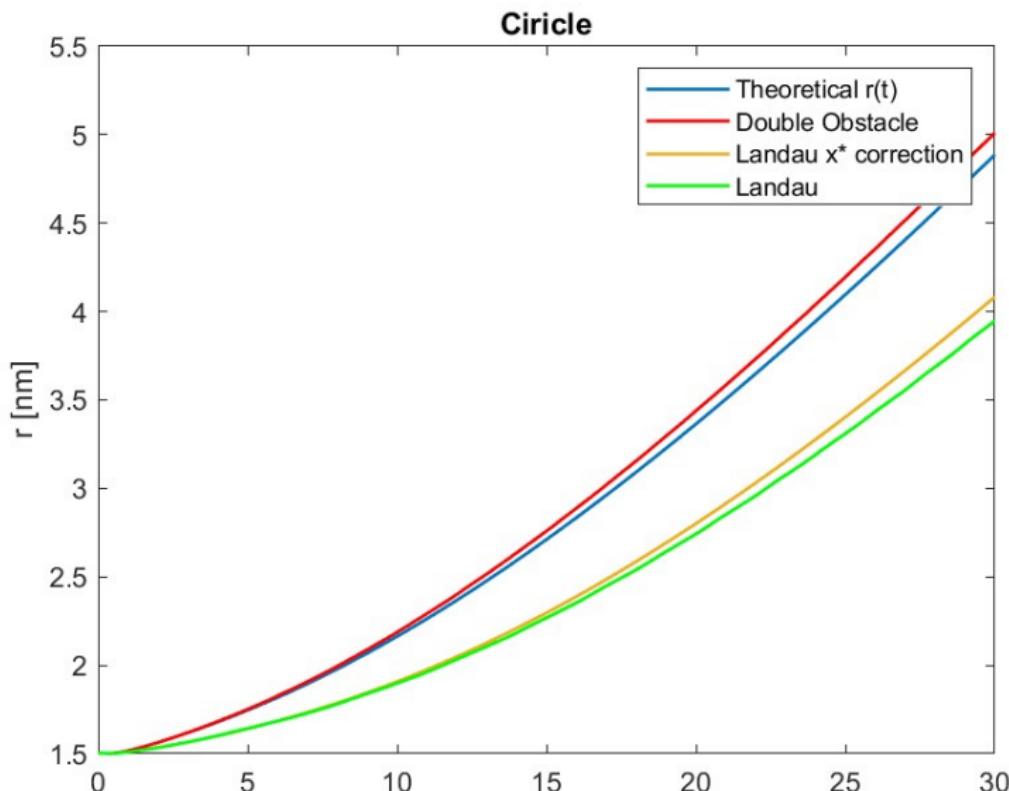
To vede na rovnice

$$\dot{r}_D = -\frac{8L\ell}{\pi r}(r\phi + \gamma) \quad \text{a} \quad \dot{r}_L = -\frac{3L\delta}{2r}((r - x^*)\phi + \gamma)$$

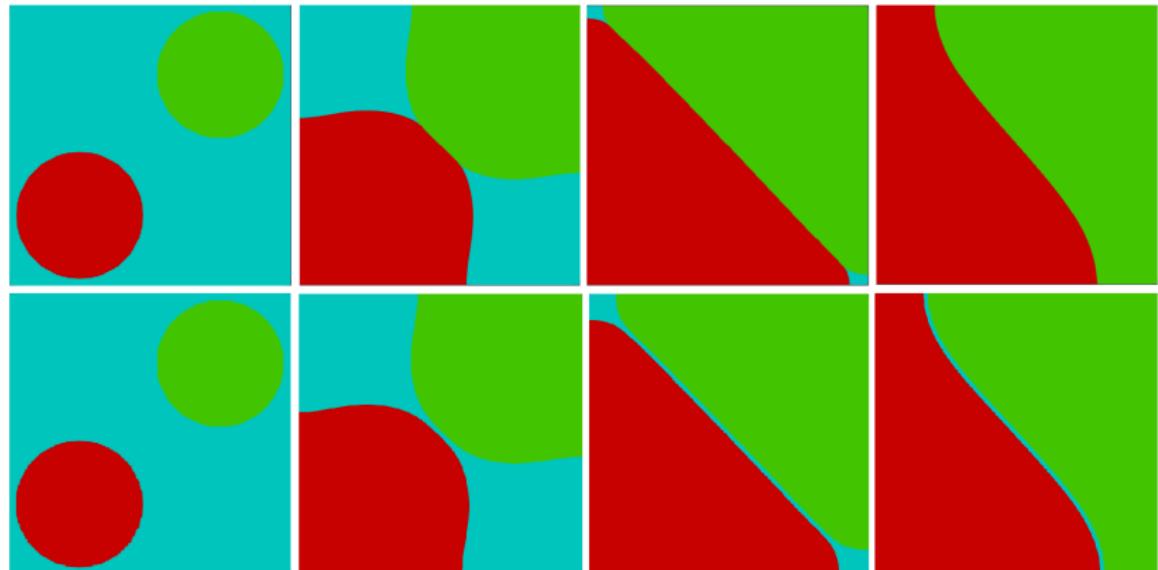
Rovinné rozhraní se šíří stejnou rychlosťí jestliže platí vztah mezi δ a ℓ

$$\delta = \frac{16\ell}{3\pi}$$

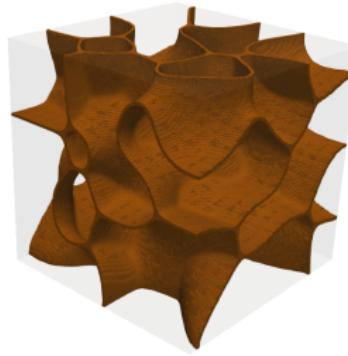
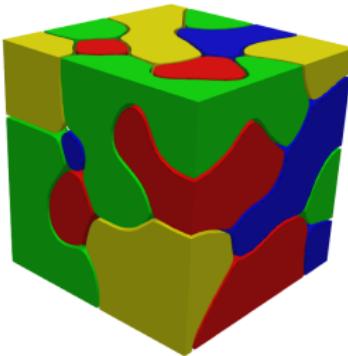
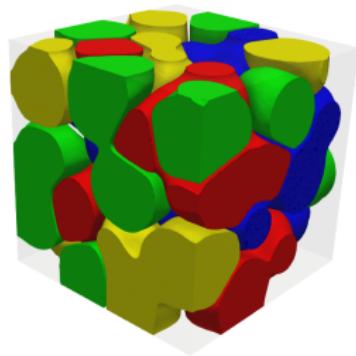
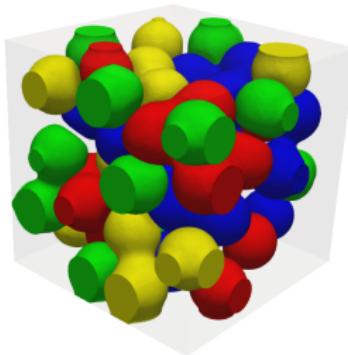
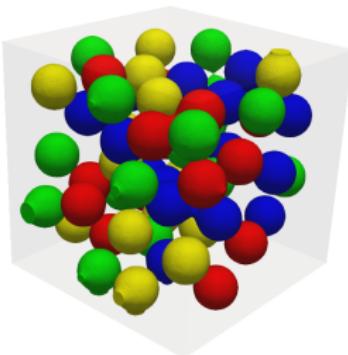
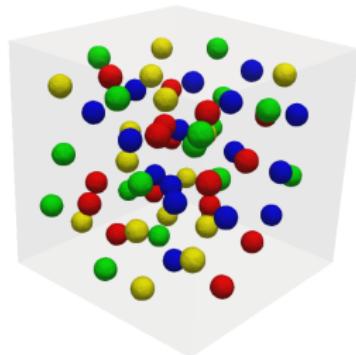
Závislost poloměru r na čase



Evoluce dvou fází



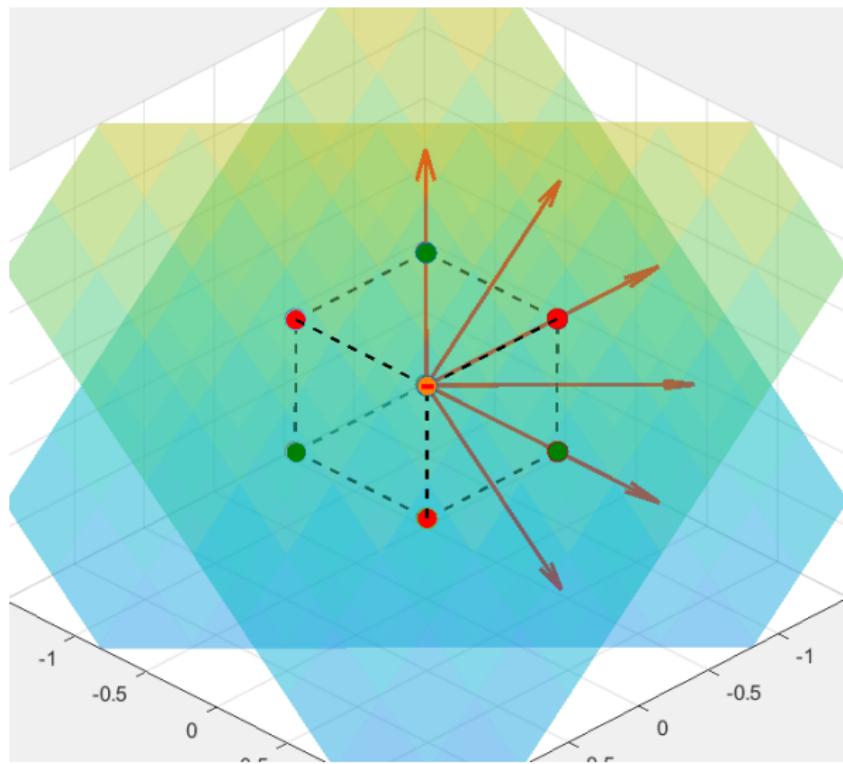
Double obstacle



Video

Přehrání videa

Symetrie



Animace přechodu β na ω

Změny pro 2D

Výsledek rovnice 2.15 je výsledek platný pro částici ve 2D, nebo pro válcovou částici ve 3D, výsledek pro kulatou částici ve 3D je pak

$$r = -\frac{2\gamma}{\phi}.$$

Rovnice 2.16 byla numericky napočítána pro křivkovou hustotu energie, výsledek je uveden pro válcovou částici, aby byli materiálové parametry platné pro 3D, proto nesedí rozměry. Transformační tenzory malých deformací pro varianty ω ve 2D, zde jsou pouze dvě varianty

$$\mathbf{U}_1^t = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \epsilon_2 \\ \epsilon_2 & \epsilon_1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U}_2^t = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & -\epsilon_2 \\ -\epsilon_2 & \epsilon_1 \end{pmatrix},$$

Laméovy koeficienty byli změněny pro 2D

$$\psi_{el} = \frac{E}{2(1+\nu)} \left[|\epsilon^{el}|^2 + \frac{2\nu}{1-\nu} \text{tr}^2(\epsilon^{el}) \right]$$