# CH与AH方程

## 变量

守恒场变量：表示裂变气体和空位的浓度分布（如气泡中的气体浓度）。

非守恒的序参量（Order parameter）：用于区分气泡相和基质相，表示相的类型或结构状态。

## Cahn-Hilliard方程（CH方程）

主要用于描述守恒场变量的演化，即物质（如裂变气体、空位）在空间的扩散和演化。

物理背景：裂变气体和空位在UO2晶体中的扩散过程必须满足质量守恒（总气体量守恒），因此用CH方程模拟气体组分的分布变化。

数学特点：是一个四阶非线性偏微分方程，体现了扩散及相分离的过程。

联系背景：文中提到用守恒场变量表示裂变气体和空位分布，模拟扩散行为和裂变气体的迁移。

## Allen-Cahn方程（AH方程）

适合描述非守恒场变量的动力学演化，即相界面位置与相的形态变化。

物理意义：用于模拟气泡相（气泡区域）和基质相（固体UO2基体）界面上的界面运动，包括气泡的形核、长大、融合过程。

数学特点：二阶非线性偏微分方程，驱动系统向自由能极小化演化，主要体现界面驱动力和界面演变。

联系背景：利用序参量来区分两相，通过该方程模拟气泡的形核和成长。

## 区别与联系

| **面** | **Cahn-Hilliard方程（CH）** | **Allen-Cahn方程（AH）** |
| --- | --- | --- |
| 用途 | 描述守恒量（气体浓度、空位）扩散与演变 | 描述非守恒量（相结构、序参量）演变 |
| 数学形式 | 四阶偏微分方程，带有质量守恒条件 | 二阶偏微分方程，无质量守恒限制 |
| 物理过程 | 物质扩散、相分离与混合 | 界面运动、相变动力学、形核与长大 |
| 变量类型 | 守恒变量（如浓度） | 非守恒变量（序参量，标识不同相） |

耦合使用：裂变气体和空位的浓度分布影响气泡的形核与增长，气泡界面的位置又反过来影响气体的扩散，因此需要耦合CH方程和AH方程联合求解。

相场模型整体框架：CH方程负责描述物质守恒扩散；AH方程负责描述相界面运动和演化任务，两者相辅相成，使得模型既能体现浓度变化，也能反映形态结构变化。

# 理论联系实际

## 位错密度演化模型 (Model of dislocation density evolution)

### 背景与目的：

铀钼合金（U-Mo）在辐照过程中，连续产生缺陷，如位错环和位错网络，使位错密度逐渐积累。

位错会储存弹性能量，当温度足够高时，通过点缺陷的扩散导致位错热退火，减少位错密度。

本节建模位错密度*ρd*​(*t*)的时间演变，考虑积累与热退火两个过程。

### 方程解释：

*dρd*​(*t*)​/*dt*=[*λ*⋅*f*˙​−*g*(*T*)]⋅*ρd*​(*t*) (1)

* *dρd*​(*t*)​/*dt*：平均位错密度
* *f*˙​：裂变速率，代表燃料发生裂变反应的速率，位错生成受裂变驱动
* *λ*：位错积累速率常数，表示单位裂变带来的位错积累效率
* *g*(*T*)：温度函数，表示位错的热退火速率，随温度变高退火加快
* 该方程表达位错密度的增长源于裂变产生位错，损耗源于热退火的竞争

在低温（如文中200°C）条件下，*g*(*T*)可忽略，热退火几乎不发生。此时方程简化为：

*dρd*​(*t*)​/*dt* =*λf*˙​*ρd*​(*t*)

解得：

*ρd*​(*t*)=*ρd*​(0)⋅exp[*λf*˙​*t*],(2)

物理意义： 位错密度随裂变时间呈指数增长，说明裂变越多，位错累积越快，材料弹性能量也越高。

## 裂变气体气泡及多晶结构的相场自由能描述

### 背景说明：

* 辐照过程中，裂变产生的稀有气体原子（如Xe）在燃料中扩散并在晶界上形成气泡。
* 位错密度的提高增加了弹性能，当弹性能达到一定阈值会触发重结晶。
* 重结晶形成的晶粒结构及气泡分布用相场参数描述，提高模拟燃料裂变气体释放行为的精度。

### 相场变量定义：

* 晶粒参数：*ηi*​(*r*,*t*)，(i = 1, 2, . . ., p)表示不同晶粒方向（守恒或非守恒需结合具体模型推断，一般为非守恒的序参量）。
* 气泡相参数：*ηj*​(*r*,*t*)，(j = p + 1, p + 2, . . ., q)区分气泡与基体。
* Xe气体浓度（守恒场变量）：*cg*​。

## 总自由能模型（考虑成分、界面与弹性能）

每项含义：

* ：体相自由能，反映不同相及组分的热力学稳定性。
* ：相场参数的梯度能，描述晶粒和气泡界面能。
* ：气体浓度梯度能，体现扩散与非均匀分布的能量成本。
* ：由于位错储存弹性能，影响总自由能。

联系：

体自由能和梯度能项是Allen-Cahn方程（非守恒序参量，描述气泡及晶界相界面）所依赖的自由能基础。

浓度梯度能聚焦于保守量，配合Cahn-Hilliard方程模拟裂变气体扩散。

储存能​体现了位错密度对晶粒及相界面的影响，反映材料性能的变化。

### 体相自由能结构

* 第一项：形成稳定相，通过的双井势能函数，规定每个相的稳定性。
* 第二项：晶粒间相互作用，避免晶粒重叠。
* 第三项：晶粒与气泡之间的相互作用。
* 常数1/4为了使同相体系自由能归零。
* 最后两项和描述气体在晶体基质和气泡相的能量贡献。*反映晶粒相的体积分数。反映气泡相的体积分数*

### 储存弹性能

G

* *G*：剪切模量，表示材料刚性
* *bv*​：Burgers矢量，位错特征长度
* *ρi*​：第*i*晶粒的位错密度。
* 此式体现位错密度对晶粒能量贡献，影响重结晶行为。

在大晶粒情况下，*ρi*​可近似一致，简化计算。

## 碰撞方程及裂变气体扩散-气泡形成的耦合

### 方程组：

Allen-Cahn方程用于不同相参数演化：

Cahn-Hilliard方程应用于气体浓度演化（守恒场量）：

* ​：相参数的动力学系数，决定相界面运动速度（AH方程中的滑动系数）。
* *M*(*η*)：气体原子迁移率，体现不同区域（基体或晶界）气体扩散速率，通常晶界扩散速率更高。气体迁移率函数采用加权形式：M(η)=Mb​h(η)+Mg​[1−h(η)], Mb​与Mg​分别为基体和晶界迁移率，h(η)为具有平滑过渡的插值函数，确保迁移率随相场连续变化。
* ：裂变气体原子产生速率,，体现连续产生新的气体原子，增加浓度场。Ran具有统计分布, 为U - Mo晶格位的体积, 为裂变率。
* ：裂变气体陷获速率, ，气泡内气体消耗过程（如气体吸附到气泡中）。其中为分辨率，用于限制仅发生在气泡内部的气体分辨率；仅为气泡相参数，因此下标i从p + 1运行到q。

方程耦合：

* 气体浓度*cg*​扩散形成气泡前驱条件，守恒场变量由CH方程管理。
* 气泡相（气-固界面）运动由AH方程控制，相参数*ηi*​描述气泡的形核、生长等非守恒过程。

## 气泡的形核模型

### 形核过程背景：

* 气泡优先在晶界（气体浓度高，扩散快）形核，因此模型将晶界离散化为小区域，每个区域具有一定形核概率。
* 一旦气泡形核，该点形核概率归零，防止重复形核。

### 形核速率方程 （改写自经典成核理论）

* *J*(*t*)：单元体积单位时间形核率。
* *Z*：Zeldovich系数，形核概率修正因子。
* *β*：原子撞击率。
* *N*0​：晶格体积单位下的晶格点数目。
* ：形核能垒，决定形核难易。
* *τ*：形核潜伏时间。
* *kB*​：玻尔兹曼常数。
* *T*：温度。

进一步简化为：

* Δ*c*：局部过饱和度，驱动力来源。
* ,
* (相变驱动力与局部过饱和度成正比)

概率计算式：

* Δ*t*为时间步长，*P*(*t*)是该时间内形核概率。

### 与相场模型的结合

* 形核过程仅添加在非守恒的相参数更新 （即Allen-Cahn方程所刻画的序参量）中。
* 引入新气泡相（核）时对应的浓度场有耗散，即在核附近浓度降低，保证浓度守恒。
* 该过程结合上述序参量的演化使得气泡形核、长大、融合得以真实刻画。

## 常数选取

参数 符号 值

Temperature 473 K

Lattice constant of U-Mo

Atomic volume

Surface energy

Grain boundary energy

Kinetic coefficient

Gas atom mobility

Gas atom mobility on grain boundary

Free energy coefficient

Free energy coefficient

Free energy coefficient

Constant

Shear modulus

Burgers vector

Gradient coefficient

Gradient coefficient

Fission rate

Constant

Xe equilibrium concentration in matrix

Xe equilibrium concentration in bubble

Resolution rate

Parameter for nucleation

Parameter for nucleation

Nucleation time interval

Effective initial Xe concentration