

Комп'ютерне моделювання задач прикладної математики

Фазове розшарування бінарних систем

Лекція 14

Постановка задачі

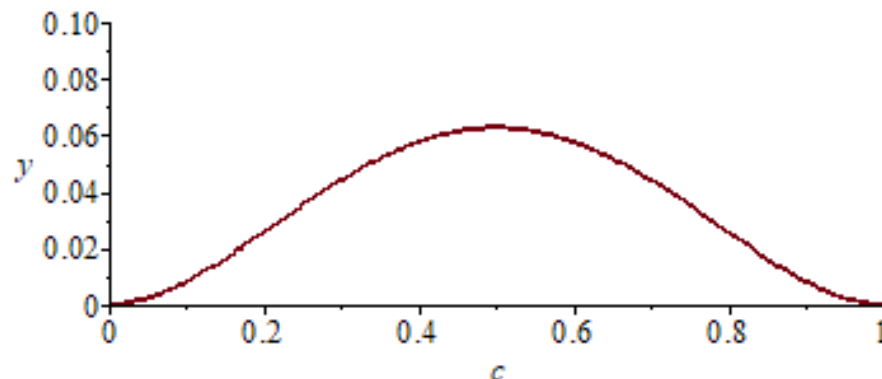
- Нехай існує два типи речовин A та B
- Резервуар розміром $L \times L$ заповнюють речовинами A та B з концентраціями c_A та c_B однорідно.
- Необхідно провести числове моделювання динаміки фазового розшарування однорідного розчину A-B на фази, збагачені на речовину A та речовину B.

Постановка задачі

Математична формалізація

- Закон збереження маси: $c_A + c_B = 1$ дозволяє моделювати динаміку локальної зміни концентрації лише однієї речовини, $c = c_A$, $c_B = 1 - c_A$
- Енергія $f(c)$ взаємодії c_A та c_B така, що за умови $c = c_A = c_{\min}$, або $c = c_A = c_{\max}$: $f(c) = 0$;
 $c = 0.5$ ($c_A = c_B = 0.5$): $f(c)$ максимальне.

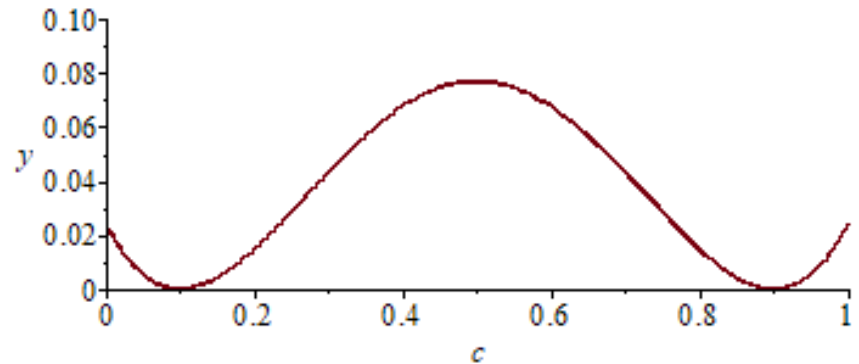
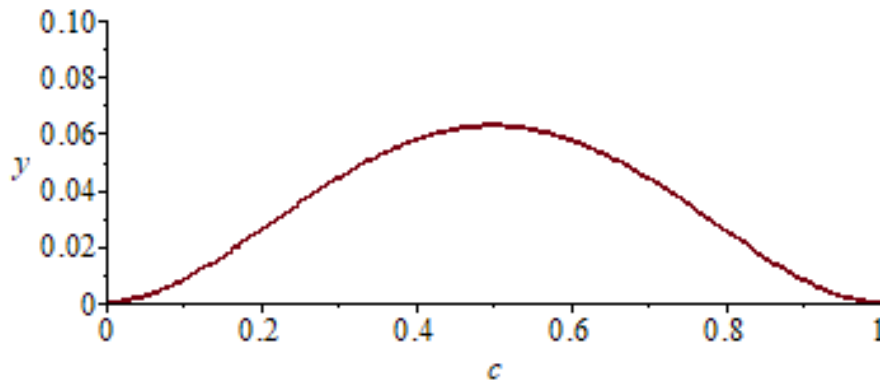
$$f(c) = c^2(1 - c)^2$$



Постановка задачі

Математична формалізація

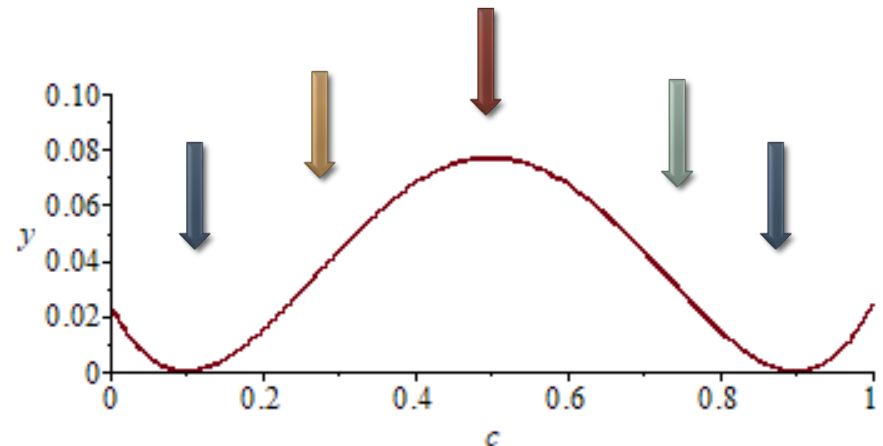
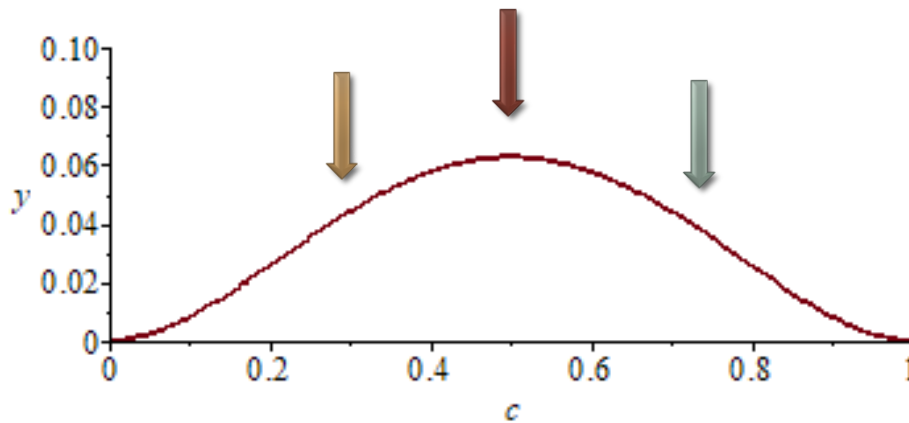
- Закон збереження маси: $c_A + c_B = 1$ дозволяє моделювати динаміку локальної зміни концентрації лише однієї речовини, $c = c_A$, $c_B = 1 - c_A$
- Енергія $f(c)$ взаємодії c_A та c_B така, що за умови $c = c_A = c_{\min}$, або $c = c_A = c_{\max}$: $f(c) = 0$;
 $c = 0.5$ ($c_A = c_B = 0.5$): $f(c)$ максимальне.



Постановка задачі

Математична формалізація

- Початковий розподіл концентрацій:



Постановка задачі

Математична формалізація

- Динамічне рівняння еволюції концентрації речовини c

$$\frac{\partial c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = M \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta c(\mathbf{r}, t)}$$

- Функціонал вільної енергії

$$F = \int_V \left[f(c) + \frac{1}{2} \kappa (\nabla c)^2 \right] dV,$$

- Просторово-часова еволюція речовини

$$\frac{\partial c}{\partial t} = M \nabla^2 \left[\frac{df}{dc} - \kappa \nabla^2 c \right]$$

M – мобільність (визначається коефіцієнтами дифузії); κ – градієнт енергії

Аналіз стійкості однорідних станів до неоднорідних збурень

- **Задача:** встановити умови (значення керуючих параметрів та концентрації речовини, коли можливим буде фазове розшарування)

Просторово-часова еволюція речовини

$$\frac{\partial c}{\partial t} = M \nabla^2 \left[\frac{df}{dc} - \kappa \nabla^2 c \right]$$

Розв'язок $\delta c = c(r, t) - c_0$ шукаємо у вигляді:

$$\delta c(r, t) \propto \exp(\lambda t + i r k)$$

Похідна за часом: $\frac{\partial \delta c}{\partial t} = \lambda \delta c$

Похідна за координатою: $\nabla \delta c = i k \delta c$; $\Delta \delta c \equiv \nabla^2 \delta c = -k^2 \delta c$

Аналіз стійкості однорідних станів до неоднорідних збурень

Просторово-часова еволюція речовини

$$\frac{\partial \delta c}{\partial t} = M \nabla^2 \left[\frac{df(c; \varepsilon)}{dc} - \kappa \nabla^2 \delta c \right]$$

Розв'язок $\delta c(r, t)$ шукаємо у вигляді:

$$\delta c(r, t) \propto \exp(\lambda t + i r k)$$

Похідна за часом: $\frac{\partial \delta c}{\partial t} = \lambda \delta c$

Похідна за координатою: $\nabla \delta c = i k \delta c$; $\Delta c \equiv \nabla^2 \delta c = -k^2 \delta c$

$$\frac{\partial \delta c}{\partial t} = M \nabla^2 \left[\frac{df(c; \varepsilon)}{dc} \right] - M \kappa \nabla^4 \delta c$$

Показник стійкості

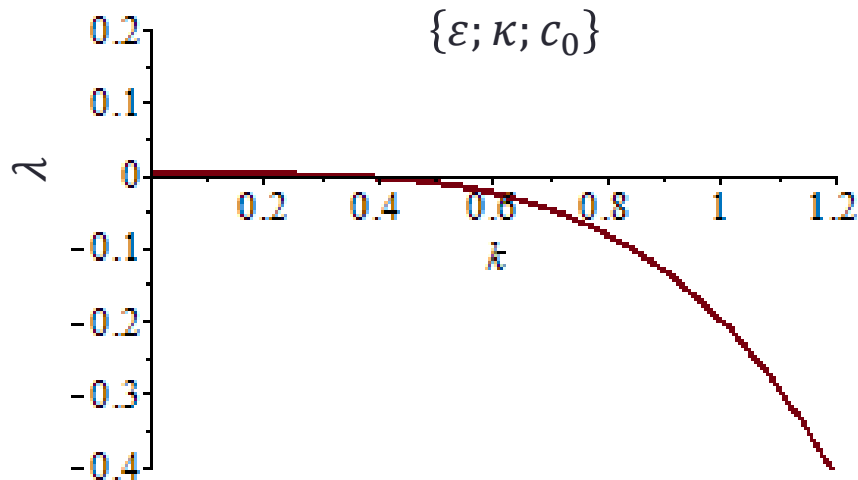
$$\lambda \delta c = -M k^2 \left[\frac{df(c; \varepsilon)}{dc} \right]_{c=c_0} \delta c - M \kappa k^4 \delta c$$

Аналіз стійкості однорідних станів до неоднорідних збурень

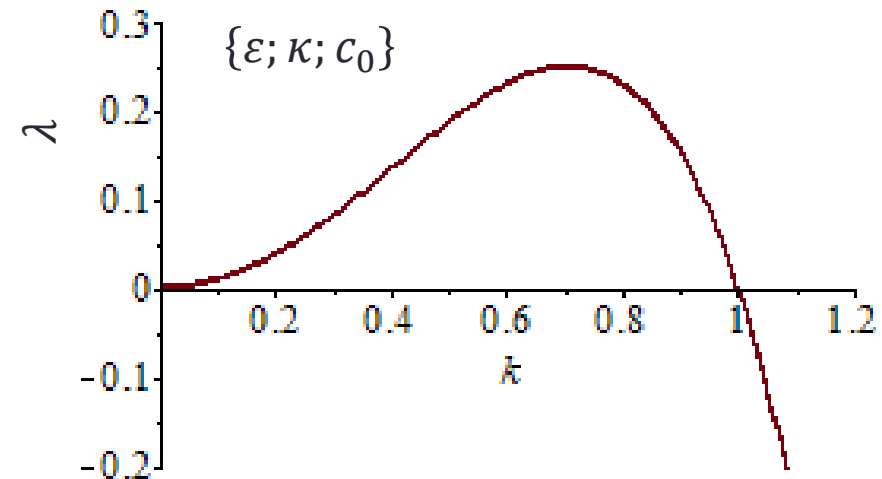
Показник стійкості

$$\lambda = -Mk^2 \left[\frac{d^2 f(c; \varepsilon)}{dc^2} \right]_{c=c_0} - M\kappa k^4$$

Стійкий однорідний стан
Однорідний розподіл



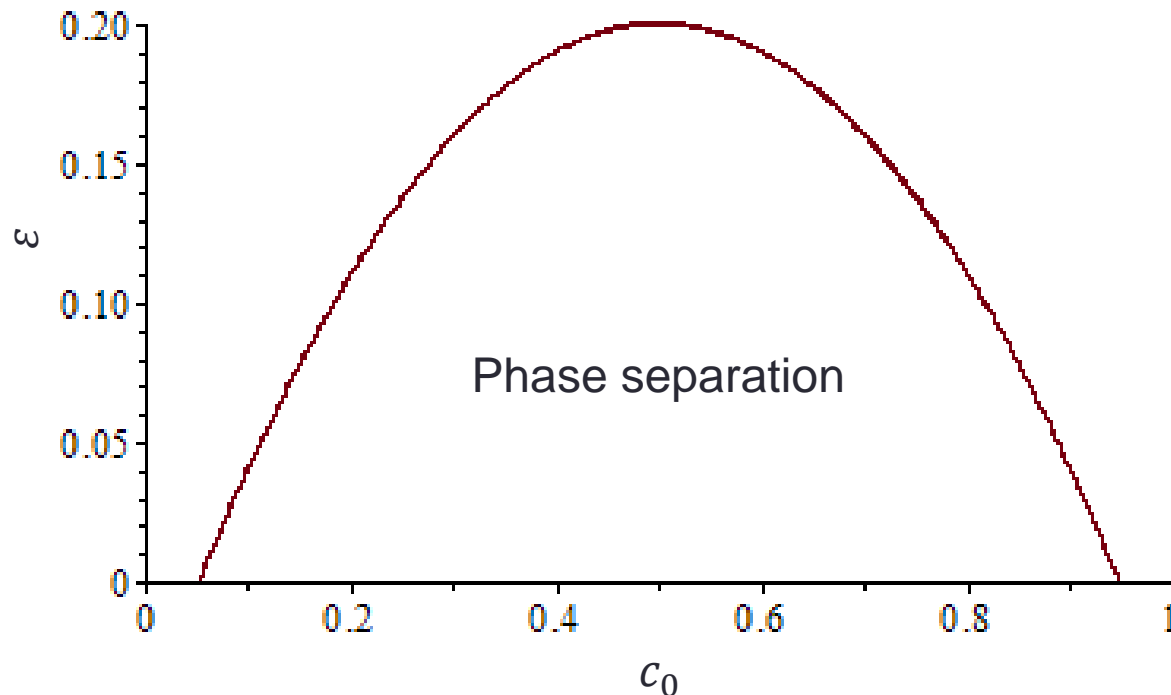
Нестійкий однорідний стан
Фазове розшарування



Аналіз стійкості однорідних станів до неоднорідних збурень

Фазова діаграма

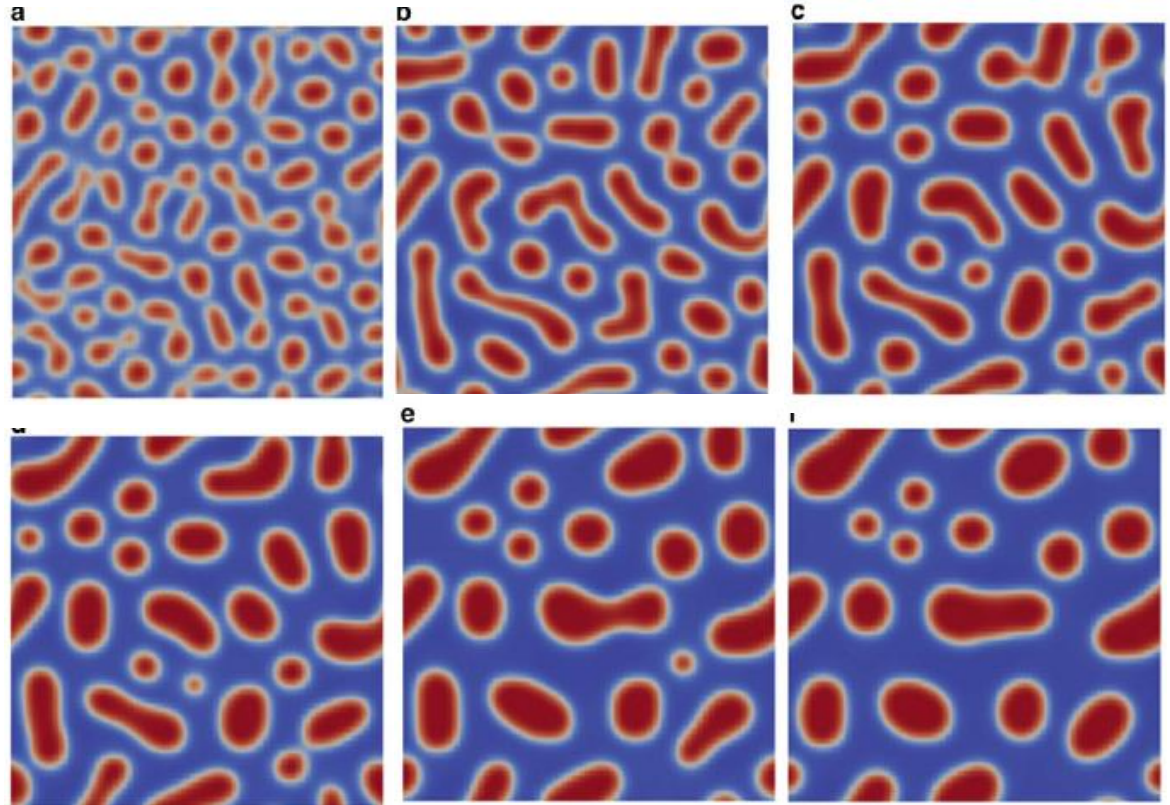
$$\varepsilon(c_0) = \left. \frac{d^2 f(c; \varepsilon)}{dc^2} \right|_{c=c_0}$$



Типова динаміка процесу фазового розшарування бінарного розчину

$$\frac{\partial c}{\partial t} = M \nabla^2 \left[\frac{df(c)}{dc} - \kappa \nabla^2 c \right]$$
$$f(c) = A c^2 (1 - c)^2$$

$$M = 1$$
$$A = 1$$
$$\kappa = 0.5$$
$$c_0 = 0.4$$



Типова динаміка статистичних характеристик

$$\frac{\partial c}{\partial t} = M \nabla^2 \left[\frac{df(c)}{dc} - \kappa \nabla^2 c \right]$$
$$f(c) = A c^2 (1 - c)^2$$

Середня концентрація

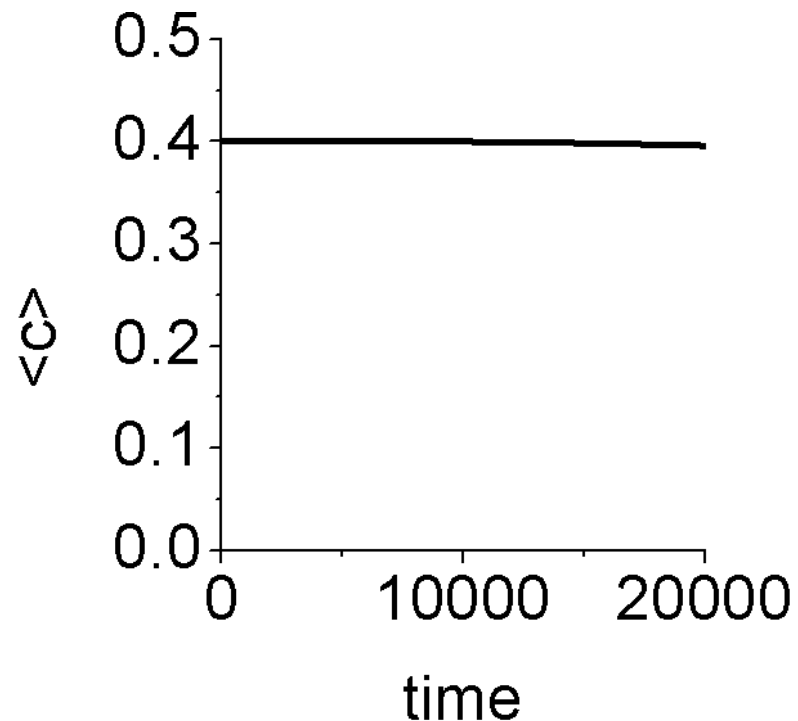
$$\langle c \rangle = \frac{1}{L^d} \sum_{i=1}^N c_i;$$

$$M = 1$$

$$A = 1$$

$$\kappa = 0.5$$

$$c_0 = 0.4$$



Типова динаміка статистичних характеристик

$$\frac{\partial c}{\partial t} = M \nabla^2 \left[\frac{df(c)}{dc} - \kappa \nabla^2 c \right]$$
$$f(c) = A c^2 (1 - c)^2$$

Середня концентрація

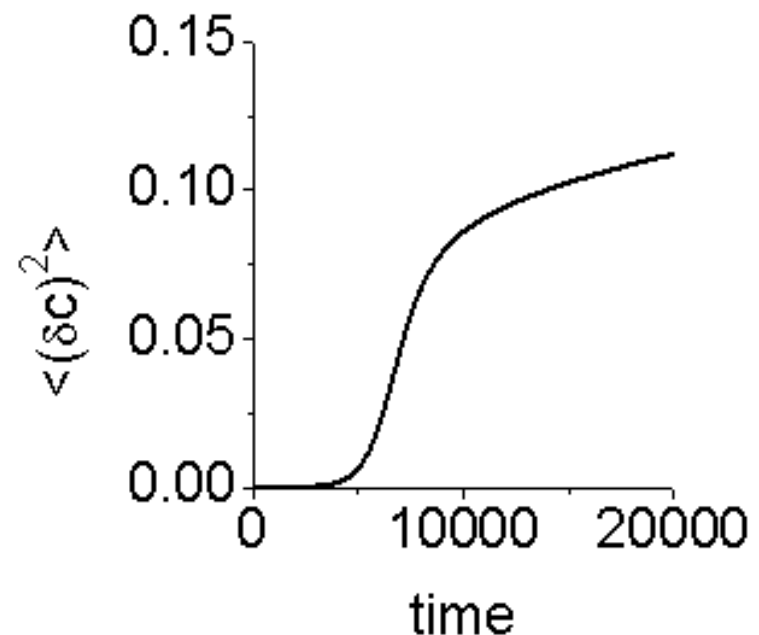
$$\langle (\delta c)^2 \rangle = \langle c^2 \rangle - \langle c \rangle^2;$$

$$M = 1$$

$$A = 1$$

$$\kappa = 0.5$$

$$c_0 = 0.4$$



Типова динаміка фазового розшарування

$$\frac{\partial c}{\partial t} = M \nabla^2 \left[\frac{df(c)}{dc} - \kappa \nabla^2 c \right]$$

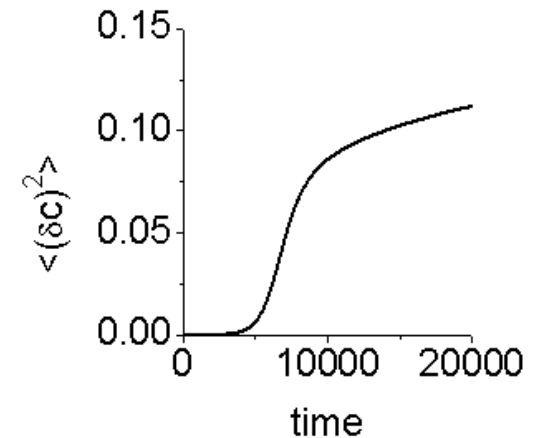
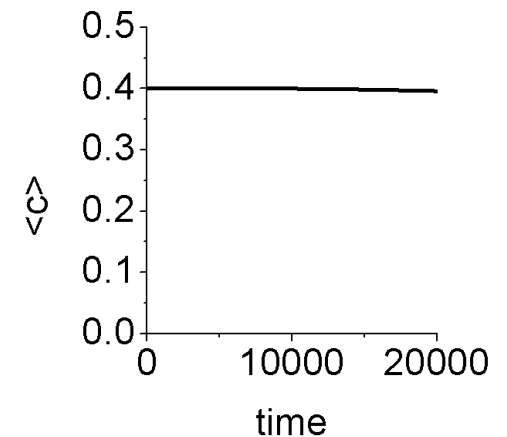
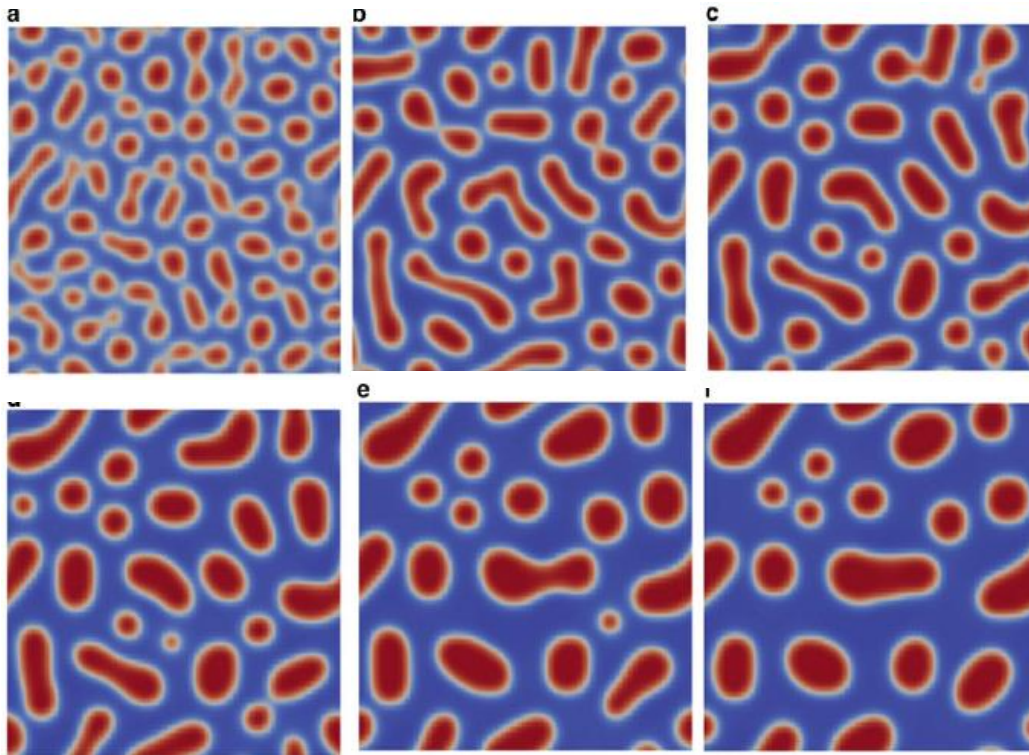
$$f(c) = A c^2 (1 - c)^2$$

$$M = 1$$

$$A = 1$$

$$\kappa = 0.5$$

$$c_0 = 0.4$$



Випадіння преципітатів Cr в сплаві Fe-Cr-Al

Математична модель: сплав Fe-Cr-Al

Динамічні рівняння

$$\begin{aligned}\partial_t x_{Cr} &= \nabla \cdot \left[M_{CrCr} \nabla \left(\frac{dG}{dx_{Cr}} - \kappa_{Cr} \nabla^2 x_{Cr} \right) + M_{CrAl} \nabla \left(\frac{dG}{dx_{Al}} - \kappa_{Al} \nabla^2 x_{Al} \right) \right] \\ \partial_t x_{Al} &= \nabla \cdot \left[M_{AlAl} \nabla \left(\frac{dG}{dx_{Al}} - \kappa_{Al} \nabla^2 x_{Al} \right) + M_{CrAl} \nabla \left(\frac{dG}{dx_{Cr}} - \kappa_{Cr} \nabla^2 x_{Cr} \right) \right]\end{aligned}$$

Потенціал взаємодії

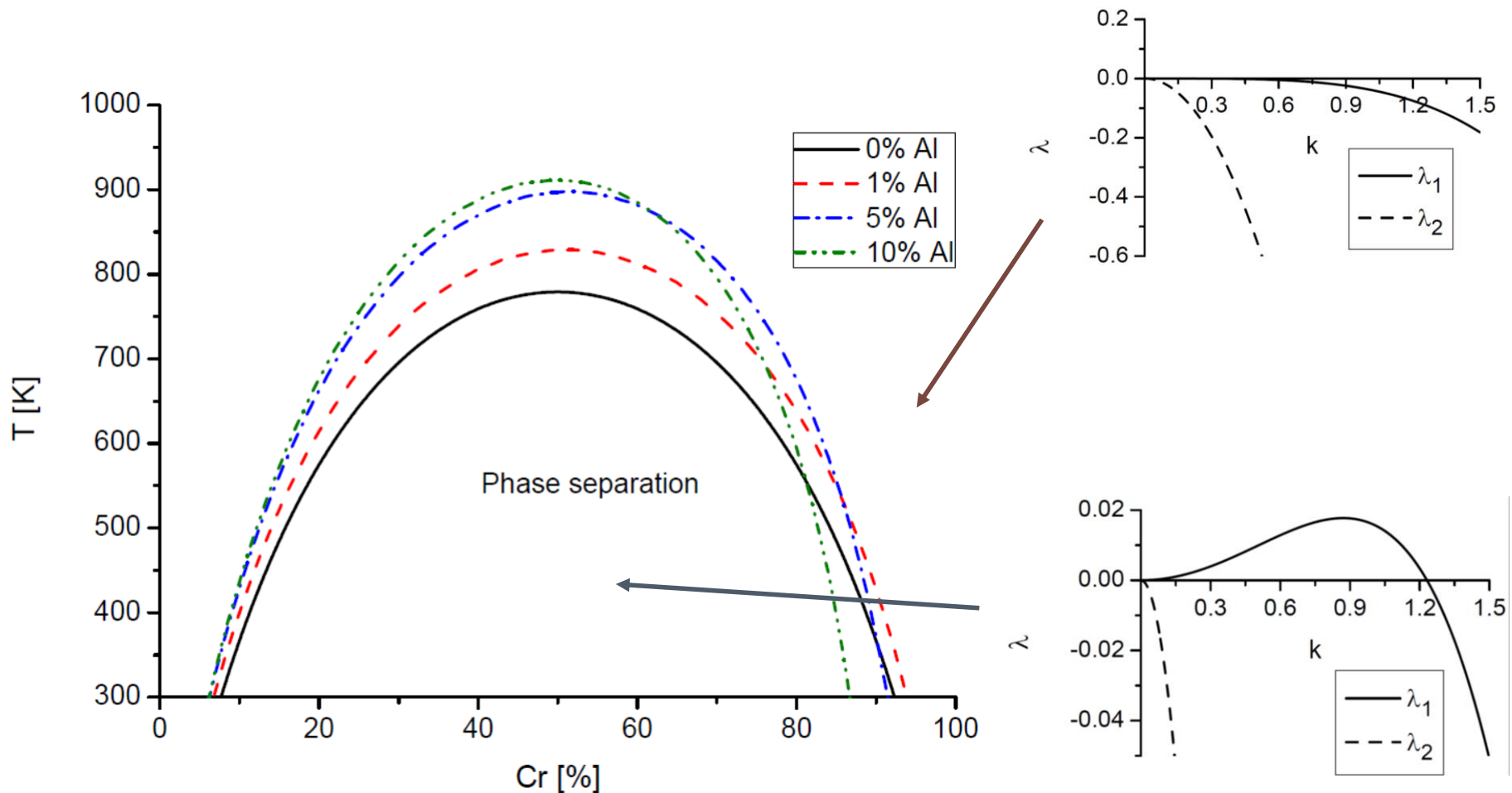
$$\begin{aligned}G(x_{Fe}, x_{Cr}, x_{Al}) &= G_{Fe}^0 x_{Fe} + G_{Cr}^0 x_{Cr} + G_{Al}^0 x_{Al} \\ &+ RT [x_{Fe} \ln x_{Fe} + x_{Cr} \ln x_{Cr} + x_{Al} \ln x_{Al}] \\ &+ x_{Fe} x_{Cr} L_{Fe,Cr} + x_{Fe} x_{Al} L_{Fe,Al} + x_{Cr} x_{Al} L_{Cr,Al}.\end{aligned}$$

Мобільності

$$\begin{aligned}M_{Cr,Cr}(x_{Fe}, x_{Cr}, x_{Al}) &= x_{Cr} [(1 - x_{Cr})^2 M_{Cr} + x_{Cr} x_{Al} M_{Al} + x_{Cr} x_{Fe} M_{Fe}] , \\ M_{Al,Al}(x_{Fe}, x_{Cr}, x_{Al}) &= x_{Al} [(1 - x_{Al})^2 M_{Al} + x_{Al} x_{Fe} M_{Fe} + x_{Al} x_{Cr} M_{Cr}] , \\ M_{Cr,Al}(x_{Fe}, x_{Cr}, x_{Al}) &= x_{Cr} x_{Al} [x_{Fe} M_{Fe} - (1 - x_{Cr}) M_{Cr} - (1 - x_{Al}) M_{Al}] ,\end{aligned}$$

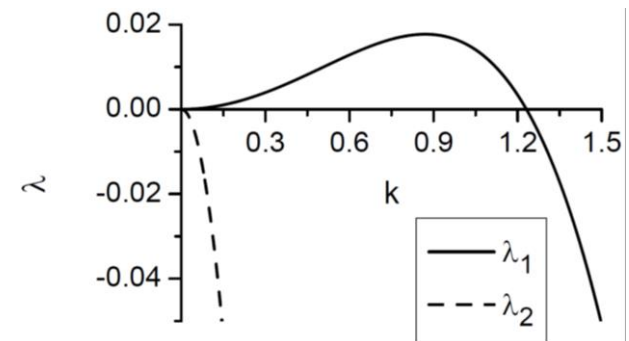
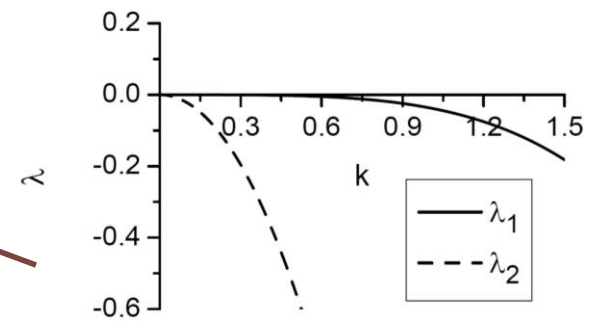
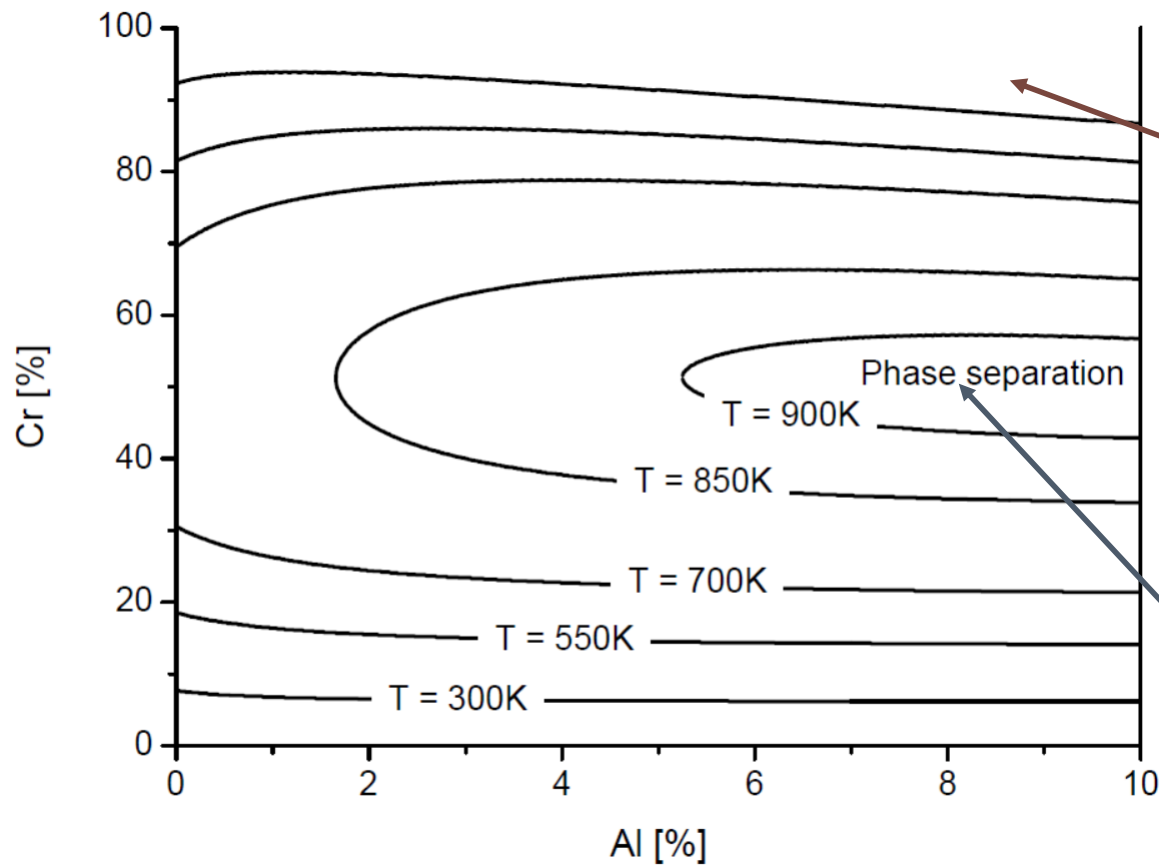
Випадіння преципітатів Cr в сплаві Fe-Cr-Al

Фазова діаграма: сплав Fe-Cr-Al



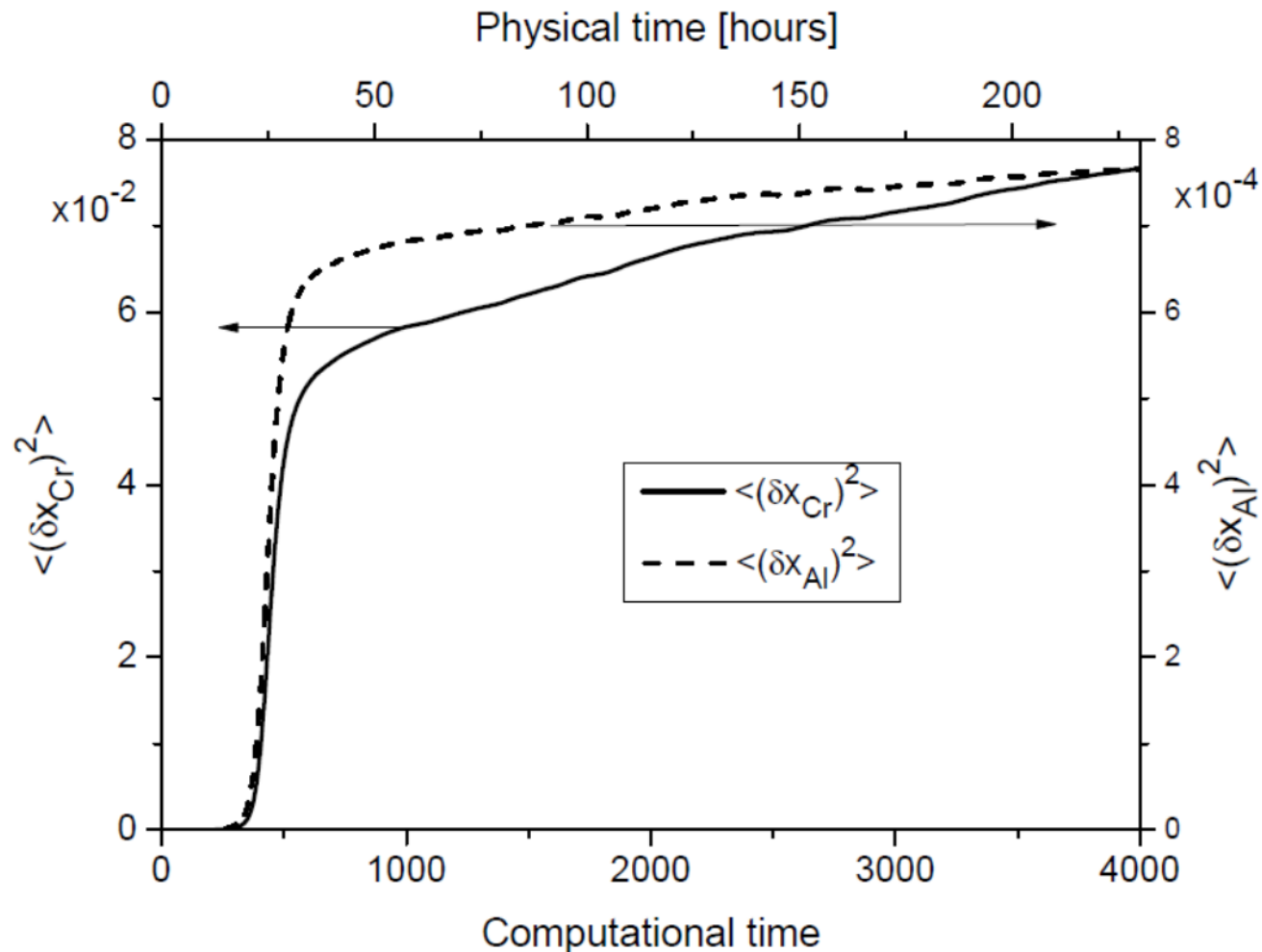
Випадіння преципітатів Cr в сплаві Fe-Cr-Al

Фазова діаграма: сплав Fe-Cr-Al



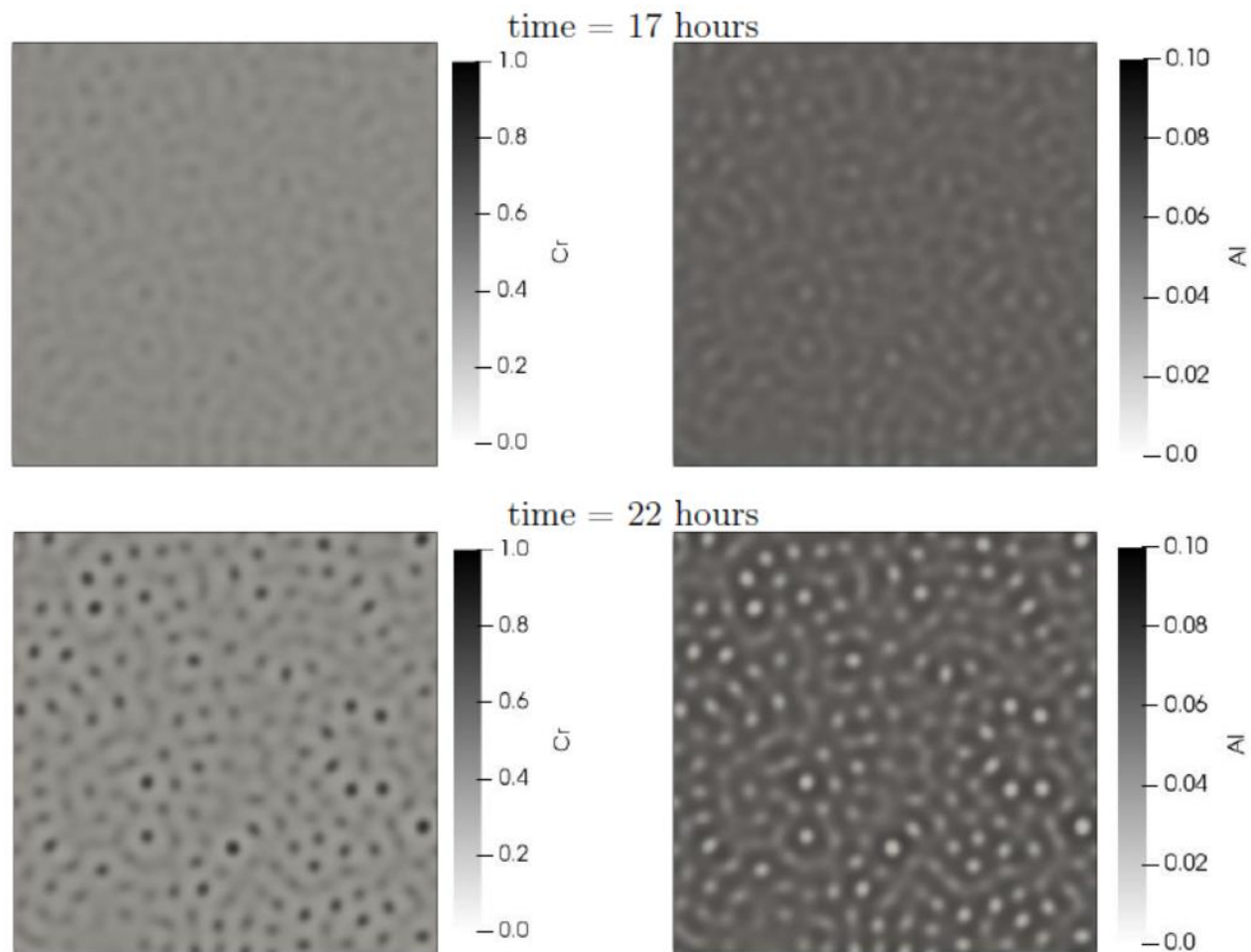
Випадіння преципітатів Cr в сплаві Fe-Cr-Al

Динаміка дисперсій: сплав Fe-Cr-Al



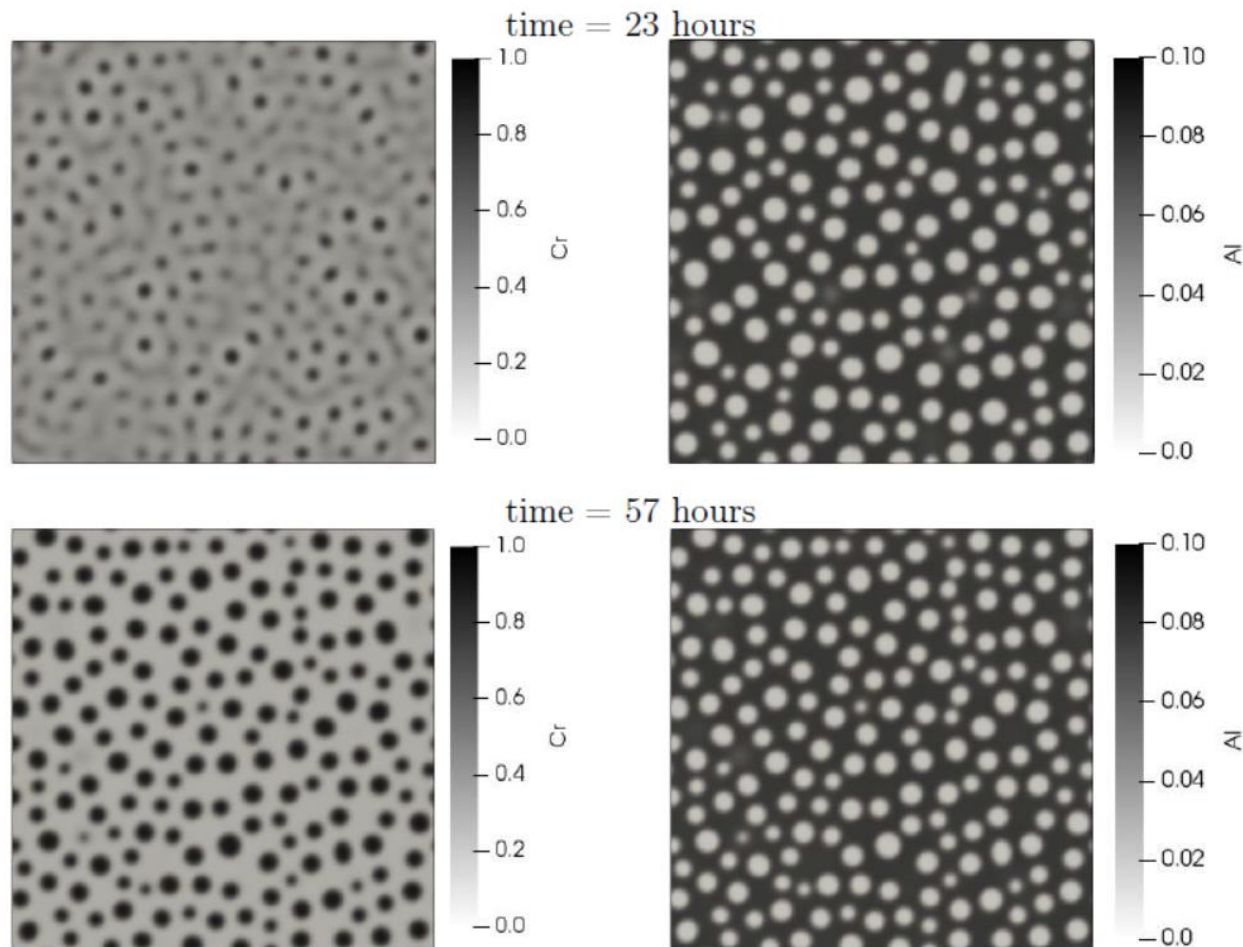
Випадіння преципітатів Cr в сплаві Fe-Cr-Al

Динаміка розшарування: сплав Fe-Cr-Al



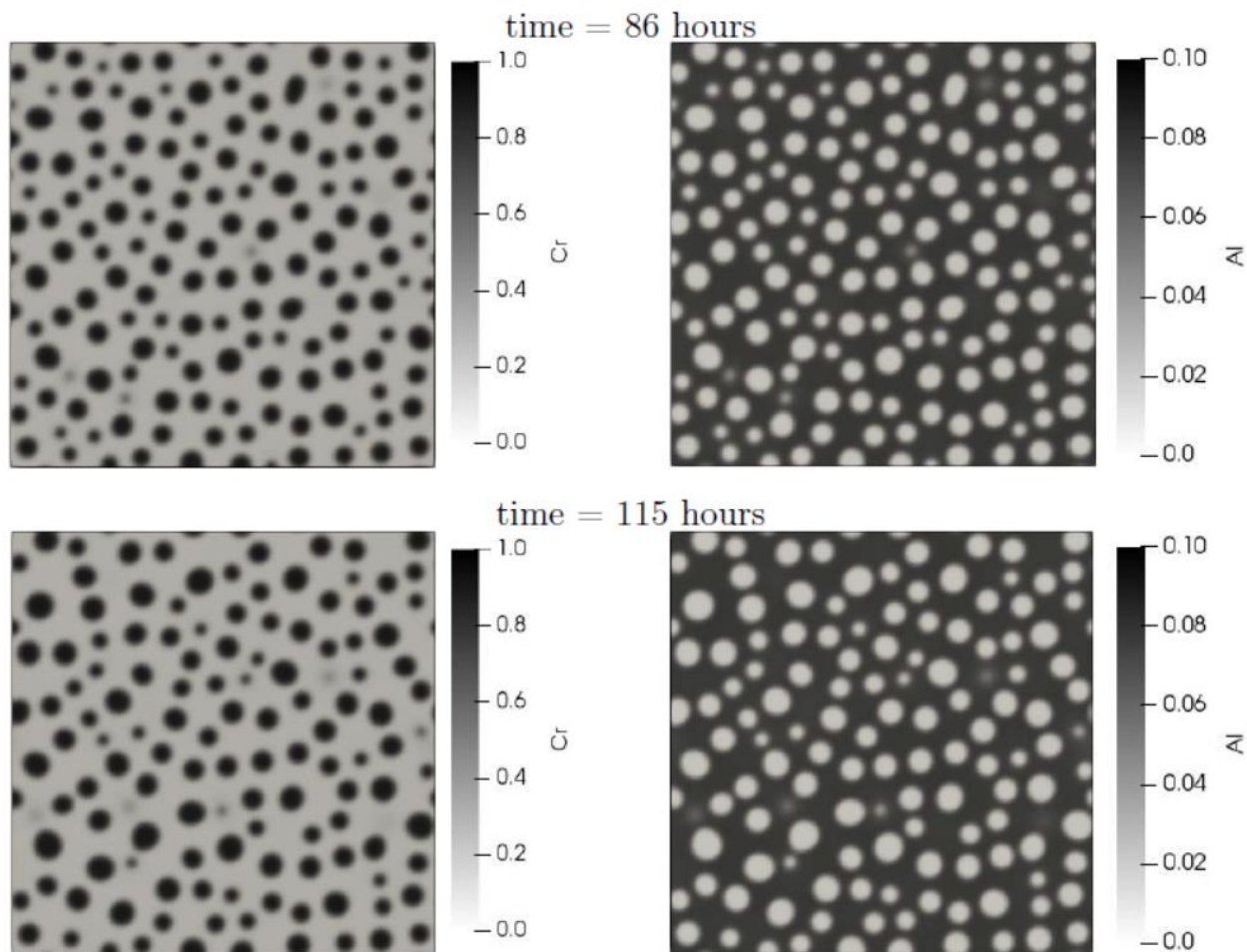
Випадіння преципітатів Cr в сплаві Fe-Cr-Al

Динаміка розшарування: сплав Fe-Cr-Al



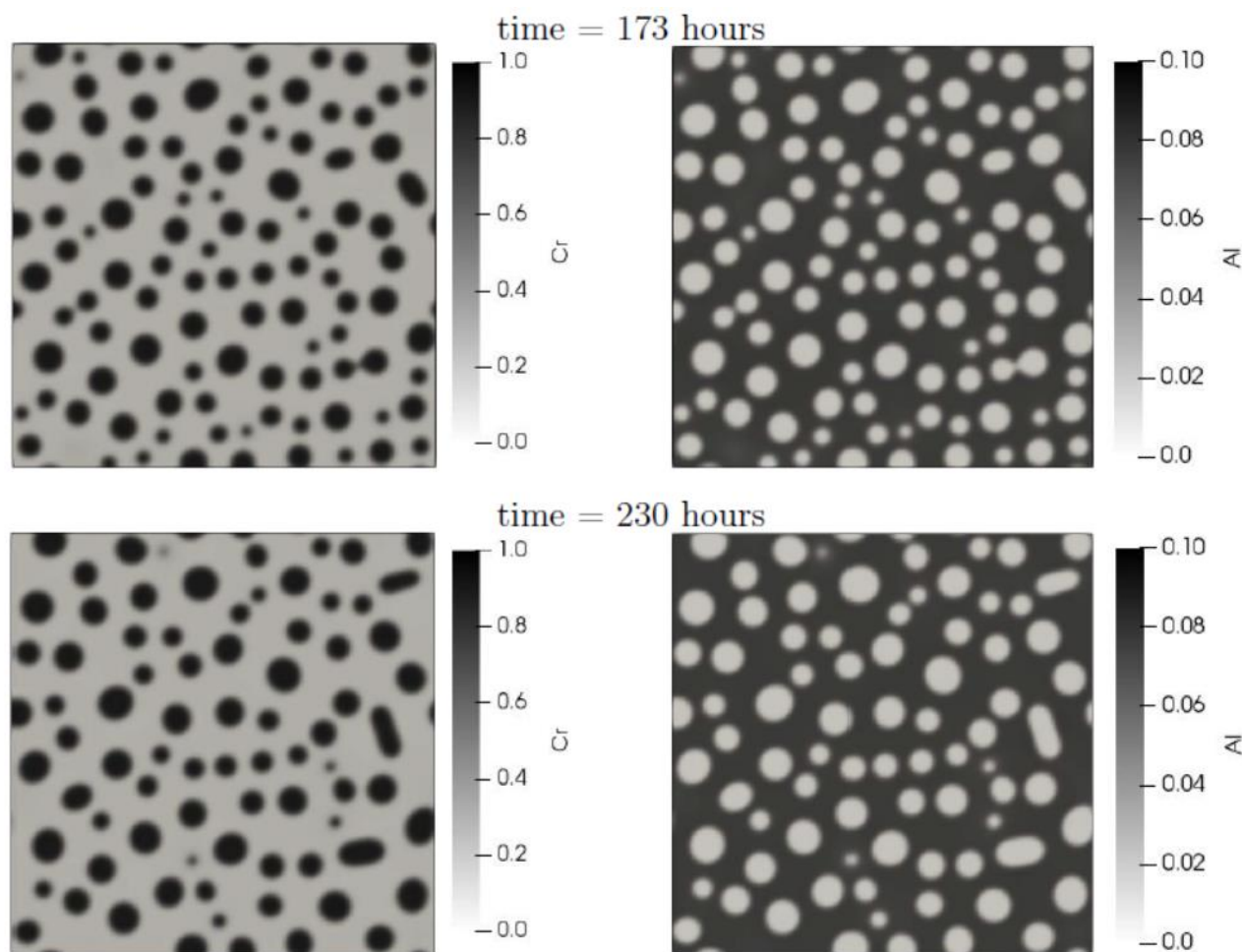
Випадіння преципітатів Cr в сплаві Fe-Cr-Al

Динаміка розшарування: сплав Fe-Cr-Al



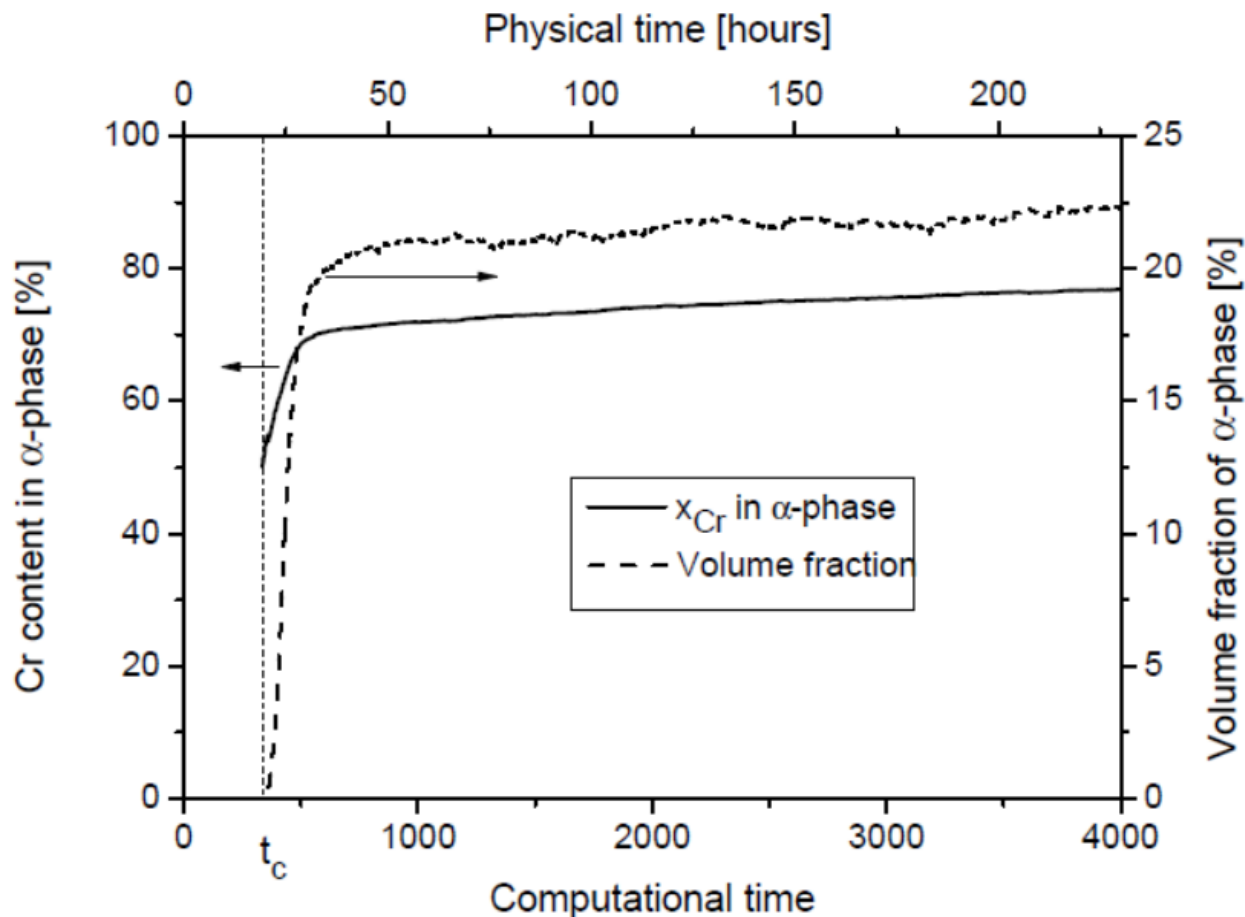
Випадіння преципітатів Cr в сплаві Fe-Cr-Al

Динаміка розшарування: сплав Fe-Cr-Al



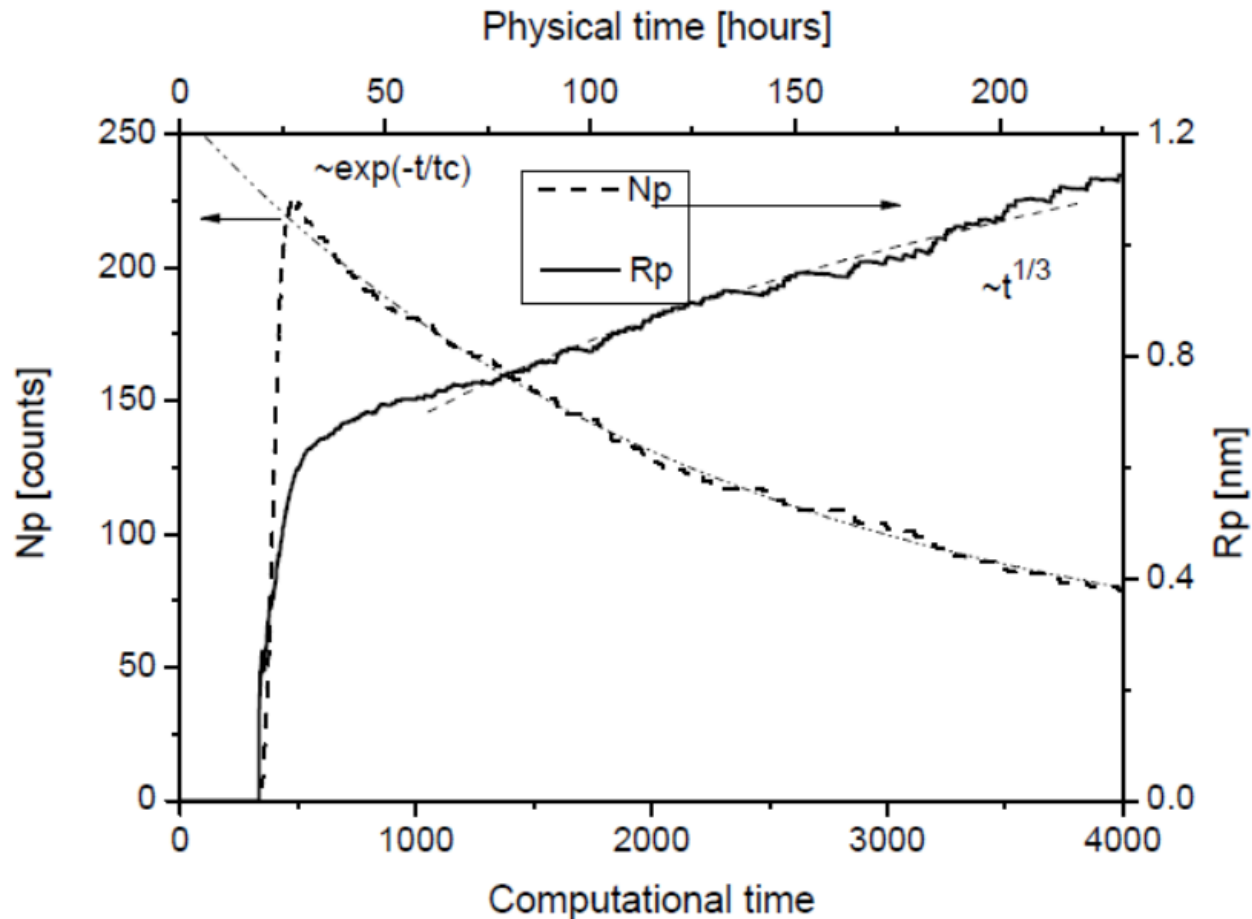
Випадіння преципітатів Cr в сплаві Fe-Cr-Al

Концентрація Хрому в преципітатах: сплав Fe-Cr-Al



Випадіння преципітатів Cr в сплаві Fe-Cr-Al

Середній розмір та кількість преципітатів: сплав Fe-Cr-Al



Дякую за увагу