

0.1. Прохоров Д.И. Алгоритм численного решения системы уравнений Аллена-Кана и Кана-Хиллиарда для моделирования процесса спекания зернистых материалов

Производство современных материалов с заданными свойствами требует глубоких знаний о процессе спекания, а также о характере эволюции микроструктуры материала, сопутствующей этому процессу. Например, ключевыми свойствами сорбента являются прочность и емкость (связанная с площадью поверхности). Измерение этих свойств химическими и физическими методами, особенно, если речь идет о большом количестве образцов, является ресурсоемкой задачей. С другой стороны, такие эксперименты можно проводить для цифрового представления образца. Поэтому компьютерное моделирование спекания представляет интерес как для промышленности, так и для вычислительной математики.

Наиболее перспективным и быстро развивающимся подходом к моделированию спекания является метод фазового поля [1]. Общий принцип метода фазового поля заключается в том, что физические величины описываются набором фазовых полей, которые принимают постоянные значения в определенных областях и плавно изменяются на их границах. Одной из возможных моделей является система, состоящая из одного уравнения Кана-Хиллиарда и I уравнений Аллена — Кана, где I — число зерен. Уравнение Кана — Хиллиарда определяет эволюцию плотности массы, а уравнения Аллена — Кана описывают поведение параметров порядка.

Для моделирования больших образцов, состоящих из нескольких тысяч зерен, предложен следующий подход: решение уравнений Аллена — Кана методом конечных разностей вычисляется только в небольшой подобласти, содержащей соответствующее зерно. В процессе микроструктурной эволюции положение и размер зерен меняется, поэтому меняются и области, в которых вычисляется решение. Проведено сравнение результатов полученных с помощью предложенного подхода с результатами, полученными стандартным способом (решение уравнений во всей расчетной области). Показана производительность алгоритма для образца из 4302 зерен.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 21-71-20003).

Научный руководитель — д.ф.-м.н. Базайкин Я. В.

Список литературы

- [1] WANG YU U. Computer modeling and simulation of solid-state sintering: A phase field approach // Acta Materialia, Volume 54, Issue 4, 2006, Pages 953-961, ISSN 1359-6454.