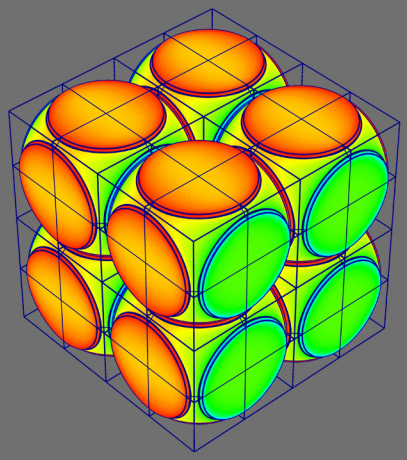
ISSN 2309-3684



Математическое моделирование и численные методы

Тягунов А.Г., Зейде К.М., Мильдер О.Б., Тарасов Д.А. Диффузионная модель эволюции кластера в металлическом расплаве жаропрочного никелевого сплава. Математическое моделирование и численные методы, 2023, № 2, с. 3–32.

Источник: https://mmcm.bmstu.ru/articles/306/

Параметры загрузки:
IP: 216.73.217.22
18.11.2026 12:59:45

УДК 519.8 DOI: 10.18698/2309-3684-2023-2-332

Диффузионная модель эволюции кластера в металлическом расплаве жаропрочного никелевого сплава

© А.Г. Тягунов[1], К.М. Зейде[2], О.Б. Мильдер[1], Д.А. Тарасов[1]

[1]Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург, Мира, 19, 620002 Россия
[2]University of Genoa, Genoa, Via Opera Pia 11a, 16121 Italy

*В работе производится построение математической модели термо-временной эволюции кластера в расплаве жаропрочного никелевого сплава ЖС6У. Формулируется начально-краевая задача с движущейся границей, для решения которой применяется численное моделирование методом трассировки траектории частиц, а для описания эволюционных процессов используется ряд классических физических теорий. Для проверки точности модели привлекается физический эксперимент построения политерм и изотерм электросопротивления рассматриваемого сплава. Подтверждено, что модель броуновской диффузии и теория проводимости Друде применимы для описания, как временной, так и температурной эволюции кластера. Так же оправдал себя подход к моделированию на основе «твердых шаров». По результатам моделирования, во временном диапазоне от 1690 до 1752 К количество частиц в составе кластера меняется от 5000 до 2000, средняя динамическая вязкость кластера изменяется от 3 до 2 *1010 Па*с, однако предполагается, что центральная часть существенно плотнее периферии, радиус кластера изменяется от 24 до 18 Å, радиус свободной зоны вокруг кластера – от 56 до 43 Å. Определены направления дальнейшего развития модели.*

Ключевые слова: *численное моделирование, задача с движущейся границей, молекулярная динамика, расплав, электросопротивление*

Введение. Последние десятилетия среди исследователей физико-химических свойств вещества наблюдается все более широкое распространение понятия «кластер». Кластеры рассматривают как особенное промежуточное между атомами/молекулами и конденсированным состоянием вещество [1]. Кластеры представляют из себя некие стабильные системы, содержащие конечное число элементов (частиц) и характеризующиеся наличием внутренних координат, вдоль которых энергия диссоциации меньше, а равновесные расстояния больше, чем у молекул.

Термин «кластер» пришел из координационной химии, где он употребляется для обозначения группы близко расположенных и тесно связанных друг с другом атомов, молекул, ионов, а иногда и ультрадисперсных частиц. Впервые это понятие ввел в 1964 году Ф. Коттон, который, характеризуя несколько новых соединений молибдена, содержащих связи «металл-металл», предложил называть кластерами химические соединения, в которых ограниченное число атомов металлов образуют между собой ковалентную химическую связь. Также в

кластерах возможно наличие атомов неметаллов (лигандов), связанных с ним. [2]. К кластерам также часто относят наночастицы упорядоченного строения, имеющие заданную упаковку атомов и правильную геометрическую форму. Как показывают результаты исследований, в большинстве случаев формирование ядра кластера происходит в соответствии с концепцией плотной упаковки атомов. Свойства кластеров во многом зависят от межкластерных взаимодействий (при наличии соседствующих кластеров) и от взаимодействия кластера с матрицей.

Металлы демонстрируют разнообразные физические проявления своей кластерной структуры. Принято разделять несколько основных типов металлических нанокластеров. Прежде всего это молекулярные кластеры как окруженные (неметаллическими) лигандами двух- и более ядерные комплексные соединения на основе металлического «каркаса», обычно представляющего собой цепи различной длины, циклические структуры, полиэрды и их комбинации, а также фрактальные системы. Впрочем, при моделировании поведения металлических кластеров наиболее распространено рассмотрение их как сферических структур. Кроме того, выделяют газовые (ван-дер-ваальсовы) безлигандные кластеры [3, 4]. Предметом нашего же интереса являются более сложные структуры — молекулярные условно безлигандные кластеры, состоящие из атомов переходных металлов и их сплавов сложного состава, в частности, сплавов на основе никеля.

Кластеры переходных металлов часто демонстрируют несколько низкоэнергетических конфигураций кластерного ядра. Структурная перестройка в них вызывается молекулярными колебаниями, в результате чего образуются изомеры и/или флуктуационные структуры, существующие ограниченное время. В некотором смысле это говорит о «нежесткости» кластерных ядер. Кластеры можно рассматривать как пример конечной Ферми — системы и по своим свойствам они аналогичны атомным ядрам [5, 6].

Известно, что электросопротивление твердых металлических тел определяется в основном рассеянием электронов на фононах, дефектах структуры и примесях. Для кластеров за счет развитых границ раздела и высокой концентрации дефектов характерно высокое рассеяние носителей заряда. Например, экспериментально обнаружено повышение удельного электросопротивления с уменьшением размеров кластеров типа «нанокристалл» у Ni, Fe, Pd, Cu и их сплавов, например, NiAl. Для подобных кластерных структур коэффициент рассеяния электронов $0 < r < 1$ можно выразить как (1)

$$\ln\left(\frac{\rho}{\rho_\infty}\right) = \frac{l_\infty}{\langle D\rangle}\ln\left(\frac{1}{r}\right) \qquad (1)$$

где <D> — средний размер зерна, l_∞ — средняя длина свободного пробега электронов в бездефектном монокристалле, ρ_∞ — удельное электросопротивление крупнозернистого вещества, ρ — удельное электросопротивление кластера, r — коэффициент рассеяния. С уменьшением размера кластера ρ должно возрастать. Увеличение ρ с уменьшением <D> объясняется частичной локализацией электронов, когда размеры кластера становятся меньше длины свободного пробега электронов, что приводит к уменьшению их концентрации.

Если кластерная структура твердого вещества сейчас не поддается сомнению, то в отношении жидкостей, особенно металлических расплавов, этот вопрос долгое время оставался дискуссионным. В настоящее время, благодаря развитию технологии изготовления материалов с особыми служебными свойствами и появления новых поколений сложнолегированных сплавов, для исследователей все больший интерес представляют поведение и свойства кластеров в них при плавлении/кристаллизации. На сегодняшний день можно утверждать, что кластерная структура расплавов 3d-переходных металлов является признанной научной гипотезой. В пользу этой гипотезы говорит, в частности, нелинейное поведение физических свойств расплава (того же удельного электрического сопротивления и пр.) выше точки ликвидуса при сохранении ближнего порядка, о чем свидетельствуют данные рентгенографии [7]. Однако взгляды на структуру и размер атомных микрогруппировок, где сохраняется ближний порядок, весьма различны. С.Р.Элиотт оперирует размерами групп атомов «ближний порядок» 2-5 Å, «средний порядок» 5-20 Å, «дальний порядок» — свыше 21 Å [8]. Б.Г.Лифшиц называет ближним порядком атомные ассоциации с геометрически правильным строением [9].

По данным Л.А.Жуковой структура ближнего порядка расплава вблизи ликвидуса может быть ОЦК и ГЦК подобной, но не связанной с исходной твердой структурой, т.о. расплав наследует ближайшее окружение, но не тип решетки [10]. В работе [11] утверждается, что количество типов кластеров и их химическую структуру можно предсказать с помощью диаграмм фазовых равновесий исследуемых систем. Но в жидкостях могут образовываться группировки атомов, которые не свойственны для твердого состояния вещества [12]. Д.Тёрнбалл [13] и В.А.Полухин с соавторами [12] придерживаются мнения о возможности образования в расплавах особого некристаллического ближнего порядка на основе икосаэдрических структур, обладающих несколько меньшей энергией по сравнению с кристаллическими ГЦК или ГПУ упаковками с тем же числом атомов [13]. Н.А.Ватолин отмечает, что «ближний порядок икосаэдрического типа (и преобладание симметрии пятого порядка) может характеризовать высокотемпературное состояние любого расплава без учета индивидуальных особенностей, связанных с конкретным химическим составом [14].

С.И.Попель с соавторами, исследуя дальние максимумы функций распределения, приходят к выводу, что при потере дальнего порядка, вызванного плавлением кристалла, атомы перераспределяются в более симметричную конфигурацию [15]. Для ГЦК и ОЦК — металлов это изменение координационной сферы соответствует переходу в икосаэдрическую решетку, в каждой из 12-ти вершин которой сходятся по пять граней в виде правильных треугольников. Научным коллективом под руководством П.С.Попеля предложено и развито представление о метастабильной микрогетерогенности расплавов [16]. В расплавах после фазового перехода «кристалл-жидкость» отмечаются признаки отсутствия полного перемешивания компонентов веществ на атомном уровне. В эвтектических жидкостях с ограниченной смешиваемостью возможно длительное существование микронеоднородностей, унаследованных от исходного гетерогенного слитка [17].

И.В.Гаврилин, анализируя процессы плавления, разработал и обосновал свой вариант модели квазикристаллического строения расплавов. По его мнению, структура металлической жидкости состоит из колеблющихся кластеров, межкластерных разрывов и активированных атомов, и эти элементы структуры непрерывно взаимодействуют между собой [18, 19]. Кластеры наследуют из исходного твердого состояния характер ближайшего упорядочения и моновакансии. Межкластерные разрывы представляют собой щели шириной около 0,1 нм, раскрывающиеся и закрывающиеся при расхождении и схождении кластеров в процессе каждого периода тепловых колебаний. Активированные атомы располагаются на открытой поверхности кластеров и имеют, как минимум, одну свободную связь. Увеличение числа свободных связей повышает степень активации. Такие атомы не образуют самостоятельную структурную зону и отличатся тем, что на период нахождения на открытой поверхности обладают дополнительной энергией и относительной свободой перемещения по поверхности кластера и между кластерами. Количество активированных атомов может служить степенью разупорядочения и мерой активности жидкого металла по сравнению с твердыми. Методика термодинамических расчетов И.В.Гаврилина [19] позволяет определить количество кластеров, количество атомов в кластере, объем межкластерных разрывов, количество активированных атомов, а также найти температурные зависимости этих структурных параметров.

Современные представления о структуре металлических жидкостей вблизи температуры ликвидус также согласуются с квазикристаллической моделью, согласно которой расплав состоит из кластеров и межкластерной разупорядоченной зоны. Различия мнений возникает при обсуждении изменения структуры расплава при нагреве или длительных изотермических выдержек сплава в твердом состоянии в условиях постоянного давления. Ряд ученых утверждают, что в

начальный момент между кластерами и разупорядоченнной зоной происходит обмен атомами и объемные доли структурных составляющих не изменяются [20]. С повышением температуры доля кластеров уменьшается, доля межкластерной зоны увеличивается [21, 22] и по достижению определенной температуры расплав представляет собой «газоподобную» структуру [20] или даже «квазигаз» [23, 24].

Другие исследователи уверены в полиморфизме расплава, проявляющемся при нагреве или длительной выдержке [25, 26, 27]. По результатам рентгено-дифракционных исследований кластерная структура расплава полностью не разупорядочивается. Металлическая жидкость все также состоит из кластеров и межкластерной области, при этом объемы структурных составляющих не изменяются. Нагрев или выдержка способствуют лишь уменьшению размеров атомных микрогруппировок с равномерным распределением элементов.

Таким образом, на текущий момент существуют нескольких основных моделей, описывающих жидкий металл: квазигазовая, дырочная, квазикристаллическая и квазихимическая [28]. Несмотря на большое количество подходов к описанию металлических расплавов, ни один из них не дает однозначного описания поведения вещества при плавлении, как не позволяет однозначно интерпретировать накопленный богатый экспериментальный материал.

Частичному восполнению этого пробела и посвящена данная работа. В ней мы проводим моделирование динамики кластера и оценка его характеристик (средний размер, межкластерное расстояние, динамическая вязкость, плотность) в предположении, что кластеры безусловно являются структурными единицами расплава. Кроме того, сделана попытка связать температурную и временную динамику кластера и наблюдаемое в эксперименте поведение поли- и изотермических зависимостей удельного электросопротивления.

Концепция построения модели. Определим кластер в расплаве как одну из форм безусловно жидкого состояния: пространственные области, обладающие атомной плотностью близкой к таковой для твёрдого тела, но лишённые регулярной пространственной структуры типа решётки. Другими словами, это настолько «перегретая» решетка, что амплитуда и асинхронность тепловых колебаний отдельных атомов не позволяет выделить в ней дальний порядок; тем не менее, данная наноструктурная единица сохраняет плотность, практически равную плотности твёрдого тела. Тот факт, что жидкости одного химического состава, но разных плотностей перемешиваются крайне неохотно, не является чем-то новым (пример — вода).

Будучи помещённым в стационарные термодинамические условия — постоянные температура и внешнее давление — кластер постепенно разрушается («тает»). Другими словами, при заданной температуре, вероятность обнаружить кластер больше определённого размера

резко падает, причём величина этого размера уменьшается с течением времени.

Разрушение кластера происходит по диффузионному механизму. Диффузия есть неравновесный необратимый процесс; необратимостью также характеризуются экспериментально наблюдаемые аномалии поведения различных физических характеристик расплава.

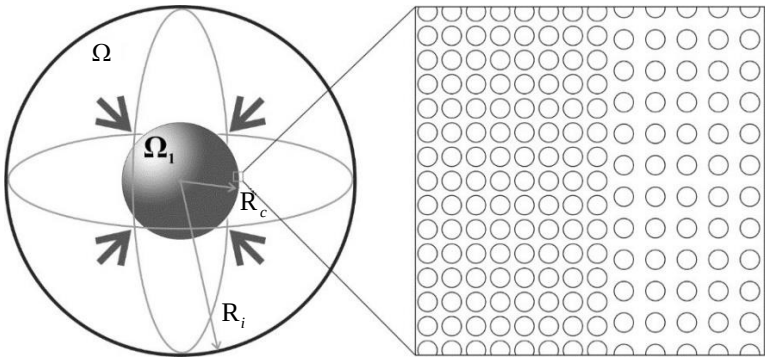


Рис. 1. Модельный кластер Ω_1 и свободная зона Ω, содержащая только один кластер

Таким образом, в нашей концепции формулируется начально-краевая задача с движущейся границей, для решения которой применяется численное моделирование методом трассировки траектории частиц, а для описания эволюционных процессов используется ряд классических физических теорий. Данная постановка характерна для задачи Стефана, в которой рассматривается движение границы раздела плотностей жидкость-жидкость одного вещества. Геометрия системы и постановка задачи близка к описываемой в [29] при отсутствии в системе термодиффузии.

В настоящем контексте наибольший интерес представляют новые вычислительные методы решения данного класса задач [30, 31, 32, 33]. Основная сложность в вычислительном подходе для решения задачи Стефана заключается в динамическом перестроении границ анализа системы в постоянном универсуме, что связано не только с итерационным пересчетом параметров модели [30], но и в необходимости накладывания расчетной сетки (движущаяся сетка) на каждом временном отчете [31, 32, 34, 35]. Для преодоления этой сложности в ряде задач имеет смысл, вместо явного определения границы в каждый отсчет времени, использовать методы сквозного счета [33]. Данный подход применен и в настоящей работе, так как данные, которые должны быть априорными для определения текущего положения границы, в рамках используемого численного метода, являются апостериорными [30]. Обзор методов решения данного класса задач предложен в работе [36].

Основы вычислительных методов молекулярной динамики представлены в [37] и в современной форме, в близком к настоящей задачи приложению, используются в [38] и [39]. При чем, в работе [39] рассматривается проблема диффузии в жидкостях на атомарном масштабе методом молекулярной динамики, что в полной мере соответствует постановке задачи в настоящей работе. Силовое взаимодействие активных частиц в системе описывается в [40]. Метод трассировки траектории частиц, применяемый к определению динамики электронов в специфических условиях описывается в [41]. Расширением этого метода может является метод дискретных элементов (метод дискретных частиц) [32, 42, 43], который находит свое применение, в том числе, при анализе движения электронов в среде [44, 45], а также, естественным образом, для решения задач диффузии в жидкостях [39]. Высокоточный метод расчета динамики электронов в плазме представлен, например, в [46]. Численный метод для расчета динамики электронного газа во временной области изложен в работе [47].

Для решения поставленной задачи применяются ряд физических концепций. Диффузионное перемещение активных частиц кластера во внешнюю среду расплава, описывается дифференциальным уравнением Ньютоновской механики [29, 40, 42, 43] в котором динамика определяется броуновской силой [48] и силой вязкого трения [49]. Электрическое сопротивления расплава исследуется согласно закону Друде [41, 50], в контексте близком к изложенному в [47]. Результаты, полученные авторами этой работы, позволяют, в том числе, судить о валидности проведенного вычислительного эксперимента.

Изучение расплавов проводилось в работе [51, 52]. Если работа [52] описывает процессы диффузии в расплавах, то работа [51] метода измерения электрического сопротивления в них, что в целом, является главными предпосылками для проведения настоящего исследования. В [52] описывается механизм диффузии в металлических расплавах на атомарном масштабе. В данном контексте можно говорить о процессе, обратном диффузионному току, который, в некоторых специальных случаях имеет полуаналитический подход к решению [53].

Моделирование. В рамках предлагаемой модели металлическая жидкость рассматривается как суспензия, состоящая из моноатомного жидкого металла с плотностью ρ_{liq} и динамической вязкостью μ_{liq}, и равномерно распределённых в ней одинаковых по своим размерам сферических образований – кластеров. Кластер обладает своими значениями плотности ρ_c, которая близка к таковой для твёрдого металла, и динамической вязкости μ_c, оценка которой производится в процессе моделирования.

И кластер, и моноатомная жидкость образованы из сферических «атомов» одинакового размера, между которыми нет электрического и химического взаимодействия. Термин «атом» взят в кавычки, чтобы подчеркнуть идеальность элементарных частиц модельного расплава. В дальнейшем изложении кавычки будут опущены. Каждый атом имеет массу m_p и диаметр d_p (т.н. «модель твёрдых шаров»).

Измеряемыми макропараметрами системы являются плотность суспензии ρ_{sus} и динамическая вязкость μ_{sus}. В системе действуют только два вида сил: силы броуновской диффузии и силы вязкого трения. Вся эволюция системы определяется только действием этих сил, и в форме второго закона Ньютона для каждого атома задача формулируется в виде [54, 55, 56].

$$\frac{d(m_p\vec{v}_p)}{dt} = \vec{F}_b + \vec{F}_d, \tag{2}$$

где $\vec{v}_p$ — вектор мгновенной скорости каждого атома; t — время; $\vec{F}_b, \vec{F}_d$ — силы броуновской диффузии и вязкого трения соответственно, определяемые согласно [54] следующим образом:

$$\vec{F}_b = \vec{\xi}\sqrt{\frac{6\pi k\mu T d_p}{\Delta t}}, \tag{3}$$

$$\vec{F}_d = -\frac{18\mu m_p\vec{v}_p}{\rho d_p^2}. \tag{4}$$

где $\vec{\xi}$ — случайный единичный вектор, определяющий направление действия силы; k — постоянная Больцмана; T — термодинамическая температура; величины динамической вязкости μ и плотности ρ берутся в зависимости от того, где располагается атом: $\mu \equiv \mu_c$, $\rho \equiv \rho_c$, если атом в составе кластера; $\mu \equiv \mu_{liq}$, $\rho \equiv \rho_{liq}$, если атом в моноатомной жидкости; Δt — шаг расчёта модели по времени.

Необходимо обозначить круг величин, определяющих начальное состояние модели ($t = 0$): N_{rel} — количество частиц в составе первоначального кластера, причём атомы заполняют объём кластера с нулевой начальной скоростью и с равным удалением друг от друга; R_c — радиус кластера; R_i — расстояние от центра кластера до «бесконечности», т.е. такое расстояние, пройдя которое атом, покинувший кластер и подошедший к границе другого кластера, неотличим по скорости от атомов моноатомной жидкости; $d = R_c + R_i$ — характеристическое расстояние между кластерами. Удобно также ввести объём кластера

$\Omega_1 = 4\pi R_c^3 / 3$ и «бесконечный» объём или свободная зона $\Omega = 4\pi R_i^3 / 3$, которая рассматривается как область расплава в которой присутствует только один кластер.

Для определения динамической вязкости суспензии в начальный момент времени используется формула из [57]:

$$\mu_{sus} = \mu_{liq}(1 + 2{,}5\phi), \tag{5}$$

где φ – объёмная доля кластеров в суспензии и, с учётом введённых размерных параметров модели R_c и R_i, равная:

$$\phi = \left(\frac{R_c}{R_i} \right)^3. \tag{6}$$

Численный коэффициент перед φ получен в [57] эмпирически и может быть уточнён. Его величина зависит как от принятой в модели формы частиц, так и от самой φ. Формула (4) справедлива в случае, когда частицы суспензии не взаимодействуют друг с другом.

Для плотности суспензии существует три выражения. Первое, по определению:

$$\rho_{sus} = \frac{m_{liq} + N_{rel} m_p}{\Omega}, \tag{7}$$

где $m_{liq} = \rho_{liq}(\Omega - \Omega_1)$ — масса моноатомной части расплава. Второе выражение есть линейная зависимость для суспензий и эмульсий:

$$\rho_{sus} = \rho_{liq}(1 - \phi) + \rho_c \phi. \tag{8}$$

И, наконец, третье выражение через специально вводимый коэффициент пропорциональности ($\kappa > 1$):

$$\rho_{sus} = \kappa \rho_{liq}. \tag{9}$$

Для выражения величины динамической вязкости внутренней среды кластера используется модель незанятого объема (FVM — Free Volume Model), описанная в [58, 59]:

$$\mu_c = \mu_{liq} \exp\left(\frac{B N_{rel} V_p}{V_f} \right), \tag{10}$$

где $V_p = \pi d_p^3 / 6$ — объём, занимаемый отдельным атомом; $V_f = V_{cm}(C_v - 1)$ — незанятый, свободный от атомов, объём пространства внутри кластера; $V_{cm} = N_{rel} V_p$ — минимальный физически допустимый объём кластера как сумма объёмов составляющих его атомов;

$C_v = \Omega_1 / V_{cm}$ — отношение действительного и минимального физически допустимого объёмов кластера. Коэффициент B в формуле (10) есть неизвестный безразмерный эмпирический параметр, величина которого определяется в результате расчётного эксперимента.

Таким образом, формула (10) для оценки динамической вязкости внутренней среды кластера упрощается к виду:

$$\mu_c = \mu_{liq} \exp\left(\frac{B}{C_v - 1} \right). \tag{11}$$

Для оценки плотности кластера по аналогии с плотностью суспензии записываются два выражения: определяющее и через эмпирический коэффициент пропорциональности $\alpha < 1$, ρ_{ss} — плотность твёрдого вещества):

$$\rho_c = \frac{m_p N_{rel}}{\Omega_1} = \alpha \rho_{ss}. \tag{12}$$

Известно, что $a = (0{,}95 / 0{,}99)$ [59], а плотность твёрдого сплава есть известная величина. Из соотношения (12) выражается объём кластера (13), и, учитывая принятую в модели его сферическую геометрию, – также и радиус (14):

$$\Omega_1 = \frac{m_p N_{rel}}{\alpha \rho_{ss}}, \tag{13}$$

$$R_c = \sqrt[3]{\frac{3 N_{rel} m_p}{4 \pi \alpha \rho_{ss}}}. \tag{14}$$

Согласно принятой модели, эволюция кластера заканчивается его практически полным распадом, когда расплав становится почти однородной субстанцией. Иначе говоря, в некоторый конечный момент времени t_f вся среда в объёме Ω становится практически моноатомной жидкостью, а кластер теряет более 95 % составлявших его частиц.

Граничные условия задачи моделирования имеют следующий вид: $\mu_{sus}(t = t_f) = \mu_{liq}$ и $\rho_{sus}(t = t_f) = \rho_{liq}$. Динамика макропараметров суспензии во времени может быть описана аналогичным образом: $\mu_{sus}(t \to t_f) \to \mu_{liq}$ и $\rho_{sus}(t \to t_f) \to \rho_{liq}$ – динамическая вязкость и плотность суспензии стремятся со временем к характеристикам моноатомной жидкости.

Для динамической вязкости и плотности кластера граничные условия в таком виде не могут быть записаны, т.к. начальные значения

этих величин априори неизвестны. В настоящей модели предполагается неизменность внутренних параметров кластера во времени: $\mu_{sus}(t \to t_f) = const$ и $\rho_{sus}(t \to t_f) = const$. Тогда, для удовлетворения граничных условий задачи необходимо потребовать уменьшение размера кластера с течением времени, т.е. перейти к задаче с движущейся границей: в формулах (5) и (6) $\phi(t \to t_f) \to 0$.

Физически такую постановку задачи можно интерпретировать следующим образом. Кластер представляет собой плотную и вязкую субстанцию. Взаимодействие кластера с моноатомным расплавом осуществляется только на границе кластера. Приграничные частицы кластера диффундируют в расплав, в то время как атомы в глубине кластера не испытывают влияния внешней среды. Покинувшие кластер атомы больше не формируют его границу, а уже принадлежат моноатомному расплаву. Таким образом, радиус кластера уменьшается с течением времени, а внутренняя структура кластера сохраняется.

При таком подходе силы, определяющие динамику задачи (формулы (2) и (3)), не являются функциями времени, т.к. плотность и динамическая вязкость кластера не изменяются, а изменяется объём Ω_1 и, соответственно, радиус R_c. Т.к. параметр C_v (11), очевидно, также оказывается постоянной величиной, начальное и мгновенное значение радиуса кластера можно выразить как:

$$R_c = \sqrt[3]{\frac{3C_v V_p N_{rel}}{4\pi}}, \tag{15}$$

$$R_c = \sqrt[3]{\frac{3C_v V_p \left[(\gamma+1)N_{rel} - N_{sel}(t)\right]}{4\pi}}, \tag{16}$$

где N_{sel} есть число атомов, первоначально принадлежавших кластеру, но покинувших его, и, к моменту времени t, пребывающих в составе моноатомного расплава в пределах объёма Ω. Безразмерный параметр замещения $\gamma \le 1$ показывает сколько атомов должно покинуть кластер (знаменатель), чтобы в кластер проникла одна частица из моноатомного расплава (числитель).

Для расчета удельного электрического сопротивления среды используется модель проводимости Друде, аналогично тому, как это было сделано в [41]. Обратная величина, удельная проводимость, рассчитывается как (17):

$$\sigma = e n_e \mu_e, \tag{17}$$

где e — заряд электрона, n_e — концентрация электронов в области моноатомного расплава, μ_e — подвижность электронов.

Подвижность электронов μ_e (18) может быть выражена через частоту рассеяния электронов в среде f_c (19), где m_e — масса электрона, n_p — концентрация центров рассеяния, σ_θ — сечение рассеяния, υ_e — среднеквадратичная максвелловская скорость свободного пробега электронов:

$$\mu_e = \frac{e}{m_e f_c}, \tag{18}$$

$$f_c = n_p \sigma_\theta \mathrm{v}_e, \tag{19}$$

В рамках предложенной модели концентрация центров рассеяния n_p возрастает со временем:

$$n_p(t) = \frac{N_{liq} + [1-\gamma] N_{sel}(t)}{\Omega - \Omega_1}, \tag{20}$$

где N_{lip} — число центров рассеяния в области моноатомной жидкости:

$$N_{liq} = \frac{\rho_{liq}(\Omega - \Omega_1)}{m_p}. \tag{21}$$

Подстановкой выражений (18–20) в (17) получается зависимость удельного электрического сопротивления от параметров модели во времени:

$$r(t) = \frac{m_e \sigma_\theta \mathrm{v}_e \left(N_{liq} + [1-\gamma] N_{sel} \right)}{e^2 N_e}, \tag{22}$$

где $N_e = n_e(\Omega - \Omega_1)$ есть число электронов проводимости в области пространства расплава, занимаемой одним кластером.

Очевидно, что в начальный момент времени:

$$r_{\min} = r(t=0) = \frac{m_e \sigma_\theta \mathrm{v}_e N_{liq}}{e^2 N_e}, \tag{23}$$

поскольку $N_{sel} = 0$ (ни один атом ещё не покинул кластер), и возрастание удельного электрического сопротивления во времени будет определяться быстротой возникновения новых центров рассеяния за счёт распада кластера и перехода составлявших его атомов в область моноатомной жидкости. Для конечного (при $t = t_f$) значения удельного электрического сопротивления выражение (22) преобразуется к виду:

$$r_{\max} = r(t = t_f) = \frac{m_e \sigma_\theta \nu_e \left(N_{liq} + (1-\gamma)\beta N_{rel} \right)}{e^2 N_e}, \qquad (24)$$

где безразмерный коэффициент $\beta \le 1$ есть доля атомов, первоначально входивших в состав кластера и покинувших его в процессе распада. Именно этот коэффициент определяет полноту распада кластера, когда утверждается, что кластер распадается «практически» полностью и расплав становится «практически» моноатомной жидкостью.

Фактически, кластеры никогда полностью не распадаются, оставляя после себя некие кластерные остовы. В пользу неокончательного распада кластера свидетельствует экспериментальный факт сохранения ближнего порядка (например, по спектрам рентгеновской дифракции) [10].

Величины начального r_{min} и конечного r_{max} удельного электрического сопротивления расплава могут быть установлены в процессе эксперимента, т.е. полагаются априорно известными по отношению к модели. Тогда, количество электронов проводимости в области, занимаемой одним кластером, выражается из формулы (23):

$$N_e = \frac{m_e \sigma_\theta \nu_e N_{liq}}{e^2 r_{\min}}. \qquad (25)$$

Для окончательного описания модели следует установить связь между параметрами модели: α, β, γ и макропараметрами системы. Наблюдаемое в эксперименте отношение максимального и минимального удельных электрических сопротивлений в рамках модели выражается отношением выражения (24) к (23):

$$\frac{r_{\max}}{r_{\min}} = 1 + \frac{(1-\gamma)\beta N_{rel}}{N_{liq}}. \qquad (26)$$

Из формулы (21) выражается объём моноатомной жидкости $\Omega - \Omega_i$ и записывается в явном виде через размерные параметры модели R_c и R_i:

$$\frac{4}{3}\pi\left(R_i^3 - R_c^3\right) = \frac{m_p N_{liq}}{\rho_{liq}}. \qquad (27)$$

Из формулы (27) в явном виде выражается радиус свободной зоны вокруг кластера R_i; из формулы (26) выражается число рассеивающих центров N_{liq} в области моноатомного расплава, содержащей один кластер; радиус самого кластера R_c определяется по выражению (14). Итоговая формула, связывающая все параметры модели, принимает вид:

$$R_i = \sqrt[3]{\frac{3m_p N_{rel}}{4\pi}\left(\frac{\beta\left[1-\gamma\right]}{\rho_{liq}\left[\frac{r_{\max}}{r_{\min}}-1\right]}+\frac{1}{\alpha\rho_{ss}}\right)} \qquad (28)$$

Эксперимент и проверка модели. Необходимые для моделирования значения удельного электрического сопротивления r_{max} и r_{min} были получены в ходе проведения эксперимента по исследованию температурных зависимостей электросопротивления сложнолегированного сплава на основе никеля. Электросопротивление рассматривается как одна из основных структурно-чувствительных характеристик определения структурных изменений в сплаве с течением времени и при изменении температуры. Эксперимент проводился по методу Регеля [60–62]. В качестве модельного материала использовался жаропрочный никелевый сплав ЖС6У (плотность при равноосной кристаллизации 8400 $кг/м^3$), химический состав которого приведен в табл. 1.

Таблица 1

Химический состав сплава ЖС6У, вес. %, никель – баланс

Fe	C	Si	Mn	Ni	S	P	Cr	Ce	Mo	W	Co	Nb	Ti	Al	Zr	B	Pb	Bi	Y
до 1	0,13 – 0,2	до 0,4	до 0,4	54,3 – 62,7	до 0,01	до 0,015	8 – 9,5	до 0,02	1,2 – 2,4	9,5 – 11	9 – 10.5	0,8 – 1,2	2 – 2,9	5,1 – 6	до 0,04	до 0,035	до 0,001	до 0,0005	до 0,01

В эксперименте были получены политермы нагрева и охлаждения, а также изотермы при трёх различных температурах. Политермы нагрева и охлаждения, а также изотермы при различных температурах (которые должны рассматриваться в привязке к политермам, масштаб оси ординат соответствует 1 Ом·м) приведены на Рис. 2.

Для возможности численного сравнения с разрабатываемой моделью политермы нагрева $r_{T\uparrow}$ и охлаждения $r_{T\downarrow}$ расплава были аппроксимированы функциональными аналитическими зависимостями вида:

$$r_{T\uparrow} = A_1 + B_1 T + \frac{C}{1+\exp\left(-\frac{T-T_{hi}}{\tau}\right)}, \qquad (29)$$

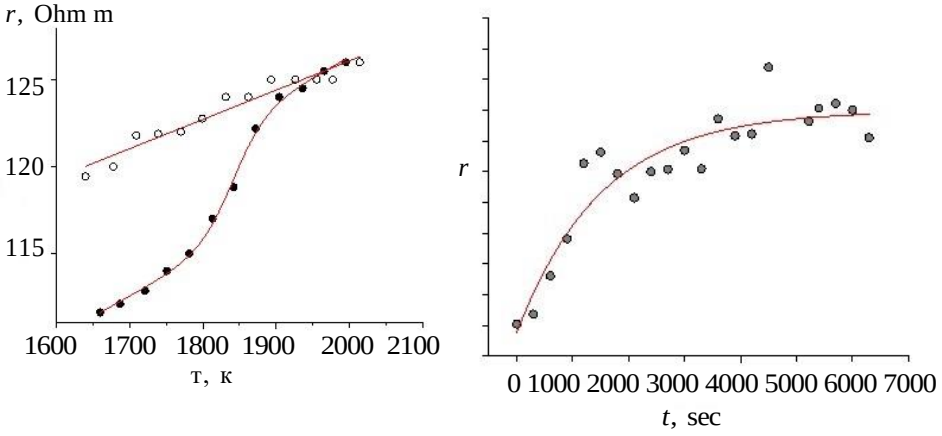
$$r_{T\downarrow} = A_2 + B_2 T.$$

Было также установлено, что изотермы удельного электрического сопротивления расплава при различных температурах хорошо аппроксимируются общей зависимостью вида:

$$r(t) = \left(r_{\max} - r_{\min}\right)\left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right)\right] + r_{\min}, \qquad (30)$$

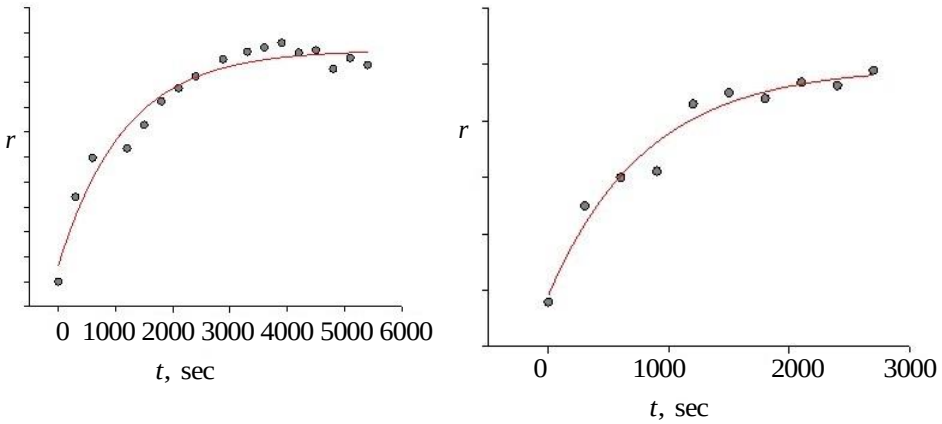
где $r_{\max}$, $r_{\min}$ определяются по политермам (29).

Аппроксимация осуществлялась в пакете MicroCal OriginPro 2018 по методу наименьших квадратов. Кривые аппроксимации экспериментальных данных приведены на Рис. 2.



а) Политерма нагрева (снизу), политерма охлаждения (сверху)

б) Изотерма при 1690 K



в) Изотерма при 1721 K

г) Изотерма при 1752 K

Рис. 2. Политермы нагрева и охлаждения, изотермы модельного сплава ЖС6У; точки — экспериментальные значения, линии — аппроксимации

Значения рассчитанных коэффициентов зависимостей (29, 30) и коэффициенты детерминации соответствующих моделей представлены в табл. 2. Следует принять во внимание, что все эмпирические коэффициенты рассчитывались только для диапазона изменения параметров реального эксперимента; иначе говоря, за пределами изменения параметров погрешность коэффициентов (табл. 2) не исследовалась.

Таблица 2

Рассчитанные коэффициенты при аппроксимациях (29, 30)

Коэффициент	Расчетное значение	Условия эксперимента	Единица измерения	Коэф. детерминации аппроксимации (R^2)
A_1	73 ± 8,5	единый	Ом·м	0,99
B_1	0,023 ± 0,005	единый	Ом·м·К$^{-1}$	
C	8,8 ± 1,4	единый	безразмерный	
τ	22,8 ± 6,3	единый	с	
T_{hi}	1841,2 ± 3,8	единый	К	
A_2	92,4 ± 2,4	единый	Ом·м	0,94
B_2	0,017 ± 0,001	единый	Ом·м·К$^{-1}$	
τ_1	1511 ± 335 1156 ± 161 812 ± 165	T=1690 K T=1721 K T=1752 K	с	0,86 0,95 0,96

Целью дальнейшего моделирования является варьирование и нахождение такого набора входных параметров модели (28) T, B, N_{rel}, α, β, γ, при которых зависимость удельного электрического сопротивления (22) совпадала бы с экспериментальными данными (аппроксимация (30)).

Моделирование осуществляется для трех температурных точек, в соответствии с имеющимися экспериментальными данными для изотерм (рис. 2б-г)). Для политермического моделирования используются следующие эвристические условия: $B(T) = const$, $\gamma(T) = const$. Значения этих величин оптимизируются по критерию наилучшего совпадения с экспериментальными данными временной эволюции кластера (рис. 2б-г) для каждой из трех температур.

Также были наложены следующие три физически обоснованные условия для температурной эволюции кластера:

$$N_{rel}(T\uparrow)\downarrow,\ \alpha(T\uparrow)\downarrow,\beta(T\uparrow)\uparrow.$$

Обоснованность первого условия легко установить из рис. 2а: с ростом температуры нижняя граница удельного электрического сопротивления движется вверх, а это означает, что в области моноатомной жидкости возникают новые центры рассеяния электронов, появляющиеся из-за диффузии активных частиц кластера. Второе условие означает, что с ростом температуры, плотность кластера стремится к плотности расплава, что является температурным аналогом граничных условий временной эволюции кластера. И последнее условие показывает, что с уменьшением количества частиц в кластере, требуемая доля покинувших кластер частиц, для достижения требуемого уровня удельного сопротивления, повышается.

Математическое моделирование молекулярной динамики проводилось в среде Comsol 5.5 в модуле трассировки траекторий частиц. В рамках модельных исследований было проведено более 300 итераций расчета для различных наборов параметров. В Табл. 3 собраны наиболее близкие к экспериментальным данным входные параметры модели, на рис. 3 показаны соответствующие графики временной эволюции кластера для трех температурных точек. Для итоговой модели, применяя граничные и эвристические условия для описания температурной эволюции кластера, указанные выше, из данных приведенных в табл. 2, для каждой температурной точки были выбраны следующие значения входных параметров:

– при $T = 1690K$: $N_{rel} = 5000$; $\alpha = 0,970$; $\beta = 0,97$; $B = 10,3$; $\gamma = 1/10$;
– при $T = 1721K$: $N_{rel} = 3000$; $\alpha = 0,967$; $\beta = 0,96$; $B = 10,4$; $\gamma = 1/20$;
– при $T = 1752K$: $N_{rel} = 2000$; $\alpha = 0,965$; $\beta = 0,98$; $B = 10,4$; $\gamma = 1/250$.

На графики (рис. 3) вынесены те варианты моделей, для которых коэффициенты детерминации наибольшие (в табл.3, последняя строчка, выделены жирным шрифтом).

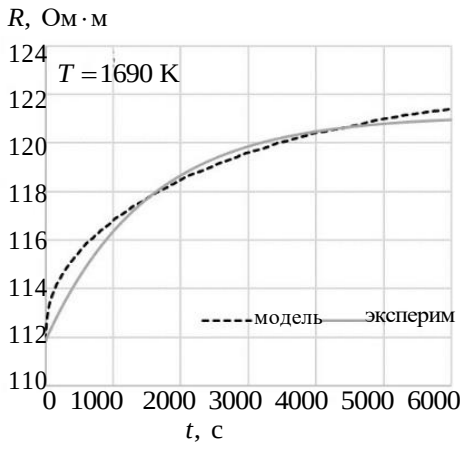
Температурные зависимости наиболее значимых параметров кластера показаны на рис. 4. Для более точной аппроксимации была выбрана дополнительная четвертая температурная точка $T = 2100\ K$, которая расположена в области, в которой ожидается достижение практически полностью однородного расплава, т.е. выполняются эквивалентные временным граничные условия при достижении t_f. Температурная зависимость радиуса кластера $R_c(T)$ хорошо аппроксимируется экспоненциальной зависимостью, а вязкости $\mu_c(T)$ — гиперболической (31) (см. рис.4):

$$R_c(T) = y_0 + A_3 \exp\left[\frac{-(T - T_{liq})}{\tau_2}\right],$$
$$\mu_c(T) = a(T - T_{liq})^c. \qquad (31)$$

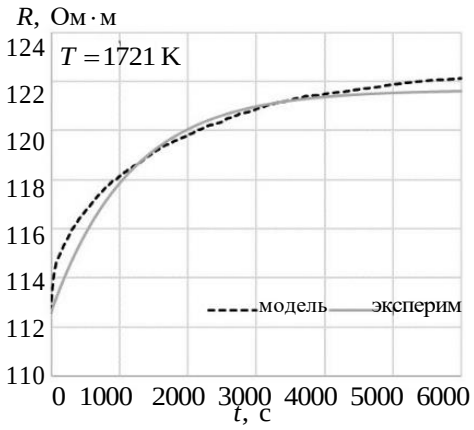
Таблица 3

Параметры модели, обеспечивающие наилучшую точность

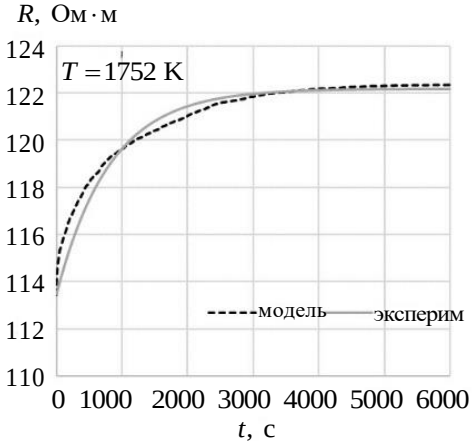
T, К		**1690**			**1721**			**1752**		
№ эксп.		1	2	3	1	2	3	1	2	3
Набор входных параметров по (Рис. 3):	*B*	10,4	10,3	10,3	10,4	10,4	10,4	10,4	10,4	10,4
	N_{rel}	4500	5000	5000	3000	3000	3000	2000	2000	1500
	α	0,97	0,97	0,97	0,967	0,967	0,965	0,965	0,964	0,962
	β	0,95	0,95	0,97	0,96	0,96	0,96	0,98	0,98	0,99
	γ	1/30	1/200	1/10	1/250	1/10	1/250	1/250	1/250	1/250
Параметры модели при $t = 0$	R_i, нм	5,38	5,62	5,49	4,8	4,73	4,8	4,28	4,28	3,9
	R_c, нм	2,33	2,41	2,41	2,04	2,04	2,04	1,78	1,78	1,62
	μ_c, Па·с	3,93	2,95	2,95	2,76	2,76	2,19	2,19	1,95	1,55
	ρ_c, кг/м^3	8148	8148	8148	8123	8123	8106	8106	8098	8081
Коэф. детерм. аппр.		0,84	0,92	**0,96**	0,96	**0,96**	0,94	**0,96**	0,95	0,84



а) Политерма нагрева (снизу), политерма охлаждения (сверху)

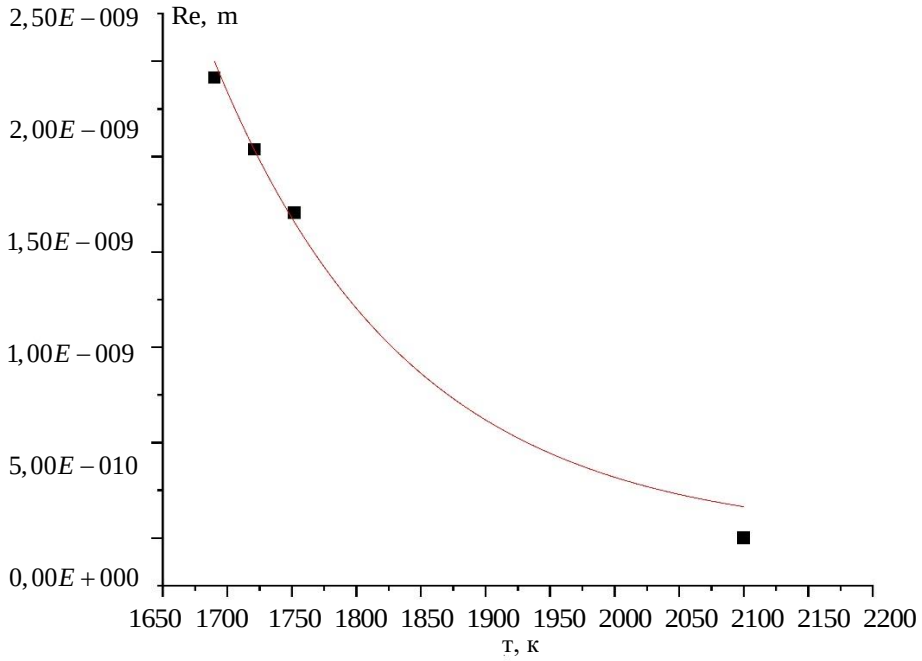


б) Изотерма при 1690 К

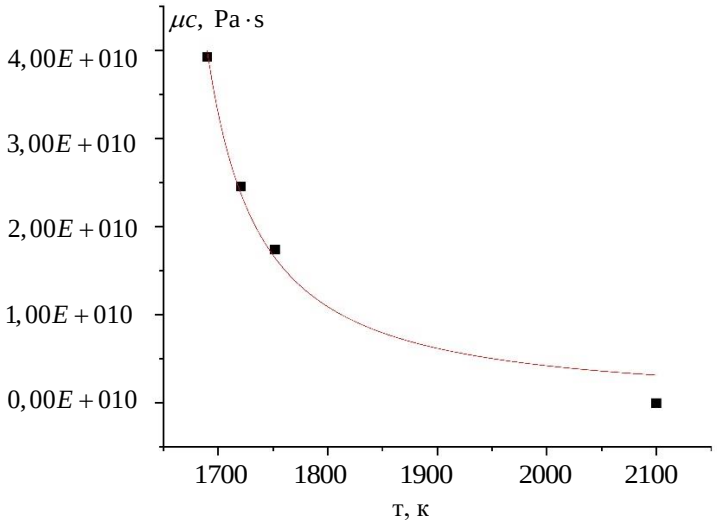


в) Изотерма при 1721 K

Рис. 3. Изотермы электросопротивления сплава ЖС6У: наложение аппроксимаций экспериментальных данных (по Рис. 2б-г) (сплошные линии) и результатов моделирования с наилучшими коэффициентами детерминации (пунктирные линии)



а) Политерма нагрева (снизу), политерма охлаждения (сверху)



б) Изотерма при 1690 K

Рис. 4. Результаты моделирования динамики поведения радиуса кластера (слева) и его динамической вязкости (справа) с ростом температуры

Температура T_{liq} — температурная точка ликвидуса, в данном исследовании равная 1633 К. Значение параметров аппроксимации (31):

$$y_0 = 0 \pm 3.3 \times 10^{-10},$$

$$A_3 = 3.65 \times 10^{-9} \pm 5.65 \times 10^{-10},$$

$$\tau_2 = 150,47 \pm 66,47,$$

$$a = 5,249 \times 10^{12} \pm 3,813 \times 10^{12},$$

$$c = -1,206 \pm 0,171.$$

Анализируя ход политерм (29), можно заключить, что в точке ликвидуса динамическая вязкость кластера становится бесконечно большой, что означает прекращение процесса броуновской диффузии. Физически, процесс разрушения кластера становится очень медленным, что имеет и экспериментальное подтверждение.

Заключение. По итогам проведенного исследования можно сделать ряд выводов, которые в целом подтверждают выводы других исследователей, упомянутых во Введении, и обсуждаемых предположений.

Во-первых, можно заключить, что модель броуновской диффузии и теория проводимости Друде применимы для описания, как временной, так и температурной эволюции кластера.

Далее, по результатам моделирования можно заключить, что кластер представляет из себя неоднородное включение в жидкую среду расплава, по характеристикам близкое к аморфному металлу или металлическому стеклу. Ни при временной, ни при температурной эволюции кластер полностью не распадается, поэтому в области анализа

всегда сохраняется ближний порядок, что подтверждается экспериментально.

В-третьих, вероятнее всего, кластер не является однородным по своей внутренней структуре. Анализируя временную эволюцию кластера и его неполный распад в ней, можно сделать предположение, что центральная область кластера является гораздо более плотной и вязкой, нежели приграничный с моноатомным расплавом слой.

Дискуссионным остается вопрос о времени жизни кластера и стабильности проявляемых им свойств. По результатам эксперимента можно высказать предположение, что характеристическое время распада кластера (формула (20), таблица 2) связано с температурой расплава при изотермической выдержке простым соотношением (32).

$$\left(T - T_{liq}\right)\tau_1 = const \qquad (32)$$

При моделировании были получены следующие параметры кластера для различных температур:

Таблица 4

?

Температура, К	1690	1721	1752
Количество частиц в составе кластера	5000	3000	2000
Коэф. плотности (относительно твердого в-ва)	0,970	0,967	0,965
Доля атомов, входивших в состав кластера и покинувших его в процессе распада	0,970	0,960	0,980
Эмпирический коэф. динамической вязкости кластера (10)	10,30	10,40	10,40
Параметр замещения – отношение покинувших кластер атомов к пришедшим	0,100	0,050	0,004
Радиус кластера, Å	24,14	20,38	17,82
Радиус свободной зоны вокруг кластера, Å	56,23	48,04	42,76
Динамическая вязкость кластера, $*10^{10}$ Па*с	2,951	2,761	1,953
Плотность кластера, кг/м^3	8148	8123	8098

Согласно результатам моделирования, плотность кластера в рассматриваемом температурном диапазоне изменяется линейно с изменением температуры, что соответствует экспериментальным данным, аналогично ведет себя и доля покинувших кластер атомов (она условно постоянна), при этом коэффициент плотности меняется нелинейно. Количество частиц в кластере, радиус кластера и радиус свободной зоны также имеют нелинейный (экспоненциальный, $R^2 = 0,99$) характер спада с ростом температуры, при этом свободная зона уменьшается несколько быстрее, чем сокращается объем кластера (отношение их объемов изменяется практически линейно от 2,33 до 2,40). Динамическая вязкость кластера с ростом температуры уменьшается достаточно быстро по существенно нелинейному закону.

Направления дальнейшего совершенствования модели эволюции кластера:

1. Моделирование нескольких кластеров в рамках одной области анализа, для учета их взаимного влияния друг на друга.
2. Моделирование неоднородного кластера, для подтверждения, выдвинутого выше предположения.
3. Включение в систему второго типа активных частиц, для моделирования динамики электронов для уточнения теории проводимости в металлических расплавах.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Johnston R. L. *Atomic and Molecular Clusters*. London, Taylor and Francis, 2002, 208 p.
[2] Коттон Ф. А., Уолтон Р. *Кратные связи металл — металл*. Москва, Мир, 1985, 535 с.
[3] Губин С. П. *Химия кластеров: Основы классификации и строение*. Москва, Наука, 1987, 262 с.
[4] Haberland H. *Clusters of atoms and moleculs*. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1994, 425 p.
[5] Quinn C.M., McKernan J.G.R., Redmond G.B. Point-group regular representations and the densities of states in finite metal clusters. *Faraday Transactions 2: Molecular and Chemical Physics. Journal of the Chemical Society*, 1984, vol. 80, no. 12, pp. 1507-1511.
[6] Суздалев И.П. *Нанотехнология: физикохимия нанокластеров, нано-структур, наноматериалов*. Москва, УРСС, 2005, 589 с.
[7] Френкель Я.И. *Кинетическая теория жидкостей*. Ленинград, Наука, 1975, 594 с.
[8] Elliott S.R. Medium-Range Structural Order in Covalent Amorphous Solids. *Nature*, 1991, vol. 354, no. 6353, pp. 445-452.
[9] Лифшиц Б.Г. *Металлография*. Москва: Металлургия, 1990, 236 с.
[10] Жукова Л.А. *Строение металлических жидкостей*: Уч. пособие. Екатеринбург, УГТУ-УПИ, 2002, 46 с.
[11] Архаров В.И., Новохатский И.А. *О квазиполикристаллической модели расплавов*. В сб.: Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов. Свердловск, 1974, с. 52-54.
[12] Полухин В.А., Ватолин Н.А., Потемкина Е.А. Структурные единицы ближнего порядка в аморфных металлах и полупроводниках. *Материаловедение*. 2002, №2, с. 8-13.
[13] Turnball D. Kinetics of solidification of supercooled liquid mercury droplets. *The Journal of Chemical Physics*. 1952, vol. 20, no. 3, pp. 411-424.
[14] Ватолин Н.А., Пастухов Э.А., Лисин В.Л., Денисов В.М., Качин С.В. *Дифракционные исследования строения высокотемпературных расплавов*. Екатеринбург, УрО РАН, 2003, 357 с.
[15] Попель С.И., Спиридонов М.А., Жукова Л.А. *Атомное упорядочение в расплавленных и аморфных металлах (по данным электронографии)*. Екатеринбург, УГТУ, 1997, 382 с.
[16] Попель П.С. Метастабильная микрогетерогенность расплавов эвтектикой и монотектикой и ее влияние на структуру сплава после затвердевания. *Расплавы*, 2005, № 1, с. 22-48.

[17] Попель П.С., Преснякова Е.Л., Павлов В.А., Архангельский Е.Л. Область существования метастабильной квазиэвтектической структуры в системе Sn-Pb. *Металлы*, 1985, № 4, с. 198-201.

[18] Гаврилин И.В. Основы модели микронеоднородного строения жидких металлов. *Повышение качества отливок и слитков*, 1979, № 2, с. 5.

[19] Гаврилин И.В. *Плавление и кристаллизация металлов и сплавов*. Владимир. Влад. Гос. Университет, 2000, 260 с.

[20] Скребцов А. М. Изучение структурных перестроек в жидких металлах на модельном расплаве. *Вісник ПДТУ. Серія: Технічні науки*, 2008, № 18, с. 61–65.

[21] Новохатский И. А., Ярошенко А. В. Определение плотности металлических жидкостей в приповерхностных слоях с учетом явления кластерной адсорбции. *Труды Одесского политехнического университета*, 2002, № 1 (17), с. 1–5.

[22] Гей С. Л. Особенности процесса кристаллизации металлов. *Вестник Гродненского государственного университета имени Янки Купалы. Серия 6. Техника*, 2012, № 2, с. 36–43.

[23] Ильинский А. Г. Особенности атомного строения металлических материалов в жидком и аморфном состояниях. *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*, 2010, Т. 8, № 3, с. 483–502.

[24] Li Y., Chen W. Z., Dong B. S., Zhou S. X. Effects of metalloid content on viscosity of Fe-Si-B-P-C alloy melt. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2018, vol. 490, pp. 31-34.

[25] Zu F. Q., Zhou B., Li X. F., Yi X., Chen Y. Effect of liquid-liquid structure transition on solidification of Sn-Bi alloys. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2007, vol. 17, no. 5, pp. 893-897.

[26] Rao K.R. Phase transitions in liquids. *Current Science*, 2001, vol. 80, no. 9, pp. 1098–1100.

[27] Yarger J.L., Wolf G.H. Polymorphism in Liquids. *Science*, 2004, vol. 306, no. 5697, pp. 820–821.

[28] Tyagunov A., Milder O., Tarasov D., Tyagunov G. LLT Structural Changes in Metal Liquids as a Basis for a Thermal Treatment Technology of Melts: a review. *Phase Transitions*, 2021, vol. 94, no. 1, pp. 1–22.

[29] Myers T.G., Hennessy M.G., Calvo-Schwarzwälder M. The Stefan problem with variable thermophysical properties and phase change temperature. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2020, vol. 149, pp. 118975.

[30] Koga S., Diagne M., Krstic M. Control and State Estimation of the One-Phase Stefan Problem via Backstepping Design. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 2019, vol. 64, no. 2, pp. 510–525.

[31] Markov S.I. Multiscale Nonconformal Finite Element Methods for Solving Problems with Moving Boundaries. *XIV International Scientific-Technical Conference on Actual Problems of Electronics Instrument Engineering (APEIE)*, Russia, Novosibirsk, 2018, no. 18303723.

[32] Munjiza A. The combined finite-discrete element method for structural failure and collapse. *Engineering fracture mechanics*, 2004, vol. 71, no. 4-6, pp. 469-483.

[33] Пестов К.Н., Любимова О.Н., Останин М.В. Об одном численном методе решения задач типа Стефана. *Вестник ЧГПУ. Серия: Механика предельного состояния*, 2019, Т. 41, № 3, с. 51–60.

[34] He L., Zheng J., Zheng Ya., Chen J., Zhou X., Xiao Z. Parallel algorithms for moving boundary problems by local remeshing. *Engineering Computations*, 2019, vol. 36, no. 8, pp. 2887–2910.

[35] Гришанов А.Н. Эффективный метод построения приближенных решений с применением многосеточных конечных элементов. *Доклады Академии наук высшей школы Российской Федерации*, 2018, № 3(40), с. 47–57.

[36] Kees C.E., Farthing M.W., Berger R.C., Lackey T.C. A Review of Methods for Moving Boundary Problems. Navigation Systems Research Program, 2009, Vol. ERDC/CHL TR-09-10.

[37] Bowler K.C., Pawley G.S. Molecular Dynamics and Monte Carlo Simulations in Solid-state and Elementary Particle Physics. *Proceedings of the IEEE*, 1984, vol. 72, no. 1, pp. 42-55.

[38] Unge M. Electron mobility edge in amorphous polyethylene. *IEEE International Conference on Dielectrics (ICD)*, 2016, vol. 2, pp. 828-831.

[39] Baba H., Urano R., Nagai T., Okazaki S. Prediction of self-diffusion coefficients of chemically diverse pure liquids by all-atom molecular dynamics simulations. *Journal of Computational Chemistry*, 2022, vol. 43, no. 28, pp. 1892–1900.

[40] Gross W.J., Vasileska D., Ferry D.K. A Novel Approach for Introducing the Electron–Electron and Electron–Impurity Interactions in Particle-Based Simulations. *IEEE Electron device letters*, 1999, vol. 20, no. 9, pp. 463-465.

[41] Zeyde K.M. The Motion of Electrons under the Action of Inertial Forces in the Rarefied Medium. *2022 3rd URSI Atlantic and Asia Pacific Radio Science Meeting (AT-AP-RASC)*, 2022. DOI: 10.23919/AT-AP-RASC54737.2022.9814326.

[42] Williams J.R., O'Connor R. Discrete Element Simulation and the Contact Problem. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 1999, vol. 6, no. 4, pp. 279—304.

[43] Thornton A., Weinhart T., Luding S., Bokhove O. Modeling of particle size segregation: calibration using the discrete particle method. *International Journal of Modern Physics C*, 2012, vol. 23, no. 8, pp. 1240014.

[44] Zeyde K.M. Electrodynamic interpretation of the results of electron dynamics modeling using the discrete element method. *Ural Radio Engineering Journal*, 2020, vol. 4, no. 1, pp. 33-50.

[45] Zeyde K.M. Mercury DPM adaptation for electromagnetic microscopic DEM simulation. *2019 IEEE-APS Topical Conference on Antennas and Propagation in Wireless Communications (APWC 2019)*, 2019, p. 136.

[46] Li X., Li D., Yue H., Zhang Z., Liu K., Fan M., Chen D. A high precision particle-moving algorithm for particle-in-cell simulation of plasma. *IEEE Transactions on magnetics*, 2015, vol. 51, no. 3, pp. 1-4.

[47] Kancleris Z., Šlekas G., Matulis A. Modeling of Two-Dimensional Electron Gas Sheet in FDTD Method. *IEEE Transactions on antennas and propagation*, 2013, vol. 61, no. 2, pp. 994–996.

[48] Romanczuk P., Bär M., Ebeling W., Lindner B., Schimansky-Geier L. Active Brownian particles. From individual to collective stochastic dynamics. *The European Physical Journal. Special Topics*, 2012, vol. 202, pp. 1–162.

[49] Мелких А.В., Повзнер А.А., Шумихина К.А. *Молекулярная физика. Учебное пособие*. Екатеринбург, УГТУ-УПИ, 2006, 242 с.

[50] Andrade-Neto A.V. Dielectric function for free electron gas: comparison between Drude and Lindhard model. *Revista Brasileira de Ensino de F′ısica*, 2017, vol. 39, no. 2, pp. 1-8.

[51] Chang T., Mukherjee S., Watkins N.N., Stobbe D.M., Mays O., Baluyot E.V., Pascall A.J., Tringe J.W. In situ monitoring for liquid metal jetting using a millimeter wave impedance diagnostic. *Scientific Reports*, 2020, vol. 10, no. 22325, pp. 1-9.

[52] Wang L. Atomistics of self-diffusion in liquid metals. *EPJ Web of Conferences*, 2017, vol. 151, no. 02004, pp. 1-9.

[53] Rizvi S.M.H., Mazhari B. An Analytical Approach to Model the Effects of Diffusion in Space-Charge-Limited Current in Organic Semiconductor Films. *2018 4th IEEE International Conference on Emerging Electronics (ICEE)*, 2019, art. no. 19256716. DOI: 10.1109/ICEE44586.2018.8937967.

[54] Kim M., Zydney A.L. Effect of electrostatic, hydrodynamic, and Brownian forces on particle trajectories and sieving in normal flow filtration. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2004, vol. 269, no. 2, pp. 425–431.

[55] Абгарян К.К., Елисеев С.В., Журавлев А.А., Ревизников Д.Л. Высокоскоростное внедрение. Дискретно-элементное моделирование и эксперимент. *Компьютерные исследования и моделирование*, 2017, Т. 9, № 6, с. 937–944.

[56] Heitzinger C., Ringhofer C., Ahmed S., Vasileska D. Accurate three-dimensional simulation of electron mobility including electron-electron and electron-dopant interactions. *Proceedings - Electrochemical Society*, 2005, vol. PV 2004-13, pp. 165-183.

[57] Bird R.B., Stewart W.E., Lightfoot E.N. *Transport Phenomena*. Hoboken, John Wiley & Sons, 2007, 905 p.

[58] Ojovan M.I. Viscous flow and the viscosity of melts and glasses. *Physics and Chemistry of Glasses*, 2012, vol. 53, no. 4, pp. 143–150.

[59] Varshneya A.K. *Fundamentals of Inorganic Glasses*. New York, Academic Press, 1994, 570 p.

[60] Повадатор А.М., Вьюхин В.В., Цепелев В.С., Тягунов А.Г. Способ бесконтактного измерения электрического сопротивления металлического твердого образца или его расплава методом вращающегося магнитного поля и устройство для его осуществления. Патент на изобретение №2299425, 20 мая 2007г.

[61] Тягунов Г.В., Цепелев В.С., Тягунов А.Г., Барышев Е.Е., Вьюхин В.В., Поводатор А.М. Устройство для определения интенсивности структурной перестройки расплавов жаропрочных сплавов. Патент РФ № 157157, 20.11.2015.

[62] Тягунов Г.В., Цепелев В.С., Поводатор А.М., Барышев Е.Е., Вьюхин В.В., Тягунов А.Г., Мушников В.С. Устройство оценки равновесности металлических расплавов. Патент на полезную модель RUS 182131, 26.12.2017..

Статья поступила в редакцию 24.04.2023

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Тягунов А.Г., Зейде К.М., Мильдер О.Б., Тарасов Д.А. Диффузионная модель эволюции кластера в металлическом расплаве жаропрочного никелевого сплава. *Математическое моделирование и численные методы,* 2023, № 2, с. 3–32.

Тягунов Андрей Геннадьевич — канд. техн. наук, доцент департамента информационных и автоматики Института радиоэлектроники и информационных технологий Уральского федерального университета. e-mail: adi8@yandex.ru

Зейде Кирилл Михайлович — канд. физ.-мат. наук, PhD student, University of Genoa, DITEN. e-mail: kirill.zeide@edu.unige.it

Мильдер Олег Борисович — канд. физ.-мат. наук, доцент департамента информационных и автоматики Института радиоэлектроники и информационных технологий Уральского федерального университета. e-mail: milder@mail.ru

Тарасов Дмитрий Александрович — канд. физ.-мат. наук, доцент департамента информационных и автоматики Института радиоэлектроники и информационных технологий Уральского федерального университета. e-mail: datarasov@yandex.ru

A Diffusion Model of Cluster Evolution in a Heat-Resistant Nickel Alloy Metal Melt

© A.G. Tyagunov[1], K.M. Zeyde[2], O.B. Milder[1], D.A. Tarasov[1]

[1]Ural Federal University, Yekaterinburg, Mira, 19, 620002 Russia
[2]University of Genoa, Genoa, Via Opera Pia 11a, 16121 Italy

*In this work, a mathematical model of the thermo-temporal evolution of a cluster in the melt of a heat-resistant nickel alloy ZhS6U is constructed. An initial-boundary value problem with a moving boundary is formulated, for the solution of which numerical modeling is used by the particle trajectory method, and a number of classical physical theories are used to describe evolutionary processes. To check the accuracy of the model, a physical experiment is involved in constructing polytherms and isotherms of the electrical resistance of the alloy under consideration. It has been confirmed that the Brownian diffusion model and Drude's theory of conductivity are applicable to describe both the temporal and temperature evolution of a cluster. The approach to modeling based on "hard balls" also justified itself. According to the simulation results, in the time range from 1690 to 1752 K, the number of particles in the cluster varies from 5000 to 2000, the average dynamic viscosity of the cluster varies from 3 to 2 * 10^{10} Pa * s, however, it is assumed that the central part is much denser than periphery. The cluster radius varies from 24 to 18 Å, and the radius of the free zone around the cluster varies from 56 to 43 Å. The directions of further development of the model are determined.*

***Keywords**: numerical simulation, moving boundary problem, molecular dynamics, melt, electrical resistance*

REFERENCES

[1] Johnston R. L. *Atomic and Molecular Clusters*. London, Taylor and Francis, 2002, 208 p.

[2] Kotton F. A., Uolton R. *Kratnye svyazi metall — metall [Multiple metal-metal bonds]*. Moscow, Mir Publischers, 1985, 535 p.

[3] Gubin S. P. *Himiya klasterov: Osnovy klassifikacii i stroenie [Chemistry of clusters: Basics of classification and structure]*. Moscow, “Nauka” Publishers, 1987, 262 p.

[4] Haberland H. *Clusters of atoms and moleculs*. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1994, 425 p.

[5] Quinn C.M., McKernan J.G.R., Redmond G.B. Point-group regular representations and the densities of states in finite metal clusters. *Faraday Transactions 2: Molecular and Chemical Physics. Journal of the Chemical Society*, 1984, vol. 80, no. 12, pp. 1507-1511.

[6] Suzdalev I.P. *Nanotekhnologiya: fizikohimiya nanoklasterov, nano-struktur, nanomaterialov [Nanotechnology: physical chemistry of nanoclusters, nanostructures, nanomaterials]*. Moscow, URSS, 2005, 589 p.

[7] Frenkel' YA.I. Kineticheskaya teoriya zhidkostej [Kinetic theory of liquids]. Leningrad, “Nauka” Publishers, 1975, 594 p.

[8] Elliott S.R. Medium-Range Structural Order in Covalent Amorphous Solids. *Nature*, 1991, vol. 354, no. 6353, pp. 445-452.

[9] Lifshic B.G. *Metallografiya [Metallography]*. Moscow, Metallurgiya [Metallurgy], 1990, 236 p.

[10] ZHukova L.A. *Stroenie metallicheskih zhidkostej: Uch. posobie [The structure of metallic liquids: Uch. allowance]*. Ekaterinburg, USTU, 2002, 46 p.

[11] Arkharov V.I., Novokhatsky I.A. *O kvazipolikristallicheskoj modeli rasplavov [About the quasi-polycrystalline model of melts]*. In the collection: Stroenie i svojstva metallicheskih i shlakovyh rasplavov [Structure and properties of metal and slag melts]. Sverdlovsk, 1974, pp. 52-54.

[12] Polukhin V.A., Vatolin N.A., Potemkina E.A. Strukturnye edinicy blizhnego poryadka v amorfnyh metallah i poluprovodnikah [Structural units of short-range order in amorphous metals and semiconductors]. *Inorganic Materials: Applied Research*. 2002, №2, pp. 8-13.

[13] Turnball D. Kinetics of solidification of supercooled liquid mercury droplets. *The Journal of Chemical Physics*. 1952, vol. 20, no. 3, pp. 411-424.

[14] Vatolin N.A., Pastukhov E.A., Lisin V.L., Denisov V.M., Kachin S.V. *Difrakcionnye issledovaniya stroeniya vysokotemperaturnyh rasplavov [Diffraction studies of the structure of high-temperature melts]*. Ekaterinburg, UB RAS, 2003, 357 p.

[15] Popel S.I., Spiridonov M.A., Zhukova L.A. *Atomnoe uporyadochenie v rasplavlennyh i amorfnyh metallah (po dannym elektronografii) [Atomic ordering in molten and amorphous metals (according to electron diffraction data)]*. Ekaterinburg, USTU, 1997, 382 p.

[16] Popel P.S. Metastabil'naya mikrogeterogennost' rasplavov evtektikoj i monotektikoj i ee vliyanie na strukturu splava posle zatverdevaniya [Metastable microheterogeneity of eutectic and monotectic melts and its effect on the alloy structure after solidification]. *Russian Metallurgy*, 2005, no. 1, pp. 22-48.

[17] Popel P.S., Presnyakova E.L., Pavlov V.A., Arkhangelsky E.L. Oblast' sushchestvovaniya metastabil'noj kvazievtekticheskoj struktury v sisteme Sn-Pb [The region of existence of a metastable quasi-eutectic structure in the Sn-Pb system]. *Russian Metallurgy (Metally)*, 1985, no. 4, pp. 198-201.

[18] Gavrilin I.V. Osnovy modeli mikroneodnorodnogo stroeniya zhidkih metallo [Fundamentals of the model of microinhomogeneous structure of liquid metals]. *Povyshenie kachestva otlivok i slitkov [Improving the quality of castings and ingots]*, 1979, no. 2, 5 p.

[19] Gavrilin I.V. *Plavlenie i kristallizaciya metallov i splavov [Melting and crystallization of metals and alloys]*. Vladimir, VISU, 2000, 260 p.

[20] Skrebtsov A. M. Izuchenie strukturnyh perestroek v zhidkih metallah na model'nom rasplave [Study of structural rearrangements in liquid metals on a model melt]. *Reporter of the Priazovskyi state technical university. Section: Technical sciences*, 2008, no. 18, pp. 61–65.

[21] Novokhatsky I. A., Yaroshenko A. V. Opredelenie plotnosti metallicheskih zhidkostej v pripoverhnostnyh sloyah s uchetom yavleniya klasternoj adsorbcii [Determination of the Density of Metallic Liquids in Surface Layers Taking into Account the Cluster Adsorption Phenomenon]. *Trudy Odesskogo politekhnicheskogo universiteta [Proceedings of the Odessa Polytechnic University]*, 2002, no. 1 (17), pp. 1–5.

[22] Gay S. L. Osobennosti processa kristallizacii metallov [Features of the process of crystallization of metals]. *Vesnik of Yanka Kupala State University of Grodno. Series 6. Engineering Science*, 2012, no. 2, pp. 36–43.

[23] Ilyinsky A. G. Osobennosti atomnogo stroeniya metallicheskih materialov v zhidkom i amorfnom sostoyaniyah [Features of the atomic structure of metallic materials in liquid and amorphous states]. *Nanosistemi, nanomateriali, nanotekhnologii [Nanosystems, nanomaterials, nanotechnologies]*, 2010, vol. 8, no. 3, pp. 483–502.

[24] Li Y., Chen W. Z., Dong B. S., Zhou S. X. Effects of metalloid content on viscosity of Fe-Si-B-P-C alloy melt. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2018, vol. 490, pp. 31-34.

[25] Zu F. Q., Zhou B., Li X. F., Yi X., Chen Y. Effect of liquid-liquid structure transition on solidification of Sn-Bi alloys. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2007, vol. 17, no. 5, pp. 893-897.

[26] Rao K.R. Phase transitions in liquids. *Current Science*, 2001, vol. 80, no. 9, pp. 1098–1100.

[27] Yarger J.L., Wolf G.H. Polymorphism in Liquids. *Science*, 2004, vol. 306, no. 5697, pp. 820–821.

[28] Tyagunov A., Milder O., Tarasov D., Tyagunov G. LLT Structural Changes in Metal Liquids as a Basis for a Thermal Treatment Technology of Melts: a review. *Phase Transitions*, 2021, vol. 94, no. 1, pp. 1–22.

[29] Myers T.G., Hennessy M.G., Calvo-Schwarzwälder M. The Stefan problem with variable thermophysical properties and phase change temperature. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2020, vol. 149, pp. 118975.

[30] Koga S., Diagne M., Krstic M. Control and State Estimation of the One-Phase Stefan Problem via Backstepping Design. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 2019, vol. 64, no. 2, pp. 510–525.

[31] Markov S.I. Multiscale Nonconformal Finite Element Methods for Solving Problems with Moving Boundaries. *XIV International Scientific-Technical Conference on Actual Problems of Electronics Instrument Engineering (APEIE)*, Russia, Novosibirsk, 2018, no. 18303723.

[32] Munjiza A. The combined finite-discrete element method for structural failure and collapse. *Engineering fracture mechanics*, 2004, vol. 71, no. 4-6, pp. 469-483.

[33] Pestov K.N., Lyubimova O.N., Ostanin M.V. Ob odnom chislennom metode resheniya zadach tipa Stefana [On a numerical method for solving Stefan-type problems]. *Vestnik CHGPU. Seriya: Mekhanika predel'nogo sostoyaniya [Bulletin of ChGPU. Series: Limit State Mechanics]*, 2019, vol. 41, no. 3, pp. 51–60.

[34] He L., Zheng J., Zheng Ya., Chen J., Zhou X., Xiao Z. Parallel algorithms for moving boundary problems by local remeshing. *Engineering Computations*, 2019, vol. 36, no. 8, pp. 2887–2910.

[35] Grishanov A.N. Эффективный метод построения приближенных решений с применением многосеточных конечных элементов. *Doklady Akademii nauk vysshej shkoly Rossijskoj Federacii [Reports of the Academy of Sciences of Higher Education of the Russian Federation]*, 2018, no. 3(40), pp. 47–57.

[36] Kees C.E., Farthing M.W., Berger R.C., Lackey T.C. A Review of Methods for Moving Boundary Problems. Navigation Systems Research Program, 2009, Vol. ERDC/CHL TR-09-10.

[37] Bowler K.C., Pawley G.S. Molecular Dynamics and Monte Carlo Simulations in Solid-state and Elementary Particle Physics. *Proceedings of the IEEE*, 1984, vol. 72, no. 1, pp. 42-55.

[38] Unge M. Electron mobility edge in amorphous polyethylene. *IEEE International Conference on Dielectrics (ICD)*, 2016, vol. 2, pp. 828-831.

[39] Baba H., Urano R., Nagai T., Okazaki S. Prediction of self-diffusion coefficients of chemically diverse pure liquids by all-atom molecular dynamics simulations. *Journal of Computational Chemistry*, 2022, vol. 43, no. 28, pp. 1892–1900.

[40] Gross W.J., Vasileska D., Ferry D.K. A Novel Approach for Introducing the Electron–Electron and Electron–Impurity Interactions in Particle-Based Simulations. *IEEE Electron device letters*, 1999, vol. 20, no. 9, pp. 463-465.

[41] Zeyde K.M. The Motion of Electrons under the Action of Inertial Forces in the Rarefied Medium. *2022 3rd URSI Atlantic and Asia Pacific Radio Science Meeting (AT-AP-RASC)*, 2022. DOI: 10.23919/AT-AP-RASC54737.2022.9814326.

[42] Williams J.R., O'Connor R. Discrete Element Simulation and the Contact Problem. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 1999, vol. 6, no. 4, pp. 279—304.

[43] Thornton A., Weinhart T., Luding S., Bokhove O. Modeling of particle size segregation: calibration using the discrete particle method. *International Journal of Modern Physics C*, 2012, vol. 23, no. 8, pp. 1240014.

[44] Zeyde K.M. Electrodynamic interpretation of the results of electron dynamics modeling using the discrete element method. *Ural Radio Engineering Journal*, 2020, vol. 4, no. 1, pp. 33-50.

[45] Zeyde K.M. Mercury DPM adaptation for electromagnetic microscopic DEM simulation. *2019 IEEE-APS Topical Conference on Antennas and Propagation in Wireless Communications (APWC 2019)*, 2019, p. 136-.

[46] Li X., Li D., Yue H., Zhang Z., Liu K., Fan M., Chen D. A high precision particle-moving algorithm for particle-in-cell simulation of plasma. *IEEE Transactions on magnetics*, 2015, vol. 51, no. 3, pp. 1-4.

[47] Kancleris Z., Šlekas G., Matulis A. Modeling of Two-Dimensional Electron Gas Sheet in FDTD Method. *IEEE Transactions on antennas and propagation*, 2013, vol. 61, no. 2, pp. 994–996.

[48] Romanczuk P., Bär M., Ebeling W., Lindner B., Schimansky-Geier L. Active Brownian particles. From individual to collective stochastic dynamics. *The European Physical Journal. Special Topics*, 2012, vol. 202, pp. 1–162.

[49] Melkikh A.V., Povzner A.A., Shumikhina K.A. *Molekulyarnaya fizika. Uchebnoe posobie [Molecular physics. Tutorial]*. Ekaterinburg, UrFU, 2006, 242 p.

[50] Andrade-Neto A.V. Dielectric function for free electron gas: comparison between Drude and Lindhard model. *Revista Brasileira de Ensino de F′ısica*, 2017, vol. 39, no. 2, pp. 1-8.

[51] Chang T., Mukherjee S., Watkins N.N., Stobbe D.M., Mays O., Baluyot E.V., Pascall A.J., Tringe J.W. In situ monitoring for liquid metal jetting using a millimeter wave impedance diagnostic. *Scientific Reports*, 2020, vol. 10, no. 22325, pp. 1-9.

[52] Wang L. Atomistics of self-diffusion in liquid metals. *EPJ Web of Conferences*, 2017, vol. 151, no. 02004, pp. 1-9.

[53] Rizvi S.M.H., Mazhari B. An Analytical Approach to Model the Effects of Diffusion in Space-Charge-Limited Current in Organic Semiconductor Films. *2018 4th IEEE International Conference on Emerging Electronics (ICEE)*, 2019, art. no. 19256716. DOI: 10.1109/ICEE44586.2018.8937967.

[54] Kim M., Zydney A.L. Effect of electrostatic, hydrodynamic, and Brownian forces on particle trajectories and sieving in normal flow filtration. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2004, vol. 269, no. 2, pp. 425–431.

[55] Abgaryan K.K., Eliseev S.V., Zhuravlev A.A., Reviznikov D.L. High-speed penetration. Discrete-element simulation and experiments. *Computer research and modeling*, 2017, vol. 9, no. 6, pp. 937–944.

[56] Heitzinger C., Ringhofer C., Ahmed S., Vasileska D. Accurate three-dimensional simulation of electron mobility including electron-electron and electron-dopant interactions. *Proceedings - Electrochemical Society*, 2005, vol. PV 2004-13, pp. 165-183.

[57] Bird R.B., Stewart W.E., Lightfoot E.N. *Transport Phenomena*. Hoboken, John Wiley & Sons, 2007, 905 p.

[58] Ojovan M.I. Viscous flow and the viscosity of melts and glasses. *Physics and Chemistry of Glasses*, 2012, vol. 53, no. 4, pp. 143–150.

[59] Varshneya A.K. *Fundamentals of Inorganic Glasses*. New York, Academic Press, 1994, 570 p.

[60] Povadator A.M., Vyuhin V.V., Tsepelev V.S., Tyagunov A.G. Sposob beskontaktnogo izmereniya elektricheskogo soprotivleniya metallicheskogo tverdogo obrazca ili ego rasplava metodom vrashchayushchegosya magnitnogo polya i ustrojstvo dlya ego osushchestvleniya [A method for non-contact measurement of the electrical resistance of a metallic solid sample or its melt by the method of a rotating magnetic field and a device for its implementation]. Invention Patent №2299425, May 20, 2007.

[61] Tyagunov G.V., Tsepelev V.S., Tyagunov A.G., Baryshev E.E., Vyuhin V.V., Driver A.M. Ustrojstvo dlya opredeleniya intensivnosti strukturnoj perestrojki rasplavov zharoprochnyh splavov [Device for determining the intensity of structural rearrangement of melts of heat-resistant alloys]. Patent RUS no. 157157, 20.11.2015.

[62] Tyagunov G.V., Tsepelev V.S., Povodator A.M., Baryshev E.E., Vyuhin V.V., Tyagunov A.G., Mushnikov V.S. Ustrojstvo ocenki ravnovesnosti metallicheskih rasplavov [Device for evaluating the equilibrium of metal melts]. Utility model patent RUS 182131, 26.12.2017.

Tyagunov A.G., Cand. Sc. (Eng.), Assoc. Professor, Department of Information and Automation of the Institute of Radio Electronics and Information Technologies, Ural Federal University. e-mail: adi8@yandex.ru

Zeyde K.M., PhD student, University of Genoa, DITEN. e-mail: kirill.zeide@edu .unige.it

Milder O.B., Cand. Sc. (Eng.), Assoc. Professor, Department of Information and Automation of the Institute of Radio Electronics and Information Technologies, Ural Federal University. e-mail: milder@mail.ru

Tarasov D.A., Cand. Sc. (Eng.), Assoc. Professor, Department of Information and Automation of the Institute of Radio Electronics and Information Technologies, Ural Federal University. e-mail: datarasov@yandex.ru