

MEK4480 — part 3 of 3

Obligatorisk oppgave: Del 3

Innleveringsfrist

Torsdag 12. mai 2018 klokken 14:30. Oppgaven skal leveres digitalt i Devilry (<https://devilry.ifi.uio.no>).

Instruksjoner

Du velger selv om du skriver besvarelsen for hånd og scanner besvarelsen eller om du skriver løsningen direkte inn på datamaskin (for eksempel ved bruk av $\text{\LaTeX}$). Besvarelsen skal leveres som én PDF-fil. Scannede ark må være godt lesbare. Besvarelsen skal inneholde navn, emne og oblignummer.

Det forventes at man har en klar og ryddig besvarelse med tydelige begrunnelser. Husk å inkludere alle relevante plott og figurer. Studenter som ikke får sin opprinnelige besvarelse godkjent, men som har gjort et reelt forsøk på å løse oppgavene, vil få én mulighet til å levere en revidert besvarelse. Samarbeid og alle slags hjelpemidler er tillatt, men den innleverte besvarelsen skal være skrevet av deg og reflektere din forståelse av stoffet. Er vi i tvil om du virkelig har forstått det du har levert inn, kan vi be deg om en muntlig redegjørelse.

I oppgaver der du blir bedt om å programmere må du legge ved programkoden og levere den sammen med resten av besvarelsen. Det er viktig at programkoden du leverer inneholder et kjøreeksempel, slik at det er lett å se hvilket resultat programmet gir.

Søknad om utsettelse av innleveringsfrist

Hvis du blir syk eller av andre grunner trenger å søke om utsettelse av innleveringsfristen, må du ta kontakt med studieadministrasjonen ved Matematisk institutt (7. etasje i Niels Henrik Abels hus, e-post: studieinfo@math.uio.no) i god tid før innleveringsfristen.

For å få adgang til avsluttende eksamen i dette emnet, må man bestå alle obligatoriske oppgaver i ett og samme semester.

For fullstendige retningslinjer for innlevering av obligatoriske oppgaver, se her:

www.uio.no/studier/admin/obligatoriske-aktiviteter/mn-math-oblig.html

Regler for obligatoriske oppgaver i MEK4480:

Du skal levere EN PDF fil i Devilry — ikke flere filer, ikke noe annet enn PDF. Du må presentere en av delene i Obligen i vår regnetime uken etter innleveringsfristen, som blir avtalt i forelesning.

LYKKE TIL!

1 Phase Field model

We postulate the free energy of the system as

$$F = \int_{\Omega} f(C) d\Omega + \int_{\Gamma} f_{\Gamma}(C) d\Gamma = \int_{\Omega} \left(\frac{\gamma}{\epsilon} \Psi(C) + \frac{\gamma\epsilon}{2} |\nabla C|^2 \right) d\Omega + \int_{\Gamma} \gamma_{sl} + (\gamma_{sg} - \gamma_{sl}) w(C) d\Gamma. \quad (1)$$

where the first term is the bulk energy $\Psi(C) = \frac{1}{4}(C-1)^2(C+1)^2$, $C = C(\mathbf{x}, t)$ is a concentration, the second term the interfacial energy and the boundary integral term is the solid substrate energy in dry ($w(C = -1) = 1$) and wet ($w(C = 1) = 0$) state. $C = C(\mathbf{x}, t)$ is a scalar field, which represents the two phases i.e. liquid state $C = 1$ and gas state $C = -1$. The volume integral (Ω) represents the bulk free energy and the surface integral (Γ) the free energy contribution from the surface. γ is the surface tension coefficient and ϵ is the interface thickness. γ_{sg} and γ_{sl} is the surface tension of the solid in dry (gas-solid) and wet (liquid-solid) state, respectively.

1.1 Chemical potential ϕ

Find the integral equation for the chemical potential ϕ , where $\delta F / \delta C = \int_{\Omega} \phi d\Omega + \int_{\Gamma} \phi_{\gamma} d\Gamma$ by making a variation in F [Nm] with respect to the order parameter/concentration C and the wetting boundary conditions (integral). Scale the chemical potential with γ/ϵ and the volume/ $\mathbf{x}$ with a characteristic length of the system e.g. drop size L to make the equation dimensionless.

1.2 Derive the equilibrium interface thickness

Assume a flat interface along one dimension in equilibrium i.e. constant chemical potential $\phi = 0$. Neglect the boundary term and find the equilibrium interface profile $C(x) = \tanh \frac{x}{\sqrt{2}\epsilon}$

1.3 Surface tension calculation

Find the effective surface tension coefficient from the free energy at equilibrium (assume a flat one-dimensional interface) i.e. $\int_{-\infty}^{\infty} F(C(x)) dx$

1.4 Substrate boundary conditions

Use the equilibrium solution to find the form of the polynomial for $g(C)$ in the surface integral by assuming the Neumann boundary condition on C at the substrate equals the variation in the substrate free energy i.e. $\gamma\epsilon \nabla C \cdot \mathbf{n} = \phi_{\gamma}$, with $\mathbf{n}$ the interface normal.

1.5 Decrease in free energy

Assume any variation δC must balance a diffusive Fickian flux $\mathbf{J} = M \nabla \phi$ we get the mass conserving Cahn-Hilliard equation,

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \nabla C = \nabla \cdot \mathbf{J} = \nabla \cdot (M \nabla \phi). \quad (2)$$

What is the sign of M that ensures that the free energy F decreases in time, albeit the laws of thermodynamics (assume $\mathbf{u} = 0$). (Hint: Use the variation δC from the Cahn-Hilliard equation into the variation of F with respect to C .)

1.6 Numerical simulation

We have posted a numerical solver of the Cahn-Hilliard equation on the course webpage. Perform simulations with the code

- Initialize the domain with a condition for $C = 1$ in the left half and $C = -1$ right half. Test if you get the analytical equilibrium thickness. How does the solution change when you change the Cahn number?
- Try to make an initial condition around $C = 0$ with some small disturbance. How does the solution behave?