



Original Article

Phase-Field Modeling of Grain Growth Under Thermal Gradients in SLM Additive Manufacturing Process

Ali Nasr Azadani¹, Hossein Jafarzadeh^{1*} and Mostafa Jamshidian²

1. Department of Mechanical Engineering, Isfahan University of Technology, Isfahan, 8415683111, Iran

2. Intelligent Systems for Medicine Laboratory, The University of Western Australia, Perth, Western Australia, Australia

Abstract: The study of material microstructures is of great importance since changes in microstructure directly influence the material properties. Normal grain growth occurs to reduce grain boundary energy, but it can be affected by various factors, including temperature variations. This research aims to model grain growth under thermal gradients using the phase-field method. Initially, the thermal field in a selective laser melting (SLM) additive manufacturing process was simulated using MATLAB, and the temperature distribution in a two-dimensional plane was extracted. This two-dimensional plane represents a cross-section where one axis corresponds to the laser movement direction and the other to the material thickness. Subsequently, three points at different depths within the geometry were selected, and their temperature variations over time were calculated. The temperature data at each time step were used as independent input for the phase-field simulation. To spatially couple the thermal field simulation with the phase-field simulation, a multiscale approach was employed. In this approach, a randomly generated representative volume element (RVE) with a predefined characteristic length was assigned to material points whose temperature variations had been extracted over time. Phase-field simulations were then performed for three RVEs at the specified depths, and grain growth and grain boundary movement within these RVEs were compared. The simulation results indicate that the RVE experiencing higher temperatures exhibits greater grain boundary mobility. Consequently, the grain growth rate, or coarsening, is higher in such cases.

Keywords: Microstructure, Phase-field, Thermal field, Grain, Grain growth, Grain boundary.

Received: Jun. 02, 2025; Revised: Jul. 10, 2025; Accepted: Aug. 03, 2025; Published Online: Aug. 18, 2025.

* Corresponding Author: jafarzadeh@iut.ac.ir

How to Cite: Nasr Azadani Ali, Jafarzadeh Hossein and Jamshidian Mostafa, Phase-field modeling of grain growth under thermal gradients in SLM additive manufacturing process. Journal of Computational Methods in Engineering; 2025, 44(1), 133-151; DOI: 10.47176/jcme.44.1.1052





مقاله پژوهشی

مدل‌سازی رشد دانه تحت گرادیان‌های حرارتی به روش میدان فاز در فرایند ساخت افزودنی ذوب لیزری انتخابی

علی نصر آزادانی^۱، حسین جعفرزاده^{۱*}، مصطفی جمشیدیان^۲

۱. دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان، ایران، ۸۴۱۵۶۸۳۱۱۱

۲. آزمایشگاه سیستم‌های هوشمند برای پزشکی، دانشگاه استرالیای غربی، پرت، استرالیا

چکیده - مطالعه ریزساختار مواد از دهه‌های گذشته همواره از اهمیت بالایی برخوردار بوده است زیرا تغییرات ریزساختار موجب تغییرات خواص ماده می‌شود. رشد دانه نرمال به‌منظور کاهش انرژی مرزخانه‌ها صورت می‌گیرد. رشد دانه می‌تواند تحت تاثیر عوامل مختلفی از جمله تغییرات دما باشد. هدف از این پژوهش مدل‌سازی رشد دانه تحت گرادیان‌های حرارتی است. به‌منظور دستیابی به این هدف از روش میدان فاز استفاده شده است. ابتدا میدان حرارتی در یک فرایند ساخت افزودنی ذوب لیزری انتخابی به کمک زبان برنامه‌نویسی متلب پیاده‌سازی و توزیع دما در صفحه‌ای دوبعدی استخراج شد. منظور از صفحه دوبعدی صفحه‌ای است که یک بعد آن در راستای حرکت لیزر و بعد دیگر در راستای ضخامت ماده است. سپس سه نقطه در عمق‌های مختلف هندسه انتخاب شد و تغییرات دمای آن‌ها در طول زمان حل به‌دست آمد. داده‌های دما در هر گام زمانی، به عنوان ورودی مستقل برای شبیه‌سازی میدان فاز استفاده شد. جهت کوپل کردن مکانی شبیه‌سازی میدان حرارتی و میدان فاز از یک رویکرد چندمقیاسی استفاده شد. به‌گونه‌ای که یک حجمک نماینده تصادفی با طول مشخصه معین به نقاط مادی که تغییرات دمای آن‌ها در طول زمان استخراج شده است، اختصاص داده شد. سپس شبیه‌سازی میدان فاز برای سه حجمک نماینده در عمق‌های تعیین شده انجام و رشد دانه و حرکت مرزخانه‌ها در این سه حجمک نماینده با یکدیگر مقایسه شد. نتایج حاصل از شبیه‌سازی نشان می‌دهد در حجمک نماینده‌ای که دمای بیشتری را تجربه کرده است تحرک مرزخانه‌ها نیز بیشتر است. در نتیجه نرخ رشد دانه یا به‌عبارتی درشت شدن دانه بیشتر است.

واژه‌های کلیدی: ریزساختار، میدان فاز، میدان حرارتی، دانه، رشد دانه، مرزخانه.

دریافت مقاله: ۱۴۰۴/۰۳/۱۲، بازنگری: ۱۴۰۴/۰۴/۱۹، پذیرش: ۱۴۰۴/۰۵/۱۲، اولین انتشار: ۱۴۰۴/۰۵/۲۷

* نویسنده مسئول، رایانامه: jafarzadeh@iut.ac.ir



۱- مقدمه

از جمله مهم‌ترین نیازهای مهندسی به‌خصوص مهندسی مکانیک شناخت رفتار مواد و عوامل درونی و بیرونی اثرگذار روی خواص مکانیکی و فیزیکی آن‌هاست. از این رو، مطالعه ریزساختار در دهه‌های گذشته همواره مورد توجه پژوهشگران بوده است. این مطالعات نشان می‌دهد که هر تغییری در ریزساختار ماده می‌تواند منجر به تغییرات در خواص ماده شود. از جمله پژوهش‌های متداول در زمینه ریزساختار مواد، بررسی رشد دانه‌ها و حرکت مرز دانه‌های موجود در ریزساختار یک حجمک نماینده^۱ است که می‌توان اثرات مختلفی همچون بارگذاری‌های متفاوت، شرایط مرزی متفاوت، اثر مقیاس ابعادی، اثر ناهمسانگردی خواص مرز دانه، چگونگی توزیع فازهای ماده و بسیاری شرایط دیگر را در آن لحاظ کرد. تفاوت حاصل شده در هر یک از این حالات، در چگونگی رشد دانه‌ها، تفاوت در نحوه توزیع دانه‌ها، افزایش یا کاهش نسبت فازهای ماده، سخت شدن یا نرم شدن ماده بروز پیدا می‌کند.

ریزساختار ماده می‌تواند تحت اثر بارگذاری‌هایی از قبیل مکانیکی، مغناطیسی، حرارتی تغییر کند که حاصل رشد دانه و حرکت مرز دانه است. درحالی‌که در مطالعات رشد دانه اغلب تحرک مرز دانه یکنواخت در نظر گرفته می‌شود اما در بسیاری از سیستم‌های واقعی تحرک مرز دانه یکنواخت نیست و می‌تواند با دما، اختلاف جهت‌گیری و سایر متغیرها تغییر کند. برای بررسی و شبیه‌سازی رشد دانه و حرکت مرز دانه در مواد، مدل‌های گوناگونی توسعه داده شده است که از میان آن‌ها می‌توان به مدل مونت کارلو^۲، مدل رشد دهنده سطح، مدل ورتکس^۳، مدل اجزای محدود و مدل میدان فاز اشاره کرد (۱)، (۲). هر کدام از این مدل‌ها دارای مزایا و معایبی هستند که بر حسب نوع کاربرد، حجم محاسبات و دقت مورد نیاز، می‌توان از هر کدام استفاده کرد. از مشهورترین این مدل‌ها، مدل میدان فاز است. مدل میدان فاز از ابزارهای محاسباتی قدرتمند است که برای شبیه‌سازی رشد دانه و پیش‌بینی تکامل ریزساختارهای

پیچیده مورد استفاده قرار می‌گیرد.

در روش کلاسیک مرز دانه به صورت تیز و بدون ضخامت در نظر گرفته می‌شود اما روش میدان فاز مبتنی بر مفهوم گسترده بودن مرز دانه است (۳). در مدل میدان فاز به علت در نظر گرفتن مرز دانه به عنوان یک ناحیه با ضخامت محدود، هنگام حرکت از یک دانه به دانه مجاور، کسر حجمی فاز اولیه به تدریج کاهش یافته و کسر حجمی فاز مجاور افزایش می‌یابد. ریزساختارهایی که در مدل میدان فاز در نظر گرفته می‌شود شامل تعدادی دانه است. شکل و توزیع این دانه‌ها توسط توابعی که در فضا و زمان پیوسته هستند بیان می‌شود که به این توابع پارامترهای مشخصه‌ی میدان فاز گفته می‌شود. در داخل دانه‌ها، مقادیر میدان فاز تقریباً ثابت هستند و با ساختار، جهت‌گیری و ترکیب دانه‌ها ارتباط دارند. با ارتباط دادن این متغیرها از طریق معادلات میدان فاز، می‌توان رفتار ماده را پیش‌بینی کرد. مدل میدان فاز در مقابل سایر مدل‌ها مزایایی دارد که از جمله آن‌ها می‌توان به عدم نیاز به دنبال کردن مکان فصل مشترک دانه‌ها حین رشد دانه‌ها به صورت صریح و با در نظر گرفتن معادلات ریاضی پیچیده و همچنین سادگی مدلسازی رشد دانه‌ها با در نظر گرفتن اثر ناهمسانگردی خواص مرز دانه اشاره کرد. انرژی مرز دانه و ضریب جنبشی مرز دانه^۴ دو متغیر مهم و اساسی در حرکت مرز دانه‌ها به‌شمار می‌روند. در مدل رشد دانه تحت گرادیان‌های حرارتی، ضریب جنبشی مرز دانه را نمی‌توان ثابت فرض کرد که به همین دلیل در این پژوهش ضریب جنبشی وابسته به دما در نظر گرفته می‌شود.

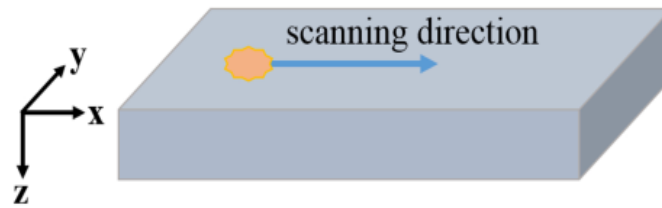
در این پژوهش رشد دانه و حرکت مرز دانه در طی یک فرایند ذوب لیزری انتخابی (SLM)^۵ در حالت جامد که یکی از انواع فرایندهای ساخت افزودنی است، مورد بررسی و تحلیل قرار می‌گیرد. در فرآیند SLM، دانه‌ها به‌طور معمول در مناطق ذوب شده با سرعت بالا رشد می‌کنند. این رشد به‌ویژه تحت تأثیر دمای محلی و نرخ خنک‌سازی است. در دماهای بالا، انرژی حرارتی زیادی برای حرکت اتم‌ها در دسترس است

که این امر موجب رشد دانه‌ها می‌شود. در حالی که در مناطق اطراف، که خنک‌شدن سریع‌تری دارند، دانه‌ها با سرعت کمتری رشد می‌کنند. کنترل این فرایندها می‌تواند منجر به تولید قطعاتی با خواص مکانیکی بهبود یافته، مقاومت به خستگی بالا، و ساختارهای یکنواخت‌تر شود.

معادلات میدان فاز که متغیرهای ریزساختار و میدان فاز را ارتباط می‌داد، نخستین بار توسط فن و چن (۳) بیان شد. یک تئوری حرکت مرزهای منحنی شکل توسط آلن و کان (۴) برای آلیاژ آهن-آلومینیوم ارائه شد. در این پژوهش اثبات شد که سرعت مرز گسترده به صورت خطی با انحنای متوسط مرز متناسب است. نتایج حاصل از این پژوهش زیربنای استخراج معادلات میدان فاز شد. اشتاینباخ و پزولا (۶) یک مدل چند میدان فازی ارائه کردند. در این مدل با توصیف میدان‌های مرزی بین فازها، روابط میان متغیرهای فازی بازنویسی شد. این فرمول‌بندی مجدد امکان تجزیه فعل و انفعالات چند میدان فازی غیرخطی را به برهم‌کنش دوبه‌دو میدان‌های مرزی فازها فراهم کرد. کیم و همکاران (۸) یک مدل برای شبیه‌سازی رشد دو بعدی و سه بعدی دانه به‌صورت همسانگرد ارائه کردند. نتایج حاصل از این پژوهش نشان داد که فرض احتمال برخورد ۶ فاز مختلف در یک نقطه قابل قبول است. تونکس و همکاران (۹) رشد دانه تحت بارگذاری در حالت همسانگرد را بررسی کردند. نتایج این شبیه‌سازی نشان داد بارگذاری اعمال شده، شتاب بیشتری به حرکت مرزدانه‌ها در مقایسه با حالت نرمال (بدون بارگذاری) می‌دهد. هر چند تأثیر این بارگذاری با گذر زمان به سرعت کاهش می‌یابد. جمشیدیان و رابزوک (۱) رشد دانه در حالت بارگذاری الاستیک همسانگرد را شبیه‌سازی کردند. برای صحت سنجی شبیه‌سازی، نتایج حاصل از مدل میدان فاز با نتایج حل تحلیلی یک مرزدانه‌ی دایره‌ای مقایسه شد. بدین صورت که مرزدانه به صورت تیز در نظر گرفته شده و با فرض تعادل فازی در مرز، سرعت حرکت مرزدانه بدست آمد و رابطه تغییر شعاع با زمان حاصل شد. سرانجام نمودارهای حاصل از شبیه‌سازی و حل عددی روابط با

یکدیگر مقایسه شد. تامبوراجا و جمشیدیان (۱۰) برای مدل‌سازی رشد دانه تحت بارگذاری، یک مدل چندمقیاسی بر پایه اصول ترمودینامیک و قوانین مکانیک محیط‌های پیوسته ارائه کردند. در حقیقت می‌توان گفت نتایج حاصل شده در این پژوهش، استخراج تئوری اشتاینباخ و پزولا بر پایه قوانین مکانیک محیط‌های پیوسته است. تونکس و همکاران (۱۱) از یک مدل میدان فاز برای بررسی تأثیر گرادیان‌های دما بر رشد دانه‌ها به‌صورت همسانگرد در UO_2 استفاده کردند. در این پژوهش حرکت مرزدانه در پلی‌کریستال‌های دو بعدی UO_2 تحت افزایش گرادیان دما پیش‌بینی شد. در این پژوهش مشخص شد در حالی که گرادیان دما باعث حرکت محلی مرزدانه به سمت گرادیان می‌شود، تکامل سطح دانه متوسط با زمان تحت تأثیر قرار نمی‌گیرد. این به این دلیل است که نیروی محرکه گرادیان دما کوچکتر از نیروی محرکه انحنا برای همه گرادیان‌های بررسی شده است.

هدف از این پژوهش مدل‌سازی رشد دانه تحت گرادیان‌های حرارتی است. به منظور دستیابی به این هدف از روش میدان فاز استفاده شده است. ابتدا میدان حرارتی در یک فرایند ساخت افزودنی ذوب لیزری انتخابی به کمک زبان برنامه‌نویسی متلب پیاده‌سازی شده است و توزیع دما در صفحه‌ای دوبعدی استخراج شده است. منظور از صفحه دوبعدی صفحه‌ای است که یک بعد آن در راستای حرکت لیزر و بعد دیگر در راستای ضخامت ماده است. سپس سه نقطه در عمق‌های مختلف هندسه انتخاب می‌شود و تغییرات دمای آن‌ها در طول زمان حل به دست می‌آید. داده‌های دما در هر گام حل به عنوان ورودی به شبیه‌سازی میدان فاز استفاده می‌شود. جهت کوپل کردن مکانی شبیه‌سازی میدان حرارتی و میدان فاز از یک رویکرد چندمقیاسی استفاده می‌شود. به گونه‌ای که یک حجمک نماینده تصادفی با طول مشخصه معین به نقاط مادی که تغییرات دمای آن‌ها در طول زمان استخراج می‌شود، اختصاص داده می‌شود. سپس شبیه‌سازی میدان فاز برای سه حجمک نماینده در عمق‌های تعیین شده انجام می‌شود و رشد



شکل ۱. دامنه شبیه‌سازی انتقال حرارت

که ρ چگالی، c_p ظرفیت گرمایی ویژه و k ضریب انتقال حرارت هدایتی وابسته به دما است. شرط اولیه توزیع دما در بستر پودر در زمان $t = 0$ به صورت رابطه زیر تعریف می‌شود:

$$T(x, z, 0) = T_0 \quad (2)$$

که در آن T_0 دمای محیط است. ورود شار حرارتی از طریق تابش لیزر و از دست رفتن حرارت به وسیله انتقال حرارت جابجایی و تابشی در سطح بالایی لحاظ می‌شود. بنابراین شرایط مرزی در سطح بالایی به صورت رابطه زیر بیان می‌شود:

$$k \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=0} = q_L - q_{con} - q_{rad} \quad (3)$$

که در این رابطه q_L شار حرارتی لیزر، q_{con} اتلاف حرارتی جابه‌جایی و q_{rad} اتلاف حرارتی تابشی است. q_{con} و q_{rad} به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$q_{con} = h_c(T_{z=0} - T_0) \quad (4)$$

$q_{rad} = \varepsilon \sigma_{rad}(T_{z=0}^4 - T_0^4) \quad (5)$ که h_c ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی، ε ضریب انتشار سطحی و σ_{rad} ثابت استفان-بولتزمن است. شرایط مرزی برای سایر سطوح مطابق رابطه زیر به صورت عایق در نظر گرفته می‌شود (۱۳):

$$-k \frac{\partial T}{\partial n} = 0 \quad (6)$$

که در آن n جهت عمود بر سطح را مشخص می‌کند. توزیع انرژی لیزر بر روی سطح هدف به صورت پروفیل گاوسی در نظر گرفته شده است، به طوری که شدت لیزر در مرکز پرتوی لیزر به حداکثر مقدار خود می‌رسد. بنابراین شار حرارتی لیزر به صورت رابطه (۷) به صورت نمایی تعریف می‌شود (۱۴):

دانه و حرکت مرزدانه‌ها در این سه حجمک نماینده با یکدیگر مقایسه می‌شود.

۲- سیستم معادلات

هدف از این بخش، ارائه معادلات حاکم بر مدلسازی میدان حرارتی و همچنین سیستم معادلات به کار گرفته شده در شبیه‌سازی میدان فاز است. در این مطالعه، میدان حرارتی بر اساس شبیه‌سازی فرآیند SLM در حالت جامد تعریف شده است. به عبارت دیگر، برخلاف بسیاری از تحقیقات پیشین که بر پدیده‌های ذوب و انجماد مجدد تمرکز داشته‌اند، هدف این پژوهش صرفاً بررسی تأثیر گرادیان حرارتی بر رشد دانه‌ها بدون در نظر گرفتن تغییرات فازی است.

۲-۱- معادلات میدان حرارتی

در این مطالعه، یک مدل حرارتی دوبعدی برای پیش‌بینی تغییرات دما در طول فرآیند SLM توسعه داده شده است. شکل ۱ شماتیک دامنه شبیه‌سازی را نشان می‌دهد. همان‌گونه که در شکل مشخص است قطعه پرینت شده به صورت سه‌بعدی است اما تحلیل دما و شبیه‌سازی به صورت دوبعدی در صفحه xz انجام می‌شود. راستای x در راستای حرکت لیزر و راستای z در راستای ضخامت قطعه است.

پروفیل دما $T(x, z, t)$ را می‌توان با استفاده از یک معادله انتقال حرارت فوریه به صورت زیر تعیین کرد (۱۲):

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (1)$$

(۱۰). چگالی انرژی آزاد محلی هلمهولتز را می‌توان به شکل قابل تفکیک به صورت رابطه (۸) بیان کرد:

$$\psi = \psi^{\varphi}(\varphi_1, \dots, \varphi_N, \nabla\varphi_1, \dots, \nabla\varphi_N) + \psi^e(\bar{\mathbf{E}}, \varphi_1, \dots, \varphi_N) \quad (۸)$$

در رابطه (۸) قسمت اول چگالی انرژی آزاد ریزساختار و قسمت دوم چگالی انرژی آزاد الاستیک است. همچنین $\bar{\mathbf{E}}$ کرنش ماکروسکوپی است. با فرض خواص مرزانه همسانگرد ψ^{φ} به صورت رابطه (۹) تعریف می‌شود (۶):

$$\psi^{\varphi} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \omega \varphi_i \varphi_j - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \kappa \nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j \quad (۹)$$

در رابطه (۹) ضرایب ω و κ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\omega = 4 \frac{\sigma}{d} \quad (۱۰)$$

$$\kappa = \frac{4}{\pi^2} \sigma d \quad (۱۱)$$

که σ انرژی مرزانه و d ضخامت مرزانه در روش میدان فاز است. با استفاده از یک تابع درون‌یاب سازگار ترمودینامیکی، ψ^e به صورت زیر بدست می‌آید (۱۷):

$$\psi^e = \frac{\sum_{i=1}^N g(\varphi_i) \psi_i^e}{\sum_{i=1}^N g(\varphi_i)} \quad (۱۲)$$

که تابع g یک تابع درون‌یاب با شیب ملایم است که معمولاً به صورت $g(\varphi_i) = \varphi_i^2(3 - 2\varphi_i)$ محاسبه می‌شود. همچنین انرژی کرنشی الاستیک فاز نام از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$\psi_i^e = \left(\frac{1}{2}\right) \bar{\mathbf{E}} : \mathbf{C}_i : [\bar{\mathbf{E}}] \quad (۱۳)$$

در این رابطه $\mathbf{C}_i$ تانسور الاستیک مرتبه ۴ در حالت تقارن مکعبی است. در این قسمت روابط سینتیکی متغیرهای میدان فاز که تغییرات پارامترهای میدان فاز را با زمان نشان می‌دهد ارائه شده است. گینزبرگ و لاندل برای رشد دانه نرمال یا بدون کرنش، با مشتق‌گیری از انرژی آزاد کل نسبت به هر یک از متغیرهای میدان فاز، روابط سینتیکی خود را ارائه کردند (۵). روابط سینتیکی متغیرهای میدان فاز با در نظر گرفتن بخش الاستیک یا رشد دانه به دلیل کرنش به صورت روابط (۱۴-۱۷) ارائه شده است (۱۰):

$$q_L = \frac{2AP}{\pi r_0^2} \exp\left(-2 \frac{(x - vt)^2}{r_0^2}\right) \quad (۷)$$

در این رابطه A ضریب جذب انرژی لیزر، P توان لیزر، r_0 شعاع موثر لیزر و v سرعت حرکت لیزر است.

۲-۲- معادلات میدان فاز

در روش میدان فاز ریزساختاری در نظر گرفته می‌شود که شامل تعدادی دانه است. شکل و توزیع متقابل این دانه‌ها با پارامترهای پیوسته در فضا و زمان که به پارامترهای میدان فاز تعبیر می‌شود بیان می‌شوند. با ارتباط دادن این پارامترها از طریق معادلات میدان فاز می‌توان رفتار ماده را پیش‌بینی کرد. پارامترهای میدان فاز درون دانه‌ها تقریباً مقادیر ثابتی دارند که با ساختار، جهت‌گیری و ترکیب دانه‌ها ارتباط دارد. تکامل زمانی پارامترهای میدان فاز با در نظر گرفتن یک دستگاه معادلات دیفرانسیل جزئی و حل عددی آن حاصل می‌شود. برای تکامل دانه‌ها می‌توان از فرض کاهش انرژی کل یا انرژی فصل مشترک و یا انرژی کشسانی استفاده نمود. در روش میدان فاز معادلات برای تکامل متغیرهای میدان فاز بر اساس اصول ترمودینامیک و سینتیک تشکیل می‌شود. در این قسمت برخی از معادلات اصلی میدان فاز مطرح می‌شود (۱، ۶، ۸).

مدل میدان فاز برای حرکت مرزانه تحت تنش برای تغییر شکل الاستیک توسط کیم و همکاران (۶) و تونکس و همکاران (۹) ارائه شده است. در نظریه چند میدان فازی اشتاینباخ و پزولا (۶) متغیر میدان فاز φ_i کسر حجمی محلی فاز i ام است که $i = 1, 2, \dots, N$ است و عدد صحیح N نشان دهنده تعداد کل فازها یا جهت‌گیری‌های مختلف کریستالی در پلی‌کریستال است. طبق پژوهش‌های کالیدینی و همکاران (۱۵) و تاکاکی و همکاران (۱۶) می‌توان از فرض یکنواختی تیلور در حالت بارگذاری بهره گرفت. یعنی کرنش الاستیک بی‌نهایت کوچک E در کل مجموعه یکنواخت است. تحقیقات قبلی بر روی رشد دانه تحت بارگذاری نشان می‌دهد که استفاده از روش یکنواختی تیلور با کاهش ناچیز دقت، هزینه محاسباتی شبیه‌سازی‌های میدان فاز را به شدت کاهش می‌دهد.

برنامه‌نویسی متلب پیاده‌سازی شده‌اند، لازم است تا توضیحاتی در این خصوص ارائه شود. شبیه‌سازی عددی انتقال حرارت در مسائل صنعتی و پژوهشی به دلیل توانایی آن در تحلیل رفتار حرارتی مواد و فرآیندها اهمیت ویژه‌ای دارد. استفاده از روش‌های عددی مانند تفاضلات محدود امکان حل معادلات حاکم غیرخطی و وابسته به زمان را فراهم می‌کند. در این میان، روش تفاضلات محدود به دلیل سادگی و کارایی بالا برای مسائل دویبعدی و سه‌بعدی بسیار رایج است. در این مقاله، معادله انتقال حرارت وابسته به زمان به صورت عددی با استفاده از روش تفاضلات محدود گسسته‌سازی شده است. هدف از این بخش، توضیح روش‌های گسسته‌سازی زمانی و مکانی، همراه با تحلیل پایداری روش مورد استفاده است.

برای گسسته‌سازی زمانی معادله انتقال حرارت، از روش اویلر پیشرو^۶ استفاده شده است. این روش مبتنی بر تقریب مشتق زمانی به صورت تفاضلی است. همچنین برای گسسته‌سازی مکانی مشتقات مرتبه دوم در معادله انتقال حرارت، از روش تفاضل مرکزی استفاده شده است. برای این منظور از رابطه استنسیل ۵ گره‌ای مطابق با شکل ۲ با فرض $\Delta x = h_x$ و $\Delta y = h_y$ استفاده می‌شود:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \approx \frac{T_{i-1,j} - 2T_{i,j} + T_{i+1,j}}{\Delta x^2} \quad (20)$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \approx \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\Delta y^2} \quad (21)$$

که در آن h_x و h_y به ترتیب فاصله افقی و عمودی بین دو گره در شبکه می‌باشند.

روش CFL^۷ شرطی است که باید در حل عددی معادلات دیفرانسیل جزئی رعایت شود تا پایداری روش تضمین گردد. این شرط ارتباط بین گام زمانی Δt ، گام مکانی Δx و Δy سرعت انتقال یا انتشار در سیستم مانند ضریب نفوذ حرارتی را مشخص می‌کند. برای معادله انتقال حرارت نیز باید گام زمانی از یک مقدار معینی کوچک‌تر انتخاب شود تا پایداری حل تضمین شود. این موضوع در رابطه (۲۲) نشان داده شده است.

$$\alpha = \frac{k}{\rho c_p} \quad (22)$$

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} = \frac{2}{N^*} \sum_{j \in S} L(f_i - f_j) \quad \text{برای } i \in S \quad (14)$$

$$f_i = \nabla \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \nabla \varphi_i} - \frac{\partial \psi}{\partial \nabla \varphi_i} = f_i^{\varphi} + f_i^e \quad (15)$$

$$f_i^e = g'(\varphi_i) \left[\frac{\sum_{j \in S} g(\varphi_j) (\psi_j^e - \psi_i^e)}{\left[\sum_{j \in S} g(\varphi_j) \right]^2} \right] \quad (16)$$

$$f_i^{\varphi} = \kappa \nabla^2 \varphi_i + \omega(\varphi_i - 1) \quad (17)$$

t بیانگر زمان، $S = \{i. |\nabla \varphi_i| > 0\}$ مجموعه‌ای از فازهای دارای N^* عضو است که با یکدیگر برهم‌کنش دارند، f_i^{φ} نیرو محرکه حرکت مرزدانه ناشی از انحنای دانه، f_i^e نیروی کاهنده انرژی الاستیک و ضریب L به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$L = \frac{\pi^2 M}{8 d} \quad (18)$$

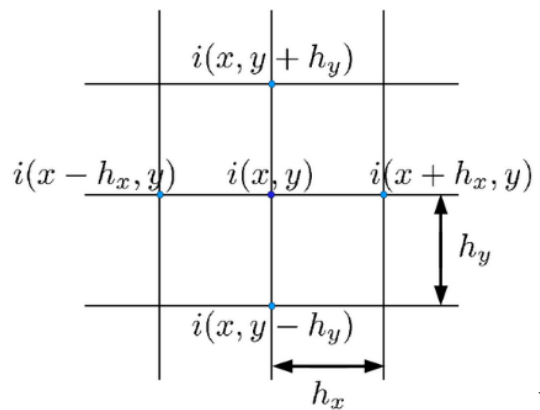
M ضریب جنبشی فیزیکی مرزدانه است. ارتباط میان میدان حرارتی مدلسازی شده و میدان فاز از طریق همین ضریب جنبشی فیزیکی مرزدانه رخ می‌دهد. به‌طوری که دما از حل میدان حرارتی استخراج شده و از طریق رابطه (۱۹) روی M اثر می‌گذارد:

$$M = M_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (19)$$

در این رابطه Q انرژی فعال‌سازی برای حرکت مرزدانه و R ثابت گازها است. لازم به توضیح است که معادلات میدان فاز استخراج شده با در نظر گرفتن بارگذاری الاستیک ذکر شده است اما در این پژوهش بارگذاری الاستیک به‌عنوان عامل ثانویه رشد دانه و حرکت مرزدانه وجود ندارد. بنابراین تمامی جملات مربوط به بارگذاری الاستیک در معادلات صفر در نظر گرفته می‌شود.

۳- پیاده‌سازی عددی

در بخش ۲ به بررسی معادلات میدان حرارتی و معادلات میدان فاز پرداخته شد. از آنجا که تمام معادلات به زبان



شکل ۲. روش استنسیل ۵ گره‌ای

پایداری حل از شرط زیر استفاده می‌شود (۸، ۱۰):

$$\Delta t \leq \frac{0.45\Delta x^2}{\alpha L\kappa} \quad (26)$$

در این رابطه α برای حالت دو بعدی برابر با ۴ و حالت سه‌بعدی برابر با ۶ است. همچنین κ و L از روابط (۱۱) و (۱۸) بدست می‌آید.

به یک ساختار اولیه از دانه‌ها نیاز است تا بتوان شبیه‌سازی را روی آن انجام داد. این ساختار اولیه با فرض توزیع اندازه دانه نرمال به شبکه شبیه‌سازی نسبت داده می‌شود. تکنیک مورد استفاده جهت ایجاد دانه‌ها در اولین گام، تولید دایره‌هایی با فرض توزیع نرمال و به‌صورت تصادفی است. الگوریتم تولید ساختار اولیه ورونوی^۸ است. به‌عنوان اولین مرحله از حل، پلی کریستال اولیه دریافت و تعداد فازها، مقادیر هر فاز و تعداد هر فاز در هر نقطه تعیین می‌شود. برای این منظور کل گره‌های موجود در دامنه حل در دو حلقه بررسی شده و متغیرهای یاد شده ثبت می‌شوند. مطابق با پژوهش‌های کیم و همکاران (۸) احتمال برخورد ۶ فاز مختلف در یک نقطه قابل قبول است. بنابراین در هر گره از شبکه، برای نگه‌داری مقادیر میدان فاز از شش متغیر استفاده می‌شود. سلول شبیه‌سازی در روش میدان فاز که یک حجمک نماینده تصادفی از ریزساختار یک نقطه مادی است، از شبکه‌ای متشکل از گره‌ها تشکیل شده که برای گسسته‌سازی، حل معادلات میدان فاز، و شبیه‌سازی رشد دانه به‌کار می‌رود. در این روش، به دلیل گسسته‌سازی و

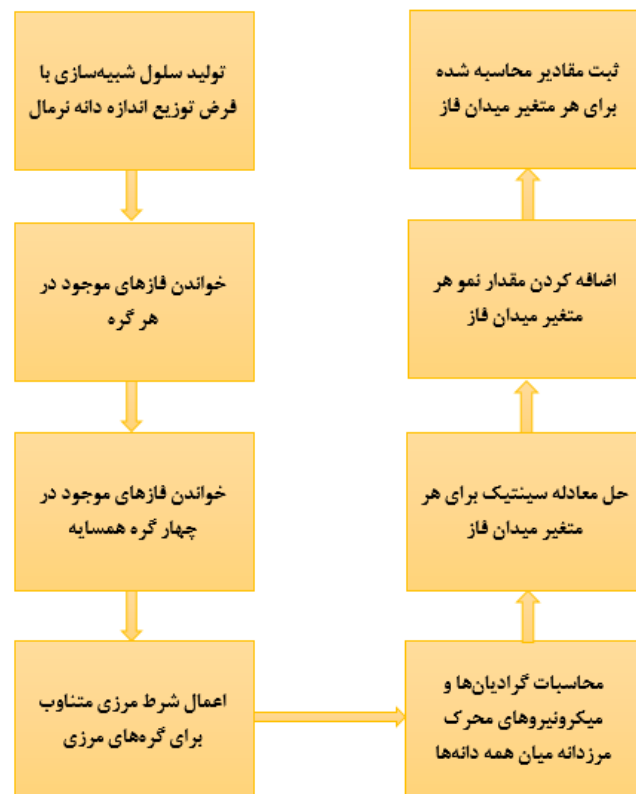
$$\Delta t \leq \frac{\min(\Delta x^2, \Delta y^2)}{2\alpha} \quad (23)$$

در رابطه (۲۲)، α ضریب نفوذ حرارتی است. بنابراین اگر گام زمانی از مقدار معینی که از این رابطه به‌دست می‌آید کوچک‌تر انتخاب شود، پایداری حل تضمین می‌گردد. جهت پیاده‌سازی معادلات میدان فاز نیز می‌توان از روش گسسته‌سازی اویلر پیشرو استفاده نمود. در این روش مقدار تغییر هر متغیر میدان فاز در هر گره پس از گذشت یک گام زمانی مشخص از رابطه (۲۴) محاسبه می‌شود:

$$\varphi_i(r, t + \Delta t) = \varphi_i(r, t) + \frac{\partial \varphi_i(r, t)}{\partial t} \Delta t; \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (24)$$

$$\nabla^2 \varphi_i(r, t) = \frac{1}{\Delta x^2} \sum_j^{inn} (\varphi_i(r_j, t) - \varphi_i(r, t)) \quad (25)$$

رابطه (۲۵) نشان‌دهنده گسسته‌سازی اپراتور لاپلاسین است و اندیس j به تمامی گره‌های مجاور نقطه در مکان r اشاره دارد. معادلات میدان فاز در سرتاسر شبکه به روش تفاضل محدود انتگرال‌گیری می‌شود. برای انتگرال‌گیری از روش انتگرال‌گیری صریح استفاده می‌شود تا پایداری حل نیز مورد توجه قرار گیرد. در این روش با در اختیار داشتن مقادیر تابع در ابتدای بازه زمانی، انتگرال‌گیری بر روی کل بازه انجام می‌شود. بنابراین طول نمو زمانی باید از یک مقدار مشخص کوچک‌تر انتخاب شود تا حل پایدار باشد. برای تضمین



شکل ۳. الگوریتم برنامه‌نویسی محاسبه متغیرهای میدان فاز

میان تمام متغیرهای موجود میدان فاز در گره مورد نظر و گره‌های مجاورش.

۴- حل معادله سینتیک برای هر متغیر میدان فاز و محاسبه‌ی مقدار تغییر آن متغیر
۵- اضافه کردن مقدار نمو هر متغیر میدان فاز به مقدار پیشین

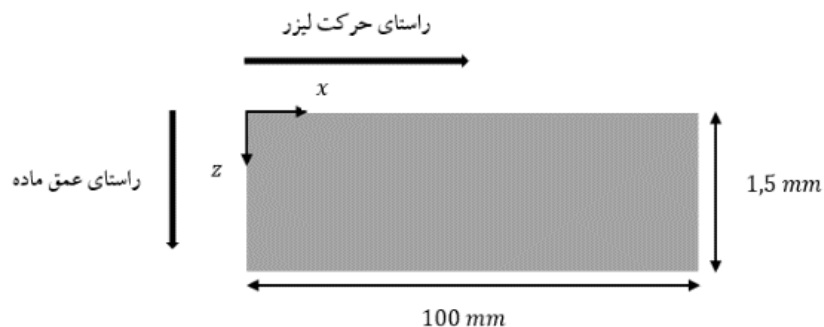
۶- بررسی اینکه هیچ متغیر میدان فازی در گره منفی نشده باشد و مجموع همه متغیرهای میدان فاز در گره برابر یک باشد (اگر متغیر میدان فازی منفی شده بود، مقدار آن متغیر صفر در نظر گرفته می‌شود و در صورتی که مجموع متغیرهای میدان فاز در گره برابر یک نبود، با اعمال یک ضریب، مجموع آن‌ها برابر یک قرار داده می‌شود).

۷- ثبت مقادیر محاسبه شده برای هر متغیر میدان فاز در گره

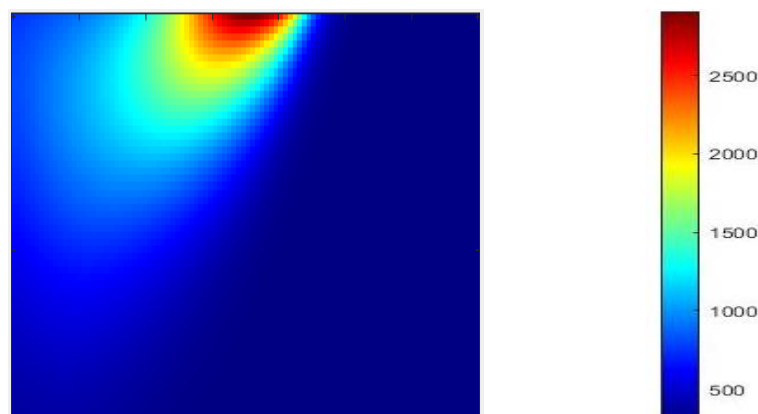
استفاده از روش اویلر پیشرو، در اختیار داشتن اطلاعات گره‌های مجاور ضروری است. برای گره‌های مرزی، لازم است شرایط مرزی به دقت تعریف شود تا مشخص گردد این اطلاعات چگونه برای این گره‌ها تأمین می‌شود. در این پژوهش، از شرط مرزی متناوب جهت شبیه‌سازی استفاده شده است. برای اعمال این شرط مرزی، اطلاعات گره‌های مرزی به گونه‌ای تنظیم می‌شود که به عنوان مثال، اطلاعات مربوط به آخرین نقطه روی محور افقی از اطلاعات اولین نقطه روی همان محور افقی گرفته شود. بنابراین الگوریتم حل مدل‌سازی میدان فاز مطابق با شکل ۳ به شرح زیر است:

۱- خواندن فازهای موجود در گره اندیس فازها
۲- خواندن فازهای موجود در چهار گره مجاور (حل دو بعدی) و در نظر گرفتن شرایط مرزی اگر گره روی مرزها باشد.

۳- محاسبه گرادیان‌ها و میکرونیروهای محرک مرزدانه



شکل ۴- هندسه شبیه‌سازی حرارتی



شکل ۵. توزیع دما در صفحه xz

۴- مسئله و نتایج

هدف از این پژوهش مدل‌سازی رشد دانه و حرکت مرزدانه در طی یک فرایند SLM در حالت جامد است. برای تعیین هندسه شبیه‌سازی حرارتی فرض می‌شود که لیزر یک مسیر به طول 100 mm را طی می‌کند. از آنجا که هدف مدل‌سازی این فرایند در حالت جامد است و تغییرات فاز جامد به مایع و سپس منجمد شدن از اهداف این پژوهش خارج است، بنابراین فرض می‌شود که تاکنون 50 لایه از ماده پرینت شده است و از این پس شبیه‌سازی آغاز می‌شود. ضخامت هر لایه از ماده در این فرایند $30\mu\text{m}$ در نظر گرفته می‌شود. هندسه شبیه‌سازی در شکل ۴ نشان داده شده است.

اکنون شبیه‌سازی آغاز شده و لیزر در راستای محور x حرکت کرده و یک توزیع حرارتی گاوسی روی قطعه ایجاد

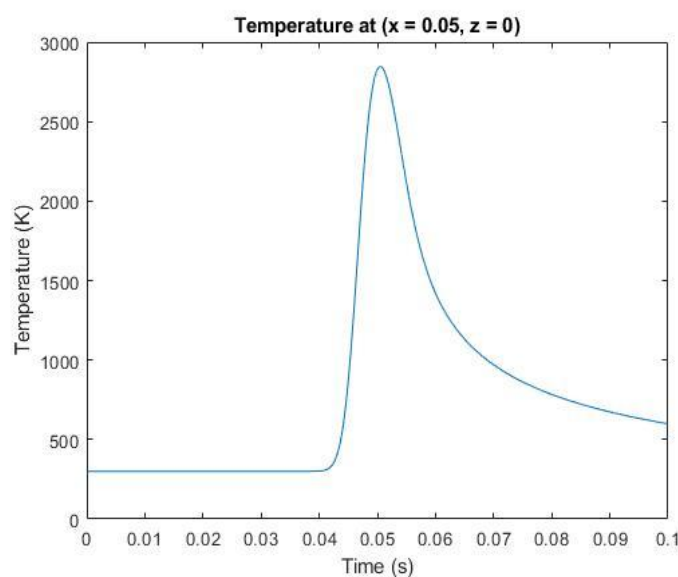
می‌کند. در فرایندهای لیزری، انرژی لیزر به صورت یکنواخت در سطح مقطع پرتو توزیع نمی‌شود. بیشترین شدت انرژی در مرکز پرتو قرار دارد و با فاصله گرفتن از مرکز، به تدریج کاهش می‌یابد. در شکل ۵ توزیع دما در صفحه xz زمانی که لیزر در میانه مسیر قرار دارد، نشان داده شده است. اثر در نظر گرفتن توزیع گاوسی در صفحه xz به خوبی ملاحظه می‌شود.

برای انجام شبیه‌سازی انتقال حرارت، خواص حرارتی ماده و پارامترهای مربوط به لیزر در جدول ۱ آورده شده است (۷). در این پژوهش، ماده مورد استفاده فولاد ضدزنگ 316L است که به دلیل خواص مکانیکی و حرارتی مناسب، به طور گسترده در فرایندهای ساخت افزودنی به کار می‌رود.

با توجه به سرعت حرکت لیزر که 1 m/s است، طول مسیر 100 mm در 0.1 s طی می‌شود و لیزر برای اسکن به

جدول ۱. خواص حرارتی فولاد 316L و پارامترهای لیزری

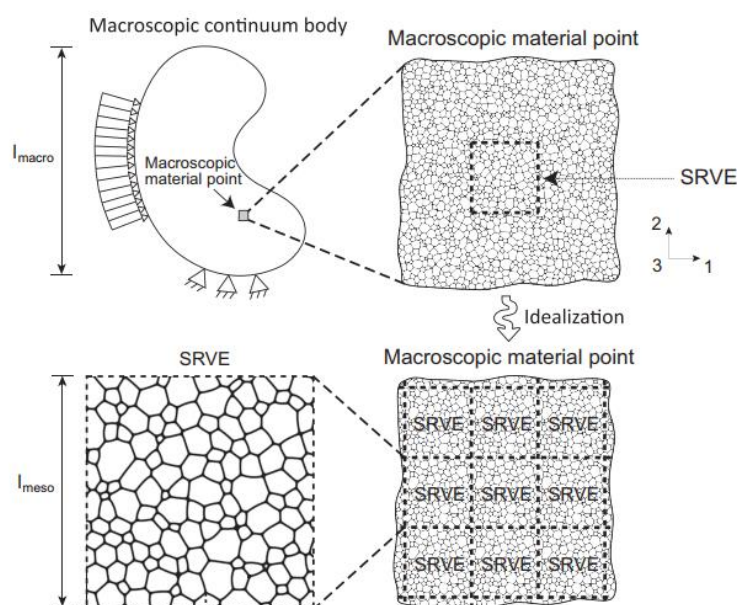
واحد	مقدار	پارامتر
kg/m ³	8084.2	ρ
J/kg.K	770.2	c_p
W/m.K	$9.248 + 1.57e^{-2} \times T$	k
K	300	T_0
W/m ² .K	10	h_c
-	0.7	ε
W/m ² .K ⁴	$5.67 e^{-8}$	σ_{rad}
W	190	P
-	0.6	A
μm	50	r_0
m/s	1	v



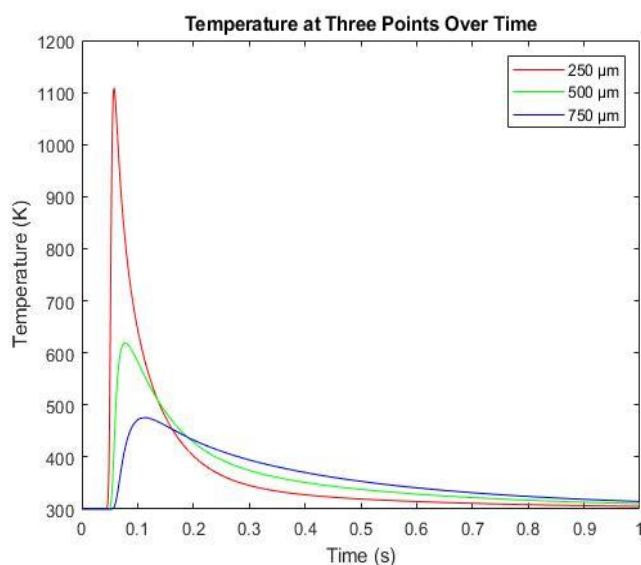
شکل ۶- تغییرات دمای یک نقطه وسط مسیر و روی سطح

روی سطح نشان داده شده است. حداکثر دمایی که در این فرایند حاصل می‌شود روی سطح است که ۲۸۴۵ کلوین است و با نتایج تجربی موجود در مرجع (۷) مطابقت خوبی دارد. برای کوپل کردن مسئله انتقال حرارت و میدان فاز در این پژوهش، از یک رویکرد چند مقیاسی^۹ در بعد مکان استفاده شده است. در شکل ۷ یک نقطه مادی از یک محیط پیوسته انتخاب شده است و با یک حجمک نماینده تصادفی^{۱۰} پوشانده شده است. بنابراین از هندسه شبیه‌سازی شده سه نقطه در راستای عمق انتخاب شده و و تغییرات دمای این سه نقطه در

مسیر دیگری می‌رود اما شبیه‌سازی تا زمان 1 s ادامه می‌یابد و از 0.1 s به بعد اثر لیزر از شبیه‌سازی حذف می‌شود و ماده در تبادیل با محیط شروع به خنک شدن می‌کند. پس از 10 s لیزر مجدد به این مسیر بازگشته و مسیر قبلی را طی می‌کند. از زمان 1 s تا 10 s از آخرین دمای ثبت شده تا زمان 1 s استفاده می‌شود. علت این امر این است که این دما به دمای محیط خیلی نزدیک است و موجب کاهش هزینه محاسباتی خواهد شد. این فرایند تا ۵۰ بار تکرار خواهد شد تا زمان شبیه‌سازی انتقال حرارت که ۵۰۰ ثانیه است کامل شود. در شکل ۶ تغییرات دمای یک نقطه در میانه مسیر اسکن و



شکل ۷. یک نقطه مادی از یک محیط پیوسته و ریزاختر آن (۱)



شکل ۸. تغییرات دما در طول زمان برای سه نقطه در عمق‌های ۲۵۰، ۵۰۰ و ۷۵۰ میکرومتر

از حل انتقال حرارت به دست می‌آید. شکل ۸ تغییرات دمای این سه نقطه را در مدت زمان ۱ s نشان می‌دهد. همان‌گونه که در شکل ۸ مشخص است هنگام عبور لیزر دمای نقطه در عمق ۲۵۰ میکرومتر تا ۱۱۰۸ کلوین، دمای نقطه در عمق ۵۰۰ میکرومتر تا ۶۱۸ کلوین و دمای نقطه در عمق ۷۵۰ میکرومتر تا ۴۷۵ کلوین بالا می‌رود. اکنون که دمای این

طول زمان محاسبه می‌شود. سپس از دمای محاسبه شده از مدل‌سازی حرارتی به عنوان ورودی برای مدل‌سازی میدان فاز استفاده می‌شود. در ارتباط با مسئله شبیه‌سازی، سه نقطه در عمق‌های ۲۵۰، ۵۰۰ و ۷۵۰ میکرومتر و در وسط هندسه شبیه‌سازی حرارتی انتخاب می‌شود و تغییرات دمای این نقاط در مدت زمان ۱ s

جدول ۲. پارامترهای مورد استفاده در شبیه‌سازی میدان فاز (۷،۱)

واحد	مقدار	پارامتر
μm	1	Δx
μm	1	Δy
μm	6	d
J/m^2	1	σ
kJ/mol	140	Q
J/mol.K	8.3145	R
$\text{m}^4/\text{J.s}$	1.1545×10^{13}	M_0

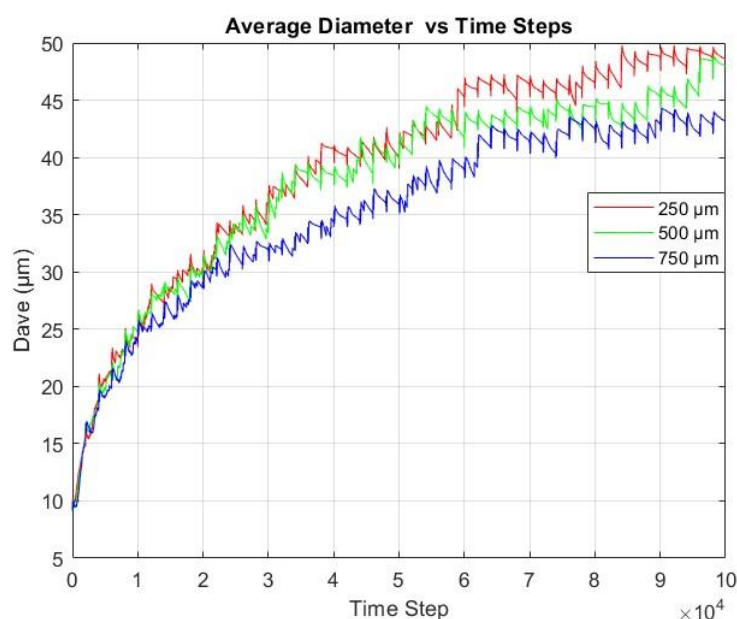
سه نقطه در طول زمان 1 s محاسبه و ذخیره شد، به علت تفاوت گام زمانی شبیه‌سازی میدان حرارتی و شبیه‌سازی میدان فاز (گام زمانی شبیه‌سازی میدان حرارتی از گام زمانی شبیه‌سازی میدان فاز کوچکتر است)، دما در گام‌های زمانی میدان فاز میان‌یابی^{۱۱} و ذخیره می‌شود. اکنون از آخرین دمای بدست آمده تا زمان 1 s برای زمان 1 s تا 10 s استفاده می‌شود. حال با داشتن دما تا زمان 10 s، این پروفیل دمایی ۵۰ بار به صورت متناوب تکرار می‌شود. اکنون دما در ۵۰۰ ثانیه و در گام‌های زمانی میدان فاز برای هر سه نقطه استخراج و ذخیره شده است و به عنوان ورودی به مسئله میدان فاز، در هر گام حل فراخوانی می‌شود.

همان‌گونه که در قسمت قبل عنوان شد جهت کوپل کردن شبیه‌سازی میدان حرارتی و میدان فاز، از یک رویکرد چندمقیاسی استفاده شده است. اکنون با در اختیار داشتن تغییرات دما در سه نقطه در عمق‌های ۲۵۰، ۵۰۰ و ۷۵۰ میکرومتر، یک حجمک نماینده تصادفی به هر یک از این نقاط اختصاص داده می‌شود. برای شبیه‌سازی از حجمک‌های نماینده با طول مشخصه ۲۰۰ میکرومتر استفاده می‌شود. با شروع شبیه‌سازی در هر گام معادلات میدان فاز به کمک روش تفاضلات محدود حل شده نتایج در هر گام زمانی به دست می‌آید. با شروع حل، مرز دانه‌های چندبلوری اولیه حرکت کرده و شکل چندبلوری تغییر می‌کند. در نتیجه این حرکت، تعدادی از دانه‌ها فشرده و حذف می‌شوند و برخی دیگر رشد می‌کنند. بنابراین می‌توان گفت که در حالت کلی تعداد دانه‌ها کم شده و قطر دانه‌ها افزایش می‌یابد. در جدول ۲ پارامترهای مورد استفاده در شبیه‌سازی میدان فاز ذکر شده است.

در شبیه‌سازی‌های مربوط به رشد دانه، از جمله نمودارهای مطرح، نمودار اندازه متوسط دانه بر حسب زمان است. زمانی که دانه‌ها رشد می‌کنند، با بزرگتر شدن دانه‌های دارای پتانسیل، سایر دانه‌ها کوچک و در نهایت حذف می‌شوند. برای محاسبه اندازه متوسط دانه، ابتدا تعداد گره‌های موجود در هر دانه شمارش شده و سپس در حجم دانه ضرب می‌شود. با توجه به اینکه شبیه‌سازی‌های این مقاله به صورت دوبعدی انجام شده‌اند، بعد سوم برابر با $1 \mu\text{m}$ در نظر گرفته می‌شود. بنابراین، حجم یک واحد از شبکه برابر با $(\Delta x)^2 * 1$ یا معادل $1 \mu\text{m}^3$ محاسبه می‌شود. در تمامی منابع موجود، برای نسبت دادن یک اندازه به دانه، فرض می‌شود که دانه‌ها کروی هستند. بر این اساس، یک قطر معادل به دانه نسبت داده می‌شود. این قطر با برابر قرار دادن حجم دانه با حجم یک کره فرضی به دست می‌آید. قطر معادل دانه از رابطه (۲۷) محاسبه می‌شود.

$$R_v = \sqrt{\frac{4V}{\pi}} \quad (27)$$

در این رابطه، V نشان‌دهنده حجم دانه است که از حاصل ضرب تعداد گره‌های دانه در حجم واحد شبکه به دست آمده و R_v قطر معادل محاسبه شده است. برای محاسبه اندازه متوسط دانه در یک شبکه شبیه‌سازی شده $\langle R \rangle$ ، ابتدا قطر معادل هر دانه محاسبه می‌شود. سپس، با جمع کردن تمامی قطرهای معادل و تقسیم آن بر تعداد کل دانه‌ها، اندازه متوسط دانه در شبکه به دست می‌آید. در شکل ۹ نمودار اندازه متوسط دانه از حل شبیه‌سازی میدان فاز برای سه حجمک نماینده با طول مشخصه ۲۰۰ میکرومتر در عمق‌های ۲۵۰، ۵۰۰ و ۷۵۰



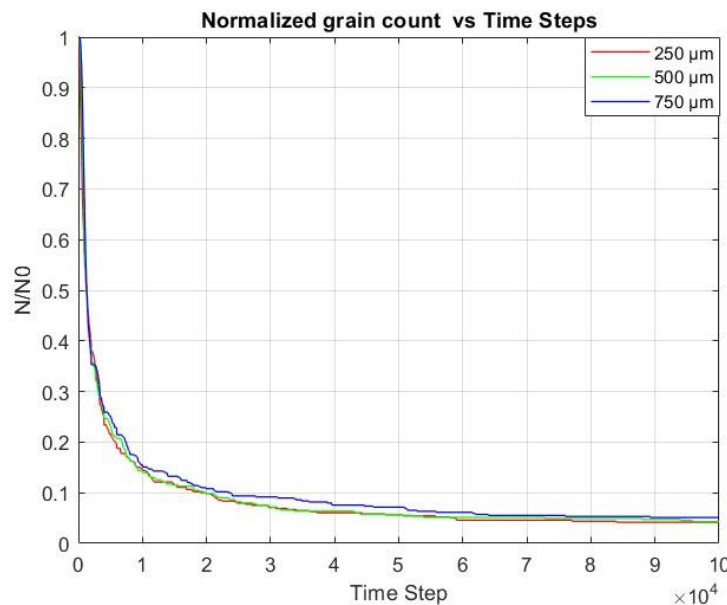
شکل ۹. نمودار اندازه متوسط دانه بر حسب زمان برای حجمک نماینده در عمق‌های ۲۵۰، ۵۰۰ و ۷۵۰ میکرومتر

است. در مقابل، کاهش دما از ۶۱۸ کلوین به ۴۷۵ کلوین باعث افت شدیدی در تحرک مرزدانه می‌شود. علاوه بر آن، در دماهای بالاتر (مانند نقطه ۲۵۰ میکرومتر)، رشد دانه به سرعت اتفاق می‌افتد و سیستم به حالت نیمه‌اشباع نزدیک می‌شود؛ یعنی دانه‌های بزرگ‌تر، رشد محدودتری در ادامه خواهند داشت. در نقطه ۵۰۰ میکرومتر، دما به گونه‌ای است که رشد مؤثر هنوز ادامه دارد. در نقطه ۷۵۰ میکرومتر، دما آن‌چنان پایین است که رشد دانه‌ها بسیار کند بوده و تأثیر دما محسوس‌تر است.

در طی شبیه‌سازی، لیزر هر ۲۰۰۰ گام زمانی یک‌بار مسیر را اسکن کرده است. در هر سه نمودار در شکل ۹ ملاحظه می‌شود زمانیکه لیزر مسیر را اسکن کرده است در آن گام‌های زمانی یک پله در نمودار ایجاد شده است و اندازه متوسط دانه افزایش پیدا کرده است. این افزایش اندازه متوسط دانه برای سه نقطه مورد نظر متفاوت است. در حجمک نماینده در عمق ۲۵۰ میکرومتر به علت اینکه دمای بالاتری را تجربه می‌کند، افزایش اندازه متوسط دانه نیز بیشتر است. هم‌چنین می‌توان گفت افزایش اندازه متوسط دانه در حجمک نماینده در

میکرومتر در طول ۱۰۰۰۰۰ گام زمانی و ۵۰۰ ثانیه نشان داده شده است.

همان‌طورکه در هر سه نمودار مشخص است اندازه متوسط دانه در طول زمان افزایش می‌یابد و روند نمودار یک روند صعودی است اما با این حال تفاوت‌هایی بین رشد دانه در این سه نقطه وجود دارد. با اینکه اندازه متوسط دانه اولیه در هر سه نقطه مساوی و تقریباً برابر با ۹ میکرومتر است اما در انتهای ۱۰۰۰۰۰ گام زمانی در حجمک نماینده در عمق ۲۵۰ میکرومتر، اندازه متوسط دانه ۵۰ میکرومتر، در حجمک نماینده در عمق ۵۰۰ میکرومتر برابر با ۴۷ میکرومتر و در حجمک نماینده در عمق ۷۵۰ میکرومتر برابر با ۴۳ میکرومتر است. این به این معنی است که در نقطه‌ای که دمای بیشتری را تجربه کرده است، در انتها اندازه متوسط دانه نیز بیشتر است و به عبارتی میزان درشت شدن دانه نیز بیشتر است. با افزایش دما، تحرک مرزدانه به صورت نمایی افزایش می‌یابد، اما این افزایش در دماهای بالا با شیب کمتری ادامه می‌یابد (رفتار اشباع‌گونه تابع نمایی). بنابراین تفاوت تحرک مرزدانه بین ۶۱۸ کلوین و ۱۱۰۸ کلوین، علیرغم تفاوت عددی زیاد در دما، نسبتاً محدود



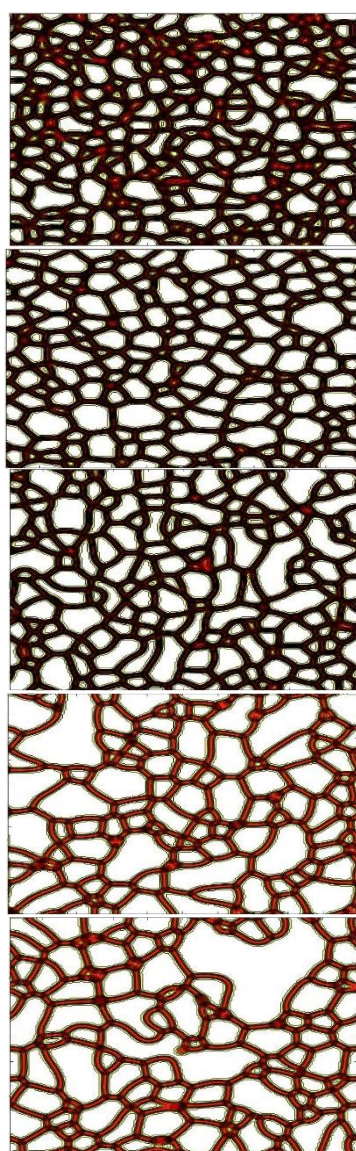
شکل ۱۰. نمودار تعداد دانه نرمال بر حسب زمان برای حجمک نماینده در عمقهای ۲۵۰، ۵۰۰ و ۷۵۰ میکرومتر

تعداد کل دانه‌ها کم شده می‌شود. بنابراین با گذشت زمان و رشد دانه‌ها، تعداد دانه‌ها کاهش می‌یابد و روند نمودار یک روند نزولی است. نتایج به‌دست آمده از این نمودار تعداد دانه نرمال نشان می‌دهد که کاهش تعداد دانه‌ها تا ۲۰۰۰۰ گام زمانی اول نسبتاً شدید است اما پس از آن روند نزولی نمودار آهسته‌تر دنبال می‌شود. به‌طور مثال برای حجمک نماینده در عمق ۲۵۰ میکرومتر، تعداد دانه اولیه برابر با ۴۷۹ دانه است که پس از ۲۰۰۰۰ گام زمانی به ۴۷ دانه کاهش یافته است. برای دو حجمک نماینده دیگر نیز روند کلی به‌همین صورت است. علت این پدیده کاهش نرخ تغییرات تعداد دانه در طول زمان است. در ابتدای فرایند رشد، دانه‌ها کوچک هستند و به‌دلیل انحنای بالای مرزدانه‌ها، نیروی محرکه زیادی برای حرکت دارند. همچنین تعداد زیادی مرز با انرژی بالا در سیستم وجود دارد که به‌سرعت کاهش می‌یابد. این شرایط منجر به رشد سریع برخی دانه‌ها و حذف سریع دانه‌های کوچک‌تر می‌شود. با گذشت زمان، دانه‌ها بزرگ‌تر شده، انحنای مرزدانه‌ها کاهش می‌یابد و در نتیجه نیروی محرکه برای حرکت کمتر می‌شود. سیستم به حالت‌های تعادلی موضعی نزدیک شده و مرزدانه‌ها به‌صورت پایدارتر رفتار می‌کنند. در

عمق ۵۰۰ میکرومتر نیز از حجمک نماینده در عمق ۷۵۰ میکرومتر بیشتر است زیرا دمای بالاتری را تجربه کرده است. از دیگر نتایجی که از این سه نمودار حاصل می‌شود نرخ رشد دانه است. در حجمک نماینده با عمق ۲۵۰ میکرومتر نرخ رشد دانه بیشتر است و به‌عبارتی دانه سریع‌تر رشد می‌کند. علت این اتفاق به ارتباط میان دما و تحرک مرزدانه مربوط می‌شود. هر چه دما بالاتر باشد، تحرک مرزدانه به‌صورت نمایی افزایش می‌یابد. در نتیجه مرزدانه‌ها سریع‌تر حرکت کرده و میزان درشت شدن دانه نیز بیشتر است.

از دیگر نمودارهای مطرح در شبیه‌سازی میدان فاز نمودار تعداد دانه نرمال در طول زمان است. تعداد دانه نرمال از تقسیم تعداد دانه بر تعداد دانه اولیه به‌دست می‌آید. در شکل ۱۰ نمودار تعداد دانه نرمال از حل شبیه‌سازی میدان فاز برای سه حجمک نماینده در عمق‌های ۲۵۰، ۵۰۰ و ۷۵۰ میکرومتر در طول ۱۰۰۰۰۰ گام زمانی و ۵۰۰ ثانیه نشان داده شده است.

همان‌گونه که در هر سه نمودار در شکل ۱۰ واضح است، با گذشت زمان، برخی از دانه‌ها رشد کرده و برخی دیگر فشرده و در نهایت حذف می‌شوند. هرگاه که یک یا چند دانه حذف شود یک پله در نمودار تعداد دانه نرمال ایجاد می‌شود زیرا



(الف)

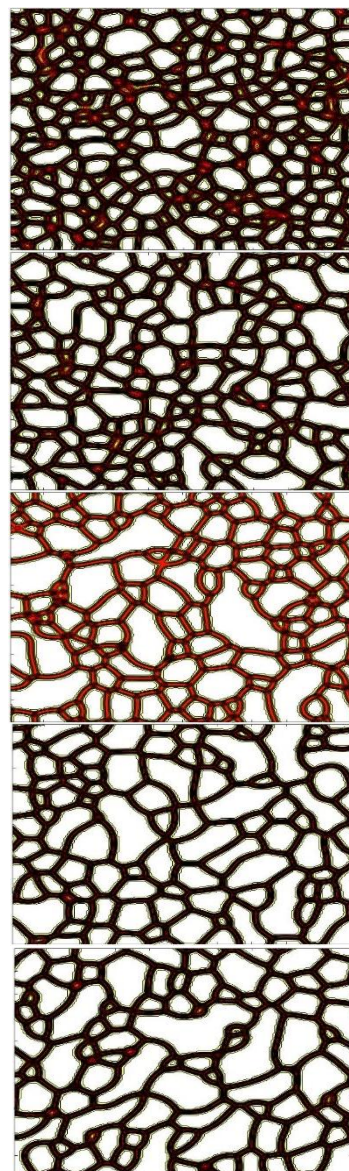
(ب)

(ج)

(د)

(ه)

شکل ۱۲. تغییر ریزساختار حجمک نماینده در عمق ۵۰۰ میکرومتر به فاصله ۲۰۰۰۰ گام زمانی



(الف)

(ب)

(ج)

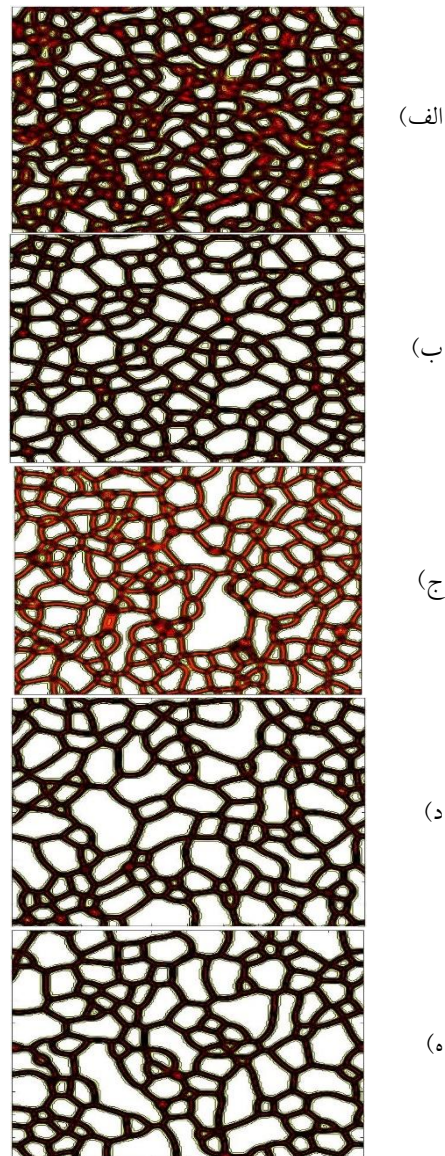
(د)

(ه)

شکل ۱۱. تغییر ریزساختار حجمک نماینده در عمق ۲۵۰ میکرومتر به فاصله ۲۰۰۰۰ گام زمانی

نمایش رشد دانه با استفاده از معادلات و شبیه‌سازی این پدیده، یکی از مهم‌ترین گام‌ها برای دستیابی به مواد پیشرفته محسوب می‌شود. در این پژوهش، تکامل ریزساختار چندبلوری‌ها که موضوع اصلی تحقیق است، برای سه حجمک نماینده با طول مشخصه ۲۰۰ میکرومتر برای سه حجمک نماینده در عمق‌های ۲۵۰، ۵۰۰ و ۷۵۰ میکرومتر گزارش می‌شود. در شکل‌های ۱۱ تا ۱۳ تغییرات ریزساختار به فاصله

این مرحله، کاهش تعداد دانه‌ها با نرخ آهسته‌تری رخ می‌دهد. بنابراین کاهش نرخ تغییرات تعداد دانه‌ها ناشی از کاهش نیروی محرکه انحنای مرزها و نزدیک شدن به تعادل انرژی در سیستم است. نتیجه دیگری که از نمودار تعداد نرمال در سه حجمک نماینده مشاهده می‌شود این است که در حجمک نماینده در عمق ۷۵۰ میکرومتر، نرخ کاهش تعداد دانه‌ها کمتر است. اما دو حجمک نماینده دیگر نتایج تقریباً مشابهی در این زمینه دارند.



شکل ۱۳. تغییر ریزساختار حجمک نماینده در عمق ۷۵۰ میکرومتر به فاصله ۲۰۰۰۰ گام زمانی

به عبارتی می‌توان گفت تغییرات ریزساختار نیز نتایجی که از نمودارهای اندازه متوسط دانه و نمودارهای تعداد دانه نرمال گرفته شد را تایید می‌کند.

۵- نتیجه‌گیری

هدف از این پژوهش، مطالعه‌ی دقیق‌تر تعاملات حرارتی و میکروساختاری در فرایندهای متالورژی پیشرفته، به ویژه فرایند SLM و توسعه مدلی برای تحلیل این رفتارها بوده

۲۰۰۰۰ گام زمانی برای سه حجمک نماینده در عمق‌های ۲۵۰، ۵۰۰ و ۷۵۰ میکرومتر نشان داده شده است. روند تغییرات ریزساختار و رشد دانه‌بندی در طول زمان برای هر سه حجمک نماینده در عمق‌های ۲۵۰، ۵۰۰ و ۷۵۰ میکرومتر تقریباً یکسان است با این تفاوت که هر چه حجمک نماینده دمای بیشتری را تجربه کرده باشد، به‌علت بالاتر بودن تحرک مرزدانه‌ها، در آن گام‌های زمانی که لیزر عبور کرده است نرخ رشد دانه نیز بیشتر است و در نتیجه در گام‌های زمانی یکسان نرخ درشت‌شدن دانه‌بندی نیز بیشتر می‌شود.

در حجمک نماینده در عمق 250° میکرومتر بیشتر از دو حجمک نماینده دیگر است. علت این پدیده نیز مجدداً بالاتر بودن دما در این حجمک نماینده است.

نتایج نشان می‌دهد که نرخ رشد دانه‌ها و حرکت مرزدانه‌ها و در نتیجه کاهش تعداد دانه‌ها در ابتدای حل زیاد است اما با گذشت زمان و پایداری شدن مرزدانه‌ها، نرخ رشد دانه نیز کمتر می‌شود. اما با این حال نرخ رشد دانه‌ها در حجمک نماینده در عمق 750° میکرومتر از دو حجمک نماینده دیگر کمتر است. زیرا در این حجمک نماینده دما کمتر بوده و در نتیجه تحرک مرزدانه‌ها نیز کمتر است.

یکی از محدودیت‌های این پژوهش مدل‌سازی به‌صورت کاملاً دوبعدی است. اگرچه پژوهش‌های زیادی با استفاده از روش میدان فاز به صورت دوبعدی در زمینه‌های دیگر رشد میکروساختار مثل رشد ترک (۱۸-۲۲)، تبدیل فاز (۲۳، ۲۴) و دوقلوبی شدن (۲۵) انجام شده است. اگر مدل‌سازی به‌صورت سه‌بعدی انجام شود تعداد دانه‌ها بسیار بیشتر می‌شود و در این صورت به‌علت استفاده از زبان برنامه‌نویسی متلب، هزینه محاسباتی به‌شدت افزایش می‌یابد. البته با توجه به این که رشد دانه در راستای ضخامت ماده مهم است شبیه‌سازی دوبعدی توجیه دارد.

است. برای شبیه‌سازی میدان حرارتی، از ویژگی‌های حرارتی فرآیند SLM استفاده شده و کدنویسی‌های لازم به زبان متلب انجام گرفت. در این مرحله، تغییرات دما در سه نقطه از عمق‌های مختلف (250° ، 500° و 750° میکرومتر) و در وسط هندسه محاسبه شد تا رفتار حرارتی و توزیع دما در راستای ضخامت ماده مشخص گردد.

در ادامه، برای کوپل‌سازی مکانی شبیه‌سازی میدان فاز و میدان حرارتی، از یک رویکرد چندمقیاسی استفاده شد. به منظور بررسی دقیق‌تر این تعاملات، حجمک نماینده با طول مشخصه 200° میکرومتر در نظر گرفته شد. نتایج به‌دست آمده از این پژوهش به این صورت است که اندازه متوسط دانه در طول زمان افزایش می‌یابد و روند نمودارها یک روند صعودی است اما با این حال تفاوت‌هایی بین رشد دانه در این سه نقطه وجود دارد. در انتهای حل، در حجمک نماینده در عمق 250° میکرومتر، اندازه متوسط دانه بیشتر است. همچنین در حجمک نماینده در عمق 500° میکرومتر نیز اندازه متوسط دانه در انتهای حل از حجمک نماینده در عمق 750° میکرومتر بیشتر است؛ یعنی حجمک نماینده که دمای بیشتری را تجربه کرده است، در انتهای حل رشد دانه بیشتری را گزارش می‌دهد.

همچنین با هر بار عبور لیزر و اسکن کردن مسیر، اندازه متوسط دانه افزایش می‌یابد اما این افزایش اندازه متوسط دانه

واژه‌نامه

1. Representative Volume Element (RVE)
2. Monte carlo model
3. Vertex model
4. Grain boundary mobility
5. Selective laser melting
6. Explicit Euler

7. Courant-Friedrichs-Lewy
8. Voronoi
9. Multiscale Approach
10. Stochastic Representative Volume Element (SRVE)
11. Interpolation

References

1. Jamshidian, M., and Rabczuk, T., "Phase field modelling of stressed grain growth: analytical study and the effect of microstructural length scale", *Journal of Computational Physics*, Vol. 261, pp. 23-35, 2014.
2. Moelans, N., Blanpain, B., and Wollants, P., "An introduction to phase-field modeling of microstructure evolution", *Calphad*, Vol. 32, No.2, pp. 268-94, 2008.

منابع

3. Singer-Loginova, I., and Singer, H. M., "The phase field technique for modeling multiphase materials". *Reports on progress in physics*, Vol. 71, No. 10, p. 106501. 2008.
4. Allen, S. M., and Cahn, J. W., "A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to

- antiphase domain coarsening", *Acta metallurgica*, Vol. 27, No. 6, pp. 1085-1095, 1979.
5. Fan, D., and Chen, L. Q., "Computer simulation of grain growth using a continuum field model", *Acta Materialia*, Vol. 45, No. 2, pp. 611-622, 1997.
 6. Steinbach, I., and Pezzolla, F., "A generalized field method for multiphase transformations using interface fields", *Physica D: Nonlinear Phenomena*, Vol. 134, No. 4, pp. 385-393, 1999.
 7. Yang, M., Wang, L., and Yan, W., "Phase-field modeling of grain evolutions in additive manufacturing from nucleation, growth, to coarsening", *Npj Computational Materials*, Vol. 7, No. 1, p. 56, 2021.
 8. Kim, S. G., Kim, D. I., Kim, W. T., and Park, Y. B., "Computer simulations of two-dimensional and three-dimensional ideal grain growth", *Physical Review E-Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, Vol. 74, No. 6, p. 061605, 2006.
 9. Tonks, M., Millett, P., Cai, W., and Wolf, D., "Analysis of the elastic strain energy driving force for grain boundary migration using phase field simulation", *Scripta Materialia*, Vol. 63, No. 11, pp. 1049-1052, 2010.
 10. Thamburaja, P. and Jamshidian, M., "A multiscale Taylor model-based constitutive theory describing grain growth in polycrystalline cubic metals", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 63, No.1, pp. 1-28, 2014.
 11. Tonks, M. R., Zhang, Y., Bai, X., and Millett, P. C., "Demonstrating the temperature gradient impact on grain growth in UO₂ using the phase field method", *Materials Research Letters*, Vol. 2, No. 1, pp. 23-28, 2014.
 12. Shi, Q., Gu, D., Xia, M., Cao, S., and Rong, T., "Effects of laser processing parameters on thermal behavior and melting/solidification mechanism during selective laser melting of TiC/Inconel 718 composites", *Optics & Laser Technology*, Vol. 84, pp. 9-22, 2016.
 13. Zhang, X. and Liao, Y., "A phase-field model for solid-state selective laser sintering of metallic materials", *Powder technology*, Vol. 339, pp. 677-685, 2018.
 14. Fu, CH., and Guo, Y. B., "3-dimensional finite element modeling of selective laser melting Ti-6Al-4V alloy" *25th Annual International Solid Freeform Fabrication Symposium*, Austin, Texas, 2014.
 15. Kalidindi, S. R., Bronkhorst, C. A., and Anand L., "Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of FCC metals", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 40, No. 3, pp. 537-569, 1992.
 16. Takaki, T., Hisakuni, Y., Hirouchi, T., Yamanaka, A., and Tomita, Y., "Multi-phase-field simulations for dynamic recrystallization", *Computational Materials Science*, Vol. 45, No. 4, pp. 881-888, 2009.
 17. Moelans, N., "A quantitative and thermodynamically consistent phase-field interpolation function for multi-phase systems", *Acta Materialia*, Vol. 59, No. 3, pp. 1077-1086, 2011.
 18. Levitas, V. I., Jafarzadeh, H., Farrahi, G. H., and Javanbakht, M., "Thermodynamically consistent and scale-dependent phase field approach for crack propagation allowing for surface stresses", *International Journal of Plasticity*, Vol. 111, pp. 1-35, 2018.
 19. Shojaiefard, M. H., Silani, M., Javanbakht, M., and Jafarzadeh, H., "Two-dimensional micromechanical analysis of fracture in human cortical bone tissue using the phase-field method", *Journal of Computational Methods in Engineering*, Vol. 43, No. 2, pp. 143-161, 2025.
 20. Jafarzadeh, H., and Mansoori, H., "Phase field approach to mode-I fracture by introducing an eigen strain tensor: general theory", *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, Vol. 108, p. 102628, 2020.
 21. Jafarzadeh, H., Farrahi, G. H., Levitas, V. I., Javanbakht, M., "Phase field theory for fracture at large strains including surface stresses", *International Journal of Engineering Science*, Vol. 178, p. 103732, 2022.
 22. Jafarzadeh, H., Shchyglo, O., Steinbach, I., "Multi-phase-field approach to fracture demonstrating the role of solid-solid interface energy on crack propagation", *International Journal of Fracture*, Vol. 245, No. 1, pp. 75-87, 2024.
 23. Jafarzadeh, H., Levitas, V. I., Farrahi, GH., Javanbakht, M., "Phase field approach for nanoscale interactions between crack propagation and phase transformation", *Nanoscale*, Vol. 11, No. 46, pp. 22243-22247, 2019.
 24. Rahbar, H., Javanbakht, M., Ziaei-Rad, S., Reali, A., Jafarzadeh, H., "Finite element analysis of coupled phase-field and thermoelasticity equations at large strains for martensitic phase transformations based on implicit and explicit time discretization schemes", *Mechanics of Advanced Materials and Structures*, Vol. 29, No. 17, pp. 2531-2547, 2022.
 25. Amirian, B., Jafarzadeh, H., Abali, B. E., Reali A., Hogan, J. D., "Thermodynamically-consistent derivation and computation of twinning and fracture in brittle materials by means of phase-field approaches in the finite element method", *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 252, p. 111789, 2022.