Kharazmi University

Mathematical Researches

Print ISSN: 2588-2546
Online ISSN: 2588-2554

Homepage: https://jemr.khu.ac.ir/

A Local Meshless Method for Numerical Simulation of Dendritic Crystal Growth

Mohammad Ilati

Department of Applied Mathematics, Faculty of Basic Sciences, Sahand University of Technology, Tabriz, Iran.
E-mail: ilati@sut.ac.ir

Article Info

Article type:
Research Article

Article history:
Received: 7 November 2022
Received in revised form: 25 January 2023
Accepted: 24 April 2023
Published online: 19 February 2024

Keywords:
Dendritic crystal growth,
Dendritic solidification,
Pure metal solidification,
Microstructure evolution,
Kobayashi phase-field model,
Meshless method,
Moving Kriging approximation.

ABSTRACT

Introduction
Solidification processes are present in a wide range of manufacturing methods and applications, from metallurgy to food processing. In recent years, Phase-Field models have been increasingly used to simulate and predict the formation and evolution of material microstructure and phase change interfacial kinetics. In this article, we study the phase-field model of solidification for numerical simulation of dendritic crystal growth that occurs during the casting of metals and alloys based on the Kobayashi model.

Material and Methods
At first, the Kobayashi phase-field model, which describes the solidification of a pure material from an undercooled melt, is introduced in detail. In discretization process of this model, the time derivatives are approximated via finite difference method. Then the local meshless moving Kriging method is applied for discretization of the model in space direction. The moving Kriging method is a truly meshless method in which the unknown function can be approximated locally, and this leads to the sparsity of the coefficient matrix. As the shape functions possess the Kronecker delta function property, boundary conditions can be implemented without any difficulties.

Results and discussion
The model is simulated for various values of its parameters. Numerical simulations illustrate the applicability and effectiveness of the proposed method.

Conclusion
As a consequence, it is found that the method is very efficient and accurate for phase-field models compared with other conventional methods. Therefore, this method can be considered as an attractive alternative to existing mesh-based methods in solving phase-field models.

How to cite: Ilati, M. (2023). A local meshless method for numerical simulation of dendritic crystal growth. *Mathematical Researches*, 9 (4), 156 – 177.

© The Author(s). Publisher: Kharazmi University

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]

شاپا چاپی: ۲۵۴۶-۲۵۸۸
شاپا الکترونیکی: ۲۵۵۴-۲۵۸۸

پژوهش‌های ریاضی

Homepage: https://mmr.khu.ac.ir/

یک روش بدون شبکه موضعی برای شبیه سازی عددی رشد دندریتی کریستال

محمد ایلاتی

گروه ریاضی کاربردی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه صنعتی سهند، تبریز، ایران. رایانامه: ilati@sut.ac.ir

اطلاعات مقاله

نوع مقاله: مقاله پژوهشی

تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۸/۱۶
تاریخ بازنگری: ۱۴۰۱/۱۱/۵
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۲/۴
تاریخ انتشار: ۱۴۰۲/۱۲/۱۰

واژه‌های کلیدی:
رشد دندریتی کریستال،
انجماد دندریتی،
انجماد فلز خالص،
تکامل ریزساختار،
مدل میدان-فاز کوبایاشی،
روش بدون شبکه،
تقریب کریجینگ متحرک.

چکیده

فرآیندهای انجماد در طیف گسترده‌ای از روش‌های ساخت و تولید، از متالورژی گرفته تا فرآوری مواد غذایی، وجود دارند. در سال‌های اخیر، مدل‌های میدان-فاز به طور فزاینده‌ای برای شبیه‌سازی و پیش‌بینی شکل‌گیری و تکامل ریزساختار مواد و سینتیک سطحی تغییر فاز مورد استفاده قرار گرفته‌اند. در این مقاله، مدل میدان-فاز انجماد را برای شبیه‌سازی عددی رشد دندریتی کریستال که در طی ریخته‌گری فلزات و آلیاژها بر اساس مدل کوبایاشی رخ می‌دهد، مطالعه می‌کنیم. ابتدا با استفاده از روش تفاضلات متناهی، این مدل را در جهت زمانی گسسته‌سازی می‌کنیم. سپس روش بدون شبکه کریجینگ متحرک را برای گسسته‌سازی مدل در راستای متغییر مکان اعمال می‌کنیم. روابط کیفی بین اشکال کریستال و پارامترهای مدل، در شبیه‌سازی عددی مدل مورد مطالعه قرار می‌گیرند. روش کریجینگ متحرک یک روش کاملا بدون شبکه است که در آن تابع مجهول را می توان به صورت موضعی تقریب زد که این منجر به تنک شدن ماتریس ضریب می‌شود. با توجه به مزایای قابل توجه روش‌های بدون شبکه، این روش را می‌توان جایگزینی بر روش‌های مبتنی بر شبکه‌ای در نظر گرفت که تا قبل از این برای شبیه‌سازی این مدل‌ها به کار برده شده است.

استناد: ایلاتی، محمد؛ (۱۴۰۲). یک روش بدون شبکه موضعی برای شبیه سازی عددی رشد دندریتی کریستال. *پژوهش‌های ریاضی*، ۹ (۴)، ۱۵۶ – ۱۷۷.

ناشر: دانشگاه خوارزمی

© نویسندگان.

CC BY NC

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]

مقدمه

تشکیل ریزساختارهای پیچیده در طول انجماد از یک فاز مایع، مانند تشکیل دانه های برف و ریزساختار ریخته‌گری فلزات، قرن‌هاست که دانشمندان را مجذوب خود کرده است. به طور خاص، تکامل مقیاس ریزساختاری دندریت‌ها در طول انجماد، بسیاری از خواص فیزیکی و مکانیکی فلزات را تعیین می‌کند، زیرا تقریباً هر سیستم فلزی از حالت مایع سرچشمه می‌گیرد. مطالعات تجربی انجام شده در [۱۱, ۱۴]، داده‌های مورد نیاز بسیاری را برای توسعه نظریه‌های انجماد فراهم آورده است. پایه اولیه اکثر نظریه‌های انجماد، مبتنی بر معادله وابسته به زمان استفان[1] (رویکرد سطح مشترک تیز) می‌باشد. این نظریه، تکامل میدان انتشار در فرایند انجماد با دو شرط در فصل مشترک جامد-مایع را توصیف می‌کند. شرط اول به نسبت سرعت سطح مشترک متحرک جامد-مایع به اختلاف شارهای حرارتی در سراسر سطح مشترک مربوط می‌شود. شرط دوم که شرط گیبس-تامسون[2] نامیده می‌شود به نسبت دمای سطحی به تعادل ترمودینامیکی، انحنای سطحی موضعی، و سینتیک سطح مشترک مربوط می‌شود. با توجه به مشکلات موجود در حل مجموعه‌ای از معادلات دیفرانسیل ناشی از رویکردهای سطح مشترک تیز، روش مدل‌سازی میدان-فاز در شبیه‌سازی فرآیند انجماد دندریتی بسیار موفق بوده است. در سال ۱۹۸۰ چاگینالپ[3] و فیفه[4] [7] رویکرد مدل‌سازی میدان-فاز را برای شبیه‌سازی انجماد دندریتی اتخاذ کردند. در [۲۷]، کوبایاشی[5] یک مدل میدان-فاز ساده را برای انجماد یک سیستم تک جزئی توسعه داد. این مدل شامل ناهمسانگردی سطحی می‌باشد. مدل در تبیین روابط کیفی بین اشکال کریستال‌ها و برخی پارامترهای فیزیکی و نویزها موفق بود تا از این طریق تأثیر مهمی بر ساختار شاخه جانبی دندریت‌ها بگذارد. اولین مدل میدان-فاز برای آلیاژها توسط ویلر[6] و همکاران توسعه داده شد که مدل WBM نامیده می‌شود [۴۵, ۴۶]. کیم[7] و همکارانش در [۲۵, ۲۶] با اتخاذ سطح مشترک نازک، مدل دیگری برای آلیاژها ارائه کردند که به مدل KKS معروف است. در [۲۲]، کارما[8] یک فرمول میدان-فاز را برای شبیه‌سازی کمی تشکیل الگوی ریزساختاری در آلیاژها ارائه کرد. سطح مشترک نازک این فرمول محدودیت بسیار کمتری را در انتخاب ضخامت سطح مشترک نسبت به فرمول‌های قبلی ایجاد کرد و اجازه حذف اثرات عدم تعادل در سطح مشترک را دارد. شبیه‌سازی رشد دندریت با انتشار جامد در حال محو شدن، نشان داد که هم تکامل سطح مشترک و هم مشخصات املاح در جامدات به دقت با این رویکرد مدل‌سازی شدند. انجمادها با جریان اجباری یا همرفت در آلیاژهای دوتایی در حالت‌های دو بعدی و سه بعدی نیز مورد مطالعه قرار گرفتند [۱۰, ۲۱, ۲۳, ۴۱, ۴۴]. همچنین در [۳۲, ۳۳, ۴۰, ۴۷]، انجماد آلیاژهای چند جزئی و چند فازی با استفاده از روش های میدان فازی مورد بررسی قرار گرفته‌اند. تاکنون روش‌های مبتنی بر شبکه به همراه الگوریتم‌های شبکه تطبیقی از قبیل روش تفاضلات متناهی [۵, ۶]، روش عناصر متناهی [۳۴-۳۶, ۴۲, ۴۳]، و روش حجم متناهی [۲۸-۳۰] برای این اهداف توسعه یافته اند.

[1] Stefan
[2] Gibbs–Thomson condition
[3] Caginalp
[4] Fife
[5] Kobayashi
[6] Wheeler
[7] Kim
[8] Karma

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]

روش‌های عددی مثل روش تفاضلات متناهی، روش عناصر متناهی و روش حجم متناهی بر روی شبکه‌ای از نقاط تعریف می‌شوند. در چنین شبکه‌ای، هر نقطه دارای تعداد ثابتی از همسایه‌های از پیش تعریف‌شده است و این اتصال بین نقاط همسایه می‌تواند برای تعریف عملگرهای ریاضی مانند مشتق مورد استفاده قرار گیرد. اما در شبیه‌سازی‌هایی که ماده شبیه‌سازی‌شده می‌تواند به اطراف حرکت کند (مانند دینامیک سیالات محاسباتی) یا جایی که تغییر شکل‌های بزرگ مواد ممکن است رخ دهد (مانند شبیه‌سازی مواد پلاستیکی)، حفظ اتصال شبکه بدون ایجاد خطا در آن دشوار است. اگر در حین شبیه‌سازی، شبکه در هم تنیده شود یا از بین برود، عملگرهای تعریف‌شده روی آن ممکن است دیگر مقادیر درستی را ارائه ندهند. همچنین برای فرایندهایی که نیاز به شبکه‌بندی مجدد در طول شبیه‌سازی دارند، با توجه به اینکه تمام نقاط موجود باید بر روی یک مجموعه جدید و متفاوت از نقاط نگاشت شوند، شبیه‌سازی با خطا همراه خواهد شد. این قبیل مشکلات باعث شد تا روش مدل‌سازی بدون شبکه در بین دانشمندان و مهندسان مورد توجه قرار بگیرد. بر خلاف روش‌های مبتنی بر شبکه، در روش‌های بدون شبکه نیازی به شبکه‌بندی و اتصال بین گره‌ها نیست و شبیه‌سازی با استفاده از گره‌های توزیع شده در ناحیه محاسباتی و بر مبنای تعامل هر گره با گره‌های همسایه‌اش انجام می‌گیرد. علاوه بر مزیت بدون شبکه بودن، مزایایی دیگری از قبیل سادگی در برنامه نویسی، قابلیت تعمیم ساده‌تر به ابعاد بالا، کار با انواع نواحی محاسباتی منظم و نامنظم و ... روش‌های بدون شبکه را به ابزاری پرکاربرد برای شبیه‌سازی انواع مسائل در فیزیک و مهندسی تبدیل کرده است. در سال‌های اخیر، مسائل زیادی با استفاده از روش‌های بدون شبکه شبیه‌سازی شده‌اند که از بین آن‌ها می‌توان به موارد زیر اشاره کرد: معادله فیشر-کولموگورو تعیم‌یافته[1] برای مدل‌سازی دینامیک تومور مغزی [۱۵]، معادلات دیفرانسیل جزئی سهموی معکوس [۱۶]، مدل گینگزبرگ-لانداو[2] [۱۷, ۳۸]، مدل کنترل آلاینده‌های آب‌های زیرزمینی [۲۰]، سیستم شرودینگر غیرخطی میراشده[3] برای توصیف میعانات بوز-انشتین[4] [۱۹]، برخی مدل‌های تورینگ[5] در ریاضیات زیستی [۸, ۱۸]، معادله گرین-نقدی[6] [۹]، معادله فرارفت-انتشار کسری گالیله[7] [۱]، مسائل الاستو استاتیک و پتانسیل ناهمسانگرد[8] [۲]، معادله کلاین-گوردن غیرخطی [۳۹]، مسائل مقدار مرزی غیرموضعی [۲۴]، معادله حمل و نقل [۳۱]، مسائل کنترل بهینه [۳۷]، معادلات انتگرال [۳, ۴]، مساله قیمت‌گذاری اختیار آمریکایی [۱۳] و غیره.

ساختار ادامه مقاله بدین صورت می‌باشد: در بخش بعدی به معرفی مدل میدان-فاز انجماد دندریتی می‌پردازیم. در بخش دوم، مدل را در هر دو بعد زمانی و مکانی گسسته‌سازی می‌کنیم. برای گسسته‌سازی زمان از روش تفاضلات متناهی استفاده می‌کنیم و بعد مکان به کمک روش بدون شبکه تقریب کریجینگ متحرک گسسته می‌شود. نتایج عددی حاصل از شبیه‌سازی مدل به کمک روش بدون شبکه موضعی کریجینگ متحرک به ازای پارامترهای مختلف در بخش سوم به تفصیل گزارش می‌شود.

[1] Extended Fisher–Kolmogorov equation
[2] Ginzburg–Landau model
[3] Damped nonlinear Schrödinger system
[4] Bose–Einstein condensates
[5] Turing Models
[6] Green–Naghdi equation
[7] Galilei invariant fractional advection-diffusion equation
[8] Anisotropic potential and plane elastostatic equations

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]

۱. مدل‌بندی میدان-فاز انجماد دندریتی

در این مقاله به بررسی مدل میدان-فاز ارائه شده توسط کوبایاشی [۲۷] برای انجماد دندریتی می‌پردازیم. این مدل شامل دو متغیر می‌باشد: متغیر اول پارامتر میدان-فاز می‌باشد و با $\varphi(x,y,t)$ نمایش داده می‌شود که در قسمت جامد مقدار ۱ و در قسمت مایع مقدار صفر را می‌گیرد. متغیر بعدی دما می‌باشد و با $T(x,y,t)$ نمایش داده می‌شود که با پیشرفت انجماد نیز تکامل می یابد. به منظور حفظ ویژگی‌های φ و برای حرکت منطقی آن، انرژی آزاد از نوع گینگزبرگ-لانداو زیر را در نظر می‌گیریم.

$$F(\varphi,m)=\int_V \frac{1}{2}\varepsilon^2|\nabla\varphi|^2+f(\varphi,m)dV\ ,$$

(۱)

که در آن ε ضریب انرژی گرادیان ناهمسانگرد است که تعیین‌کننده ضخامت لایه سطح مشترک می‌باشد. f یک پتانسیل دوچاهی می‌باشد که دارای مینیمم‌های موضعی در $\varphi=0$ و $\varphi=1$ می‌باشد. پارامتر m نیروی محرکه جهت حرکت سطح مشترک متناسب با فوق خنک کننده می‌باشد. در اینجا فرم خاصی از f به صورت زیر در نظر گرفته می‌شود:

$$f(\varphi,m)=\frac{1}{4}\varphi^4-\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{3}m\right)\varphi^3+\left(\frac{1}{4}-\frac{1}{2}m\right)\varphi^2.$$

(۲)

ناهمسانگردی بین سطحی با این فرض معرفی می‌شود که ε به جهت بردار نرمال خروجی در سطح مشترک بستگی دارد. مقدار این بوسیله رابطه زیر ارزیابی می‌شود

$$\varepsilon=\bar{\varepsilon}\,\sigma(\theta),$$

(۳)

که $\bar{\varepsilon}$ مقدار میانگین ε می‌باشد و $\sigma(\theta)$ بیانگر ناهمسانگردی می‌باشد که به صورت زیر تعریف می‌شود

$$\sigma(\theta)=1+\delta\cos\left(j\,(\theta-\theta_0)\right),$$

(۴)

که در آن δ قدرت ناهمسانگردی و j تعداد حالات ناهمسانگردی می‌باشد. θ_0 زاویه آفست اولیه می‌باشد و به صورت یک ثابت درنظر گرفته می‌شود. زاویه θ به صورت زیر تعریف می‌شود

$$\theta=\tan^{-1}\left(\frac{\frac{\partial\varphi}{\partial y}}{\frac{\partial\varphi}{\partial x}}\right).$$

(۵)

پارامتر m که در معادله (۲) ظاهر می‌شود وابسته به درجه فوق خنک کننده و دما می‌باشد و به صورت زیر تعریف می‌شود

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]

$$m(T)=\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)\tan^{-1}\left(\gamma\left(T_{eq}-T\right)\right),$$

(٦)

که α یک ثابت مثبت و T_{eq} دمای تعادل می‌باشد.

معادله وابسته به زمان گینزبرگ-لانداو یا آلن-کاهن[1] برای سیر تکاملی در نظر گرفته می‌شود

$$\tau\frac{\partial\varphi}{\partial t}=-\frac{\delta F}{\delta\varphi}.$$

(٧)

با گرفتن مشتق تابعی از معادله (١) معادله تکامل زمان زیر را خواهیم داشت:

$$\tau\frac{\partial\varphi}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon\frac{\partial\varepsilon}{\partial\theta}\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon\frac{\partial\varepsilon}{\partial\theta}\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right)+\nabla.\left(\varepsilon^2\nabla\varphi\right)+\varphi\left(1-\varphi\right)\left(\varphi-\frac{1}{2}+m\right),$$

(٨)

تکامل میدان دما T برگرفته از قانون بقای آنتالپی به صورت زیر می‌باشد:

$$\frac{\partial T}{\partial t}=\nabla^2T+\kappa\frac{\partial\varphi}{\partial t},$$

(٩)

متغیر T غیربعدی است به گونه‌ای که دمای خنک کننده مشخصه صفر و دمای تعادل صفر می‌باشد. κ یک گرمای نهان بی بعد است که متناسب با گرمای نهان است و با قدرت خنک‌کننده نسبت عکس دارد. برای سادگی، ضرایب انتشار برای هر دو حالت جامد و مایع یکسان لحاظ شده است.

۲.گسسته‌سازی مدل و پیاده‌سازی روش

در این بخش، ابتدا به گسسته‌سازی بعد زمان مدل معرفی شده در بخش قبلی می‌پردازیم. سپس در ادامه با استفاده از روش تقریب کریجینگ متحرک به تقریب مشتقات مکانی موجود در مدل خواهیم پرداخت.

برای گسسته‌سازی مدل در بعد زمان، فرض می‌کنیم دامنه زمانی $\left[0,t_f\right]$ به M قسمت مساوی با طول گام $\Delta t=\frac{t_f-0}{M}$ تقسیم شده باشد. با بکارگیری روش تفاضلات متناهی پیشرو برای تقریب مشتقات زمانی موجود در سیستم (٨) و (٩) داریم:

[1] Allen–Cahn

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]

$$\tau\frac{\varphi^{n+1}-\varphi^{n}}{\Delta t}=\frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon^{n}\frac{\partial\varepsilon^{n}}{\partial\theta}\frac{\partial\varphi^{n}}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon^{n}\frac{\partial\varepsilon^{n}}{\partial\theta}\frac{\partial\varphi^{n}}{\partial y}\right)$$
$$+\nabla.\left(\left(\varepsilon^{n}\right)^{2}\nabla\varphi^{n}\right)+\varphi^{n}\left(1-\varphi^{n}\right)\left(\varphi^{n}-\frac{1}{2}+m^{n}\right),$$

(۱۰)

$$\frac{T^{n+1}-T^{n}}{\Delta t}=\nabla^{2}T^{n}+\kappa\frac{\varphi^{n+1}-\varphi^{n}}{\Delta t},$$

(۱۱)

بعد از ساده‌سازی روابط بالا، خواهیم داشت:

$$\varphi^{n+1}=\varphi^{n}$$
$$+\frac{\Delta t}{\tau}\left(\frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon^{n}\frac{\partial\varepsilon^{n}}{\partial\theta}\frac{\partial\varphi^{n}}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon^{n}\frac{\partial\varepsilon^{n}}{\partial\theta}\frac{\partial\varphi^{n}}{\partial y}\right)+\nabla.\left(\left(\varepsilon^{n}\right)^{2}\nabla\varphi^{n}\right)+\varphi^{n}\left(1-\varphi^{n}\right)\left(\varphi^{n}-\frac{1}{2}+m^{n}\right)\right),$$

(۱۲)

$$T^{n+1}=T^{n}+\Delta t\,\nabla^{2}T^{n}+\kappa\left(\varphi^{n+1}-\varphi^{n}\right),$$

(۱۳)

در روابط بالا منظور از بالا اندیس n، مقدار تابع مورد نظر در زمان $t=t_n$ می‌باشد.

برای گسسته‌سازی کامل معادلات بالا، مشتقات اول و دوم توابع φ و T را به صورت زیر تقریب می‌زنیم.

$$\frac{\partial\varphi^{n}}{\partial x}=\sum_{j=1}^{N}\frac{\partial\Phi_{j}}{\partial x}\varphi_{j}^{n},$$

(۱٤)

$$\frac{\partial\varphi^{n}}{\partial y}=\sum_{j=1}^{N}\frac{\partial\Phi_{j}}{\partial y}\varphi_{j}^{n},$$

(۱٥)

$$\nabla^{2}\varphi^{n}=\sum_{j=1}^{N}\nabla^{2}\Phi_{j}\,\varphi_{j}^{n},$$

(۱٦)

$$\nabla^{2}T^{n}=\sum_{j=1}^{N}\nabla^{2}\Phi_{j}\,T_{j}^{n},$$

(۱۷)

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]

که در روابط بالا، Φ_j ها توابع شکل ساخته شده با استفاده از روش کریجینگ متحرک می‌باشند که در زیر به توضیح نحوه ساخت آن‌ها خواهیم پرداخت.

روش درونیابی کریجینگ متحرک[1] یک روش شناخته شده برای درونیابی مکانی در زمین‌شناسی و استخراج معدن می‌باشد. فرض کنید دامنه محسباتی Ω توسط مجموعه نقاط $X=\{\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,...,\mathbf{x}_N\}$ گسسته شده باشد. مشابه روش تقریب کمترین مربعات متحرک، تقریب تابع $u(\mathbf{x})$ به صورت زیر بیان می‌شود

$$u^h(\mathbf{x})=\sum_{j=1}^{Q} p_j(\mathbf{x})a_j+Z(\mathbf{x})=\mathbf{p}^T(\mathbf{x})a+\mathbf{Z}(\mathbf{x}),$$

(۱۸)

که در آن $p_j(\mathbf{x})$ توابع پایه چندجمله‌ای، a_jها ضرایب مجهول و $Z(\mathbf{x})$ تحقق یک فرایند تصادفی با میانگین صفر، واریانس σ^2 و کواریانس غیرصفر می‌باشد. ماتریس کواریانس $Z(\mathbf{x})$ به صورت زیر تعریف می‌شود

$$cov\left\{Z(\mathbf{x}_i),Z(\mathbf{x}_j)\right\}=\sigma^2\mathbf{R}\left[R(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)\right],$$

(۱۹)

که در آن $\mathbf{R}\left[R(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)\right]$ ماتریس همبستگی[2] و $R(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)$ تابع همبستگی[3] بین نقاط $\mathbf{x}_i$ و $\mathbf{x}_j$ می‌باشد. توابع همبستگی‌های مختلفی را می‌توان در این روش بکار برد که در بین آن‌ها تابع گاوسی متداول می‌باشد که به صورت زیر تعریف می‌شود

$$R(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)=e^{-cr_{ij}^2}.$$

(۲۰)

در رابطه بالا $r_{ij}=\left\|\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j\right\|$ و $c>0$ پارامتر همبستگی[4] می‌باشد. با بکارگیری بهترین پیش‌بینی بی‌طرفانه خطی[۱۲]، رابطه (۱۸) به صورت زیر در می‌آید.

$$u^h(\mathbf{x})=\mathbf{p}^T(\mathbf{x})\mathbf{b}+\mathbf{r}^T(\mathbf{x})\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{u}-\mathbf{Pb}),$$

(۲۱)

که در آن داریم

[1] Moving Kriging
[2] Correlation matrix
[3] Correlation function
[4] Correlation parameter

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]

$$\mathbf{b} = (\mathbf{P}^T \mathbf{R}^{-1}\mathbf{P})^{-1}\mathbf{P}^T \mathbf{R}^{-1}\mathbf{u},$$

(۲۲)

$$\mathbf{p}^T(\mathbf{x}) = [p_1(\mathbf{x}), p_2(\mathbf{x}), ., p_Q(\mathbf{x})],$$

(۲۳)

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} p_1(\mathbf{x}_1) & p_2(\mathbf{x}_1) & \cdots & p_Q(\mathbf{x}_1) \\ p_1(\mathbf{x}_2) & p_2(\mathbf{x}_2) & \cdots & p_Q(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_1(\mathbf{x}_N) & p_2(\mathbf{x}_N) & \cdots & p_Q(\mathbf{x}_N) \end{bmatrix},$$

(۲٤)

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} 1 & R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) & \cdots & R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_N) \\ R(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) & 1 & \cdots & R(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ R(\mathbf{x}_N, \mathbf{x}_1) & R(\mathbf{x}_N, \mathbf{x}_2) & \cdots & 1 \end{bmatrix},$$

(۲٥)

$$\mathbf{r}^T(\mathbf{x}) = [R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}), R(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}), ., R(\mathbf{x}_N, \mathbf{x})].$$

(۲٦)

با در نظر گرفتن ماتریس‌های

$$\mathbf{A} = (\mathbf{P}^T \mathbf{R}^{-1}\mathbf{P})^{-1}\mathbf{P}^T \mathbf{R}^{-1},$$

(۲۷)

$$\mathbf{B} = \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{A}),$$

(۲۸)

معادله (۲۱) به صورت زیر نوشته می‌شود

$$u^h(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x})\mathbf{A}\mathbf{u} + \mathbf{r}^T(\mathbf{x})\mathbf{B}\mathbf{u} = \sum_{i=1}^{N} \Phi_i(\mathbf{x}) u_i,$$

(۲۹)

که در آن $\Phi_i(\mathbf{x})$ تابع شکل کریجینگ متحرک می‌باشد و به صورت زیر تعریف می‌شود

$$\Phi_i(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{Q} p_j(\mathbf{x}) A_{ji} + \sum_{k=1}^{N} r_k(\mathbf{x}) B_{ki}.$$

(۳۰)

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]

کیفیت این تابع شکل به شدت تحت تاثیر پارامتر همبستگی c می‌باشد. همانگونه که در [48] ذکر شده است، c بهین وابسته به تعداد نقاط داخل دامنه تاثیر است و از طریق فرمول زیر محاسبه می‌شود

$$c = \frac{\omega}{h^2}, \tag{۳۱}$$

که ω عدد ثابت می‌باشد و h متوسط فاصله نقاط داخل دامنه تاثیر می‌باشد. $\omega \in [0.03, 0.2]$ می‌تواند یک انتخاب خوب برای ω باشد.

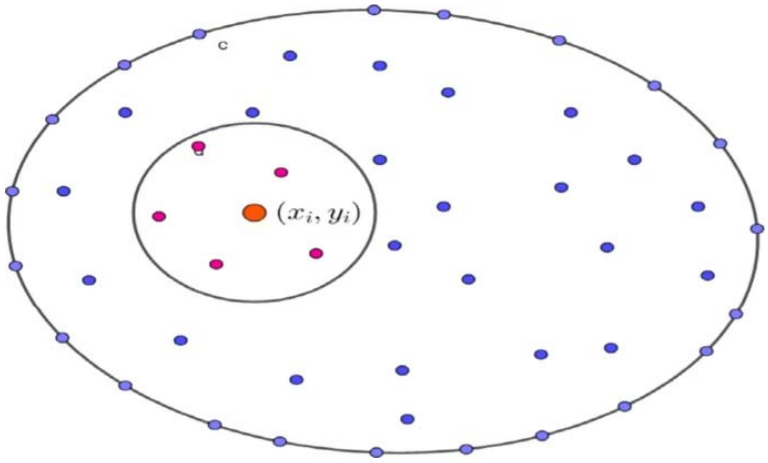
یکی از ویژگی‌های کلیدی توابع شکل کریجینگ متحرک، خاصیت دلتای کرونیکر می‌باشد که موجب سادگی پیاده سازی شرایط مرزی می شود. این خاصیت مهم باعث شده است تا در شبیه‌سازی های عددی، روش کریجینگ متحرک به سایر روش‌ها از جمله روش کمترین مربعات متحرک ترجیح داده شود. دیگر ویژگی مهم این توابع شکل این است که هر تابعی را می‌تواند به صورت دقیق بازتولید کند. در حالت خاص، اگر یک پایه خطی برای ساخت توابع شکل کریجینگ متحرک بکار گرفته شود، همه توابع خطی و ثابت را می تواند بازتولید کند.

همانطور که در بالا اشاره شد، $p_j(\mathbf{x})$ ها توابع پایه چندجمله‌ای در مختصات $\mathbf{x} = (x, y)$ هستند که توسط مثلث پاسکال ساخته می‌شوند و معمولا پایه کامل ترجیح داده می‌شود. با توجه به دوبعدی بودن مدل در نظر گرفته شده در این مقاله، توابع پایه $p_j(\mathbf{x})$ در شبیه‌سازی عددی به صورت زیر در نظر گرفته می‌شوند.

$$\mathbf{p}^T(\mathbf{x}) = \left[p_1(\mathbf{x}), p_2(\mathbf{x}), \ldots, p_6(\mathbf{x})\right] = \left[1, x, y, x^2, xy, y^2\right]. \tag{۳۲}$$

توجه به این نکته ضروری می‌باشد که استفاده از کل نقاط موجود در ناحیه محاسباتی منجر به پر بودن ماتریس ضرایب می‌شود که به تبع آن موجب افزایش هزینه محاسباتی روش می‌شود. لذا جهت رفع این مشکل، بجای استفاده از کل نقاط موجود در ناحیه محاسباتی، می‌توان مطابق شکل ۱ حول هر نقطه یک دامنه تاثیر در نظر گرفت و برای تقریب تابع مجهول از نقاط داخل آن دامنه تاثیر استفاده کرد که موضعی‌بودن روش را تضمین می‌کند. دامنه تاثیر را می‌توان به صورت دایره، مستطیل یا هر شکل دلخواهی حول نقطه مورد نظر تعریف کرد. در این مقاله، برای تعریف دامنه تاثیر حول هر نقطه، از یک دایره به شعاع r استفاده می‌کنیم.

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]



شکل ۱: دامنه تاثیر حول یک نقطه دلخواه

۳. شبیه‌سازی عددی

در این بخش به شبیه‌سازی عددی مدل میدان-فاز معرفی شده در بخش ۱ می‌پردازیم. برای این منظور، معادلات (۸) و (۹) را با شرایط اولیه [۲۷]

$$\varphi(x,y,0)=\begin{cases}1 & (x-x_0)^2+(y-y_0)^2\le 0.01,\\ 0 & o.w.\end{cases}$$

$$T(x,y,0)=0.$$

و شرایط مرزی متناوب در نظر می‌گیریم. پارامترهای مورد نیاز مدل، مطابق با جدول ۱ انتخاب می‌شوند.

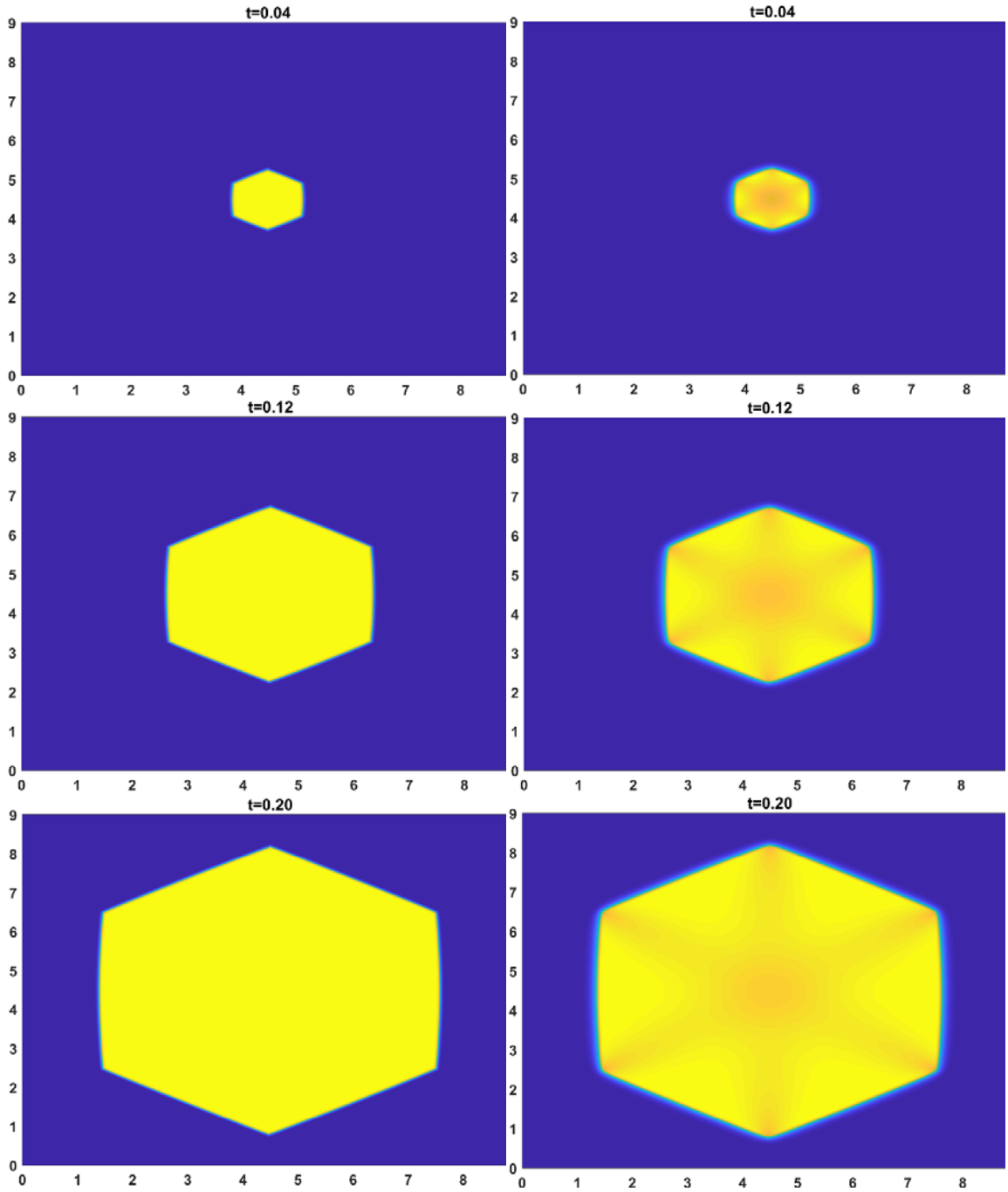
جدول ۱: مقادیر پارامترهای مدل

پارامتر	τ	$\bar{\varepsilon}$	κ	δ	j	α	T_{eq}	θ_0	γ
مقادیر	0.0003	0.01	0.8,1.0,1.2 1.6,1.8,2.0	0.02,0.04	4,6	0.9	1	$0.2,\frac{\pi}{2}$	10

برای شبیه‌سازی مدل با استفاده روش موضعی کریجینگ متحرک، ناحیه محاسباتی با نقاط منظم به طول گام $h=0.03$ گسسته‌سازی می‌کنیم. برای موضعی کردن روش، حول هر نقطه یک دامنه تاثیر به شعاع $r=5h$ در نظر می‌گیریم. پارامتر ω مربوط به روش کریجینگ متحرک را برابر با 0.08 در نظر گرفتیم.

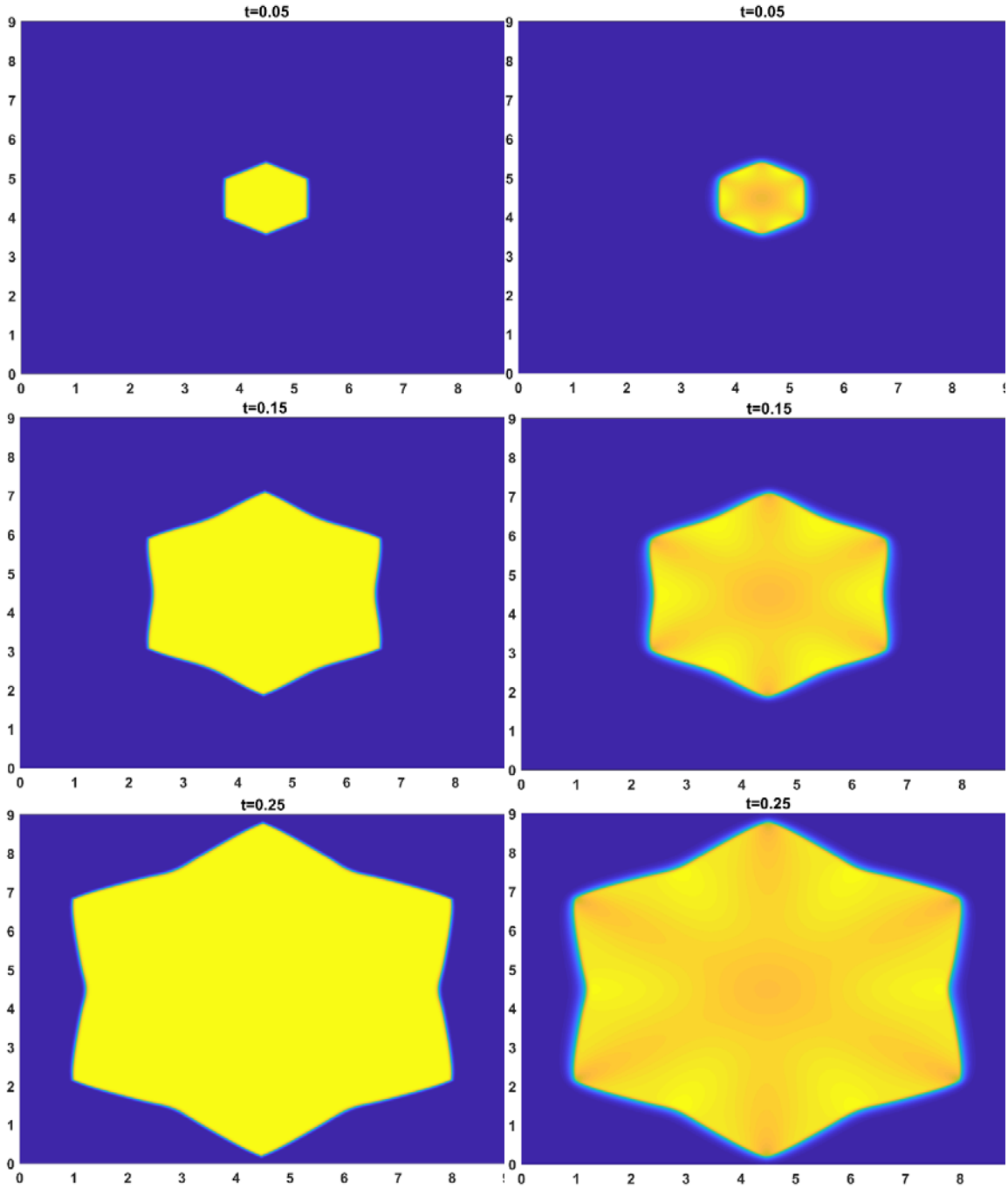
ابتدا مدل را با پارامترهای $\theta_0=\frac{\pi}{2}$ و $\delta=0.04$ شبیه‌سازی می‌کنیم و تکامل زمانی ساختارهای دندریتی و میدان دما را برای تعداد حالت ناهمسانگردی $j=6$ در شکل‌های ۲-۷ نمایش می‌دهیم.

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]



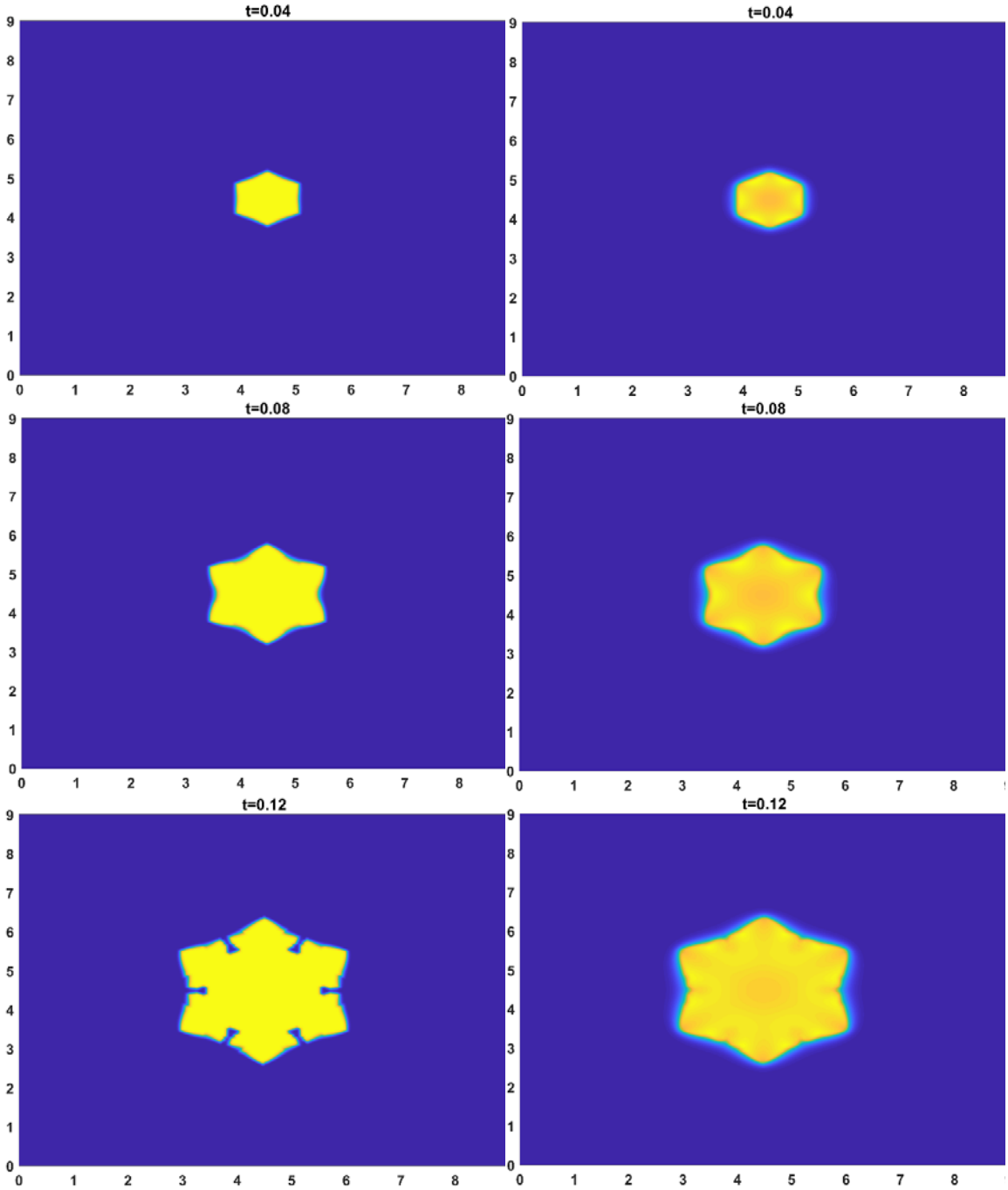
شکل ۲: تکامل زمانی الگوهای φ (ستون چپ) و T (ستون راست) برای $\kappa = 0.8$

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]



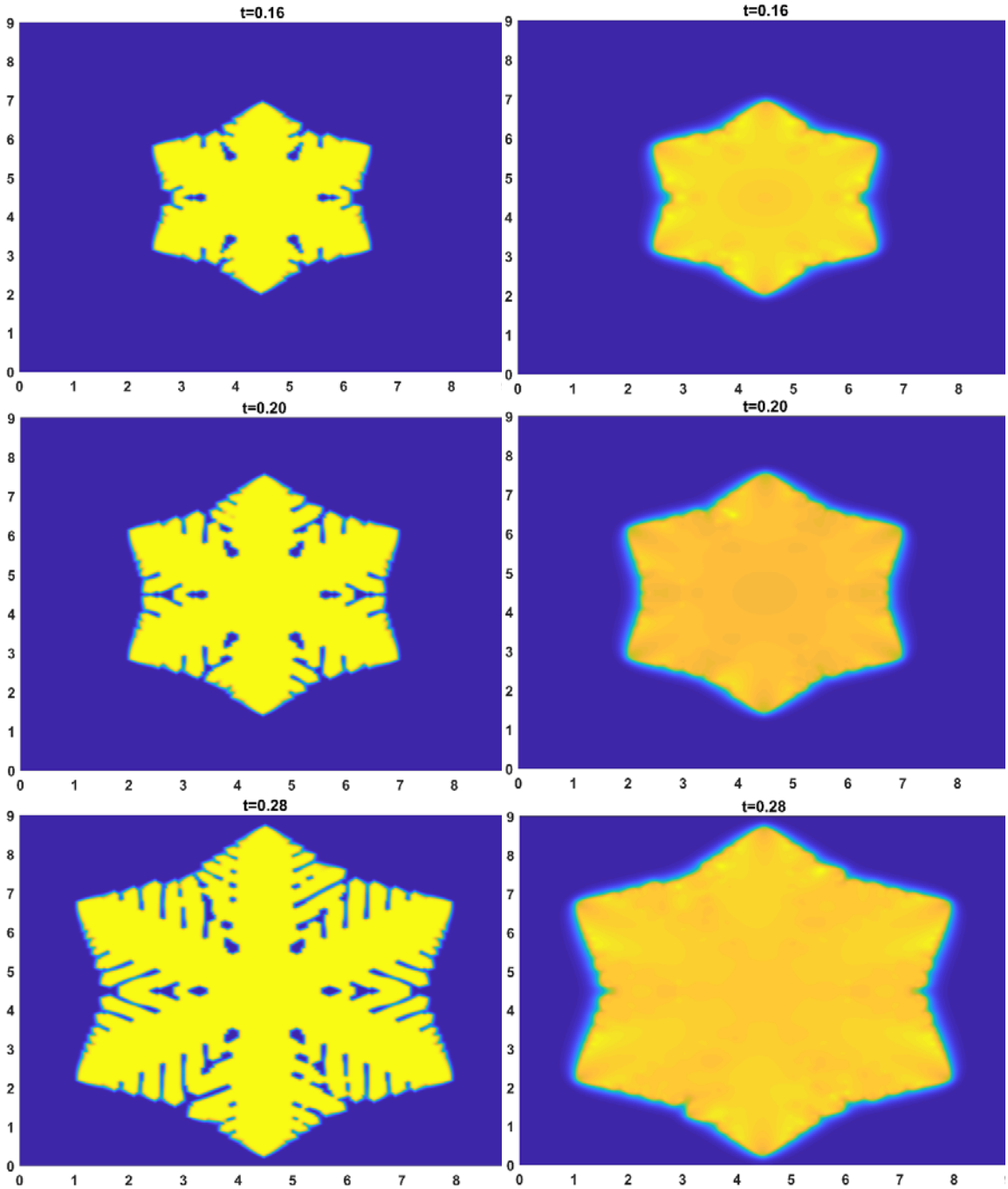
شکل ۳: تکامل زمانی الگوهای φ (ستون چپ) و T (ستون راست) برای $\kappa = 1.0$

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]



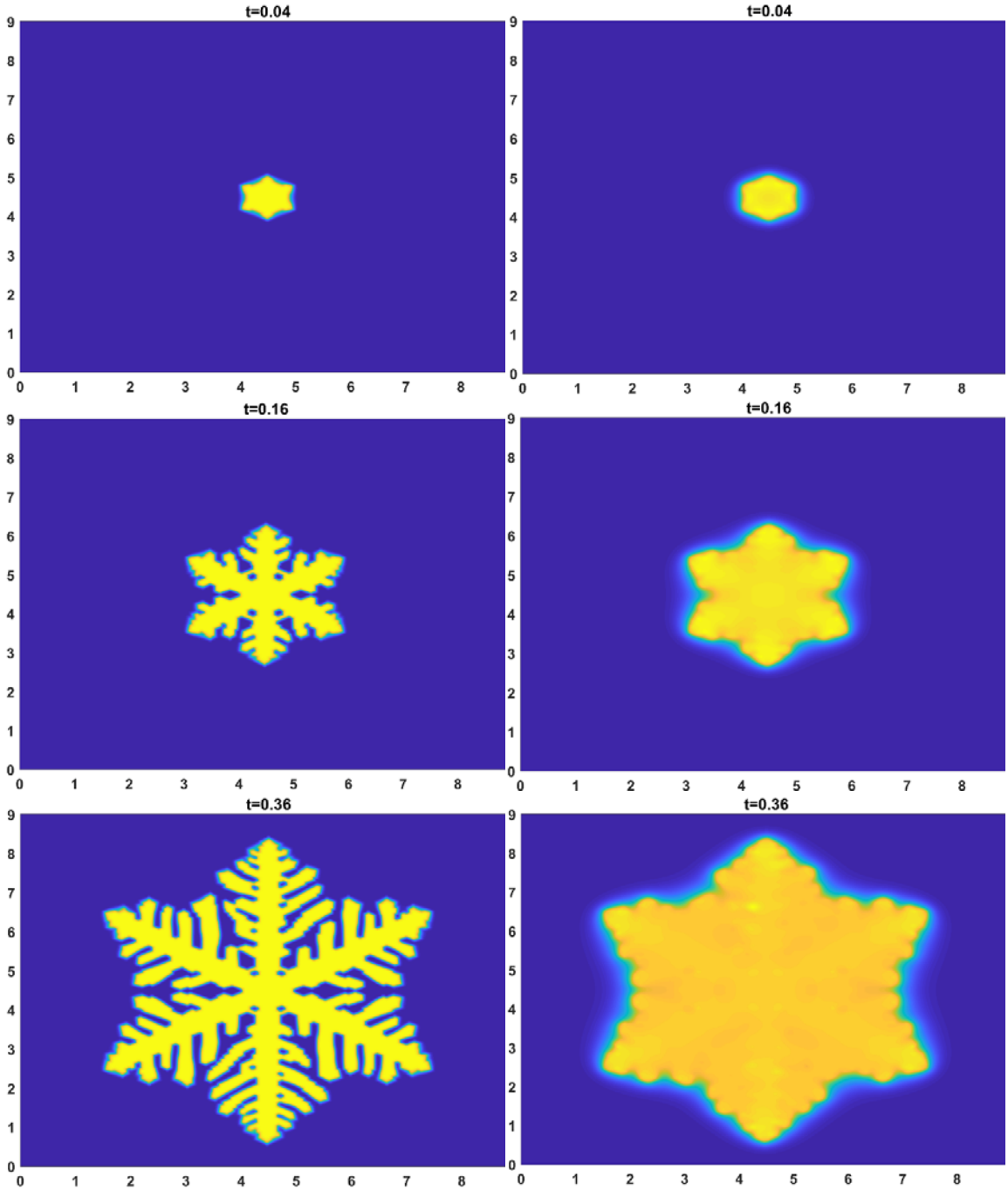
شکل ۴: تکامل زمانی الگوهای φ (ستون چپ) و T (ستون راست) برای $\kappa = 1.2$

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]



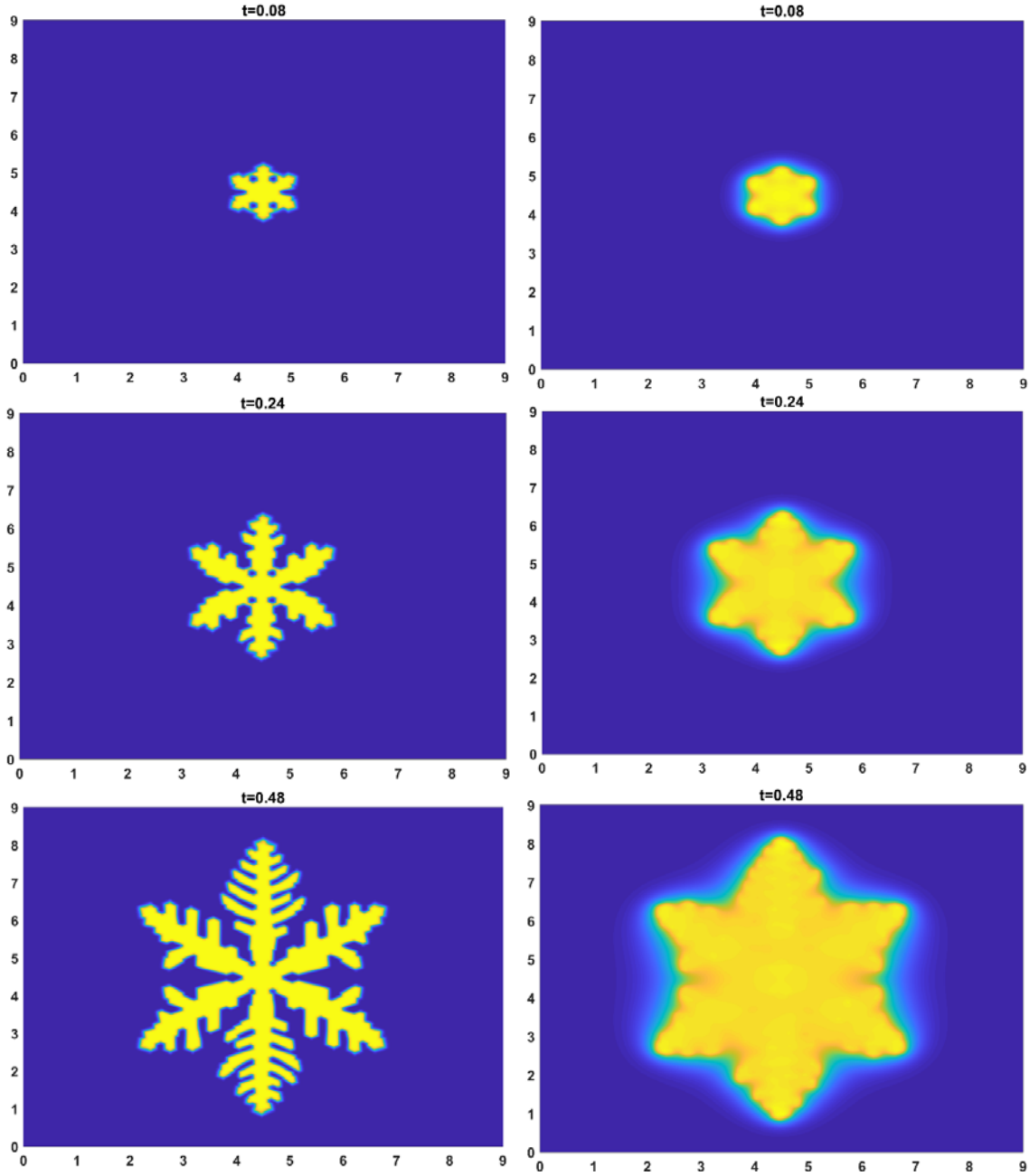
شکل ۵: تکامل زمانی الگوهای φ (ستون چپ) و T (ستون راست) برای $\kappa = 1.2$

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]



شکل ۶: تکامل زمانی الگوهای φ (ستون چپ) و T (ستون راست) برای $\kappa = 1.6$

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]



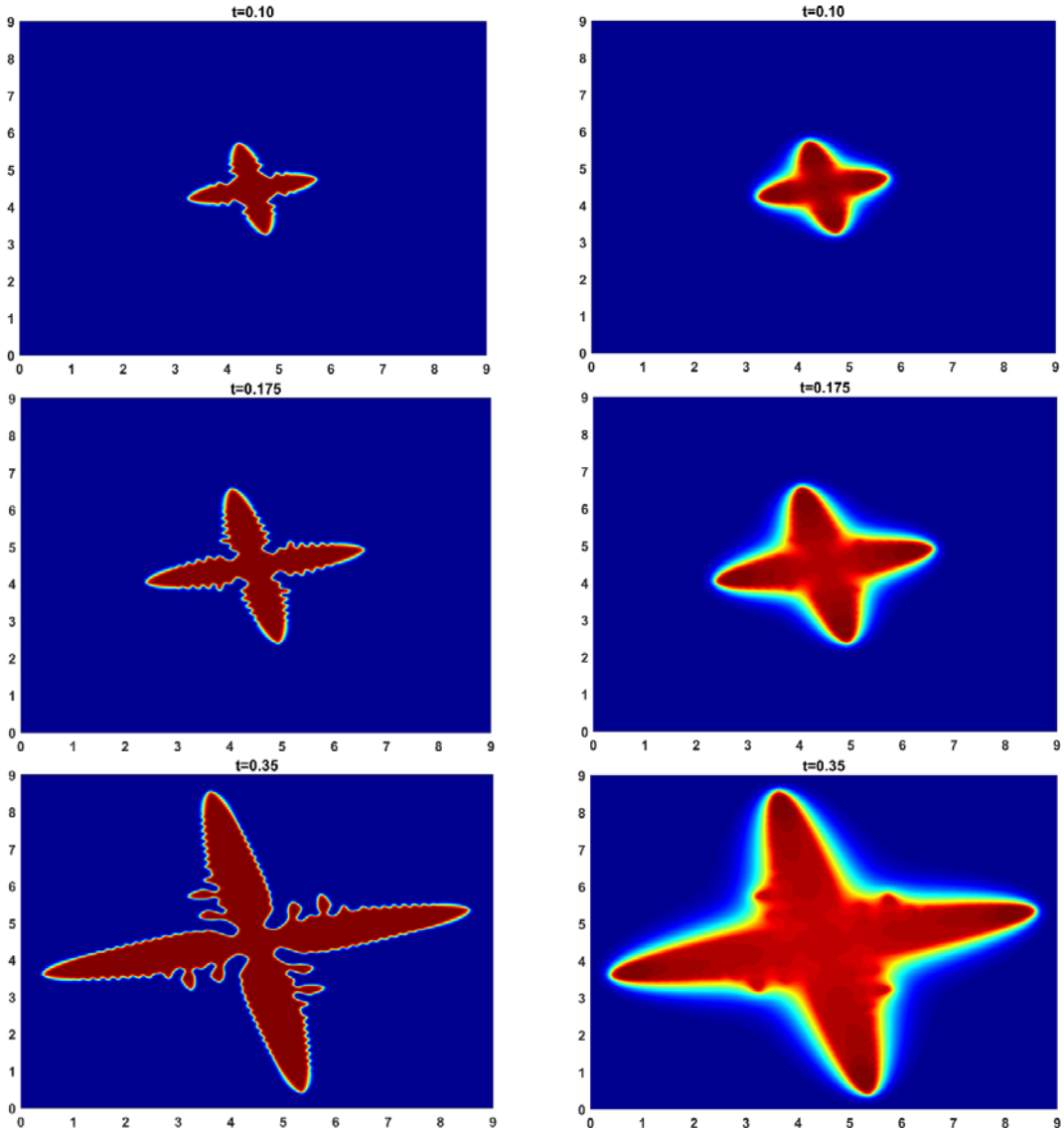
شکل ۷: تکامل زمانی الگوهای φ (ستون چپ) و T (ستون راست) برای $\kappa = 2$

همانطور که از نتایج مشخص است، در ابتدا کریستال به صورت یک شش‌ضلعی است که برای $\kappa = 0.8$ قویا محدب می‌باشد. ولی با افزایش κ محدب بودن از بین می‌رود. برای $\kappa = 1$ می‌توان فرورفتگی‌ها در مرکز لبه‌های کریستالی را مشاهده کرد. برای $\kappa = 1.2$ الگوهای مختلفی در طول فرایند رشد نمایش داده شده است. در ابتدا شکل شش ضلعی و سپس فرورفتگی‌ها در مرکز لبه‌ها را می بینیم. پس از آن فرورفتگی‌ها به شکاف‌ها تبدیل می‌شوند و سپس چین در بالای

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]

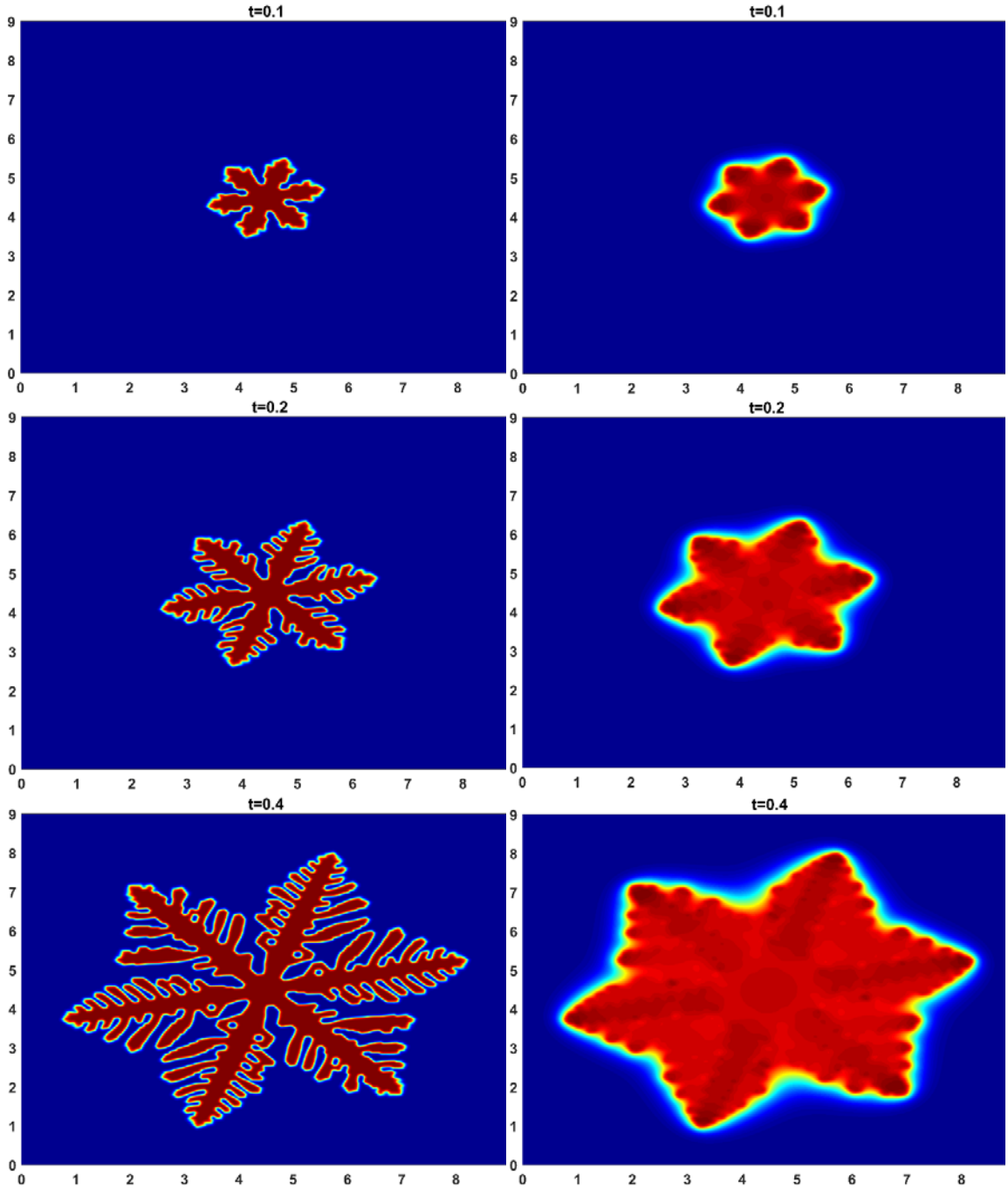
شکاف ظاهر می‌شود. در نهایت یک الگوی انشعاب ضخیم را نشان می‌دهد که یک الگوی میانی بین الگوهای اساساً شش ضلعی و الگوهای انشعاب است. برای $\kappa = 1.6$، کریستال یک الگوی انشعاب را نشان می‌دهد. با افزایش κ شاخه‌ها نازکتر می‌شوند و یک الگویی شبیه دانه برف برای $\kappa = 2$ بدست می‌آید. بنابراین با افزایش κ می‌توان تغییر از شکل شش ضلعی به الگوهای انشعاب را مشاهده کرد. تمامی نتایج بدست آمده از این شبیه‌سازی، با نتایج گزارش شده در [۲۷] تطابق دارد.

یکبار دیگر مدل را با پارامترهای $\theta_0 = 0.2$ و $\delta = 0.02$ و $\kappa = 1.8$ شبیه‌سازی می‌کنیم و تکامل زمانی ساختارهای دندریتی و میدان دما را برای تعداد حالت ناهمسانگردی $j = 4$ در شکل ۸ و برای تعداد حالت ناهمسانگردی $j = 6$ در شکل ۸ و شکل ۹ نمایش می‌دهیم.



شکل ۸: تکامل زمانی الگوهای φ (ستون چپ) و T (ستون راست) برای $j = 4$

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]



شکل ۹: تکامل زمانی الگوهای φ (ستون چپ) و T (ستون راست) برای $j = 6$

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]

۴. نتیجه‌گیری

رشد دندریتی یک پدیده اساسی رشد کریستال است که همراه با اکثر فرآیندهای ریخته‌گری و انجماد، و گاهی اوقات در طول رشد تک کریستال‌ها رخ می‌دهد. شکل دندریتی کریستال‌ها در آلیاژهای انجمادی و مذاب‌های فوق سرد برای انتقال موثر گرما و جرم در مقیاس های کوچک بسیار مناسب هستند. در این مقاله، یک مدل میدان-فاز برای شبیه‌سازی رشد دندریتی کریستال ارائه شده است که شامل ناهمسانگردی به شکل خاصی است. ابتدا جزئیات این مدل به همراه پارامترهای تاثیرگذارش مورد بررسی و مطالعه قرار گرفت. برای شبیه‌سازی این مدل در راستای متغییر زمان، روش تفاضلات متناهی صریح را بکار گرفتیم. سپس با استفاده از روش بدون شبکه موضعی کریجینگ متحرک به گسسته‌سازی مدل در راستای متغیر مکان پرداختیم. تاثیر پارامترهای مختلف مدل را در شبیه‌سازی عددی لحاظ کردیم و روابط کیفی بین شکل کریستال ها و برخی پارامترهای فیزیکی را مورد بحث قرار دادیم. با توجه به مزایای قابل توجه روش‌های بدون شبکه در قیاس با روش‌های مبتنی برشبکه، می‌توان نتیجه گرفت که از روش‌های بدون شبکه علی الخصوص روش‌های بدون شبکه موضعی می‌توان به عنوان ابزاری قدرتمند در شبیه‌سازی مدل‌های میدان-فاز پرکاربرد در زمینه انجماد فلزات و رشد کریستال بهره برد.

References

1. M. Abbaszadeh and M. Dehghan, A class of moving Kriging interpolation-based DQ methods to simulate multi-dimensional space Galilei invariant fractional advection-diffusion equation, Numerical Algorithms, **90**(1) (2022), 271-299.
2. M. Abbaszadeh and M. Dehghan, Direct meshless local Petrov-Galerkin method to investigate anisotropic potential and plane elastostatic equations of anisotropic functionally graded materials problems, Engineering Analysis with Boundary Elements, **118** (2020), 188-201.
3. P. Assari, A meshless local Galerkin method for the numerical solution of Hammerstein integral equations based on the moving least squares technique, Journal of Applied Analysis & Computation, **9**(1) (2019), 75-104.
4. P. Assari, On the numerical solution of two-dimensional integral equations using a meshless local discrete Galerkin scheme with error analysis, Engineering with Computers, **35**(3) (2019), 893-916.
5. R. Braun and B. Murray, Adaptive phase-field computations of dendritic crystal growth, Journal of Crystal Growth, **174**(1-4) (1997), 41-53.
6. R. Braun, B. Murray, and J. Soto Jr, Adaptive finite-difference computations of dendritic growth using a phase-field model, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, **5**(4) (1997), 365.
7. G. Caginalp and P. Fife, Phase-field methods for interfacial boundaries, Physical Review B, **33**(11) (1986), 7792.
8. M. Dehghan and M. Abbaszadeh, Numerical study of three-dimensional Turing patterns using a meshless method based on moving Kriging element free Galerkin (EFG) approach, Computers & Mathematics with Applications, **72**(3) (2016), 427-454.

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]

9. M. Dehghan and M. Abbaszadeh, The solution of nonlinear Green–Naghdi equation arising in water sciences via a meshless method which combines moving kriging interpolation shape functions with the weighted essentially non–oscillatory method, Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, **68** (2019), 220-239.
10. L. Du, R. Zhang, and L. Zhang, Phase-field simulation of dendritic growth in a forced liquid metal flow coupling with boundary heat flux, Science China Technological Sciences, **56**(10) (2013), 2586-2593.
11. M.E. Glicksman, Free dendritic growth, Materials Science and Engineering, **65**(1) (1984), 45-55.
12. L. Gu, Moving kriging interpolation and element□free Galerkin method, International journal for numerical methods in engineering, **56**(1) (2003), 1-11.
13. M. Haghi, R. Mollapourasl, and M. Vanmaele, An RBF–FD method for pricing American options under jump–diffusion models, Computers & Mathematics with Applications, **76**(10) (2018), 2434-2459.
14. S.-C. HUANG and M. Glicksman, Fundamentals of dendritic solidification—I. Steady-state tip growth, in Dynamics of Curved Fronts. Elsevier, (1988), 247-261.
15. M. Ilati, Analysis and application of the interpolating element-free Galerkin method for extended Fisher–Kolmogorov equation which arises in brain tumor dynamics modeling, Numerical Algorithms, **85**(2) (2020), 485-502.
16. M. Ilati, DMLPG method for specifying a control function in two-dimensional parabolic inverse PDEs, Computers & Mathematics with Applications, **80**(5) (2020), 604-616.
17. M. Ilati, A meshless local moving Kriging method for solving Ginzburg–Landau equation on irregular domains, The European Physical Journal Plus, **135**(11) (2020), 1-18.
18. M. Ilati and M. Dehghan, Application of direct meshless local Petrov–Galerkin (DMLPG) method for some Turing-type models, Engineering with Computers, **33**(1) (2017), 107-124.
19. M. Ilati and M. Dehghan, DMLPG method for numerical simulation of soliton collisions in multi-dimensional coupled damped nonlinear Schrödinger system which arises from Bose–Einstein condensates, Applied Mathematics and Computation, **346** (2019), 244-253.
20. M. Ilati and M. Dehghan, Remediation of contaminated groundwater by meshless local weak forms, Computers & Mathematics with Applications, **72**(9) (2016), 2408-2416.
21. J.-H. Jeong, N. Goldenfeld, and J.A. Dantzig, Phase field model for three-dimensional dendritic growth with fluid flow, Physical Review E, **64**(4) (2001), 041602.
22. A. Karma, Phase-field formulation for quantitative modeling of alloy solidification, Physical review letters, **87**(11) (2001), 115701.
23. A. Karma and W.-J. Rappel, Quantitative phase-field modeling of dendritic growth in two and three dimensions, Physical review E, **57**(4) (1998), 4323.
24. S. Kazem and J. Rad, Radial basis functions method for solving of a non-local boundary value problem with Neumann's boundary conditions, Applied Mathematical Modelling, **36**(6) (2012), 2360-2369.
25. S.G. Kim, W.T. Kim, and T. Suzuki, Interfacial compositions of solid and liquid in a phase-field model with finite interface thickness for isothermal solidification in binary alloys, Physical Review E, **58**(3) (1998), 3316.
26. S.G. Kim, W.T. Kim, and T. Suzuki, Phase-field model for binary alloys, Physical review e, **60**(6) (1999), 7186.
27. R. Kobayashi, Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth, Physica D: Nonlinear Phenomena, **63**(3-4) (1993), 410-423.
28. C. Lan, Y. Chang, and C.-J. Shih, Adaptive phase field simulation of non-isothermal free dendritic growth of a binary alloy, Acta Materialia, **51**(7) (2003), 1857-1869.

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]

29. C. Lan, C. Hsu, and C. Liu, Efficient adaptive phase field simulation of dendritic growth in a forced flow at low supercooling, Journal of crystal growth, **241**(3) (2002), 379-386.
30. C.W. Lan, C.C. Liu, and C.M. Hsu, An adaptive finite volume method for incompressible heat flow problems in solidification, Journal of Computational Physics, **178**(2) (2002), 464-497.
31. V. Mohammadi, et al., Numerical investigation on the transport equation in spherical coordinates via generalized moving least squares and moving kriging least squares approximations, Engineering with Computers, **37**(2) (2021), 1231-1249.
32. B. Nestler and A. Choudhury, Phase-field modeling of multi-component systems, Current opinion in solid state and Materials Science, **15**(3) (2011), 93-105.
33. B. Nestler, H. Garcke, and B. Stinner, Multicomponent alloy solidification: phase-field modeling and simulations, Physical Review E, **71**(4) (2005), 041609.
34. N. Palle and J.A. Dantzig, An adaptive mesh refinement scheme for solidification problems, Metallurgical and Materials Transactions A, **27**(3) (1996), 707-717.
35. N. Provatas, N. Goldenfeld, and J. Dantzig, Adaptive mesh refinement computation of solidification microstructures using dynamic data structures, Journal of computational physics, **148**(1) (1999), 265-290.
36. N. Provatas, N. Goldenfeld, and J. Dantzig, Efficient computation of dendritic microstructures using adaptive mesh refinement, Physical Review Letters, **80**(15) (1998), 3308.
37. J.A. Rad, S. Kazem, and K. Parand, Radial basis functions approach on optimal control problems: a numerical investigation, Journal of Vibration and Control, **20**(9) (2014), 1394-1416.
38. A. Shokri and E. Bahmani, Direct meshless local Petrov–Galerkin (DMLPG) method for 2D complex Ginzburg–Landau equation, Engineering Analysis with Boundary Elements, **100** (2019), 195-203.
39. A. Shokri and A. Habibirad, A moving Kriging based MLPG method for nonlinear Klein–Gordon equation, Mathematical Methods in the Applied Sciences, **39**(18) (2016), 5381-5394.
40. I. Singer-Loginova and H. Singer, The phase field technique for modeling multiphase materials, Reports on progress in physics, **71**(10) (2008), 106501.
41. X. Tong, et al., Phase-field simulations of dendritic crystal growth in a forced flow, Physical Review E, **63**(6) (2001), 061601.
42. R. Tönhardt and G. Amberg, Dendritic growth of randomly oriented nuclei in a shear flow, Journal of Crystal Growth, **213**(1-2) (2000), 161-187.
43. R. Tönhardt and G. Amberg, Phase-field simulation of dendritic growth in a shear flow, Journal of crystal growth, **194**(3-4) (1998), 406-425.
44. Y. Tsai, C. Chen, and C. Lan, Three-dimensional adaptive phase field modeling of directional solidification of a binary alloy: 2D–3D transitions, International journal of heat and mass transfer, **53**(9-10) (2010), 2272-2283.
45. A.A. Wheeler, W.J. Boettinger, and G.B. McFadden, Phase-field model for isothermal phase transitions in binary alloys, Physical Review A, **45**(10) (1992), 7424.
46. A.A. Wheeler, W.J. Boettinger, and G.B. McFadden, Phase-field model of solute trapping during solidification, Physical Review E, **47**(3) (1993), 1893.
47. R. Zhang, M. Li, and J. Allison, Phase-field study for the influence of solute interactions on solidification process in multicomponent alloys, Computational materials science, **47**(3) (2010), 832-838.
48. B. Zheng and B. Dai, A meshless local moving Kriging method for two-dimensional solids, Applied Mathematics and Computation, **218**(2) (2011), 563-573.

[Downloaded from mmr.khu.ac.ir on 2024-10-12]