



Finite Element Analysis of Phase Field Equations for Martensitic Phase Transformations at the Nanoscale

ARTICLE INFO

Article Type

Original Research

Authors

Mirzakhani S.¹ MSc,
Javanbakht M.*¹ PhD

How to cite this article

Rashidi A.M, Ramazani H. Finite Element Analysis of Phase Field Equations for Martensitic Phase Transformations at the Nanoscale. Modares Mechanical Engineering, 2019;19(11):2771-2780.

ABSTRACT

In the present work, the nonlinear finite element method is used to solve the phase field equations for phase transformations at the nanoscale. In the phase field theory, the evolution of a martensitic nanostructure is described in terms of several order parameters and the Ginzburg-Landau equation is a linear relationship between the change rate of an order parameter and the thermodynamic forces which are the variational derivative of the free energy of the system with respect to the order parameter. Since the free energy includes nonlinear terms of the order parameter, the thermodynamic forces are nonlinear functions of the order parameter. Therefore, the phase field equations are solved using the nonlinear finite element method and the self-developed code. The studied transformation is the conversation of cubic to tetragonal phase in NiAl by temperature changes and neglecting the mechanical effects. Therefore, the transformation is the induction temperature type and is defined using only one order parameter. To validate the numerical work, the profile, width, energy, and velocity of the austenite- martensite interface were calculated and compared to the previous works and a very good agreement is found between them. Also, various physical problems such as plane interface propagation, martensitic nucleation, and propagation undercooling, and reverse phase transformation under heating are simulated. The obtained results present a proper tool to solve more advanced phase field problems for phase transformations at the nanoscale including mechanics effects and complex initial and boundary conditions.

Keywords Phase Field; Phase Transformations; Nonlinear Finite Element; Nanoscale

CITATION LINKS

[1] Continuum modeling of strain-induced martensitic transformation at shear-band ... [2] A new view on transformation induced plasticity ... [3] Martensite and life: displacive transformations as biological ... [4] Numerical modelling of martensitic growth in an elastoplastic ... [5] Wing morphing control with shape memory alloy ... [6] Phase field approach with anisotropic interface energy and interface stresses: large ... [7] Phase field methods: microstructures, mechanical properties and ... [8] Three-dimensional Landau theory for multivariant stress ... [9] Microscale simulation of martensitic microstructure ... [10] Multi-scale phase field approach to ... [11] Phase field microelasticity modeling of heterogeneous nucleation and ... [12] Phase-field approach to martensitic phase transformations ... [13] Interface propagation and microstructure evolution in phase field ... [14] Computer simulation of martensitic transformation in constrained ... [15] Finite element simulation of martensitic phase transitions in elastoplastic ... [16] Hierarchical pattern formation in elastic ... [17] Three-dimensional field model and computer simulation of martensitic ... [18] Phase-field theory for martensitic phase transformations at large ... [19] Displacive phase transitions at large strains: phase-field ... [20] Applications of semi-implicit Fourier spectral method to phase field ... [21] Elastoplastic phase-field simulation of self- and plastic accommodations in ... [22] Finite element analysis of phase transformation dynamics in shape memory ... [23] Finite element simulations of dynamics of multivariant martensitic phase transitions based ... [24] Micromechanical modeling of stress-induced phase ... [25] Micromechanical modeling of stress-induced phase ... [26] Surface tension and energy in multivariant ... [27] Molecular dynamics study of surface effect on martensitic cubic-to- ... [28] Phase-field theory for martensitic phase transformations at large ... [29] Thermodynamically consistent phase field theory of phase transformations with ... [30] Phase field approach to martensitic phase transformations with ... [31] Martensitic phase transformations in shape ... [32] Deformation twinning. Progress in Materials ... [33] Phase transformations in nanograin materials under high pressure and plastic ... [34] Application of phase field microelasticity theory of phase transformations to dislocation ...

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

*Correspondence

Address: No: Room 17, Mechanical Engineering Department, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran
Phone: +98 (31) 33915214
Fax: +98 (31) 33912862
javanbakht@cc.iut.ac.ir

Article History

Received: April 4, 2018

Accepted: May 21, 2019

ePublished: November 2, 2019

تحلیل المان محدود معادلات میدان فاز در استحاله‌های مارتنزیتی در ابعاد نانو

سام میرزاخانی MSc

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان، ایران

مهدی جوانبخت PhD

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان، ایران

چکیده

در این مقاله، روش المان محدود غیرخطی برای حل معادلات میدان فاز یا گینزبرگ-لاندای برای استحاله‌های مارتنزیتی در ابعاد نانو به کار گرفته شده است. در تئوری میدان فاز برای تعریف نوع فاز ماده از یک پارامتر مشخصه استفاده می‌شود و معادلات گینزبرگ-لاندای در واقع رابطه خطی بین نرخ تغییرات پارامتر مشخصه و مشتق وردشی انرژی آزاد سیستم نسبت به پارامتر مشخصه یا همان نیروهای ترمودینامیکی مربوطه هستند. با توجه به اینکه انرژی آزاد شامل ترم-هایی غیرخطی از پارامتر مشخصه است، نیروهای ترمودینامیکی توابعی غیرخطی از پارامتر مشخصه هستند. در نتیجه، معادلات گینزبرگ-لاندای با استفاده از روش المان محدود غیرخطی و کد تولید شده حل می‌شوند. استحاله مورد بررسی، تبدیل فاز آستنیت به مارتنزیت در آلیاژ NiAl است که در اینجا بدون لحاظ کردن اثرات مکانیک و تنها تحت اعمال تغییر دما صورت می‌گیرد. لذا استحاله از نوع دما القایی بوده و با استفاده از تنها یک پارامتر مشخصه تعریف می‌شود. به منظور صحت‌سنجی کار عددی، منحنی پارامتر مشخصه برای صفحه فازی مشترک آستنیت-مارتنزیت، ضخامت، انرژی و سرعت انتشار آن محاسبه و با کارهای پیشین مقایسه شده‌اند که نتایج نشان از تطابق بسیار خوب کار حاضر با کارهای پیشین دارد. هم چنین مسائل فیزیکی متنوعی نظیر انتشار صفحه مشترک فازی، جوانه زنی مارتنزیت و رشد ساختارهای مارتنزیتی تحت برودت و استحاله معکوس تحت حرارت ارائه شده‌اند. نتایج این تحقیق، گام مهمی در حل مسائل میدان فازی در بار نظر گرفتن اثرات مکانیک و شرایط پیچیده اولیه و مرزی موجود در ابعاد نانو است.

کلیدواژه‌ها: میدان فاز، استحاله‌های فازی، المان محدود غیرخطی، ابعاد نانو

تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۱/۱۵

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۸/۲/۳۱

نویسنده مسئول: javanbakht@cc.uit.ac.ir

۱- مقدمه

تبدیل فاز (استحاله) مارتنزیتی یک تبدیل فاز مرتبه اول، همراه با تغییر مکان اتم‌ها نسبت به هم و بدون رخداد پدیده نفوذ اتم‌ها درهم است که نقش مهمی در ایجاد نانو و میکروساختارها و خواص مکانیکی در بسیاری از مواد نظیر آلیاژهای حافظه‌دار یا هوشمند ایفا می‌کند. با اعمال بار مکانیکی یا اعمال برودت، ساختار کریستالی مکعبی شکل پایدار در درجه حرارت بالا (آستنیت یا A) به ساختار با درجه تقارن کریستالی کمتر مکعب مستطیل و پایدار در دمای پایین (مارتنزیت یا M) تبدیل می‌گردد. به دلیل تقارن کریستال‌های فازهای آستنیت و مارتنزیت، به لحاظ کریستالوگرافی تعداد محدودی از ورینت‌های مارتنزیتی معادل وجود دارد^[1] که این مؤلفه‌ها از لحاظ اندازه یکسان بوده ولی نسبت به یکدیگر ۹۰ درجه چرخش دارند. این تغییر شکل می‌تواند با استفاده از یک تانسور کرنش تبدیل فاز تعریف شود. پدیده‌های گوناگونی مرتبط به تبدیل فازهای مارتنزیتی وجود دارند که از اهمیت بنیادی و تکنولوژیکی برخوردارند که از آن جمله می‌توان به عملیات‌های حرارتی و حرارتی-مکانیکی مواد برای به‌دست‌آوردن خواص و ساختارهای مورد نظر، پلاستیسیته القاشده به وسیله تبدیل فاز، سنتز مواد تحت فشار بالا به همراه تغییر شکل‌های پلاستیک بزرگ مانند فرآیند خرد کردن با ساچمه، اصطکاک داخلی در هنگام تبدیل فاز، عملیات کارسطحی، و نفوذ پرتابه در جسم

هدف اشاره نمود^[2]. با پیشرفت علم و تکنولوژی نانو، تبدیل فاز و پلاستیسیته در نانوذرات، نانومیلها، نانوسیم‌ها و غیره برای کاربردهای نانوسیستم‌های هوشمند مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. بهره‌گیری از پدیده‌های مرتبط با تبدیل فاز منجر به به‌دست‌آوردن خواص مکانیکی منحصربه‌فردی نظیر مقاومت بسیار بالا و تغییر شکل پلاستیک بزرگ می‌گردد که این پلاستیسیته بر خلاف پلاستیسیته کلاسیک، برگشت‌پذیر بوده و در نتیجه منجر به جذب انرژی بسیار بالایی می‌گردد. مواد تحت این تبدیل فاز دارای مفهوم تکنولوژیکی بسیار مهمی هستند. تبدیل مارتنزیتی با سریع سرد کردن موجب افزایش استحکام فولاد می‌شود. تبدیل فاز مارتنزیتی در شبکه استوانه‌ای پروتئین برای انجام ابتدایی وظایف زندگی در سیستم بیولوژیکی بدن یافت می‌شود^[3]. در حالی که تئوری‌های ارائه‌شده برای تعیین پارامترهای اساسی پدیده تبدیل فاز مجبور به فرض نمودن شکل نهایی نانو ساختار پس از پایان تبدیل فاز هستند^[4] در مقابل روش میدان فازی (PFM) یا گینزبرگ-لاندای (GL) به صورت گسترده‌ای برای مدل‌سازی تبدیل فازهای مارتنزیتی بدون در نظر گرفتن هندسه پیش فرض جواب به کار گرفته شده است^[5]. مزیت کلیدی روش میدان فاز در تعیین و محاسبه سیر تکاملی نانو ساختارها بدون نیاز به حدس و پیش‌بینی اتفاقات احتمالی و نیز دنبال کردن صفحات فازی چندگانه است. این روش به عنوان پلی بین روش‌های اتمی مانند دینامیک مولکولی، و روش‌های محیط پیوسته، نه تنها قابلیت به‌دست‌آوردن نتایج در ابعاد نانو را دارد (به عنوان مثال، صفحه مشترک فازی در حدود ۱ نانومتر می‌باشد) بلکه از سوی دیگر امکان در نظر گرفتن اندازه نمونه‌ها و زمان‌های حل بسیار بزرگتر نسبت به تحلیل‌های اتمی را می‌دهد. روش میدان فاز، اطلاعات زیادتری را نسبت به روش ترمودینامیک دربر می‌گیرد زیرا در این روش تابع پتانسیل تمامی حالات میانی (و نه فقط حالت‌های ابتدایی و انتهایی) بین فازها و میان لایه‌ها را دربر می‌گیرد^[6]. در روش میدان فاز، هر ورینت مارتنزیتی با استفاده از یک پارامتر مشخصه تعریف شده است که تحول ساختاری هر ورینت با استفاده از معادلات سینتیک گینزبرگ-لاندای مشخص می‌گردد. نانو ساختار مارتنزیتی حاصل دربرگیرنده لایه جداساز بین دو فاز همسایه با ضخامت معین و در ابعاد چند نانومتر (صفحه مشترک فازی) می‌باشد که در این لایه جداساز پارامتر مشخصه و به تبع آن تمامی خواص ترمومکانیکی به صورت پیوسته بین مقادیر مربوط به دو فاز همسایه تغییر می‌نمایند. تابع انرژی آزاد شامل دو بخش محلی و گرا دیان می‌باشد که بخش محلی می‌تواند به کرنش الاستیک، دما، و همه پارامترهای مشخصه وابسته باشد. بخش انرژی گرا دیان به گرا دیان پارامترهای مشخصه وابسته است که در صفحه مشترک بین فازهای مختلف و با ضخامت در ابعاد یک تا چند نانومتر متمرکز شده است و انرژی صفحات فازی را تشکیل می‌دهد. تئوری میدان فاز برای تبدیل فازهای مارتنزیتی برحسب پارامترهای مشخصه وابسته به کرنش کلی ارائه شده‌اند^[7]. تئوری گینزبرگ-لاندای ۳ بعدی برای تبدیل فازهای چندگانه مارتنزیتی و تنش القایی که دربرگیرنده مکانیک پیشرفته به منظور تعریف و لحاظ نمودن ویژگی‌های مهم و مفهومی مربوط به نمودارهای تنش-کرنش تجربی آلیاژهای هوشمند، فولادها و سرامیک‌هاست، بیان شده است^[8]. مدل‌های میدان فاز در ابعاد میکرو ارائه شده‌اند^[9]. وانگ و همکاران جوانه‌زنی و رشد ناهمگن در آلیاژهای مارتنزیتی را با استفاده از میدان فاز-میکروالاستیسیته مدل‌سازی نمودند^[10]. اثر دینامیک بر تبدیل فاز نیز مشخص شده است^[11].

بر آن بسیاری از مسائل فیزیکی که در آنها پدیده‌های سینتیکی از جمله نفوذ، تغییرات ساختاری کریستال‌ها و غیره وجود دارد با این روش قابل تحلیل است. با توجه به غیرخطی بودن نیروهای ترمودینامیکی برحسب پارامتر مشخصه، معادلات گینزبرگ-لاندا به کمک روش المان محدود غیرخطی به فرم معادلات المان محدود استخراج و کدی برای حل این معادلات المان محدود تولید شده است. از نتایج حاصله می‌توان به شبیه‌سازی صفحات فازی مشترک آستنیت-مارتنزیت، انرژی و سرعت آنها اشاره نمود که این نتایج با مدل‌های تحلیلی و کارهای پیشین مقایسه و هم‌خوانی بسیار خوبی به دست آمده است. بر پایه این معادلات و روش عددی تولیدشده مسائل فیزیکی متنوعی در استحاله فازی در ابعاد نانو قابل تحلیل است که در اینجا انتشار صفحه مشترک فازی، جوانه‌زنی مارتنزیت و رشد ساختارهای مارتنزیتی تحت برودت و استحاله معکوس تحت حرارت ارائه شده است. این پژوهش پایه تحلیل معادلات کوپل میدان‌های فازی و معادلات الاستیسیته با در نظر گرفتن اثرات مکانیک و شرایط پیچیده اولیه و مرزی موجود در ابعاد نانو در آینده می‌باشد.

۲- سیستم کامل معادلات

تحول نانو ساختارهای مارتنزیتی و پارامترهای مشخصه مربوطه می‌توانند به وسیله n معادله گینزبرگ-لاندا توصیف گردند که در واقع رابطه‌ای خطی بین نرخ تغییرات پارامترهای مشخصه و نیروهای ترمودینامیکی مربوطه می‌باشد. معادله گینزبرگ-لاندا برای یک پارامتر مشخصه به صورت رابطه (۱) بیان می‌گردد [26]:

$$\frac{1}{\lambda} \frac{\partial \eta}{\partial t} = - \frac{\partial \psi}{\partial \eta} + \beta |\nabla \eta|^2 \quad (1)$$

که در رابطه بالا λ ضریب سینتیک می‌باشد.

انرژی آزاد هلمهولتز بر واحد حجم به صورت جمع انرژی حرارتی مربوط به استحاله ψ^0 ، انرژی کریستالین ψ^c و انرژی گرادیان مربوط به استحاله مارتنزیتی ψ^v به شکل رابطه (۲) بیان می‌گردد:

$$\psi = \psi^0 + \psi^c + \psi^v \quad (2)$$

انرژی حرارتی که نیروی محرکه تبدیل فاز در نبود بار مکانیکی را فراهم می‌نماید، به صورت رابطه (۳) بیان می‌شود.

$$\psi^0 = \frac{A_0(\theta - \theta_e)}{3} \eta^2 (3 - 2\eta) \quad (3)$$

که θ_e دمای تعادل ترمودینامیکی برای فازهای آستنیت و مارتنزیت بدون تنش و A_0 یک پارامتر می‌باشد.

ψ^c انرژی کریستالین که مانع انرژی بین دوفاز در تعادل را نشان می‌دهد به صورت رابطه (۴) قابل بیان است:

$$\psi^c = A_0(\theta_e - \theta_c) \eta^2 (1 - \eta)^2 \quad (4)$$

که θ_c دمای بحرانی است که در آن فاز آستنیت بدون تنش پایداری ترمودینامیکی خود را از دست می‌دهد.

ψ^v انرژی گرادیان تنها در درون ناحیه لایه جداساز بین دو فاز حضور دارد و نماینده ناهمگنی شیمیایی لایه جداساز می‌باشد. برای استحاله‌های فازی با یک ورینت مارتنزیتی، انرژی گرادیان به شکل رابطه (۵) تعریف می‌گردد.

$$\psi^v = \frac{\beta}{2} |\nabla \eta|^2 \quad (5)$$

که β ضریب انرژی گرادیان و تعیین‌کننده انرژی گرادیان لایه جداساز A-M می‌باشد. معادلات گینزبرگ-لاندا برای استحاله فازی و نابجایی‌ها به صورت رابطه (۶) خلاصه می‌گردد.

$$\frac{1}{\lambda} \frac{\partial \eta}{\partial t} = -(4A_1\eta^2 - 2A_2\eta + 2A_3) + \beta |\nabla \eta|^2 \quad (6)$$

برای شبیه‌سازی جوانه‌زنی و تکامل ورینت‌های مارتنزیتی چندگانه در مقیاس نانو تحت بارگذاری ترمومکانیکی، معمولاً روش میدان فاز اعمال می‌شود [12-14]. روش میدان فاز در مقابل روش صفحه مشترک فازی تیز که در آن تکامل توسط اصل اکسترمم پیچیده یا حرکت صفحات فازی تعیین می‌شود قرار می‌گیرد [15]. اکثر روش‌های محاسباتی برای معادلات میدان فاز بر اساس روش‌های طیفی هستند [16]. *خاچاتوریان* پیشگام روشی که در آن روش طیفی با یک راه حل تحلیلی سری فوری برای معادلات الاستیسیته با یک توزیع دلخواه از پارامترهای مشخصه ترکیب شده است می‌باشد. البته این روش فقط برای مسائلی با هندسه و فیزیک خطی و عمدتاً برای شرایط مرزی تناوبی قابل استفاده است [14, 17]. از آنجایی که تئوری توسعه‌یافته شامل فیزیک چندگانه غیرخطی نظیر قانون الاستیک غیرخطی، معادلات غیرخطی GL یا هندسه غیرخطی می‌باشد، روش سنتی طیفی قابل استفاده نمی‌باشد [18, 19]. *خاچاتوریان* و همکاران پیش‌قدم در استفاده از مدل‌های میدان فاز برای تبدیلات فاز مارتنزیتی هستند. آنها تئوری میکروالاستیسته میدان فاز و مدل میدان فاز را برای تبدیلات مارتنزیتی بر اساس معادلات جنبشی وابسته به زمان (GL) توسعه داده‌اند. در این روش حل عددی معادلات GL با استفاده از تبدیلات فوری به دست آمده است [17, 19]. سیر تکاملی یک نانو ساختار مارتنزیتی چند مؤلفه‌ای در حین تبدیل فاز، خصوصیات تغییر شکل ماده را تعیین نموده و امکان بروز خاصیت تحریک‌شدگی یا جذب انرژی را می‌دهد. از آنجایی که پارامترهای تبدیل فاز قابل کنترل می‌باشند، خواص مکانیکی نیز به همان صورت به کمک روش‌هایی نظیر آلیاژسازی یا پلاستیسیته می‌توانند کنترل گردند. برای حل معادلات GL از روش‌های گوناگونی بهره گرفته شده است که از آن جمله می‌توان به تبدیلات فوری [20]، روش تفاضل نامحدود [21] و روش المان محدود [18, 22-26] اشاره کرد. در این میان، روش المان محدود قابلیت بالاتری نشان داده و تلاش‌های بیشتری را به سوی خود معطوف نموده است. در سال‌های اخیر، توجه پایه‌ای و کاربردی قابل توجهی به پدیده تبدیل فازها در نمونه‌های با ابعاد نانو شده است که از آن جمله می‌توان به نانو ذرات، نانو وایرها و نانوفیلم‌ها و نیز مواد پلی‌کریستالی با پایه ساختاری نانودانه اشاره نمود [27]. در این موارد، پدیده‌های پیش تبدیل و تبدیل فاز سطح القایی، صفحات فازی و کشش سطحی و اثرات اندازه نقش مهم و تعیین‌کننده‌ای در ترمودینامیک، سینتیک و نانو ساختار ایفا می‌نمایند. مطالعه جامع رفتارهای غیرخطی، فازهای چندگانه، فازهای با نانو ساختارهای دوقلو، تعامل‌های محلی، کشش سطحی و انرژی سطحی متغیر منجر به کشف نانو ساختارهای جدید، مکانیزم‌ها، پدیده‌ها و قواعد کیفی و کمی از پدیده تعامل فاز و اثرات سطح می‌گردد [28-31]. به عنوان مثال، یکی از تلاش‌های قابل توجه در سال‌های اخیر، مطالعه مواد با نانو ساختار دوقلویی می‌باشد. دوقلویی یک مکانیزم برای تغییر شکل پلاستیک در مواد کریستالی است که به وسیله آن یک منطقه از شبکه کریستالی در داخل یک جهت‌گیری جدید به طور همگن چیده می‌شوند [32]. در این پژوهش، روش المان محدود غیرخطی برای حل معادلات سینتیک میدان فاز یا گینزبرگ-لاندا برای استحاله‌های مارتنزیتی در ابعاد نانو به کار گرفته شده است. در اینجا، تابع انرژی هلمهولتز مورد استفاده شامل دو بخش محلی و گرادیان می‌باشد که بخش محلی تابعی غیرخطی از پارامتر مشخصه و انرژی گرادیان نیز تابعی از گرادیان این پارامتر است. این تابع انرژی در تحلیل استحاله‌های دما القایی و عاری از تنش مکانیکی کاربرد دارد. علاوه

$$b^e = - \int_{\Gamma^e} N^T \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \cos \gamma + \frac{\partial \eta}{\partial y} \sin \gamma \right) \beta d\Gamma \quad (13)$$

انتگرال‌های موجود در ماتریس سختی معادل میدان فاز و بردار شرط مرزی را می‌توان برای المان‌هایی با درجه آزادی مختلف محاسبه نمود. که برای المان مثلثی ۳ گره‌ای با استفاده از انتگرال‌گیری به روش مختصات سطح می‌توان به صورت (۱۴) نوشت:

$$C^e = \int_{A^e} \frac{1}{\lambda} N^T N dA = \frac{1}{\lambda} \int_{A^e} \begin{bmatrix} N_1^2 & N_1 N_2 & N_1 N_3 \\ N_1 N_2 & N_2^2 & N_2 N_3 \\ N_1 N_3 & N_2 N_3 & N_3^2 \end{bmatrix} dA = \frac{A^e}{12\lambda} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \quad (14)$$

$$\int_{A^e} N_1^m N_2^l N_3^p dA = \frac{m! l! p!}{(m+l+p)} 2A$$

طبق رابطه (۱۲) ماتریس ضریب سینتیک میدان فاز از یک بخش خطی و یک بخش غیرخطی تشکیل شده است. برای استخراج بخش خطی ماتریس سختی معادل میدان فاز ابتدا بردار گرادینان پارامتر مشخصه را می‌توان به صورت رابطه (۱۵) نوشت.

$$\nabla \eta = \begin{bmatrix} \frac{\partial \eta}{\partial x} \\ \frac{\partial \eta}{\partial y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N}{\partial x} \\ \frac{\partial N}{\partial y} \end{bmatrix} \eta^e = B \eta^e \quad (15)$$

$$B = \begin{bmatrix} \frac{\partial N}{\partial x} \\ \frac{\partial N}{\partial y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x} & \frac{\partial N_2}{\partial x} & \frac{\partial N_{nd}}{\partial x} \\ \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{\partial N_2}{\partial y} & \frac{\partial N_{nd}}{\partial y} \end{bmatrix} \quad (16)$$

B ماتریس کرنش تغییر مکان به صورت رابطه (۱۶) بیان می‌شود. لذا ترم خطی ماتریس سختی معادل میدان فاز به شکل رابطه (۱۷) قابل بیان است.

$$K_{phf-linear}^e = \int_{A^e} B^T \tilde{\beta} B dA = B^T \tilde{\beta} B A^e \quad (17)$$

$$\tilde{\beta} = \begin{bmatrix} \beta & 0 \\ 0 & \beta \end{bmatrix} \quad (18)$$

با توجه به اینکه هر گره دارای یک درجه آزادی بوده، توابع شکل انتخابی برای این المان به صورت رابطه (۱۹) می‌باشند.

$$\eta(x,y) = N_1(x,y)\eta_1 + N_2(x,y)\eta_2 + N_3(x,y)\eta_3 \quad (19)$$

$$N_i = \frac{1}{2A^e} (a_i + b_i x + c_i y)$$

با همگن در نظر گرفتن استحاله فازی به صورت رابطه (۱۸)، نهایتاً ترم خطی ماتریس سختی معادل میدان فاز برای یک المان به شکل رابطه (۲۰) استخراج می‌گردد.

$$K_{phf-linear}^e = \frac{\beta}{4A^e} \begin{bmatrix} b_1^2 + c_1^2 & b_1 b_2 + c_1 c_2 & b_1 b_3 + c_1 c_3 \\ b_1 b_2 + c_1 c_2 & b_2^2 + c_2^2 & b_2 b_3 + c_2 c_3 \\ b_1 b_3 + c_1 c_3 & b_2 b_3 + c_2 c_3 & b_3^2 + c_3^2 \end{bmatrix} \quad (20)$$

بخش غیرخطی ماتریس ضریب سینتیک میدان فاز تابعی از مجهولات مسئله یعنی پارامترهای مشخصه می‌باشد که باعث غیرخطی شدن ماتریس ضریب سینتیک میدان فاز می‌شود. با جایگذاری رابطه (۱۹) در رابطه (۱۲) (ب) این ترم به شکل رابطه (۲۱) بیان می‌گردد.

$$A_1 = A_0(\theta_e - \theta_c), A_2 = A_0(\theta + 2\theta_e - \theta_c) \\ A_3 = A_0(\theta - \theta_c)$$

اصولاً روش اجزای محدود یکی از روش‌های حل معادلات دیفرانسیل نظیر روش تفاضل محدود و اجزای مرزی می‌باشد. حل معادلات دیفرانسیل توسط اجزای محدود عموماً به دو روش گالرکین و حساب تغییرات صورت می‌گیرد. در این پژوهش ابتدا معادلات دیفرانسیل به فرم اجزای محدود برای یک المان و با استفاده از روش گالرکین بر اساس روش باقی‌مانده وزنی استخراج می‌گردد و سپس برای کل المان‌های هندسه ادغام می‌شوند. بردار گالرکین به صورت رابطه (۷) بیان می‌شود.

$$G^e = \int_{A^e} N^T f(\eta(x,y)) dx dy \quad (7)$$

با جایگذاری رابطه (۶) در رابطه (۷) و تبدیل ترم لاپلاس موجود در رابطه (۶) به فرم ضعیف با استفاده از قضیه دیورژانس، بردار گالرکین به صورت رابطه (۸) قابل بیان می‌باشد.

$$G^e = \int_{A^e} N^T \left(\frac{1}{\lambda} \frac{\partial \eta}{\partial t} + (4A_1 \eta^3 - 2A_2 \eta^2 + 2A_3 \eta) \right) dA + \int_{A^e} \left(\frac{\partial N^T}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial N^T}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \beta dA - \int_{\Gamma^e} N^T \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \cos \gamma + \frac{\partial \eta}{\partial y} \sin \gamma \right) \beta d\Gamma \quad (8)$$

با در نظر گرفتن $\eta(x,y) = N(x,y)\eta^e$ که $N(x,y)$ ماتریس توابع شکل و η^e بردار مقادیر پارامتر مشخصه برای نودهای المان می‌باشند. برای هر المان و جایگذاری در رابطه (۸) بردار گالرکین به صورت رابطه (۹) حاصل می‌گردد.

$$G^e = \left\{ \int_{A^e} \frac{1}{\lambda} N^T N dA \right\} \dot{\eta}^e + \left\{ \int_{A^e} N^T N (4A_1 \eta^2 - 2A_2 \eta + 2A_3) dA \right\} \eta^e + \left\{ \int_{A^e} \left(\frac{\partial N^T}{\partial x} \frac{\partial N}{\partial x} + \frac{\partial N^T}{\partial y} \frac{\partial N}{\partial y} \right) \beta dA \right\} \eta^e - \int_{\Gamma^e} N^T \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \cos \gamma + \frac{\partial \eta}{\partial y} \sin \gamma \right) \beta d\Gamma$$

معادله میدان فاز به فرم اجزای محدود (۹) به صورت رابطه (۱۰) قابل بیان است.

$$G^e = C^e \dot{\eta}^e + [K_{phf-linear}^e + K_{phf-nonlinear}^e] \eta^e + b^e \quad (10)$$

که C^e ماتریس ضریب سینتیک میدان فازست و به صورت رابطه (۱۱) بیان می‌شود.

$$C^e = \int_{A^e} \frac{1}{\lambda} N^T N dA \quad (11)$$

$[K_{phf-linear}^e + K_{phf-nonlinear}^e]$ ماتریس سختی معادل میدان فاز می‌باشد که در آن $K_{phf-linear}^e$ بخش خطی به صورت رابطه (۱۲-الف) و $K_{phf-nonlinear}^e$ غیرخطی و به صورت رابطه (۱۲-ب) بیان می‌شوند.

$$K_{phf-linear}^e = \int_{A^e} \left(\frac{\partial N^T}{\partial x} \frac{\partial N}{\partial x} + \frac{\partial N^T}{\partial y} \frac{\partial N}{\partial y} \right) \beta dA \quad (12-ب)$$

$$K_{phf-nonlinear}^e = \int_{A^e} N^T N (4A_1 \eta^2 - 2A_2 \eta + 2A_3) dA$$

b^e بردار شرط مرزی به صورت رابطه (۱۳) بیان می‌شود.

رابطه (۲۸) بسط تیلور داده می‌شود.

$$R(\eta^e) = [K^e(\eta^e)]\eta_t^e - F_t^e \quad (27)$$

$$R(\eta^e) = R(\eta_t^{(r-1)}) + \left[\left(\frac{\partial R}{\partial \eta} \right) \right] \eta_t^{(r-1)} \delta \eta + \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 R}{\partial \eta^2} \right) \right] \eta_t^{(r-1)} (\delta \eta)^2 + \dots = 0 \quad (28)$$

با صرف نظر از ترم‌های مرتبه بالاتر افزایش دیفرانسیلی در معادله (۲۸)، افزایش دیفرانسیلی با رابطه (۲۹) محاسبه می‌گردد.

$$\delta \eta = -[K_T^e(\eta_t^{(r-1)})]^{-1} \cdot R(\eta_t^{(r-1)}) \quad (29)$$

که در رابطه (۲۹)، $[K_T^e]$ ماتریس شیب (مماسی) می‌باشد و به صورت رابطه (۳۰) قابل بیان می‌باشد.

$$[K_T^e] = \left[\left(\frac{\partial R}{\partial \eta} \right) \right] \eta_t^{(r-1)} = [K^e(\eta^e)] + \frac{\partial [K^e(\eta^e)]}{\partial \eta} \eta_t^e \quad (30)$$

پس از محاسبه افزایش دیفرانسیلی از رابطه (۲۹) مقادیر پارامتر مشخصه η با استفاده از رابطه (۳۱) قابل محاسبه می‌باشد.

$$\eta_t^r = \eta_t^{(r-1)} + \delta \eta \quad (31)$$

این روند تا جایی تکرار می‌گردد که نرم بردار باقی‌مانده از یک مقدار ترانس کمتر گردد. استفاده از شرط همگرایی فاصله دو تکرار متوالی (خطای نسبی) منجر به افزایش تعداد تکرار در روش نیوتن-رافسون برای دستیابی به جواب قابل قبول و افزایش چشم‌گیر زمان حل گردید. بنابراین از رابطه (۳۲) به عنوان شرط همگرایی مقدار ترانس همگرایی $\varepsilon = 10^{-10}$ در شبیه‌سازی مسائل استفاده شده است.

$$\sqrt{\sum_{i=1}^n R^2} < \varepsilon \quad (32)$$

۳- شبیه‌سازی عددی

برای حل معادلات میدان فاز ارائه‌شده از روش المان محدود و کد متلب نوشته شده، استفاده شده است. اندازه، زمان و تنش به ترتیب برابر با 1nm، 1ps و 1GPa بی‌بعد شده‌اند. همچنین دما برحسب نیروی محرکه بی‌بعد برودتی $\theta_e = (\theta_e - \theta) / \theta_e$ بیان شده است. خصوصیات ماده زیر برای آلیاژ NiAl در شبیه‌سازی‌ها استفاده شده‌اند [33, 34]:

$$\beta = 5.18 \times 10^{-10} N \lambda = 2600 (\text{Pa} \cdot \text{s})^{-1} \quad \theta_e = 215 \text{K} \\ \theta_c = -183 \text{K} \quad A_0 = 4.4 \text{MPa/K}$$

پیاده‌سازی عددی مسائل میدان فاز غیرخطی وابسته به زمان با توجه به اینکه باید اثر زمان بر پارامتر مشخصه در نظر گرفته شود پیچیده است. روند کد نویسی به صورت خلاصه بدین صورت می‌باشد که پس از تشریح معادلات سینتیک میدان فاز به فرم المانی و مش‌بندی نانو ساختار، کلیه پارامترهای عددی مسئله که در یک فایل اکسل ذخیره شده است را به برنامه فراخوانی نموده و سپس ماتریس کرنش تغییر مکان، سینتیک میدان فاز و بردار نیروی ناشی از شرایط مرزی میدان فاز در زیر برنامه مربوطه محاسبه و به برنامه اصلی برگردانده و ذخیره می‌گردد. شرایط اولیه برای هر مسئله اعمال گردیده و به عنوان حدس اولیه در روش تکرار نیوتن-رافسون به کار می‌رود. سپس برنامه وارد حلقه زمانی شده و در یک زیر برنامه ماتریس سختی معادل میدان فاز و ماتریس مماسی برای هر المان محاسبه و به برنامه بازگردانده می‌شود و برای کل المان‌ها ادغام و ذخیره می‌گردد. در گام بعد، بردار باقی‌مانده محاسبه شده و مقدار پارامتر مشخصه به دست می‌آید و شرط همگرایی بررسی می‌گردد. حال اگر شرط همگرایی ارضا شود برنامه مقدار پارامتر مشخصه به دست آمده را برای محاسبه ماتریس سختی معادل میدان فاز استفاده می‌کند. در گام بعدی، با استفاده

$$K_{\text{phf-nonlinear}}^e = \int_{A^e} 4A_1 N^T N (N_1 \eta_1 + N_2 \eta_2 + N_3 \eta_3)^2 dA - \int_{A^e} 2A_2 N^T N (N_1 \eta_1 + N_2 \eta_2 + N_3 \eta_3) dA + \int_{A^e} 2A_3 N^T N dA \quad (21)$$

بخش غیرخطی ماتریس سختی معادل میدان فاز با استفاده از انتگرال‌گیری به روش مختصات سطح قابل محاسبه می‌باشد. با توجه به اینکه در این پژوهش مسائل دمایی القایی و نه سطح القایی مد نظر هستند شرط مرزی مسئله میدان فاز مورد استفاده شرط مرزی عایق (ایزوله) می‌باشد و تفسیر فیزیکی آن به معنای عدم تغییر انرژی سطحی در مرزهای نانو ساختار نمونه می‌باشد. شرط مرزی مربوطه را می‌توان به صورت رابطه (۲۲) بیان نمود.

$$\beta \frac{\partial \eta}{\partial x} \cos \gamma + \beta \frac{\partial \eta}{\partial y} \sin \gamma = \beta k \cdot \nabla \eta = 0 \quad (22)$$

که k بردار نرمال بر مرزهای هندسه می‌باشد.

معادله اجزای محدود به دست آمده از معادله غیرخطی میدان فاز، منجر به معادلات جبری غیرخطی برای هر المان از مش‌بندی اجزاء محدود می‌گردد. معادله هر یک از المان‌ها به فرم رابطه (۲۳) می‌باشد.

$$C^e \dot{\eta}^e + [K^e(\eta^e)]\eta^e = F^e \quad (23)$$

اساس روش‌های تقریبی زمان به تقریب مشتق از یک تابع برمی‌گردد. معروف‌ترین روش، روش‌های خانواده α هستند که آن یک میانگین وزنی از مشتق زمان یک متغیر وابسته می‌باشد و در دو گام زمانی متوالی با استفاده از درون‌یابی خطی از مقدار متغیر در این دو گام به صورت رابطه (۲۴) تقریب زده می‌شود.

$$(1 - \alpha)\eta_t^e + \alpha \dot{\eta}_{t+1}^e \approx \frac{\eta_{t+1}^e - \eta_t^e}{\Delta t} \quad \text{for } 0 \leq \alpha \leq 1 \quad (24)$$

در این بخش برای تبدیل معادلات غیرخطی المان محدود (۲۳) به معادلات دیفرانسیل جبری استاندارد، به صورت زیر از روش‌های تقریب زمانی استفاده می‌گردد. بدین صورت که پارامتر $(1 - \alpha)$ را در معادله غیرخطی المان محدود در زمان t و پارامتر α را در معادله غیرخطی المان محدود در زمان $t + 1$ ، ضرب و سپس این دو با هم ادغام می‌شوند و با در نظر گرفتن رابطه تقریب زمانی رابطه (۲۴) شکل استاندارد معادلات دیفرانسیل جبری غیرخطی به صورت رابطه (۲۵) به دست می‌آید.

$$\left\{ \frac{1}{\Delta t} C^e + \alpha [K^e(\eta^e)] \right\} \eta_{t+1}^e = \left\{ \frac{1}{\Delta t} C^e - (1 - \alpha) [K^e(\eta^e)] \right\} \eta_t^e + (1 - \alpha) F_t^e + \alpha F_{t+1}^e \quad (25)$$

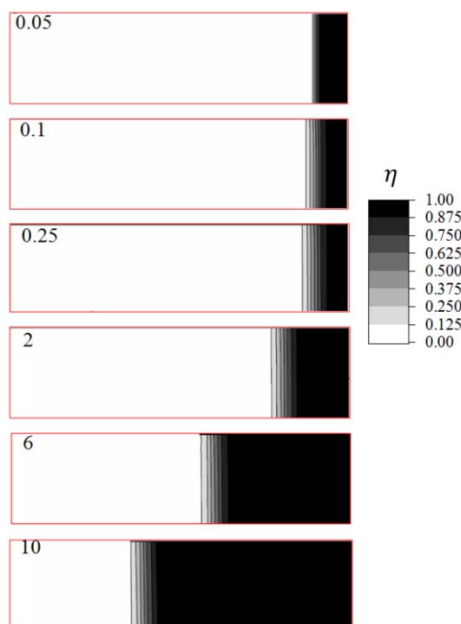
بنابراین بر مبنای روش صریح (انتخاب $\alpha = 0$)، η_{t+1}^e با دانستن مقدار η_t^e از رابطه (۲۶) به دست می‌آید.

$$\left\{ \frac{1}{\Delta t} C^e \right\} \eta_{t+1}^e = \left\{ \frac{1}{\Delta t} C^e - [K^e(\eta^e)] \right\} \eta_t^e + F_t^e \quad (26)$$

با توجه به اینکه تابع انرژی هلمهولتز تابعی غیرخطی از پارامتر مشخصه می‌باشد، ماتریس سختی معادل میدان فاز تابعی از پارامتر مشخصه بوده و لذا بایستی معادلات غیرخطی را به نحوی خطی نمود. بدین صورت که با در نظر گرفتن یک تقریب اولیه از پارامتر مشخصه برای هر المان ماتریس سختی معادل میدان فاز هر المان محاسبه و با ادغام آنها برای کل المان‌ها و سپس با حل معادلات ادغام شده تقریب بعدی پارامتر مشخصه به دست می‌آید. این روش را می‌توان تکرار کرد تا با توجه به شرط همگرایی مورد نظر حل تقریبی به حل واقعی نزدیک شود. در این پژوهش از روش نیوتن-رافسون برای خطی‌سازی معادلات غیرخطی میدان فاز استفاده شده است. با فرض اینکه مقدار پارامتر میدان در مرحله $r - 1$ مشخص باشد، مقدار پارامتر مشخصه در مرحله r به این شکل حاصل می‌شود که در ابتدا بردار باقی‌مانده طبق رابطه (۲۶) تعریف و سپس حول پارامتر مشخصه در مرحله $r - 1$ به صورت

مشترک A-M حرکت می‌نماید و فاز آستنیت به تدریج جای خود را به فاز مارتنزیت می‌دهد. این پدیده تنها با اعمال برودت صورت می‌گیرد و در پایان تمامی نمونه به فاز مارتنزیت تبدیل می‌گردد. نکته مهم آنکه محاسبات نشان می‌دهد سرعت انتشار صفحه مشترک فازی ثابت می‌ماند. دلیل این سرعت ثابت عدم حضور تنش و همچنین نبود اثرات انرژی سطحی مرزی است که می‌توانند باعث ایجاد ناهمگنی نیروی محرکه ترمودینامیکی در نمونه شوند. شکل ۱ مرحله بازشدگی صفحه مشترک فازی تیز و تبدیل آن به صفحه مشترک فازی با ضخامت معین را تا زمان $t = 0.25$ و سپس انتشار صفحه فازی مشترک و تغییر پیوسته و تدریجی فاز آستنیت به مارتنزیت در منطقه مشترک در طول زمان را نشان می‌دهد. همچنین، پروفیل η در راستای x و برای خط میانی $y = 0.5$ در حین رشد و انتشار صفحه مشترک در نمودار ۱ آورده شده است. مشاهده می‌گردد که فرم پارامتر مشخصه در حین تغییر فاز تغییر نمی‌کند.

برای درک چگونگی تغییرات انرژی سیستم در حین رشد و انتشار، پروفیل انرژی سیستم در راستای x و برای خط میانی $y = 0.5$ برای زمان‌های مختلف در نمودار ۲ آورده شده است. مشاهده می‌شود که با انتشار صفحه مشترک پروفیل انرژی بدون تغییر فرم در طول نمونه جابجا می‌شود و به تدریج انرژی فاز مارتنزیت بر سیستم غالب می‌گردد. عدم تغییر پروفیل انرژی ناشی از عدم تغییر پروفیل پارامتر مشخصه فاز است و لذا علی‌رغم کاهش مقدار انرژی سیستم، مقدار انرژی صفحه مشترک تغییر نمی‌کند. هرگونه نیروی محرکه ناهمگن اعم از میدان تنش ناهمگن یا اثرات انرژی سطحی متغیر سبب تغییر پروفیل انرژی در حین حرکت می‌گردد. به منظور بررسی همگرایی کار عددی، چگونگی تغییر ضخامت صفحه مشترک فازی با تغییر پارامتر $\bar{N}$ که بیانگر نسبت تعداد المان در راستای ضخامت صفحه مشترک است برای این مسئله محاسبه و در نمودار ۳ آورده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌گردد ضخامت صفحه مشترک برای $\bar{N} \geq 3$ مستقل از تعداد المان‌ها می‌باشد و در شبیه‌سازی حاضر نیز از مش‌ریزی به اندازه کافی ریز ($\bar{N} = 4$)، استفاده شده است.



شکل ۱) مراحل انتشار صفحه فازی مشترک برای زمان‌های مختلف در $\bar{\theta} = 0.53$

از معادلات فرم المانی میدان فاز مقدار پارامتر مشخصه برای زمان بعدی محاسبه و ذخیره می‌گردد و یک گام زمانی به زمان حل اضافه می‌گردد. برنامه تا زمان نهایی در نظر گرفته شده با همین روند تکرار می‌گردد. برنامه قابلیت نمایش پارامترهای گوناگون را در ۲ بعد مکانی و نیز در امتداد خط دلخواه در داخل نمونه را داراست. با توجه به اینکه در این پژوهش مسئله میدان فاز بدون لحاظ کردن اثرات مکانیک مورد بررسی قرار گرفته است و هندسه مورد بررسی فاقد هر گونه ناپیوستگی و نبود تمرکز تنش می‌باشد که می‌توان از المان‌های ۳ گرهی و ۴ گرهی با مرتبه‌های مختلف استفاده نمود. در این پژوهش به منظور کاستن از حجم محاسبات کار عددی و زمان حل از المان سه گرهی مرتبه اول برای مش‌بندی نمونه‌های مورد تحلیل استفاده شد.

۳-۱- اعتبارسنجی معادلات

به منظور اعتبارسنجی کار عددی، انتشار صفحه مشترک فازی بررسی و سرعت انتشار محاسبه و با حل تحلیلی مقایسه گردیده است. بدین منظور یک نمونه مستطیلی 10×20 در نظر گرفته شد. شرایط مرزی ایزوله (به معنی عدم تغییر انرژی سطح در مرز) برای تمامی مرزها در نظر گرفته شده است، همچنین به عنوان شرط اولیه، قسمت انتهایی سمت راست نمونه با ابعاد 10×2 به عنوان فاز مارتنزیت و مابقی نمونه آستنیت لحاظ گردیده است. با توجه به عدم وجود تنش و نیز ایزوله بودن مرزها، تنها نیروی محرکه ترمودینامیکی موجود برای رشد ناحیه مارتنزیتی و حرکت صفحه مشترک فازی کاهش دما می‌باشد. به این منظور دمای $\bar{\theta} = 0.53$ (پایین‌تر از دمای تعادل $\bar{\theta} = 0$) اعمال شده است. سرعت محاسبه شده برای انتشار صفحه فازی مشترک بر مبنای حرکت نقطه متناظر با $\eta = 0.5$ برابر با $v = 1008 \text{ m/s}$ به دست آمده است که تطابق بسیار خوبی با نتایج به دست آمده $v = 1012 \text{ m/s}$ از حل تحلیلی را نشان می‌دهد^[13]. ضخامت صفحه مشترک نیز از کد محاسبه و برابر با $\delta = 2.1 \text{ nm}$ به دست آمده که با خطای کمتر از ۱/۴٪ در تطابق بسیار خوب با نتایج تحلیلی ($\delta = 2.13 \text{ nm}$) می‌باشد^[32]. گام دیگر در صحت‌سنجی نتایج، محاسبه انرژی صفحه مشترک فازی آستنیت-مارتنزیت است. در ابتدا اشاره‌ای به نحوه محاسبه انرژی صفحه مشترک فازی می‌گردد. انرژی صفحه مشترک فازی بین دو فاز به عنوان انرژی مازاد بر انرژی بالک آن دو فاز به صورت رابطه (۳۳) تعریف می‌گردد:

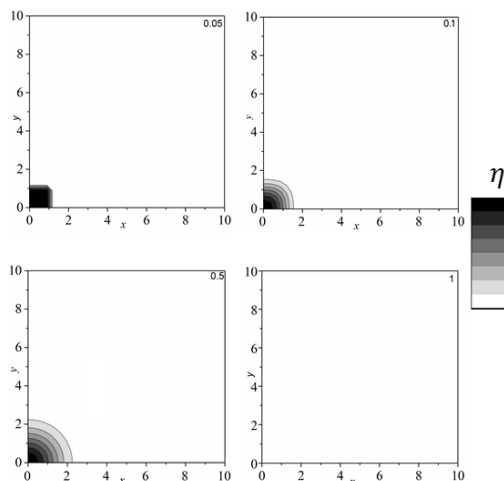
$$E = \int_0^L \psi dx_0 - \psi_b L \quad (33)$$

که L طول اولیه نمونه (عمود بر صفحه مشترک فازی) است و انتگرال در هیات مرجع گرفته می‌شود. ψ_b انرژی بالک فاز، در هر نقطه‌ای دور از صفحه مشترک قابل محاسبه است با این فرض که انرژی بالک هر فاز به صورت همگن توزیع شده است. حال با در نظر گرفتن مسئله در دمای تعادل مقدار انرژی بر واحد حجم از شبیه‌سازی برابر با $E = 0.2251 \text{ J/m}^3$ به دست می‌آید که در تطابق خوبی با نتایج به دست آمده از رابطه تحلیلی $E = 0.2245 \text{ J/m}^3$ می‌باشد^[8].

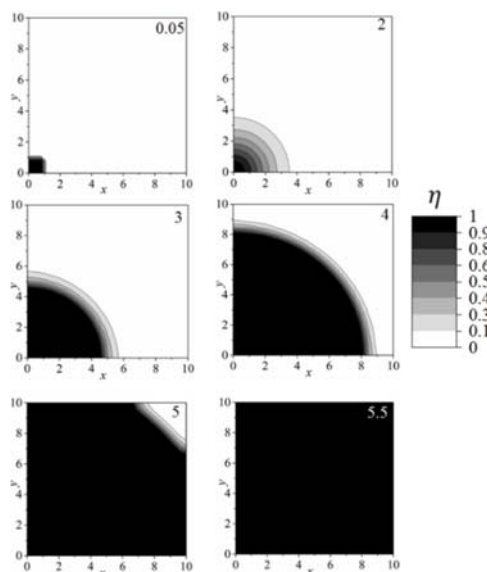
۳-۲- انتشار صفحه مشترک فازی

در دماهای کمتر از تعادل شرایط برای رشد فاز مارتنزیت ایجاد می‌گردد. در اینجا دمای نمونه $\bar{\theta} = 0.53$ انتخاب شده است. پدیده تغییر فاز بدین شکل روی می‌دهد که در ابتدا مرز مشترک لبه تیز بین آستنیت و مارتنزیت شروع به باز شدن و افزایش ضخامت نموده و به صفحه مشترک فازی A-M با ضخامت معینی تبدیل می‌گردد. سپس فاز مارتنزیت شروع به رشد نموده، صفحه

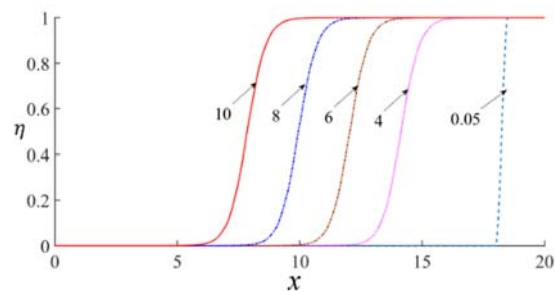
تا بالاترین دمایی که در آن جوانه رشد می‌نماید به دست آید. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که تا $\bar{\theta} = 1.8$ رشدی صورت نمی‌گیرد و جوانه به دلیل کافی نبودن نیروی محرکه برودتی از بین می‌رود و به آستنیت تبدیل می‌گردد. نمودار ۳ بیانگر عدم رشد جوانه مارتنزیتی در این دماست. مشاهده می‌گردد که جوانه اولیه اگرچه در حال افزایش ضخامت صفحه مشترک فازی است اما مقدار آن رو به کاهش بوده و نهایتاً به صفر می‌رسد. اما با ادامه کاهش دما و به عبارتی افزایش نیروی محرکه به $\bar{\theta} = 1.93$ مقدار η مربوط به جوانه زیاد شده و به یک می‌رسد که بیانگر تشکیل مارتنزیت کامل است. ادامه منطقه مارتنزیت با حرکت صفحه مشترک فازی رشد کرده و با گذشت زمان سرتاسر نمونه به مارتنزیت تبدیل می‌گردد. شکل ۳ نحوه رشد جوانه در این حالت را نشان می‌دهد. محاسبات نشان می‌دهد پس از رشد اولیه جوانه، سرعت رشد مارتنزیت و صفحه مشترک فازی ثابت می‌ماند که این به دلیل نبود تنش ناهمگن و نیز وجود شرایط مرزی ایزوله برای میدان فاز که به معنی عدم تغییر انرژی سطحی در مرزهاست می‌باشد. صفحه مشترک فازی نیز به صورت دایره‌وار حرکت می‌نماید و در ادامه جهت انحنای آن معکوس می‌گردد که ناشی از اعمال شرط مرزی ایزوله بر مرزها، یعنی عمودماندن صفحه مشترک بر مرز می‌باشد.



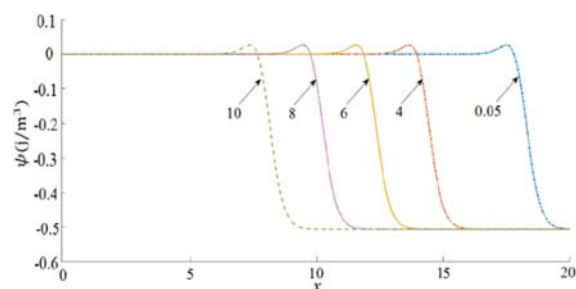
شکل ۲ عدم رشد جوانه و از بین رفتن آن تحت برودت $\bar{\theta} = 1.8$ در طول زمان



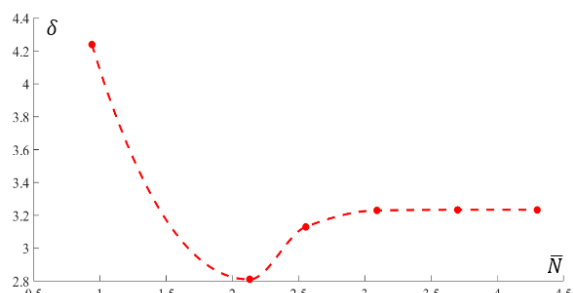
شکل ۳ رشد جوانه مارتنزیتی دمای القایی در $\bar{\theta} = 1.93$



نمودار ۱) پروفایل پارامتر مشخصه در حین انتشار در راستای خط میانی $y = 5$



نمودار ۲) پروفایل انرژی در حین انتشار در راستای خط میانی $y = 5$



نمودار ۳) ضخامت صفحه مشترک فازی برحسب پارامتر $\bar{N}$

۳-۳- بررسی رشد جوانه مارتنزیتی

یکی از مسائل اساسی در بررسی تغییرات نانو ساختارها و کریستالوگرافی، مسئله جوانه‌زنی و رشد جوانه فاز است که می‌تواند به شدت بر خواص ماده تأثیر بگذارد. پارامترهای بسیاری می‌توانند در این پدیده تأثیرگذار باشند که این خود زمینه بسیار مناسبی برای شبیه‌سازی‌های عددی ایجاد می‌نماید. در اینجا با استفاده از معادلات و کد ارائه‌شده نمونه‌ای از مسئله جوانه‌زنی دمای القایی در یک نانو ساختار ارائه می‌گردد. بدین منظور یک نمونه مربعی 20×20 با یک جوانه مارتنزیتی مربعی با ابعاد 2×2 و به بزرگی $\eta = 0.1$ در وسط آن در نظر گرفته شده است. بقیه نمونه به صورت بستر آستنیت ($\eta = 0$) در نظر گرفته شده است. به دلیل تقارن، مدل یک‌چهارم نمونه شبیه‌سازی شده و لذا شرایط مرزی تقارن بر ضلع‌های پایین و چپ اعمال شکل ۲ گردیده است. در دمای تعادل هیچ‌گونه رشدی در جوانه مشاهده نمی‌گردد و مقدار پارامتر مشخصه کاهش یافته تا به صفر می‌رسد. برای رشد جوانه نیروی محرکه تبدیل فاز بایستی افزایش یابد و لذا دما باید کاهش داده شود تا شرایط برای حضور فاز مارتنزیت فراهم آید. برای یافتن بیشینه دمایی که در آن جوانه رشد نموده تا به مقدار $\eta = 1$ برسد به تدریج دمای سیستم را به صورت پله‌ای و در هر مرحله 25K کاهش داده یا به بیان دیگر نیروی محرکه بی‌بعد برودتی در هر مرحله $\Delta \bar{\theta} \approx 0.12$ افزایش می‌یابد و مسئله حل مجدد می‌شود

۴- نتیجه‌گیری

در این مقاله، روش المان محدود غیرخطی برای حل معادلات میدان فاز یا گینزبرگ-لاندا برای استحاله‌های مارتنزیتی در ابعاد نانو به کار گرفته شده است. با توجه به اینکه انرژی آزاد استحاله فازی شامل ترم‌هایی غیرخطی از پارامتر مشخصه می‌باشد، نیروهای ترمودینامیکی، توابعی غیرخطی از پارامتر مشخصه هستند. در نتیجه، معادلات سینتیک گینزبرگ-لاندا با استفاده از روش المان محدود غیرخطی و کد تولید شده حل گردید. استحاله مورد بررسی، تبدیل فاز مارتنزیتی بدون لحاظ کردن اثرات مکانیک و تنها تحت اعمال تغییر دما بود که با استفاده از تعریف، تنها یک پارامتر مشخصه صورت گرفت. معادلات، روش المان محدود و کد نوشته شده با مقایسه منحنی پارامتر مشخصه صفحه فازی A-M، ضخامت، انرژی و سرعت انتشار آن با کارهای پیشین صحت‌سنجی گردید. مسئله انتشار صفحه مشترک فازی شبیه‌سازی گردید و مراحل تشکیل و سپس حرکت این صفحه بررسی شد. همچنین، پروفیل فاز و انرژی سیستم و چگونگی تغییرات آنها ارائه گردید. در ادامه، نمونه‌ای از مسئله اساسی جوازنی مارتنزیت و رشد ساختارهای مارتنزیتی تحت برودت تحلیل شد. دمای آستانه رشد جواز به دست آمد و تحول نانو ساختار تا رسیدن سیستم به تعادل ارائه گردید. در پایان، نمونه‌ای از مسئله استحاله معکوس تحت حرارت نیز ارائه گردید و دمای آستانه استحاله معکوس استخراج شد. کار حاضر ابزاری مناسب برای تحلیل پدیده استحاله فازی در ابعاد نانو به دست می‌دهد که می‌توان بر پایه آن مسائل پیچیده‌تر در این زمینه نظیر استحاله با در نظر گرفتن نقش انرژی الاستیک بر استحاله، شرایط اولیه، مرزی و بارگذاری‌های پیچیده، انرژی سطحی متغیر، کرنش‌های حرارتی و پلاستیک و غیره را شبیه‌سازی نمود و ابزار مناسبی برای پیش‌بینی نانو ساختارهای مارتنزیتی ارائه کرد.

تشکر و قدردانی: بدین وسیله از همکاری دانشگاه صنعتی اصفهان در آماده‌سازی این پژوهش قدردانی می‌گردد.

تأییدیه اخلاقی: این مقاله تاکنون در نشریه دیگری (به طور کامل یا بخشی از آن) به چاپ نرسیده است. همچنین، برای بررسی یا چاپ به نشریه دیگری ارسال نشده است. ضمناً محتویات علمی مقاله حاصل فعالیت نویسندگان بوده و صحت و اعتبار نتایج بر عهده نویسندگان است.

تعارض منافع: مقاله حاضر هیچ‌گونه تعارض منافعی با سازمان‌ها یا اشخاص دیگر ندارد.

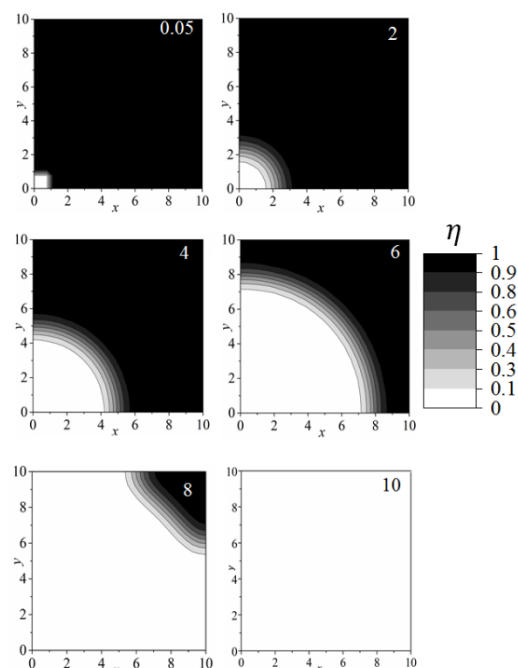
سهم نویسندگان: سام میرزاخانی (نویسنده اول)، روش‌شناس/پژوهشگر اصلی (۵۰٪)؛ مهدی جوان‌بخت (نویسنده دوم)، نگارنده مقدمه/روش‌شناس/پژوهشگر اصلی/نگارنده بحث (۵۰٪)

منابع مالی: منابع مالی این پژوهش از پژوهانه دکتر مهدی جوان‌بخت تأمین شده است.

۵- فهرست علائم

مساحت المان	
پارامتر انرژی فازی ($\text{Nm}^{-2} \text{K}^{-1}$)	A_0
ماتریس کرنش تغییر مکان	B
بردار شرایط مرزی	b
ماتریس ضریب سینتیک میدان فاز	C
انرژی صفحه مشترک فازی بر واحد سطح (Nm)	E
بردار نیرویی (N)	F

استحاله معکوس یا تبدیل مارتنزیت به آستنیت و شرایط رخداد آن از مسائل مهم در مهندسی مواد به شمار می‌رود. در اینجا با استفاده از معادلات و فرآیند عددی تولید شده نمونه‌ای از این تبدیل فاز در ابعاد نانو شبیه‌سازی می‌گردد. بدین منظور نمونه هندسی مشابه با مسئله رشد جواز مارتنزیتی در بخش ۳-۳ در نظر گرفته شده است. این بار، تمامی نمونه به صورت بستر مارتنزیت اولیه لحاظ می‌گردد ($\eta = 1$) به جز بخش مربعی 2×2 در وسط که آستنیت در نظر گرفته شده است ($\eta = 0$). به دلیل تقارن، مدل یک‌چهارم نمونه شبیه‌سازی شده و ارائه شده است. برای رشد آستنیت و رویداد استحاله معکوس، نیروی محرکه حرارتی بایستی افزایش یابد و لذا دما باید افزایش داده شود تا شرایط برای رشد فاز آستنیت فراهم آید. برای یافتن کمینه دمایی این رخداد به تدریج دمای سیستم را به صورت پله‌ای و در هر مرحله 25K افزایش داده یا به بیان دیگر نیروی محرکه بی‌بعد برودتی در هر مرحله $\Delta \bar{\theta} \approx 0.12$ کاهش می‌یابد و مسئله حل مجدد می‌شود تا کمترین دمایی که در آن آستنیت رشد می‌نماید به دست آید. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که تا $\bar{\theta} = -0.63$ رشدی صورت نمی‌گیرد و آستنیت به دلیل کافی نبودن دما از بین می‌رود و به مارتنزیت تبدیل می‌گردد. در ادامه با افزایش دما و به عبارتی کاهش نیروی محرکه برودتی به $\bar{\theta} = -0.75$ منطقه آستنیت با حرکت صفحه مشترک فازی رشد کرده و با گذشت زمان سرتاسر نمونه به آستنیت تبدیل می‌گردد. شکل ۷ استحاله معکوس در این دما در زمان‌های مختلف را تا اینکه تمامی نمونه به آستنیت تبدیل گردد، نشان می‌دهد. محاسبات نشان می‌دهد پس از رشد اولیه آستنیت سرعت رشد آن و صفحه مشترک فازی ثابت می‌ماند که این به دلیل نبود تنش ناهمگن و نیز وجود شرایط مرزی ایزوله برای میدان فاز که به معنی عدم تغییر انرژی سطحی در مرزهاست می‌باشد. صفحه مشترک فازی نیز به صورت دایره‌وار حرکت می‌نماید و در ادامه جهت انحنای آن معکوس می‌گردد که ناشی از اعمال شرط مرزی ایزوله بر مرزها، یعنی عمودماندن صفحه مشترک بر مرز می‌باشد.



شکل ۷) استحاله معکوس در $\bar{\theta} = -0.75$ در زمان‌های مختلف تا اینکه تمامی نمونه به آستنیت تبدیل گردد

strain formulation. Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 2016;91:94-125.

7- Finel A, Le Bouar Y, Gaubert A, Salman U. Phase field methods: microstructures, mechanical properties and complexity. Comptes Rendus Physique. 2010;11(3-4):245-256.

8- Levitas VI, Preston DL, Lee DW. Three-dimensional Landau theory for multivariant stress-induced martensitic phase transformations. III. Alternative potentials, critical nuclei, kink solutions, and dislocation theory. Physical Review B. 2003;68(134201):1-24.

9- Levitas VI, Idesman AV, Preston DL. Microscale simulation of martensitic microstructure evolution. Physical Review Letters. 2004;93(10):105701.

10- Wang Y, Khachaturyan AG. Multi-scale phase field approach to martensitic transformations. Materials Science and Engineering: A. 2006;438:55-63.

11- Zhang W, Jin YM, Khachaturyan AG. Phase field microelasticity modeling of heterogeneous nucleation and growth in martensitic alloys. Acta Materialia. 2007;55(2):565-574.

12- Levitas VI, Javanbakht M. Phase-field approach to martensitic phase transformations: effect of martensite-martensite interface energy. International Journal of Materials Research. 2011;102(2):652-665.

13- Levitas VI, Lee DW, Preston DL. Interface propagation and microstructure evolution in phase field models of stress-induced martensitic phase transformations. International Journal of Plasticity. 2010;26(3):395-422.

14- Seol DJ, Hu SY, Li YL, Chen LQ, Oh KH. Computer simulation of martensitic transformation in constrained films. Materials Science Forum. 2002;408(2):1645-1650.

15- Levitas VI, Idesman AV, Stein E. Finite element simulation of martensitic phase transitions in elastoplastic materials. International Journal of Solids and Structures. 1998;35(9-10):855-887.

16- Saxena A, Wu Y, Lookman T, Shenoy SR, Bishop AR. Hierarchical pattern formation in elastic materials. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 1997;239(1-3):18-34.

17- Wang Y, Khachaturyan AG. Three-dimensional field model and computer simulation of martensitic transformation. Acta Materialia. 1997;45(2):759-773.

18- Levitas VI. Phase-field theory for martensitic phase transformations at large strains. International Journal of Plasticity. 2013;49:85-118.

19- Levitas VI, Levin VA, Zingerman KM, Freiman EI. Displacive phase transitions at large strains: phase-field theory and simulations. Physical Review Letters. 2009;103(2):025702

20- Chen LQ, Shen J. Applications of semi-implicit Fourier spectral method to phase field equations. Computer Physics Communications. 1998;108(2-3):147-158.

21- Yamanaka A, Takaki T, Tomita Y. Elastoplastic phase-field simulation of self- and plastic accommodations in martensitic transformation. Materials Science and Engineering: A. 2008;491(1-2):378-384.

22- Mahapatra DR, Melnik RVN. Finite element analysis of phase transformation dynamics in shape memory alloys with a consistent Landau-Ginzburg free energy model. Mechanics of Advanced Materials and Structures. 2006;13(6):443-455.

23- Cho JY, Idesman AV, Levitas VI, Park T. Finite element simulations of dynamics of multivariant martensitic

بردار گلرکین	G
ماتریس سختی معادل میدان فاز	K
بردار یکه عمود بر سطح (m)	k
ماتریس توابع شکل	N
تعداد المان بر طول صفحه مشترک	$\bar{N}$
بردار باقی‌مانده	R
سرعت انتشار صفحه مشترک فازی (ms^{-1})	v
مختصه مکان عمود بر امتداد	y
علامه یونانی	
ضریب خانواده آلفا	α
ضریب انرژی گرادیان مربوط به استحاله فازی (N)	β
ماتریس ضرایب انرژی گرادیان	$\bar{\beta}$
زاویه بردار یکه عمود بر سطح	γ
مرز المان	Γ
پارامتر مشخصه	η
انرژی آزاد هلمهولتز بر واحد حجم (Nm^{-2})	ψ
انرژی حرارتی مربوط به استحاله بر واحد حجم (Nm^{-2})	ψ^{θ}
انرژی کریستالین بر واحد حجم (Nm^{-2})	ψ^c
انرژی‌های گرادیان مربوط به استحاله مارتنزیتی بر واحد حجم (Nm^{-2})	ψ^v
انرژی بالک فاز بر واحد حجم (Nm^{-2})	ψ_b
دما (K)	θ
دمای بحرانی ناپایداری فاز آستنیت (K)	θ_c
دمای تعادل (K)	θ_e
ضریب سینتیک استحاله ($\text{N}^{-1}\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)	λ
عملگر گرادیان (m^{-1})	∇
بالانویس‌ها	
کریستالین	c
المان	e
مرحله تکرار نیوتن-رافسون	r
زمان	t
ترانهاد	T
دما	θ
گرادیان	∇
زیرنویس‌ها	
انرژی بالک	b
بخش خطی	phf – linear
بخش غیرخطی	phf – nonlinear
مماسی (شیب)	T
تعداد نودهای المان	nd

منابع

- Levitas VI, Idesman AV, Olson GB. Continuum modeling of strain-induced martensitic transformation at shear-band intersections. Acta Materialia. 1998;47(1):219-233.
- Fischer FD, Reisner G, Werner E, Tanaka K, Cailletaud G, Antretter T. A new view on transformation induced plasticity (TRIP). International Journal of Plasticity. 2000;16(7-8):723-748.
- Olson GB, Hartman H. Martensite and life: displacive transformations as biological processes. Le Journal de Physique Colloques. 1982;43(C4):PC4855-65.
- Levitas VI, Idesman AV, Olson GB, Stein OE. Numerical modelling of martensitic growth in an elastoplastic material. Philosophical Magazine A. 2002;82(3):429-462.
- Bil C, Massey K, Abdullah EJ. Wing morphing control with shape memory alloy actuators. Journal of Intelligent Material Systems and Structures. 2013;24(7):879-898.
- Levitas VI, Warren JA. Phase field approach with anisotropic interface energy and interface stresses: large

- 29- Levitas VI, Warren JA. Thermodynamically consistent phase field theory of phase transformations with anisotropic interface energies and stresses. *Physical Review B*. 2015;92(14):144106.
- 30- Levitas VI. Phase field approach to martensitic phase transformations with large strains and interface stresses. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2014;70:154-189.
- 31- Javanbakht M, Barati E. Martensitic phase transformations in shape memory alloy: phase field modeling with surface tension effect. *Computational Materials Science*. 2016;115:137-144.
- 32- Christian JW, Mahajan S. Deformation twinning. *Progress in Materials Science*. 1995;39(1-2):1-157.
- 33- Levitas VI, Javanbakht M. Phase transformations in nanograin materials under high pressure and plastic shear: nanoscale mechanisms. *Nanoscale*. 2014;6(1):162-166.
- 34- Wang YU, Jin YM, Cuitino AM, Khachaturyan AG. Application of phase field microelasticity theory of phase transformations to dislocation dynamics: model and three-dimensional simulations in a single crystal. *Philosophical Magazine Letters*. 2001;81(6):385-393.
- phase transitions based on Ginzburg-Landau theory. *International Journal of Solids and Structures*. 2012;49(14):1973-1992.
- 24- Levitas VI, Ozsoy IB. Micromechanical modeling of stress-induced phase transformations. Part 1. Thermodynamics and kinetics of coupled interface propagation and reorientation. *International Journal of Plasticity*. 2009;25(2):239-280.
- 25- Levitas VI, Ozsoy IB. Micromechanical modeling of stress-induced phase transformations. Part 2. Computational algorithms and examples. *International Journal of Plasticity*. 2009;25(3):546-583.
- 26- Levitas VI, Javanbakht M. Surface tension and energy in multivariant martensitic transformations: phase-field theory, simulations, and model of coherent interface. *Physical Review Letters*. 2010;105(16):165701.
- 27- Saitoh KI, Liu WK. Molecular dynamics study of surface effect on martensitic cubic-to-tetragonal transformation in Ni-Al alloy. *Computational Materials Science*. 2009;46(2):531-544.
- 28- Levitas VI. Phase-field theory for martensitic phase transformations at large strains. *International Journal of Plasticity*. 2013;49:85-118.