

## Research Paper

# Numerical modeling of dissolution process of spherical precipitates in alloys by differential quadrature method (DQM)

Nozar Anjabin<sup>1</sup>

1-Department of materials science and engineering, Shiraz university, Shiraz, Iran

**Received:** 2021/06/15

**Revised:**

**Accepted:** 2021/06/20

Use your device to scan and read the article  
online



DOI: [10.30495/JNM.2021.4680](https://doi.org/10.30495/JNM.2021.4680)

### Keywords:

Numerical modeling, precipitate dissolution, differential quadrature method, front-fixing method, moving boundary problem.

### Abstract

Prediction of the dissolution kinetics of precipitates is important in various metallurgical processes such as welding, homogenization, and preheating of the age hardenable alloys. The problem of spherical particle dissolution is a moving boundary problem, which has no exact solution yet. In the present study, a numerical model based on the differential quadrature method is presented to solve the problem of precipitate dissolution with spherical geometry in a matrix with finite dimensions. In the proposed model, the dissolution kinetics is expressed as a function of the volume fraction of the precipitate, the concentration of the alloying element in the matrix, and precipitate, equilibrium concentration at the precipitate /matrix interface, and the annealing temperature. The convergence of the presented numerical model in solving the dissolution problem is evaluated by examining the effect of time step size and number of grid points on the numerical solution results. The accuracy of the proposed model is also evaluated by comparing the model results with the results of an approximate analytical model as well as experimental data. The results show that the proposed model converges even with a low number of grid points and is in good agreement with the experimental data related to the dissolution of spherical precipitates during isothermal annealing treatment.

**Citation:** Nozar Anjabin. Numerical modeling of dissolution process of spherical precipitates in alloys by differential quadrature method (DQM). Journal of New Materials. 2021; 11 (43):82-94

**Corresponding author:** Nozar Anjabin

**Address:** Department of materials science and engineering, School of engineering, Shiraz university, Shiraz, Iran.

**Tell:**

**Email:** Anjabin@shirazu.ac.ir

## Extended Abstract

### 1. Introduction

Secondary phase precipitates are present in the microstructure of many engineering alloys. It is well known that size, shape, volume fraction, and spatial distribution of the precipitates have a great influence on the mechanical behavior and corrosion resistance of these alloys. The components made from age hardenable alloys are subjected to different thermal cycles during the production processes, which affect the precipitated particles via the precipitation, coarsening or dissolution processes [1]. The process of precipitation/dissolution of secondary phases in alloys is a diffusion-control problem with moving boundaries (Stefan problem) [2], in which to find the distribution of solute atoms in the alloy matrix, the partial diffusion equation (Fick's second law) must be solved in a domain with moving borders.

In the present study, for the first time, the differential quadrature method (DQM) has been applied to solve the problem of spherical precipitate dissolution in an alloy matrix with finite dimensions.

### 2. Numerical modeling

The problem of spherical precipitates dissolution, can be considered as a sum of two events, diffusion of the alloying element from the particle/matrix interface into the surrounding matrix and the migration of the particle/matrix boundary, which are governed by the following differential equations [2]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{2D}{r} \frac{\partial C}{\partial r} + D \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} \quad \rho(t) < r < R \quad (1)$$

$$(C_p - C_{int}) \frac{\partial \rho}{\partial t} = D \left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_{r = \rho(t)} \quad (2)$$

where  $C$ ,  $C_p$  and  $C_{int}$  are the concentration of the alloying element in the matrix, precipitate, and particle/matrix interface respectively.  $D$  is the diffusion coefficient of the alloying element in the matrix,  $\rho$  is the radius of the dissolving precipitate and  $R$  is the radius of the surrounding matrix. To solve the dissolution problem, Eqs (1) and (2) with the following boundary and initial conditions are considered:

$$C(r, 0) = C_0 \quad \rho(t) \leq r < R \quad (3)$$

$$C(\rho(t), t) = C_{int} \quad t > 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial C}{\partial r}(R, t) = 0 \quad t > 0 \quad (5)$$

The above set of equations are reformulated using a new spatial coordinate,  $\xi$  to fix the position of the particle/matrix interface,

$$\xi = \frac{r - \rho(t)}{R - \rho(t)} \quad (6)$$

The equations in the new coordinates with the corresponding boundary and initial conditions are discretized using the DQM [3] in the spatial domain. To do so, a Lagrange interpolation polynomial is used along with the Chebyshev–Gauss–Lobatto grid points distribution. Also, a fully implicit finite difference method is used to discretize the equations in the time domain. Finally, the obtained non-linear system of algebraic equations is solved using the simple iteration method.

### 3. Results and discussion

In order to evaluate the convergence and accuracy of the proposed method, first the independence of numerical solution from the number of grid points and the time step size are examined. Then, the predictions of the presented model are validated with the results of an approximate analytical model and laboratory data. The mesh independent results are achieved at grid points number

of  $N = 10$ , and time step size of  $\Delta t = 10^{-2}$  s. Also, the convergence of the proposed method can be clearly seen by increasing the number of grid points from 5 to 10, and time step size from 0.5 s to  $10^{-2}$  s. The variation of precipitate size and distribution of the alloying element in the matrix surrounding the precipitate, during the dissolution process are predicted using the numerical model, and the results are compared with the Whelan analytical model [4]. It is found that, in the early stages of the dissolution process there is a very good agreement between the results of both models, which indicates the accuracy of the proposed model. However, at longer times the dissolution rate predicted by the Whelan model is higher than that of the numerical model. This can be explained by considering the dependence of the dissolution rate on the difference between the alloying element concentration in the matrix and the equilibrium concentration of the particle/matrix interface. Since in the Whelan model, the dissolution of spherical precipitates in an infinite matrix is considered, this concentration difference is assumed to be constant. While in the numerical model, finite matrix is considered, which results in increasing the mean concentration of the matrix, and reduction of the concentration difference between the matrix and the particle/matrix boundary. Therefore, the dissolution rate predicted by the presented numerical model is less than the dissolution rate obtained from the Whelan model.

Finally, the experimentally measured volume fraction changes of silicon particles in Al-0.8 wt% Si alloy during annealing at 530°C [5] is compared with the results of the proposed numerical

model and the analytical model. As can be seen, the results of the proposed model are more consistent with laboratory data, which indicates a higher accuracy of the numerical model in predicting the dissolution kinetics of spherical precipitates.

#### 4. Conclusion

Mathematical modeling of the dissolution process of precipitates in a metal matrix, requires solving the Fick's partial differential equation with moving boundaries. In the present study, using the front fixing method, the solution domain with moving boundaries is transformed into a new domain with fixed boundaries. Then, the governing equations are solved by combining the differential quadrature method and the Euler implicit method. The proposed model was used to predict the particle dissolution kinetics in the Al-0.8% Si alloy. The results obtained from the calculations show that the presented numerical model converges with a low number of grid points and is in good agreement with the experimental data. Also, there is a good consistency between the results of the numerical model with the approximate analytical solution in the early times of the dissolution process.

#### References

- [1] D. Bratland, Ø. Grong, H. Shercliff, O. Myhr, and S. Tjøtta, *Acta Materialia*, vol. 45, no. 1, pp. 1-22, 1997.
- [2] F. Vermolen and K. Vuik, *Journal of computational and applied mathematics*, vol. 93, no. 2, pp. 123-143, 1998.
- [3] C. Shu, *Differential quadrature and its application in engineering*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [4] M. Whelan, *Metal Science Journal*, vol. 3, no. 1, pp. 95-97, 1969.
- [5] U. H. Tundal and N. Ryum, *Metallurgical Transactions A*, vol. 23, no. 2, pp. 445-449, 1992.

## مقاله پژوهشی

## مدلسازی عددی فرآیند انحلال رسوبات کروی در آلیاژها با روش دیفرانسیل کوادریچر (DQM)

نوذر انجبین<sup>\*۱</sup>

۱- بخش مهندسی مواد، دانشکده مهندسی، دانشگاه شیراز، شیراز، ایران

## چکیده

پیش بینی سینتیک انحلال رسوب در فرایندهای متالورژیکی مختلف نظیر جوشکاری، عملیات همگن سازی و پیشگرم کردن آلیاژهای رسوب سخت شونده حائز اهمیت است. مسئله انحلال رسوب کروی در زمره مسائل با مرزهای متحرک است و تابحال حل تحلیلی دقیق برای آن ارایه نشده است. در تحقیق پیش رو یک مدل عددی بر مبنای روش دیفرانسیل کوادریچر برای حل مسئله انحلال رسوب با هندسه کروی در زمینه ای با ابعاد متناهی ارایه شده است. در مدل پیشنهاد شده سینتیک انحلال بصورت تابعی از کسر حجمی رسوب، غلظت عنصر آلیاژی در زمینه و رسوب، غلظت تعادلی در فصل مشترک رسوب/زمینه و نیز دمای عملیات آنیل بیان شده است. همگرایی مدل عددی ارایه شده در حل مسئله انحلال از طریق بررسی اثر اندازه گام زمانی و تعداد نقاط شبکه بر نتایج حل عددی، مورد ارزیابی قرار گرفته است. همچنین دقت مدل پیشنهادی از طریق مقایسه نتایج مدل با نتایج یک مدل تحلیلی تقریبی و نیز داده های آزمایشگاهی مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج بدست آمده نشان می دهد که مدل عددی ارایه شده حتی با تعداد نقاط شبکه کم، نیز همگرا بوده و انطباق خوبی با داده های آزمایشگاهی مربوط به انحلال رسوب کروی حین عملیات آنیل هم دما دارد.

تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۰۱/۲۷

تاریخ داوری:

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۳/۳۰

از دستگاه خود برای اسکن و خواندن مقاله به صورت آنلاین استفاده کنید



DOI:10.30495/JNM.2021.4680

## واژه‌های کلیدی:

مدلسازی عددی، انحلال رسوب، روش دیفرانسیل کوادریچر، روش جبهه ثابت، مسئله با مرز متحرک

\* نویسنده مسئول: نوذر انجبین

نشانی: بخش مهندسی مواد، دانشکده مهندسی، دانشگاه شیراز، شیراز، ایران

تلفن:

پست الکترونیکی: Anjabin@shirazu.ac.ir

## ۱- پیشگفتار

رسوبات فاز ثانویه در ریزساختار بسیاری از آلیاژهای مهندسی حضور دارند. مشخصات این رسوبات شامل اندازه، کسر حجمی، شکل هندسی و نحوه توزیع در زمینه اثر قابل توجهی بر خواص این آلیاژها از جمله استحکام، رفتار کارسختی و مقاومت به خوردگی دارد [۱-۵]. قطعات ساخته شده از این آلیاژها حین فرایند های تولید تحت سیکل های حرارتی مختلفی قرار می گیرند که مشخصات رسوبات را طی فرایندهای رسوبگذاری، درشت شدن و یا انحلال تحت تاثیر قرار می دهد [۶-۹]. لذا دستیابی به یک توصیف کمی از وابستگی مشخصات رسوبات به پارامترهای سیکل های حرارتی بسیار حائز اهمیت است.

فرایند های رسوبگذاری و انحلال فاز ثانویه در آلیاژها در زمره مسائل نفوذ-کنترل با مرزهای متحرک (مسئله استفان) قرار دارد [۱۰]، که در آن برای یافتن توزیع اتم های محلول در زمینه آلیاژ بایستی معادله دیفرانسیل جزئی نفوذ (قانون دوم فیک) در دامنه ای با مرزهای متحرک حل شود. در واقع در این مسائل همزمان با حل معادله دیفرانسیل حاکم بایستی مکان مرز بین زمینه و رسوب به صورت تابعی از زمان نیز تعیین شوند، این امر باعث می شود تا آنالیز این دسته از مسائل بسیار پیچیده شود.

در آلیاژهای رسوب سخت شونده مسئله انحلال رسوبات در فرایندهای مختلفی نظیر عملیات همگن سازی ساختارهای ریختگی [۱۱]، جوشکاری [۱۲]، عملیات حرارتی محلول سازی برای ایجاد یک ساختار مناسب برای فرایندهای شکل دهی بعدی [۱۳] و یا رسوبگذاری کنترل شده طی عملیات پیر سازی بعدی [۱۴]، مطرح است. تاکنون در مطالعات زیادی به پیش بینی سینتیک انحلال رسوبات پرداخته شده است. با این وجود حل تحلیلی دقیقی برای انحلال رسوبات کروی ارایه نشده است. در میان مدل های تحلیلی موجود، مدل ویلن که در سال ۱۹۶۹ برای محاسبه نرخ انحلال رسوب کروی در زمینه ای با ابعاد نامحدود ارایه شده است، بیشتر مورد توجه قرار گرفته است [۱۵، ۱۶]. اولین بار تانزلی و هکل [۱۷، ۱۸] یک مدل عددی بر مبنای روش تفاضل محدود برای مدلسازی انحلال رسوبات در زمینه ای با ابعاد محدود ارایه کرده اند. توندال و ریوم [۱۹] یک مدل حجم محدود برای انحلال رسوبات ارایه کرده اند که قابلیت در نظر گرفتن اثر توزیع اندازه ذرات بر سینتیک انحلال را دارا می باشد. ورمولن و همکاران [۱۰] با استفاده از یک شبکه متحرک و روش حل عددی تفاضل محدود یک مدل ریاضی برای حل مسئله انحلال رسوب در سیستم های سه جزئی ارایه کرده اند. در این

روش، در هر گام زمانی ابتدا توزیع غلظت عناصر آلیاژی در زمینه اطراف رسوب با حل قانون دوم فیک تعیین و سپس با استفاده از نتایج آن موقعیت جدید فصل مشترک تعیین می شود. در ادامه زمینه مجدداً شبکه بندی می شود و توزیع غلظت در شبکه جدید با استفاده از توزیع غلظت در شبکه قبلی تخمین زده می شود و این روند ادامه می یابد. زو و همکاران [۲۰] با استفاده از تلفیق تئوری جانسون- مهل- اورامی (JMA) و مدل ویلن یک رابطه ریاضی برای محاسبه کسر حجمی رسوبات کروی حین فرایند انحلال هم دما ارایه کرده اند. علاوه بر روش های فوق از مدل میدان فاز نیز برای پیش بینی سینتیک انحلال رسوبات در سیستم های آلیاژی مختلف استفاده شده است [۲۱-۲۳]. این روش بر مبنای حل عددی معادلات انرژی در شبکه ثابت است.

در پژوهش پیش رو برای اولین بار از روش دیفرانسیل کوادریچر برای حل مسئله انحلال رسوب کروی در زمینه ای با ابعاد متناهی استفاده شده است. روش دیفرانسیل کوادریچر یک روش عددی برای حل معادلات دیفرانسیل است که در آن ترم های مشتق در معادلات حاکم با مجموع وزن دار مقدار تابع در تمام نقاط شبکه تقریب زده می شود [۲۴]. در این روش در مقایسه با سایر روش های عددی رایج از جمله روش های المان محدود، تفاضل محدود و حجم محدود، به تعداد نقاط (گره) کمتری برای گسسته سازی شبکه نیاز است، که این امر باعث کاهش چشمگیر هزینه محاسباتی در حل مسائل می گردد [۲۵]. تا بحال از روش دیفرانسیل کوادریچر برای حل معادلات حاکم در بسیاری از مسائل مهندسی نظیر انتقال جرم [۲۵، ۲۶]، انتقال حرارت [۲۵، ۲۷] و مسائل سازه ای و ارتعاشات [۲۴، ۲۸، ۲۹] استفاده شده است. در مطالعه پیش رو با تلفیق روش دیفرانسیل کوادریچر با روش جبهه ثابت که یکی از روش های ارایه شده برای حل مسائل با مرزهای متحرک است، معادلات دیفرانسیل حاکم بر مسئله انحلال به دو معادله جبری کوپل و غیر خطی تبدیل شد و با استفاده از روش های تکراری بطور همزمان حل گردید.

## ۲- مدلسازی فرایند انحلال

### ۲-۱- فرمولاسیون

با فرض اینکه فرایند انحلال رسوب با نفوذ عنصر آلیاژی در زمینه کنترل می شود، می توان این فرایند را بصورت مجموع دو رویداد، شامل نفوذ عنصر آلیاژی از سمت فصل مشترک به زمینه اطراف رسوب و مهاجرت فصل مشترک در نظر گرفت. نفوذ اتم حل شده در زمینه با معادله دوم

$$C(r, 0) = C_0 \quad \rho(t) \leq r < R \quad (5)$$

$$C(\rho(t), t) = C_{int} \quad t > 0 \quad (6)$$

$$\frac{\partial C}{\partial r}(R, t) = 0 \quad t > 0 \quad (7)$$

در این تحقیق از روش جبهه ثابت همراه با روش عددی دیفرانسیل کوادریچر برای حل مسئله فوق استفاده می شود. در این روش یک مختصات مکانی جدید به نحوی تعریف می شود که موقعیت فصل مشترک نسبت به آن مختصات ثابت باشد.

$$\xi = \frac{r - \rho(t)}{R - \rho(t)} \quad (8)$$

در دستگاه مختصات جدید دامنه نفوذ از  $\rho(t) \leq r \leq R$  به  $0 \leq \xi \leq 1$  تغییر می یابد، بطوریکه مکان فصل مشترک همواره با  $\xi = 0$  تعیین می شود. با استفاده از متغیر جدید ( $\xi$ ) و قاعده مشتق زنجیری معادلات ۱ و ۳ بصورت زیر قابل بازنویسی است:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \left( \frac{2D}{\xi(R - \rho(t)) + \rho(t)R - \rho(t)} \frac{1}{R - \rho(t)} - \frac{d\rho(t)}{dt} \frac{\xi - 1}{R - \rho(t)} \right) \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} + \frac{D}{(R - \rho(t))^2} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial \xi^2} \quad (9)$$

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \frac{D}{C_p - C_{int}} \frac{1}{R - \rho(t)} \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=0} = 0 \quad (10)$$

همچنین شرایط مرزی و اولیه در مختصات جدید بصورت زیر خواهد بود:

$$\bar{C}(\xi, 0) = C_0 \quad 0 < \xi < 1 \quad (11)$$

$$\bar{C}(0, t) = C_{int} \quad t > 0 \quad (12)$$

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi}(1, t) = 0 \quad t > 0 \quad (13)$$

برای گسسته سازی معادلات ۹ و ۱۰ با شرایط مرزی و اولیه فوق در حوزه مکان، از روش دیفرانسیل کوادریچر استفاده شده است. در این روش از یک چندجمله ای برای تقریب حل مسئله استفاده می شود. نحوه این تقریب و مشتقات آن در یک نقطه مشخص از شبکه به صورت زیر است [۲۴، ۳۰]:

$$\bar{C}_i = \sum_{j=1}^N A_{ij} \bar{C}_j \quad (14)$$

فیک قابل بررسی است. این معادله برای یک هندسه با تقارن کروی، بصورت زیر نوشته می شود [۱۰].

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{2D}{r} \frac{\partial C}{\partial r} + D \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} \quad \rho(t) < r < R \quad (1)$$

در این رابطه  $C$  غلظت عنصر آلیاژی،  $D$  ضریب نفوذ عنصر آلیاژی در زمینه،  $\rho$  شعاع رسوب در حال انحلال و  $R$  شعاع زمینه اطراف رسوب می باشد. با توجه به متغیر بودن مکان مرز رسوب/زمینه ( $\rho$ ) با زمان برای حل معادله فوق نیاز به تعیین مکان فصل مشترک است، از این رو یک مسئله با مرز متحرک نامیده می شود. ضریب نفوذ عنصر آلیاژی مطابق رابطه زیر به دما مرتبط می شود:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{Q_d}{R_g T}\right) \quad (2)$$

در این رابطه  $D_0$  یک ضریب ثابت،  $Q_d$  انرژی فعالسازی برای نفوذ،  $R_g$  ثابت جهانی گازها و  $T$  درجه حرارت در مقیاس کلون است. مطابق قانون بقای جرم، شار اتم حل شده در فصل مشترک رسوب/زمینه، با اختلاف غلظت در دو سمت مرز و سرعت فصل مشترک متناسب است [۱۰]. به عبارت دیگر:

$$(C_p - C_{int}) \frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial C}{\partial r} \Big|_{r = \rho(t)} \quad (3)$$

در این رابطه  $C_p$  غلظت عنصر آلیاژی در رسوب و  $C_{int}$  غلظت تعادلی در فصل مشترک رسوب/زمینه است. برای مدل سازی فرایند انحلال رسوب بایستی معادلات (۱) و (۳) بطور همزمان حل شوند.

## ۲-۲- حل عددی

در اینجا برای حل مسئله انحلال فرض می شود که ذرات کروی توزیع یکنواختی در زمینه دارند. همچنین دامنه نفوذ هر ذره محدود بوده و با انحلال رسوبات غلظت متوسط زمینه تحت تاثیر قرار می گیرد. برای این منظور یک رسوب کروی با شعاع  $\rho_0$  که توسط زمینه فلزی با شعاع  $R$  احاطه شده است، مطابق شکل ۱ مورد بررسی قرار گرفته است. شعاع زمینه اطراف رسوب مطابق رابطه زیر به کسر حجمی ( $f_0$ ) و شعاع رسوب در شروع فرایند انحلال مرتبط می شود:

$$R = \frac{\rho_0}{f_0^{1/3}} \quad (4)$$

لذا برای حل مسئله انحلال معادلات (۱) و (۳) همراه با شروط مرزی و اولیه زیر در نظر گرفته شده است:

همچنین شرایط مرزی و اولیه به صورت زیر خواهد بود:

$$\bar{C}(\xi_i, 0) = C_0 \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (24)$$

$$\bar{C}(\xi_1, t) = C_{int} \quad t > 0 \quad (25)$$

$$\sum_{j=1}^N A_{Nj}^{(1)} \bar{C}_j = 0 \quad t > 0 \quad (26)$$

برای حل دستگاه معادلات ۲۲ و ۲۳ ابتدا از روش تفاضل محدود کاملاً ضمنی برای گسسته سازی معادلات در حوزه زمان استفاده شد، سپس به دلیل غیر خطی بودن دستگاه معادلات حاصل با استفاده از روش تکرار ساده توزیع غلظت و مکان فصل مشترک در هر گام زمانی محاسبه گردید.

$$\frac{\bar{C}^{(m+1)}(\xi_i, t_{n+1}) - \bar{C}(\xi_i, t_n)}{\Delta t} = \left\{ \frac{2D}{\xi_i (R - \rho^{(m)}(t_{n+1})) + \rho^{(m)}(t_{n+1}) R - \rho^{(m)}(t_{n+1})} \frac{1}{R - \rho^{(m)}(t_{n+1})} - \frac{D(\xi_i - 1)}{C_p - C_i} \left( \frac{1}{R - \rho^{(m)}(t_{n+1})} \right)^2 \sum_{j=1}^N A_{1j}^{(1)} \bar{C}^{(m)}(\xi_j, t_{n+1}) \right\} \times \sum_{j=1}^N A_{ij}^{(1)} \bar{C}^{(m+1)}(\xi_j, t_{n+1}) + \frac{D}{(R - \rho^{(m)}(t_{n+1}))^2} \times \sum_{j=1}^N A_{ij}^{(2)} \bar{C}^{(m+1)}(\xi_j, t_{n+1}) \quad (27)$$

$$\frac{\rho^{(m+1)}(t_{n+1}) - \rho(t_n)}{\Delta t} = \frac{D}{C_p - C_i} \frac{1}{R - \rho^{(m)}(t_{n+1})} \times \sum_{j=1}^N A_{1j}^{(1)} \bar{C}^{(m+1)}(\xi_j, t_{n+1}) \quad (28)$$

در این روابط بالانویس  $m$  نشان دهنده تعداد مراحل تکرار می باشد، با این شرط که:

$$\bar{C}^{(1)}(\xi_i, t_{n+1}) = \bar{C}(\xi_i, t_n) \quad (29)$$

$$\rho^{(1)}(t_{n+1}) = \rho(t_n) \quad (30)$$

### ۳- نتایج و بحث

برای حل معادلات ارایه شده در روابط ۲۷ و ۲۸ با شرایط مرزی و اولیه آورده شده در روابط ۲۴-۲۶، یک برنامه کامپیوتری با محیط برنامه نویسی MATLAB تهیه شد. برای بررسی همگرایی و دقت روش

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} \Big|_{\xi_i} = \sum_{j=1}^N A_{ij}^{(1)} \bar{C}_j \quad (15)$$

$$\frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial \xi^2} \Big|_{\xi_i} = \sum_{j=1}^N A_{ij}^{(2)} \bar{C}_j \quad (16)$$

در این روابط مقدار چند جمله ای لاگرانژ از درجه  $j$ ام در مکان  $\xi_i$  است،  $A_{ij}^{(1)}$  و  $A_{ij}^{(2)}$  ضرایب وزنی در مکان  $\xi_i$  است و  $N$  تعداد نقاط شبکه می باشد.

$$A_{ij}^{(1)} = \frac{1}{\xi_i - \xi_j} \frac{\prod_{k=1, k \neq i}^N (\xi_i - \xi_k)}{\prod_{k=1, k \neq j}^N (\xi_j - \xi_k)} \quad (17)$$

$$i \neq j, \quad i, j = 1, 2, \dots, N$$

$$A_{ii}^{(1)} = - \sum_{j=1, j \neq i}^N A_{ij}^{(1)} \quad (18)$$

$$A_{ij}^{(2)} = 2A_{ij}^{(1)} (A_{ii}^{(1)} - \frac{1}{\xi_i - \xi_j}) \quad (19)$$

$$i \neq j, \quad i, j = 1, 2, \dots, N$$

$$A_{ii}^{(2)} = - \sum_{j=1, j \neq i}^N A_{ij}^{(2)} \quad (20)$$

برای گسسته سازی دامنه حل از یک شبکه با اندازه مش متغیر استفاده شد. برای این منظور از نقاط چیشف-گوس-لوباتو با مختصات زیر استفاده گردید [۳۰]:

$$\xi_i = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \cos \left[ \frac{(i-1)\pi}{N-1} \right] \right\}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (21)$$

با جایگذاری تقریب های فوق در روابط ۹ و ۱۰، می توان این روابط را برای گره  $i$  ام شبکه به صورت زیر نوشت:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} \Big|_{\xi_i} = \left( \frac{2D}{\xi_i (R - \rho(t)) + \rho(t) R - \rho(t)} \frac{1}{R - \rho(t)} - \frac{d\rho(t)}{dt} \right) \times \left( \frac{\xi_i - 1}{R - \rho(t)} \right) \sum_{j=1}^N A_{ij}^{(1)} \bar{C}_j + \frac{D}{(R - \rho(t))^2} \sum_{j=1}^N A_{ij}^{(2)} \bar{C}_j \quad (22)$$

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \frac{D}{C_p - C_i} \frac{1}{R - \rho(t)} \sum_{j=1}^N A_{1j}^{(1)} \bar{C}_j \quad (23)$$

نقاط شبکه به وضوح مشاهده می شود. لذا در ادامه مقدار  $N = 10$  و  $\Delta t = 10^{-2} s$  در نظر گرفته شد.

### ۳-۲- مقایسه نتایج مدل عددی با مدل تحلیلی ویلن

ویلن یک حل تحلیلی تقریبی برای مسئله انحلال رسوب کرووی با ابعاد محدود در زمینه ای با ابعاد نامحدود ارائه کرده است [۱۵]. در این روش شرایط اولیه و مرزی بصورت زیر در نظر گرفته شده است:

$$C(r, 0) = C_0 \quad \rho < r < \infty \quad (31)$$

$$C(\rho, t) = C_{int} \quad t > 0 \quad (32)$$

$$C(\infty, t) = C_0 \quad t > 0 \quad (33)$$

در این حل با صرفنظر کردن از تغییرات  $\rho(t)$  با زمان، توزیع غلظت اتم حل شده در اطراف رسوب بصورت زیر ارائه شده است:

$$C(r, t) = C_0 + \frac{(C_{int} - C_0)\rho}{r} \times \operatorname{erfc}\left(\frac{r - \rho}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad (34)$$

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-\mu^2} d\mu \quad (35)$$

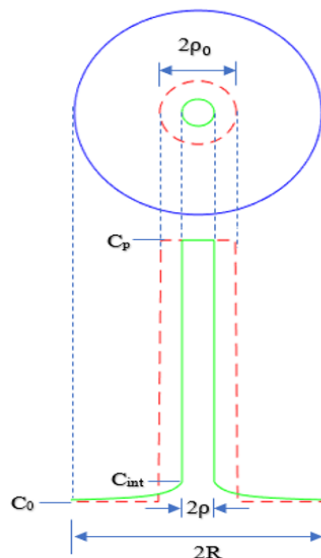
ارایه شده ابتدا استقلال حل عددی از تعداد نقاط شبکه و نیز اندازه گام زمانی مورد بررسی قرار گرفت و در ادامه نتایج مدل ارائه شده با نتایج یک مدل تحلیلی تقریبی و نیز نتایج آزمایشگاهی صحنه سنتزی گردید. ثوابت مورد استفاده در مدلسازی در جدول ۱ آورده شده است. این ثوابت مربوط به انحلال رسوبات کرووی در آلیاژ  $\text{Al-0.8wt \%Si}$  طی عملیات آنیل هم دما در دمای  $530^\circ\text{C}$  می باشد [۳۱].

### ۳-۱- بررسی اثر اندازه گام زمانی و تعداد نقاط شبکه

#### بر نتایج مدل عددی

در شکل ۲ اثر اندازه گام زمانی بر نتایج حاصل از مدل عددی نشان داده شده است. در این حل تعداد نقاط شبکه ثابت و برابر  $N = 100$  در نظر گرفته شده است. همانطوریکه دیده می شود کاهش گام زمانی از  $\Delta t = 0.5 s$  به  $10^{-2} s$  نتایج را تحت تاثیر قرار می دهد، اما با کاهش بیشتر  $\Delta t$  از  $10^{-2} s$  به  $10^{-3} s$  تغییر محسوسی در نتایج حل عددی ایجاد نمی شود.

در شکل ۳ اثر تعداد نقاط شبکه بر نتایج مدل عددی نشان داده شده است. در این حل اندازه گام زمانی ثابت و برابر  $\Delta t = 10^{-2} s$  در نظر گرفته شده است. مطابق این شکل با افزایش تعداد نقاط شبکه از  $N = 10$  به  $N = 100$  تغییر محسوسی در جواب حل عددی ایجاد نمی شود. همچنین همگرایی روش پیشنهادی با افزایش تعداد

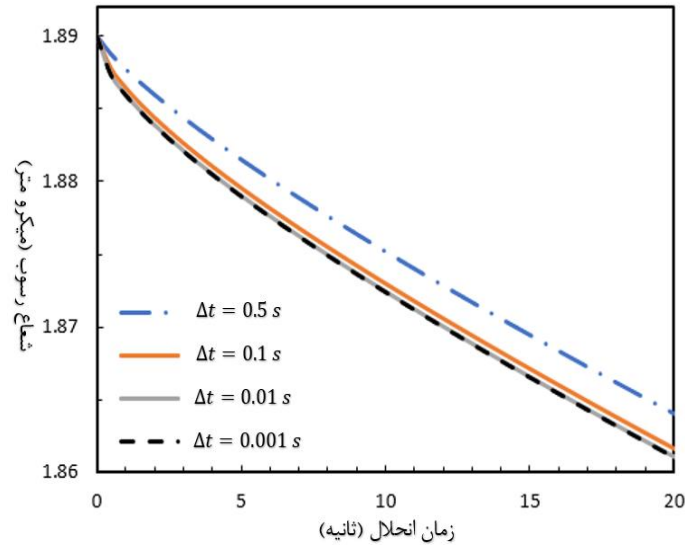


شکل ۱- رسوب کرووی در حال انحلال و زمینه اطراف متأثر از آن، همراه با توزیع غلظت عنصر آلیاژی

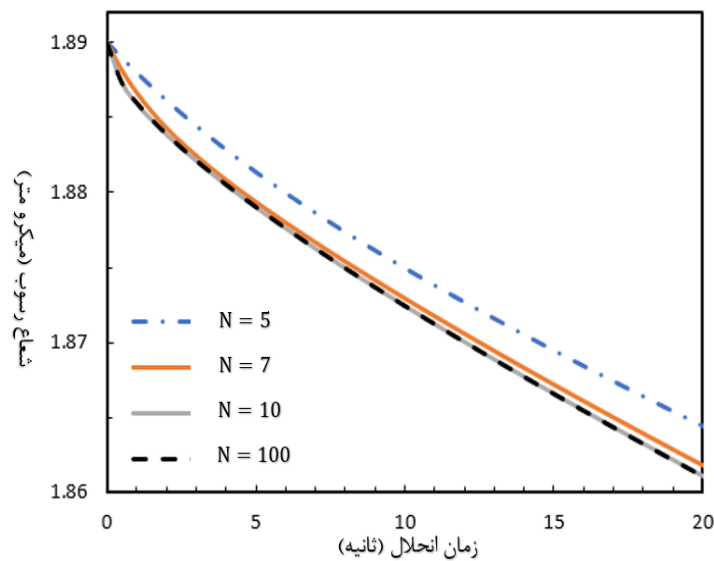


جدول ۱- ثوابت مورد استفاده در مدل [۱۹]

پارامتر	$R (\mu m)$	$\rho_0 (\mu m)$	$C_p (at. \%)$	$C_{int} (at. \%)$
مقدار	12.2	1.89	82.89	1.04
پارامتر	$C_0 (at. \%)$	$D_0 (cm^2/s)$	$Q_0 (kJ/mol)$	
مقدار	0.46	2.02	139	



شکل ۲ - اثر اندازه گام زمانی بر نتایج مدل عددی در پیش بینی سینتیک انحلال رسوب



شکل ۳ - اثر تعداد نقاط شبکه بر نتایج مدل عددی در پیش بینی سینتیک انحلال رسوب

با زمان صرفنظر شده است، لذا به نوعی یک حل شبه استاتیکی و تقریبی محسوب می شود. با این وجود نتایج حاصل از این مدل و مدل عددی برای زمانیکه نفوذ هنوز در نواحی دور از فصل مشترک رخ نداده باشد یا عبارتی برای زمان های انحلال کوتاه قابل مقایسه است. در شکل های ۴ و ۵ به ترتیب تغییرات اندازه رسوب حین فرایند انحلال و نحوه توزیع عنصر آلیاژی در زمینه اطراف رسوب آورده شده است. در این شکل ها نتایج حاصل از مدل عددی با نتایج مدل تحلیلی ویلن [۱۵] مقایسه شده است. مطابق این شکل ها در مراحل اولیه فرایند انحلال انطباق بسیار خوبی بین نتایج هر دو مدل دیده می شود، که بیانگر صحت مدل پیشنهادی می باشد. اما در زمان های طولانی تر نرخ انحلال پیش بینی شده با مدل ویلن بیشتر از نتایج مربوط به مدل عددی می باشد. این امر را می توان با در نظر گرفتن وابستگی نرخ انحلال رسوب به اختلاف غلظت عنصر آلیاژی در زمینه با غلظت تعادلی فصل مشترک رسوب/زمینه توضیح داد. در مدل ویلن این اختلاف غلظت حین فرایند انحلال ثابت و برابر  $(C_{int} - C_0)$  در نظر گرفته شده است. در حالیکه در مدل عددی ارایه شده مطابق با واقعیت، در اثر نفوذ عنصر آلیاژی در زمینه غلظت متوسط زمینه افزایش می یابد که باعث کاهش اختلاف غلظت میان زمینه و مرز رسوب/زمینه می شود (شکل ۵). لذا سرعت انحلال پیش بینی شده با مدل عددی ارایه شده کمتر از سرعت انحلال حاصل از مدل ویلن خواهد بود.

با جایگذاری رابطه ۳۴ در معادله ۳، رابطه تقریبی زیر برای سرعت مهاجرت فصل مشترک حین فرایند انحلال توسط ویلن ارایه شده است:

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{C_{int}-C_0}{C_P-C_{int}} \left( \frac{D}{\rho} + \sqrt{\frac{D}{\pi t}} \right) \quad (36)$$

با انتگرال گیری از معادله فوق با در نظر گرفتن روابط ۳۱-۳۳، معادله غیرخطی زیر توسط ویلن ارایه شده است که بیانگر نحوه تغییرات اندازه رسوب کروی با زمان عملیات انحلال می باشد.

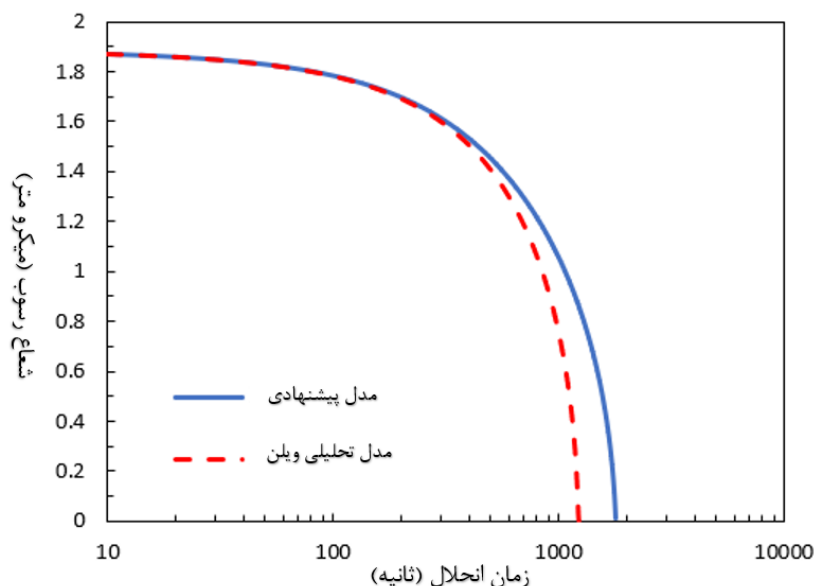
$$\ln(y^2 + 2p\sqrt{\tau y} + \tau) = -\frac{2p}{\sqrt{1-p^2}} \tan^{-1} \left( \frac{\sqrt{1-p^2}}{(y/\sqrt{\tau})+p} \right) \quad (37)$$

$$y = \frac{\rho(t)}{\rho_0} \quad (38)$$

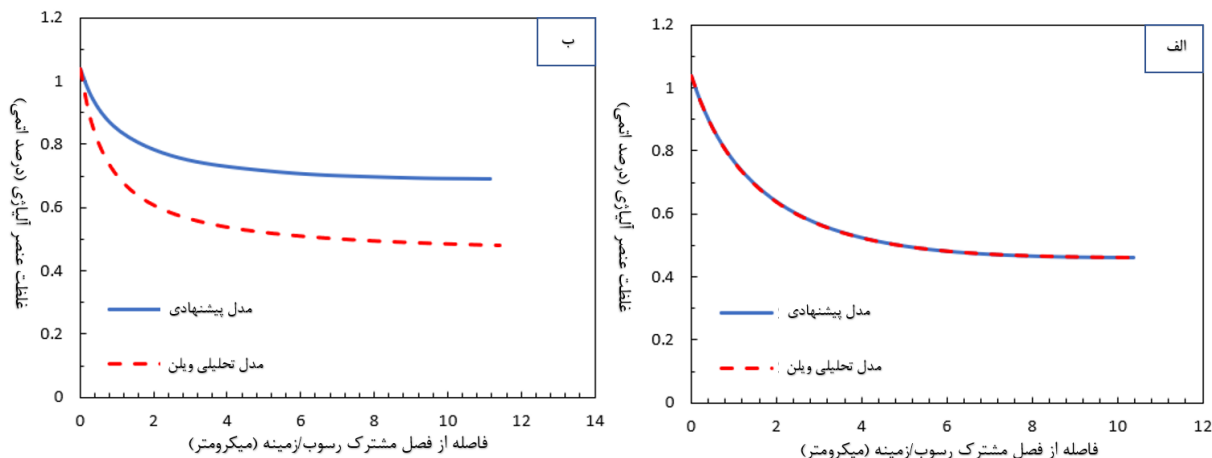
$$\tau = \frac{2D}{\rho_0^2} \left( \frac{C_{int}-C_0}{C_P-C_{int}} \right) t \quad (39)$$

$$p = \frac{1}{2\pi} \left( \frac{C_{int}-C_0}{C_P-C_{int}} \right)^{1/2} \quad (40)$$

در این رابطه اولاً فرض شده است که غلظت در نواحی دور از فصل مشترک ثابت باقی می ماند و ثانیاً برای بدست آوردن توزیع غلظت عنصر آلیاژی در زمینه اطراف رسوب (رابطه ۳۴) از تغییرات اندازه رسوب



شکل ۴- مقایسه نتایج مدل عددی پیشنهادی با نتایج مدل تحلیلی ویلن [۱۵] برای تغییرات اندازه رسوب حین فرایند انحلال

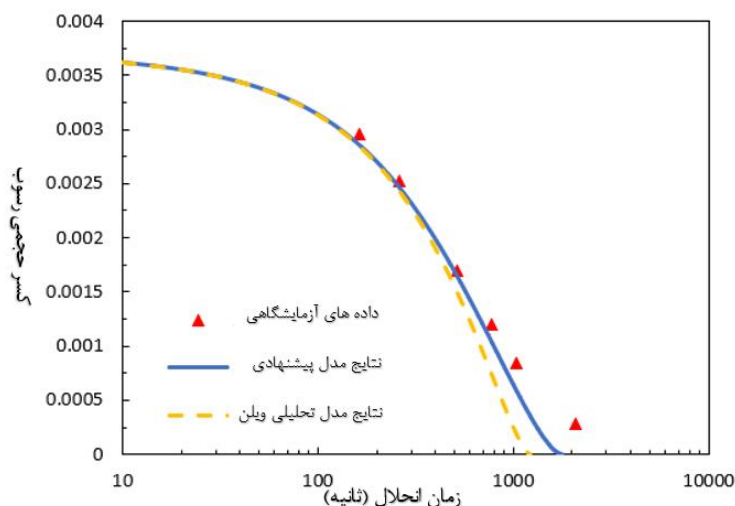


شکل ۵- مقایسه نتایج مدل عددی پیشنهادی با نتایج مدل تحلیلی ویلن [۱۵] برای توزیع غلظت عنصر آلیاژی در زمینه اطراف رسوب در زمان های آنبیل مختلف: الف)  $t=50$  s ب)  $t=1000$  s

مقایسه آورده شده است. همانطوریکه دیده می شود، نتایج مدل پیشنهاد شده انطباق بیشتری با داده های آزمایشگاهی دارد که بیانگر دقت بالاتر مدل عددی در پیش بینی سینتیک انحلال رسوب کروی می باشد.

### ۳-۳- مقایسه نتایج مدل عددی با داده های آزمایشگاهی

در شکل ۶ تغییرات کسر حجمی ذرات سیلیسیم در آلیاژ Al-0.8wt %Si حین آنبیل در دمای  $530^{\circ}\text{C}$  نشان داده شده است. همچنین در این شکل نتایج مدل عددی پیشنهادی و مدل تحلیلی ویلن برای



شکل ۶- مقایسه نتایج مدل پیشنهادی با داده های آزمایشگاهی [۳۱] مربوط به تغییرات کسر حجمی ذرات سیلیسیم در آلیاژ Al-0.8% Si حین فرآیند انحلال در دمای  $530^{\circ}\text{C}$ .

در مطالعه حاضر ابتدا با استفاده از انتقال دستگاه مختصات دامنه حل با مرزهای متحرک به یک دامنه جدید با مرزهای ثابت تبدیل شد. سپس معادلات حاکم در دستگاه مختصات تبدیل یافته با تلفیق روش دیفرانسیل کوادریچر و روش ضمنی اولر بصورت تکراری حل گردید.

### ۴- نتیجه گیری

مدلسازی ریاضی فرآیند انحلال رسوب در زمینه فلزی، مستلزم حل معادله دیفرانسیل جزئی فیک با مرزهای متحرک است. برای این منظور،

بسیار خوبی بین نتایج هر دو مدل وجود دارد، که بیانگر صحت نتایج مدل عددی پیشنهادی می باشد. همچنین تغییرات کسر حجمی ذرات سیلیسیم حین فرایند آنیل هم دما با استفاده از مدل ارائه شده پیش بینی گردید، که انطباق بسیار خوبی با نتایج آزمایشگاهی نشان می دهد.

## References

- [1] L. Hu, S.-J. Zhao, and Q. Liu, "The effect of size of Cu precipitation on the mechanical properties of microalloyed steel," *Materials Science and Engineering: A*, vol. 556, pp. 140-146, 2012.
- [2] J. Kai, G. Yu, C. Tsai, M. Liu, and S. Yao, "The effects of heat treatment on the chromium depletion, precipitate evolution, and corrosion resistance of INCONEL alloy 690," *Metallurgical transactions A*, vol. 20, no. 10, pp. 2057-2067, 1989.
- [3] W. Yang, S. Ji, Q. Zhang, and M. Wang, "Investigation of mechanical and corrosion properties of an Al-Zn-Mg-Cu alloy under various ageing conditions and interface analysis of  $\eta'$  precipitate," *Materials & Design*, vol. 85, pp. 752-761, 2015.
- [4] N. Anjabin, A. K. Taheri, and H. Kim, "Crystal plasticity modeling of the effect of precipitate states on the work hardening and plastic anisotropy in an Al-Mg-Si alloy," *Computational materials science*, vol. 83, pp. 78-85, 2014.
- [5] م. میرزایی، م. روشن، س. جوادپور، "افزایش شدید خواص مکانیکی آلیاژ آلومینیوم ۲۰۲۴ با اعمال یک پاس نورد سرد"، *مجله مواد نوین*، جلد ۴، شماره ۳، ص ۶۷-۷۸، بهار ۱۳۹۳.
- [6] M. Nicolas and A. Deschamps, "Characterisation and modelling of precipitate evolution in an Al-Zn-Mg alloy during non-isothermal heat treatments," *Acta Materialia*, vol. 51, no. 20, pp. 6077-6094, 2003.
- [7] T. Marlaud, A. Deschamps, F. Bley, W. Lefebvre, and B. Baroux, "Evolution of precipitate microstructures during the retrogression and re-ageing heat treatment of an Al-Zn-Mg-Cu alloy," *Acta materialia*, vol. 58, no. 14, pp. 4814-4826, 2010.

- مدل ارائه شده برای پیش بینی سینتیک انحلال رسوب در آلیاژ Al-Si 0.8% مورد استفاده قرار گرفت. نتایج بدست آمده از محاسبات نشان می دهد که مدل عددی ارائه شده با تعداد نقاط شبکه کم نیز همگرا می شود. همچنین مقایسه نتایج مدل عددی با نتایج مدل تحلیلی تقریبی نشان می دهد که در زمان های اولیه فرایند انحلال، انطباق
- [8] D. Bratland, Ø. Grong, H. Shercliff, O. Myhr, and S. Tjøtta, "Overview No. 124 Modelling of precipitation reactions in industrial processing," *Acta Materialia*, vol. 45, no. 1, pp. 1-22, 1997.
- [9] D. Zhang, X. Wang, Y. Pan, Sh. Hou, J. Zhang, L. Zhuang, L. Zhou, "Friction stir welding of novel T-phase strengthened Zn-modified Al-Mg alloy," *Journal of Materials Science*, vol. 56, no. 8, pp. 5283-5295, 2021.
- [10] F. Vermolen and K. Vuik, "A numerical method to compute the dissolution of second phases in ternary alloys," *Journal of computational and applied mathematics*, vol. 93, no. 2, pp. 123-143, 1998.
- [11] I. Sadeghi, M. A. Wells, and S. Esmaeili, "Effect of particle shape and size distribution on the dissolution behavior of Al<sub>2</sub>Cu particles during homogenization in aluminum casting alloy Al-Si-Cu-Mg," *Journal of Materials Processing Technology*, vol. 251, pp. 232-240, 2018.
- [12] O. Gopkalo, X. Liu, F. Long, M. Booth, A. Gerlich, and B. Diak, "Non-isothermal thermal cycle process model for predicting post-weld hardness in friction stir welding of dissimilar age-hardenable aluminum alloys," *Materials Science and Engineering: A*, vol. 754, pp. 205-215, 2019.
- [13] J. Van de Langkruis, N. Kuijpers, W. Kool, F. Vermolen, and S. Van der Zwaag, "Modeling Mg<sub>2</sub>Si dissolution in an AA6063 alloy during preheating to the extrusion temperature," in *proceedings of international aluminum extrusion technology seminar, 2000*, vol. 1, pp. 119-124: Citeseer.
- [14] B. A. Chen, L. Pan, R. H. Wang, G. Liu, P. M. Cheng, L. Xiao, J. Sun, "Effect of solution treatment on precipitation behaviors and age

hardening response of Al-Cu alloys with Sc addition," *Materials Science and Engineering: A*, vol. 530, pp. 607-617, 2011.

[15] M. Whelan, "On the kinetics of precipitate dissolution," *Metal Science Journal*, vol. 3, no. 1, pp. 95-97, 1969.

[16] H. B. Aaron, D. Fainstein, and G. R. Kotler, "Diffusion-limited phase transformations: a comparison and critical evaluation of the mathematical approximations," *Journal of applied physics*, vol. 41, no. 11, pp. 4404-4410, 1970.

[17] R. Tanzilli and R. Heckel, "Numerical solutions to finite diffusion-controlled 2-phase moving-interface problem (with planar cylindrical and spherical interfaces)," *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, vol. 242, no. 11, pp. 2313, 1968.

[18] D. L. Baty, R. A. Tanzilli, and R. W. Heckel, "Solution kinetics of  $\text{CuAl}_2$  in an Al-4Cu alloy," *Metallurgical Transactions*, vol. 1, no. 6, pp. 1651-1656, 1970.

[19] U. H. Tundal and N. Ryum, "Dissolution of particles in binary alloys: Part I. computer simulations," *Metallurgical Transactions A*, vol. 23, no. 2, pp. 433-444, 1992.

[20] Q. Zuo, F. Liu, L. Wang, C. F. Chen, and Z. H. Zhang, "An analytical model for secondary phase dissolution kinetics," *Journal of Materials Science*, vol. 49, no. 8, pp. 3066-3079, 2014.

[21] Z. Xu and P. Meakin, "Phase-field modeling of two-dimensional solute precipitation/dissolution: Solid fingers and diffusion-limited precipitation," *The Journal of chemical physics*, vol. 134, no. 4, p. 044137, 2011.

[22] G. Wang, D. S. Xu, N. Ma, N. Zhou, E. J. Payton, R. Yang, M. I. Mills, Y. Wang, "Simulation study of effects of initial particle size distribution on dissolution," *Acta Materialia*, vol. 57, no. 2, pp. 316-325, 2009.

[23] I. Kovačević and B. Šarler, "Solution of a phase-field model for dissolution of primary

particles in binary aluminum alloys by an r-adaptive mesh-free method," *Materials Science and Engineering: A*, vol. 413, pp. 423-428, 2005.

[24] C. W. Bert and M. Malik, "Differential quadrature method in computational mechanics: a review," 1996.

[25] G. Meral, "Differential quadrature solution of heat-and mass-transfer equations," *Applied Mathematical Modelling*, vol. 37, no. 6, pp. 4350-4359, 2013.

[26] B. Kaya, "Solution of the advection-diffusion equation using the differential quadrature method," *KSCE Journal of civil engineering*, vol. 14, no. 1, pp. 69-75, 2010.

[27] P. Malekzadeh and H. Rahideh, "Two-dimensional nonlinear transient heat transfer analysis of variable section pin fins," *Energy Conversion and Management*, vol. 50, no. 4, pp. 916-922, 2009.

[28] A. Vosoughi, N. Anjabin, and S. Amiri, "Thermal post-buckling analysis of moderately thick nanobeams," *Iranian Journal of Science and Technology, Transactions of Civil Engineering*, vol. 42, no. 1, pp. 33-38, 2018.

[29] A. R. Vosoughi, P. Malekzadeh, U. Topal, and T. Dede, "A hybrid DQ-TLBO technique for maximizing first frequency of laminated composite skew plates," *Steel and Composite Structures*, vol. 28, no. 4, pp. 509-516, 2018.

[30] C. Shu, *Differential quadrature and its application in engineering*. Springer Science & Business Media, 2012.

[31] U. H. Tundal and N. Ryum, "Dissolution of particles in binary alloys: part II. experimental investigation on an Al-Si alloy," *Metallurgical Transactions A*, vol. 23, no. 2, pp. 445-449, 1992.