



## پژوهش‌نامه ریخته‌گری

### مقاله پژوهشی:

### محاسبه نمودارهای فازی با استفاده از الگوریتم جارویس

محمد امین جباره

استادیار، گروه مهندسی مواد و پلیمر، دانشکده فنی، دانشگاه حکیم سبزواری، سبزوار، ایران

\* نویسنده مکاتبه کننده: Email: m.jabbareh@hsu.ac.ir

#### چکیده:

دریافت: ۱۴۰۰/۰۴/۰۴

پذیرش: ۱۴۰۰/۰۶/۲۸

نمودارهای فازی یکی از ابزارهای اصلی در طراحی آلیاژهای مهندسی هستند. محاسبه نمودارهای فازی با استفاده از ترمودینامیک محاسباتی در دهه‌های گذشته مورد توجه ویژه دانشمندان حوزه مواد بوده است. تلاش‌های انجام شده در چند دهه گذشته، منجر به توسعه الگوریتم‌های مختلفی جهت محاسبه نمودارهای فازی شده است. با این حال بسیاری از الگوریتم‌های ارائه شده یا بسیار پیچیده هستند و یا در محاسبه نمودارهای فازی محدودیت‌هایی دارند. هزینه محاسباتی بالا، خطا در محاسبه نواحی شامل شکاف حلالیت و عدم توانایی در تفکیک تعادل شبیه پایدار از تعادل پایدار تنها بخشی از محدودیت‌های الگوریتم‌های موجود برای محاسبه نمودارهای فازی هستند. از این رو بهینه سازی الگوریتم‌های موجود و یا توسعه الگوریتم‌های جدید جهت محاسبه نمودارهای فازی همواره مورد توجه دانشمندان بوده است. در تحقیق حاضر امکان استفاده از الگوریتم جارویس جهت محاسبه نمودارهای فازی مورد بررسی قرار گرفته است. الگوریتم جارویس یک الگوریتم شناخته شده در هندسه محاسباتی جهت محاسبه پوش محدب است. نتایج نشان داد که الگوریتم پیشنهادی می‌تواند به خوبی جهت محاسبه نمودارهای فازی مورد استفاده قرار گیرد. سادگی پیاده سازی و هزینه محاسباتی پایین از ویژگی‌های الگوریتم پیشنهادی است.

#### واژه‌های کلیدی:

نمودار فازی،  
الگوریتم جارویس،  
ترمودینامیک محاسباتی،  
پوش محدب.

#### ارجاع به این مقاله:

محمد امین جباره، محاسبه نمودارهای فازی با استفاده از الگوریتم جارویس، پژوهش‌نامه ریخته‌گری، بهار ۱۴۰۰، جلد ۵، شماره ۱، صفحات ۴۱-۵۰.

شناسه دیجیتال: (DOI): 10.22034/fjz.2021.292120.1137

#### ۱- مقدمه

محلول ایده‌آل و محلول با قاعده نمودار فازی تعدادی از سیستم‌های دوتایی را محاسبه کرد. میجرینگ<sup>۳</sup> [۸] روش وان لار را برای سیستم‌های سه تایی بسط داد. با توسعه کامپیوتر، استفاده از این ابزار برای محاسبه نمودارهای فازی مورد توجه محقق قرار گرفت [۹،۱۰]. کافمن<sup>۴</sup> [۱۱-۱۳]، هیلرت<sup>۵</sup> [۱۴] و لوکاس<sup>۶</sup> [۱۵،۱۶] از پیشگامان استفاده از کامپیوتر در محاسبه نمودارهای فازی هستند. این تلاشها منجر به توسعه نرم افزارهایی مانند Lukas program [۱۶]، ThermoCalc [۱۷]، FactSage [۱۸]، OpenCalphad [۱۹]، PANDAT [۲۰] و MTDATA [۲۱] جهت محاسبه نمودارهای فازی شده است.

نمودارهای فازی یک ابزار کاربردی مهم در علم و مهندسی مواد هستند. طراحی آلیاژهای جدید و بهینه سازی فرایندهای تولید جهت دستیابی به خواص مطلوب نمونه‌ای از کاربردهای نمودارهای فازی است [۱-۴]. تعیین نمودار فازی یک سیستم به کمک آزمون‌های تجربی امکان پذیر است با این حال استفاده از آزمون‌های تجربی خصوصاً در سیستم‌های چند جزئی بسیار پر هزینه و زمان بر خواهد بود [۵]. از این رو روش‌های محاسباتی مبتنی بر ترمودینامیک جهت پیش بینی نمودارهای فازی توسعه یافته اند [۶]. این روش‌ها تحت عنوان روش کلفد<sup>۱</sup> شناخته می‌شوند. اولین بار وان لار<sup>۲</sup> [۷] با استفاده از مدل ترمودینامیکی

<sup>4</sup> Kaufman

<sup>5</sup> Hillert

<sup>6</sup> Lukas

<sup>1</sup> CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams)

<sup>2</sup> Van Laar

<sup>3</sup> Meijering

اطلاعات ورودی از طرف کاربر نیست. در ادامه ابتدا اصول محاسبه نمودار فازی بر اساس الگوریتم‌های هندسی و ارتباط آن با مسئله پوش محدب تشریح شده است. سپس مبانی الگوریتم جارویس بیان شده و در نهایت نحوه استفاده از این الگوریتم در محاسبه نمودار فازی ذکر شده است.

## ۲- مدل

### ۲-۱- مروری بر محاسبه نمودارهای فازی به روش هندسی

شکل (۱) توابع انرژی آزاد گیبس یک سیستم فرضی با دو جزء A و B که تنها شامل دو فاز  $\alpha$  و  $\beta$  است را در یک دما و فشار ثابت برحسب ترکیب شیمیایی نشان می‌دهد. در این حالت در هر ترکیب شیمیایی مشخص، فازی که کمترین انرژی آزاد را داشته باشد فاز پایدار (تعادلی) خواهد بود. به این ترتیب برای غلظت‌های کمتر از  $X_\alpha$  فاز  $\alpha$  و برای غلظت‌های بیشتر از  $X_\beta$  فاز  $\beta$  فازهای تعادلی سیستم بوده که تشکیل آنها موجب کمینه شدن انرژی آزاد سیستم خواهد شد. اما برای سیستم‌هایی با ترکیب شیمیایی بین نقاط  $X_\alpha$  و  $X_\beta$  کمینه انرژی آزاد گیبس زمانی حاصل می‌شود که سیستم شامل نسبتی از هر دو فاز  $\alpha$  و  $\beta$  با ترکیب شیمیایی ثابت  $X_\alpha$  و  $X_\beta$  باشد. در این ناحیه، کمینه انرژی آزاد سیستم نه بر روی منحنی‌های  $G_\alpha$  یا  $G_\beta$  بلکه بر روی منحنی مشکی رنگ رسم شده در شکل (۱) (منحنی  $G_{min}$ ) قرار خواهد گرفت. همان طور که مشاهده می‌شود  $G_{min}$  در غلظت‌های کمتر از  $X_\alpha$  بر منحنی  $G_\alpha$  و در غلظت‌های بیشتر از  $X_\beta$  بر منحنی  $G_\beta$  منطبق است اما در ناحیه بین  $X_\alpha$  و  $X_\beta$  بر روی مماس مشترک دو منحنی  $G_\alpha$  و  $G_\beta$  قرار می‌گیرد. بنابراین جهت تعیین نواحی پایداری فازی در هر دما و فشار ثابت کافی است کمینه انرژی آزاد گیبس سیستم در دامنه تغییرات ترکیب شیمیایی، یعنی  $G_{min}$  را تعیین کرد. اگر این کمینه انرژی بر روی تابع انرژی آزاد گیبس هر یک از فازها باشد، فاز مورد نظر تنها فاز پایدار در سیستم خواهد بود، اما اگر این کمینه انرژی بر روی مماس مشترک توابع انرژی آزاد گیبس قرار گیرد ناحیه مورد نظر یک ناحیه تعادلی دو فازی است.  $X_\alpha$  و  $X_\beta$  نقاط مرزی ناحیه دو فازی هستند. با تعیین نقاط مرزی در دماهای مختلف و رسم این نقاط به صورت منحنی‌های دما-غلظت، نمودار فازی سیستم مورد نظر حاصل می‌شود. بنابراین می‌توان گفت که مسئله اصلی در محاسبه نمودارهای فازی تعیین کمینه انرژی آزاد گیبس و غلظت‌های مرزی برای سیستم مورد نظر است. این مسئله ارتباط تنگاتنگی با مسئله پوش محدب در هندسه محاسباتی دارد که در ادامه به آن پرداخته می‌شود.

الگوریتم‌های استفاده شده برای محاسبه نمودارهای فازی را می‌توان به دو دسته اصلی تقسیم کرد. اول الگوریتم‌های مبتنی بر روش لاگرانژ [۲۱]. در این الگوریتم‌ها با محاسبه مشتقات اول و دوم توابع انرژی آزاد گیبس فازهای موجود در سیستم، فازهای تعادلی در هر دما و ترکیب شیمیایی پیش‌بینی می‌شود. لازمه این کار، حل دستگاهی از معادلات غیر خطی است. هر چند برخی از نرم‌افزارهای تجاری مانند ThermoCalc و OpenCalphad از الگوریتم‌های مبتنی بر روش لاگرانژ برای انجام محاسبات استفاده می‌کنند [۲۲]، اما این الگوریتم‌ها با محدودیت‌هایی همراه هستند. به عنوان مثال چن<sup>۱</sup> [۲۳، ۲۴] نشان داد در شرایطی که تابع انرژی آزاد گیبس دارای چند مینیموم باشد (مانند سیستم‌های دارای ناحیه شکاف حلالیت) استفاده از الگوریتم‌های مبتنی بر روش لاگرانژ می‌تواند منجر به شناسایی فازهای شبیه پایدار به عنوان فازهای پایدار گردد. همچنین با افزایش تعداد اجزای سیستم حجم محاسبات به شدت افزایش پیدا خواهد کرد. به علاوه تعیین دقیق نواحی پایداری فازی در این روش‌ها مستلزم انتخاب صحیح مقادیر اولیه جهت انجام محاسبات عددی است [۲۵]. به عبارت دیگر محاسبه نمودار فازی به اطلاعات اولیه کاربر از سیستم وابسته است. تاکنون تلاش‌های مختلفی جهت بهینه سازی و بهبود عملکرد الگوریتم‌های مبتنی بر روش لاگرانژ انجام شده است [۲۶-۲۵، ۲۷]. با توجه به محدودیت‌های ذکر شده، چن [۲۳] روش جدیدی را پیشنهاد کرد که در آن از شکل هندسی توابع انرژی آزاد گیبس جهت محاسبه نواحی تعادلی فازی استفاده شد. به این ترتیب دسته دوم از الگوریتم‌های محاسبه نمودار فازی پایه گذاری شدند که می‌توان آنها را روش‌های هندسی<sup>۲</sup> نامید. توسعه نرم افزار تجاری PANDAT بر مبنای روش چن انجام شده است [۲۰]. هر چند الگوریتم پیشنهادی توسط چن بسیاری از مشکلات روش‌های پیشین را برطرف می‌کند اما هزینه محاسباتی آن خصوصاً برای سیستم‌های چند جزئی نسبتاً بالا است. لذا یافتن روش‌های هندسی جدید جهت بهبود دقت و افزایش سرعت محاسبات همواره مورد توجه بوده است [۲۸، ۲۹].

هدف از این تحقیق، ارائه یک الگوریتم جدید مبتنی بر روش هندسی جهت محاسبه نمودارهای فازی است. برای این منظور از الگوریتم جارویس [۳۰]، که یک الگوریتم شناخته شده در حل مسائل پوش محدب<sup>۳</sup> است استفاده شده است. با استفاده از این روش اولاً از حل دستگاه معادلات غیر خطی اجتناب می‌شود ثانیاً محاسبات به صورت کاملاً اتوماتیک انجام شده و لذا وابسته به

<sup>3</sup> Convex hull

<sup>1</sup> Chen

<sup>2</sup> Geometrical methods

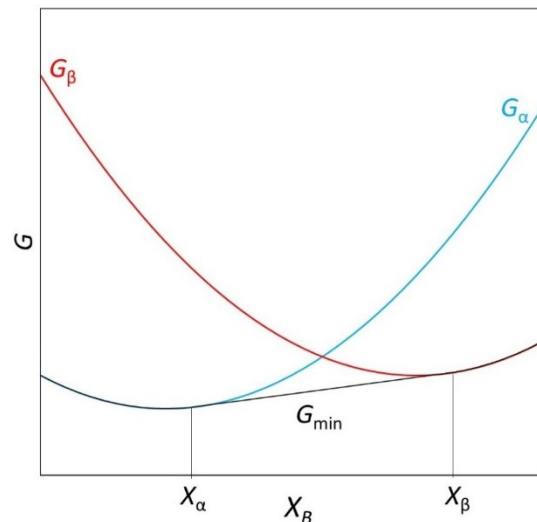
سیستم خواهد بود. واضح است که جهت محاسبه نمودار فازی صرفاً محاسبه بخش پایینی پوش محدب مورد نظر است. تاکنون الگوریتم‌های مختلفی جهت محاسبه پوش محدب پیشنهاد شده است که از آن جمله می‌توان به الگوریتم پویش گراهام<sup>۱</sup>، الگوریتم پویش سریع<sup>۲</sup> و الگوریتم تقسیم و غلبه<sup>۳</sup> اشاره کرد [۳۱]. الگوریتم جارویس [۳۰] یکی از ساده‌ترین الگوریتم‌های پیشنهادی جهت محاسبه پوش محدب است که در سال ۱۹۷۳ ارائه شده است. این الگوریتم به این صورت عمل می‌کند که ابتدا نقاط را برحسب مشخصه  $y$  (یا  $x$ ) مرتب کرده و در یک آرایه ذخیره می‌کند به این ترتیب نقطه با کمترین  $y$  (نقطه  $P_0$  در شکل (۳-الف)) حتماً یکی از رئوس پوش محدب است. در مرحله بعد نقطه‌ای که کمترین زاویه قطبی با نقطه  $P_0$  را داشته باشد تعیین می‌شود. (نقطه  $P_1$  در شکل (۳-الف)) همین فرایند برای نقطه جدید ( $P_1$ ) تکرار می‌شود تا زمانی که به بالاترین نقطه آرایه ( $P_n$ ) برسیم. مجموعه نقاط مشخص شده نیمی از پوش محدب را ایجاد می‌کند که به آن زنجیره راست می‌گویند (شکل (۳-الف)). برای تعیین نیمه دوم پوش محدب یا زنجیره چپ از آخرین نقطه مجموعه ( $P_n$ ) شروع کرده و فرایند فوق تکرار می‌شود با این تفاوت که در این مرحله اندازه‌گیری زوایا نسبت به بخش منفی محور  $x$  انجام می‌شود (شکل (۳-ب)).

### ۳-۲- محاسبه نمودار فازی به کمک الگوریتم جارویس

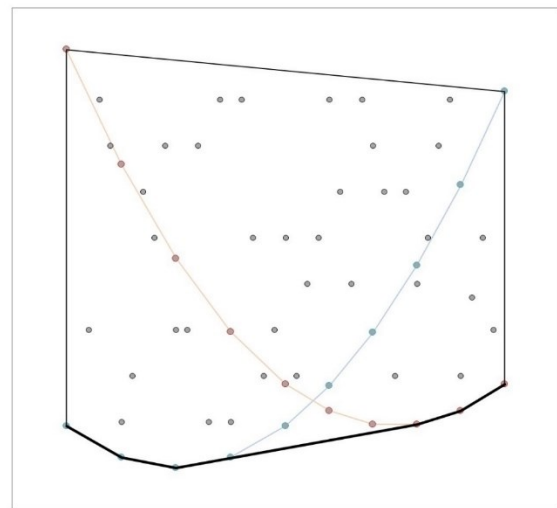
الگوریتم جارویس که در قسمت قبل تشریح شد یک روش عمومی جهت محاسبه پوش محدب مجموعه‌ای از نقاط است. تعیین کمینه توابع انرژی آزاد گیبس و محاسبه نمودار فازی، یک حالت خاص از مسئله پوش محدب است. در اینجا نقاط سیستم از ابتدا بر روی محور ترکیب شیمیایی (محور  $x$ ) منظم شده‌اند. به علاوه صرفاً زنجیره راست پوش محدب مورد نیاز است. با توجه به این موضوع محاسبه نمودار فازی در این تحقیق مطابق الگوریتم زیر انجام شده است:

الف) محاسبه انرژی آزاد گیبس و گسسته‌سازی سیستم: اولین قدم در محاسبه نمودارهای فازی تعیین توابع انرژی آزاد گیبس برای تمام فازهای سیستم مورد مطالعه است. برای فاز مایع و محلول‌های جامد تابع انرژی آزاد گیبس معمولاً به شکل زیر تعریف می‌شود [۳۲]:

$$G(X, T) = G^{ref}(X, T) + G^{id}(X, T) + G^{ex}(X, T) \quad (1)$$



شکل ۱- توابع انرژی آزاد گیبس برای یک سیستم دو تایی فرضی شامل دو فاز  $\alpha$  و  $\beta$  در فشار و دمای ثابت. منحنی  $G_{min}$  (منحنی مشکی) کمینه انرژی آزاد سیستم را نشان می‌دهد. غلظت‌های  $X_\alpha$  و  $X_\beta$  مرز نواحی دو فازی را مشخص می‌کنند



شکل ۲- توزیعی دو بعدی از نقاط روی صفحه و پوش محدب مربوط به آن (خط مشکی). جهت مشاهده بهتر، نقاط مربوط به منحنی‌های شکل (۱) با خطوط رنگی به یکدیگر متصل شده‌اند. بخش پایینی پوش محدب (خط پر رنگ) معادل منحنی  $G_{min}$  در شکل (۱) است

### ۲-۲- مسئله پوش محدب و الگوریتم جارویس

مسئله پوش محدب یکی از مسائل اساسی در هندسه محاسباتی است که هدف از آن تعیین کوچکترین پوسته محدبی است که می‌تواند مجموعه‌ای از نقاط روی یک صفحه را در بر بگیرد [۳۱]. به عنوان مثال پوش محدب مربوط به مجموعه نقاط ارائه شده در شکل (۲) با خطوط مشکی مشخص شده است. اگر هریک از این نقاط را مقدار انرژی آزاد گیبس برای یک فاز با ترکیب شیمیایی مشخص فرض کنیم، بخش زیرین پوش محدب نشان داده شده (خط پر رنگ در شکل ۲) بیانگر کمینه انرژی آزاد

<sup>3</sup> Divide and conquer algorithm

<sup>1</sup> Graham scan algorithm

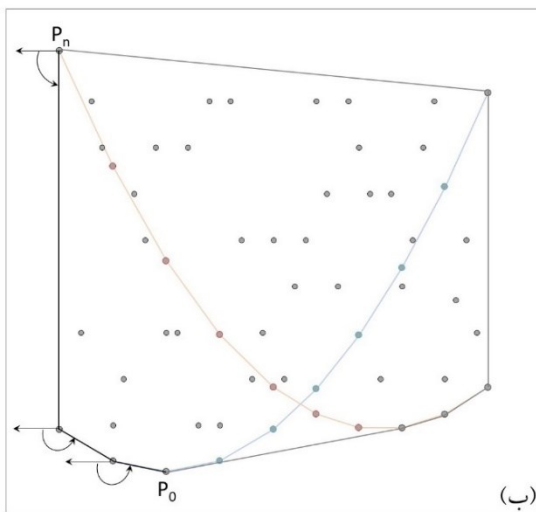
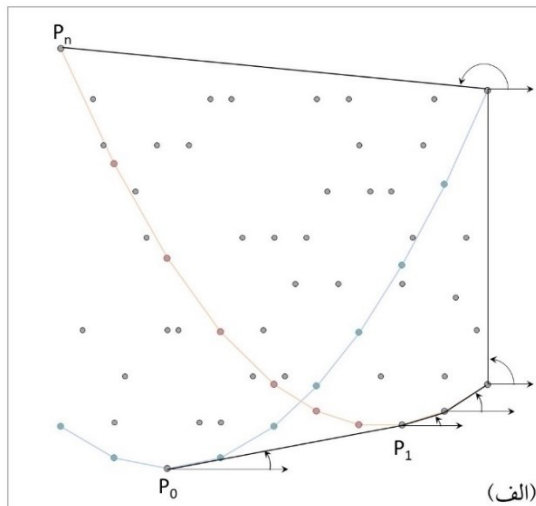
<sup>2</sup> Quickhull algorithm

پیدا کردن رئوس بعدی پوش محدب تا رسیدن به نقطه نهایی تکرار می‌شود (شکل ۴-و).

د) رسم نمودار فازی: به منظور رسم نمودار فازی لازم است مراحل ب و ج برای سایر دماها تکرار شده و اطلاعات مربوط به غلظت‌های مرزی ذخیره شود. بعد از ذخیره‌سازی اطلاعات مربوط به تمامی دماها نمودار فازی رسم می‌شود. (شکل ۵) روندنمای محاسبات انجام شده را نشان می‌دهد.

#### ۴-۲- پیاده‌سازی و ارزیابی

الگوریتم فوق به صورت یک کد کامپیوتری به زبان فرترن پیاده‌سازی شد. جهت بررسی عملکرد الگوریتم، سه سیستم آلیاژی نیکل-طلا، نیکل-کروم و آهن-کربن مورد بررسی قرار گرفت. جدول (۱) فازهای پایدار در هر سیستم و مدل ترمودینامیکی مربوط به آن را نشان می‌دهد.



شکل ۳- مراحل محاسبه پوش محدب به روش جارویس. الف) زنجیره راست و ب) پوش محدب کامل. در اینجا زنجیره چپ با خطوط مشکی و زنجیره راست با خطوط خاکستری رسم شده است

که در آن  $G^{ref}$  انرژی آزاد گیبس مرجع،  $G^{id}$  بخش ایده آل انرژی آزاد گیبس و  $G^{ex}$  انرژی آزاد گیبس اضافی ناشی از انحلال است. انرژی آزاد گیبس، یک تابع پیوسته از ترکیب شیمیایی است. اما محاسبه پوش محدب برای مجموعه‌ای از نقاط امکان‌پذیر است، بنابراین بعد از تعیین توابع انرژی آزاد گیبس لازم است گسسته‌سازی سیستم در دامنه غلظت انجام شود. این مرحله به صورت نمادین برای یک سیستم فرضی دو جزئی که شامل دو فاز  $\alpha$  و  $\beta$  است در شکل (۴-الف) و (۴-ب) نشان داده شده است. شکل ۴-الف بیانگر تغییرات تابع انرژی آزاد برای فازهای  $\alpha$  و  $\beta$  برحسب ترکیب شیمیایی است و شکل (۴-ب) همین تغییرات را به صورت گسسته‌سازی شده نشان می‌دهد.

ب) تعیین کمترین انرژی آزاد در هر غلظت: همان طور که اشاره شد در محاسبه کمینه انرژی آزاد گیبس تنها زنجیره راست از پوش محدب مورد نیاز است. با در نظر گرفتن این موضوع در می‌یابیم که تنها نقاطی می‌توانند رئوس پوش محدب را تشکیل دهند که در یک غلظت ثابت، در مقایسه با سایر نقاط با همان غلظت، انرژی آزاد کمتری داشته باشند. به عنوان مثال در شکل (۴-ب) از بین نقاط  $P_1$  و  $P_2$  احتمال آنکه  $P_2$  یکی از رئوس پوش محدب باشد صفر است. بنا بر این به منظور کاهش حجم محاسبات بهتر است پیش از استفاده از الگوریتم جارویس ابتدا نقاط غیر ضروری را حذف کنیم. برای این منظور در هر ترکیب شیمیایی مقادیر کمترین انرژی آزاد گیبس و فاز مربوط به آن ذخیره و سایر نقاط حذف شدند. شکل (۴-ج) این فرایند را به صورت شماتیک نشان می‌دهد.

ج) اعمال الگوریتم جارویس و تعیین غلظت‌های مرزی: بعد از حذف نقاط اضافی تعیین کمینه انرژی آزاد و غلظت‌های مرزی با استفاده از الگوریتم جارویس انجام شد. برای این منظور اولین نقطه روی محور ترکیب شیمیایی به عنوان نقطه شروع انتخاب شد (نقطه  $P_0$  در شکل ۴-د). سپس زاویه این نقطه با سایر نقاط سیستم محاسبه شد. نقطه‌ای که کمترین زاویه را با نقطه  $P_0$  دارد به عنوان رأس دوم پوش محدب انتخاب شد (نقطه  $P_1$  در شکل ۴-د). در اینجا لازم است بررسی شود که آیا نقاط  $P_1$  و  $P_0$  غلظت‌های مرزی هستند و یا خیر. برای این منظور نقاط  $P_1$  و  $P_0$  از نظر فاز با یکدیگر مقایسه می‌شوند. در صورتی که هر دو متعلق به یک فاز باشند غلظت  $P_0$  قطعاً غلظت مرزی نخواهد بود و تعیین رئوس بعدی پوش محدب انجام می‌گیرد (شکل ۴-ه) اما در صورتی که دو نقطه مربوط به دو فاز متفاوت باشند هر دو نقطه معرف غلظت‌های مرزی هستند لذا ابتدا مقادیر ترکیب شیمیایی و فازهای مربوط به هر دو نقطه ذخیره شده و سپس

$$G = G^{ref} + G^{id} + G^{ex} + G^{mag} \quad (۲)$$

$$G^{ref} = X_A G_A^0 + X_B G_B^0 \quad (۳)$$

$$G_i^0 = a + bT + c T \ln T + d T^2 + e T^{-1} + f T^3 + j T^7 + k T^{-9} \quad (۴)$$

$$G^{id} = RT(X_A \ln X_A + X_B \ln X_B) \quad (۵)$$

$$G^{ex} = X_A X_B [L_0 + L_1(X_A - X_B)^1 + L_2(X_A - X_B)^2] \quad (۶)$$

در روابط فوق  $G^{ref}$  انرژی آزاد گیبس مرجع،  $G^{id}$  بخش ایده آل انرژی آزاد گیبس،  $G^{ex}$  انرژی آزاد گیبس اضافی ناشی از انحلال و  $G^{mag}$  سهم تغییرات مغناطیسی در انرژی آزاد گیبس را نشان می‌دهند.  $X_i$  کسر مولی جزء  $i$ ،  $T$  دما،  $R$  ثابت جهانی گازها و  $G_i^0$  انرژی آزاد گیبس استاندارد برای عنصر  $i$  در فاز مورد نظر است. همچنین پارامتر برهم‌کنش دوتایی در محلول است که معمولاً به صورت تابعی خطی از دما تعریف می‌شود. مقادیر  $L_v$  برای هر سیستم مشخص با استفاده از داده‌های تجربی تعیین می‌شود. مقادیر  $G_i^0$  عناصر نیکل، طلا، کروم، آهن و گرافیت از مرجع [۳۳] استخراج شده است. همچنین تابع  $G^{mag}$  بر اساس روابط زیر تعریف می‌شود [۳۲].

$$G^{mag} = R T \ln(\beta + 1) f(\tau) \quad (۷)$$

$$\tau = T/T_c \quad (۸)$$

$$\tau < 1 \Rightarrow f(\tau) = 1 - \left[ \frac{79\tau^{-1}}{140p} + \frac{474}{497} \left( \frac{1}{p} - 1 \right) \left( \frac{\tau^3}{6} + \frac{\tau^9}{135} + \frac{\tau^{15}}{600} \right) \right] / A_0 \quad (۱-۹)$$

$$\tau > 1 \Rightarrow f(\tau) = - \left[ \left( \frac{\tau^{-5}}{10} + \frac{\tau^{-15}}{315} + \frac{\tau^{-25}}{1500} \right) \right] / A_0 \quad (۲-۹)$$

$$A_0 = \frac{518}{1125} + \left( \frac{11692}{15975} \right) \left( \frac{1}{p} - 1 \right) \quad (۱۰)$$

در روابط فوق  $T_c$  دمای کیوری و  $\beta$  مومنتوم مغناطیسی است.  $p$  یک ضریب ثابت وابسته به شبکه بلوری است که برای شبکه fcc برابر با ۰/۲۸ و برای شبکه bcc برابر با ۰/۴ است. لازم به ذکر است که در تحقیق حاضر برای سیستم‌های نیکل-طلا و نیکل-کروم از  $G^{mag}$  صرف نظر شده است. همچنین با توجه به اینکه فاز  $Ni_2Cr$  در دمای کمتر از ۸۷۰ کلین پایدار است [۳۵] و محاسبات برای دماهای بیشتر از ۹۰۰ کلین انجام شده است، این فاز در محاسبات لحاظ نشده است.

جدول ۱- فازهای پایدار و مدل ترمودینامیکی مربوط به آن در سیستم‌های

نیکل-طلا، نیکل-کروم و آهن-کربن

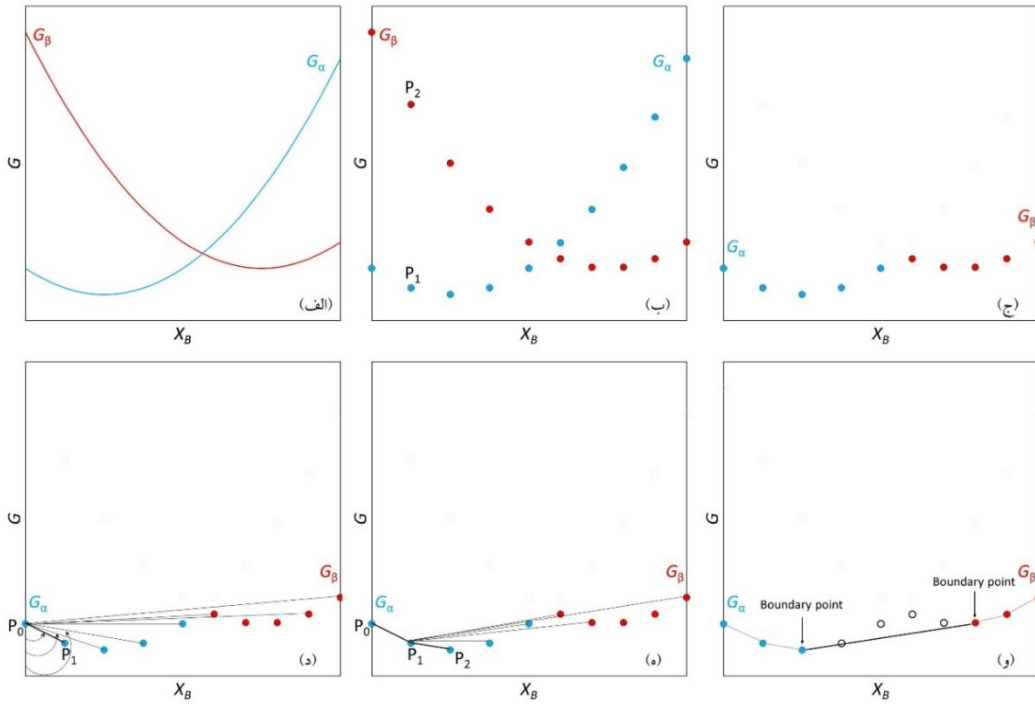
سیستم	فازهای پایدار	مدل ترمودینامیکی
Ni-Au	Liq.	Substitutional solution model
	fcc	Substitutional solution model
Ni-Cr	Liq.	Substitutional solution model
	fcc	Substitutional solution model
	bcc	Substitutional solution model
	Ni <sub>2</sub> Cr	Substitutional solution model
Fe-C	Liq.	Substitutional solution model
	fcc	Two sub-lattice model
	bcc	Two sub-lattice model
	Fe <sub>3</sub> C	Two sub-lattice model

جدول ۲- مقادیر ترمودینامیکی استفاده شده در محاسبه نمودارهای فازی. ضرایبی

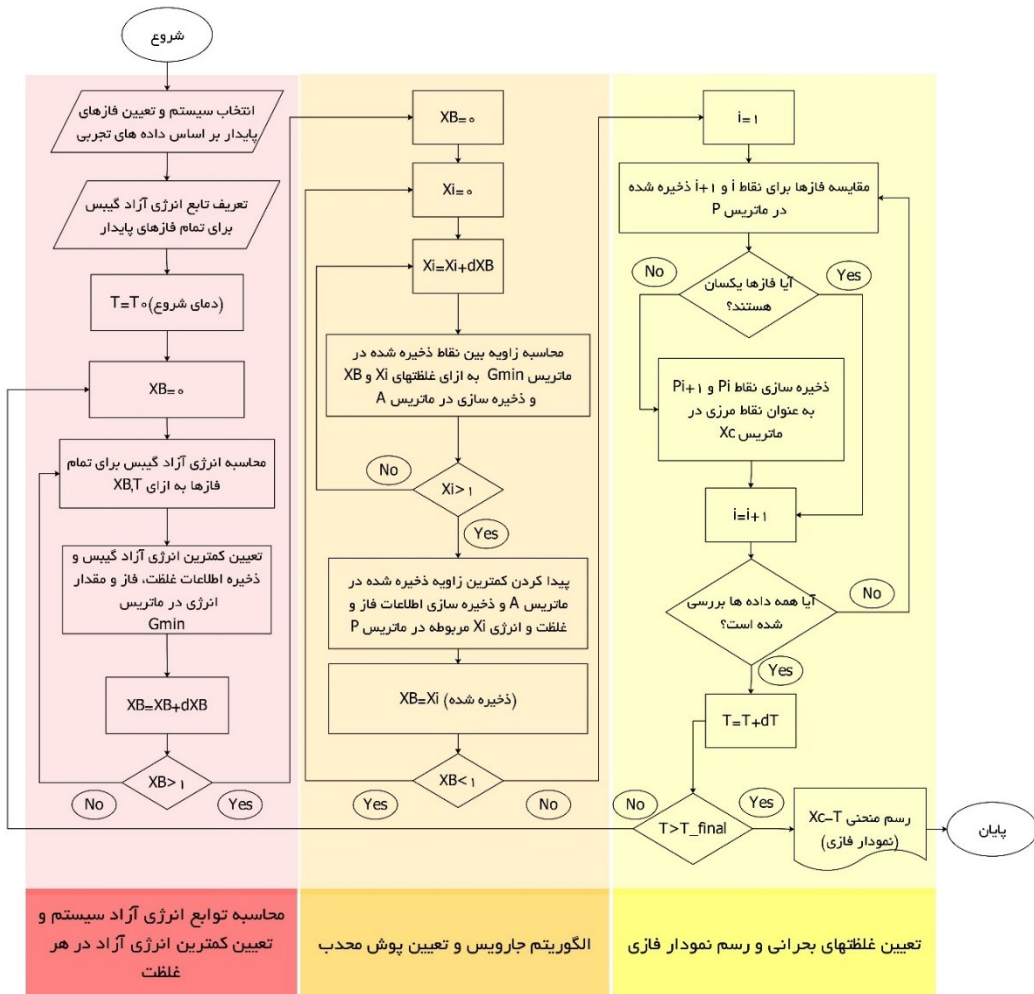
که مقادیر آنها در جدول ارائه نشده، برابر با صفر هستند

سیستم	فاز	ثوابت	مرجع
Ni-Au	Liq.	$L_0 = 9500 - 5.429 T$ $L_1 = 1614$	[36]
	fcc	$L_0 = 28696 - 11.274 T$ $L_1 = -10945 + 6.154 T$ $L_2 = 2519$	
Ni-Cr	Liq.	$L_0 = 318 - 7.3318 T$ $L_1 = 16941 - 6.3696 T$	[37]
	fcc	$L_0 = 8030 - 12.8801 T$ $L_1 = 33080 - 16.0362 T$	
	bcc	$L_0 = 17170 - 11.8199 T$ $L_1 = 34418 - 11.8577 T$	
Fe-C	Liq.	$L_0 = -124320 + 28.5 T$ $L_1 = 19300$ $L_2 = 49260 - 19 T$	[34]
	fcc	$G_{Fe:C}^0 = G_{Fe}^0 + G_{graphit}^0 + 77207 - 15.877 T$ $G_{Fe:Va}^0 = G_{Fe}^0$ $L_{Fe:C, Va} = -34671$ $T_C = -201 y_{Fe}^1$ $\beta = -2.1 y_{Fe}^1$	
	bcc	$G_{Fe:C}^0 = G_{Fe}^0 + 3G_{graphit}^0 + 322050 + 75.667 T$ $G_{Fe:Va}^0 = G_{Fe}^0$ $L_{Fe:C, Va} = -190 T$ $T_C = 1043 y_{Fe}^1$ $\beta = 2.22 y_{Fe}^1$	
	Fe <sub>3</sub> C	$G_{Fe:C}^0 = -10745 + 706.04 T - 120.6 T \ln T$	

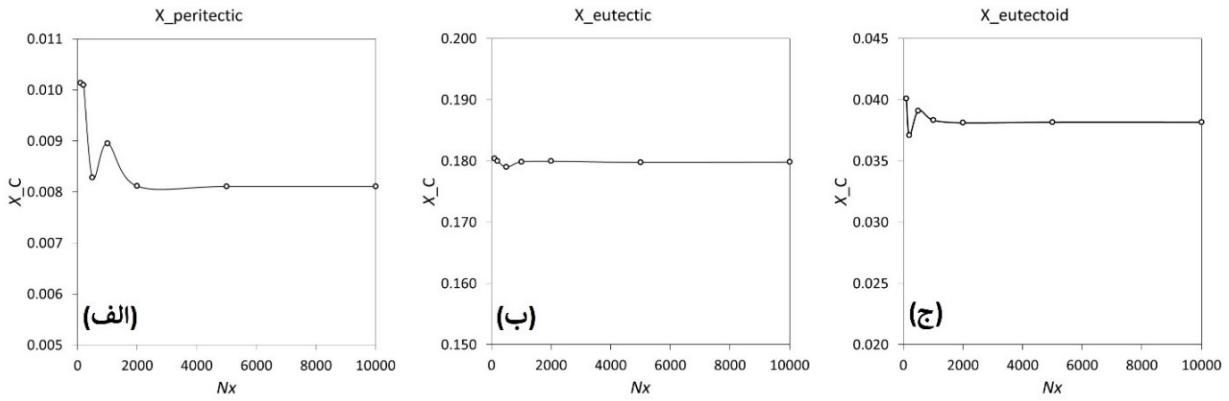
همان طور که مشاهده می‌شود در سیستم‌های نیکل-طلا و نیکل-کروم انرژی آزاد گیبس کلیه فازها بر اساس مدل محلول جانشینی تعریف می‌شود. همچنین فاز مایع در سیستم آهن-کربن با استفاده از مدل محلول جانشینی تعریف شده است. بر اساس این مدل، برای سیستم‌های دوتایی، تابع انرژی آزاد گیبس با استفاده از روابط (۲) تا (۶) تعریف می‌شود [۳۲].



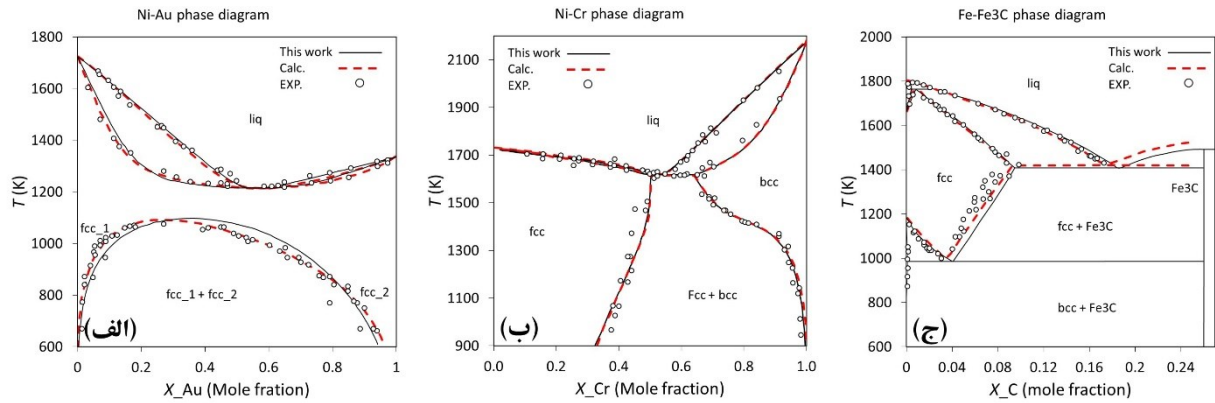
شکل ۴- مراحل محاسبه نمودار فازي. الف) تعیین انرژی آزاد گیبس ب) گسسته سازی سیستم. ج) تعیین مقدار کمینه توابع انرژی آزاد به ازای هر ترکیب شیمیایی مشخص. د) و ه) استفاده از الگوریتم جارویس جهت محاسبه زاویه بین نقاط سیستم و تعیین رئوس پوش محدب. توجه کنید که به منظور وضوح بیشتر، برخی از خطوط رسم نشده‌اند. و) تعیین زنجیره راست پوش محدب و شناسایی غلظت‌های مرزی



شکل ۵- روند نمای محاسبه نمودار فازي با استفاده از الگوریتم جارویس



شکل ۶- غلظت محاسبه شده برای سه نقطه‌ی الف) پریکتیک، ب) یوتکتیک و ج) یوتکتوئید در سیستم آهن-کربن بر حسب تعداد المان‌ها



شکل ۷- نموداری‌های فازی محاسبه شده برای سیستم‌های آلیاژی الف) نیکل-طلا، ب) نیکل-کروم، ج) آهن-کربن. نقاط، داده‌های تجربی و خطوط قرمز نمودارهای محاسبه شده قبلی را نشان می‌دهند که برای سیستم نیکل-طلا از مرجع [۳۶]، نیکل-کروم از مرجع [۳۵] و آهن-کربن از مرجع [۳۸] استخراج شده‌اند

در روابط فوق  $y_{Fe}^1 = X_{Fe}/(1 - X_C)$  بیانگر کسر مولی آهن روی زیر شبکه اول،  $y_C^2 = \left(\frac{a}{c}\right) \left(\frac{X_C}{1-X_C}\right)$  بیانگر کسر مولی کربن روی زیر شبکه دوم و  $y_{Va}^2 = 1 - y_C^2$  بیانگر کسر مولی جاهای خالی است. همچنین  $G_{Fe:Va}^0 = G_{Fe}^0$  و  $G^{mag}$  بر اساس روابط (۷) تا (۱۰) محاسبه شده است. سایر پارامترها در جدول (۲) آمده‌است. همانطور که قبلاً اشاره شد برای تعیین غلظت‌های تعادلی در هر دما لازم است گسسته‌سازی سیستم در دامنه غلظت انجام شود. برای این منظور دامنه غلظت به المان‌هایی با طول مساوی تقسیم شد. جهت بررسی وابستگی نتایج به تعداد المان‌ها و انتخاب تعداد المان‌های بهینه، نمودار فازی سیستم آهن-کربن با تعداد المان‌های بین ۱۰۰ تا ۱۰۰۰۰ محاسبه شد. تغییرات غلظت محاسبه شده برای سه نقطه پریکتیک، یوتکتیک و یوتکتوئید بر حسب تعداد المان (Nx) در شکل (۶) نشان داده شده است. هم‌گرایی نتایج بعد از تعداد المان ۲۰۰۰ به خوبی مشاهده می‌شود. تعداد المان ۵۰۰۰ برای انجام محاسبات انتخاب شد. همچنین محاسبه غلظت‌های تعادلی در بازه‌های دمایی ۱ کلوبین انجام شد.

فازهای fcc، bcc و ترکیب  $Fe_3C$  در سیستم آهن - کربن با استفاده از مدل زیر شبکه دوتایی<sup>۱</sup> و با استفاده از روابط (۱۱) تا (۱۳) تعریف شده‌اند [۳۴]. در این مدل شبکه کریستالی به صورت دو زیر شبکه که یکی شامل اتم‌های آهن و دومی شامل اتم‌های کربن و جاهای خالی است به شکل  $(Fe)_a(C,Va)_c$  تعریف می‌شود. a و c بیانگر تعداد فضاهای موجود روی هر زیر شبکه هستند. برای فاز fcc داریم  $a=c=1$  و برای فازهای bcc و  $Fe_3C$  داریم  $a=3$  و  $c=1$ .

$$G^{ref} = \sum_i \sum_j y_i^1 y_j^2 G_{i,j}^0 = y_{Fe}^1 y_C^2 G_{Fe:C}^0 + y_{Fe}^1 y_{Va}^2 G_{Fe:Va}^0 \quad (11)$$

$$G^{id} = R T \left[ a \sum_i y_i^1 \ln y_i^1 + c \sum_j y_j^2 \ln y_j^2 \right] = a R T (y_{Fe}^1 \ln y_{Fe}^1) + c R T (y_C^2 \ln y_C^2 + y_{Va}^2 \ln y_{Va}^2) \quad (12)$$

$$G^{ex} = \sum_{i,j,k} y_i^1 y_j^1 y_k^2 L_{i,j:k} + \sum_{i,j,k} y_k^1 y_i^2 y_j^2 L_{k:i,j} = y_{Fe}^1 y_C^2 y_{Va}^2 L_{Fe:C,Va} \quad (13)$$

<sup>1</sup> Two sub-lattice model



## ۳- نتایج و بحث

الگوریتم‌هایی سریع‌تر از الگوریتم جارویس جهت محاسبه پوش محدب وجود دارد اما مزیت الگوریتم جارویس سادگی پیاده‌سازی آن است. به علاوه این الگوریتم به راحتی قابل تعمیم به سیستم‌های سه بعدی است. از این قابلیت می‌توان در محاسبه مقاطع هم‌دما، در نمودارهای فازي سیستم‌های سه جزئی استفاده کرد.

## ۴- نتیجه گیری

در این تحقیق برای اولین بار محاسبه نمودارهای فازي با استفاده از روش مبتنی بر الگوریتم جارویس انجام شد. نتایج نشان داد روش پیشنهادی قابلیت خوبی در محاسبه نمودار فازي سیستم‌های دوتایی دارد. از مزایای این روش می‌توان به سادگی پیاده‌سازی الگوریتم، سرعت محاسبات بالا و قابلیت استفاده از آن برای سیستم‌های چند جزئی اشاره کرد.

## مراجع

1. Changkang C., Phase diagram and its application to the crystal growth of high Tc oxide superconductors, Progress in Crystal Growth and Characterization, 1998, 36, 1-97.
2. Chang Y.A., Chen S., Zhang F., Yan X., Xie F., Schmid-fetzer R., Oates W.A., Phase diagram calculation: past, present and future, Progress in Materials Science, 2004, 49, 313-345.
3. Schmid-Fetzer R., Phase diagrams: The beginning of wisdom, Journal of Phase Equilibria and Diffusion, 2014, 35, 735-760.
4. Ying Y., Bewlay B.P., Shuang-lin C., Chang Y.A., Application of phase diagram calculations to development of new ultra-high temperature structural materials, Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2007, 17, 1396-1404.
5. Zhao J.C., Methods for Phase Diagram Determination, Amsterdam, 2007.
6. Lukas H.L., Fries S.G., Sundman B., Computational Thermodynamics: The Calphad Method, Cambridge, 2007.
7. Van Laar J.J., Die Schmelz- oder erstarrungskurven bei binären systemen, wenn die feste phase ein gemisch (amorphe feste lösung oder mischkristalle) der beiden komponenten ist, Zeitschrift für Physikalische Chemie, 1908, 63, 216-253.
8. Meijering J.L., Calculation of the nickel-chromium-copper phase diagram from binary data, Acta Metallurgica, 1957, 5, 257-264.
9. Hillert M., Some viewpoints on the use of a computer for calculating phase diagrams, Physica B+C, 1981, 103, 31-40.
10. Mallik A.K., Computer calculations of phase diagrams. Bulletin of Materials Science, 1986, 8, 107-121.
11. Kaufman L., Nesor H., Calculation of superalloy phase diagrams: Part I, Metallurgical Transactions, 1974, 5, 1617-1621.
12. Kaufman L., Nesor H., Coupled phase diagrams and thermochemical data for transition metal binary systems - I, Calphad, 1978, 2, 55-80.
13. Kaufman L., Calculation of multicomponent ceramic phase diagrams, Physica B+C, 1988, 150, 99-114.

شکل (۷) نمودارهای فازي محاسبه شده برای سه سیستم آلیاژی نیکل-طلا، نیکل-کروم و آهن-کربن را نشان می‌دهد. جهت مقایسه، داده‌های تجربی با استفاده از نقاط بر روی شکل نشان داده شده است. همچنین محاسبات انجام شده توسط سایرین [۳۵،۳۶،۳۸] با خط چین قرمز روی شکل مشخص شده است. همانطور که در شکل (۷-الف) مشاهده می‌شود اختلاف جزئی بین نمودار فازي محاسبه شده در این تحقیق با محاسبات قبلی و داده‌های تجربی وجود دارد. این اختلاف خصوصاً در ناحیه شکاف حلالیت نمود بیشتری دارد. همان‌طور که اشاره شد در این تحقیق از  $G^{mag}$  در محاسبه تابع انرژی آزاد گیبس برای سیستم نیکل - طلا صرف نظر شده است که همین مسئله سبب کاهش دقت محاسبات شده است. اما در سیستم نیکل-کروم (شکل ۷-ب) تطابق کاملی بین نمودار فازي محاسبه شده با نمودار فازي و داده‌های تجربی موجود مشاهده می‌شود. در سیستم آهن-کربن (شکل ۷-ج) نیز تطابق قابل قبولی بین نمودار فازي محاسبه شده با نمودار فازي موجود مشاهده می‌شود. عمده اختلاف دو نمودار در محاسبه دما و غلظت یوتکتیک و همچنین غلظت آلیاژ یوتکتوئید است. به طوری که دمای یوتکتیک در این تحقیق ۱۴۰۸ کلوین و غلظت یوتکتیک ۰/۱۸ محاسبه شده است در حالی که محاسبات قبلی دمای ۱۴۲۰ کلوین و غلظت ۰/۱۷۳ را ارائه می‌کنند. این میزان اختلاف به ترتیب معادل ۰/۸ درصد و ۴ درصد خطا در محاسبه دما و غلظت است. همچنین غلظت یوتکتوئید محاسبه شده ۰/۰۳۷ و غلظت گزارش شده در محاسبات قبلی ۰/۰۳۴ است که خطایی در حدود ۸ درصد دارد. اختلاف جزئی بین نتایج تجربی و نتایج محاسبات هم در محاسبات انجام شده در این تحقیق و هم در محاسبات انجام شده قبلی مشاهده می‌شود. این امر ناشی از مدل ترمودینامیکی انتخاب شده جهت محاسبه توابع انرژی آزاد گیبس است. همان‌طور که اشاره شده ضرایب موجود در توابع انرژی آزاد گیبس به صورت تجربی تعیین می‌شوند و لذا بسته به داده‌های تجربی مورد استفاده، مقدار این ضرایب در مراجع مختلف متفاوت است. لذا با تغییر در مدل ترمودینامیکی انتخاب شده دقت محاسبات نیز تغییر خواهد کرد. نتایج به دست آمده قابلیت خوب الگوریتم پیشنهادی در محاسبه نمودار فازي سیستم‌های مختلف که شامل نواحی شکاف حلالیت یا ترکیبات استوکیومتری هستند را به خوبی نشان می‌دهد. به علاوه برخلاف بسیاری از نرم‌افزارهای تجاری، محاسبه نمودار فازي در این روش به صورت کاملاً خودکار انجام شده و نیازی به وارد کردن اطلاعات اضافه توسط کاربر نیست. لازم به ذکر است که هرچند



26. Snider J., Griva I., Sun X., Emelianenko M., Set based framework for Gibbs energy minimization, Calphad: Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry, 2015, 48, 18–26.
27. Piro M.H.A., Simunovic S., Besmann T.M., Lewis B.J., Thompson W.T., The thermochemistry library Thermochemica, Computational Materials Science, 2013, 67, 266–272.
28. Chen S., Zhang J., Lu X., Chou K., Chang Y.A., Application of Graham scan algorithm in binary phase diagram calculation, Journal of Phase Equilibria and Diffusion, 2006, 27, 121–125.
29. Belov G.V., Emelina A.L., Goriacheva V.I., Uspenskaya I.A., Voronin G.F., PhDi — Software package for calculation of binary phase diagrams, Journal of Alloys and Compounds, 2008, 452, 133–135.
30. Jarvis R.A., On the identification of the convex hull of a finite set of points in the plane, Information Processing Letters, 1973, 2, 18–21.
31. Preparata F.P., Shamos M.I., Computational Geometry - An Introduction, Springer-Verlag: New York, 1985.
32. Sunders N., Miodownik A.P., CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams): A Comprehensive Guide; pergamon, 1998.
33. Delsante A., SGTE data for pure elements, Calphad, 1991, 15, 317–425.
34. Gabriel A., Gustafson P., Ansara I., A thermodynamic evaluation of the C-Fe-Ni system. Calphad, 1987, 11, 203–218.
35. Nash P., The Cr-Ni (Chromium-Nickel) system, Bulliten of Alloy Phase Diagrams, 1986, 7, 466–476.
36. Wang J., Lu, X.-G., Sundman B., Su X., Thermodynamic assessment of the Au-Ni system, Calphad, 2005, 29, 263–268.
37. Huang W., Chang Y.A., Thermodynamic properties of the Ni-Al-Cr system, Intermetallics, 1999, 7, 863–874.
38. Okamoto H., The C-Fe (carbon-iron) system, Journal of Phase Equilibria and Diffusion, 1992, 13, 543–565.
14. Hillert M., A Discussion of methods of calculating phase diagrams, Bulliten of Alloy Phase Diagrams, 1981, 2, 265–268.
15. Lukas H.L., Henig E.T., Zimmermann B., Optimization of phase diagrams by a least squares method using simultaneously different types of data, Calphad, 1977, 1, 225–236.
16. Lukas H.L., Weiss J., Henig E.T., Strategies for the calculation of phase diagrams, Calphad, 1982, 6, 229–251.
17. Sundman B., Jansson B., Andersson J.O., The Thermo-Calc databank system, Calphad, 1985, 9, 153–190.
18. Jung I.H., Van Ende M.A., Computational thermodynamic calculations: FactSage from CALPHAD thermodynamic database to virtual process simulation, Metallurgical and Materials Transaction B, 2020, 51, 1851–1874.
19. Sundman B., Kattner U.R., Sigli C., Stratmann M., Le Tellier R., Palumbo M., Fries S.G., The OpenCalphad thermodynamic software interface, Computational Materials Science, 2016, 125, 188–196.
20. Chen S.L., Daniel S., Zhang F., Chang Y.A., Yan X.Y., Xie F.Y., Schmid-Fetzer R., Oates W.A., The PANDAT software package and its applications, Calphad: Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry, 2002, 26, 175–188.
21. Davies R.H., Dinsdale A.T., Gisby J.A., Robinson J.A.J., Martin S.M., MTDATA - Thermodynamic and phase equilibrium software from the national physical laboratory, Calphad: Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry, 2002, 26, 229–271.
22. Fu T., Zheng Z., Du Y., Wang J., Du C., Jin B., Liu Y., A new algorithm to calculate binary phase diagrams, Computational Materials Science, 2019, 159, 478–483.
23. Chen S.-L., Chou K.-C., Chang Y.A., On a new strategy for phase diagram calculation 1. Basic principles, Calphad, 1993, 17, 237–250.
24. Shuang-lin C., Chou K., Chang Y.A., On A new strategy for phase diagram calculation 2. Binary systems, Calphad, 1993, 17, 287–302.
25. Emelianenko M., Liu Z., Du Q., A new algorithm for the automation of phase diagram calculation, Computational Materials Science, 2006, 35, 61–74.



IRANIAN FOUNDRYMEN'S  
SOCIETY

## Founding Research Journal

*Research Paper:*

### Calculation of Phase Diagrams Using "Jarvis" Algorithm

**Mohammad Amin Jabbareh**

Assistant Professor, Department of Materials and Polymer Engineering, Hakim Sabzevari University, Sabzevar, Iran  
Corresponding author: Email: m.jabbareh@hsu.ac.ir

**Paper history:**

Received: 25 June 2021  
Accepted: 19 September 2021

**Keywords:**

Phase diagram,  
Jarvis algorithm,  
Computational  
thermodynamics,  
Convex hull

**Abstract:**

Phase diagrams are one of the main tools in designing engineering alloys. The calculation of phase diagrams using computational thermodynamics has been of great interest to materials scientists in recent decades. Efforts in the last decades have led to the development of various algorithms for calculating phase diagrams. However, many of the proposed algorithms are either very complex or have limitations in calculating phase diagrams. High computational cost, errors in calculating miscibility gap areas, and inability to distinguish meta-stable equilibrium from stable equilibrium are just some of the limitations of existing algorithms for calculating phase diagrams. Therefore, optimization of existing algorithms or development of new algorithms for calculating phase diagrams has always been of interest to scientists. In the present study, the possibility of using the Jarvis March algorithm to calculate phase diagrams has been investigated. The Jarvis March algorithm is a well-known algorithm in computational geometry for calculating convex hulls. The results show that the proposed algorithm can be successfully used to calculate phase diagrams. The simplicity of implementation and low computational cost are the main features of the proposed algorithm.

**Please cite this article using:**

Mohammad Amin Jabbareh, Calculation of phase diagrams using "Jarvis" algorithm, in Persian, Founding Research Journal, 2021, 5(1) 41-50.  
DOI: 10.22034/FRJ.2021.292120.1137

Journal homepage: [www.foundingjournal.ir](http://www.foundingjournal.ir)