





دانشگاه صنعتی شاهرود

مکانیک دانشکده مهندسی

گروه مکانیک سیالات

کنترل سطح مشترک جامد-مایع در فرآیندهای انجماد با استفاده از روشهای انتقال حرارت معکوس

دانشجو : علی عباس نژاد

اساتید راهنما :

دکتر محمد جواد مغربی

دکتر حسن بصیرت تبریزی

رساله دکتری جهت اخذ درجه دکتری

تیر ۱۳۸۹



دانشگاه صنعتی شاهرود
دانشکده مهندسی مکانیک
گروه حرارت و سیالات

پایان نامه رساله دکتری آقای علی عباس نژاد
تحت عنوان: کنترل سطح مشترک جامد-مایع در فرآیندهای انجماد با استفاده از روشهای انتقال
حرارت معکوس

در تاریخ ۸۹/۰۴/۲۸ توسط کمیته تخصصی زیر جهت اخذ مدرک دکتری مورد ارزیابی و با درجه عالی
مورد پذیرش قرار گرفت.

امضاء	اساتید مشاور	امضاء	اساتید راهنما
	نام و نام خانوادگی :		نام و نام خانوادگی : محمدجواد مغربی
	نام و نام خانوادگی :		نام و نام خانوادگی : حسن بصیرت تبریزی

امضاء	نماینده تحصیلات تکمیلی	امضاء	اساتید داور
	نام و نام خانوادگی : سید مجید هاشمیان		نام و نام خانوادگی : داوود دومیری گنجی
			نام و نام خانوادگی : فرهاد طالبی
			نام و نام خانوادگی : محمدحسن کیهانی
			نام و نام خانوادگی : محمدحسن شاه مردان

تقدیم به

روان پاک پدرم، که به من درس زندگی آموخت

و

مادر مهربان و همسر فداکارم به پاس تمامی زحماتشان

و

دختر عزیزم به امید فردایی روشن

تقدیر و تشکر

پس از حمد، سپاس و ستایش خداوند لازم می دانم تقدیر و تشکر ویژه خود را از زحمات بی دریغ، تلاشهای بی وقفه و راهنمایی های ارزشمند اساتید گرامی جناب آقای دکتر مغربی و جناب آقای دکتر بصیرت تبریزی در راستای انجام این رساله ابراز دارم. همچنین بجاست از راهنمایی ها و همکاری های جناب آقای پروفسور ولفگانگ مارکوارت ریاست محترم انستیتوی تحقیقاتی مهندسی سیستمهای فرایندی دانشگاه RWTH آخن آلمان که امکان تحقیق و پژوهش اینجانب در انستیتوی مذکور را فراهم نمودند قدردانی نمایم. از اساتید بزرگوار دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه صنعتی شاهرود که افتخار شاگردی ایشان را داشته ام نیز صمیمانه سپاسگزارم. در انتها نیز از زحمات و حمایت های پدر، مادر و همسر عزیزم که در طی دوران تحصیل، همواره مشوق و پشتیبان اینجانب بوده اند کمال تشکر و قدردانی را دارم.

تعهد نامه

اینجانب علی عباس نژاد دانشجوی دوره دکتری رشته مهندسی مکانیک - تبدیل انرژی دانشکده مکانیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده رساله کنترل سطح مشترک جامد-مایع در فرآیندهای انجماد با استفاده از روشهای انتقال حرارت معکوس تحت راهنمایی دکتر محمد جواد مغربی و دکتر حسن بصیرت تبریزی متعهد می شوم :

- تحقیقات در این پایان نامه / رساله توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است .
- مطالب مندرج در پایان نامه/رساله تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچگونه مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است .
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد و مقالات مستخرج با نام «دانشگاه صنعتی شاهرود» و یا « Shahrood University of Technology » به چاپ خواهد رسید .
- حقوق معنوی تمام افرادی که در بدست آمدن نتایج اصلی پایان نامه / رساله تاثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه/رساله رعایت می گردد .
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه/رساله ، در مواردی که از موجود زنده (یا بافتهای آنها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است .
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه/رساله ، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا از آن استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است .

تاریخ :

امضاء دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج ، کتاب ، برنامه های رایانه ای ، نرم افزارها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد و این مطلب باشد به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود .
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه / رساله بدون ذکر منبع مجاز نمی باشد .
- متن این صفحه نیز باید در ابتدای نسخه های تکثیر شده پایان نامه/رساله وجود داشته باشد .

چکیده

در بسیاری از فرآیندهای صنعتی مانند ریخته گری و جوشکاری، پدیده انجماد رخ می دهد. خواص فیزیکی ماده منجمد شده در درشت مقیاس^۱ به ساختار ماده در ریز مقیاس^۲ وابسته است. ریز ساختارهای تشکیل شده در حین انجماد به عوامل متعددی از جمله نرخ سرد کردن، گرادیان دما در سطح مشترک جامد - مایع، تنش سطحی و سرعت سطح مشترک بستگی دارد.

برای اطمینان از کیفیت و قابلیت اطمینان ماده منجمد شده و برای دستیابی به ماده ای با کیفیت مورد نظر نیازمند به کنترل فرآیندهای انجماد هستیم. یکی از مهمترین پارامترهایی که بر ریز ساختار ماده تشکیل شده تأثیر گذار است، سرعت سطح مشترک جامد - مایع در انجماد مواد خالص و ضخامت ناحیه دوفازی میانی^۳ در انجماد آلیاژهاست. لذا کنترل دو پارامتر مذکور برای حصول قطعه ای با کیفیت مورد نیاز در فرایندهای انجماد فلزات خالص و آلیاژها، هدف اصلی تحقیق حاضر خواهد بود. بنابراین محاسبه شرایط مرزی در سطوح قالب به گونه ای که منجر به دستیابی به سرعت مطلوب و همچنین ضخامت ناحیه میانی شود امری ضروری خواهد بود که این مسأله در دسته مسائل معکوس حرارتی طبقه بندی می شود.

در اکثر پژوهشهای قبلی که در زمینه انتقال حرارت معکوس و کاربرد آن در مساله انجماد آلیاژها (جوشکاری و ریخته گری) انجام شده، اثر ناحیه میانی لحاظ نشده است.

این ناحیه یک ناحیه دوفازی با خواص ترموفیزیکی متغیر بوده و وابسته به کسری از ماده است که به جامد تبدیل می شود. لذا در این رساله تلاش بر آن است که کنترل حرکت سطح مشترک جامد-مایع تحت حضور ناحیه میانی توسط روشهای انتقال حرارت معکوس صورت گیرد. در این تحقیق ابتدا تابع

¹ Macro scale

² Micro scale

³ Mushy Zone

هدف بر مبنای اختلاف دمای بین دمای مطلوب و محاسبه شده در موقعیت مطلوب سطح مشترک تعریف شده و با استفاده از روش گرادیان مزدوج بهینه می شود.

جهت جلوگیری از حل معکوس در سه ناحیه موجود، از فرمول بندی آنتالپی استفاده شده است. صحت روش و کد کامپیوتری نوشته شده ابتدا توسط اعمال شار حرارتی معلوم و ثبت دما در نقاط مشخصی از دامنه محاسباتی تایید و سپس کد تایید شده برای کنترل سرعت و شکل سطح مشترک در مختصات یک و دو بعدی استفاده شده است.

نتایج به دست آمده نشانگر این مطلب است که با اعمال شار کنترلی به صورت همزمان در دو مرز، به راحتی می توان ضخامت و حتی شکل ناحیه میانی را کنترل نمود. شار حرارتی بدست آمده برای کنترل ضخامتهای ثابت و متغیر ناحیه میانی نشان داد که در سمت جامد همیشه سرمایش و در سمت مایع بسته به ضخامت ناحیه نیاز به گرمایش نیز وجود دارد. از آنجا که کیفیت آلیاژ تشکیل شده در حین فرآیند انجماد به شدت به ضخامت ناحیه میانی وابسته است، نتیجه می شود که می توان با استفاده از روش پیشنهادی در این رساله به آلیاژهایی با کیفیت و خواص مکانیکی مطلوب برای کاربردهای مشخص دست پیدا کرد.

بنا بر این رساله حاضر به عنوان یک کار تحقیقاتی دانشگاهی از اهمیت ویژه ای برخوردار است به نحوی که نتایج حاصل از آن می تواند در راستای رفع نیازهای صنایع مرتبط و بهبود کیفیت قطعات تولید شده مفید واقع شود.

- 1- “Optimal Operation of Alloy Material in Solidification Processes with Inverse Heat Transfer”, International Communications in Heat and Mass Transfer, 37, 2010, 711-716.
- 2- “Effect of Sensor Locations on the Solution of Inverse Stefan Problems”, Mechanika, 83(3), July 2010, 51-57.
- 3- “A High Order Time Advancement Scheme for Prediction of Solidification Processes”, Defect and Diffusion Forum, Trans Tech Publications, Switzerland, 297-301, 2010, 779-784.
- 4- “Control of Interface Acceleration During Solidification Processes using Inverse Heat Transfer Methods”, International Journal of Nonlinear Dynamics in Engineering and Science, In Press.
- 5- “Reconstruction of Time and Spatial dependent Boundary Heat Flux in 2D Solidification Problems”, Presented at International Symposium on Computing in Science and Engineering, 3-5 June 2010, Kusadasi, Turkey.

فصل اول: مقدمه

۲	۱-۱- مسائل معکوس حرارتی.....
۴	۲-۱- مسائل معکوس حرارتی همراه با تغییر فاز.....
۵	۳-۱- مروری بر پژوهشهای گذشته.....
۱۹	۴-۱- اهداف پایان نامه.....
۲۰	۵-۱- نوآوری های رساله.....

فصل دوم: مقدمه ای بر انجماد

۲۳	۱-۲- مقدمه.....
۲۴	۲-۲- بیان ریاضی معادلات حاکم.....
۳۰	۱-۲-۲- روش آنتالپی.....
۳۳	۲-۲-۲- بی بعدسازی معادلات حاکم به شکل آنتالپی.....
۳۵	۳-۲-۲- نحوه پیدا کردن سطح مشترک.....

فصل سوم: مسائل معکوس حرارتی

۳۹	۱-۳- مقدمه.....
۴۰	۲-۳- تاریخچه مسائل معکوس حرارتی.....
۴۲	۳-۳- دسته بندی مسائل معکوس حرارتی.....
۴۴	۴-۳- حل مسائل معکوس حرارتی.....
۴۴	۵-۳- طبقه بندی روش ها.....
۴۶	۶-۳- ارزیابی روش های مسائل معکوس هدایت.....
۴۸	۷-۳- کاربرد روش های معکوس در مهندسی.....

فصل چهارم: روشهای بهینه سازی توابع

۵۲ ۱-۴ مسائل بهینه سازی
۵۳ ۲-۴ دسته بندی روش های بهینه سازی
۵۴ ۳-۴ راه حل کلی
۵۵ ۴-۴ نرخ همگرایی
۵۶ ۵-۴ گرادیان تابع
۵۸ ۱-۵-۴ محاسبه گرادیان
۵۹ ۲-۵-۴ تعیین طول گام بهینه در جهت کاهش تابع
۶۰ ۶-۴ معیار همگرایی
۶۰ ۷-۴ روش کاهش سریع
۶۱ ۸-۴ روش گرادیان مزدوج
۶۱ ۱-۸-۴ جهت های مزدوج
۶۲ ۲-۸-۴ شرح روش گرادیان مزدوج
۶۳ ۳-۸-۴ الگوریتم روش گرادیان مزدوج
۶۵ ۴-۸-۴ دسته بندی روش های گرادیان مزدوج
۶۸ ۹-۴ روش نیوتن
۷۱ ۱۰-۴ روش مارکارت- لونیبرگ
۷۲ ۱۱-۴ روش شبه نیوتن

فصل پنجم: کنترل فرآیندهای انجماد با روش گرادیان مزدوج

۷۵ ۱-۵-معادلات حاکم بر مسأله مستقیم
۷۷ ۲-۵-مسأله معکوس
۷۹ ۳-۵-روش گرادیان مزدوج
۸۱ ۱-۳-۵-معیار توقف
۸۲ ۲-۳-۵-مسأله حساسیت

۸۳مسأله الحاقی.....۳-۳-۵
۸۴الگوریتم روش گرادیان مزدوج.....۴-۳-۵
۸۵مطالعه معادلات حاکم در مختصات دو بعدی.....۴-۵
۸۶مساله مستقیم.....۱-۴-۵
۸۷مساله حساسیت.....۲-۴-۵
۸۷مساله الحاقی.....۳-۴-۵
۸۸روش گرادیان مزدوج.....۴-۴-۵
۹۰محاسبات عددی حل معادلات.....۵-۵
۹۱محاسبه مشتقات مکانی.....۱-۵-۵
۹۷الگوی پیشروی در زمان.....۲-۵-۵
۹۸طرح ضمنی برای حل مساله معکوس انجماد آلیاژها.....۳-۵-۵

فصل ششم: نتایج عددی

۱۰۲مقدمه.....۱-۶
۱۰۲انجماد موادخالص در حالت یک بعدی.....۲-۶
۱۰۲اعمال شار مرزی معلوم و بازسازی آن.....۱-۲-۶
۱۰۵بررسی استقلال از شبکه محاسباتی.....۱-۱-۲-۶
۱۰۸بررسی اثر حدس اولیه.....۲-۱-۲-۶
۱۱۱اثر موقعیت قرارگیری حسگرها.....۳-۱-۲-۶
۱۱۵بررسی اثر عدد استفان.....۴-۱-۲-۶
۱۱۷اثر میزان خطا در داده های ورودی.....۵-۱-۲-۶
۱۲۲اثر دمای اولیه مذاب.....۶-۱-۲-۶
۱۲۵کنترل سرعت وشتاب سطح مشترک.....۲-۲-۶
۱۳۴انجماد یک بعدی آلیاژها.....۳-۶
۱۳۶بررسی استقلال از شبکه محاسباتی.....۱-۱-۲-۶

۱۳۸۳-۱-۲-۶- اثر موقعیت قرارگیری حسگرها
۱۴۱۵-۱-۲-۶- اثر میزان خطا در داده های ورودی
۱۴۵۵-۱-۲-۶- اثر ترکیب و نوع آلیاژ
۱۴۷۲-۲-۶- کنترل سرعت سطح مشترک
۱۵۳۴-۶- انجماد مواد خالص و آلیاژها در حالت دو بعدی

فصل هفتم: نتیجه گیری و پیشنهادات

۱۷۴۱-۷- نتیجه گیری
۱۷۸۲-۷- پیشنهادات برای پژوهشهای آینده

ضمیمه: ارزیابی دقت روش تفاضلات محدود فشرده

۱۸۱الف-۱- ارزیابی دقت روش رانگ کوتای مرتبه سوم فشرده
۱۸۲الف-۲- مقایسه دقت روشهای تفاضلات محدود فشرده زمانی و مکانی
۱۸۴مراجع

۵	شکل (۱-۱): ساختارهای مختلف سطح مشترک در گرادیان های مختلف دما
۱۰	شکل (۲-۱): انجماد تک جهتی به همراه جابجایی طبیعی
۱۴	شکل (۳-۱): هندسه مسأله و نواحی جامد و مایع به همراه شرایط مرزی
۱۵	شکل (۴-۱): هندسه و شماتیک دستگاه مورد استفاده
۱۷	شکل (۵-۱): اشکال سطح مشترک برای حالت ۱ (تخت) و حالت ۲ (سینوسی)
۲۵	شکل (۱-۲): نمایش هندسه و مختصات برای مساله الف) انجماد و ب) ذوب
۳۱	شکل (۲-۲): رابطه آنتالپی-دما برای الف) موادخالص و ب) آلیاژها
۳۵	شکل (۳-۲): روش مشخص کردن موقعیت مرز مشترک
۵۵	شکل (۱-۴): نمودار روند بهینه سازی تابع هدف
۵۷	شکل (۲-۴): جهت های سریع ترین افزایش
۷۰	شکل (۳-۴): مینیمم یک تابع درجه دوم در یک مرحله با روش نیوتن
۷۶	شکل (۱-۵): نمایش شماتیک مساله انجماد برای الف) ماد خالص و ب) آلیاژها
۸۶	شکل (۲-۵): نمایش شماتیک مساله انجماد در مختصات دو بعدی
۹۳	شکل (۳-۵): تقریب مشتق اول تابع $y = 2x + \cos(3x)$
۹۴	شکل (۴-۵): مرتبه دقت برای مشتق مرتبه اول
۹۶	شکل (۵-۵): تقریب مشتق دوم تابع $y = 2x + \cos(3x)$
۹۶	شکل (۶-۵): مرتبه دقت برای مشتق مرتبه دوم
۱۰۴	شکل (۱-۶): مقایسه شار حرارتی مطلوب و محاسبه شده
۱۰۵	شکل (۲-۶): الف) نرخ کاهش تابع هدف و ب) نرخ کاهش نرم گرادیان
۱۰۷	شکل (۳-۶): الف) شار حرارتی و ب) نرخ کاهش تابع هدف برای شبکه های متفاوت با شار مثلثی
۱۰۸	شکل (۴-۶): شار حرارتی و نرخ کاهش تابع هدف برای شبکه های متفاوت با شار پله ای
۱۱۰	شکل (۵-۶): نرخ کاهش تابع هدف برای شبکه های متفاوت با الف) شار مثلثی و ب) شار پله ای
۱۱۱	شکل (۶-۶): شار حرارتی برای حدسهای اولیه متفاوت با الف) شار مثلثی و ب) شار پله ای
۱۱۳	شکل (۷-۶): دماهای ثبت شده در موقعیتهای متفاوت سنسور برای الف) شار مثلثی و ب) شار پله ای
۱۱۴	شکل (۸-۶): شار حرارتی برای حسگرهای متفاوت با الف) شار مثلثی و ب) شار پله ای

- ۱۱۶ شکل (۶-۹): شار حرارتی برای اعداد استفان متفاوت با الف) شار مثلثی و ب) شار پله ای
- ۱۱۸ شکل (۶-۱۰): دماهای ثبت شده و اغتشاش یافته برای الف) شار مثلثی و ب) شار پله ای
- ۱۲۰ شکل (۶-۱۱): شار حرارتی بدست آمده و مطلوب برای مقادیر متفاوت نوسانات ورودی الف) شار مثلثی و ب) شار پله ای
- ۱۲۱ شکل (۶-۱۲): روند همگرایی تابع هدف برای مقادیر متفاوت نوسانات ورودی الف) شار مثلثی و ب) شار پله ای
- ۱۲۳ شکل (۶-۱۳): شار حرارتی محاسبه شده و مطلوب برای مقادیر متفاوت توزیع دمای اولیه مذاب، الف) شار مثلثی و ب) شار پله ای
- ۱۲۴ شکل (۶-۱۴): روند همگرایی تابع هدف برای مقادیر متفاوت توزیع دمای اولیه مذاب، الف) شار مثلثی و ب) شار پله ای
- ۱۲۶ شکل (۶-۱۵): روند همگرایی تابع هدف برای کنترل سرعت سطح مشترک
- ۱۲۷ شکل (۶-۱۶): کنترل سرعت سطح مشترک برای مواد خالص الف) مقایسه شار بدست آمده با سایر پژوهشها ب) مقایسه مکان سطح مشترک در دو حالت مطلوب و محاسبه شده
- ۱۲۸ شکل (۶-۱۷): موقعیت سطح مشترک برای مقادیر مختلف سرعت مرز مشترک
- ۱۲۹ شکل (۶-۱۸): مقایسه شار حرارتی تحلیلی و عددی برای $V = 1$.
- ۱۳۰ شکل (۶-۱۹): مقایسه شار حرارتی تحلیلی و عددی برای مواد با خواص فیزیکی (عدد استفان) متفاوت
- ۱۳۰ شکل (۶-۲۰): مقایسه موقعیت مطلوب و کنترل شده سطح مشترک برای مواد خالص با خواص فیزیکی (عدد استفان) متفاوت
- ۱۳۲ شکل (۶-۲۱): مقایسه مکانهای مطلوب و محاسبه شده سطح مشترک برای مقادیر مختلف شتاب سطح مشترک
- ۱۳۳ شکل (۶-۲۲): مقایسه شار حرارتی بدست آمده برای مقادیر مختلف شتاب سطح مشترک
- ۱۳۳ شکل (۶-۲۳): مقایسه نرخ همگرایی تابع هدف برای مقادیر مختلف شتاب سطح مشترک
- ۱۳۷ شکل (۶-۲۴): مقایسه شار حرارتی مثلثی برای اندازه های مختلف شبکه محاسباتی
- ۱۳۷ شکل (۶-۲۵): نرخ همگرایی تابع هدف برای مقادیر مختلف اندازه شبکه محاسباتی
- ۱۳۹ شکل (۶-۲۶): مقایسه شار حرارتی بدست آمده و مطلوب برای موقعیتهای مختلف حسگر، الف) شار مثلثی ب) شار پله ای
- ۱۴۰ شکل (۶-۲۷): مقایسه روند همگرایی تابع هدف برای موقعیتهای مختلف حسگر، الف) شار مثلثی ب) شار

- پله ای
- شکل (۶-۲۸): نمونه ای از دماهای اندازه گیری شده و اغتشاش یافته، الف) شار مثلثی ب) شار پله ای ۱۴۲
- شکل (۶-۲۹): شار حرارتی مطلوب و محاسبه شده برای مقادیر مختلف اغتشاش در داده های ورودی، الف) شار مثلثی ب) شار پله ای ۱۴۳
- شکل (۶-۳۰): نرخ کاهش تابع هدف برای مقادیر مختلف اغتشاش در داده های ورودی، الف) شار مثلثی ب) شار پله ای ۱۴۴
- شکل (۶-۳۱): مکان مطلوب و محاسبه شده سطوح مشترک برای مقادیر متفاوت اغتشاشات ورودی و شار حرارتی پله ای ۱۴۵
- شکل (۶-۳۲): مقایسه شار حرارتی مطلوب و محاسبه شده برای آلیاژ Al-Cu ۱۴۶
- شکل (۶-۳۳): مقایسه مکان مطلوب و محاسبه شده سطوح مشترک برای Al-Cu ۱۴۷
- شکل (۶-۳۴): مقایسه الف) شار حرارتی در دو مرز، ب) مکانهای مطلوب و کنترل شده سطوح مشترک و ج) نرخ کاهش تابع هدف برای $V_l = 2, V_s = 0.5$ ۱۴۹
- شکل (۶-۳۵): مقایسه الف) شار حرارتی در دو مرز، ب) مکانهای مطلوب و کنترل شده سطوح مشترک و ج) نرخ کاهش تابع هدف برای $V_l = 2, V_s = 1$ ۱۵۰
- شکل (۶-۳۶): مقایسه الف) شار حرارتی در دو مرز، ب) مکانهای مطلوب و کنترل شده سطوح مشترک و ج) نرخ کاهش تابع هدف برای $V_l = 2, V_s = 1.25$ ۱۵۱
- شکل (۶-۳۷): مقایسه الف) شار حرارتی در دو مرز، ب) مکانهای مطلوب و کنترل شده سطوح مشترک و ج) نرخ کاهش تابع هدف برای $V_l = 2, V_s = 2$ ۱۵۲
- شکل (۶-۳۸): مقایسه شار حرارتی در مرزهای پایینی و بالایی برای ضخامتهای مختلف ناحیه میانی ۱۵۳
- شکل (۶-۳۹): مقایسه بین الف) شار حرارتی اعمال شده برای تولید داده ها و ب) شار محاسبه شده از حل معکوس ۱۵۵
- شکل (۶-۴۰): مقایسه شار حرارتی محاسبه شده و مطلوب در زمانها و مکانهای مختلف ۱۵۶
- شکل (۶-۴۱): مقایسه بین کانتورهای شار حرارتی الف) مطلوب، ب) محاسبه شده ۱۵۶
- شکل (۶-۴۲): مکانهای مطلوب و محاسبه شده سطح مشترک در مختصات دو بعدی ۱۵۶
- شکل (۶-۴۳): نرخ کاهش تابع هدف برای مختصات دو بعدی و شار حرارتی رابطه (۶-۱۰) ۱۵۷
- شکل (۶-۴۴): مقایسه بین شار حرارتی محاسبه شده الف) $Ste = 1$ ب) $Ste = 1.5$ ۱۵۷
- شکل (۶-۴۵): مکانهای مطلوب و محاسبه شده سطح مشترک برای $Ste = 1$ ۱۵۸

- ۱۵۹ شکل (۶-۴۶): مقایسه بین کانتورهای دما در حالت مطلوب و محاسبه شده برای $Ste = 0.5$
- ۱۶۰ شکل (۶-۴۷): مقایسه بین کانتورهای دما در حالت مطلوب و محاسبه شده برای $Ste = 1$
- ۱۶۱ شکل (۶-۴۸): شار حرارتی محاسبه شده در مختصات دو بعدی برای سرعت ثابت سطح مشترک
الف) $Ste = 0.5$ ب) $Ste = 1.5$
- ۱۶۱ شکل (۶-۴۹): مکانهای مطلوب و محاسبه شده در مختصات دو بعدی برای سرعت ثابت سطح مشترک
الف) $Ste = 0.5$ ب) $Ste = 1.5$
- ۱۶۲ شکل (۶-۵۰): مقایسه کانتورهای دما برای سرعت ثابت سطح مشترک و اعداد استفان مختلف
- ۱۶۳ شکل (۶-۵۱): شار حرارتی محاسبه شده در مختصات دو بعدی و سرعت سطح مشترک طبق رابطه
(۶-۱۳)
- ۱۶۳ شکل (۶-۵۲): مکانهای مطلوب و محاسبه شده سطح مشترک در مختصات دو بعدی و سرعت سطح
مشترک سینوسی
- ۱۶۴ شکل (۶-۵۳): کانتورهای دما برای شکل سینوسی سطوح مشترک مواد خالص
- ۱۶۵ شکل (۶-۵۴): نرخ کاهش تابع هدف در مختصات دو بعدی و سرعت سطح مشترک طبق رابطه (۶-۱۳)
- ۱۶۶ شکل (۶-۵۵): شار حرارتی محاسبه شده برای آلیاژها در مختصات دو بعدی و سرعت ثابت سطوح
مشترک الف) شار در مرز پایینی ب) شار در مرز بالایی
- ۱۶۷ شکل (۶-۵۶): مکانهای مطلوب و محاسبه شده سطوح مشترک برای آلیاژها در مختصات دو بعدی و
سرعت ثابت سطوح مشترک
- ۱۶۸ شکل (۶-۵۷): کانتورهای دما برای سرعت ثابت سطوح مشترک آلیاژها
- ۱۶۹ شکل (۶-۵۸): نرخ کاهش تابع هدف برای آلیاژها در مختصات دو بعدی و سرعت ثابت سطوح مشترک
- ۱۷۰ شکل (۶-۵۹): شار حرارتی محاسبه شده برای آلیاژها در مختصات دو بعدی و شکل سینوسی سطوح
مشترک الف) شار در مرز پایینی ب) شار در مرز بالایی
- ۱۷۱ شکل (۶-۶۰): مکانهای مطلوب و محاسبه شده سطوح مشترک برای آلیاژها در مختصات دو بعدی و
شکل سینوسی سطوح مشترک
- ۱۷۲ شکل (۶-۶۱): کانتورهای دما برای شکل سینوسی سطوح مشترک آلیاژها
- ۱۸۲ شکل الف-۱): مقایسه بین نتایج عددی حاصل از روش رانج کوتا و حل دقیق تابع مدل
- ۱۸۲ شکل الف-۲): مرتبه دقت طرح پیشروی زمانی برای معادله مدل
- ۱۸۳ شکل الف-۳): مقایسه خطای حاصل از روش تفاضل محدود فشرده و روش FTCS برای معادله مدل

فهرست جداول

صفحه

۲۱	جدول (۱-۱): خلاصه پژوهش‌های گذشته و مقایسه با رساله حاضر
۵۴	جدول (۱-۴): دسته بندی روشهای بهینه سازی
۹۷	جدول (۱-۵): طرح پیشروی زمانی رانج کوتای مرتبه سوم
۱۰۶	جدول (۱-۶): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای مورد نیاز برای شبکه های مختلف
۱۰۹	جدول (۲-۶): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای مورد نیاز برای حدسهای اولیه متفاوت
۱۱۲	جدول (۳-۶): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای مورد نیاز برای مکانهای حسگر متفاوت
۱۱۵	جدول (۴-۶): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای مورد نیاز برای اعداد استفان مختلف
۱۱۹	جدول (۵-۶): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای مورد نیاز در حالت اغتشاش داده های ورودی
۱۲۲	جدول (۶-۶): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای مورد نیاز برای دماهای اولیه متفاوت
۱۳۱	جدول (۷-۶): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای مورد نیاز در کنترل سرعت برای اعداد استفان متفاوت
۱۳۱	جدول (۸-۶): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای مورد نیاز در کنترل سرعت برای سرعتهای مختلف
۱۳۲	جدول (۹-۶): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای مورد نیاز در کنترل شتابهای مختلف
۱۳۵	جدول (۱۰-۶): خواص ترموفیزیکی آلیاژهای استفاده شده
۱۳۸	جدول (۱۱-۶): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای لازم در انجماد آلیاژها برای شبکه های مختلف
۱۳۸	جدول (۱۲-۶): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای لازم در انجماد آلیاژها برای موقعیتهای مختلف حسگرها
۱۴۵	جدول (۱۳-۶): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای مورد نیاز در انجماد آلیاژها در حضور اغتشاش در دادهای ورودی
۱۴۶	جدول (۱۴-۶): مقادیر تابع هدف و متوسط خطا در انجماد آلیاژ آلومینیوم و برای موقعیتهای مختلف قرارگیری حسگرها
۱۵۳	جدول (۱۵-۶): مقادیر تابع هدف و متوسط خطا در کنترل سرعت سطح مشترک آلیاژها و برای سرعتهای مختلف
۱۸۱	جدول (الف-۱): طرح پیشروی زمانی رانج کوتای مرتبه سوم در یک گام زمانی

فهرست علائم

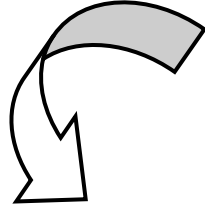
شتاب سطح مشترک	a
طول قالب در جهت y	b
ظرفیت گرمایی ویژه	c
طول قالب در جهت x	d
جهت کاهش	d^k
خطای RMS	e_{RMS}
نسبت جامد	f_s
گرادیان دمای سطح مشترک	G
آنتالپی	H
ضریب هدایت حرارتی	k
گرمای نهان	L
تعداد بازه های زمانی	M
تعداد بازه های زمانی	N
شار حرارتی	q
شار حرارتی سمت جامد	q_s
شار حرارتی سمت مایع	q_l
تابع هدف	$S[q]$
موقعیت سطح مشترک	$s(t)$
عدد استفان	Ste
دما	T
دمای ذوب	T_f
دمای سالیدوس	T_{sol}
دمای لیکیدوس	T_{liq}
دمای اولیه	T_i
دمای مرجع	T_0

زمان	t
زمان نهایی	t_f
سرعت سطح مشترک	V
سرعت سطح مشترک سالیدوس	V_s
سرعت سطح مشترک لیکیدوس	V_l
دمای اندازه گیری شده	Y

علائم یونانی

چگالی	ρ
مقدار کوچک	ε
ضریب نفوذ حرارتی	α
گرادیان تابع هدف	$\nabla S[q]$
ضریب مزدوج	γ
گام جستجو	β
متغیر حساسیت	ΔT
ضریب لاگرانژ (متغیر الحاقی)	λ
انحراف معیار داده های اندازه گیری شده	σ
تابع دیراک دلتا	$\delta(\cdot)$
سطح مشترک سالیدوس	Γ_s
سطح مشترک لیکیدوس	Γ_l
خطای اندازه گیری	ω

فصل اول



مقدمه

۱-۱- مسائل معکوس حرارتی

مسائل معکوس حرارتی^۱ در سالهای اخیر مورد توجه علوم مختلفی از جمله مکانیک، هوافضا، ریاضی و فیزیک، شیمی و علوم هسته ای بوده است. مبنای مسائل معکوس حرارتی، اندازه گیری دما و یا شار حرارتی است که برای تخمین مقادیر مجهولی در تحلیل یک مسأله دخیل هستند. به عنوان مثال، مسائل معکوس هدایت حرارتی (IHCP)، مربوط به تخمین یک شرط مرزی مجهول (شار حرارتی در یک مرز) با استفاده از دماهای اندازه گیری شده در داخل دامنه مورد نظر هستند. بنابراین در مسائل مستقیم حرارتی، علت (شار حرارتی در مرز)، جزو معلومات بوده و اثر (میدان دما در داخل جسم)، بوسیله حل معادلات حاکم مشخص خواهد شد، اما در مسائل معکوس حرارتی به تخمین علت مجهول با استفاده از اثر معلوم یا اثر مطلوب پرداخته می شود.

مسائل معکوس حرارتی از نظر ریاضی جزو مسائل ناهنجار^۲ طبقه بندی می شوند چون ممکن است حل چنین مسائلی ناپایدار شود و یکتایی جواب فقط برای حالات خاصی قابل اثبات است. همچنین تأثیر خطاهای پارامترهای ورودی در پاسخ های خروجی شدید بوده و حل آنها به ورودی بسیار حساس است و به همین جهت برای دستیابی به پاسخ باید به تکنیک های ویژه ای متوسل شد [۱، ۲].

به عنوان مثالی از مسائل معکوس حرارتی، مسأله هدایت حرارتی یک بعدی گذرا در یک دیوار به طول L را در نظر بگیرد. توزیع دمای اولیه دیوار $F(x)$ بوده و برای زمانهای $t > 0$ یک شار حرارتی $f(t)$ در مرز $x = 0$ اعمال می شود. همچنین مرز $x = L$ در دمای ثابت T_L نگه داشته می شود. صورت ریاضی مسأله فوق به شکل زیر خواهد بود [۳]:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad \text{in} \quad 0 < x < L \quad \text{For } t > 0$$

¹ Inverse Heat Transfer Problems (IHCP)

² Ill-Posed

$$-k \frac{\partial T}{\partial x} = f(t) \quad \text{at} \quad x = 0 \quad \text{For } t > 0$$

$$T = T_L \quad \text{at} \quad x = L \quad \text{For } t > 0$$

$$T = F(x) \quad \text{for} \quad t = 0 \quad \text{In } 0 < x < L$$

برای حالتی که شرایط مرزی $f(t)$ و T_L ، شرط اولیه $F(x)$ و خواص ترموفیزیکی ρ ، c_p و k مشخص باشند مساله فوق به تعیین توزیع دمای $T(x,t)$ در داخل جسم مورد نظر محدود می شود که جزو مسائل مستقیم طبقه بندی می گردد.

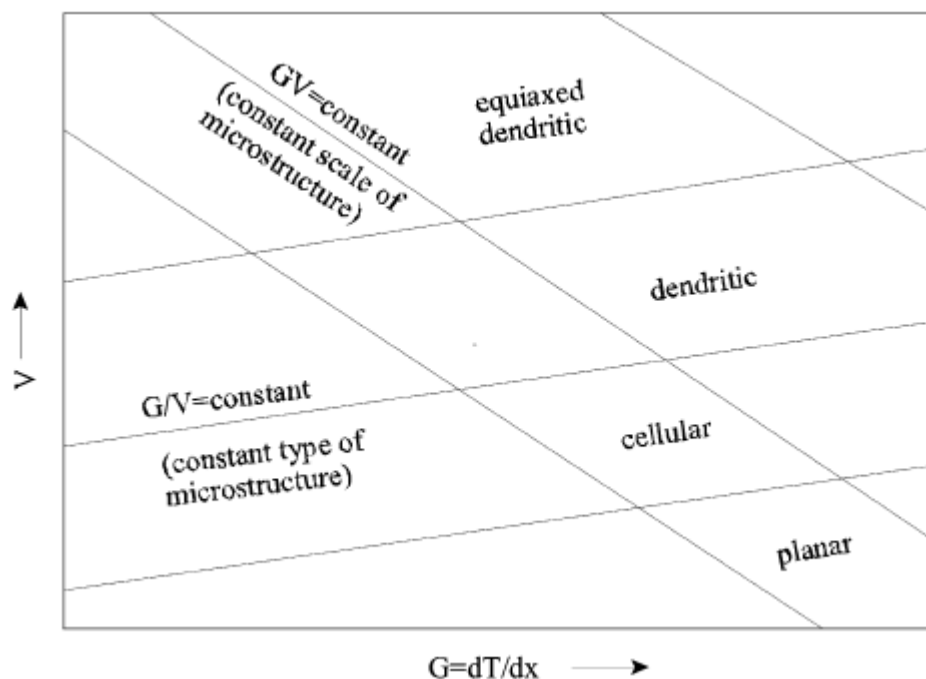
حال مساله قبلی را به گونه ای در نظر بگیرید که به عنوان مثال، شرط مرزی $f(t)$ مجهول باشد اما سایر پارامترهای مساله معلوم باشند. هدف مسأله معکوس محاسبه شرط مرزی $f(t)$ می باشد که این امر نیازمند معلوم بودن توزیع دمای $T(x,t)$ در داخل جسم است. این توزیع دمای $T(x,t)$ می تواند به وسیله اندازه گیری در نقاط مختلف جسم و در زمانهای متفاوت مشخص شود. پس مسأله معکوس شامل تخمین تابع $f(t)$ به عنوان شرط مرزی برای رسیدن به توزیع دمای اندازه گیری شده است. مسأله معکوس فوق شامل تخمین شرط مرزی $f(t)$ بوده اما در دسته ای دیگر از مسائل، شرایط اولیه و خواص ترموفیزیکی نیز می توانند به عنوان مجهول مسأله در نظر گرفته شوند.

در دسته ای دیگر از مسائل معکوس، هدف، طراحی و کنترل سیستم های حرارتی می باشد. در این مسائل انتظار خاصی از سیستم مورد نظر است. مثلاً خواهان اعمال شرایط دمایی و شار حرارتی خاصی روی سطح مشخصی هستیم. هدف این مسائل، یافتن ورودی ها برای دستیابی به خروجی مطلوب می باشد. به عبارت دیگر شرایط روی سطح هایی که سطح هدف نام دارند معلوم است، اما شرایط مجهول روی سایر قسمت های مسأله باید تعیین شوند.

۱-۲- مسائل معکوس حرارتی همراه با تغییر فاز

مسائل شامل تغییر فاز همراه با جذب یا آزاد شدن انرژی (ذوب یا انجماد) هستند. در سطح مشترک موجود در این فرآیندها در حالیکه دو فاز با خواص ترموفیزیکی متفاوت از یکدیگر جدا می شوند، حرارت نهان جذب یا آزاد می شود. در مسائل معکوس شامل تغییر فاز، دما و سرعت در سطح مشترک جامد - مایع مشخص هستند و دما یا شار حرارتی در مرز برای داشتن چنین دما و سرعتی در سطح مشترک از مجهولات مسأله است. یکی از مهمترین پارامترها در ریخته گری و رشد کریستالها، سرعت سطح مشترک جامد - مایع است که کیفیت ماده منجمد شده (ریخته شده) را تعیین می کند. علاوه بر این ترکیب سرعت و گرادیان دما در سطح مشترک، اندازه و نوع ریز ساختارها را در یک ماده در حال انجماد مشخص می کنند [۴]. به عنوان مثال شکل (۱-۱) ریز ساختارهای متفاوتی را در انجماد آلیاژها با تغییرات سرعت سطح مشترک V ، و گرادیان دمای سطح مشترک G نشان می دهد. ملاحظه می شود که با کنترل این پارامترها می توان به موادی با کیفیت های مطلوب دست پیدا کرد. پس هدف در حل مسائل کنترل انجماد آلیاژها و مواد خالص، تعیین شرایط مرزی مجهول برای دستیابی به سرعت و گرادیان دمای معلوم در سطح مشترک است.

کنترل گرادیان دما و سرعت در سطح مشترک، هم برای آلیاژها و هم برای مواد خالص می تواند صورت گیرد. در انجماد مواد خالص، دمای سطح مشترک ثابت بوده و انجماد در یک دمای ثابت (دمای ذوب) روی می دهد و مسأله تنها شامل دو فاز مایع و جامد خواهد بود. اما در انجماد آلیاژها، انجماد در یک دمای ثابت رخ نداده و در یک بازه دمایی اتفاق می افتد و علاوه بر فاز جامد و مایع، فاز سوم به نام ناحیه میانی حضور خواهد داشت که یک ناحیه دو فاز (ترکیبی از فاز جامد - مایع) بوده و خواص در این ناحیه دارای مقادیر ثابتی نخواهند بود. بنابر این در انجماد آلیاژها ناحیه سوم هم حضور خواهد داشت که بایستی در تحلیل مسائل معکوس و کنترل سطح مشترک لحاظ شود.



شکل (۱-۱): ساختارهای مختلف سطح مشترک در گرادیان های مختلف دما [۵]

پژوهشهای صورت گرفته در مورد مسائل کنترل سطح مشترک در آلیاژها فاقد این قسمت بوده و کنترل سطح مشترک بدون در نظر گرفتن اثرات ناحیه میانی صورت گرفته است. در این پایان نامه تلاش بر این است که کنترل سطح مشترک جامد - مایع با حضور ناحیه میانی انجام پذیرد، که از این لحاظ یک کار جدید محسوب می شود.

۱-۳- مروری بر پژوهشهای گذشته

مسائل معکوس انتقال حرارتی که شامل تغییر فاز (ذوب یا انجماد) هستند را می توان در گروههای زیر طبقه بندی نمود :

۱. مسأله شامل تخمین خواص و حرارت نهان در طی فرایند انجماد.
۲. مسأله انجماد که شامل محاسبه سطح مشترک جامد - مایع و محاسبه شار حرارتی مرزی با استفاده از اندازه گیری دما در ناحیه مایع و جامد است.

۳. مسأله طراحی و کنترل انجماد که شامل محاسبه شرایط مرزی لازم برای رسیدن به حرکت (سرعت) و گرادیان دمای مطلوب، در سطح مشترک است.

۴. مسأله تخمین مقاومت حرارتی تماسی یا ضریب انتقال حرارت بین مذاب و قالب در طی فرآیندهای انجماد.

پژوهشهای صورت گرفته که در چهار گروه فوق طبقه بندی شده اند هم مربوط به انجماد آلیاژها و هم مواد خالص هستند. از میان ۴ دسته فوق، گروه سوم از اهمیت فوق العاده ای در فرآیندهای انجماد برخوردار است، چرا که با کنترل پارامترهای مؤثر بر انجماد مواد خالص یا آلیاژها می توان به ماده ای با کیفیت و شکل مطلوب و در طی فرآیندهای جوشکاری به یک اتصال جوش مقاوم و مطمئن دست یافت. مهمترین پارامترهایی که بر کیفیت قطعه ریخته شده مؤثر هستند، سرعت سطح مشترک جامد - مایع و گرادیان دمای سطح مشترک در سمت جامد یا مایع هستند که باعث افزایش مقاومت قطعه در مقابل تنشها و خستگی حرارتی می شوند. در ادامه، ابتدا نمونه هایی از تحقیقاتی که در زمینه های مختلف مرتبط با مساله معکوس انجماد در سالهای مختلف انجام پذیرفته معرفی و سپس تاریخچه مسائل مربوط به کنترل سطح مشترک در فرآیندهای انجماد به تفصیل بررسی خواهد شد.

در سال ۱۹۸۸، زاباراس^۱ و همکارانش [۶] با استفاده از روش انتگرالی، مسأله معکوس شامل تغییر فاز را حل کرده اند. این روش برای یافتن شرایط مرزی مناسب برای رسیدن به سرعت مطلوب سطح مشترک مورد استفاده قرار گرفته است. همچنین ذکر شده که می توان با این روش و استفاده از دماهای اندازه گیری شده توسط ترموکوپل، حرکت سطح مشترک را برای حالتی که شار سطوح معلوم است، پیش بینی نمود.

¹ Zabaras

همچنین رن^۱ [۷] نیز با استفاده از روش انتگرالی بالانس حرارتی به حل مسأله معکوس انجماد پرداخته است. در این تحقیق نیز مسأله یک بعدی انجماد برای هر دو ناحیه جامد و مایع در حالتی که مکان سطح مشترک به صورت $S = 1 - (\beta\tau)^{\frac{1}{n}}$ در نظر گرفته شود حل شده است.

تادرداری^۲ و همکارانش [۸] از مسأله انتقال حرارت معکوس شامل تغییر فاز برای پیش بینی رشد لایه های محافظ تشکیل شونده روی دیوارهای آجری کوره های القایی استفاده کرده اند. این لایه های محافظ از خورده شدن دیوارها توسط گدازه ها جلوگیری می کنند. در این پژوهش با استفاده از شرایط محیط خارجی کوره و اندازه گیری دما در یک نقطه داخل دیوار آجری و با استفاده از روش گرادیان مزدوج، ضخامت و حرکت لایه های محافظ پیش بینی شده و اثر پارامترهای مختلف از جمله موقعیت ترموکوپل روی آن بررسی می شود.

مراجع [۹، ۱۰] برای دو حالت خاص، مسأله معکوس انجماد را به طور تحلیلی ارزیابی نموده اند. برای حالتی که مکان سطح مشترک به صورت $\xi(t) = t$, $\xi(t) = 2 - \sqrt{2}$, $\xi(t) = 2 - \sqrt{2}$ باشد، جواب دقیق مسأله معکوس استفان برای میدان دما و شرایط مرزی به صورت زیر خواهد بود (برای ماده خالص با خواص ثابت).

$$u(x, t) = e^{-x}, u(x, t) = \exp(1 - 2^{-1/2}(1+x) + t/2) - 1$$

$$g(t) = e^t, g(t) = \exp(1 - 2^{-1/2} + t/2) - 1$$

اسلودیکا و شپر^۳ [۱۱] نیز به ارزیابی ضریب انتقال حرارت در انجماد آلیاژها پرداخته اند. روان^۴ و همکارانش [۱۲] نیز با استفاده از دماهای اندازه گیری شده در نواحی جامد و مایع، ضریب انتقال حرارت تماسی بین قالب و قطعه در انجماد آلیاژها را محاسبه نموده اند.

¹ Ren

² Tadrari

³ Slodicka and Schepper

⁴ Ruan

تلجکو [۱۳] با استفاده از روش انتقال حرارت معکوس در فرایندهای انجماد، به طور همزمان به تعیین ضریب هدایت حرارتی و حرارت نهان در طی انجماد فولاد پرداخته است. نتایج محاسبه ضریب انتقال حرارت هدایتی با نتایج تجربی مقایسه شده و دقت خوبی گزارش شده است.

ماجرزاک^۱ و همکارانش [۱۴] نیز ضریب انتقال حرارت هدایتی و گرمای ویژه قالب در یک سیستم ریخته گری را به طور همزمان بوسیله مسائل معکوس محاسبه کرده اند.

مرجع [۱۵] نیز ضریب انتقال حرارت را برای آلیاژهای آلومینیوم-سیلیکون با درصدهای متفاوت در انجماد رو به پایین و همچنین رو به بالا بدست آورده است. این ضریب با استفاده از نتایج تجربی و روش معکوس محاسبه شده است.

مراجع [۱۶، ۱۷] با استفاده از نتایج تجربی (دماهای اندازه گیری شده در مذاب و قالب) و روش معکوس، ضریب انتقال حرارت بین قالب و قطعه را برای آلیاژهای Al-Cu و Sn-Pb محاسبه کرده است. اثر قرار گیری قالب (عمودی یا افقی)، ترکیب آلیاژ، جنس و ضخامت قالب و همچنین اثرات فوق گرم شدن مذاب نیز در این تحقیق بررسی شده است.

مراجع [۱۸-۲۷] نیز از جمله مقالاتی هستند که در زمینه تعیین ضریب انتقال حرارت بین قالب و قطعه برای مواد خالص و آلیاژهای مختلف به چاپ رسیده اند. در تمام کارهای مذکور اثر ناحیه میانی در نظر گرفته نشده است.

آغاز مسأله کنترل انجماد در سال ۱۹۹۲ را می توان کارهای زاباراس دانست. وی و همکارانش [۲۸، ۲۹] در سالهای ۱۹۹۲ و ۱۹۹۴ به محاسبه شار حرارتی یا دمای مرزی برای یک جسم در حال انجماد با سرعت مطلوب سطح مشترک پرداختند. مسأله انجماد برای حالت تک جهتی با یک شار حرارتی سینوسی در مرز در نظر گرفته شده و سرعت یا موقعیت مطلوب سطح مشترک از حل مسأله مستقیم بدست آمده

¹ Majchrzak

است. در این مقاله برای حل مسأله ناهنجار معکوس از روش اطلاعات آینده بک^۱ و منظم سازی مکانی استفاده شده است.

در سال ۱۹۹۵، زاباراس و کانگ^۲ [۳۰] به کنترل سرعت سطح مشترک در یک هندسه دو بعدی پرداختند. در این کار نیز هدف یافتن تاریخچه زمانی شار حرارتی مرزی برای دست یابی به سرعت مطلوب سطح مشترک است که برای بهینه سازی تابع هدف که به صورت زیر تعریف شده از روش الحاقی و الگوریتم روش گرادیان مزدوج^۳ استفاده شده است.

$$S(q) = \frac{1}{2} \int_0^{t_{\max}} \int_{\partial\Omega_f(t)} (T_m - T(x, t; q))^2 d\Gamma dt$$

که در آن $T(x, y; q)$ توزیع دمای محاسبه شده در سطح مشترک و T_m دمای ذوب یا انجماد داده شده هستند. مسأله برای دو حالت مختلف از انجماد یک ماده خالص حل شده است. حالت اول مربوط به انجماد تک جهتی و حالت دوم مربوط به انجماد در یک گوشه بی نهایت است. در حالت اول سرعت مطلوب سطح مشترک از حل مسأله مستقیم با شار حرارتی سینوسی در مرز بدست آمده است. همچنین در این مقاله بیان شده است که این روش بهینه سازی تابع هدف (روش الحاقی و CGM) دارای یک حل همگرا در زمانهای طولانی تر نسبت به مقاله قبلی است. هنگامی که مقدار حدس اولیه از مقدار واقعی حل دور باشد بدلیل شرایط پایانی در مسأله الحاقی، دقت و نرخ همگرایی حل کاهش پیدا می کند.

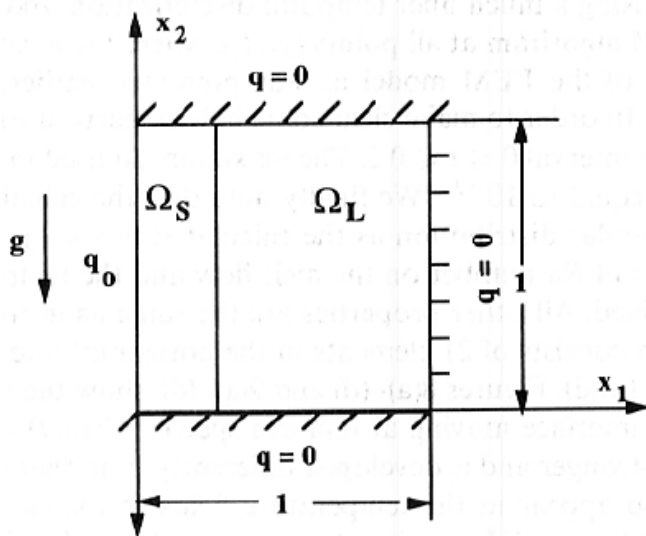
زاباراس و همکارانش در ادامه در سالهای ۱۹۹۵ و ۱۹۹۷ [۳۱، ۳۲] با استفاده از روش الحاقی و الگوریتم گرادیان مزدوج به کنترل سطح مشترک جامد - مایع در حضور جابجایی طبیعی پرداختند. در این تحقیق مسأله معکوس فقط برای فاز جامد حل شده و جریان جابجایی طبیعی در فاز مایع به صورت مستقیم حل شده و از نتایج آن برای حل مسأله معکوس در ناحیه جامد استفاده شده است. هدف از حل مسأله

¹ Beck's Future Information

² Zabaras and Kang

³ Conjugate Gradient Method (CGM)

معکوس، رسیدن به سرعت مطلوب سطح مشترک در انجماد آلومینیوم خالص بیان شده است و برای این منظور از روش (FTFET) Front Tracking Finite Element Technique استفاده شده است. بهینه سازی تابع هدف با استفاده از الگوریتم گرادیان مزدوج و با حل مسائل مستقیم، حساسیت و الحاقی صورت گرفته است. هندسه مورد استفاده این مقاله در شکل (۲-۱) ملاحظه می شود.



شکل (۲-۱): انجماد تک جهتی به همراه جابجایی طبیعی [۳۱]

محاسبه شرایط مرزی در دیوار سمت چپ برای سرعت بدون بعد سطح مشترک برابر یک انجام شده است. در تحقیق حاضر فقط سرعت سطح مشترک به وسیله شار مرزی در $x = 0$ کنترل شده و پیشنهاد شده است که برای کنترل شار حرارتی در سطح مشترک از پارامتر کنترل دیگری مانند شار در $x = 1$ ، نیروهای الکترومغناطیسی و یا یک چشمه حرارتی در قسمت مایع استفاده شود.

در سال ۱۹۹۸، یانگ و زاباراس^۱ [۳۳] در توسعه تحقیق قبلی خود علاوه بر حل مسأله معکوس در ناحیه جامد به حل مسأله معکوس در ناحیه مایع نیز در حضور جابجایی طبیعی پرداخته اند. در این پژوهش از الگوریتم اجزای محدود و استفاده از روش الحاقی و گرادیان مزدوج برای طراحی مسأله انجماد استفاده

¹ Yang and Zabararas

شده است. علاوه بر کنترل سرعت سطح مشترک، کنترل گرادیان دمای سطح مشترک نیز صورت پذیرفته است.

هدف این تحقیق یافتن شرایط مرزی مناسب برای کاهش اثرات جابجایی طبیعی روی سطح مشترک و رسیدن به سرعت و گرادیان دمای مطلوب در سطح مشترک برای یک ماده خالص عنوان شده است. چون هدف از کار حاضر حذف اثر جابجایی طبیعی روی سطح مشترک و رسیدن به سرعت و گرادیان دمای مشخص در سطح مشترک عنوان شده است، مقادیر مطلوب و یا طراحی سرعت و شار مرزی سطح مشترک برای حالتی انتخاب شده اند که هیچگونه جابجایی طبیعی وجود نداشته و فقط هدایت حرارتی خالص حضور دارد. در این حالت سطح مشترک به صورت عمودی حرکت می کند. دامنه زمانی برابر با $t_f = 0.36$ و محاسبات بعد از ۲۰۰ تکرار بر پایه $\varepsilon = 3 \times 10^{-5}$ متوقف شده اند.

برای تعیین اعتبار، نتایج بدست آمده از حل معکوس برای مرزها به عنوان ورودی ها (شرایط مرزی) بکار برده شدند تا نتایج حاصل از حل مستقیم این حالت با مقادیر مطلوب مقایسه شوند. بدین منظور شار بهینه بدست آمده $\bar{q}_o(y, t)$ روی مرز $x=1$ و دمای بدون بعد $\theta_g = -3.175$ در مرز $x=0$ اعمال شده و سایر مرزها آدیاباتیک در نظر گرفته شدند و حل این مسأله به عنوان حل طراحی بهینه^۱ معرفی شد. نتایج این حل با حالت اولیه (بدون کنترل) مقایسه شده است.

در همان سال، یانگ و زاباراس [۳۴] به توسعه پژوهش قبلی پرداخته و مسأله را برای یک آلیاژ دوتایی (محلول $\text{NH}_4\text{Cl} - \text{H}_2\text{O}$) حل کرده اند. ماده یا آلیاژ مورد استفاده محلول NH_4Cl و آب با غلظت وزنی ۱.۵٪ و با دمای اولیه ای 20° بالاتر از دمای ذوب است که در یک قالب مستطیلی به ارتفاع $h=1$ و عرض $w=0.5$ قرار گرفته است. در این تحقیق سرعت مطلوب سطح مشترک به صورت زیر تعریف شده است.

¹ Optimal Design

$$v_f(t) = \begin{cases} v_0, & 0 \leq t \leq t_{mid}, \\ v_0 \frac{t_{max} - t}{t_{max} - t_{mid}}, & t_{mid} < t \leq t_{max} \end{cases}$$

$$v_0 = 0.2, \quad t_{mid} = 1.5, \quad t_{max} = 2.0$$

و مقدار حدس اولیه برای $q_{ol}(y, t) = 1$ در الگوریتم گرادیان مزدوج انتخاب شده است. در این مقاله اشاره ای به آلیاژهای فلزی و همچنین نیمه هادیها نشده و علاوه بر این سخنی از ناحیه دوفازی^۱ (میانی) نیز به میان نیامده است.

در سال ۲۰۰۱، سامپاس^۲ و زاباراس [۳۵] نیز مسأله معکوس در ناحیه جامد و مایع برای حصول سرعت و گرادیان دمای مطلوب در سطح مشترک برای یک قالب روباز، بدون در نظر گرفتن ناحیه دوفازی حل کرده اند. ماده مورد استفاده در این پژوهش آلیاژ Sb-8.6% Ge است. سپس با بدست آمدن شرایط مرزی بهینه^۳، از آنها برای حل مسأله مستقیم استفاده شده است.

در این پژوهش عنوان شده است که نیاز به روشهای محاسباتی دیگر و جدیدتری برای حل مسأله معکوس وجود دارد. علاوه بر این ذکر شده که برای افزایش دقت روشهای عددی مشهای ریزتری در بازه مکانی مورد نیاز است که این روشها می تواند به منظور طراحی فرآیندهای انجماد با حضور ناحیه دوفازی توسعه داده شود.

در پژوهشهای دیگری که توسط زاباراس و همکارانش صورت گرفته است از میدانهای مغناطیسی و گرادیانهای میدان مغناطیسی به عنوان پارامتری جهت کنترل سرعت انجماد استفاده شده است که به وسیله آن ها جریان جابجایی طبیعی ناشی از اختلاف چگالی حذف شده و سطح مشترکی صفحه ای بین جامد و مایع با سرعت مطلوب ایجاد می شود. در این تحقیق [۳۶] که در سال ۲۰۰۱ انجام پذیرفته است، میدان مغناطیسی اعمال شده روی قالب و مذاب ثابت بوده و هدف، یافتن تاریخچه زمانی شرایط مرزی

¹ Mushy Zone

² Sampath

³ Optimal

حرارتی است به گونه ای که منجر به حذف جابجایی طبیعی و ایجاد سطح مشترکی صفحه ای با سرعت مطلوب شود. محاسبات برای ماده ژرمانیم انجام گرفته و نتایج حاصل از حل مستقیم با شار بهینه نشان دهنده نزدیک شدن سطح مشترک به حالت مطلوب است.

در تحقیقات دیگری که توسط زاباراس و همکارانش [۳۷, ۳۸] در سال ۲۰۰۵ صورت گرفته است، با در نظر گرفتن شرایط مرزی دمایی (حرارتی) ثابت در مرزهای قالب، هدف یافتن میدان مغناطیسی بهینه ای است که منجر به حذف اثرات جابجایی و رسیدن به سرعت مطلوب رشد سطح مشترک در حالت صفحه ای شود. مرجع [۳۸] مربوط به حل مذکور برای مواد رسانا و مرجع [۳۷] مربوط به مواد نارسانا می باشند. هر دو حالت مواد خالص و آلیاژها در این دو مقاله بررسی شده اند. مسأله معکوس برای یافتن میدان مغناطیسی مناسب فقط در ناحیه جامد و مایع حل شده و اثر ناحیه دوفازی در این مقالات نیز مانند مقالات قبلی بررسی نشده است.

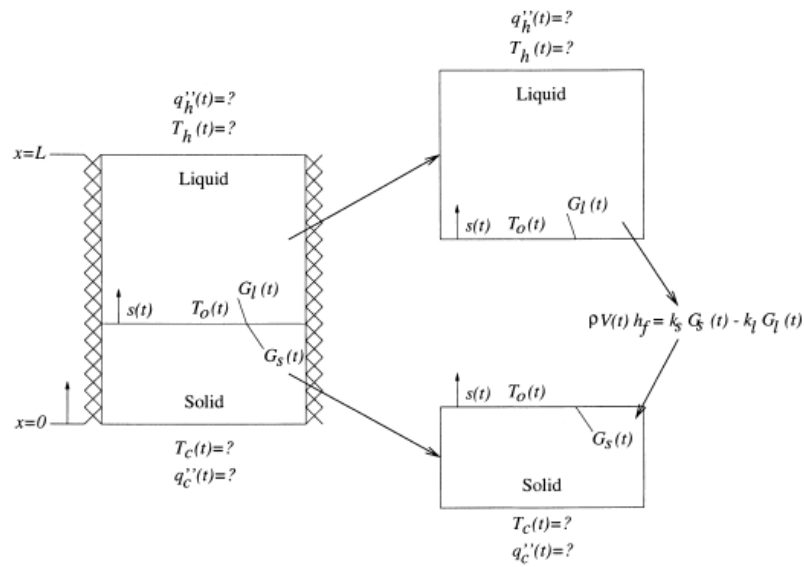
در پژوهش دیگری که توسط هال^۱ و همکارانش [۳۹] انجام گرفته است، مسأله انجماد برای مواد خالص و آلیاژهای یوتکتیک^۲ در حالتی که سرمایه از پایین صورت می گیرد حل شده است. در این کار عنوان شده است که کنترل سرعت سطح مشترک $V(t)$ و گرادیان دمای سطح مشترک در سمت مایع $G_L(t)$ به طور مجزا صورت پذیرفته است. شماتیک هندسه و مسأله این پژوهش در شکل (۱-۳) آورده شده است.

با توجه به شکل، حل مسأله در ناحیه مایع، دمای دیوار گرم T_h را که برای ایجاد گرادیان دمای مطلوب در سمت مایع نیاز است مشخص می کند و حل مسأله ناحیه جامد، دمای سطح سرد T_c را که برای کنترل حرکت (سرعت) سطح مشترک $(V(t))S(t)$ نیاز است مشخص می کند. مسأله تأخیر زمانی در

¹ Hale

² Eutectic

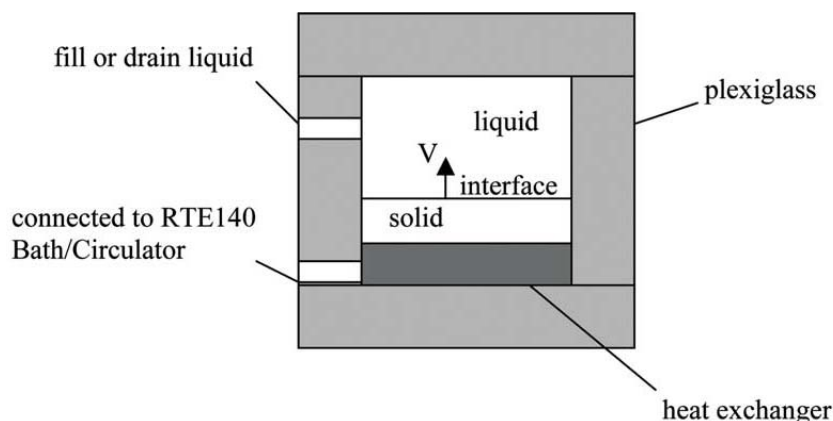
این کار لحاظ شده است. به عنوان مثال کنترل $G_L(t)$ در زمان t نیاز به تغییر دمای $T_h(t)$ در زمان $t - t_p$ دارد که t_p زمان نفوذ حرارت از $x=1$ تا سطح مشترک جامد - مایع یا $x=S(t)$ خواهد بود.



شکل (۳-۱): هندسه مسأله و نواحی جامد و مایع به همراه شرایط مرزی [۳۹]

به منظور تحلیل نواحی جامد و مایع، دو حالت مختلف در نظر گرفته شده است که تفاوت آنها در زمانهای نفوذ، زمان رسیدن سرعت سطح به سرعت مطلوب و زمان رسیدن گرادیان دمای سطح به مقدار مطلوب است. برای هر دو مورد، طول قالب $L = 38.1 \text{ mm}$ ، توزیع دمای اولیه تشکیل شده از یک توزیع خطی با $T_i(0) = T_f$ و $G_i = 0.5 \text{ K/mm}$ ، زمان نفوذ $t_p = 14 \text{ s}$ و مقادیر طراحی سرعت و گرادیان دما به ترتیب $V_d = 0.2 \text{ mm/s}$ و $G_d = 0.94 \text{ K/mm}$ انتخاب شده است. حداکثر زمان $t_{\max} = 250 \text{ s}$ در نظر گرفته شده است. ماده انتخاب شده ترکیب یوتکتیک Pb-Sn (61.9% درصد وزنی Sn)، با خواص ثابت در ناحیه مایع و جامد و چگالی برابر برای دو فاز است. در این تحقیق نیز اثر ناحیه دوفازی و خواص وابسته به دما در نظر گرفته نشده است.

در سال ۲۰۰۵، یک کار تجربی - عددی جهت کنترل سطح مشترک در طی انجماد آب توسط زو و ناترر^۱ [۴۰] صورت گرفته است. یک روش عددی برای حل مسأله معکوس به منظور یافتن شرایط مرزی مناسب و در نتیجه داشتن حرکتی مشخص در سطح مشترک استفاده شده است. سپس نتایج عددی به عنوان ورودی یک کنترل کننده و نقطه تنظیم^۲ کار تجربی در نظر گرفته شده و نتایج برای سطح مشترک آب - یخ بدست آمده اند. در این مسأله نیز انجماد جهتی رو به بالا (سرمایش از پایین قالب) برای آب در نظر گرفته شده است. شکل (۴-۱) شماتیک هندسه و دستگاه مورد استفاده در این تحقیق را نمایش می دهد.



شکل (۴-۱): هندسه و شماتیک دستگاه مورد استفاده [۴۰]

مطابق شکل در پایین قالب یک مبدل حرارتی قرار دارد که دمای سطح پایینی قالب را با توجه به دمایی که از حل معکوس بدست آمده است تنظیم می کند. فرآیند کنترل برای دو سرعت $0.175, 0.35 \text{ mm/s}$ انجام گرفته است که گام زمانی^۳ به ترتیب ۱۰ و ۵ دقیقه هستند که با توجه به آنها سطح مشترک در هر گام زمانی ۱/۷۵ میلیمتر طی می کند. اثر فوق سرمایش^۴ نیز در این تحقیق در

¹ Xu and Naterer

² Set Point

³ Time Step

⁴ Supercooling

نظر گرفته شده است. این اثر موجب می شود که حتی وقتی دمای سطح پایینی به 5°C می رسد هنوز انجماد شروع نشده و دمای سطح باید بین 5°C تا 7°C قرار گیرد تا نخستین هسته های جامد تشکیل شود. این زمان (زمان تأخیر) که حدوداً ۱۱ دقیقه (دو گام زمانی) است در محاسبات نیز لحاظ شده است و براساس آن مقادیر مطلوب و موقعیت مطلوب سطح مشترک در نظر گرفته شده است و با در نظر گرفتن این زمان تأخیر تطابق خوبی بین نتایج عددی و تجربی وجود دارد.

در پژوهش دیگری که در سال ۲۰۰۴ توسط نویسندگان قبلی انجام گرفته مجدداً از یک روش عددی - تجربی برای کنترل شتاب سطح مشترک در طی فرآیند انجماد استفاده شده است [۵]. هندسه مسأله و سایر شرایط مانند پژوهش قبلی است. تحقیق برای سه حالت مختلف شتاب انجام گرفته است.

۱. شتاب منفی سطح مشترک (دمای خنک کن ثابت)

دمای مرز خنک کن (-10°C) در نظر گرفته می شود. در آغاز شروع انجماد به دلیل گرادیان دمای شدید، سرعت زیاد و سپس کم می شود.

۲. شتاب صفر (سرعت ثابت): سرعت ثابت برابر با 0.175 mm/s در نظر گرفته شده است.

۳. شتاب مثبت ثابت: حرکت سطح مشترک به صورت $y = \frac{1}{2}at^2$ لحاظ شده است.

در مرجع [۴۱] با استفاده از الگوریتم ژنتیک و روش منظم سازی تیخانف^۱ به ارزیابی ضریب انتقال حرارت پرداخته شده است.

زو و ناترر^۲ در مرجع [۴۲] با استفاده از روش انتقال حرارت معکوس، شرط مرزی دمایی را برای حالتی که سرعت سطح مشترک ثابت باشد بدست آورده اند. در این مقاله از قانون دوم ترمودینامیک برای افزایش پایداری روش و حذف جوابهای غیر فیزیکی استفاده شده است.

¹ Tikhonov

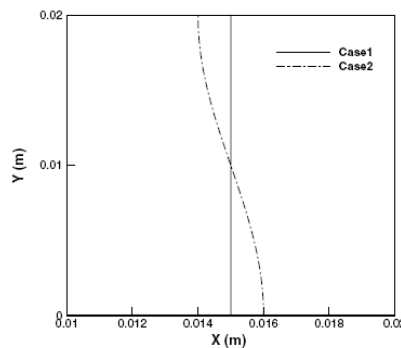
² Xu and Naterer

در سال ۲۰۰۷، لی و اوکاموتو^۱ [۴۳] با توسعه یک روش انتقال حرارت معکوس برای مسائل کنترل و طراحی انجماد و با استفاده از یک روش منظم سازی^۲ به محاسبه شار حرارتی بهینه برای دستیابی به سطح مشترکی با شکل و سرعت مطلوب پرداخته اند. اثر جابجایی طبیعی ناشی از گرادیان دما در جهت عمودی نیز در این تحقیق لحاظ شده است. هر دو روش تمام دامنه زمانی و روش مرحله ای در این پژوهش در نظر گرفته شده است. برای حل این مسأله این شار حرارتی به شکل تابع q در نظر گرفته شده است :

$$q = \sum_{j=1}^N q_j f_j(y, t)$$

که f_j ها توابعی معلوم هستند و هدف در این کار تخمین پارامترهای q_j می باشد به نحوی که تابع هدف می نیمم شود. در این کار f_j به شکل چند جمله ای با درجه ۴ در نظر گرفته شده است.

ماده در نظر گرفته شده آلومینیوم خالص با دمای ذوب ۹۳۳ کلوین بوده و دیوار سمت چپ در دمای ۱۲۲۰ کلوین ثابت نگه داشته می شود. دو شکل مطلوب سطح مشترک به صورت صاف و سینوسی بوده که در شکل (۵-۱) ملاحظه می شوند و سرعت مطلوب سطح مشترک برابر با $1.17 \times 10^{-2} m/s$ است.



شکل (۵-۱): اشکال سطح مشترک برای حالت ۱ (تخت) و حالت ۲ (سینوسی) [۴۳]

¹ Li and Okamoto

² Tikhonov Regularization

در روش مرحله ای، بازه زمانی حل مسأله $[0,0.6]$ ثانیه به سه بازه با فاصله 0.2 ثانیه تقسیم می شود و محاسبات برای هر کدام از این بازه ها به صورت مجزا صورت می گیرد و به عنوان مثال توزیع دما و سرعت محاسبه شده در بازه $[0,0.2]$ به عنوان شرایط اولیه برای بازه بعدی در نظر گرفته می شود. اما در روش تمام دامنه، کل بازه $[0,0.6]$ در نظر گرفته می شود که در هر دو تابع f_i به صورت چند جمله ای خواهد بود.

هینز و زیگنبالی [۴۴] نیز در سال ۲۰۰۷ به کنترل سطح مشترک برای یک ماده خالص بوسیله کنترل دمای یکی از مرزها پرداخته اند. تابع هدف در این کار بر خلاف کارهای زاباراس که تابع هدف بر مبنای دمای سطح مشترک بود، بر مبنای اختلاف سطح مشترک از حالت ایده آل و با تاثیر پارامتر منظم سازی صورت گرفته است. بهینه سازی تابع هدف با روش کاهش سریع با کنترل اندازه گام انجام شده است. به عنوان یک مورد، مطالعه روی سیلیکون مایع در یک محفظه به ابعاد 20×40 cm در زمان $t_f = 3600$ انجام شده و خواص ثابت فرض شده است. سطح مشترک مطلوب به صورت خط متحرک زیر تعریف شده است:

$$\bar{f}(t, y) = 10 + \frac{t}{180}$$

خلاصه ای از پژوهشهای صورت گرفته در مور کنترل سطح مشترک جامد-مایع در فرایندهای انجماد در جدول (۱-۱) نشان داده شده است.

مراجع [۴۵-۴۹] نیز از جمله رساله هایی هستند که در زمینه کنترل مسائل انجماد با استفاده از روشهای انتقال حرارت معکوس به انجام رسیده اند.

۱-۴- اهداف پایان نامه

در فرآیندهای ریخته گری مهمترین مساله، دستیابی به قطعه ای با کیفیت مشخص می باشد. بدین منظور فلز بایستی دارای ساختار متالورژیکی مطلوب باشد. ساختار متالورژیکی فلزات تابعی از دما و تغییرات آن است. بنابراین یکی از راههای تغییر ساختار متالورژیکی مواد فلزی، کنترل فرایند انجماد در ریخته گری و تغییرات میدان دمای درون آنهاست. تغییر ساختار متالورژیکی فلزات مختلف با دما را می توان با استفاده از نمودارهای فازی بررسی نمود. نکته مهم در فرایند انجماد در ریخته گری فلزات، الگوی سرد شدن قطعه و قالب با زمان و به تبع آن سرعت سطح مشترک جامد-مایع می باشد.

شیوه هایی که مهندسان در انجام فرایندهای ریخته گری به کار می برند بر اساس نمودارها و نتایج حاصل از کارهای تجربی است. در نتیجه بایستی برای هر کاربرد با توجه به پارامترهای موثر (جنس قطعه، ابعاد و هندسه آن، نوع انتقال حرارت و ...) آزمایشی تجربی را انجام داد و یا با استفاده از نتایج موجود، شرایط جدید را استنتاج کرد. از آنجا که نمونه سازی و انجام آزمایش برای هر کاربردی نیازمند صرف وقت و هزینه زیاد است، بنابر این توسعه روشهای تحلیلی و عددی به منظور مدل سازی این فرایندها لازم است. بنابر آنچه ذکر شد کنترل سرعت سطح مشترک در فرایندهای انجماد یکی از اصلی ترین عوامل کنترل کیفیت قطعه می باشد. در این رساله هدف، کنترل سطح مشترک در فرایندهای انجماد مواد خالص و آلیاژها با استفاده از روش آنتالپی برای بیان معادلات حاکم و روش تفاضلات محدود فشرده به عنوان روش عددی می باشد. در انجماد آلیاژها، خواص فیزیکی تابعی از دما بوده و به علت وجود یک ناحیه میانی سرعت دو سطح مشترک متحرک بایستی به صورت همزمان کنترل شود. به عبارت دیگر هدف، یافتن شرایط مرزی حرارتی مناسب با استفاده از روشهای انتقال حرارت معکوس است به گونه ای که سطح مشترک با سرعت مطلوب حرکت کند.

۱-۵- نوآوری های رساله

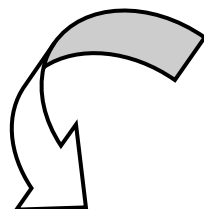
بر اساس مطالعات انجام شده روی پژوهشهای مختلف، ملاحظه شد که اثر ناحیه دوفازی (میانی) در تمام مقالات در نظر گرفته نشده است. لذا از این حیث این رساله کاری نو و جدید خواهد بود. چون در این ناحیه خواص ثابت نیستند لذا می توان مساله را براحتی برای انجماد موادی که خواص آنها حتی در ناحیه مایع یا جامد نیز به دما وابسته است گسترش داد. علاوه بر این تلاش شده است تا در حل معادلات از یک روش عددی جدید و با دقت بالا استفاده شود که خود از جنبه های نوآوری این رساله خواهد بود. همچنین همان گونه که در مورد یکی از مراجع ذکر شد، در این رساله نیز علاوه بر کنترل سرعت سطح مشترک در مختصات دوبعدی، شکل سطح مشترک نیز هم برای مواد خالص و هم برای آلیاژها با وجود دو سطح مشترک متحرک کنترل خواهد شد.

از جمله موارد نوآوری دیگر استفاده از فرمول بندی آنتالپی به همراه روش گرادیان مزدوج است که این روش نیاز به حل مسائل معکوس برای نواحی جامد و مایع به طور جداگانه را از میان می برد.

جدول (۱-۱): خلاصه پژوهش‌های گذشته و مقایسه با رساله حاضر

نام محقق	شماره مرجع	نوع تحقیق	هدف	نوع ماده	اثر ناحیه میانی	پارامتر کنترل	روش عددی	خواص فیزیکی
Zabaras et. al	[۲۹, ۳۰]	عددی	کنترل سرعت سطح مشترک	خالص	لحاظ نشده	دما یا شار حرارتی در مرزها	FEM	ثابت
Zabaras & Enguyen	[۳۱]	عددی	کنترل سرعت سطح مشترک	خالص	لحاظ نشده	شار حرارتی در مرز	FEM	ثابت
Yang & Zabaras	[۳۲]	عددی	کنترل سرعت و گرادیان دمای سطح مشترک	خالص	لحاظ نشده	دما و شار حرارتی در مرزها	FEM	ثابت
Yang et. al	[۳۴, ۳۵]	عددی	کنترل سرعت و گرادیان دمای سطح مشترک	آلیاژ	لحاظ نشده	دما و شار حرارتی در مرزها	FEM	ثابت
Zabaras et. al	[۳۶, ۳۸, ۳۷]	عددی	کنترل سرعت سطح مشترک	خالص و آلیاژ	لحاظ نشده	دما و شار حرارتی در مرزها و میدان مغناطیسی	FEM	ثابت
Hale et. al	[۳۹]	عددی	کنترل سرعت و گرادیان دمای سطح مشترک	خالص و آلیاژ	لحاظ نشده	دما و شار حرارتی در مرزها	GTM	ثابت
Xu & Naterer	[۴۲, ۴۰, ۵]	تجربی- عددی	کنترل سرعت و شتاب سطح مشترک	خالص	لحاظ نشده	دمای مرز	FVM	ثابت
Li & Okamoto	[۴۳]	عددی	کنترل سرعت و شکل سطح مشترک	خالص	لحاظ نشده	شار حرارتی در مرز	FEM	ثابت
Hinze & Ziegenbalg	[۴۴]	عددی	کنترل سرعت سطح مشترک	خالص	لحاظ نشده	دمای مرز	FDM	ثابت
Present Work		عددی	کنترل سرعت و شکل سطح مشترک	خالص و آلیاژ	لحاظ شده	شار حرارتی در مرزها	Compact FDM	متغیر

فصل دوم



مقدمه ای بر انجماد

مسائل انتقال حرارت گذرا شامل ذوب و انجماد که به مسائل تغییر فاز یا مرز متحرک موسوم هستند، نقش مهمی را در بسیاری از کاربردهای مهندسی مانند انجماد مواد غذایی، ریخته گری، جوشکاری، ذخیره انرژی گرمایی، رشد کریستالها و بسیاری از کاربردهای دیگر ایفا می کنند. حل چنین مسائلی بدلیل وجود مرز مشترک بین فازهای جامد و مایع که با آزاد شدن یا جذب گرمای نهان حرکت می کند دشوار است. در انجماد مواد خالص، انجماد در یک درجه حرارت مشخص رخ داده و دو فاز جامد و مایع بوسیله یک سطح مشترک مشخص از هم جدا می شوند.

در سوی دیگر در انجماد مخلوطها، آلیاژها و مواد غیرخالص، انجماد در یک محدوده دمایی رخ داده و فازهای جامد و مایع بوسیله یک ناحیه دو فازی متحرک از هم جدا می شوند. خواص ترموفیزیکی در این ناحیه به نسبت جامد^۱ تشکیل شده که آن نیز تابع دماست مرتبط می شود.

اولین جوابهای تحلیلی مسائل شامل تغییر فاز بوسیله لامه و کلایپرون^۲ و استفان^۳ انجام شد. در این تحلیل، موقعیت سطح مشترک که هم مجهول و هم متحرک بود در یک مسأله هدایت حرارتی به شکل معادلات سهموی می بایستی در ناحیه ای که خود نیز مجهول بود حل شود. علاوه بر این جوابهای دقیق، جوابهای تحلیلی دیگری برای مسائل تغییر فاز به شکلهای کلی تر بوسیله نیومان^۴ ارائه شده است. نکته ای که باید در اینجا به آن توجه شود این است که حلهای دقیق و تحلیل محدود به شماری از حالتیهای ایده آل شامل نواحی بی نهایت و نیمه بی نهایت و شرایط مرزی و اولیه ساده شده است [۵۰].

بدلیل طبیعت غیرخطی این مسائل، استفاده از اصلی برهم نهی^۵ غیرممکن بوده و هر موردی باید به طور جداگانه بررسی شود. در غیاب جوابهای تحلیلی، روشهای تقریبی، نیمه تحلیلی (شبه تحلیلی) و عددی

¹ Solid Fraction

² Lamé and Clapeyron

³ Stefan

⁴ Neumann

⁵ Superposition

برای حل این گونه مسائل پیشنهاد شده اند. از جمله این روشها، روش انتگرال، روش حساب تغییرات، منبع حرارتی متحرک، روش اختلالات، روش مقادیر ویژه متغیر و روشهای عددی که امروزه بواسطه دسترسی به کامپیوترهای دیجیتال پرسرعت به شدت مورد توجه قرار گرفته است، می باشند.

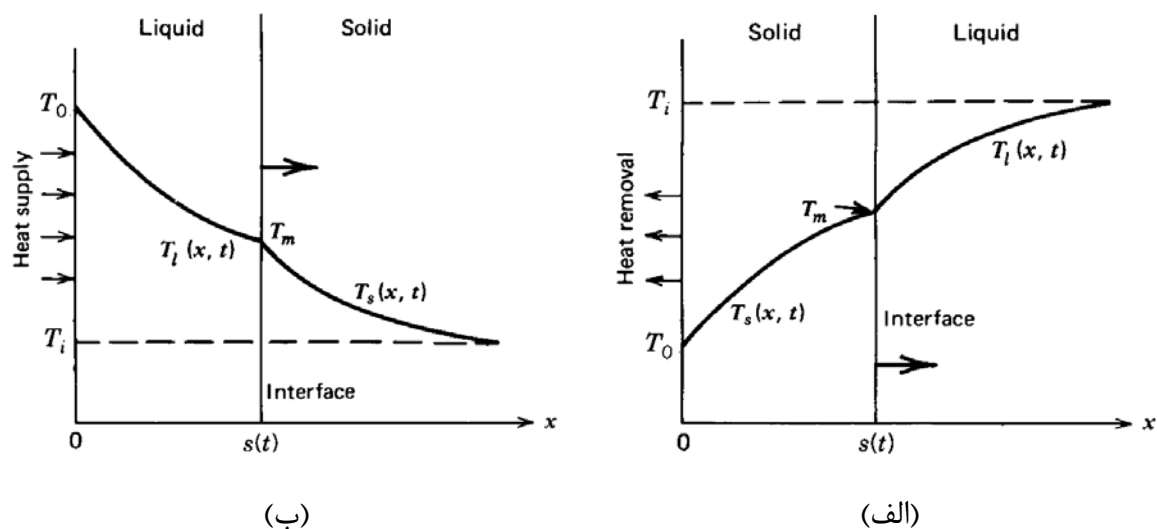
۲-۲- بیان ریاضی معادلات حاکم

جهت نشان دادن معادلات حاکم بر مسائل تغییر فاز، ابتدا یک مسأله یک بعدی انجماد ماده خالص را به شکل زیر در نظر می گیریم، مایعی با درجه حرارت تغییر فاز T_f را در نظر بگیرید که در یک ناحیه نیمه بی نهایت $0 < x < \infty$ قرار گرفته است. در ابتدا مایع در درجه حرارت یکنواخت T_i که بالاتر از T_f می باشد، کل ناحیه را پر کرده است. در لحظه $t = 0$ ، دما در مرز $x = 0$ ناگهان به دمای $T_b < T_f$ رسیده و برای $t > 0$ در همین دما باقی می ماند. انجماد از سطح $x = 0$ آغاز شده و سطح مشترک جامد-مایع در جهت مثبت محور x ها حرکت می کند. شکل (۱-۲) طرح شماتیک این مسأله انجماد یک بعدی را نشان می دهد. دماهای $T_s(x,t)$ و $T_l(x,t)$ برای نواحی جامد و مایع با فرض خواص ثابت برای فازهای جامد و مایع توسط معادلات زیر تعیین می شود [۵۰، ۵۱].

$$\frac{\partial^2 T_s(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_s} \frac{\partial T_s(x,t)}{\partial t} \quad 0 < x < s(t) \quad t > 0 \quad (1-2)$$

$$\frac{\partial^2 T_l(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_l} \frac{\partial T_l(x,t)}{\partial t} \quad s(t) < x < \infty \quad t > 0 \quad (2-2)$$

در اینجا $s(t)$ موقعیت سطح مشترک است که مجهول بوده و باید به عنوان قسمتی از حل مشخص شود. اندیسهای s و l به ترتیب مربوط به نواحی جامد و مایع می شوند.



شکل (۱-۲): نمایش هندسه و مختصات برای مساله الف) انجماد و ب) ذوب

بنابراین مسأله دارای سه مجهول $T_l(x, t)$ ، $T_s(x, t)$ و $s(t)$ خواهد بود. از آنجا که $s(t)$ مجهول و متغیر است، برای تعیین موقعیت آن نیاز به یک معادله اضافی داریم. این معادله که به شرط استفان (Stefan) مشهور است بیان می کند که حرکت مشترک انجماد به گونه ای است که سرعت آن متناسب با پرش در شار حرارتی در خلال سطح مشترک است. به طور کلی، مواد خالص در یک دمای مشخص ثابت تغییر فاز داده و دارای یک گرمای نهان مشخص در طی تغییر فاز هستند در صورتیکه در انجماد آلیاژها، انجماد در یک بازه دمایی بین دماهای سالیدوس^۱ و لیکیدوس^۲ رخ میدهد.

معادله دیگری که مربوط به $s(t)$ می شود، با نوشتن موازنه انرژی در سطح مشترک جامد مایع $x = s(t)$ به شرح ذیل بدست می آید.

(نرخ آزاد شدن یا جذب گرمای نهان بر واحد سطح) = (شار حرارتی در جهت منفی محور x ها در ناحیه مایع) - (شار حرارتی در جهت منفی محور x ها در ناحیه جامد)

¹ Solidus
² Liquidus

$$k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} - k_l \frac{\partial T_l}{\partial x} = \rho L \frac{ds(t)}{dt} \quad x = s(t) \quad t > 0 \quad (3-2)$$

که L گرمای نهان بر واحد جرم است و چگالی فازهای جامد و مایع برابر فرض شده است
 ($\rho_s = \rho_l = \rho$). لازم به ذکر است به این دلیل که $\frac{ds(t)}{dt}$ تابعی از تغییرات دما است این معادله یک
 معادله غیرخطی است. از پیوستگی دما در سطح مشترک و همچنین طبیعت مسائل تغییر فاز می توان
 نتیجه گرفت که:

$$T_s(x, t) = T_l(x, t) = T_f \quad x = s(t) \quad (4-2)$$

به طور خلاصه، معادلات (۱-۲) تا (۳-۲) سه معادله دیفرانسیل اصلی حاکم بر مسائل تغییر فاز هستند که
 با حل آنها توزیع دما در نواحی جامد و مایع و مکان سطح مشترک محاسبه می شود. ابتدا باید توجه
 داشت که این معادلات با فرض خواص ثابت فیزیکی برای فازهای جامد و مایع نوشته شده اند و برای
 حالت‌های واقعی که خواص ثابت نیستند این معادلات باید اصلاح شوند.

معادله (۴-۲)، دو شرط مرزی را برای معادلات دیفرانسیل مذکور فراهم کرده و شرایط مرزی و اولیه دیگر
 نیز با توجه به شرایط و فیزیک حاکم بر مسأله و سطوح مرزی مشخص خواهند شد.

به دلیل مشکلات مذکور در حل مسائل شامل تغییر فاز، جوابهای دقیق و تحلیلی فقط به چند حالت ایده
 آل محدود می باشد. این جواب به مسأله یک بعدی در یک محیط بی نهایت یا نیمه بی نهایت و شرایط
 مرزی ساده مانند دمای مشخص در مرزها محدود می شود. جواب دقیق با استفاده از یک حل تشابهی

بدست می آید به نحویکه دو کمیت مستقل x و t ادغام شده و یک کمیت تشابهی از جنس $\frac{x}{t^{1/2}}$ می

سازند. به عنوان نمونه یک حل دقیق برای مسأله ذکر شده در بالا برای یک ناحیه نیمه بی نهایت ارائه می
 شود. یک ناحیه نیمه بی نهایت را به گونه ای در نظر می گیریم که ابتدا از یک مایع با دمای یکنواخت
 $T_i > T_f$ پر شده است. در لحظه $t = 0$ دمای مرز $x = 0$ تا دمای $T_b < T_f$ پایین آورده و برای زمانهای

$t > 0$ ثابت نگه داشته می شود. حل مسأله دو فازی مذکور برای یافتن دمای نواحی جامد و مایع و همچنین موقعیت سطح مشترک در زمانهای مختلف به شرح ذیل خواهد بود که به حل نیومان مشهور است.

معادلات حاکم بر نواحی جامد و مایع به شرح ذیل است:

$$\frac{\partial^2 T_s(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_s} \frac{\partial T_s(x,t)}{\partial t} \quad 0 < x < s(t) \quad t > 0 \quad (5-2)$$

$$T_s(x,t) = T_b \quad x = 0 \quad t > 0 \quad (6-2)$$

$$\frac{\partial^2 T_l(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_l} \frac{\partial T_l(x,t)}{\partial t} \quad s(t) < x < \infty \quad t > 0 \quad (7-2)$$

$$T_l(x,t) \rightarrow T_i \quad x \rightarrow \infty \quad t > 0 \quad (8-2)$$

$$T_l(x,t) = T_i \quad t = 0 \quad x > 0 \quad (9-2)$$

و شرایط موجود سطح مشترک به قرار زیر خواهند بود:

$$T_s(x,t) = T_l(x,t) = T_f \quad x = s(t) \quad t > 0 \quad (10-2)$$

$$k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} - k_l \frac{\partial T_l}{\partial x} = \rho L \frac{ds(t)}{dt} \quad x = s(t) \quad t > 0 \quad (11-2)$$

جوابی به شکل زیر برای $T_l(x,t)$ و $T_s(x,t)$ در معادلات دیفرانسیل حاکم و شرایط مرزی صدق می کنند.

$$T_s(x,t) = T_b + A \operatorname{erf} \left[\frac{x}{2(\alpha_s t)^{\frac{1}{2}}} \right] \quad (12-2)$$

$$T_l(x,t) = T_i + B \operatorname{erfc} \left[\frac{x}{2(\alpha_l t)^{\frac{1}{2}}} \right] \quad (13-2)$$

با بکار بردن معادلات (۱۲-۲) و (۱۳-۲) در معادله (۱۰-۲) خواهیم داشت:

$$T_b + A \operatorname{erf}(\lambda) = T_i + B \operatorname{erfc} \left[\lambda \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_l} \right)^{\frac{1}{2}} \right] = T_f \quad (14-2)$$

که در آن :

$$\lambda = \frac{s(t)}{2(\alpha_s t)^{\frac{1}{2}}} \quad \text{or} \quad s(t) = 2\lambda(\alpha_s t)^{\frac{1}{2}} \quad (15-2)$$

ضرایب A و B با استفاده از معادلات (۱۴-۲) و (۱۵-۲) به شرح ذیل بدست می آیند.

$$A = \frac{T_f - T_b}{\operatorname{erf}(\lambda)} \quad B = \frac{T_f - T_i}{\operatorname{erfc} \left[\lambda \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_l} \right)^{\frac{1}{2}} \right]} \quad (16-2)$$

با جاگذاری ضرایب A و B در معادلات (۱۲-۲) و (۱۳-۲)، توزیع دما در نواحی جامد و مایع به ترتیب

زیر خواهد بود.

$$\frac{T_s(x,t) - T_b}{T_f - T_b} = \frac{\operatorname{erf} \left[\frac{x}{2(\alpha_s t)^{\frac{1}{2}}} \right]}{\operatorname{erf}(\lambda)} \quad (17-2)$$

$$\frac{T_l(x,t) - T_i}{T_f - T_i} = \frac{\operatorname{erfc} \left[\frac{x}{2(\alpha_l t)^{\frac{1}{2}}} \right]}{\operatorname{erfc} \left[\lambda \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_l} \right)^{\frac{1}{2}} \right]} \quad (18-2)$$

برای محاسبه پارامتر λ ، از معادله موازنه انرژی در سطح مشترک (۲-۱۱) استفاده می کنیم. با جایگذاری عبارت مربوط به $T_s(x,t)$ و $T_l(x,t)$ در معادله (۲-۱۱)، معادله زیر برای محاسبه λ بدست خواهد آمد:

$$\frac{e^{-\lambda^2}}{\operatorname{erf}(\lambda)} + \frac{k_l}{k_s} \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_l} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{T_f - T_i}{T_f - T_b} \frac{e^{-\lambda^2 (\alpha_s / \alpha_l)}}{\operatorname{erfc} \left[\lambda (\alpha_s / \alpha_l)^{\frac{1}{2}} \right]} = \frac{\lambda L \sqrt{\pi}}{C_{ps} (T_f - T_b)} \quad (2-19)$$

پس از محاسبه λ از معادله (۲-۱۹)، $s(t)$ ، $T_s(x,t)$ و $T_l(x,t)$ به ترتیب از معادلات (۲-۱۵)، (۲-۱۷) و (۲-۱۸) محاسبه خواهند شد.

هنگامی که حل تحلیلی و دقیق مسائل مربوط به تغییر فاز غیرممکن می شود، روشهای عددی مانند اجزاء محدود یا تفاضل محدود برای حل معادلات حاکم بکار برده می شود. روشهای عددی برای حل مسائل شامل تغییر فاز به شرح زیر خلاصه می شوند.

۱. روشهای شبکه ثابت: در این روشها، دامنه مکان و زمان به تعدادی نقطه با فواصل مساوی برای Δx و Δt تقسیم می شود. در این روش، مرز مشترک جامد - مایع که متحرک است در حالت کلی ممکن است در نقطه ای بین دو گره مجاور قرار گیرد. استفاده از روشهای مناسب درونیابی برای تخمین موقعیت سطح مشترک در کارهای گذشته پیشنهاد شده است.

۲. روشهای شبکه متغیر: در این روشها، دامنه مکان- زمان به نقاطی با فواصل مساوی فقط در یک جهت تقسیم شده و تقسیم در جهت دیگر به گونه ای انجام می گیرد که مرز متحرک همیشه روی یکی از نقاط شبکه قرار گیرد. به عنوان مثال می توان دامنه مکانی را به تعدادی نقطه با فاصله مساوی و ثابت Δx تقسیم کرده و Δt را طوری پیدا کرد که سطح مشترک در هر بازه زمانی فقط به اندازه یک Δx پیشروی می کند. این روش از نظر محاسباتی زمان بر است چرا که پیدا کردن یک چنین Δt با استفاده از یک روش مبتنی بر تکرار انجام می شود.

این روش بیشتر برای مسائل یک بعدی استفاده شده است. این روش یک روش انتقال مختصات است به گونه ای که مکان سطح مشترک را ثابت کرده و نیاز به مکان یابی آن را از بین می برد. عیب این روش این است که نیاز به حل یک مسأله پیچیده با روشهای عددی دارد که از نظر محاسباتی بسیار زمان بر است.

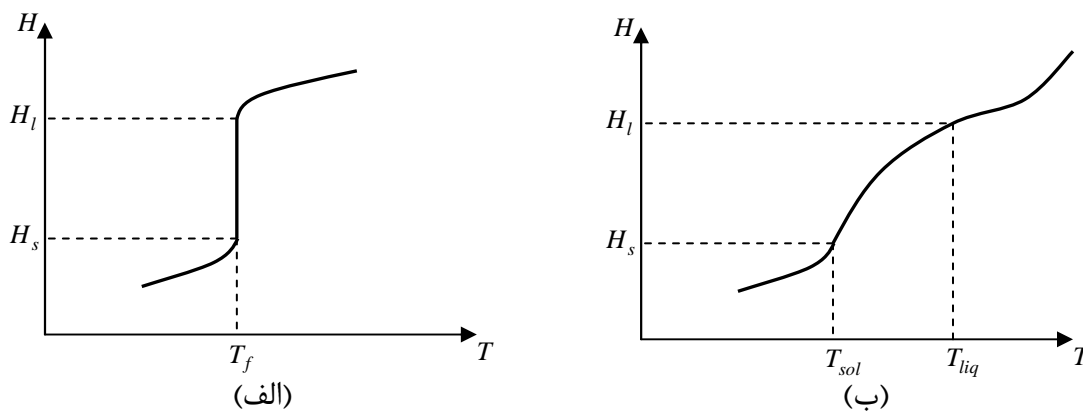
۳. روش آنتالپی: این روش نیز تقریباً یک روش شبکه ثابت بوده با این تفاوت که بجای حل مسأله برای دو ناحیه جامد و مایع به طور جداگانه و ارتباط آنها در سطح مشترک، با تعریف تابع آنتالپی، مسأله فقط برای یک ناحیه ثابت زمانی و مکانی حل شده و سپس با استفاده از جواب بدست آمده برای آنتالپی در نقاط مختلف، دما و مکان سطح مشترک محاسبه خواهند شد. این روش یک روش بسیار کارآمد در حل مسائل انجماد مواد خالص با یک سطح مشترک متحرک و آلیاژها با دو سطح مشترک متحرک (یک ناحیه دوفازی متحرک) است چرا که بویژه در انجماد آلیاژها، نیاز به حل مساله برای سه ناحیه مجزا از هم که متحرک نیز هستند را از بین می برد.

استفاده از روشهای شبکه متغیر برای حل مسائل انجماد آلیاژها بسیار پیچیده و از نظر محاسباتی بسیار گران تمام می شود زیرا اینگونه مسائل شامل سه ناحیه با دو مرز متحرک هستند و پیدا کردن Δt که بتواند هر دو مرز متحرک را در نقاط شبکه قرار دهد، تقریباً غیرممکن است.

۲-۲-۱- روش آنتالپی

در مسائل مربوط به تغییر فاز که با روشی غیر از روش آنتالپی تحلیل می شوند (مانند مسأله قبل)، تنها دما به عنوان متغیر تابع در نظر گرفته می شود که در این حالت نیاز به نوشتن و حل معادلات حاکم به طور جداگانه برای دو ناحیه جامد و مایع داریم. این دماهای مختلف در نواحی جامد و مایع بوسیله موازنه

انرژی حرارتی در مرز مشترک به یکدیگر مرتبط می شوند. بنابراین حل این مسأله با روش ذکر شده بدلیل نیاز به تعیین موقعیت سطح مشترک همزمان با حل معادلات پیچیده مشکل می باشد. یک راه حل برای ساده سازی حل یک چنین مسائلی، استفاده از شکل آنتالپی برای معادلات حاکم می باشد. مزیت بزرگ این روش این است که یک معادله انرژی برای همه فازها (جامد، مایع و دوفازی) بکار برده شده و نیاز به در نظر گرفتن معادلات برای فازهای مختلف به صورت جداگانه نیست. بنابراین هر روش عددی اعم از تفاضلات محدود یا المان محدود می تواند به سادگی برای این گونه مسائل استفاده شود. علاوه بر این، استفاده از شکل آنتالپی معادلات حاکم یک روش بسیار کارآمد در حل مسائل انجماد آلیاژهاست که در آنها انجماد در یک محدوده دمایی رخ داده و سه ناحیه جامد، مایع و دوفازی حضور دارند. شکل (۲-۲) به طور شماتیک رابطه بین آنتالپی و دما را برای مواد خالص و آلیاژها نشان می دهد.



شکل (۲-۲): رابطه آنتالپی-دما برای (الف)موادخالص و (ب) آلیاژها

برای مواد خالص و آلیاژهای یوتکتیک، تغییر فاز در یک دمای مشخص رخ داده و چون گرمای نهان در همین دما جذب یا آزاد می شود یک پرش در نمودار آنتالپی دما مشاهده شده و $\frac{\partial H}{\partial T}$ در این نقطه بی نهایت می شود. از سوی دیگر همانطور که در شکل (۲-۲) مشاهده می شود، برای آلیاژها رابطه بین دما و

آنتالپی چنین رفتاری از خود نشان نداده و تغییر فاز و آزاد شدن انرژی نهان در یک محدوده دمایی بین T_{sol} و T_{liq} روی می دهد.

معادله انرژی حاکم به شکل آنتالپی به صورت زیر است:

$$\rho \frac{\partial H}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (20-2)$$

که معادل با معادلات هدایت حرارتی و شرایط موازنه انرژی ذکر شده در سطح مشترک بین دو ناحیه است.

رابطه بین آنتالپی و دما برای مواد خالص به گونه ای است که در فاز جامد ($T < T_f$)، ماده فقط دارای گرمای محسوس بر واحد جرم $C_p T$ است و در فاز مایع ($T > T_f$)، علاوه بر گرمای محسوس، گرمای نهان نیز به آن اضافه می شود به نحویکه:

$$H = \begin{cases} C_p (T - T_f), & T < T_f \\ C_p (T - T_f) + L, & T > T_f \end{cases} \quad (21-2)$$

و با توجه به عبارت فوق و تعریف آنتالپی، دما از رابطه زیر محاسبه خواهد شد:

$$T = \begin{cases} T_f + \frac{H}{C_p} & H < 0 \\ T_f & 0 \leq H \leq L \\ T_f + \frac{H - L}{C_p} & H > L \end{cases} \quad (22-2)$$

و برای آلیاژها با دماهای سالیدوس و لیکیدوس، رابطه بین آنتالپی و دما به شکل زیر خواهد بود، که معمولاً یک رابطه غیرخطی است.

$$H = \begin{cases} H_s = C_{ps}(T - T_f) & T < T_{sol} & \text{جامد} \\ f_s H_s + (1 - f_s) H_l & T_{sol} \leq T \leq T_{liq} & \text{دوفازی (میانی)} \\ H_l = C_{pl}(T - T_f) + L & T > T_{liq} & \text{مایع} \end{cases} \quad (23-2)$$

که f_s نسبت جامد بوده و می تواند براساس رابطه‌ی خطی، قانون لور^۱ یا قانون شیل^۲ مطابق با روابط زیر محاسبه شود.

$$f_s = 1 - \frac{T - T_{sol}}{T_{liq} - T_{sol}} \quad (24-2)$$

$$f_s = \frac{1}{1 - k_p} \left(\frac{T - T_{liq}}{T - T_f} \right) \quad (25-2)$$

$$f_s = 1 - \left(\frac{T_f - T}{T_f - T_{liq}} \right)^{1/k_p - 1} \quad (26-2)$$

در این روابط، k_p ضریب تفکیک^۳ بوده که توسط دیاگرام فازی در یک دمای مشخص محاسبه می شود. لازم به ذکر است که در ناحیه میانی که ناحیه ای دوفازی از جامد و مایع می باشد، خواص فیزیکی برحسب نسبت جامد به شکل زیر تعریف می شوند.

$$k = f_s k_s + (1 - f_s) k_l \quad (27-2)$$

$$C_p = f_s C_{ps} + (1 - f_s) C_{pl} \quad (28-2)$$

۲-۲-۲- بی بعدسازی معادلات حاکم به شکل آنتالپی

با توجه به روابط بین آنتالپی و بیان معادلات حاکم به شکل آنتالپی، پارامترهای زیر برای بی بعد سازی معادلات ذکر شده مورد استفاده قرار می گیرند.

¹ Lever

² Scheil

³ Partition Coefficient

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \frac{x}{a} & \bar{t} &= \frac{\alpha_l t}{a^2} & \alpha_l &= \frac{k_l}{\rho_l C_{pl}} \\ \bar{T} &= \frac{T - T_f}{T_f - T_0} & \bar{H} &= \frac{H}{C_{pl}(T_f - T_0)} & \bar{k} &= \frac{k}{k_l} \\ Ste &= \frac{L}{C_{pl}(T_f - T_0)} & \bar{q} &= \frac{qa}{k(T_f - T_0)} & \bar{c} &= \frac{C_p}{C_{pl}} \end{aligned} \quad (29-2)$$

که در آنها a طول مشخصه (معمولاً طول قالب)، T_0 یک دمای مرجع، C_{pl} گرمای ویژه مایع، k_l هدایت حرارتی مایع، Ste عدد استفان یا همان شکل بی بعد گرمای نهان می باشند. با توجه به پارامترهای فوق معادله حاکم و روابط بین آنتالپی و دما به شکل زیر خلاصه خواهد شد:

$$\frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{t}} = \nabla \cdot (\bar{k}(T) \nabla \bar{T}) \quad (30-2)$$

$$\bar{H} = \begin{cases} \bar{c}\bar{T} & \bar{T} < 0 \\ \bar{c}\bar{T} + Ste & \bar{T} > 0 \end{cases} \quad (31-2)$$

$$\bar{H}(x, \bar{t}) = \begin{cases} \bar{c}_s \bar{T} & \bar{T} < \bar{T}_{sol} & \text{جامد} \\ f_s \bar{H}_s + (1 - f_s) \bar{H}_l & \bar{T}_{sol} \leq \bar{T} \leq \bar{T}_{liq} & \text{دوفازی (میانی)} \\ \bar{c}_l \bar{T} + Ste & \bar{T} > \bar{T}_{liq} & \text{مایع} \end{cases} \quad (32-2)$$

که با توجه به تعریف \bar{c} و \bar{k} ، برای فاز مایع \bar{c}_l و \bar{k}_l برابر با یک خواهند شد.

$$\bar{k} = f_s \bar{k}_s + (1 - f_s) \bar{k}_l \quad (33-2)$$

$$\bar{C}_p = f_s \bar{C}_{ps} + (1 - f_s) \bar{C}_{pl} \quad (34-2)$$

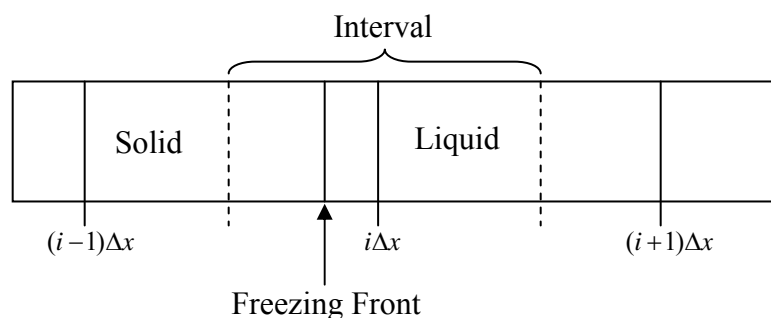
۲-۲-۳- نحوه پیدا کردن سطح مشترک

با توجه به معادلات حاکم و با استفاده از شرایط مرزی و اولیه مناسب با توجه به هندسه و شرایط خنک کاری قالب و همچنین استفاده از روابط بین آنتالپی و دما، مقادیر آنتالپی و دما برای تمام نقاط شبکه پس از حل مشخص خواهند شد. قبلاً گفته شد که از مزایای روش آنتالپی این است که نیاز به پیدا کردن سطح مشترک در خلال حل معادلات ندارد و یافتن مکان سطح مشترک در زمانهای مختلف پس از حل کامل معادلات حاکم انجام خواهد شد. برای مواد خالص که در آنها یک پرش در نمودار آنتالپی- دما اتفاق می افتد، کافی است پس از محاسبه آنتالپی در همه مکانها و زمانها، مکان و زمانی که این پرش اتفاق می افتد محاسبه شود که دقیقاً همان مکان سطح مشترک است.

برای این منظور به ترتیب زیر عمل می کنیم. فرض می کنیم که در بازه زمانی Δt ، سطح مشترک از

مکان $i\Delta x$ عبور می کند. یک بازه شامل این نقطه $i\Delta x$ ، $\left[\left(i - \frac{1}{2}\right)\Delta x, \left(i + \frac{1}{2}\right)\Delta x \right]$ را مطابق شکل

(۲-۳) در نظر می گیریم.



شکل (۲-۳): روش مشخص کردن موقعیت مرز مشترک

فرض می کنیم که سطح مشترک از سمت چپ به راست در حال حرکت است. در وضعیت نشان داده شده و برای بازه Δx در نظر گرفته شده، فرض کنیم که به اندازه کسر ϵ از ماده تبدیل به جامد شده است. بنابراین برای این بازه می توان آنتالپی کل را به شکل زیر نشان داد:

$$H_i = \varepsilon \bar{c} T_i + (1 - \varepsilon)(\bar{c} T_i + Ste) \quad (35-2)$$

هنگامی که سطح مشترک دقیقاً از نقطه $i\Delta x$ می‌گذرد، $\varepsilon = \frac{1}{2}$ و $T_i = T_f = 0$ خواهد شد پس خواهیم داشت:

$$H_i = \frac{Ste}{2} \quad (36-2)$$

بنابراین هرگاه برای نقطه ای آنتالپی به اندازه $\frac{Ste}{2}$ شود، سطح مشترک در آن نقطه قرار گرفته است. برای پیدا کردن زمانی که سطح مشترک در گره i قرار می‌گیرد از فرض تغییرات خطی آنتالپی نسبت به زمان درباره زمانی $n\Delta t$ و $(n+1)\Delta t$ استفاده می‌کنیم. هنگامی که در بازه زمانی $n\Delta t$ تا $(n+1)\Delta t$ ، سطح مشترک از نقطه $i\Delta x$ عبور مبی کند خواهیم داشت:

$$H_i^n > \frac{Ste}{2} \quad H_i^{n+1} < \frac{Ste}{2} \quad (37-2)$$

با فرض تغییرات خطی آنتالپی با زمان:

$$H_i^{n+\theta} = (1 - \theta)H_i^n + \theta H_i^{n+1} \quad (38-2)$$

و برای حالتی که $(n + \theta)\Delta t$ مربوط به زمانی می‌باشد که سطح مشترک از $i\Delta x$ می‌گذرد، آنتالپی برابر با $\frac{Ste}{2}$ خواهد شد و می‌توان نوشت:

$$H_i^n + \theta(H_i^{n+1} - H_i^n) = \frac{Ste}{2} \quad (39-2)$$

و بنابراین پارامتر θ محاسبه خواهد شد.

$$\theta = \frac{\frac{Ste}{2} - H_i^n}{H_i^{n+1} - H_i^n} \quad (40-2)$$

با محاسبه θ ، مکان سطح مشترک و زمانی که سطح مشترک در این مکان ($i\Delta x$) قرار می گیرد محاسبه خواهد شد. پس سطح مشترک در زمان $t = (n + \theta)\Delta t$ در مکان $i\Delta x$ قرار می گیرد.

روش ذکر شده فوق همچنین برای یافتن مکانهای سطح مشترک جامد-میانی (Solidus Front) و میانی-مایع (Liquidus Front) استفاده می شود با این تفاوت که در انجماد آلیاژها هیچگونه پرش ناگهانی در نمودار آنتالپی-دما وجود نداشته و برای یافتن مکانهای سالیدوس و لیکیدوس کافیست نقاطی پیدا شوند که آنتالپی در آنها به ترتیب برابر H_s و H_l شود. به عنوان نمونه برای محاسبه زمان قرارگیری سطح مشترک سالیدوس در گره i ام خواهیم داشت.

$$H_i^n > \bar{c}_s T_{sol} \quad H_i^{n+1} < \bar{c}_s T_{sol} \quad (41-2)$$

$$\theta_s = \frac{\bar{c}_s T - H_i^n}{H_i^{n+1} - H_i^n} \quad (42-2)$$

$$t_s = (n + \theta_s)\Delta t \quad (43-2)$$

و به همین ترتیب برای سطح مشترک لیکیدوس :

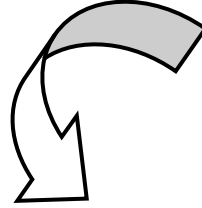
$$H_i^n > \bar{c}_l T_{liq} + Ste \quad H_i^{n+1} < \bar{c}_l T_{liq} + Ste \quad (44-2)$$

$$\theta_l = \frac{(\bar{c}_l T + Ste) - H_i^n}{H_i^{n+1} - H_i^n} \quad (45-2)$$

$$t_l = (n + \theta_l)\Delta t \quad (46-2)$$

در ادامه پایان نامه و در فصل پنجم، معادلات حاکم فوق به همراه شرایط مرزی و روش معکوس مناسب ارائه می شوند.

فصل سوم



مسائل معکوس حرارتی

۳-۱- مقدمه

توسعه کامپیوتر و ابزار محاسباتی، رشد روش های عددی را برای مدل سازی پدیده های فیزیکی تسریع کرده است. برای مدل سازی یک پدیده فیزیکی به یک مدل ریاضی و یک روش حل نیاز است. مدل سازی مسائل هدایت حرارتی نیز به مانند دیگر پدیده های فیزیکی با حل معادلات حاکم امکان پذیر است. برای حل مسائل هدایت حرارتی به اطلاعات زیر نیاز داریم:

➤ هندسه ناحیه حل

➤ شرایط اولیه

➤ شرایط مرزی (دما یا شار حرارتی سطحی)

➤ خواص ترموفیزیکی

➤ و محل و قدرت ترمهای منبع در صورتی که وجود داشته باشند.

پس از حل معادلات حاکم توزیع دما در داخل ناحیه حل به دست می آید. این نوع مسائل را مسائل مستقیم حرارتی می گوئیم. روش های حل مسائل مستقیم از سال ها پیش توسعه یافته اند. این روش ها شامل حل مسائلی با هندسه پیچیده و مسائل غیرخطی نیز می گردند. علاوه بر این پایداری و یکتایی این روش ها نیز بررسی شده است. روش های اولیه عمدتاً بر مبنای حل های تحلیلی بوده اند. این روش ها بیشتر برای مسائل خطی و با هندسه های ساده قابل استفاده هستند. برعکس، روش های عددی دارای این محدودیت نبوده و برای کاربردهای مهندسی بیشتر مورد توجه هستند. دسته دیگر از این مسائل که در دهه های اخیر مورد توجه قرار گرفته اند، مسائل معکوس حرارتی هستند. در این نوع از مسائل یک یا تعدادی از اطلاعات مورد نیاز برای حل مستقیم، دارای مقدار معلومی نمی باشند و ما قصد داریم از طریق اندازه گیری دما در یک یا چند نقطه از ناحیه مورد نظر، به تخمین مقادیر مجهول بپردازیم.

به طور کلی می توان گفت که در مسائل مستقیم حرارتی، علت (شار حرارتی، هندسه و...) معلوم، و هدف یافتن معلول (میدان دما) می باشد. اما در مسائل معکوس حرارتی، معلول (دما در بخش ها و یا تمام میدان)، معلوم می باشد، و هدف یافتن علت (شار حرارتی، هندسه و...) است.

۳-۲- تاریخچه مسائل معکوس حرارتی

شروع تحقیقات بر روی موضوع انتقال حرارت معکوس را می توان دهه ۱۹۵۰ دانست. در همین سالها، مقاله ای روسی توسط شوماکوف^۱ [۵۲] در مورد مسائل انتقال حرارت معکوس به ثبت رسید. یکی از قدیمی ترین مقالات در این زمینه، توسط استولز^۲ [۵۳] گزارش شده است. نویسنده در این مقاله، نرخ انتقال حرارت را در فرآیند آب دهی اجسام با هندسه ساده و محدود محاسبه کرده است. میرسپاسی [۵۴، ۵۵] این کار را با روشی مشابه برای اجسام نیمه بی نهایت از طریق عددی و گرافیکی انجام داده است. آغاز سفرهای فضائی از اواخر دهه ۱۹۵۰ انگیزه مهمی برای گسترش کاربردها و تحقیقات در زمینه IHCP شد. به عنوان مثال محاسبه نرخ انتقال حرارت در اثر گرمایش آئرو دینامیکی بر روی دماغه موشکها و یا اجسامی که وارد جو زمین می شوند از قبیل نازل، شیپوره موشکها و... از جمله مباحث مورد توجه بود [۵۶، ۵۷]. بک^۳ [۵۸، ۵۹] طی مقالاتی در دهه ۱۹۶۰ مفاهیم و روش هایی را برای تخمین شار حرارتی از طریق اندازه گیری دما ارائه داد که در آنها امکان استفاده از گام زمانی کوچکتری نسبت به روش استولز امکان پذیر بود.

یکی دیگر از روش های به کار گرفته شده برای حل مسائل معکوس، روش های بهینه سازی است. در مرجع [۵۹، ۶۰] تاریخچه و مجموعه ای از روش های بهینه سازی که در حل مسائل معکوس به کار می روند، آمده است. یکی از این روش ها روش گرادیان مزدوج است که به طور گسترده ای در مسائل بهینه

¹ Shumakov

² Stolz

³ Beck

سازی مورد استفاده قرار گرفته است. یکی از نکاتی که در این روش حائز اهمیت است، نحوه محاسبه تابعی است که می خواهیم بهینه کنیم. روش های متعددی برای محاسبه گرادیان تابع هدف در روش گرادیان مزدوج وجود دارد.

پارک و چانگ^۱ [۶۱] دو روش مشتق گیری مستقیم و استفاده از معادله الحاقی برای محاسبه گرادیان در روش گرادیان مزدوج را با هم مقایسه کرده اند. در این مقاله نتیجه گرفته اند که اگر چه روش مشتق گیری معمولی آسان و دقیق است، اما مدت زمان بیشتری را برای محاسبه طلب می کند. در عوض بدست آوردن گرادیان از طریق تشکیل معادله الحاقی می تواند زمان محاسبه را کاهش دهد، هر چند که بدست آوردن روابط مورد نیاز، دارای پیچیدگی های ریاضی می باشد.

جانی^۲ و دیگران [۶۲] مسأله انتقال حرارت هدایتی معکوس در حالت چند بعدی را با استفاده از روش گرادیان مزدوج و معادله الحاقی بررسی کرده اند. هوانگ^۳ [۶۳] مسأله تخمین شار حرارتی را برای یک جسم سه بعدی، در حالتی که شار به صورت پیوسته روی مرز تغییر می کند را بررسی کرد.

زیانگ^۴ [۶۴] مقایسه ای بین روش های موجود IHCP انجام داد و همچنین اثر دینامیکی ترموکوپل را بر محاسبات انتقال حرارت معکوس مورد تحلیل قرار داد. شیدفر هم در مقالاتی به بررسی تکنیکهای ریاضی حل IHCP پرداخت [۶۰، ۶۵]. کوثری [۶۶-۶۸] و همکاران نیز با استفاده از روش گرادیان مزدوج و میزان متغیر به بررسی مسائل معکوس هدایت و تشعشع حرارتی پرداخته اند.

حالت دیگری از مسائل معکوس در حوزه تغییر فاز توسط مارکوارت^۵ [۶۹-۷۱] و همکارانش انجام شده است. در این پژوهشها مساله معکوس سه بعدی برای جوشش استخری با استفاده از داده های اندازه

¹ Park and Chung

² Jarny

³ Huang

⁴ Xiang

⁵ Marquardt

گیری شده بررسی شده است. علاوه بر این چندین پایان نامه در دانشگاههای کشور در زمینه مسائل انتقال حرارت معکوس انجام شده و یا در حال انجام است [۷۲-۷۵].

۳-۳- دسته بندی مسائل معکوس حرارتی

به دلیل کاربرد گسترده مسائل معکوس حرارتی در علوم و صنعت، توسعه دسته بندی این گونه مسائل مهم است. در یک دسته بندی مسائل معکوس حرارتی به دو دسته زیر تقسیم می شود:

- مسائل تخمین پارامتر

- مسائل تخمین تابع

در مسائل تخمین پارامتر، هدف، تخمین پارامترها، ثابت ها و یا خواص ترموفیزیکی مانند رسانش گرمایی و یا ظرفیت گرمایی ویژه است. در حالی که در مسائل تخمین تابع، هدف، تخمین یک تابع مانند شار حرارتی سطحی و یا رسانش تماسی در سطح مشترک است که با زمان و یا مکان تغییر می کند. مسائل معکوس حرارتی را همچنین می توان با توجه به طبیعت مسأله به صورت زیر طبقه بندی نمود:

- مسائل معکوس هدایت حرارتی

- مسائل معکوس جابجایی (آزاد یا اجباری)

- مسائل معکوس تشعشع سطحی

- مسائل معکوس تشعشع در محیط های موثر در تشعشع

- مسائل معکوس هدایت و تشعشع همزمان

- مسائل معکوس جابجایی و هدایت همزمان

- مسائل معکوس تغییر فاز (ذوب یا انجماد)

یک دسته بندی دیگر برای مسائل معکوس هدایتی را می توان برپایه نوع مشخصه سببی تخمینی در نظر گرفت که در زیر معرفی شد:

- مسائل تخمین پارامتر
- مسائل تخمین شرط مرزی
- مسائل تخمین شرایط اولیه
- مسائل تخمین هندسه ناحیه حل
- مسائل دیگر

مسائل تخمین پارامتر، شامل مسائلی می شوند که هدف آنها تخمین یک یا چند پارامتر است. این پارامترها معمولاً خواص فیزیکی یک جسم مانند ضریب هدایت حرارتی، چگالی، ظرفیت گرمایی ویژه، ضریب نفوذ حرارتی و... می باشند. این نوع از مسائل معمولاً غیرخطی هستند.

مسائل تخمین شرط مرزی از پرکاربردترین مسائل مورد استفاده در مسائل معکوس هدایت حرارتی هستند، زیرا در اکثر مسائل، تخمین شار حرارتی سطحی از روی اندازه گیری دما در داخل جسم مورد توجه می باشد. در برخی مسائل از این نوع هم هدف یافتن شرط مرزی دما است.

مسائل تخمین شرایط اولیه کمتر از دیگر مسائل مورد بررسی قرار گرفته اند، زیرا نسبت به دیگر مسائل معکوس کاربرد کمتری دارند.

مسائل تخمین هندسه نیز هنگامی که هندسه ناحیه حل کاملاً مشخص نیست و یا به دنبال هندسه بهینه برای یک مسأله خاص باشیم، مطرح می شوند.

۳-۴- حل مسائل معکوس حرارتی

همان طور که در بخش مقدمه اشاره کردیم مسائل معکوس از دیدگاه ریاضی جزو دسته مسائل ناهنجار هستند. بنابراین برای حل این گونه مسائل می بایست روش های خاصی به کار گرفته شود. وجود جواب برای مسائل معکوس حرارتی را می توان با استدلال فیزیکی مسأله بررسی کرد. اما یکتایی جواب تنها برای تعدادی از مسائل به صورت ریاضی اثبات شده است. همچنین مسائل معکوس نسبت به خطاهای اندازه گیری و اغتشاشات در ورودی ها و داده های مسأله بسیار حساس هستند و به همین دلیل بایستی روش های خاصی را برای یافتن جواب این گونه مسائل به کار برد. برای حل این مشکل تیخونوف و آرسنین^۱ [۷۶] روش منظم سازی را ارائه دادند که در آن به منظور کاهش اثر خطاهای ناشی از اندازه گیری دما، جمله هایی به معادله تخمین افزوده می شود. الیفانوف نیز روش منظم سازی تکراری را ارائه داد که در آن بهبود جواب مسأله در یک روند تکراری و متوالی انجام می گیرد. در این روش معیار توقف روند تکرار براساس پایداری جواب نسبت به خطای موجود در داده های ورودی تعیین می شود.

۳-۵- طبقه بندی روش ها

روش هایی که برای حل مسائل معکوس هدایت به کار می روند به طرق مختلف طبقه بندی می شوند. یک طبقه بندی مربوط به توانمندی روش برای حل مسائل اعم از مسائل غیرخطی و خطی است. به عنوان مثال روش تخمین تابع و منظم سازی را می توان برای مسائل غیرخطی نیز به کار برد، در حالی که روش هایی مانند تبدیل لاپلاس منحصراً برای مسائل خطی به کار می روند.

¹ Tikhonov and Arsenin

روش دیگر طبقه بندی براساس روش بدست آوردن جواب معادله هدایت حرارتی است، مانند روش دوهامل، تفاضل محدود، اجزای محدود و حجم محدود و... روش دوهامل تنها برای مسائل خطی کاربرد دارد در حالی که دیگر روش های ذکر شده در مسائل غیرخطی نیز می توانند استفاده شوند. دامنه زمانی در مسائل انتقال حرارت هدایت معکوس را می توان به عنوان معیاری برای طبقه بندی در نظر گرفت. در این تقسیم بندی روش های IHCP به دو گروه تقسیم می شوند.

۱. روش های متوالی

۲. روش های تمام دامنه

این نوع تقسیم بندی مهم ترین نوع تقسیم بندی روش های IHCP است. هرکدام از روش های بالا دارای مزایا و معایب مربوط به خود هستند. در روش های متوالی، مولفه های شار حرارتی به شکل گام به گام و یکی پس از دیگری تخمین زده می شوند. دو روش از این دسته، یکی روش تطابق دقیق یا استولز است و دیگری روش تخمین متوالی تابع می باشد. در روش اول، دماهای بدست آمده از سنسور برابر با دماهای محاسبه شده قرار می گیرند و محاسبات انجام می شود. این روش از نظر محاسباتی بسیار سریع و آسان است اما مشکل آن، این است که نسبت به خطاهای اندازه گیری بسیار حساس و در نتیجه ناپایدار است.

در روش دوم از چند دمای اندازه گیری شده در زمان های آینده نیز برای تخمین شار حرارتی در زمان حال استفاده می شود. این روش که توسط بک ارائه شد برخلاف روش اول به خطاهای اندازه گیری حساسیت کمتری دارد و می توان گام های زمانی کوچکتری را برای اندازه گیری دما به کار برد. استفاده از گام های زمانی کوچک این امکان را به ما می دهد که اطلاعات بیشتری از تغییرات شار حرارتی در طول زمان به دست آوریم.

روش تمام دامنه، روشی کارآمد است که از تمام دماهای اندازه گیری شده به طور همزمان استفاده می کند و تمام مولفه های شار حرارتی در زمان های مختلف را با یکدیگر و به طور همزمان تخمین می زند. این روش به خاطر امکان استفاده از گام های زمانی کوچک مناسب است، اما حجم محاسبات آن در مقایسه با روش مرحله ای خیلی بیشتر است. روش های بهینه سازی از دسته روش های تمام دامنه هستند.

طبقه بندی دیگری که برای حل مسائل معکوس هدایت به کار می روند، براساس ابعاد مسأله معکوس است. اگر هدف مسأله تخمین تنها یک شار حرارتی باشد، مسأله یک بعدی است. در روش دوهمان ابعاد فیزیکی مسأله تأثیری در نحوه حل ندارد بدین معنی که اگر هدف، تخمین تنها یک شار حرارتی باشد، روال حل برای اجسام یک، دو و سه بعدی یکسان است. اگر هدف تخمین دو یا چند شارحرارتی با استفاده از روش دوهمان باشد، مسأله چند بعدی است. اگر از روش هایی همچون تفاضل محدود، اجزاء محدود یا... در مسائل غیرخطی استفاده شود، تعداد مختصات فضایی که برای تحلیل فیزیکی انتقال حرارت هدایت در جسم به کار می رود، بعد مسأله را تعیین می کند.

۳-۶- ارزیابی روش های مسائل معکوس هدایت

به منظور ارزیابی روش های به کار گرفته شده در IHCP باید معیارهای زیر را در نظر گرفت:

۱. کمیت پیش بینی شده در صورتی که داده های اندازه گیری شده دارای دقت بالایی باشند، بایستی دقیق باشد.

۲. روش می بایست نسبت به خطاهای اندازه گیری پایدار باشد (حساسیت نداشته باشد).

۳. روش می بایست دارای پایه های آماری باشد و اجازه دهد تا توزیع های آماری متنوعی برای خطاهای اندازه گیری وجود داشته باشد.

۴. روش نباید نیازمند این باشد که داده های اندازه گیری از قبل هموار شده باشند.
۵. روش می بایست برای گام های زمانی کوچک پایدار باشد این عمل باعث دقت بهتر در تغییرات زمانی کمیت مجهول می شود.
۶. روش می بایست امکان بهره گیری از چندین سنسور را در اختیار ما قرار دهد.
۷. روش نباید نیازمند مشتقات اول پیوسته مجهول باشد اگر چه روش باید قادر باشد تا توابعی را که دارای ناپیوستگی هستند، بازیابی کند.
۸. دانستن زمان شروع دقیق کاربرد شار حرارتی سطح یا ترم چشمه مجهول نباید مورد نیاز باشد. معمولاً زمان ابتدای اعمال شار حرارتی هم زمان با زمان اندازه گیری دما توسط سنسور نیست. همچنین زمان دقیق تغییرات ناگهانی شار حرارتی نیز برای ما معلوم نیست.
۹. روش نباید به تعداد مشخصی از داده های اندازه گیری محدود باشد.
۱۰. روش می بایست قادر باشد تا در موقعیت های فیزیکی پیچیده شامل جامدهای مرکب، مرزهای متحرک، خواص وابسته زمانی انتقال حرارت جابجایی یا تشعشعی، مدل های ترکیبی از انتقال حرارت، مسائل چند بعدی و هندسه های غیرمتعارف عمل کند.
۱۱. روش می بایست جهت برنامه نویسی کامپیوتری ساده باشد.
۱۲. هزینه محاسبات می بایست متعادل باشند.
۱۳. روش نبایست به گونه ای باشد که کاربر برای بهره گیری از آن در اجسام با هندسه های مختلف نیازمند مهارت بالایی در ریاضیات باشد.
۱۴. روش می بایست قادر به گسترش به بیش از یک مجهول باشد.

۳-۷ کاربرد روش های معکوس در مهندسی

در سالهای اخیر روش های معکوس کاربرد زیادی در صنایع یافته اند. محققین دانشگاهی و صنعتی، مسائل مختلف مدل سازی، آنالیز و توسعه روش های عددی نوین را مورد توجه قرار داده اند. کاربرد روشهای معکوس در مسائل حرارتی را به سه دسته زیر می توان تقسیم کرد:

۱. کاربرد در مسائل تعیین و شناخت

۲. کاربرد در مسائل طراحی

۳. کاربردهای کنترلی

متداولترین کاربرد مسائل معکوس مربوط به دسته اول می باشد. این نوع مسائل شامل تحلیل و آنالیز داده های تجربی می باشند. در این دسته از مسائل، هدف تعیین یک تابع و یا ثابت می باشد که اندازه گیری مستقیم آن مشکل یا غیرعملی است.

دسته دوم مسائل که شامل مسائل طراحی می باشند معمولاً شامل اندازه گیری نمی باشند. بلکه رسیدن به یک طراحی و یا بهینه سازی یک طرح از طریق مینیمم کردن یک تابع تعریف کننده یک مسئله معکوس (تابع هدف)، می باشد. به عنوان مثال می توان به مسئله استفان اشاره کرد.

در بعضی مواقع انجماد با سرعت خاص مورد نظر می باشد. با تعیین شرط مرزی مجهول، می توان سرعت انجماد مورد نظر را تأمین کرد. کاربردهای دیگر این گونه مسائل را می توان در شاخه های مختلف علوم مهندسی نظیر مسائل تصفیه، محاسبه اتلاف مواد و یافتن خوردگی در سطح را مشاهده نمود.

مسائل کنترلی سومین دسته از مسائل معکوس می باشند. در این نوع مسائل هدف تعیین علت (پارامتر کنترل کننده) با اندازه گیری یک متغیر می باشد. در بسیاری از مسائل از این نوع، باید یک مسأله معکوس را حل نمود.

یکی از متداولترین کاربردهای مسائل معکوس تعیین شرط مرزی مجهول و یا تخمین یک پارامتر می باشد. به عنوان نمونه می توان به تعیین ضرایب جابجایی اشاره نمود. تعیین این ضرایب نیاز به تعیین دمای سطحی، دمای سیال و شار حرارتی با توجه به رابطه زیر دارد:

$$q = h(T_s - T_a) \quad (۱-۳)$$

که T_a و T_s به ترتیب دماهای سطحی و سیال بوده و q شار حرارتی می باشد. تعیین ضرایب حرارتی با استفاده از رابطه بالا نیاز به اندازه گیری دمای سطح دارد. دماهای اندازه گیری شده به وسیله دماسنجی که بر روی سطح قرار دارد حاوی خطای بالایی است. این خطا در مواردی که سرعت سیال بالا می باشد، افزایش می یابد. راه مناسبتر برای محاسبه، استفاده از یک روش معکوس می باشد.

در مقاله استولز یک روش برای تعیین ضریب انتقال حرارت، زمانی که راهی برای قرار دادن دماسنج داخل جسم وجود ندارد، ارائه گردیده است. در این روش جسم مورد نظر را در داخل یک فلز مایع با نقطه انجماد پایین غوطه ور می کنند. در نتیجه یک لایه از فلز روی جسم به وجود می آید. ضریب انتقال حرارت مجهول را می توان با حل یک مسئله استفان برای سطح خارجی بدست آورد. این روش برای اجسام بسیار نازک نیز کاربرد دارد.

مثال دیگر این کاربرد، تخمین شار حرارتی بر روی دیواره یک کوره است که با فرض انتقال حرارت یک بعدی می توان شار حرارتی را بدست آورد [۷۷]. یک کاربرد دیگر این نوع مسائل، جهت تعیین دمای سطحی یک ترک در یک لوله که دارای نشت، بررسی شده است [۷۸]. کاربرد دیگر، یک روش برای کنترل فرآیند گرم کردن یک جسم داخل کوره می باشد [۷۹].

انتقال حرارت در اجسام متخلخل کاربرد دیگر روشهای معکوس است. مسائل مورد بررسی در اجسام متخلخل، تعیین شرط مجهول یا خواص ترموفیزیکی است. کاربردهای مختلف مسائل معکوس در زمینه متالورژی را می توان به صورت زیر خلاصه کرد:

۱. کنترل فرآیند گرم کردن یک جسم داخل کوره

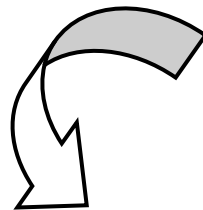
۲. مدل سازی فرایند سردسازی فولاد به منظور رسیدن به دمای سطحی مورد نظر

۳. مدل سازی فرایند کربنیزه کردن فولاد و بررسی نفوذ کربن در فولاد

مثالهای که در زمینه روش معکوس بیان گردید، نشان می دهد که بسیاری از آنها شامل تعیین یک شرط مرزی مجهول می باشد. در واقع تعیین خواص ترموفیزیکی که یکی دیگر از کاربردهای روشهای معکوس است، در بسیاری از مواقع با روشهای دیگر امکان پذیر است. یکی دیگر از کاربردهای روش های معکوس تعیین قابلیت نفوذ یک جسم جامد است. نفوذ در یک جسم جامد بسیار کند صورت می گیرد و معمولاً به حالت پایدار نمی رسد، در این حالت نیز روشهای معکوس، می توانند به کار گرفته شوند.

کاربردهای دیگر از روش های معکوس در مرجع [۸۰] بررسی شده است.

فصل چهارم



روشهای بهینه سازی توابع

در این فصل به معرفی و بررسی روش هایی که برای بهینه سازی توابع استفاده می شوند، می پردازیم. ابتدا به تعریف مسأله بهینه سازی پرداخته و در ادامه مفاهیم مربوط به روند انجام فرایند بهینه سازی در یک مسأله معرفی می شوند. انواع روشهای مستقیم و غیرمستقیم بهینه سازی معرفی می شوند. از آنجا که در این پایان نامه از روش غیرمستقیم برای بهینه سازی استفاده کرده ایم، بنابراین بیشتر به این روش ها پرداخته ایم. در تمامی این روش ها محاسبه گرادیان تابع الزامی است، بنابراین بررسی خواص و نحوه محاسبه آن آورده شده است. در ادامه شرح مختصری از انواع روش های غیرمستقیم به همراه الگوریتم محاسباتی آنها آورده شده است.

۴-۱ مسائل بهینه سازی

یک مسأله بهینه سازی می تواند به صورت زیر بیان شود:

تعیین بردار $\bar{X} = [x_1, x_2, \dots, x_n]$ به گونه ای که تابع $f(\bar{X})$ تحت شرایط زیر مینیمم شود.

$$\begin{cases} l_j(\bar{X}) = \alpha & j = 1, 2, \dots, p \\ g_j(\bar{X}) \leq \beta & j = 1, 2, \dots, r \end{cases} \quad (1-4)$$

که در آن \bar{X} یک بردار n بعدی به نام بردار طراحی، $f(\bar{X})$ تابع هدف و $l_j(\bar{X})$ و $g_j(\bar{X})$ به ترتیب قیدهای برابری و نابرابری نامیده می شوند. در حالت کلی تعداد متغیرها n و تعداد قیود r یا p رابطه ای با هم ندارند. مسأله فوق یک مسأله بهینه سازی مقید نامیده می شود. در مسائلی که قیودی وجود ندارند با یک مسأله بهینه سازی نامقید روبرو هستیم.

نقطه X^* را مینیمم یا نقطه سکون تابع هدف $f(\bar{X})$ می نامیم اگر داشته باشیم:

$$\nabla f|_{X^*} = 0 \quad (2-4)$$

شرط بالا یک شرط لازم است در صورتی که ماتریس هسین^۱ معین مثبت باشد آنگاه حتماً نقطه مینیمم نسبی خواهد بود. یعنی اگر داشته باشیم:

$$[H]_{x^*} = \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right]_{x^*} \quad (3-4)$$

البته شرط بالا در صورتی صادق است که تابع $f(\bar{X})$ مشتق پذیر باشد.

۲-۴ دسته بندی روش های بهینه سازی

روش های حل مسائل مینیمم سازی به دو دسته روش های جستجوی مستقیم و روش های کاهش تقسیم بندی می شوند.

برای استفاده از روش های جستجوی مستقیم در محاسبه نقطه مینیمم، تنها به مقدار تابع هدف نیاز است و نیازی به مشتقات جزئی تابع نیست. بنابراین اغلب، روشهای غیرگرادیانی یا روش های مرتبه صفر نامیده می شوند زیرا از مشتقات مرتبه صفر تابع استفاده می کنند. این روش ها بیشتر برای مسائلی کاربرد دارند که تعداد متغیرها کم و یا محاسبه مشتقات تابع مشکل می باشند و بطور کلی کارایی کمتری نسبت به روشهای کاهش دارند.

روشهای کاهش علاوه بر مقدار تابع به مشتقات اول و در برخی موارد به مشتقات مرتبه دوم تابع هدف نیز نیاز دارند. از آنجا که در روش های کاهش، اطلاعات بیشتری از تابع هدفی که (از طریق مشتقات آن) مینیمم می شود، مورد استفاده قرار می گیرد، این روشها کارایی بیشتری نسبت به روش های جستجوی مستقیم دارند.

¹ Hessian Matrix

روشهای کاهشیه همچنین روشهای گرادیدانی نیز نامیده می شوند. در این بین روش هایی که فقط به مشتق اول تابع هدف نیاز دارند، روش های مرتبه اول و آنهایی که به مشتق اول و دوم هر دو نیاز دارند، روش های مرتبه دوم نامیده می شوند. در جدول (۱-۴) روش هایی از هر دو دسته آمده است.

جدول (۱-۴): دسته بندی روشهای بهینه سازی

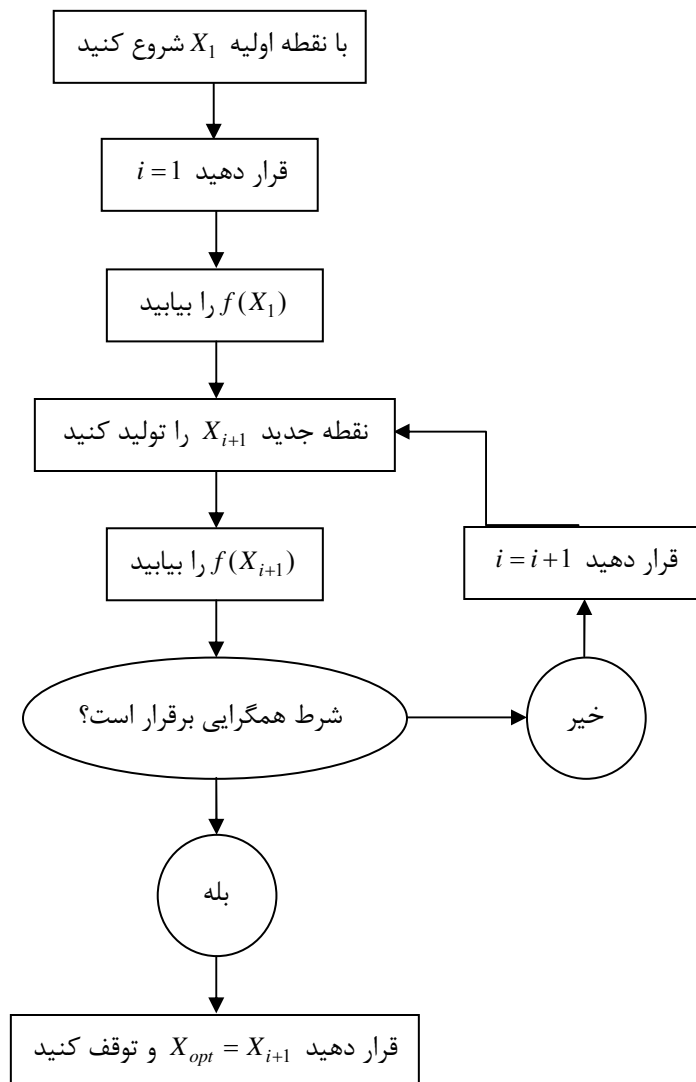
روش های جستجوی مستقیم	روش های کاهشیه
روش جستجوی تصادفی	بیشترین کاهش
جستجوی شبکه	گرادیدان مزدوج
روش تک متغیر	روش نیوتن
جستجوی الگو	روش لونبرگ-مارکورات
	میزان متغیر

۳-۴ راه حل کلی

تمام روش های مینیمم سازی نامقید اساساً تکراری هستند و از این رو از یک حدس اولیه شروع می کنند و به شکل ترتیبی به سمت نقطه مینیمم پیش می روند. طرح کلی این روش ها در شکل (۱-۴) نشان داده شده است.

باید توجه شود تمام روش های مینیمم سازی نامقید:

۱. نیاز به نقطه اولیه X_1 برای شروع تکرار دارند.
۲. با یکدیگر تنها در نحوه تولید نقطه بعدی X_{i+1} از X_i تفاوت دارند.



شکل (۴-۱): نمودار روند بهینه سازی تابع هدف

۴-۴ نرخ همگرایی

روش های مختلف بهینه سازی، نرخ همگرایی مختلف دارند. به طور کلی یک روش، همگرایی از مرتبه p

دارد اگر داشته باشیم:

$$\frac{\|X_{i+1} - X^*\|}{\|X_i - X^*\|^p} \leq l, \quad l \geq 0, p \geq 1 \quad (4-4)$$

که X_i و X_{i+1} نقاط محاسبه شده در پایان تکرارهای i و $i+1$ هستند. X^* نقطه بهینه و $\|X\|$ نشان دهنده طول یا نرم بردار X است که از رابطه زیر بدست می آید:

$$\|X\| = \sqrt{X_1^2 + X_2^2 + \dots + X_N^2} \quad (5-4)$$

اگر $p=1$ و $0 \leq l \leq 1$ باشد، روش همگرای خطی (متناظر با همگرایی آهسته) و اگر $p=2$ باشد، روش همگرای مرتبه دوم (متناظر با همگرایی سریع) نامیده می شود. یک روش بهینه سازی، همگرای فوق خطی است اگر:

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \frac{\|X_{i+1} - X^*\|}{\|X_i - X^*\|^p} \rightarrow 0 \quad (6-4)$$

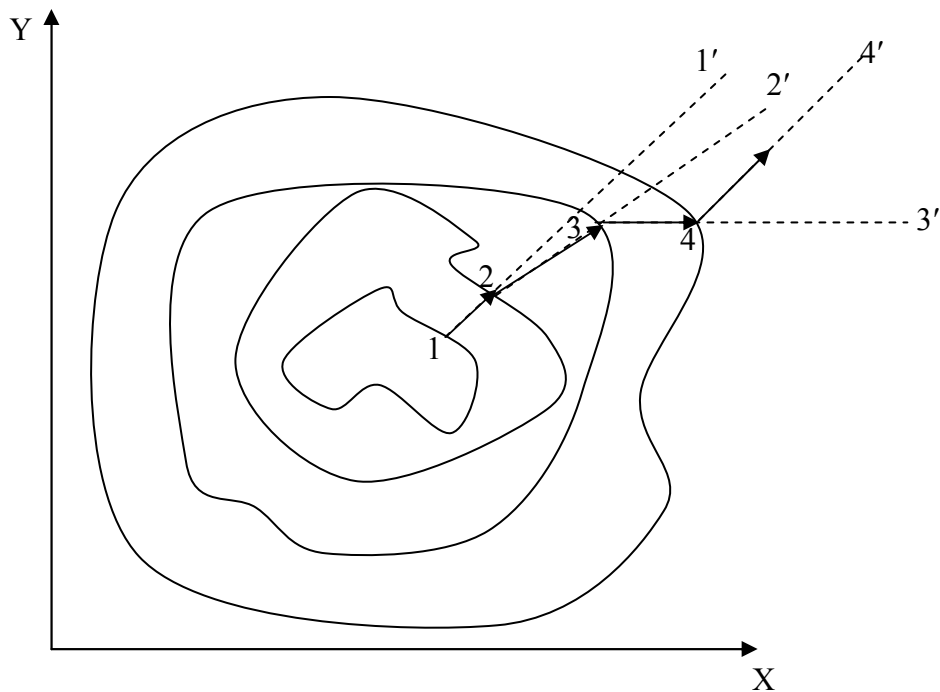
تعریف دیگری برای روش همگرایی مرتبه دوم وجود دارد: اگر یک روش مینیمم سازی با استفاده از روند دقیق ریاضی بتواند نقطه مینیمم یک تابع درجه دوم n متغیره را در n تکرار پیدا کند. روش همگرای مرتبه دوم نامیده می شود.

۵-۴ گرادیان تابع

گرادیان تابع، یک بردار n مولفه ایست که با رابطه زیر داده می شود:

$$\nabla f = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right]^T \quad (7-4)$$

اگر از یک نقطه در فضای n بعدی در راستای گرادیان حرکت کنیم، مقدار تابع با سریع ترین نرخ افزایش می یابد. بنابراین جهت گرادیان، جهت بیشترین افزایش نیز نامیده می شود.



شکل (۲-۴): جهت های سریع ترین افزایش

اما جهت بیشترین افزایش یک خاصیت محلی است و نه سراسری. این مطلب در شکل (۲-۴) نشان داده شده است. در این شکل، بردار گرادیان ∇f محاسبه شده در نقاط 1, 2, 3, 4 به ترتیب در جهت های $11'$ و $22'$ و $33'$ و $44'$ قرار دارد. بنابراین در نقطه 1 مقدار تابع در جهت $11'$ با سریع ترین نرخ افزایش می یابد و به همین ترتیب اگر به تعداد بی نهایت مسیر کوچک در جهت های سریع ترین افزایش حرکت کنیم، مسیر حرکت یک منحنی شبیه به منحنی 1-2-3-4 خواهد بود.

از آنجا که بردار گرادیان جهت بیشترین افزایش مقدار تابع را نشان می دهد، منفی بردار گرادیان جهت سریع ترین کاهش را نشان می دهد. بنابراین انتظار داریم روش هایی که از بردار گرادیان برای بهینه سازی استفاده می کنند نسبت به روش های دیگر سریع تر به نقطه مینیمم برسند. بنابراین دو قضیه زیر را بدون اثبات می آوریم.

۱. بردار گرادیان جهت سریع ترین افزایش را نشان می دهد.

۲. بیشترین نرخ تغییر تابع f در هر نقطه X^* ، برابر اندازه بردار گرادیان در آن نقطه است.

۴-۵-۱ محاسبه گرادیان

محاسبه گرادیان نیاز به محاسبه مشتقات جزئی $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ ($i=1,2,\dots,n$) دارد. سه حالت وجود دارد که

محاسبه گرادیان را مشکل می کند:

۱. تابع در تمامی نقاط مشتق پذیر است، اما محاسبه مولفه های بردار گرادیان غیرعملی است.

۲. رابطه ای برای مشتقات جزئی $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ می توان بدست آورد، اما محاسبه آن نیازمند زمان محاسباتی

زیادی است.

۳. گرادیان تابع در تمامی نقاط تعریف نشده باشد.

در مورد اول می توان از فرمول تفاضل محدود پیشرو برای تخمین مشتق جزئی استفاده کرد:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x_i} \right|_{X_m} = \frac{f(X_m + \Delta x_i \cdot u_i) - f(X_m)}{\Delta x_i} \quad i=1,2,\dots,n \quad (۸-۴)$$

برای یافتن نتیجه بهتر می توان از فرمول اختلاف مرکزی محدود زیر استفاده کرد:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x_i} \right|_{X_m} = \frac{f(X_m + \Delta x_i \cdot u_i) - f(X_m - \Delta x_i \cdot u_i)}{2\Delta x_i} \quad i=1,2,\dots,n \quad (۹-۴)$$

در روابط بالا Δx_i یک کمیت اسکالر کوچک و u_i برداری n بعدی است که مولفه i ام آن یک، و مابقی صفر هستند. در محاسبات، مقدار Δx_i را می بایست با دقت انتخاب نمود، زیرا کوچک بودن بیش از حد آن ممکن است اختلاف میان مقادیر محاسبه شده تابع در $(X_m + \Delta x_i \cdot u_i)$ و $(X_m - \Delta x_i \cdot u_i)$ را بسیار کوچک کرده، و موجب افزایش خطای گرد کردن شود و نتایج را با خطا همراه سازد. به همین ترتیب

بزرگ بودن بیش از اندازه Δx_i نیز خطای برشی را در محاسبه گرادیان ایجاد می کند. در حالت دوم استفاده از فرمول های تفاضل محدود پیشنهاد می شود. برای حالت سوم با توجه به این نکته که گرادیان در تمام نقاط تعریف شده نیست، نمی توان از فرمول های تفاضل محدود استفاده کرد. بنابراین در این موارد مینیمم کردن فقط با استفاده از روش های مستقیم امکان پذیر است.

۴-۵-۲ تعیین طول گام بهینه در جهت کاهش تابع

در بیشتر روش های بهینه سازی، نیاز است که نقطه مینیمم در یک راستای مشخص را تعیین نمود. بنابراین لازم است نرخ تغییر تابع هدف از یک نقطه مانند \bar{X}_i ، در راستای مشخصی مانند \bar{S}_i ، نسبت به پارامتری چون λ محاسبه شود. باید در نظر داشت که موقعیت هر نقطه در این راستا را می توان با توجه به نقطه X_i ، به صورت $\bar{X}_{i+1} = \bar{X}_i + \lambda \bar{S}_i$ نشان داد. بنابراین نرخ تغییر تابع نسبت به این متغیر λ در راستای \bar{S}_i را می توان به صورت زیر نشان داد:

$$\frac{df}{d\lambda} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial x_j}{\partial \lambda} \quad (10-4)$$

که در رابطه فوق x_j مولفه j -ام \bar{X}_i است. از طرفی داریم:

$$\frac{\partial x_j}{\partial \lambda} = \frac{\partial}{\partial \lambda} (x_{ij} + \lambda s_{ij}) = s_{ij} \quad (11-4)$$

که x_{ij} و s_{ij} مولفه های j -ام \bar{X}_i و \bar{S}_i هستند. بنابراین نرخ تغییر تابع در راستای \bar{S}_i برابر است با:

$$\frac{df}{d\lambda} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_j} \cdot s_{ij} = \nabla f^T \cdot \bar{S}_i \quad (12-4)$$

در صورتی که λ^* تابع f را در راستای \bar{S}_i مینیمم کند، در نقطه $\bar{X}_i + \lambda^* \bar{S}_i$ می توان نوشت:

$$\left. \frac{df}{d\lambda} \right|_{\lambda=\lambda^*} = \nabla f^T \cdot \bar{S}_i = 0 \quad (13-4)$$

بنابراین مینیمم تابع، در راستای \bar{S}_i ، در نقطه $\bar{X}_i + \lambda^* \bar{S}_i$ می باشد.

۴-۶ معیار همگرایی

معیارهای زیر می توانند برای بررسی همگرایی در محاسبات تکراری به کار روند:

- در صورتی که تغییرات تابع در دو تکرار متوالی از مقدار معینی کوچک تر شود:

$$\left| \frac{f(\bar{X}_{i+1}) - f(\bar{X}_i)}{f(\bar{X}_i)} \right| \leq \varepsilon_1 \quad (14-4)$$

- زمانی که مشتقات جزئی (گرادیان مولفه ها) به اندازه کافی کوچک شود:

$$\left| \frac{\partial f}{\partial x_i} \right| \leq \varepsilon_2 \quad (15-4)$$

- زمانی که تغییرات بردار مورد نظر در دو تکرار متوالی کوچک شود:

$$\left| \bar{X}_{i+1} - \bar{X}_i \right| \leq \varepsilon_3 \quad (16-4)$$

که ε_1 ، ε_2 و ε_3 مقادیر معین کوچکی در نظر گرفته می شوند.

۴-۷ روش کاهش سریع

استفاده از قرینه بردار گرادیان به عنوان جهت مینیمم سازی اولین بار توسط کوشی انجام گرفت. در این روش محاسبات از نقطه ای مانند X_1 شروع شده و طی فرآیندهای تکراری با حرکت در جهت سریع ترین نرخ کاهش، نهایتاً به نقطه مینیمم می رسد. مراحل مختلف این روش را می توان به صورت زیر در نظر گرفت:

۱. شروع محاسبات از یک نقطه \bar{X}_1 دلخواه به عنوان اولین تکرار ($i=1$)

۲. یافتن جهت \bar{S}_i به صورت $\bar{S}_i = -\nabla f_i = -\nabla f(\bar{X}_i)$

۳. محاسبه طول گام بهینه λ_i^* در جهت \bar{S}_i و قراردادن $\bar{X}_{i+1} = \bar{X}_i + \lambda_i^* \bar{S}_i$ و یا $\bar{X}_{i+1} = \bar{X}_i - \lambda_i^* \nabla f_i$.

۴. بررسی بهینه بودن نقطه \bar{X}_{i+1} و پایان محاسبات در صورت مینیمم بودن این نقطه، در غیر این صورت

قراردادن $i = 2$ و ادامه محاسبات از مرحله ۲.

۴-۸ روش گرادیان مزدوج

۴-۸-۱ جهت های مزدوج

فرض کنید A یک ماتریس متقارن $n \times n$ باشد. یک مجموعه از n بردار یا جهت $\{S_i\}$ مزدوج نامیده می شود اگر داشته باشیم:

$$S_i^T A S_j = 0, \quad i \neq j, \quad i=1,2,\dots,n \quad j=1,2,\dots,n \quad (17-4)$$

مشاهده می شود که جهات متعامد حالت خاصی از جهات مزدوج هستند.

اگر f یک تابع درجه دوم مانند زیر باشد:

$$f = \frac{1}{2} \bar{X}^T A \bar{X} + B^T \bar{X} + C \quad (18-4)$$

که به شکل ترکیبی در جهات مزدوج مینیمم شود، مینیمم تابع در n تکرار یا کمتر به دست می آید. سرعت همگرایی روش کاهش سریع را می توان با ترکیب جهت های کاهش تابع به میزان قابل توجهی افزایش داد. در این صورت روش گرادیان مزدوج را بدست می دهد که در آن از جهت های مزدوج برای کاهش تابع استفاده می شود. روشهای مینیمم سازی که از جهت های مزدوج بهره می برند، همگرایی مرتبه ۲ دارند. این خاصیت از این جهت دارای اهمیت بسیار است که می تواند این اطمینان را دهد که بتواند مینیمم یک تابع مرتبه دوم n متغیره را در n یا کمتر از n تکرار پیدا کند.

از آنجا که هر تابع دلخواهی را در نزدیکی نقطه بهینه، می توان با دقت خوبی به صورت یک تابع درجه دوم تقریب زد می توان از این روش انتظار داشت، که در تعداد تکرار کمتری نقطه مینیمم را پیدا کنند.

در این روش با محاسبه گرادیان مورد نظر می توان بعد از هر مینیمم سازی یک بعدی، یک جهت ترکیبی را بدست آورد. چگونگی ایجاد جهت های مزدوج و الگوریتم این روش در ادامه آورده شده است.

۲-۸-۴ شرح روش گرادیان مزدوج

توسعه الگوریتم این روش با انجام اصلاحاتی بر روی روش کاهش سریع انجام می گیرد و برای اعمال بر روی یک تابع درجه دوم مثل $f(\bar{X}) = \frac{1}{2} \bar{X}^T A \bar{X} + B^T \bar{X} + C$ به گونه ای صورت می گیرد که جهات جدید به وجود آمده متقابلاً با هم مزدوج باشند، فرض کنید \bar{X}_1 نقطه شروع فرآیند مینیمم یابی و اولین جهت جستجوی منطبق بر جهت سریع ترین نرخ کاهش باشد:

$$\bar{S}_1 = -\nabla f_1 = -A\bar{X}_1 - B \quad (19-4)$$

$$\bar{X}_2 = \bar{X}_1 + \lambda_1^* \bar{S}_1 \quad (20-4)$$

$$\bar{S}_1 = \frac{\bar{X}_2 - \bar{X}_1}{\lambda_1^*} \quad (21-4)$$

λ_1^* مقدار تابع را در جهت \bar{S}_1 مینیمم می کند بنابراین:

$$\bar{S}_1^T \nabla f_1 |_{\bar{X}_2} = 0 \quad (22-4)$$

به این ترتیب مقدار λ_1^* را می توان بدست آورد:

$$\lambda_1^* = \frac{-\bar{S}_1^T (A\bar{X}_1 + B)}{\bar{S}_1^T A \bar{S}_1} = -\frac{\bar{S}_1^T \nabla f_1}{\bar{S}_1^T A \bar{S}_1} \quad (23-4)$$

جهت کاهش در مرحله دوم به صورت ترکیب خطی از \bar{S}_1 و ∇f_2 در نظر گرفته می شود:

$$\bar{S}_2 = -\nabla f_2 + \beta_2 \bar{S}_1 \quad (24-4)$$

مقدار β_2 به گونه ای محاسبه می شود که \bar{S}_1 و \bar{S}_2 با تعریف زیر مزدوج شوند:

$$\bar{S}_1^T A \bar{S}_2 = 0 \quad (25-4)$$

با ترکیب روابط فوق می توان برای β_2 رابطه زیر را بدست آورد:

$$\beta_2 = \frac{-\nabla f_2^T \nabla f_2}{\nabla f_1^T \bar{S}_1} = \frac{\nabla f_2^T \nabla f_2}{\nabla f_1^T \nabla f_1} \quad (26-4)$$

به همین ترتیب جهت کاهش بعدی را می توان از ترکیب خطی \bar{S}_1 و \bar{S}_2 و ∇f_3 بدست آورد:

$$\bar{S}_3 = -\nabla f_3 + \beta_3 \bar{S}_2 + \delta_3 \bar{S}_1 \quad (27-4)$$

که مقادیر β_3 و δ_3 را با مزدوج در نظر گرفتن \bar{S}_3 نسبت به \bar{S}_1 و \bar{S}_2 بدست می آید. با استفاده از شرط

$$\bar{S}_1^T A \bar{S}_3 = 0 \quad \delta_3 = 0 \quad \text{بدست می آید. مقدار } \beta_3 \text{ نیز به صورت زیر خواهد شد:}$$

$$\beta_2 = \frac{\nabla f_3^T \nabla f_3}{\nabla f_2^T \nabla f_2} \quad (28-4)$$

و در نتیجه:

$$\bar{S}_3 = -\nabla f_3 + \beta_3 \bar{S}_2 \quad (29-4)$$

صورت کلی دو رابطه فوق را برای فرآیند تکرارپذیر می توان به شکل زیر نوشت:

$$\bar{S}_i = -\nabla f_i + \beta_i \bar{S}_{i-1} \quad (30-4)$$

$$\beta_i = \frac{\nabla f_i^T \nabla f_i}{\nabla f_{i-1}^T \nabla f_{i-1}} \quad (31-4)$$

دو رابطه اخیر مسیر جستجوی کاهش تابع را ارائه می کنند.

۳-۸-۴ الگوریتم روش گرادیان مزدوج

الگوریتم روش تکراری گرادیان مزدوج را می توان به صورت زیر در نظر گرفت:

۱. شروع محاسبات با نقطه دلخواه \bar{X}_1 .

۲. قراردادن اولین مسیر جستجو به صورت $\bar{S}_1 = -\nabla f(X_1) = -\nabla f_1$.

۳. یافتن نقطه \bar{X}_2 با توجه به $\bar{X}_2 = \bar{X}_1 + \lambda_1^* \bar{S}_1$ که λ_1^* رابطه طول گام بهینه در مسیر \bar{S}_1 می باشد.

۴. قراردادن $i = 2$ برای تکرار بعدی و انجام مرحله بعد.

۵. محاسبه $\nabla f_i = \nabla f(X_i)$ و قراردادن:

$$\bar{S}_i = -\nabla f_i + \frac{\|\nabla f_i\|^2}{\|\nabla f_{i-1}\|^2} \bar{S}_{i-1} \quad (۳۲-۴)$$

۶. محاسبه طول گام بهینه λ_i^* در جهت \bar{S}_i و یافتن نقطه جدید: $\bar{X}_{i+1} = \bar{X}_i + \lambda_i^* \bar{S}_i$.

۷. بررسی نقطه \bar{X}_{i+1} و پایان محاسبات در صورت بهینه بودن. در غیر این صورت با قرار دادن $i = i+1$

محاسبات از مرحله ۴ به بعد ادامه می یابد.

در این زمینه نکات زیر قابل توجه می باشند:

روش گرادیان مزدوج در اصل به عنوان روشی برای حل دستگاه معادلات خطی بنیان گذاری شده است و

ازسبک^۱ در کتاب خود شرح کاملی از تکنیک های مختلف این روش ارائه داده است. از آنجائی که جهت

های S_i استفاده شده در این روش با ماتریس A مزدوج هستند ($\bar{S}_i^T A \bar{S}_i = 0$)، این فرآیند می بایست

برای یک تابع مرتبه دوم در n تکرار یا کمتر از آن همگرا شود. این روش برای توابع مرتبه دوم ناهنجار به

تعداد بیشتری تکرار برای همگرایی نیازمند است. علت این موضوع خطای تجمعی گرد کردن است.

چون S_i از رابطه (۴-۳۰) بدست می آید، هر خطای ناشی از کم بودن دقت λ_i^* در محاسبه و خطای ناشی

از گرد کردن تجمعی در ترم $\bar{S}_{i-1} \frac{\|\nabla f_i\|^2}{\|\nabla f_{i-1}\|^2}$ به مرحله بعدی \bar{S}_i نیز راه پیدا می کند و جهت کاهش \bar{S}_i به

صورت قابل توجهی توسط این خطاها، منحرف می شود. بنابراین لازم است تا بعد از هر m تکرار

¹ Ozisik

برخلاف مقدار موجود در الگوریتم، برابر با $-\nabla f_{m+1}$ قرار گیرد. این کار شروع مجدد نام دارد. فلچر-ریوز^۱ مقدار $m = n + 1$ را برای شروع مجدد پیشنهاد دادند که n تعداد متغیرهای مجهول می باشد. با وجود محدودیتهای گفته شده، روش گرادیان مزدوج از لحاظ یافتن مسیرهای مزدوج کاهش بسیار موثرتر از روش کاهش سریع عمل می کند.

۴-۸-۴ دسته بندی روش های گرادیان مزدوج

روش گرادیان مزدوج برحسب چگونگی یافتن جهت مزدوج، به سه نسخه متفاوت تقسیم می شود در این قسمت تنها معادلات هر یک از سه نسخه آورده شده است.

صورت کلی جهت مزدوج که خود تابعی از $f(X)$ است به صورت زیر می باشد:

$$P^n(X) = -J^n(x, y) + \gamma^n P^{n-1}(X) + \varphi^n P^q(X) \quad (۳۳-۴)$$

به طوری که مشاهده می شود این جهت ترکیبی از منفی گرادیان تابع در تکرار n ام و جهت مزدوج در تکرارهای $n-1$ ام و q ام می باشد. با این کار زاویه بین جهت کاهش و منفی جهت گرادیان از 90° درجه کمتر می شود که این امر می تواند فرآیند یافتن مینیمم را تضمین کند. اندیس q در رابطه فوق شماره تکراری است که برای بهبود روش گرادیان مزدوج، شروع مجدد در آن رخ داده است. ضرایب γ^n و φ^n در هر یک از نسخه های گرادیان مزدوج با روابطی که در ادامه می آیند تعریف می گردند.

در نسخه اول روش گرادیان مزدوج، که به نسخه فلچر-ریوز [۳۱] معروف است ضرایب γ^n و φ^n به صورت زیر تعریف می شوند:

$$\gamma^n = \frac{\int_{x=0}^L (J^n)^2 dx}{\int_{x=0}^L (J^{n-1})^2 dx}, \quad \gamma^0 = 0, \varphi^n = 0 \quad (۳۴-۴)$$

¹ Fletcher and Reeves

لازم به ذکر است که رابطه فوق فرم انتگرالی رابطه (۴-۳۱) است، با این تعریف همه گرادیان ها به صورت نقطه ای در نظر گرفته شده و محاسبه ضرایب مزدوج از طریق انتگرال گیری گرادیان های نقطه ای بر روی مرز مجهول انجام می گیرد. برای این کار تغییرات گرادیان بر روی هرالمان به صورت خطی در نظر گرفته می شود. براین اساس جهت مزدوج برای هر نقطه نیز دارای مقدار عددی است و اصلاح نقاط مرزی با جابجایی هر نقطه در راستای بردار عمود بر مرز به مقدار $\beta^n P^n(X)$ انجام می گیرد.

در نسخه دوم که نسخه پولاک-ریبیر^۱ [۱] نام دارد، ضرایب این گونه می باشند:

$$\gamma^n = \frac{\int_{x=0}^L (J^m - J^{m-1})^2 dx}{\int_{x=0}^L (J^{m-1})^2 dx}, \quad \gamma^0 = 0, \varphi^n = 0 \quad (۳۵-۴)$$

استفاده از هر یک از روابط فلچر-ریوز و پولاک-ریبیر برای محاسبه ضرایب مزدوج می تواند زاویه بین جهت کاهش و منفی گرادیان را از ۹۰ درجه کمتر کند و در نتیجه می توان اطمینان داشت که مینیمم تابع مورد نظر را بیابند. کارآیی این دو روش برای مسائل خطی تعیین پارامتر یکسان است.

بیل و پاول^۲ براساس نسخه دوم روابط زیر را برای ضرایب مزدوج ارائه کردند که نسخه پاول-بیل در روش گرادیان مزدوج نام دارد.

$$\gamma^n = \frac{\int_{x=0}^L (J^m - J^{m-1}) J^m dx}{\int_{x=0}^L (J^m - J^{m-1}) P^{n-1} dx}, \quad \gamma^0 = 0 \text{ for } n = 0 \quad (۳۶-۴)$$

$$\varphi^n = \frac{\int_{x=0}^L (J'^{q+1} - J'^q) J^m dx}{\int_{x=0}^L (J'^{q+1} - J'^q) P^q dx}, \quad \varphi^0 = 0 \text{ for } n = 0 \quad (۳۷-۴)$$

^۱ Polak-Ribiere

^۲ Bill and Powell

پاول استفاده از روابط (۳۶-۴) (۳۷-۴) را مستلزم استفاده از تکنیک شروع مجدد دانسته است. از این تکنیک زمانی استفاده می شود که گرادیان ها در تکرار مورد نظر نامتعاد می شود. همچنین زمانی که جهت بدست آمده به اندازه کافی کاهش تابع را به همراه نداشته باشد با شروع مجدد، جهت مزدوج اصلاح می گردد. این کار با قراردادن $\varphi^n = 0$ در رابطه (۳۳-۴) انجام می گیرد. جزئیات بیشتر در الگوریتمی که در ادامه می آید توضیح داده شده است.

میزان نامتعاد بودن گرادیانها در تکرار n ام را با معیار زیر می توان اندازه گیری کرد.

$$\left| \int_{x=0}^L (J^n - J^{n-1}) J^n dx \right| \geq 0.2 \int_{x=0}^L (J^n)^2 dx \quad (38-4)$$

میزان کم بودن کاهش تابع در مسیر مورد نظر (بزرگ بودن زاویه بین جهت کاهش و منفی جهت گرادیان) در تکرار n ام را نیز می توان با هر یک از نامساوی های زیر بررسی نمود.

$$\int_{x=0}^L P^n J^n dx \leq -1.2 \int_{x=0}^L (J^n)^2 dx \quad (39-4)$$

$$\int_{x=0}^L P^n J^n dx \geq -0.8 \int_{x=0}^L (J^n)^2 dx \quad (40-4)$$

ضرایب 0.2، 1.2 و 0.8 در روابط فوق تجربی می باشند.

در نسخه پاول-بیل روش گرادیان مزدوج جهت کاهش (۳۳-۴) برای $n \geq 1$ مطابق الگوریتم زیر محاسبه می شود:

- بررسی نامساوی (۳۸-۴) در صورت برقراری نامساوی، قراردادن $q = n - 1$
- محاسبه ضریب γ^n از رابطه (۳۶-۴)
- در صورتی که $n = q + 1$ ، قراردادن $\varphi^n = 0$ و در غیر این صورت محاسبه φ^n از رابطه (۳۷-۴)
- محاسبه جهت کاهش از رابطه (۳۳-۴)

• در صورتی که $n = q + 1$ بررسی نامساوی (۴-۳۹) و (۴-۴۰) در صورت برقراری هر یک از آنها، قرارداد $\varphi^n = 0$ و محاسبه مجدد جهت کاهش از رابطه (۴-۳۳)، با قرارداد $\gamma^n = \varphi^n = 0$ در هر تکرار، جهت کاهش $P^n(X)$ همان جهت گرادیان خواهد شد که معرف روش کاهش سریع می باشد. مطابق الگوریتم ارائه شده با برقراری این نامساوی در مسائل معکوس که درجه غیرخطی بودن آنها زیاد باشد با شروع مجدد محاسبات، الگوریتم می تواند سرعت یافتن مینیمم را نسبت به دو روش قبل افزایش دهد.

برای انجام فرآیند تکراری و اصلاح نقاط مرزی مطابق رابطه زیر لازم است طول گام بهینه یعنی β^n و گرادیان تابعی $J^n(X)$ در هر تکرار محاسبه گردد. محاسبه این دو مقدار به ترتیب از حل معادله حساسیت و معادله الحاقی انجام می پذیرد.

$$f^{n+1}(X) = f^n(X) + \beta^n P^n(X), \quad n = 1, 2, \dots \quad (۴۱-۴)$$

۹-۴ روش نیوتن

روش نیوتن را می توان برای مینیمم کردن توابع چند متغیره استفاده نمود. تقریب مرتبه دوم تابع $f(\bar{X})$ در نقطه $\bar{X} = \bar{X}_i$ با استفاده از بسط سری تیلور به صورت زیر است:

$$f(\bar{X}) = f(\bar{X}_i) + \nabla f_i^T (\bar{X} - \bar{X}_i) + \frac{1}{2} (\bar{X} - \bar{X}_i)^T [J_i] (\bar{X} - \bar{X}_i) \quad (۴۲-۴)$$

که $[J_i] = [J]_{X_i}$ ماتریس هسین نام دارد و شامل مشتقات جزئی مرتبه دوم تابع f در نقطه \bar{X}_i می باشد. با مساوی صفر قرارداد مشتقات در رابطه فوق برای محاسبه مینیمم تابع رابطه زیر بدست می آید:

$$\frac{\partial f}{\partial X_j} = 0, \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (۴۳-۴)$$

از دو رابطه اخیر نتیجه می شود:

$$\nabla f = \nabla f_i + [J_i](\bar{X} - \bar{X}_i) = 0 \quad (44-4)$$

در صورتی که $[J_i]$ غیر منفرد باشد، می توان از رابطه فوق تقریب بسیار خوبی (در نقطه $\bar{X} = \bar{X}_{i+1}$) به صورت زیر بدست آورد:

$$\bar{X}_{i+1} = \bar{X}_i - [J_i]^{-1} \nabla f_i \quad (45-4)$$

با صرف نظر کردن از ترم های مرتبه بالا در روابط (42-4) و (45-4) می توان از یک فرایند تکراری برای محاسبه جواب \bar{X}^* بهینه استفاده نمود.

می توان نشان داد که دنباله نقاط $\bar{X}_1, \bar{X}_2, \dots, \bar{X}_{i+1}$ در صورتی که نقطه شروع \bar{X}_1 به اندازه کافی به \bar{X}^* نزدیک شود و $[J_i]$ غیرمنفرد باشد، می تواند به جواب واقعی \bar{X}^* همگرا شود. همچنین از آنجائی که در روش نیوتن از مشتقات مرتبه دوم تابع مورد نظر (به فرم ماتریس $[J_i]$) استفاده می شود، روش مرتبه دوم محسوب می شود. در ادامه نشان داده شده که با روش نیوتن می توان مینیمم یک تابع مرتبه دوم را با یک تکرار محاسبه نمود.

فرض کنید فرم تابع f به صورت زیر باشد:

$$f(\bar{X}) = \frac{1}{2} \bar{X}^T A \bar{X} + B^T \bar{X} + C \quad (46-4)$$

مینیمم تابع f در نقطه زیر بدست می آید:

$$\bar{X}^* = -[A]^{-1} B \quad (47-4)$$

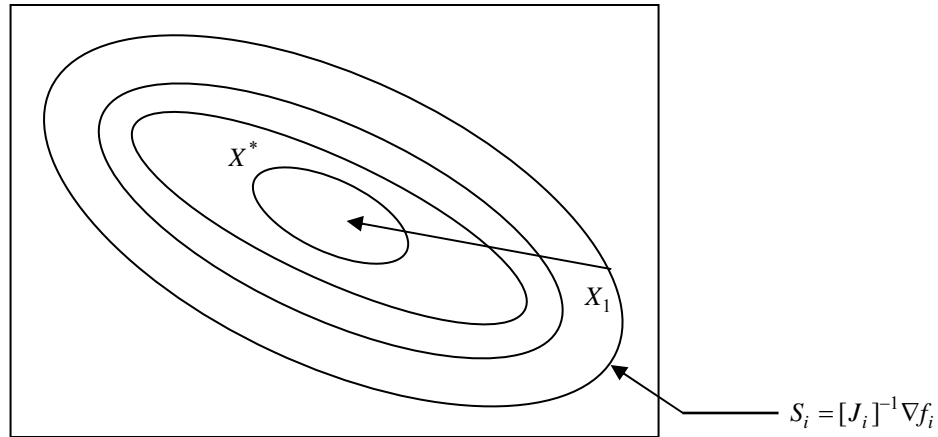
بنابراین روش تکراری با استفاده از رابطه (45-4) به صورت زیر خواهد شد:

$$\bar{X}_{i+1} = \bar{X}_i - [A]^{-1} ([A] \bar{X}_i + B) \quad (48-4)$$

که \bar{X}_i نقطه شروع در تکرار i ام می باشد. از رابطه فوق جواب دقیق به صورت زیر بدست می آید:

$$\bar{X}_{i+1} = \bar{X}^* = -[A]^{-1} B \quad (49-4)$$

شکل زیر چگونگی انجام این کار را نشان می دهد.



شکل (۴-۳): مینیمم یک تابع درجه دوم در یک مرحله با روش نیوتن

در صورتی که f تابعی مرتبه دوم نباشد، ممکن است روش نیوتن واگرا شود. برای جلوگیری از این اتفاق رابطه (۴۵-۴) را می بایست به صورت زیر اصلاح نمود:

$$\bar{X}_{i+1} = \bar{X}_i + \lambda_i^* \bar{S}_i = \bar{X}_i - \lambda_i^* [J_i]^{-1} \nabla f_i \quad (50-4)$$

که λ_i^* طول گام برای مینیمم کردن تابع در جهت $\bar{S} = -[J_i]^{-1} \nabla f_i$ است. این اصلاح امتیازاتی را به دنبال خواهد داشت. اول اینکه این حالت در مقایسه با روش قبلی در تعداد تکرار کمتری نقطه مینیمم را پیدا می کند. دوم اینکه در این روش یافتن نقطه مینیمم برای همه حالات، در صورتی که فرمولاسیون اصلی در برخی موارد، نقطه مینیمم را پیدا کند، امکان پذیر می باشد. سوم اینکه، این روش منجر به پیدا کردن نقطه ماکزیمم یا عطف نخواهد شد. با توجه به امتیازات گفته شده، خصوصیات زیر باعث می شود این روش در عمل آنچنان موثر نباشد:

۱. در این روش لازم است ماتریس $[J]$ با بعد $n \times n$ ذخیره شود.

۲. محاسبه درایه های ماتریس $[J]$ بسیار مشکل و در مواردی غیرممکن می باشد.

۳. در هر مرحله به محاسبه مقدار $\nabla f_i [J_i]^{-1}$ نیاز است.

خصوصیات ذکر شده، این روش را در مورد توابع پیچیده با تعداد زیاد متغیر، غیرکاربردی می کند.

۴-۱۰ روش مارکارت - لونبرگ^۱

روش کاهش سریع مقدار تابع را برای حالتی که بردار \bar{X}_i از نقطه بهینه X^* دور باشد، کاهش می دهد، روش نیوتن در حالتی که بردار \bar{X}_i به نقطه بهینه نزدیک باشد، از سرعت همگرایی بالائی برخوردار است. روش مارکارت روشی است که امتیازات هر دو روش گفته شده را در بردارد. این روش، درایه های قطری ماتریس هسین را به صورت زیر اصلاح می کند:

$$[\tilde{J}_i] = [J_i] + \alpha_i [I] \quad (51-4)$$

که $[I]$ ماتریس واحد و α_i مقدار ثابتی است که در این صورت، مثبت معین بودن ماتریس $[\tilde{J}_i]$ در صورتی که $[J_i]$ مثبت معین نباشد را تضمین می کند.

می توان اینگونه گفت که، وقتی α_i به اندازه کافی بزرگ باشد (از مرتبه 10^4)، ترم $\alpha_i [I]$ بر ترم $[J_i]$ غالب شده و معکوس ماتریس $[J_i]$ به صورت زیر خواهد شد:

$$[\tilde{J}_i]^{-1} = [[J_i] + \alpha_i [I]]^{-1} \approx [\alpha_i [I]]^{-1} = \frac{1}{\alpha_i} [I] \quad (52-4)$$

در این صورت جهت کاهش \bar{S}_i به صورت زیر خواهد شد:

$$\bar{S}_i = -[\tilde{J}_i]^{-1} \nabla f_i \quad (53-4)$$

¹ Marquardt-Levenberg

S_i برای مقادیر بزرگ α_i همان جهت کاهش سریع است. در روش مارکارت، برای α_i در آغاز عملیات تکراری، مقدار بزرگی در نظر گرفته می شود و این مقدار در طول تکرارهای مختلف کاهش می یابد و نهایتاً به صفر می رسد، بنابراین با کاهش α_i از یک مقدار بزرگ به صفر، جهت جستجو در این روش، از روش کاهش سریع در آغاز عملیات تا روش نیوتن در انتها تغییر می کند.

$$\bar{X}_{i+1} = \bar{X}_i + \lambda_i^* \bar{S}_i = \bar{X}_i - \lambda_i^* [[J_i] + \alpha_i [I]]^{-1} \nabla f_i \quad (54-4)$$

که λ_i^* را می توان از بخش جستجوی یک بعدی محاسبه نمود.

۱۱-۴ روش شبه نیوتن

رابطه اصلی برای گسترش روش نیوتن، رابطه (۴-۴۴)، را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\nabla f(\bar{X}_i) = -[J_i](\bar{X} - \bar{X}_i) = 0 \quad (55-4)$$

$$\bar{X} = \bar{X}_i - [J_i]^{-1} \nabla f(\bar{X}_i) \quad (56-4)$$

که به شکل تکرار پذیر زیر نوشته می شود:

$$\bar{X}_{i+1} = \bar{X}_i - [J_i]^{-1} \nabla f(\bar{X}_i) \quad (57-4)$$

لازم به ذکر است که ماتریس $[J_i]$ از مشتقات مرتبه دوم تابع f تشکیل شده است. که برای یک تابع غیر مرتبه دوم (و در حالت کلی غیرخطی) با بردار X_i تغییر می کند. ایده اصلی در روش شبه نیوتن که به روش میزان متغیر نیز شناخته می شود، تقریب زدن ماتریس $[J_i]$ با ماتریس دیگری مثل $[B_i]$ می باشد که در آنها فقط از مشتقات مرتبه اول f استفاده می شود. اگر $[J_i]^{-1}$ با $[B_i]$ تقریب زده شود، رابطه (۴-۵۳) را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\bar{X}_{i+1} = \bar{X}_i - \lambda_i^* [B_i] \nabla f(\bar{X}_i) \quad (58-4)$$

که λ_i^* طول گام بهینه در جهت \bar{S}_i می باشد.

$$\bar{S}_i = -[B_i] \nabla f_i \quad (59-4)$$

می توان مشاهده نمود که روش کاهش سریع حالت خاصی از رابطه فوق است که به ازای قرار دادن $[B_i] = [I]$ بدست می آید.

محاسبه $[B_i]$: برای استفاده از رابطه (4-55) می بایست ماتریس معکوس تقریبی $[B_i] = [A_i]^{-1}$

محاسبه شود. برای این کار می بایست در ابتدا گرادیان f حول یک نقطه مرجع اختیاری مثل \bar{X}_0 بسط تیلور داده شود. یعنی:

$$\nabla f(\bar{X}) \approx \nabla f(\bar{X}_0) + [J_0](\bar{X} - \bar{X}_0) \quad (60-4)$$

با تعریف d_i و g_i ، به صورت زیر:

$$\bar{d}_i = \bar{X}_{i+1} - \bar{X}_i \quad (61-4)$$

$$g_i = \nabla f_{i+1} - \nabla f_i \quad (62-4)$$

می توان رابطه زیر را بدست آورد:

$$d_i = [B_i] g_i \quad (63-4)$$

که $[B_i] = [A_i]^{-1}$ تقریبی از ماتریس $[J_0]^{-1}$ می باشد. رابطه فوق دستگامی از n رابطه با n^2 درایه

مجهول ماتریس $[B_i]$ را نشان می دهد. بنابراین برای $n > 1$ انتخاب $[B_i]$ یکتا نمی باشد و حتی می

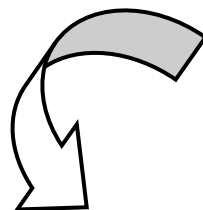
توان مقدار آن را نزدیک به $[J_0]^{-1}$ انتخاب نمود. در مقالات مختلف، روشهای متعددی برای محاسبه

$[B_i]$ طی یک فرایند تکراری (یعنی محاسبه $[B_{i+1}]$ با در اختیار داشتن $[B_i]$) پیشنهاد شده است نکته

مهمی که باید به آن توجه داشت این است که با متقارن و مثبت معین بودن $[B_i]$ ماتریس $[B_{i+1}]$ نیز

متقارن و مثبت معین باقی بماند.

فصل پنجم



کنترل فرآیند انجماد با روش گرادیان مزدوج

در فصل حاضر، ابتدا معادلات حاکم بر مسأله و نحوه حل آنها معرفی شده و سپس با توجه به آنها به تعریف تابع هدف می پردازیم. در ادامه، روش گرادیان مزدوج به همراه معادلات حساسیت و الحاقی مورد نیاز برای مواد خالص و آلیاژها بررسی خواهند شد. ابتدا معادلات در حالت یک بعدی مورد بحث قرار گرفته و سپس معادلات و الگوریتم حل برای مسائل دو و سه بعدی نیز به اختصار معرفی خواهند شد.

۵-۱- معادلات حاکم بر مسأله مستقیم

ابتدا معادلات حاکم، روش حل، الگوریتم گرادیان مزدوج، معادلات الحاقی و حساسیت برای یک مسأله یک بعدی شامل انجماد مواد خالص و همچنین آلیاژها معرفی شده و در انتها برای هندسه های دو و سه بعدی تعمیم داده می شود. فرض می کنیم که در قالب نشان داده شده در شکل (۵-۱)، شار خنک کن حرارتی فقط از مرز پایین و بالا به عنوان تابعی از زمان اعمال شده، سطوح جانبی عایق بوده و بنابراین هیچ گونه جابجایی طبیعی در ناحیه مایع اتفاق نخواهد افتاد و انجماد فقط در جهت عمودی و رو به بالا خواهد بود. (حالت یک بعدی)

معادلات حاکم، شرایط مرزی و شرایط اولیه به شکل بی بعد برای هندسه نشان داده شده در شکل به شرح زیر خواهند بود.

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad 0 < x < b \quad 0 < t \leq t_f, \quad (1-5)$$

$$-k \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = q_s(t) \quad x = 0 \quad 0 < t \leq t_f, \quad (2-5)$$

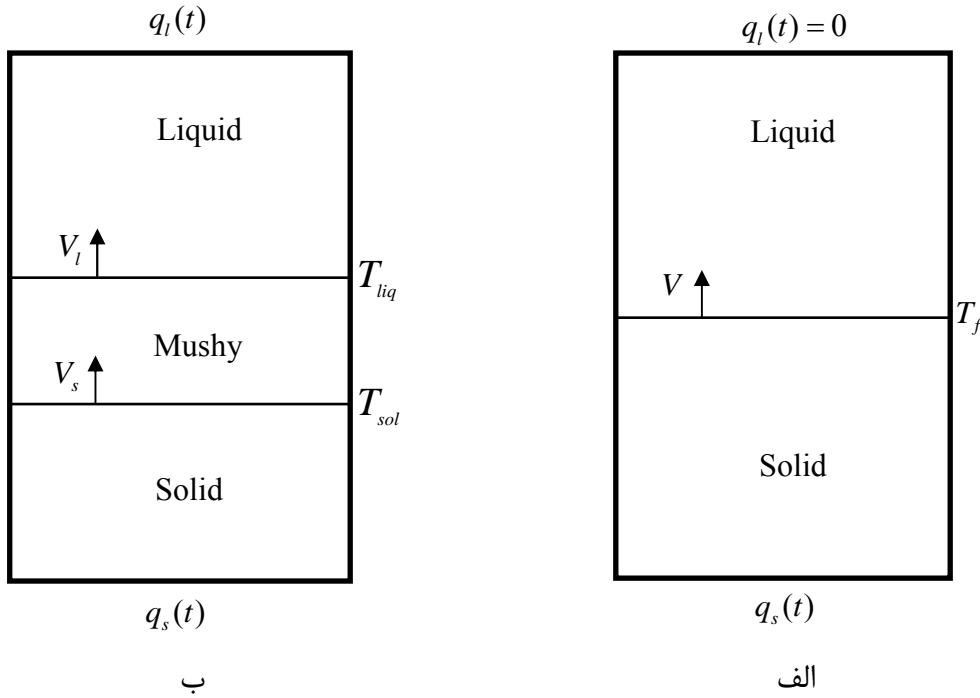
$$k \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=b} = q_l(t) \quad x = b \quad 0 < t \leq t_f, \quad (3-5)$$

$$T = T_i \text{ or } H = H_i \quad 0 \leq x \leq b \quad t = 0. \quad (4-5)$$

که در معادلات بالا:

$$k(T) = f_s(T)k_s + (1 - f_s(T))k_l. \quad (5-5)$$

و f_s از روابط ذکر شده در فصل دوم محاسبه خواهد شد. بدیهی است برای انجماد مواد خالص با فرض ثابت بودن خواص حرارتی، $k(T) = 1$ خواهد بود.



شکل (5-1): نمایش شماتیک مساله انجماد برای الف) ماد خالص و ب) آلیاژها

همانطور که از شکل (5-1) پیداست، در انجماد آلیاژها سه ناحیه متفاوت جامد، مایع و میانی حضور دارند که هدف کنترل سرعت در سطوح مشترک سالیدوس و لیکیدوس و در انجماد مواد خالص هدف کنترل سرعت تنها سطح مشترک موجود میان فازهای جامد و مایع است. قبلاً ذکر شد که کیفیت ماده ریخته گری شده به میزان سرعت در سطح مشترک یا به عبارتی ضخامت ناحیه میانی (دوفازی) وابسته است. بدلیل اینکه هدف کنترل دو سرعت سطح مشترک یا به عبارتی دو دمای T_{liq} و T_{sol} است، بنابراین برای رسیدن به این مهم نیاز به دو عامل کنترلی یا دو شار حرارتی در مرزهای پایین و بالاست (q_l و q_s). بدیهی است که در کنترل انجماد مواد خالص به دلیل وجود یک پارامتر کنترلی، فقط q_s در نظر گرفته

شده و q_l برابر صفر یا عایق فرض شده است. رابطه بین آنتالپی و دما برای مواد خالص و آلیاژها به ترتیب از روابط (۶-۵) و (۷-۵) محاسبه خواهد شد.

$$H = \begin{cases} cT & T < 0 \\ [0, Ste] & T = 0 \\ cT + Ste & T > 0 \end{cases} \quad (۶-۵)$$

$$H = \begin{cases} H_s = c_s T & T < T_{sol} & \text{جامد} \\ f_s H_s + (1 - f_s) H_l & T_{sol} \leq T \leq T_{liq} & \text{دوفازی (میانی)} \\ H_l = c_l T + Ste & T > T_{liq} & \text{مایع} \end{cases} \quad (۷-۵)$$

که Ste عدد استفان یا همان شکل بی بعد گرمای نهان، T_{sol} و T_{liq} به ترتیب دماهای سالیدوس و لیکیدوس هستند. هدف مسأله مستقیم تعیین توزیع دما و یا آنتالپی با دانستن شارهای حرارتی در مرزها به عنوان یک پارامتر معلوم می باشد. از طرف دیگر در یک مسأله معکوس، این شرایط مرزی مجهول بوده و بجای آنها مقدار دما در نقاط خاصی از هندسه (مکان سنسورها) و یا سرعت سطح مشترک به عنوان پارامترهای معلوم هستند. به عبارت دیگر هدف در حل مسأله معکوس، یافتن ورودیها (شرایط مرزی) برای دستیابی به خروجی های مطلوب (دما در نقاط سنسورها و یا سرعت مطلوب سطح مشترک) می باشد. در ادامه فرمول بندی مسأله معکوس به همراه روش گرادیان مزدوج برای حل آن ارائه خواهد شد.

۵-۲- مسأله معکوس

همانگونه که مطرح شد در یک مسأله معکوس طراحی و کنترل انجماد، شرایط حرارتی در مرزها مجهول بوده و با استفاده از دماهای اندازه گیری شده در نقاطی از هندسه مورد نظر و یا با استفاده از سرعت مطلوب سطح مشترک تخمین زده می شوند. بنابراین هدف از حل معکوس یافتن q_s و q_l به گونه ای

است که دما در نقاط خاصی از دامنه و یا سرعت سطح مشترک، به مقدار مطلوب برسد. با توجه به رفتار فیزیکی مواد در هنگام انجماد، می دانیم که دما در دو سطح مشترک جامد-میانی برابر دمای سالیدوس و در سطح مشترک میانی- مایع برابر دمای لیکیدوس است.

همچنین در انجماد مواد خالص، دما در سطح مشترک جامد- مایع برابر دمای ذوب (T_f) خواهد بود. بنابراین با دانستن سرعت سطح مشترک، مکان سطح مشترک معلوم بوده و دما در این مکان و در زمان های مشخص باید برابر T_{sol} ، T_{liq} و یا T_f باشد. در نتیجه مسأله کنترل سرعت سطح مشترک می تواند با مسأله کنترل دما جایگزین شود.

برپایه آنچه ذکر شد، تابع هدف برمبنای اختلاف بین دماهای T_{sol} ، T_{liq} و یا T_f که همان دماهای مطلوب در مکانهای مطلوب سطح مشترک هستند و دمای محاسبه شده در این مکانها تعریف می شود. در مسائل کلاسیک انتقال حرارت معکوس که در آنها از دماهای اندازه گیری شده و یا شبیه سازی شده جهت تخمین تابع مجهول (شرایط مرزی و...) استفاده می شود، تابع هدف برمبنای اختلاف بین دمای اندازه گیری شده و محاسبه شده (تخمین زده شده) در مکان سنسورها به شکل زیر تعریف می شوند:

$$s = \int_0^{t_f} \sum_{i=1}^N (Y_i - T_i)^2 dt \quad (8-5)$$

که در آن Y_i و T_i به ترتیب دماهای تخمینی و برداشت شده در مکان x_i (مکان سنسور)، N تعداد سنسورها و t_f نیز زمان نهایی می باشند. دماهای T_i از حل مسأله مستقیم محاسبه می شوند.

در مسائل طراحی و کنترل با استفاده از روشهای انتقال حرارت معکوس به جای Y_i یا دماهای اندازه گیری شده، دمای مطلوب در نقطه ای مشخص از دامنه قرار گرفته و T_i دمای محاسبه شده از حل مستقیم در همان مکان خواهد بود. به این ترتیب برای کنترل سرعت و مکان سطح مشترک در انجماد آلیاژها و مواد خالص، تابع هدف به ترتیب زیر تعریف می شود:

$$s[q_s, q_l] = \int_0^{t_f} [T_{sol} - T(x_s, t; q_s, q_l)]^2 dt + \int_0^{t_f} [T_{liq} - T(x_l, t; q_s, q_l)]^2 dt. \quad (9-5)$$

$$s[q_s(t)] = \int_0^{t_f} [T_f - T(x_m, t; q_s(t))]^2 dt, \quad (10-5)$$

که $T(x_s, t; q_s, q_l)$ ، $T(x_l, t; q_s, q_l)$ و $T(x_m, t; q_s(t))$ به ترتیب دماهای محاسبه شده در مکان های سالیدوس و لیکیدوس در انجماد آلیاژها و دمای محاسبه شده در سطح مشترک جامد-مایع در انجماد مواد خالص، با فرض شارهای مشخص حرارتی در مرز هستند. برای مینیمم کردن توابع هدف مذکور از روش گرادیان مزدوج به همراه روش الحاقی برای محاسبه گرادیان تابع هدف استفاده شده است.

۵-۳- روش گرادیان مزدوج

برای محاسبه شرایط مرزی $q_s(t)$ و $q_l(t)$ بوسیله روش گرادیان مزدوج، الگوریتم تکرار زیر به کار برده شده است.

$$q_i^{k+1}(t) = q_i^k(t) - \beta_i^k d_i^k(t), \quad i = s, l, \quad t > 0 \quad (11-5)$$

که بالانویس k مربوط به شماره تکرار می باشد و فرآیند تکرار با یک فرض اولیه شروع شده که این فرض $q_i^0(t) = 0$ است.

جهت کاهش توسط رابطه زیر قابل محاسبه است:

$$d_i^{k=0}(t) = -\nabla s[q_i^k(t)], \quad (12-5)$$

$$d_i^k(t) = -\nabla s[q_i^k(t)] + \gamma_i^k d_i^{k-1}(t)$$

در رابطه بالا، ضریب مزدوج یا ضریب پیوستگی از عبارت (۵-۱۳) به شکل زیر بدست می آید.

$$\gamma_i^0 = 0 \quad (13-5)$$

$$\gamma_i^k = \frac{\int_0^{t_f} \left\{ \nabla s[q_i^k(t)] - \nabla s[q_i^{k-1}(t)] \right\} \nabla s[q_i^k(t)] dt}{\int_0^{t_f} \left\{ \nabla s[q_i^{k-1}(t)] \right\}^2 dt},$$

که $\nabla s[q_i^k(t)]$ میزان گرادیان تابع هدف در تکرار k ام است که از حل معادله الحاقی و توسط رابطه ای که در ادامه فصل ذکر خواهد شد قابل محاسبه است. یک عبارت برای اندازه گام جستجو با حداقل کردن تابع هدف (معادله (۵-۹)) نسبت به β^k بدست می آید.

$$\beta_i^k = \begin{cases} \frac{F_1 A_{22} - F_2 A_{12}}{A_{11} A_{22} - A_{12}^2}, & i = s \\ \frac{F_2 A_{11} - F_1 A_{12}}{A_{11} A_{22} - A_{12}^2}, & i = l \end{cases} \quad (14-5)$$

که ضرایب معادلات فوق به شرح زیر هستند:

$$A_{11} = \int_0^{t_f} (\Delta T_{s,x_s}^k)^2 dt + \int_0^{t_f} (\Delta T_{s,x_l}^k)^2 dt, \quad (15-5)$$

$$A_{22} = \int_0^{t_f} (\Delta T_{l,x_s}^k)^2 dt + \int_0^{t_f} (\Delta T_{l,x_l}^k)^2 dt, \quad (16-5)$$

$$A_{12} = \int_0^{t_f} \Delta T_{s,x_s}^k \Delta T_{l,x_s}^k dt + \int_0^{t_f} \Delta T_{s,x_l}^k \Delta T_{l,x_l}^k dt, \quad (17-5)$$

$$F_1 = \int_0^{t_f} (T_{x_s}^k - T_{sol}) \Delta T_{s,x_s}^k dt + \int_0^{t_f} (T_{x_l}^k - T_{liq}) \Delta T_{s,x_l}^k dt, \quad (18-5)$$

$$F_2 = \int_0^{t_f} (T_{x_s}^k - T_{sol}) \Delta T_{l,x_s}^k dt + \int_0^{t_f} (T_{x_l}^k - T_{liq}) \Delta T_{l,x_l}^k dt, \quad (19-5)$$

که ΔT_s ، جواب مسأله حساسیت (معادلات (۵-۲۴) تا (۵-۲۷)) است هنگامی که

$\Delta q_s = d_s^k$ ، $\Delta q_l = 0$ ، ΔT_l نیز جواب همین مسأله است با $\Delta q_s = 0$ ، $\Delta q_l = d_l^k$. توجه به این نکته

ضروری است که در انجماد مواد خالص، $q_l(t)$ ، β_l^k ، d_l^k و γ_l^k همگی صفر بوده و گام جستجو از رابطه زیر بدست می آید.

$$\beta_s^k = \frac{\int_0^{t_f} [T(x_m, t; q_s^k(t)) - T_f] \Delta T(x_m, t; d_s^k(t)) dt}{\int_0^{t_f} [\Delta T(x_m, t; d_s^k(t))]^2 dt} \quad (20-5)$$

فرآیند تکراری معرفی شده تا زمانی ادامه می یابد که شرط توقف ارضا شود. بسته به نوع مسأله و شرایط آن، انواع مختلفی از شروط توقف می تواند استفاده گردد.

۵-۳-۱- معیار توقف

در صورتی که مسأله با هیچ خطای اندازه گیری مواجه نشود، شرط زیر برای توقف تکرارها مورد استفاده قرار می گیرد.

$$s[q_s, q_l] < \varepsilon \quad (21-5)$$

که ε یک مقدار کوچک و مشخص است که از قبل برای مسأله تعیین می شود. هنگامی که داده های اندازه گیری شده دارای خطای ورودی با انحراف معیار σ باشند، از اصل اختلاف^۱ استفاده می شود. اصل اختلاف پیشنهاد می کند که تکرارها زمانی متوقف شوند که اختلاف بین دمای مطلوب و اندازه گیری شده برابر با انحراف معیار خطاهای اندازه گیری شده به نحوی که:

$$|T_{sol} - T(x_s, t; q_s, q_l)| \approx |T_{liq} - T(x_l, t; q_s, q_l)| \approx \sigma \quad (22-5)$$

با جاگذاری عبارت فوق در معادله مربوط به تابع هدف (۵-۱۰) داریم:

$$\varepsilon \approx 2\sigma^2 t_f \quad (23-5)$$

¹ Discrepancy Principle

۵-۳-۲-مسأله حساسیت

اگر فرض کنیم که $q_s(t)$ و $q_l(t)$ به ترتیب به اندازه $\Delta q_s(t)$ و $\Delta q_l(t)$ تغییر کنند، طبعاً دما و آنتالپی نیز به اندازه ΔT و ΔH تغییر خواهند کرد. جهت طرح مسأله حساسیت، T را با $T + \Delta T$ ، H را با $H + \Delta H$ ، q_s را با $q_s + \Delta q_s$ و q_l را با $q_l + \Delta q_l$ در مسأله مستقیم (معادلات (۱-۵) تا (۴-۵)) جایگزین کرده و سپس معادلات مستقیم را از نتیجه بدست آمده کم می کنیم. مسأله حساسیت به دست آمده به شرح ذیل خواهد بود.

$$\frac{\partial(C(T)\Delta T)}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}(k(T)\Delta T) \quad 0 < x < b \quad 0 < t \leq t_f, \quad (۲۴-۵)$$

$$-\frac{\partial k\Delta T}{\partial x} \Big|_{x=0} = \Delta q_s(t) \quad x = 0 \quad 0 < t \leq t_f, \quad (۲۵-۵)$$

$$\frac{\partial k\Delta T}{\partial x} \Big|_{x=b} = \Delta q_l(t) \quad x = b \quad 0 < t \leq t_f, \quad (۲۶-۵)$$

$$\Delta T = 0 \quad 0 \leq x \leq b \quad t = 0. \quad (۲۷-۵)$$

و با توجه به معادله (۷-۵) داریم:

$$C(T) = \begin{cases} c_s & T < T_{sol} & \text{Solid} \\ f_s c_s + (1 - f_s) c_l + \frac{\partial f_s}{\partial T} (c_s T - c_l T - Ste) & T_{sol} \leq T \leq T_{liq} & \text{Mushy} \\ c_l & T > T_{liq} & \text{Liquid} \end{cases} \quad (۲۸-۵)$$

ذکر این نکته ضروری است که برای مواد خالص، $C(T) = 1$ و $\Delta q_l(t) = 0$ می باشد. مسأله حساسیت برای انجماد آلیاژها یک بار با فرض $\Delta q_s = d_s^k$ ، $\Delta q_l = 0$ برای بدست آوردن ΔT_s و بار دیگر با فرض $\Delta q_l = d_l^k$ ، $\Delta q_s = 0$ برای بدست آوردن ΔT_l حل می شود. با بدست آوردن ΔT_s و ΔT_l ، طول گام بهینه برای انجماد آلیاژها از رابطه (۱۴-۵) و برای انجماد موادخالص از رابطه (۲۰-۵) محاسبه خواهند شد.

۵-۳-۳-مسأله الحاقی

برای بدست آوردن مسأله الحاقی، ابتدا معادلات حاکم بر مسأله مستقیم را در ضریب لاگرانژ $\lambda(x, t)$ ضرب کرده روی دامنه زمان و مکان انتگرال گرفته و حاصل را به معادله (۹-۵) تابع هدف اضافه می کنیم و خواهیم داشت:

$$s[q_s, q_l] = \int_0^{t_f} [T_{sol} - T(x_s, t; q_s, q_l)]^2 dt + \int_0^{t_f} [T_{liq} - T(x_l, t; q_s, q_l)]^2 dt + \int_0^{t_f} \int_0^b \lambda(x, t) [k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \rho \frac{\partial H}{\partial t}] dx dt \quad (۲۹-۵)$$

با جایگزین کردن T با $[T + \Delta T]$ ، q_s با $q_s + \Delta q_s$ ، q_l با $q_l + \Delta q_l$ و $s[q_s, q_l]$ با $[s[q_s, q_l] + \Delta s[q_s, q_l]]$ در معادله (۹-۵) و کم کردن معادله اصلی (۹-۵) از عبارت حاصل و صرف نظر کردن از عبارتهای مرتبه بالاتر خواهیم داشت.

$$C(T) \frac{\partial \lambda(x, t)}{\partial t} + k(T) \frac{\partial^2 \lambda(x, t)}{\partial x^2} + 2\{[T - T_{sol}] \delta(x - x_s) + [T - T_{liq}] \delta(x - x_l)\} = 0 \quad 0 < x < b \quad 0 < t \leq t_f, \quad (۳۰-۵)$$

$$\frac{\partial \lambda}{\partial x} = 0 \quad x = 0 \quad 0 < t \leq t_f, \quad (۳۱-۵)$$

$$\frac{\partial \lambda}{\partial x} = 0 \quad x = b \quad 0 < t \leq t_f, \quad (۳۲-۵)$$

$$\lambda = 0 \quad 0 \leq x \leq b \quad t = t_f. \quad (۳۳-۵)$$

که $\delta(\bullet)$ تابع دیراک دلتا می باشد. پس از انجام عملیات ریاضی فوق و نادیده گرفتن عبارتهای شامل $\Delta T(x, t)$ ، عبارت انتگرالی ذیل باقی می ماند.

$$\Delta s[q_s, q_l] = \int_0^{t_f} \lambda(0, t) \Delta q_s dt + \int_0^{t_f} \lambda(b, t) \Delta q_l dt. \quad (34-5)$$

از آنجا که $q(t) \in L_2(0, t_f)$ می توان نوشت:

$$\Delta s(q) = \int_0^{t_f} \Delta q \nabla s[q(t)] dt. \quad (35-5)$$

و با مقایسه دو معادله اخیر خواهیم داشت:

$$\nabla s[q_s(t)] = \lambda(0, t), \quad (36-5)$$

$$\nabla s[q_l(t)] = \lambda(b, t). \quad (37-5)$$

معادله (30-5) برای انجماد مواد خالص به شکل زیر تبدیل شده و شرایط مرزی به همان شکل ذکر شده باقی می ماند.

$$\frac{\partial \lambda(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial^2 \lambda(x, t)}{\partial x^2} + 2[T - T_f] \delta(x - x_m) = 0 \quad 0 < x < b \quad 0 < t \leq t_f, \quad (38-5)$$

بدین ترتیب با محاسبه گرادیان شارهای حرارتی، می توان ضریب مزدوج γ_i^k و جهت کاهش d_i^k را مطابق روابط (13-5) و (12-5) محاسبه کرد.

5-3-4- الگوریتم روش گرادیان مزدوج

با توجه به مطالعه روش گرادیان مزدوج و معادلات حساسیت و الحاقی که ذکر شد، می توان از الگوریتم تکرار زیر برای تخمین شار حرارتی در مرزها استفاده کرد.

قدم اول: مشخص کردن یک حدس اولیه برای شارهای حرارتی q_s^0 و q_l^0 و قراردادن شماره تکرار $k = 0$

قدم دوم: حل معادلات مستقیم حاکم بر مسأله با شارهای مفروض برای مشخص کردن توزیع دما در قالب

قدم سوم: بررسی معیارهمگرایی (توقف)، در صورت عدم برقراری، رفتن به قدم چهارم، در صورت برقرار شدن، توقف تکرارها.

قدم چهارم: حل معادلات الحاقی برای $\lambda(x,t)$ و نهایتاً محاسبه گرادیان با توجه به روابط (۵-۳۶) و (۵-۳۷).

قدم پنجم: محاسبه ضریب مزدوج γ_i^k و جهت کاهش d_i^k با استفاده از روابط (۵-۱۳) و (۵-۱۲).

قدم ششم: حل معادله حساسیت با توجه به شرایط ذکر شده

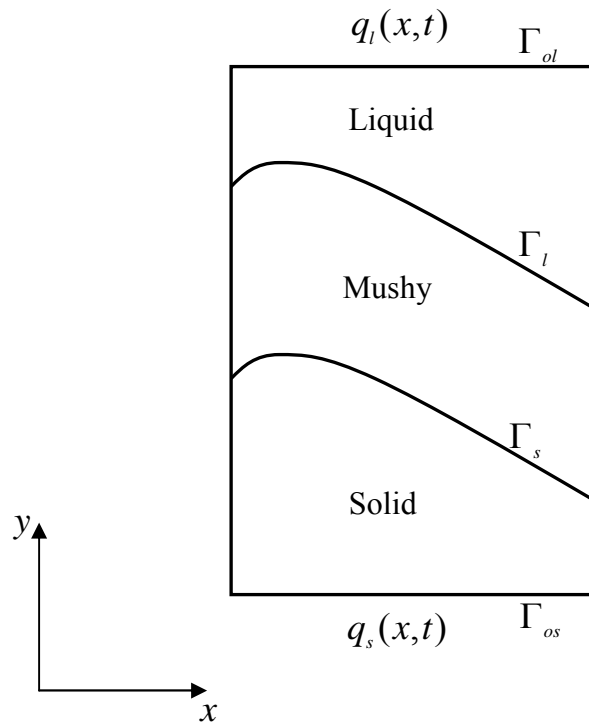
قدم هفتم: محاسبه طول گام بهینه β_i^k با توجه به معادلات (۵-۱۴) و (۵-۲۰) برای آلیاژها و مواد خالص

قدم هشتم: حدس جدید برای شارهای حرارتی با توجه به رابطه (۵-۱۱) و برگشت به قدم دوم.

۵-۴- مطالعه معادلات حاکم در مختصات دو بعدی

معادلات ذکر شده در قسمت گذشته مربوط به انجماد تک جهتی و در راستای یک بعدی برای مواد خالص و آلیاژها بود. اگر شار حرارتی $q_s(t)$ در مرز پایین که قبلاً تنها تابعی از زمان بود، تابعی از زمان و مکان باشد، مسأله تبدیل به یک مسأله دوبعدی خواهد شد. شماتیک این مسأله دو بعدی به همراه شرایط مرزی در شکل (۵-۲) نمایش داده شده است.

معادلات حاکم بر مسائل مستقیم، حساسیت و الحاقی به همراه شرایط مرزی و اولیه مناسب مطابق آنچه در حالت یک بعدی ارائه شد به شرح زیر خواهند بود.



شکل (۲-۵): نمایش شماتیک مساله انجماد در مختصات دو بعدی

۵-۴-۱- مساله مستقیم

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k(T) \frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad 0 < x < d \quad 0 < y < b \quad 0 < t \leq t_f, \quad (۳۹-۵)$$

$$-k \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=0} = q_s(x,t) \quad 0 < x < d \quad y = 0 \quad 0 < t \leq t_f, \quad (۴۰-۵)$$

$$k \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=b} = q_l(x,t) \quad 0 < x < d \quad y = b \quad 0 < t \leq t_f, \quad (۴۱-۵)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0 \quad x = 0 \quad 0 < y < b \quad 0 < t \leq t_f, \quad (۴۲-۵)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=d} = 0 \quad x = d \quad 0 < y < b \quad 0 < t \leq t_f, \quad (۴۳-۵)$$

$$T = T_i \text{ or } H = H_i \quad 0 \leq x \leq b \quad 0 \leq y \leq b \quad t = 0. \quad (44-5)$$

٥-٤-٢- مساله حساسيت

$$\frac{\partial(C(T)\Delta T)}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}(k(T)\Delta T) + \frac{\partial^2}{\partial y^2}(k(T)\Delta T) \quad \begin{array}{l} 0 < x < d \\ 0 < y < b \end{array} \quad 0 < t \leq t_f, \quad (45-5)$$

$$-\frac{\partial k\Delta T}{\partial y} \Big|_{y=0} = \Delta q_s(x,t) \quad \begin{array}{l} 0 < x < d \\ y = 0 \end{array} \quad 0 < t \leq t_f, \quad (46-5)$$

$$\frac{\partial k\Delta T}{\partial y} \Big|_{y=b} = \Delta q_l(x,t) \quad \begin{array}{l} 0 < x < d \\ y = b \end{array} \quad 0 < t \leq t_f, \quad (47-5)$$

$$\frac{\partial \Delta T}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0 \quad \begin{array}{l} x = 0 \\ 0 < y < b \end{array} \quad 0 < t \leq t_f, \quad (48-5)$$

$$\frac{\partial \Delta T}{\partial x} \Big|_{x=d} = 0 \quad \begin{array}{l} x = d \\ 0 < y < b \end{array} \quad 0 < t \leq t_f, \quad (49-5)$$

$$\Delta T = 0 \quad \begin{array}{l} 0 \leq x \leq b \\ 0 \leq y \leq b \end{array} \quad t = 0. \quad (50-5)$$

٥-٤-٣- مساله الحاقى

$$C(T) \frac{\partial \lambda(x, y, t)}{\partial t} + k(T) \frac{\partial^2 \lambda(x, y, t)}{\partial x^2} + k(T) \frac{\partial^2 \lambda(x, y, t)}{\partial y^2} + \quad (51-5)$$

$$2\{[T - T_{sol}]\delta(x - x_s)\delta(y - y_s) + [T - T_{liq}]\delta(x - x_l)\delta(y - y_l)\} = 0$$

$$\frac{\partial \lambda}{\partial y} \Big|_{y=0} = 0 \quad (52-5)$$

$$\frac{\partial \lambda}{\partial y} \Big|_{y=b} = 0 \quad (53-5)$$

$$\left. \frac{\partial \lambda}{\partial x} \right|_{x=0} = 0 \quad (54-5)$$

$$\left. \frac{\partial \lambda}{\partial x} \right|_{x=d} = 0 \quad (55-5)$$

$$\lambda \Big|_{t=t_f} = 0 \quad (56-5)$$

5-4-4- روش گرادیان مزدوج

در مختصات دو بعدی که شار حرارتی در مرزها تابعی از مکان و زمان می باشد $(q_s(x,t))$ و $(q_l(x,t))$ تابع هدف به صورت زیر تعریف خواهد شد.

$$s[q_s(x,t), q_l(x,t)] = \|T_{sol} - T\|_{L_2(\Gamma_s \times [0, t_f])}^2 + \|T_{liq} - T\|_{L_2(\Gamma_l \times [0, t_f])}^2 = \int_0^{t_f} \int_{\Gamma_s} [T_{sol} - T(\Gamma_s, t; q_s, q_l)]^2 d\Gamma dt + \int_0^{t_f} \int_{\Gamma_l} [T_{liq} - T(\Gamma_l, t; q_s, q_l)]^2 d\Gamma dt \quad (57-5)$$

که در معادلات بالا Γ_l و Γ_s منحنی های سطوح مشترک سالییدوس و لیکیدوس می باشند. برای کمینه کردن تابع هدف فوق، ابتدا یک حدس اولیه برای $q_s(x,t)$ و $q_l(x,t)$ در نظر می گیریم. موقعیت سطوح مشترک سالییدوس و لیکیدوس (Γ_l و Γ_s) در هر لحظه از زمان مشخص می باشند. با حدس اولیه برای شار حرارتی، ابتدا معادلات مستقیم حل شده و توزیع دما در نقاط مختلف در زمانهای مختلف بدست می آید. سپس از رابطه (57-5)، تابع هدف محاسبه شده و شرایط همگرایی (توقف) بررسی می شود. در صورت عدم برقراری معیار توقف، محاسبات در مرحله بعدی ادامه پیدا کرده و معادلات الحاقی برای محاسبه گرادیان تابع هدف حل می شوند.

$$\nabla s[q_s(x,t)] = \lambda(x, y=0, t) \quad (58-5)$$

$$\nabla s[q_l(x,t)] = \lambda(x, y=b, t) \quad (59-5)$$

پس ضریب مزدوج γ_i^k و جهت کاهش d_i^k از روابط زیر محاسبه خواهند شد.

$$\gamma_i^k = \frac{[\nabla s(q_i^k), \nabla s(q_i^k) - \nabla s(q_i^{k-1})]_{L_2(\Gamma_{oi} \times [0, t_f])}}{\|\nabla s(q_i^{k-1})\|_{L_2(\Gamma_{oi} \times [0, t_f])}^2} \quad (60-5)$$

که حاصلضرب در فضای L_2 برای دو تابع f و g به صورت زیر تعریف می شود.

$$(f, g)_{L_2(\Gamma \times [0, t_f])} = \int_0^{t_f} \int_{\Gamma} fg \, d\Gamma dt \quad (61-5)$$

با توجه به رابطه (61-5)، ضریب مزدوج را می توان از رابطه زیر تعیین کرد.

$$\gamma_i^0 = 0$$

$$\gamma_i^k = \frac{\int_0^{t_f} \int_{\Gamma_{oi}} \{ \nabla s[q_i^k(x, t)] - \nabla s[q_i^{k-1}(x, t)] \} \nabla s[q_i^k(x, t)] \, d\Gamma dt}{\int_0^{t_f} \int_{\Gamma_{oi}} \{ \nabla s[q_i^k(x, t)] \}^2 \, d\Gamma dt} \quad (62-5)$$

همچنین جهت کاهش نیز به شکل زیر محاسبه خواهد شد.

$$d_i^0(x, t) = -\nabla s[q_i^k(x, t)] \quad (63-5)$$

$$d_i^k(x, t) = -\nabla s[q_i^k(x, t)] + \gamma_i^k d_i^{k-1}(x, t),$$

سپس برای محاسبه طول گام بهینه به حل معادلات حساسیت پرداخته و طول گام بهینه را از رابطه زیر بدست می آوریم.

$$\beta_i^k = \begin{cases} \frac{F_1 A_{22} - F_2 A_{12}}{A_{11} A_{22} - A_{12}^2}, & i = s \\ \frac{F_2 A_{11} - F_1 A_{12}}{A_{11} A_{22} - A_{12}^2}, & i = l \end{cases} \quad (64-5)$$

که ضرایب معادلات فوق به شرح زیر هستند:

$$A_{11} = \int_0^{t_f} \int_{\Gamma_s} (\Delta T_{s,\Gamma_s}^k)^2 d\Gamma dt + \int_0^{t_f} \int_{\Gamma_l} (\Delta T_{s,\Gamma_l}^k)^2 d\Gamma dt, \quad (65-5)$$

$$A_{22} = \int_0^{t_f} \int_{\Gamma_s} (\Delta T_{l,\Gamma_s}^k)^2 d\Gamma dt + \int_0^{t_f} \int_{\Gamma_l} (\Delta T_{l,\Gamma_l}^k)^2 d\Gamma dt, \quad (66-5)$$

$$A_{12} = \int_0^{t_f} \int_{\Gamma_s} \Delta T_{s,\Gamma_s}^k \Delta T_{l,\Gamma_s}^k d\Gamma dt + \int_0^{t_f} \int_{\Gamma_l} \Delta T_{s,\Gamma_l}^k \Delta T_{l,\Gamma_l}^k d\Gamma dt, \quad (67-5)$$

$$F_1 = \int_0^{t_f} \int_{\Gamma_s} (T_{\Gamma_s}^k - T_{sol}) \Delta T_{s,\Gamma_s}^k d\Gamma dt + \int_0^{t_f} \int_{\Gamma_l} (T_{\Gamma_l}^k - T_{liq}) \Delta T_{s,\Gamma_l}^k d\Gamma dt, \quad (68-5)$$

$$F_2 = \int_0^{t_f} \int_{\Gamma_s} (T_{\Gamma_s}^k - T_{sol}) \Delta T_{l,\Gamma_s}^k d\Gamma dt + \int_0^{t_f} \int_{\Gamma_l} (T_{\Gamma_l}^k - T_{liq}) \Delta T_{l,\Gamma_l}^k d\Gamma dt, \quad (69-5)$$

با محاسبه طول قائم بهینه به محاسبه حدس جدید برای شارهای حرارتی می پردازیم:

$$q_i^{k+1}(x,t) = q_i^k(x,t) - \beta_i d_i^k(x,t), \quad i = s,l, \quad t > 0 \quad (70-5)$$

و در صورت برقرار شدن معیار توقف، روند تکرار تا برقراری این معیار ادامه خواهد یافت.

۵-۵- محاسبات عددی حل معادلات

برای حل معادلات حاکم برمسأله شامل مسأله مستقیم، حساسیت و الحاقی از روش تفاضل محدود استفاده شده است. از روش تفاضلات محدود فشرده برای تقریب مشتقات مکانی و روش رانگ-کوتای مرتبه سوم فشرده برای پیشروی در حوزه زمان در حل مسائل معکوس مربوط به مواد خالص استفاده شده است. بدلیل وجود دو سطح مشترک متحرک با سرعتهای متفاوت و همچنین طبیعت غیر خطی معادلات حاکم بر انجماد آلیاژها، از طرح تفاضلات مرکزی و روش پیشروی ضمنی برای حل عددی معادلات در این حالت استفاده شده است. در این قسمت جزییات روش عددی استفاده شده در حل معادلات حاکم جهت

استفاده در برنامه کامپیوتری بطور کامل شرح داده شده است. ابتدا نحوه محاسبه مشتقات مادی مکانی معرفی شده و سپس الگوی پیشروی در دامنه زمانی ارائه خواهد شد.

۵-۵-۱- محاسبه مشتقات مکانی

مشتقات مادی در این پژوهش با استفاده از روش تفاضلات محدود فشرده^۱ محاسبه گردیده است. این روش ابتدا توسط لیلی^۲ [۸۱] ارائه شد. ایشان مشتق اول تابع دلخواهی مانند $f(x)$ را بطور ضمنی مطابق معادله (۷۱-۵) بیان نموده است.

$$\alpha f'_{j-1} + f'_j + \alpha f'_{j+1} = \frac{\alpha+2}{3\Delta x}(f_{j+1} - f_{j-1}) + \frac{4\alpha-1}{12\Delta x}(f_{j+2} - f_{j-2}) \quad (71-5)$$

که در آن علامت پرایم نمایانگر مشتق اول، j بیانگر شماره گره ($0 \leq j \leq J$) و $\Delta x = L_x / J$ می باشند. اگر در معادله (۷۱-۵)، $\alpha = 1/4$ یا $\alpha = 1/3$ قرار داده شود به طرحهایی با مرتبه خطای چهارم یا ششم می رسیم. که در این صورت ترم قطری اصلی در طرف راست معادله (۷۱-۵)، سه یا چهار برابر کوچکتر از دیگر ترمهاست. این مساله می تواند موجب ایجاد شرایط ناهنجاری^۳ در ماتریس گردد. برای جلوگیری از این مساله و اصلاح معادله، هر دو طرف آن را در ضریب $1/\alpha$ ضرب می کنیم. در این صورت معادله (۷۱-۵) به فرم معادله (۷۲-۵) تغییر شکل خواهد یافت.

$$f'_{j-1} + \frac{1}{\alpha} f'_j + f'_{j+1} = \frac{1+2/\alpha}{3\Delta x}(f_{j+1} - f_{j-1}) + \frac{4-1/\alpha}{12\Delta x}(f_{j+2} - f_{j-2}) \quad (72-5)$$

در مرزها یعنی جایی که $j=0$ یا $j=J$ است، از یک طرح مرتبه سوم یک طرفه ضمنی استفاده شده است.

¹ Compact (Pade) Finite Difference

² S.K. Lele

³ Ill-conditioning

$$f'_0 + 2f'_1 = \frac{1}{2\Delta x}(-5f_0 + 4f_1 + f_2) \quad (۷۳-۵)$$

$$f'_j + 2f'_{j-1} = \frac{1}{2\Delta x}(5f_j - 4f_{j-1} - f_{j-2}) \quad (۷۴-۵)$$

در همسایگی مرزها یعنی جایی که $j=1$ یا $j=J-1$ است از معادله (۷۲-۵) در حالتی که $\alpha = 1/4$ استفاده می شود. همانطور که توسط لیلی بحث شده است با قرار دادن $\alpha' = (16\alpha + 32)/(40\alpha - 1)$ به جای α در معادله (۷۲-۵) برای گره‌های $j=2$ و $j=J-2$

می توان پایداری و بقای عددی معادله $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} f(u)$ را تضمین نمود.

بطور خلاصه در صورتیکه در شکل کلی معادله، $\alpha = 1/4$ قرار دهیم، ماتریس محاسبات به فرم

ماتریس‌های $[A]$ و $[B]$ خواهد بود که در آن ماتریس‌های $[A]_{n \times n} \times [F']_{n \times 1} = [B]_{n \times n} \times [F]_{n \times 1}$

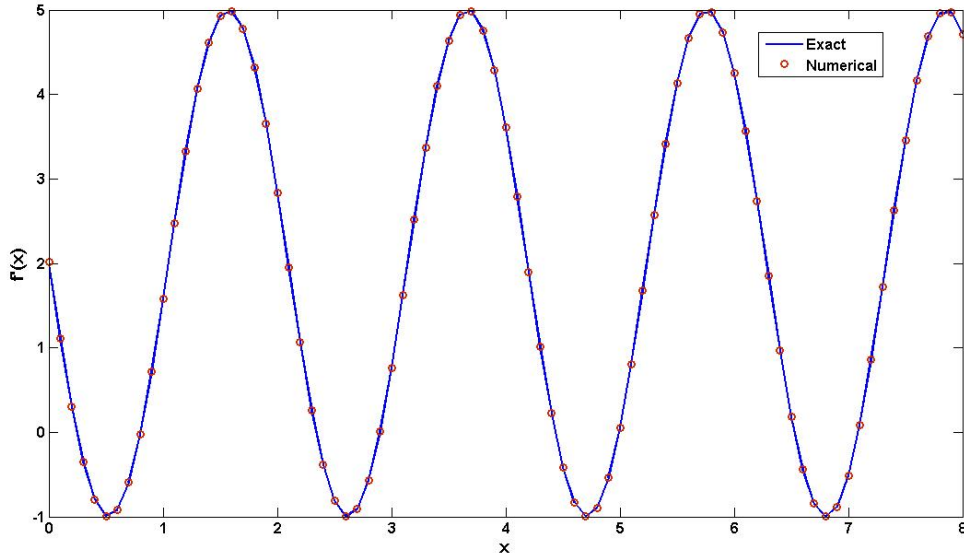
ضرایب و ماتریس‌های $[F]$ و $[F']$ مقادیر تابع $f(x)$ و مشتق اول آن می‌باشند.

$$[A] = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 0 & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & 1 & 4 & 1 & 0 & \dots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \dots & 0 & 1 & 4 & 1 & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & 0 & 1 & 4 & 1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 2 & 1 \end{pmatrix}, \quad [B] = \begin{pmatrix} \frac{-5}{2\Delta x} & \frac{4}{2\Delta x} & \frac{1}{2\Delta x} & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \frac{-3}{\Delta x} & 0 & \frac{3}{\Delta x} & 0 & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & \frac{-3}{\Delta x} & 0 & \frac{3}{\Delta x} & 0 & \dots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \dots & 0 & \frac{-3}{\Delta x} & 0 & \frac{3}{\Delta x} & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & 0 & \frac{-3}{\Delta x} & 0 & \frac{3}{\Delta x} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \frac{-1}{2\Delta x} & \frac{-4}{2\Delta x} & \frac{5}{2\Delta x} \end{pmatrix}$$

در شکل (۳-۵) مقایسه بین نتایج عددی و حقیقی مشتق اول تابع $y = 2x + \cos(3x)$ را می‌توان

ملاحظه نمود. انتظار داریم که طرحی با مرتبه سوم در مرز و مرتبه خطای ششم در گره‌های مرکزی

داشته باشیم. میزان دقت نیز در شکل (۴-۵) برای گره‌های مرزی و داخلی ترسیم شده است.



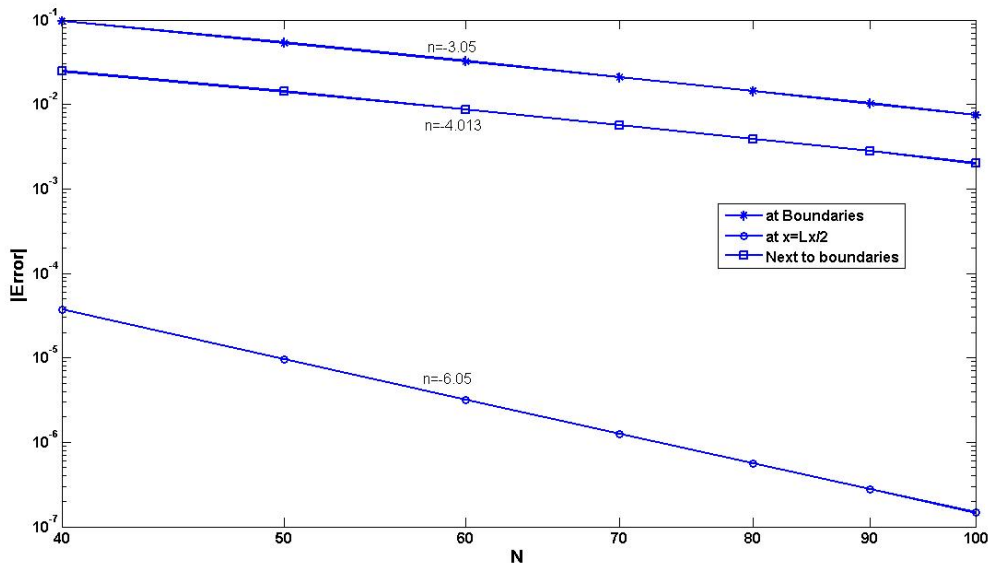
شکل (۵-۳): تقریب مشتق اول تابع $y = 2x + \cos(3x)$

معادله (۷۵-۵) مشتق دوم تابع $f(x)$ را نشان می‌دهد که یک طرح اختلاف محدود فشرده و با دقت مرتبه چهارم است.

$$\alpha f_{j-1}'' + f_j'' + \alpha f_{j+1}'' = \frac{4(1-\alpha)}{3\Delta x^2}(f_{j-1} - 2f_j + f_{j+1}) + \frac{10\alpha-1}{12\Delta x^2}(f_{j+2} - 2f_j + f_{j-2}) \quad (۷۵-۵)$$

که در آن $\alpha = 1/4$ است. در اینجا نیز مساله ناهنجاری مورد توجه قرار گرفته است و برای غلبه بر این مشکل، معادله (۷۵-۵) را در ضریب $1/\alpha$ ضرب می‌کنیم. در این صورت معادله به فرم زیر تغییر شکل خواهد داد.

$$f_{j-1}'' + \frac{1}{\alpha} f_j'' + f_{j+1}'' = \frac{4(1/\alpha-1)}{3\Delta x^2}(f_{j-1} - 2f_j + f_{j+1}) + \frac{10-1/\alpha}{12\Delta x^2}(f_{j+2} - 2f_j + f_{j-2}) \quad (۷۶-۵)$$



شکل (۴-۵): مرتبه دقت برای مشتق مرتبه اول

در مرزهای جریان، حالت مرتبه سوم یکطرفه بکار برده می شود که به صورت زیر است.

$$f_0'' + 11f_1'' = \frac{1}{\Delta x^2} (13f_0 - 27f_1 + 15f_2 - f_3) \quad (۷۷-۵)$$

$$f_J'' + 11f_{J-1}'' = \frac{1}{\Delta x^2} (13f_J - 27f_{J-1} + 15f_{J-2} - f_{J-3}) \quad (۷۸-۵)$$

از طرفی با مشتق گیری از معادله (۷۳-۵)، معادله (۷۹-۵) تولید می شود.

$$f_0'' + 2f_1'' = \frac{1}{2\Delta x} (-5f_0' + 4f_1' + f_2') \quad (۷۹-۵)$$

حال به سادگی می توان از معادله (۷۹-۵)، معادله (۸۰-۵) را بدست آورد.

$$f_0'' + 2f_1'' = \frac{-3}{\Delta x} f_0' + \frac{1}{2\Delta x} (f_0' + 4f_1' + f_2') \quad (۸۰-۵)$$

با جایگذاری طرف چپ معادله (۷۳-۵) (با فرض $\alpha = 1/4$) برای ترمهای داخل پرانتز در معادله (۵-

۸۰) به معادله زیر می رسیم:

$$f_0'' + 2f_1'' = \frac{-3}{\Delta x} \frac{df}{dx} \Big|_{(x=0)} - \frac{3}{2\Delta x^2} (f_0 - f_2) \quad (81-5)$$

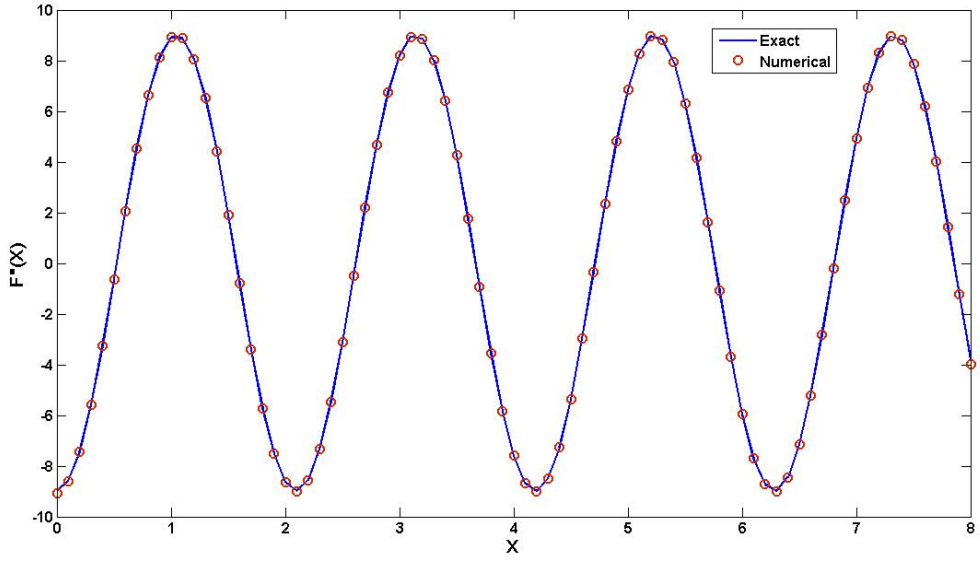
معادله (81-5) زمانی در داخل مرزها به کار برده می شود که مقادیر تابع و مشتق آنها موجود باشند. مشابه این روابط را می توان برای خروجی از مرز، هنگامی که تابع و مشتق آن در دسترس است بکار برد.

$$f_J'' + 2f_{J-1}'' = \frac{3}{\Delta x} \frac{df}{dx} \Big|_{(x=Lx)} - \frac{3}{2\Delta x^2} (f_J - f_{J-2}) \quad (82-5)$$

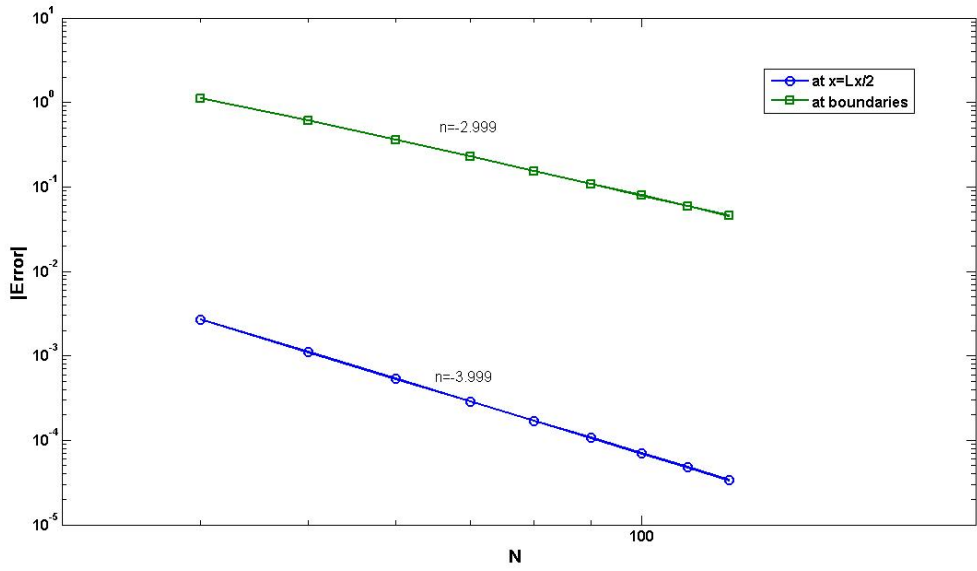
نزدیک مرزها یعنی جایی که $j=1$ و $j=J-1$ است از طرح تفاضل متناهی فشرده مرتبه دوم استفاده شده است که با جایگزینی $\alpha = 1/10$ در معادله (82-5) به دست می آید. بطور خلاصه ماتریس محاسبات به فرم $[D]_{n \times n} \times [F]_{n \times 1} = [C]_{n \times n} \times [F'']_{n \times 1}$ خواهد بود که در آن ماتریسهای $[C]$ و $[D]$ ماتریسهای ضرایب و ماتریسهای $[F]$ و $[F'']$ مقادیر تابع $f(x)$ و مشتق دوم آن $f''(x)$ می-باشند.

$$[C] = \begin{pmatrix} 1 & 11 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 1 & 10 & 1 & 0 & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & 1 & 4 & 1 & 0 & \dots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \dots & 0 & 1 & 4 & 1 & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & 0 & 1 & 10 & 1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 11 & 1 \end{pmatrix}, \quad [D] = \begin{pmatrix} \frac{13}{\Delta x^2} & \frac{-27}{\Delta x^2} & \frac{15}{\Delta x^2} & \frac{-1}{\Delta x^2} & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \frac{12}{\Delta x^2} & \frac{-24}{\Delta x^2} & \frac{12}{\Delta x^2} & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ \frac{1}{2\Delta x^2} & \frac{4}{\Delta x^2} & \frac{-9}{\Delta x^2} & \frac{4}{\Delta x^2} & \frac{1}{2\Delta x^2} & 0 & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & \frac{1}{2\Delta x^2} & \frac{4}{\Delta x^2} & \frac{-9}{\Delta x^2} & \frac{4}{\Delta x^2} & \frac{1}{2\Delta x^2} & 0 & \dots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \dots & 0 & \frac{1}{2\Delta x^2} & \frac{4}{\Delta x^2} & \frac{-9}{\Delta x^2} & \frac{4}{\Delta x^2} & \frac{1}{2\Delta x^2} & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & 0 & \frac{1}{2\Delta x^2} & \frac{4}{\Delta x^2} & \frac{-9}{\Delta x^2} & \frac{4}{\Delta x^2} & \frac{1}{2\Delta x^2} \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \frac{12}{\Delta x^2} & \frac{-24}{\Delta x^2} & \frac{12}{\Delta x^2} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & \frac{-1}{\Delta x^2} & \frac{15}{\Delta x^2} & \frac{-27}{\Delta x^2} & \frac{13}{\Delta x^2} \end{pmatrix}$$

در شکل (82-5) مقایسه بین نتایج عددی و تحلیلی مشتق دوم تابع $y = 2x + \cos(3x)$ را می توان ملاحظه نمود. میزان خطا برای گره های داخلی و مرزی نیز در شکل (82-6) ترسیم شده اند که نشان دهنده دقت مرتبه چهارم محاسبات در نقاط داخلی و مرتبه سوم در مرزهاست.



شکل (۵-۵): تقریب مشتق دوم تابع $y = 2x + \cos(3x)$



شکل (۵-۶): مرتبه دقت برای مشتق مرتبه دوم

۵-۵-۲-الگوی پیشروی در زمان

برای انجام محاسبات و پیشروی در زمان، از طرح اختلاف زمانی کوتاه مرتبه سوم فشرده^۱ که توسط رای^۲ [۸۱] ارائه شده است استفاده می کنیم. کاربرد این روش با در نظر گرفتن معادله (۵-۸۳) و جدول (۵-۱) به صورت ذیل تشریح می گردد.

$$\frac{du}{dt} = R(u) \quad (۵-۸۳)$$

جدول (۵-۱): طرح پیشروی زمانی رانج کوتای مرتبه سوم

زمان	اولین موقعیت	دومین موقعیت
t^n	u^n	$R(u^n)$
$t' = t^n + c_1 \Delta t$	$u' = u^n + c_1 \Delta t R$	$R' = R(u')$
$t'' = t' + (c_2 + d_2) \Delta t$	$u'' = u' + (c_2 R' + d_2 R) \Delta t$	$R'' = R(u'')$
$t^{n+1} = t'' + \Delta t$	$u^{n+1} = u'' + (c_3 R'' + d_3 R') \Delta t$	

جدول (۵-۱) نشان می دهد که برای پیشروی زمانی معادله (۵-۸۳) به اندازه Δt ، طرف راست معادله $(R(u))$ ، نیازمند محاسبه در سه زیربازه زمانی است. در هر زیربازه زمانی، زمان به اندازه $(c_i + d_i) \Delta t$ افزایش یافته و u بوسیله یک ترکیب خطی از R در مرحله زمانی حال و R در مرحله زمانی گذشته محاسبه می گردد که در آن c_i و d_i مقادیر ثابتند.

^۱ Compact, third order, Runge-Kutta time differencing scheme

^۲ A. Wray

بعد از گذشت مرحله سوم، زمان برابر Δt و مقدار u محاسبه شده برابر مقدار u بعد از گذر از یک Δt زمانی است. برای محاسبه ضرایب، با معادل هم قراردادن ضرایب حاصل از سری تیلور با طرح مذکور داریم.

$$c_1 + c_2 + c_3 + d_1 + d_2 + d_3 = 1$$

$$c_1 c_2 + c_3 \left[\frac{d_1}{c_2} \left(1 + \frac{d_3}{c_3} \right) + c_2 \left(1 + \frac{d_2}{c_2} \right) \right] = \frac{1}{2}$$

$$c_1^2 c_2 + c_3 \left[c_1 + c_2 \left(1 + \frac{d_2}{c_2} \right) \right]^2 + c_1^2 c_3 = \frac{1}{3}$$

$$c_1 c_2 c_3 = \frac{1}{6}$$

برای حل، $d_1 = 0$ قرار می دهیم و نتیجه به صورت زیر خواهد بود.

$$c_1 = \frac{2}{3}, \quad d_1 = 0$$

$$c_2 = \frac{5}{12}, \quad d_2 = -\frac{5}{12}$$

$$c_3 = \frac{3}{5}, \quad d_3 = -\frac{4}{15}$$

مثالهایی از مقایسه دقت روش تفاضلات محدود فشرده با سایر روشهای تفاضل محدود در ضمیمه الف قابل ملاحظه است.

۵-۳-۵- طرح ضمنی برای حل مساله معکوس انجماد آلیاژها

به منظور حل معادلات حاکم بر مساله معکوس انجماد آلیاژها از یک طرح تفاضل محدود ضمنی به شرح زیر استفاده شده است. روش حل فقط برای معادلات حاکم بر مساله مستقیم در حالت یک بعدی عنوان

شده و برای مسائل حساسیت و الحاقی نیز به روشی مشابه عمل شده است. شایان ذکر است که در حالت دو بعدی نیز از همین طرح با بهره گیری از روش ADI استفاده شده است. ابتدا معادله حاکم بر مساله مستقیم (معادله (۵-۱)) را در نظر می گیریم:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad 0 < x < b \quad 0 < t \leq t_f, \quad (۸۴-۵)$$

با توجه به نمودار و رابطه بین آنتالپی و دما در حالت انجماد آلیاژها که انجماد در یک بازه دمایی مشخص رخ داده و پرش ناگهانی در مقدار آنتالپی در موقعیت سطح مشترک همانند مواد خالص وجود ندارد، می توان برای محاسبه $\frac{\partial H}{\partial t}$ از قاعده زنجیری به شکل زیر استفاده کرد.

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} = C'_p(T) \frac{\partial T}{\partial t} \quad (۸۵-۵)$$

حال با توجه به آنچه ذکر شد، معادله حاکم به شکل زیر تبدیل خواهد شد.

$$C'_p(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (۸۶-۵)$$

و با استفاده از یک طرح تفاضل مرکزی ضمنی، معادله فوق به شکل گسسته بدست خواهد آمد [۸۲].

$$C'_p(T_i^{n+1}) \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = k_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} \frac{T_{i-1}^{n+1} - T_i^{n+1}}{\Delta x^2} + k_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} \frac{T_{i+1}^{n+1} - T_i^{n+1}}{\Delta x^2} \quad (۸۷-۵)$$

از آنجا که الگوریتم حل مساله معکوس مبتنی بر تکرار بوده و در هر تکرار سه دسته معادله مستقیم، الحاقی و حساسیت حل می شوند، لذا به منظور افزایش سرعت حل مساله و خودداری از یک فرایند تکراری دیگر در داخل حلقه محاسباتی روش معکوس، از یک تاخیر زمانی در مقدار دما در بدست آوردن k و C'_p استفاده شده است. در واقع برای بدست آوردن این دو خاصیت از دمای لحظه قبل استفاده شده و جهت کاهش خطای موجود ناشی از این اقدام، از گامهای زمانی کوچک تری استفاده شده است. بنا بر آنچه ذکر شد، این خواص از روابط زیر محاسبه خواهند شد.

$$k_{i\pm\frac{1}{2}}^{n+1} = k \text{ at } \left[\frac{T_{i\pm 1}^n + T_i^n}{2} \right] \quad (88-5)$$

$$C'_p(T_i^{n+1}) = C'_p(T_i^n) \quad (89-5)$$

و سرانجام معادلات گسسته پس از ساده سازی به شکل زیر در خواهند آمد.

$$-A_i T_{i-1}^{n+1} + (1 + 2B_i) T_i^{n+1} - D_i T_{i+1}^{n+1} = T_i^n \quad (90-5)$$

که در این معادله

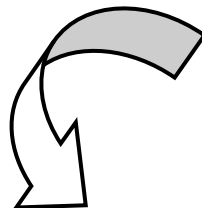
$$A_i = \frac{k_{i-\frac{1}{2}}}{C_{p_i}} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad (91-5)$$

$$D_i = \frac{k_{i+\frac{1}{2}}}{C_{p_i}} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad (92-5)$$

$$B_i = \frac{1}{2}(A_i + D_i) \quad (93-5)$$

معادلات فوق منجر به تشکیل یک دستگاه معادلات سه قطری شده که از الگوریتم توماس برای حل این دستگاه استفاده شده است. بدیهی است که نوشتن معادلات گسسته در حالت دو بعدی منجر به ایجاد یک دستگاه بلوکی پنج قطری خواهد شد که برای حل آن روش ADI بکار برده شده است. گسسته سازی معادلات حاکم بر مسائل الحاقی و حساسیت نیز به همین روش صورت گرفته با این تفاوت که به دلیل معلوم بودن توزیع دما در تمام نقاط، نیازی به ارزیابی خواص در زمان قبل نیست.

فصل ششم



نتایج عددی

۶-۱-مقدمه

در این فصل با توجه به معادلات حاکم ارائه شده و نحوه حل آنها در فصلهای قبل، نتایج حاصل از حل مساله معکوس برای موادخالص و آلیاژها در هندسه های یک و دو بعدی ارائه خواهد شد. به منظور ارزیابی و اطمینان از صحت نتایج عددی بدست آمده برای هر مساله خاص، برای هر حالت ابتدا یک شار حرارتی مشخص به مساله مستقیم اعمال شده و تاریخچه زمانی دما در یک نقطه خاص (مکان حسگر)، اندازه گیری و ثبت می شود. سپس بوسیله این دماهای اندازه گیری شده و حل مساله معکوس، شار حرارتی ورودی در قسمت اول بازسازی خواهد شد. با مقایسه کمی و کیفی این دو شار بدست آمده می-توان به میزان دقت روش استفاده شده پی برد. در نهایت پس از تایید کد عددی استفاده شده، مساله معکوس به منظور طراحی و کنترل سرعت سطح مشترک در نظر گرفته می شود. دقت و صحت نتایج بدست آمده برای مقادیر مختلف سرعت، شتاب و حتی شکل سطح مشترک بررسی شده اند.

۶-۲-انجماد موادخالص در حالت یک بعدی

۶-۲-۱-اعمال شار مرزی معلوم و بازسازی آن

به منظور تحلیل مساله معکوس انجماد مواد خالص در حالت یک بعدی، معادلات (۵-۱) تا (۵-۴) را برای حالتی که ضریب هدایت حرارتی ثابت باشد در نظر می گیریم. علاوه بر آن توجه به این نکته نیز لازم است که $q_l(t) = 0$ می باشد. همان گونه که ذکر شد، ابتدا دو شار حرارتی با توابع مشخص که ذکر خواهند شد به عنوان ورودی به مساله مستقیم اعمال شده و سپس با ثبت دما در نقاط حسگرها و استفاده از روش انتقال حرارت معکوس به تخمین و بازسازی این شارهای ورودی پرداخته خواهد شد. دو شار حرارتی ورودی با اشکال مثلثی و تابع پله ای انتخاب شده اند. دلیل انتخاب این دو نوع تابع برای شار حرارتی، تایید صحت نتایج برای حالتی است که گوشه های تیز و یا تغییرات ناگهانی در شار حرارتی

وجود دارد، چرا که روشهای انتقال حرارت معکوس باید برای هر نوع شکل شار حرارتی پایدار بوده و جوابی یکتا تولید نماید. توابع زیر به عنوان شار حرارتی ورودی در نظر گرفته شده اند.

$$q(t) = \begin{cases} -120t - 15 & 0 \leq t \leq 0.125 \\ 120t - 45 & 0.125 \leq t \leq 0.25 \\ -15 & t \geq 0.25 \end{cases} \quad (1-6)$$

$$q(t) = -10 - 10u(t - 0.15) \quad (2-6)$$

که $u(t)$ تابع پله‌ای هویساید می باشد. توابع فوق برای مقادیر مختلف موقیعت مکانی حسگرها، نويز در داده های اندازه گیری شده، عدد استفان، توزیع دمای اولیه مذاب، حدس اولیه روش گرادیان مزدوج بررسی و همچنین استقلال حل از شبکه محاسباتی نیز برای این حالت ارزیابی شده است.

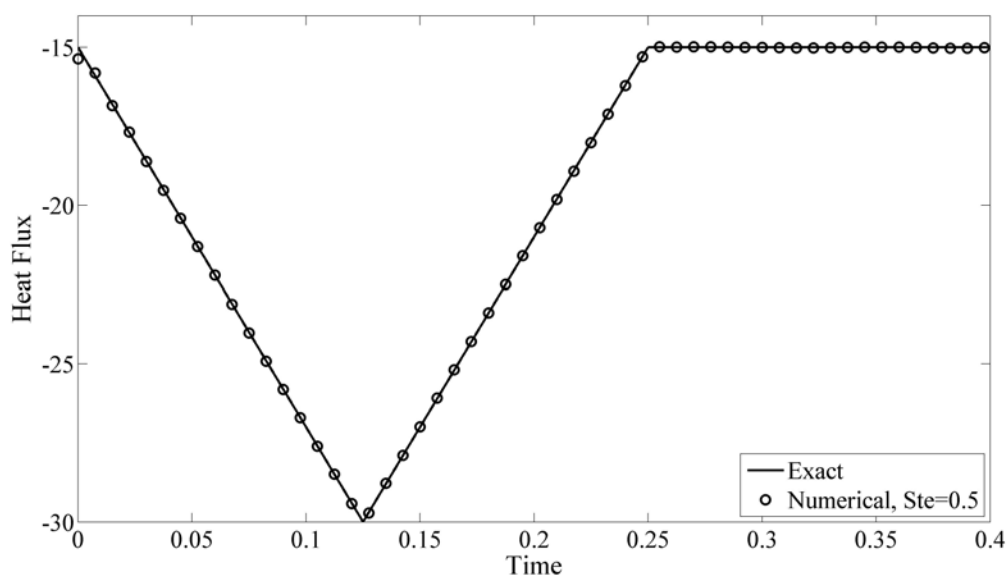
ابتدا در نظر بگیرید که تمام قالب از ماده مذاب خالص با دمای یکنواخت $T_i = 0.5$ پر شده، مرز بالا ایزوله و انتقال حرارت تنها از مرز پایین صورت گیرد. در لحظه $t = 0$ ناگهان مرز پایین در معرض یک شار حرارتی قرار گرفته و مقدار دما در مکان حسگر برای یک بازه زمانی $[0, t_f]$ ثبت شده که برای این مساله $t_f = 0.3$ در نظر گرفته شده است.

شار حرارتی مطلوب و محاسبه شده بوسیله دماهای ثبت شده در مکان حسگر و الگوریتم حل معکوس در حالت مثلثی برای $Ste = 0.5$ ، $x_s = 0.1$ ، $N_x = 40$ و $T_i = 0.5$ در شکل (۱-۶) نمایش داده شده است که x_s موقیت قرارگیری حسگر می باشد. لازم به ذکر است که مقدار حدس اولیه برای روش گرادیان مزدوج $q_s^0(t) = 0$ و برای توقف الگوریتم بهینه سازی $\varepsilon = 1 \times 10^{-5}$ در نظر گرفته شده است. مطابق این شکل و طی یک ارزیابی کیفی ملاحظه می شود که تخمین و محاسبه این شار حرارتی از دقت خوبی برخوردار بوده است و این نشان دهنده صحت و دقت روش و الگوریتم معکوس بکار گرفته شده است. علاوه بر این جهت ارزیابی کمی دقت نتایج بدست آمده، مقدار درصد جذر مربعات خطای متوسط به شکل رابطه (۳-۶) تعریف می شود.

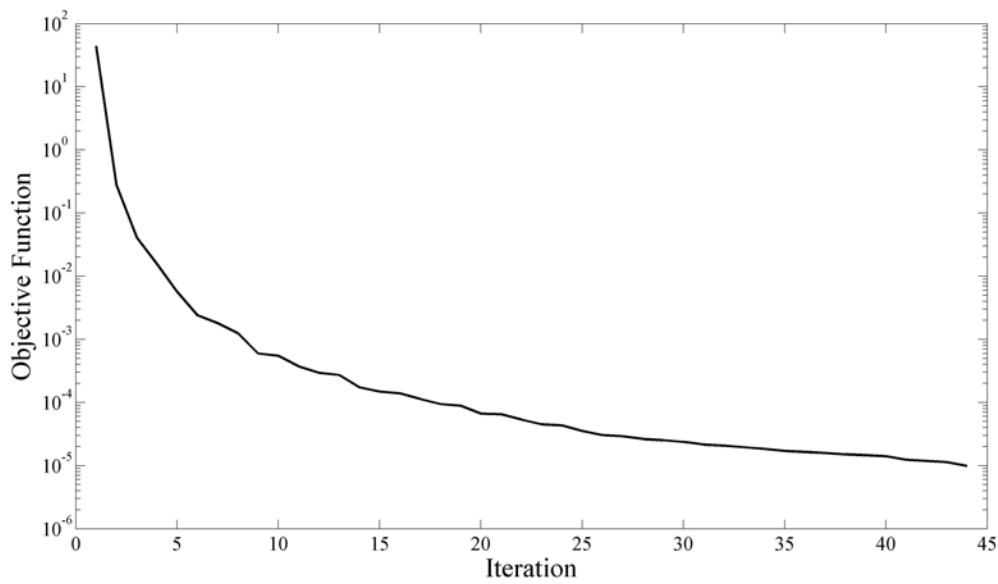
$$e_{RMS} = \frac{\sqrt{(1/M) \sum_{m=1}^M (q_{desired,m} - q_{estimate,m})^2}}{\sqrt{(1/M) \sum_{m=1}^M (q_{desired,m})^2}} \times 100 \quad (3-6)$$

که در رابطه بالا M تعداد کل بازه های زمانی است.

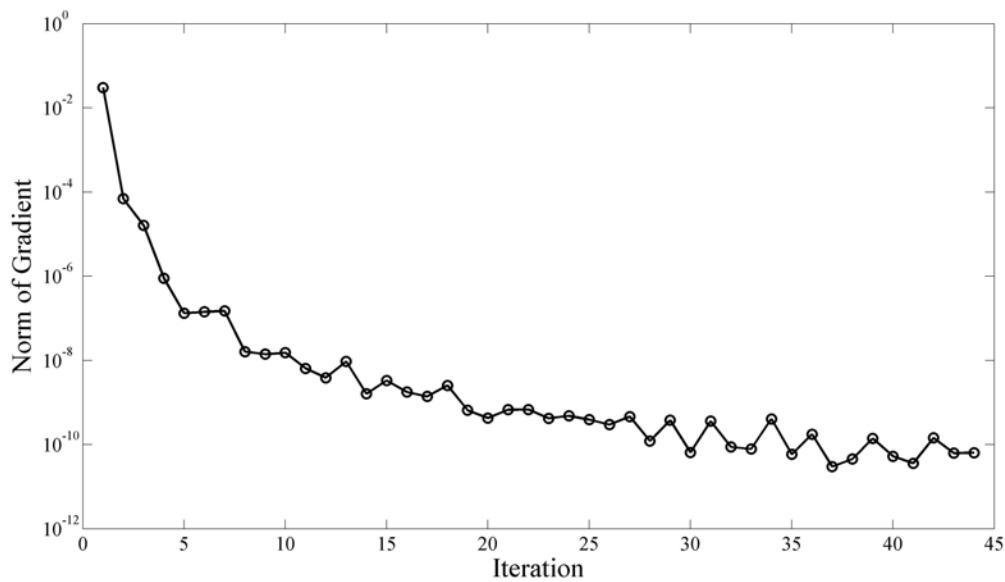
نرخ کاهش تابع هدف به همراه نرخ کاهش نرم بردار گرادیان نیز در شکل (۶-۲) ملاحظه می شوند که نشان دهنده روند بسیار مناسب همگرایی این روش به سمت میزان مطلوب بوده که این خود دلیل بر بدست آوردن و حل صحیح مساله الحاقی و انجام پذیری مطلوب مساله بهینه سازی می باشد.



شکل (۶-۱): مقایسه شار حرارتی مطلوب و محاسبه شده



الف



ب

شکل (۶-۲): الف) نرخ کاهش تابع هدف و ب) نرخ کاهش نرم گرادیان

۶-۲-۱-۱-بررسی استقلال از شبکه محاسباتی

به منظور ارزیابی میزان وابستگی حل معکوس به تعداد گره های شبکه یا به عبارتی اندازه مشها، تحلیل معکوس برای دو شار حرارتی مذکور برای مقادیر مختلفی از نقاط شبکه انجام گرفته است. مقدار تابع

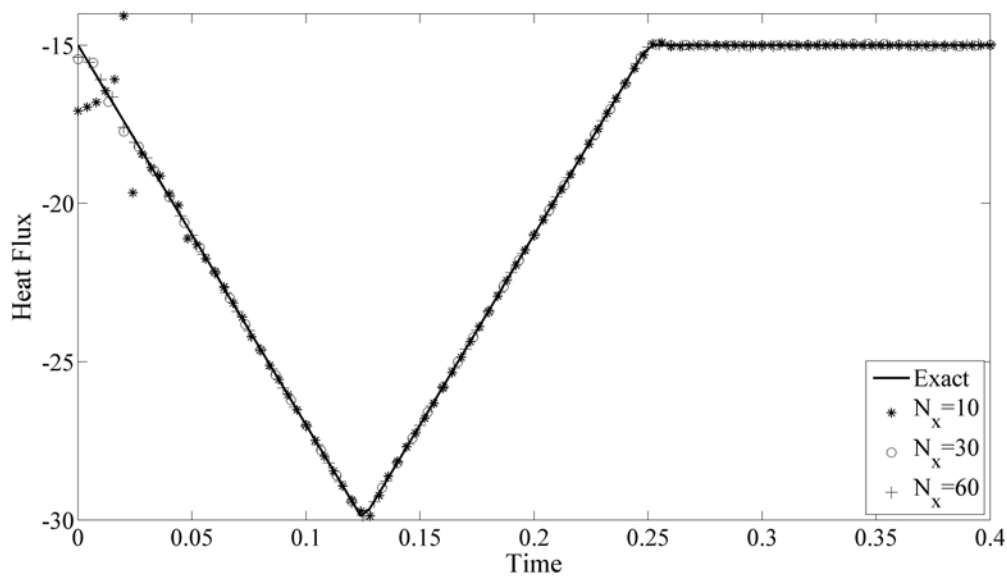
هدف در آخرین گام بهینه سازی، تعداد تکرار های لازم برای همگرایی روش و همچنین میزان خطای RMS برای دامنه ای با شبکه های متفاوت در جدول (۶-۱) ارائه شده اند. مطابق این نتایج، مقدار بهینه اندازه شبکه $N_x = 40$ انتخاب شده است. علاوه بر این شار حرارتی محاسبه شده و همچنین نرخ کاهش تابع هدف نیز برای مقادیر مختلف اندازه شبکه برای شار حرارتی مثلثی به ترتیب در شکل (۶-۳) و برای شار حرارتی پله ای شکل در شکل (۶-۴) آورده شده است. مطابق این نتایج ملاحظه می شود که برای یک شبکه محاسباتی با تعداد گره های کمتر، پس از عبور از شماره تکرار بحرانی N_c ، نرخ کاهش تابع هدف به میزان قابل ملاحظه ای کاهش می یابد.

جدول (۶-۱): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای مورد نیاز برای شبکه های مختلف

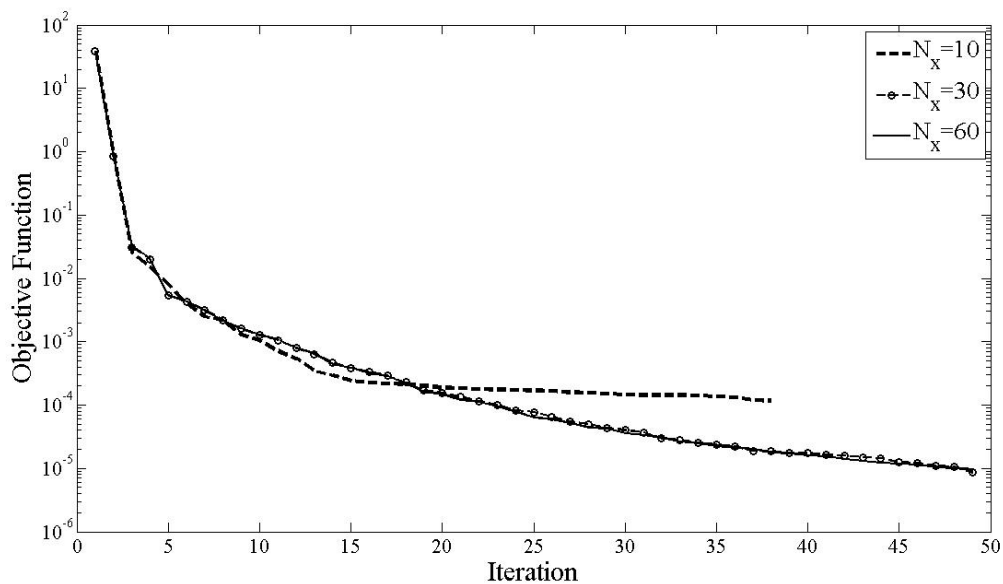
N_x		Objective Function	RMS Error(%)	Iteration
10	Triangular	1.1793e-004	2.3307	38
	Step	3.0274e-004	5.4587	90
20	Triangular	9.2799e-006	0.4145	52
	Step	8.3264e-006	2.2777	84
30	Triangular	8.6425e-006	0.2531	49
	Step	9.7101e-006	2.2512	57
40	Triangular	9.5342e-006	0.2416	48
	Step	9.5967e-006	2.2336	70
50	Triangular	9.9314e-006	0.2045	45
	Step	8.6273e-006	2.2394	75
60	Triangular	9.5591e-006	0.2023	49
	Step	9.9176e-006	2.3862	86
70	Triangular	9.7097e-006	0.2019	47
	Step	9.7766e-006	2.4146	85

بدلیل بد وضع بودن طبیعت مساله انتقال حرارت معکوس، هنگامی که تابع هدف به مقدار خطا در داده های ورودی نزدیک شود، ادامه تکرارها منجر به کاهش تابع هدف با نرخ بسیار کمی می شود. لذا همانگونه که آلیفانف ذکر کرده است، روش گرادیان مزدوج پس از رسیدن به شماره تکرار بحرانی (N_c) بایستی متوقف شود. این تکرار بحرانی به مقدار خطای ورودی و همچنین خطای ناشی از گرد کردن در روش عددی استفاده شده برای حل مسائل مستقیم، الحاقی و حساسیت وابسته است. همانگونه که در

شکل های (۳-۶) و (۴-۶) و جدول (۱-۶) مشهود است با افزایش تعداد گره ها به مقدار ۴۰، نتایج حاصل باعث نرخ همگرایی مطلوب تری شده است. این پدیده دور از انتظار نبوده است به این دلیل که با یک شبکه محاسباتی ریزتر، خطای گرد کردن کاهش می یابد.

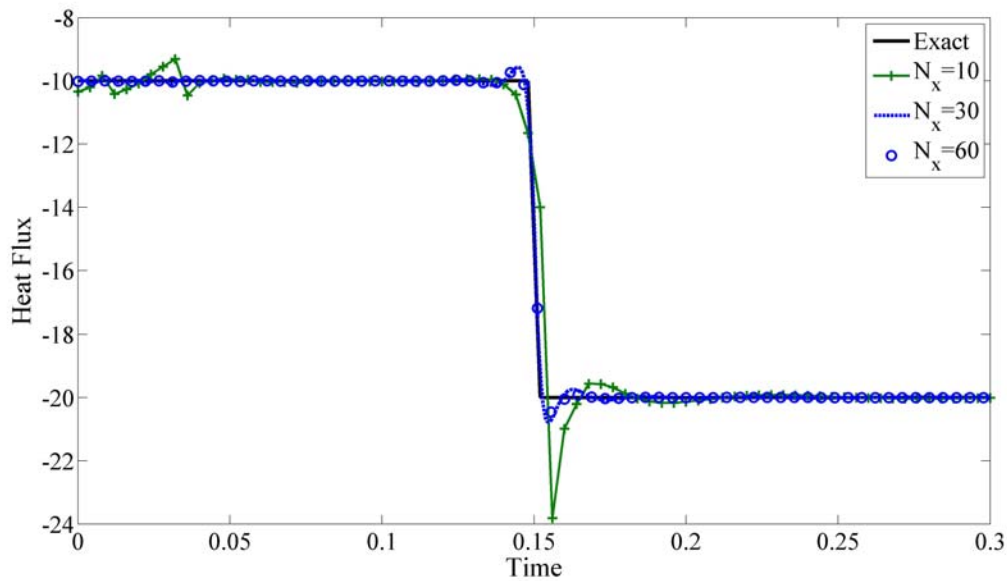


الف

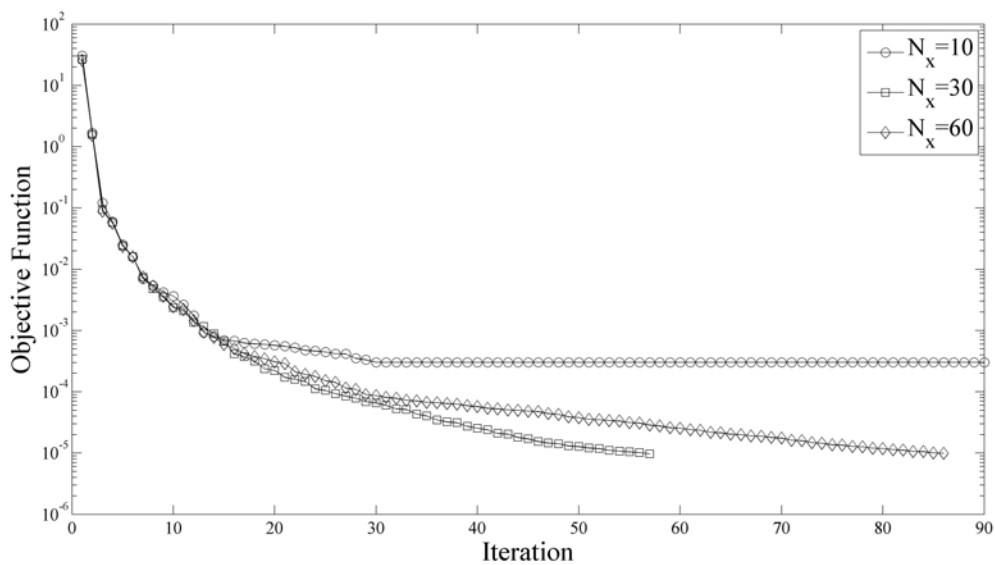


ب

شکل (۳-۶): الف) شار حرارتی و ب) نرخ کاهش تابع هدف برای شبکه های متفاوت با شار مثلی



الف



ب

شکل (۴-۶): شار حرارتی و نرخ کاهش تابع هدف برای شبکه های متفاوت با شار پله ای

۲-۱-۲-۶- بررسی اثر حدس اولیه

جهت بررسی اثر حدس اولیه برای شروع تکرارها بر حل مساله معکوس ذکر شده در قسمت قبل، مساله برای شکلهای مختلفی از حدس اولیه حل شده و نرخ کاهش تابع هدف در شکل (۴-۵) ترسیم شده است.

همچنین مقایسه ای بین شار حرارتی تخمین زده شده برای این مقادیر نیز در شکل (۶-۶) آورده شده است. بر طبق آنچه در شکل‌های (۵-۶) و (۶-۶) و جدول (۲-۶) ملاحظه می شود می توان نتیجه گرفت که مقدار حدس اولیه تاثیر عمیقی بر روی حل انجام شده ندارد. البته همان گونه که در شکل مربوط به نرخ کاهش تابع هدف مشخص است، هنگامی که حدس اولیه $q^0 = -15$ انتخاب می شود، تعداد تکرارها برای رسیدن به مقدار کمینه تابع هدف به کمترین مقدار خود می رسد. این پدیده به این دلیل رخ می دهد که در روش گرادیان مزدوج، شار حرارتی تخمین زده شده به سمت مقدار حدس اولیه پیش می رود و دقیقا در آخرین لحظه از شبیه سازی به مقدار حدس اولیه می رسد. چون مقدار حدس اولیه در این حالت با مقدار شار حرارتی در زمان نهایی برابر است، لذا تعداد تکرار کمتری برای رسیدن به این مقدار مورد نیاز است. بنابر این با در نظر گرفتن نتایج کمی و کیفی به دست آمده نتیجه می شود که روش استفاده شده وابستگی به میزان حدس اولیه ندارد و لذا می توان با انتخاب هر مقدار حدس اولیه به جواب نهایی دست پیدا کرد. البته ذکر این نکته ضروری است که انتخاب حدس اولیه مناسب می تواند تعداد تکرارها برای رسیدن به حالت بهینه را کاهش دهد.

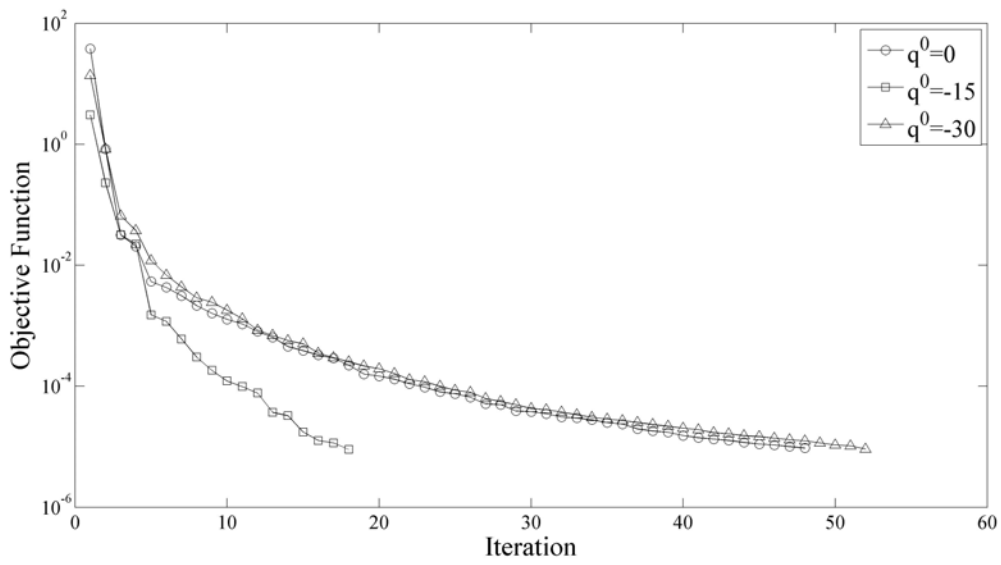
جدول (۲-۶): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای مورد نیاز برای حدسهای اولیه متفاوت

الف) شار مثلثی

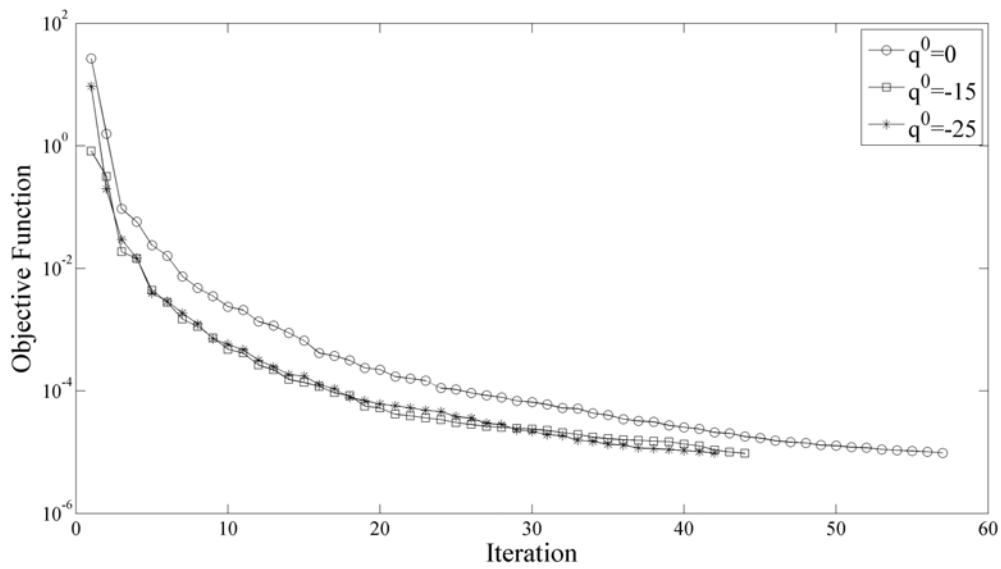
q^0	Objective Function	RMS Error(%)	Iteration
0	9.5342e-006	0.2416	48
-10	9.2843e-006	0.6392	30
-15	9.0250e-006	0.8969	18
-25	9.9349e-006	0.4614	41
-30	9.1552e-006	0.3185	52

ب) شار پله ای

q^0	Objective Function	RMS Error(%)	Iteration
0	9.7101e-006	2.2512	57
-1	9.8773e-006	2.2464	72
-5	9.4771e-006	2.3762	61
-10	9.9504e-006	2.6654	43
-15	9.5715e-006	2.6654	44
-20	9.9718e-006	3.1483	39
-25	9.7500e-006	2.9533	42

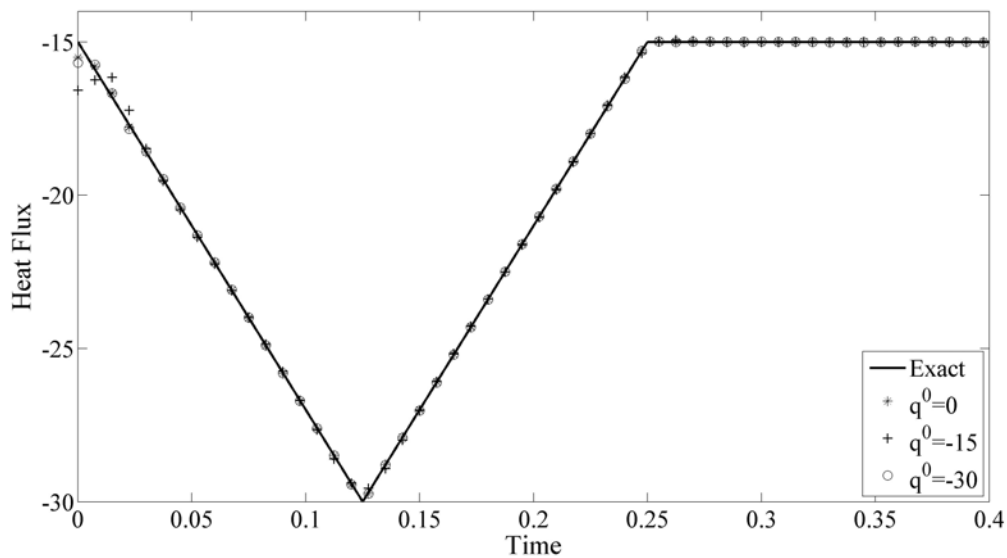


الف

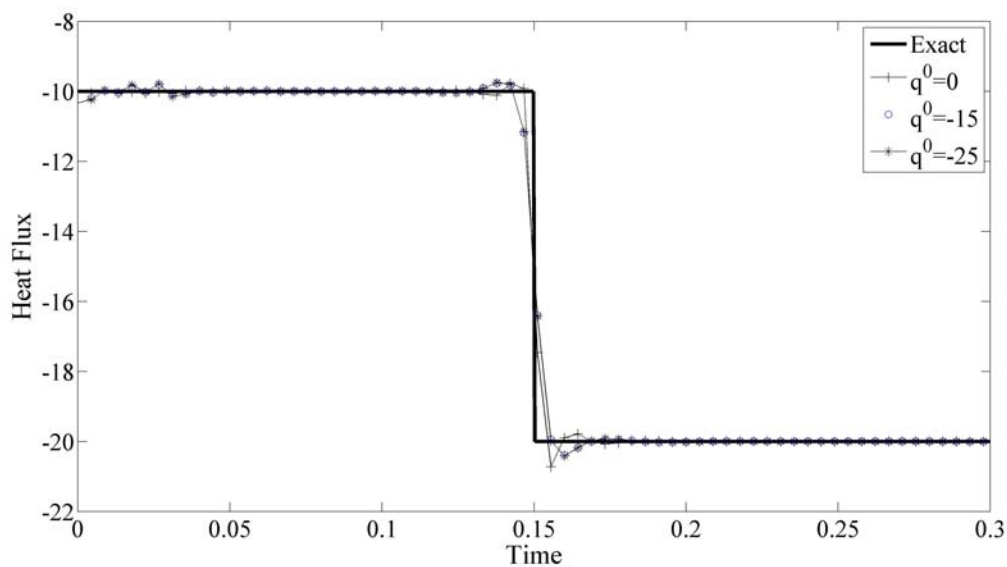


ب

شکل (۶-۵): نرخ کاهش تابع هدف برای شبکه های متفاوت با الف) شار مثلثی و ب) شار پله ای



الف



ب

شکل (۶-۶): شار حرارتی برای حدسهای اولیه متفاوت با الف) شار مثلثی و ب) شار پله ای

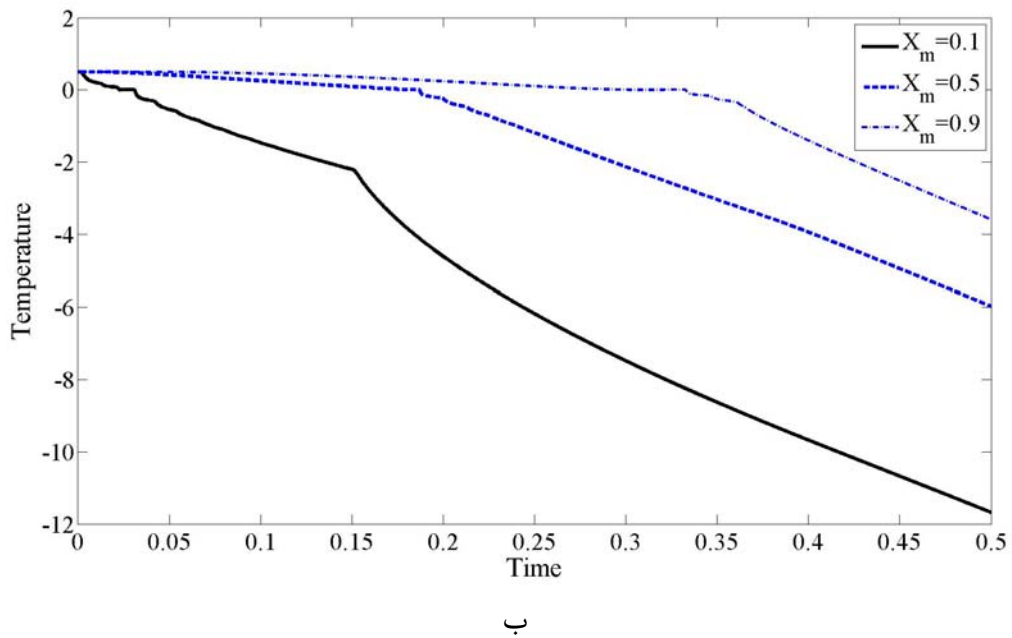
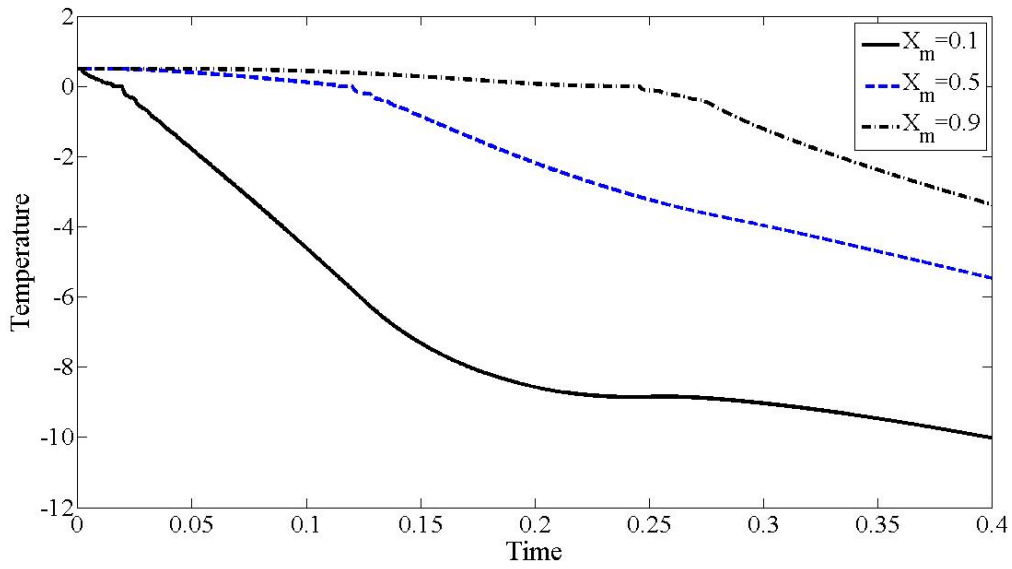
۶-۲-۱-۳- اثر موقعیت قرارگیری حسگرها

بدلیل اینکه هدف از انجام این تحقیق کنترل سرعت سطح مشترک در فرایندهای انجماد بوسیله روشهای انتقال حرارت معکوس می باشد و در این مساله، حسگر دقیقا در موقعیت سطح مشترک قرار داشته و

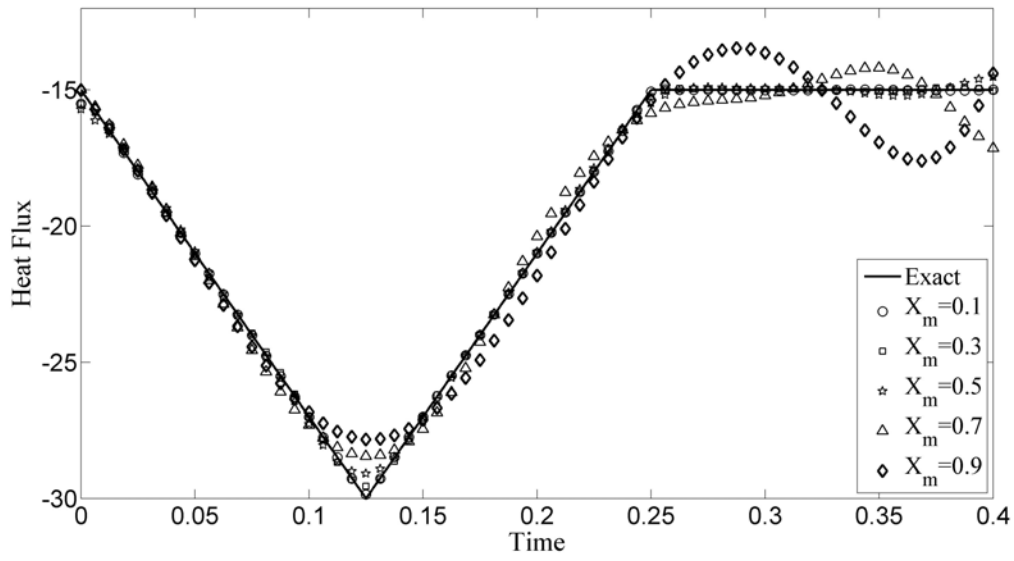
متحرک است. لذا به منظور مطالعه اثر حرکت حسگر در دامنه مکانی، ابتدا موقعیتهای مختلفی در طول قالب به فواصل ۰/۱ برای حسگر در مساله فوق در نظر گرفته شده و دماهای ثبت شده در این نقاط به همراه روش معکوس توصیف شده برای بازگردانی شار حرارتی مورد استفاده قرار گرفته است. نمونه ای از دماهای اندازه گیری شده با اعمال شار مثلثی و پله ای در شکل (۶-۷) (الف و ب) نمایش داده شده است. شکل (۶-۸) نشان دهنده شار حرارتی بدست آمده برای موقعیتهای مختلف حسگر بوده و بیانگر این مطلب است که با فاصله گرفتن حسگر از مرز فعال یعنی مرزی که شار حرارتی روی آن اعمال می شود، دقت نتایج برای بازگرداندن هر دو نوع شار مثلثی و پله ای کاهش می یابد که این مطلب برای شار حرارتی پله ای به دلیل گرادیان شدیدی که در شکل این شار وجود دارد شدیدتر است. همین مطلب با مقایسه مقدار خطای متوسط در جدول (۶-۳) تایید می شود. بنابر این با توجه به نتایج حاصل درمی یابیم که برای مساله کنترل سطح مشترک، هرچه حسگر از مرز فعال دورتر شود خطای محاسبه بیشتر شده و بنابر این انتظار می رود که دقت محاسبات نسبت به حالتی که حسگر ثابت باشد کاهش یابد.

جدول (۶-۳): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای مورد نیاز برای مکانهای حسگر متفاوت

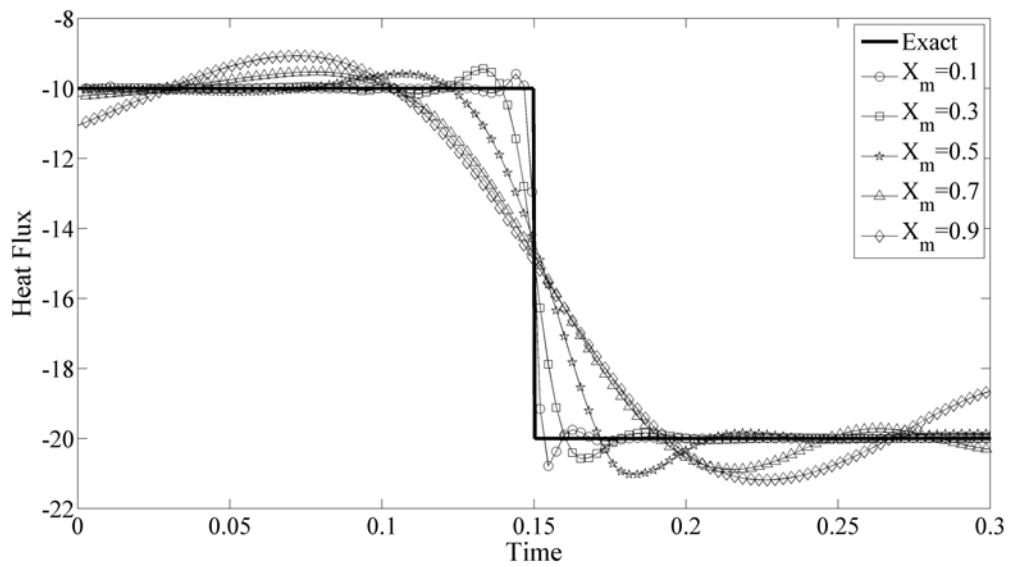
X_m		Objective Function	RMS Error(%)	Iteration
0.1	Triangular	9.5342e-006	0.2416	48
	Step	9.7101e-006	2.2512	57
0.2	Triangular	9.8761e-006	0.3025	48
	Step	9.6103e-006	3.3333	67
0.3	Triangular	9.4767e-006	0.4406	72
	Step	9.8559e-006	4.3117	103
0.4	Triangular	9.4696e-006	0.7247	59
	Step	9.7985e-006	5.2965	80
0.5	Triangular	9.3580e-006	0.9633	49
	Step	9.7659e-006	7.0355	94
0.6	Triangular	9.6294e-006	1.6509	46
	Step	9.9407e-006	8.4275	89
0.7	Triangular	9.0796e-006	2.8887	60
	Step	9.5036e-006	9.1009	83
0.8	Triangular	9.6501e-006	4.5838	46
	Step	9.7995e-006	10.1428	85
0.9	Triangular	9.9074e-006	5.1826	41
	Step	9.8859e-006	10.0922	68



شکل (۶-۷): دماهای ثبت شده در موقعیتهای متفاوت سنسور برای الف) شار مثلثی و ب) شار پله ای



الف



ب

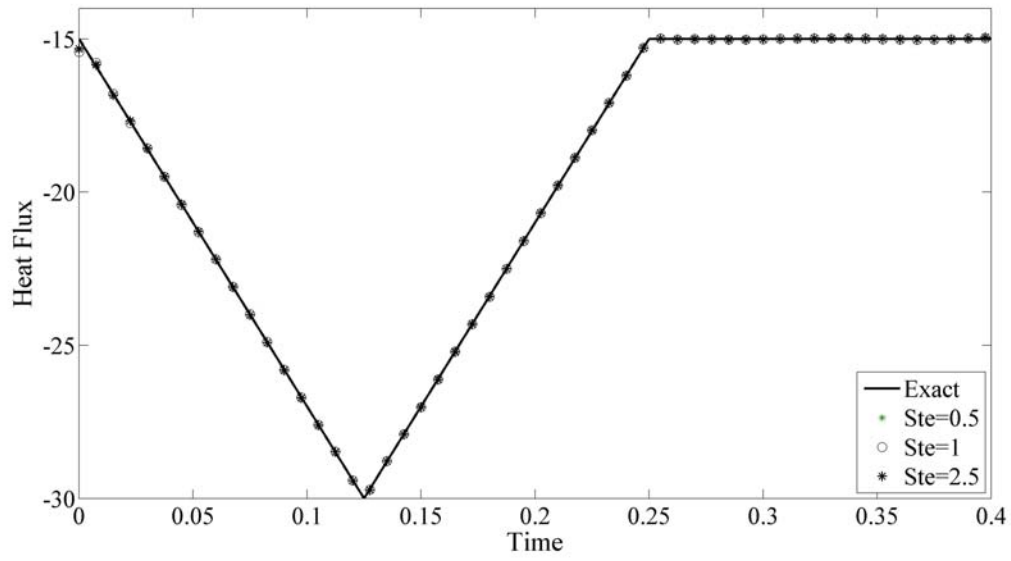
شکل (۸-۶): شار حرارتی برای حسگرهای متفاوت با الف) شار مثلثی و ب) شار پله ای

۴-۱-۲-۶- بررسی اثر عدد استفان

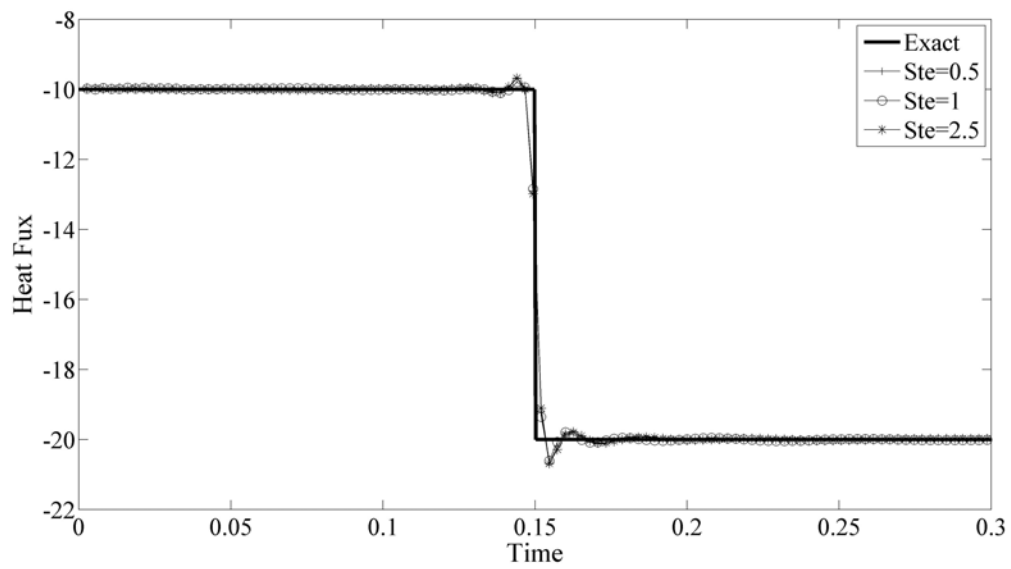
یکی از شرایط مطلوب حل مسائل معکوس به ویژه در انجماد مواد خالص و آلیاژها، عملکرد مناسب روش و الگوریتم استفاده شده برای مواد گوناگون با خواص مختلف می باشد. به منظور بررسی عدم وابستگی تحلیل مساله به نوع و جنس ماده مورد بررسی، مساله مذکور برای مواد مختلف در یک گستره مشخص از اعداد استفان بررسی شده است چرا که با عوض شدن جنس و ماده تحت انجماد فقط عدد استفان تغییر می کند. عدد استفان شکل بدون بعد گرمای نهان آزاد شده در طی فرایند انجماد است. شار حرارتی بدست آمده از حل معکوس برای گستره ای از اعداد استفان در شکل (۶-۹) آورده شده است. نتایج حاصل موبد این مطلب است که حل مساله معکوس چه از نظر روند همگرایی الگوریتم بهینه سازی و چه از نظر شار حرارتی محاسبه شده به جنس ماده وابستگی مشخصی ندارد. این مطلب را می توان با مقایسه شکل (۶-۹) و جدول (۶-۴) ملاحظه نمود.

جدول (۶-۴): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای مورد نیاز برای اعداد استفان مختلف

Ste		Objective Function	RMS Error(%)	Iteration
0.5	Triangular	9.9023e-006	0.1339	44
	Step	9.2675e-006	2.2039	55
1	Triangular	9.5271e-006	0.1953	40
	Step	9.7475e-006	2.1373	67
1.5	Triangular	9.5342e-006	0.2416	48
	Step	9.7101e-006	2.25	57
2	Triangular	9.8862e-006	0.3013	56
	Step	9.8427e-006	2.2766	68
2.5	Triangular	9.9508e-006	0.1366	40
	Step	9.4442e-006	2.2409	57



الف



ب

شکل (۶-۹): شار حرارتی برای اعداد استیفان متفاوت با الف) شار مثلثی و ب) شار پله ای

۶-۲-۱-۵- اثر میزان خطا در داده های ورودی

یکی از مهمترین مسائل مربوط به مسائل معکوس، پایداری و یکتایی جوابها برای حالتی است که اغتشاش یا خطا در داده های ورودی وجود داشته باشد. در راستای بررسی این اثر، داده های ورودی یا همان دمای اندازه گیری شده در موقیعت حسگر با یک مقدار خطای اندازه گیری مصنوعی ω حول مقادیر اندازه گیری شده مطابق رابطه (۶-۴) نوسان داده می شوند.

$$T_m = T_m^{ex} + \sigma\omega \quad (۶-۴)$$

که در رابطه فوق، T_m^{ex} دمای اندازه گیری شده بدون خطای اندازه گیری، σ انحراف معیار خطاهای اندازه گیری هستند و ω از یک توزیع نرمال با متوسط صفر و واریانس یک تولید می شود. نمونه ای از دمای اندازه گیری شده به همراه مقدار نوسان یافته آن با $\sigma = 0.3$ که حدود ۸-۱۲٪ خطا در داده های اندازه گیری شده می باشد در شکل (۶-۱۰) نشان داده شده است.

در حالت وجود خطا در داده های ورودی، علیرغم کاهش مقدار تابع هدف با افزایش تکرارها، کیفیت تخمین شار حرارتی ورودی با افزایش تکرارها کاهش می یابد. لذا ضروری است که محاسبات در یک تکرار مشخص با یک مقدار ε مشخص خاتمه یابد که این مقدار با توجه به اصل اختلاف^۱ در نظر گرفته می شود. این اصل پیشنهاد می کند که فرایند بهینه سازی هنگامی خاتمه یابد که قدر مطلق اختلاف بین دمای مطلوب و محاسبه شده برابر انحراف معیار خطای داده های ورودی شود.

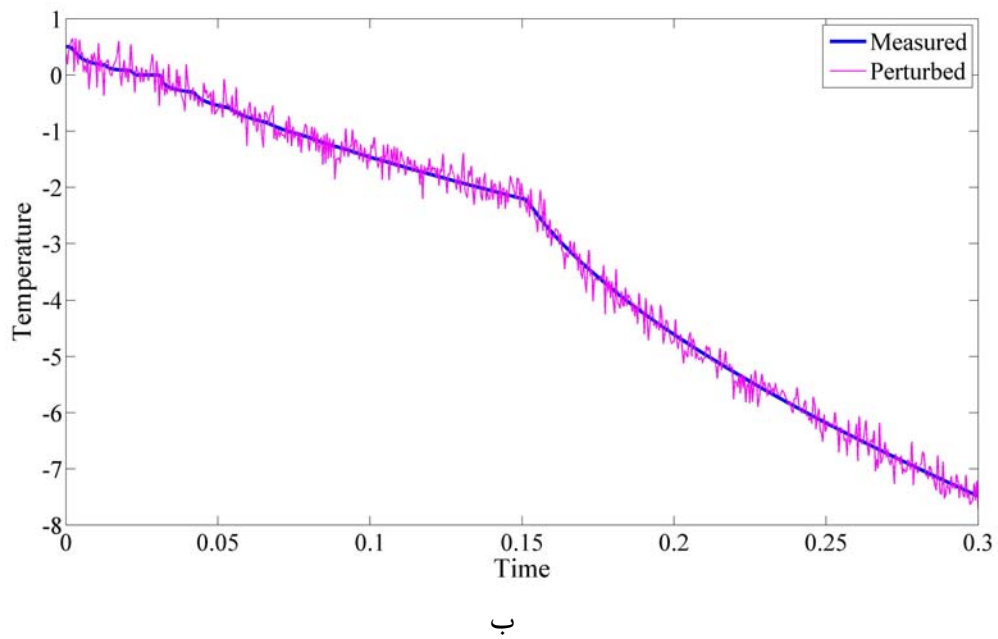
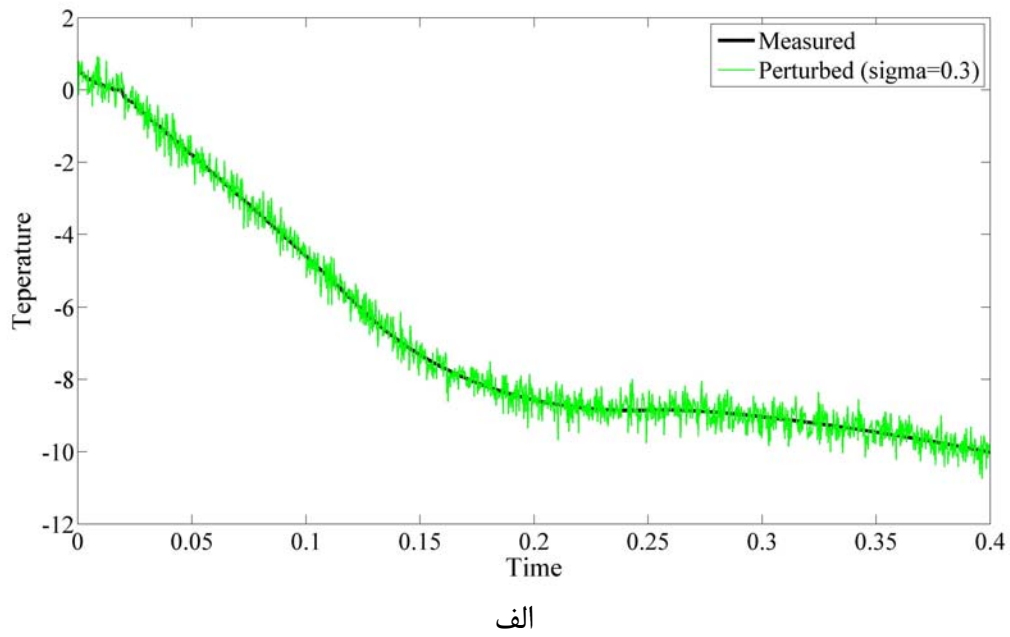
$$|T(x_s, t; q_s) - T_m(x_s, t)| \approx \sigma \quad (۵-۶)$$

با جایگزین کردن رابطه (۵-۶) در رابطه مربوط به تابع هدف خواهیم داشت

$$\varepsilon \approx \sigma^2 t_f \quad (۶-۶)$$

رابطه (۶-۶) در صورت وجود چندین حسگر به شکل رابطه (۶-۷) تغییر خواهد یافت.

¹ Discrepancy Principle



شکل (۶-۱۰): دماهای ثبت شده و اغتشاش یافته برای الف) شار مثلثی و ب) شار پله ای

$$\varepsilon \approx M \sigma^2 t_f \quad (7-6)$$

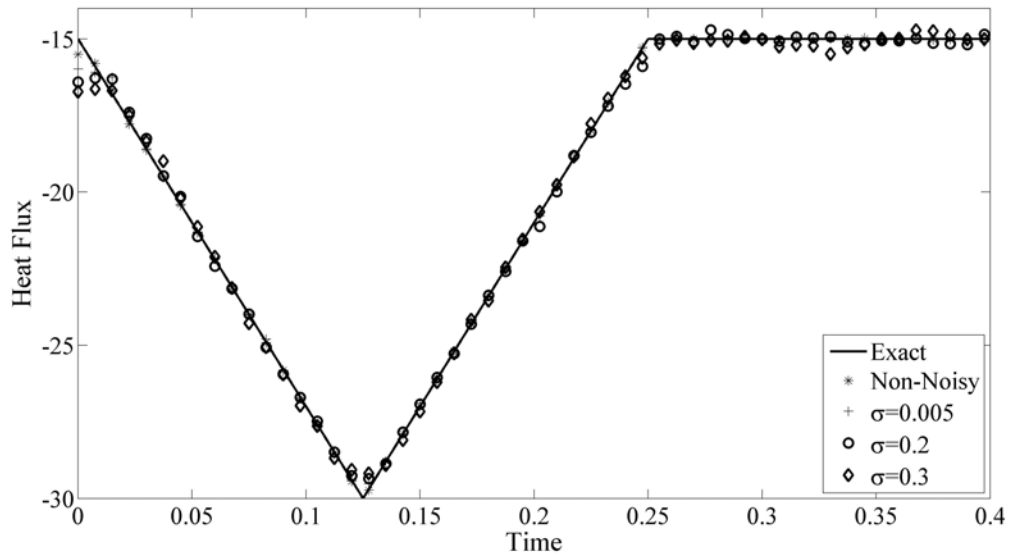
در رابطه فوق M تعداد حسگرهای موجود می باشد.

در این رساله مقادیر متفاوتی از انحراف معیار برای داده های ورودی در نظر گرفته شده و نتایج حاصل از تخمین شار حرارتی در شکل (۶-۱۱) و نرخ کاهش تابع هدف در شکل (۶-۱۲) برای مقادیر مختلف انحراف معیار نمایش داده شده است. علاوه بر این مقادیر خطا و تعداد تکرارهای مورد نیاز برای همگرایی حل مساله به همراه مقدار تابع هدف در آخرین تکرار در جدول (۶-۵) درج شده است.

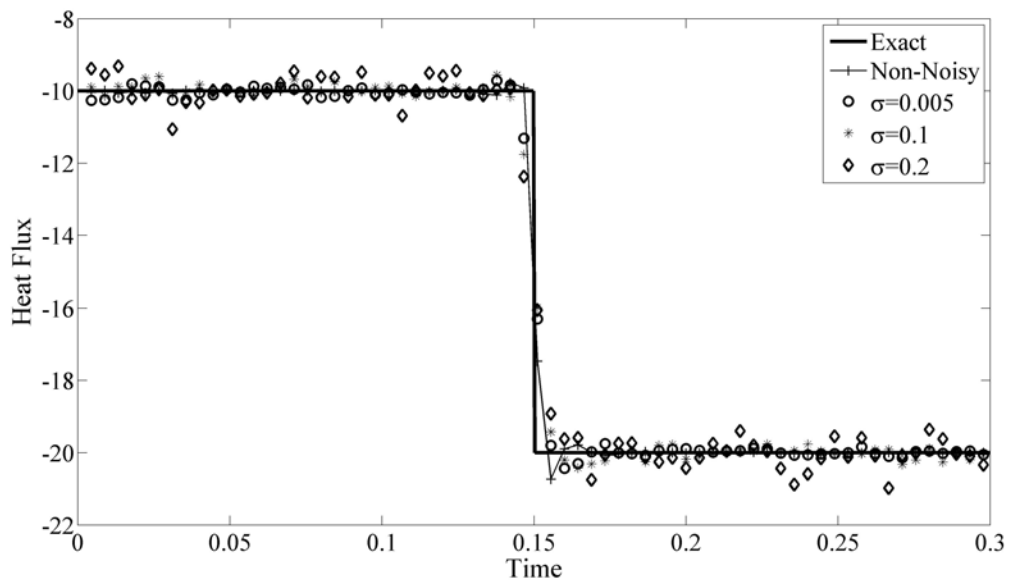
جدول (۶-۵): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای مورد نیاز در حالت اغتشاش در داده های ورودی

σ		Objective Function	RMS Error(%)	Iteration
0	Triangular	9.5342e-006	0.2416	48
	Step	9.7101e-006	2.2512	57
0.002	Triangular	2.2973e-004	0.5071	40
	Step	2.3000e-004	2.8987	50
0.005	Triangular	0.0013	0.6200	29
	Step	0.0012	3.1603	54
0.1	Triangular	0.0049	0.7952	29
	Step	0.0049	3.5514	28
0.2	Triangular	0.0198	1.1082	18
	Step	0.0188	4.4240	30
0.3	Triangular	0.0445	1.3744	14

مطابق آنچه در این جدول و شکلها ملاحظه می شود، این روش از دقت بسیار خوبی حتی با وجود میزان بالای خطا در داده های ورودی (حدودا ۱۲٪) برخوردار بوده و طبیعتا با افزایش این مقدار خطا، از دقت حل مساله به میزان قابل توجهی کاسته می شود. دلیل این پدیده طبیعت بدوضع مسائل معکوس است که نسبت به اغتشاش داده های ورودی حساس بوده و یک اغتشاش ورودی کوچک می تواند منجر به ایجاد نوسانات بزرگی در جوابهای تولید شده گردد.

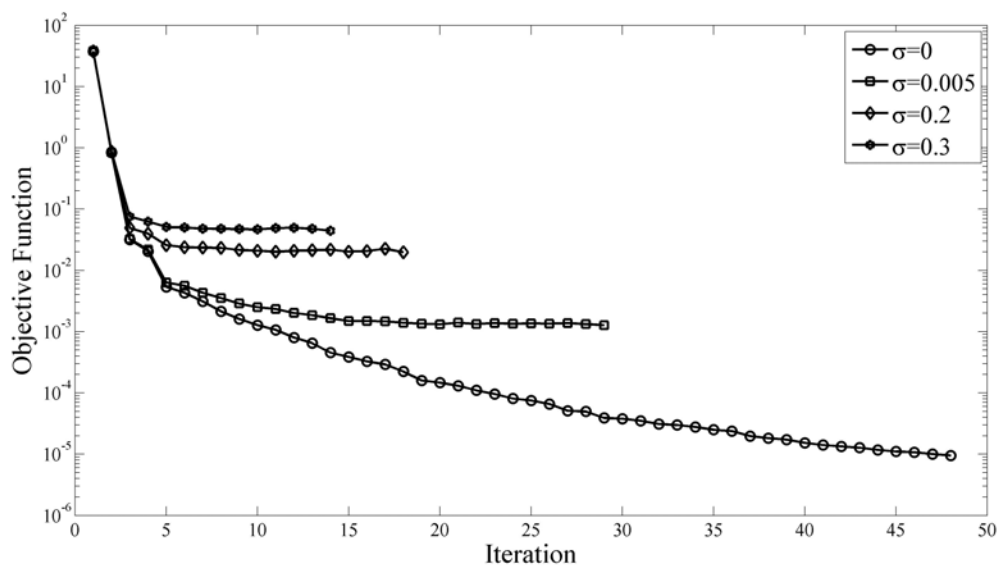


الف

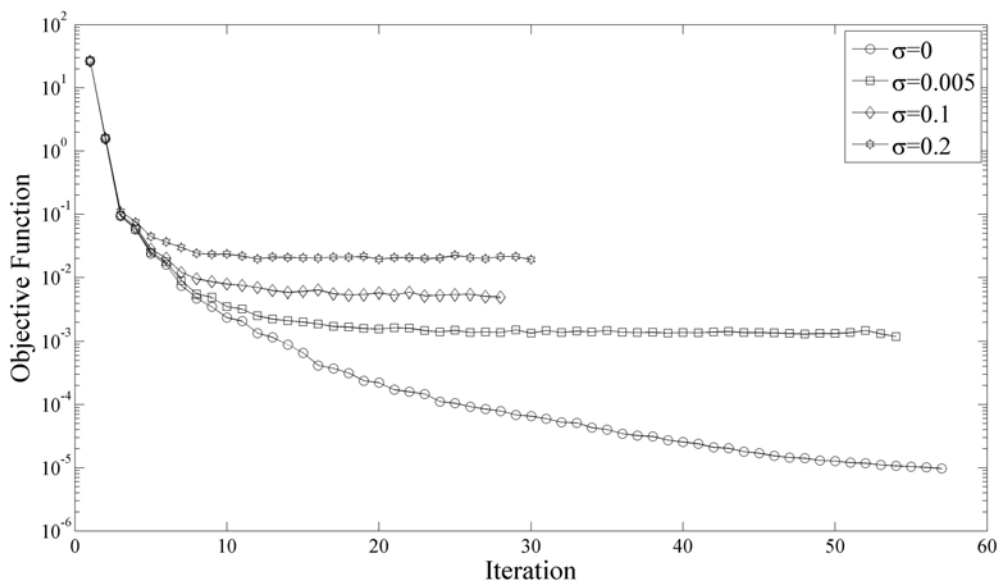


ب

شکل (۶-۱۱): شار حرارتی بدست آمده و مطلوب برای مقادیر متفاوت نوسانات ورودی الف) شار مثلی و ب) شار پله ای



الف



ب

شکل (۶-۱۲): روند همگرایی تابع هدف برای مقادیر متفاوت نوسانات ورودی (الف) شار مثلی و (ب) شار پله ای

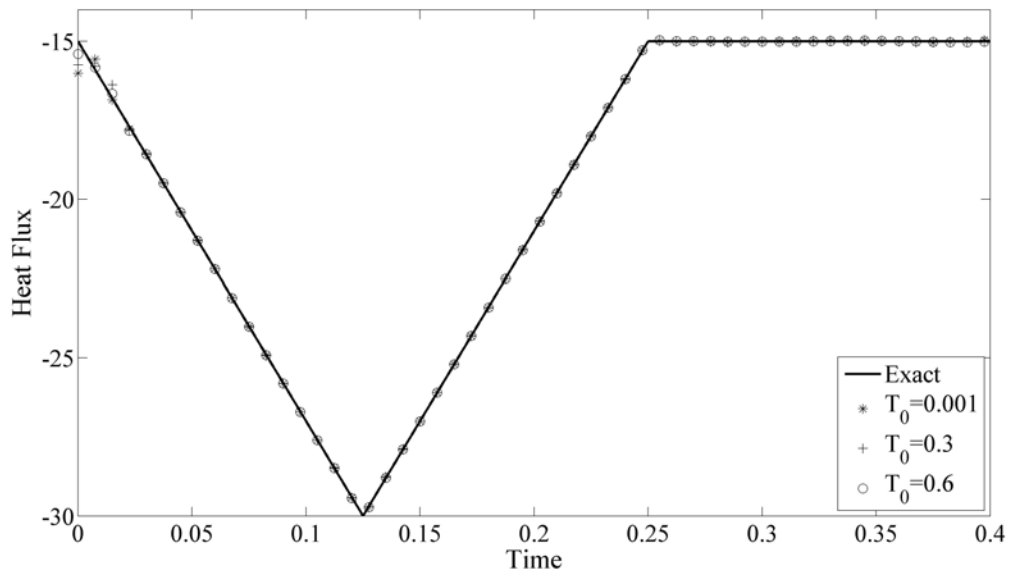
۶-۲-۱-۶- اثر دمای اولیه مذاب

یکی دیگر از عوامل بسیار مهم در انجماد فلزات اثر دمای اولیه مذابی است که درون قالب ریخته می شود. لذا روش استفاده شده بایستی دارای عملکرد مناسبی برای مذابهایی با دماهای اولیه متفاوت باشد. نتایج حل معکوس برای مذابهایی با دماهای اولیه متفاوت در شکل (۶-۱۳) و نرخ همگرایی تابع هدف نیز در شکل (۶-۱۴) به نمایش در آمده است.

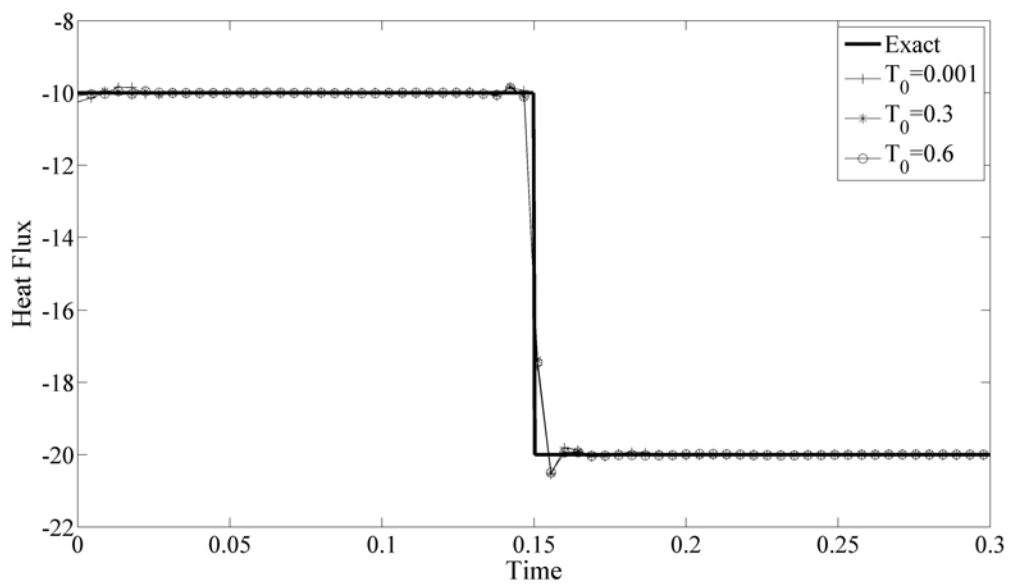
علاوه بر این، جدول (۶-۶) نیز نشان دهنده مقدار تابع هدف در تکرار نهایی، درصد خطای محاسبه شار حرارتی و همچنین تعداد تکرارهای لازم برای همگرایی تابع هدف می باشد. طبق نتایج نشان داده می توان دریافت که روش معکوس استفاده شده عملکرد مناسبی هم از نظر بازگردانی شار حرارتی مثلثی و پله ای و هم از نظر همگرایی به سوی حالت بهینه را دارا بوده و در ضمن به توزیع دمای اولیه مذاب وابسته نیست.

جدول (۶-۶): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای مورد نیاز برای دماهای اولیه متفاوت

Initial Temperature		Objective Function	RMS Error(%)	Iteration
0.001	Triangular	9.0660e-006	0.5276	47
	Step	9.3032e-006	2.2040	69
0.1	Triangular	9.0097e-006	0.4677	47
	Step	9.7719e-006	2.2541	64
0.2	Triangular	9.7225e-006	0.3820	49
	Step	9.9982e-006	2.2838	71
0.3	Triangular	9.4895e-006	0.3530	47
	Step	9.7258e-006	2.2511	72
0.4	Triangular	9.9857e-006	0.2686	46
	Step	9.8910e-006	2.2306	59
0.5	Triangular	9.5342e-006	0.2416	48
	Triangular	9.7101e-006	2.2512	57
0.6	Step	9.7027e-006	0.2016	47
	Triangular	9.4364e-006	2.2225	70

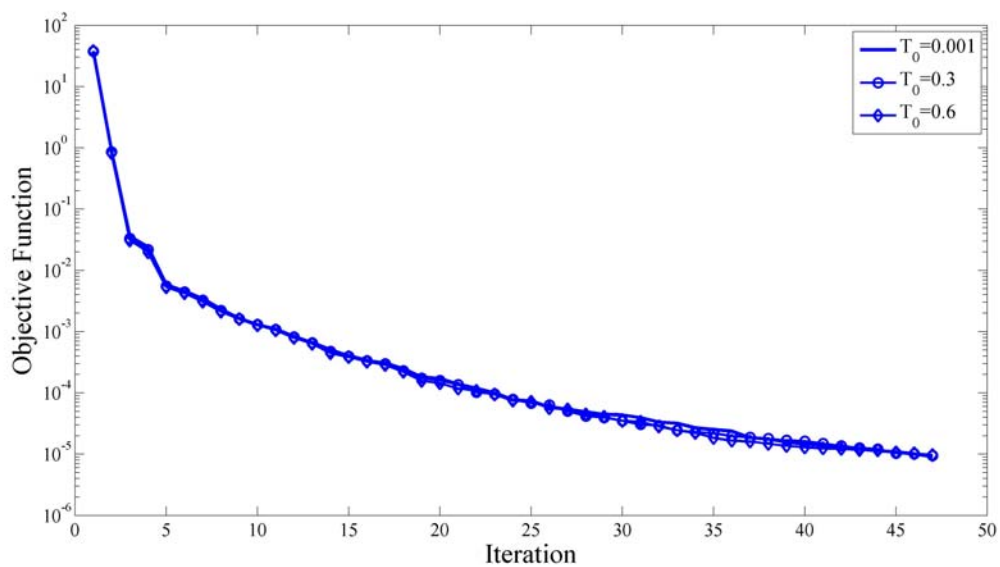


الف

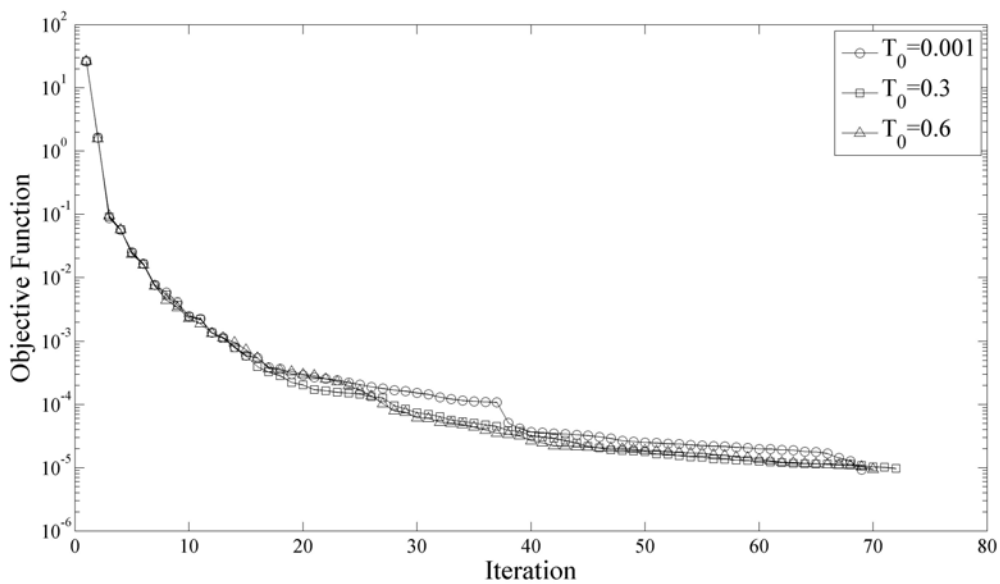


ب

شکل (۶-۱۳): شار حرارتی محاسبه شده و مطلوب برای مقادیر متفاوت توزیع دمایی اولیه مذاب، الف) شار مثلثی و ب) شار پله ای



الف



ب

شکل (۶-۱۴): روند همگرایی تابع هدف برای مقادیر متفاوت توزیع دمایی اولیه مذاب، الف) شار مثلی و ب) شار پله ای

۶-۲-۲- کنترل سرعت و شتاب سطح مشترک

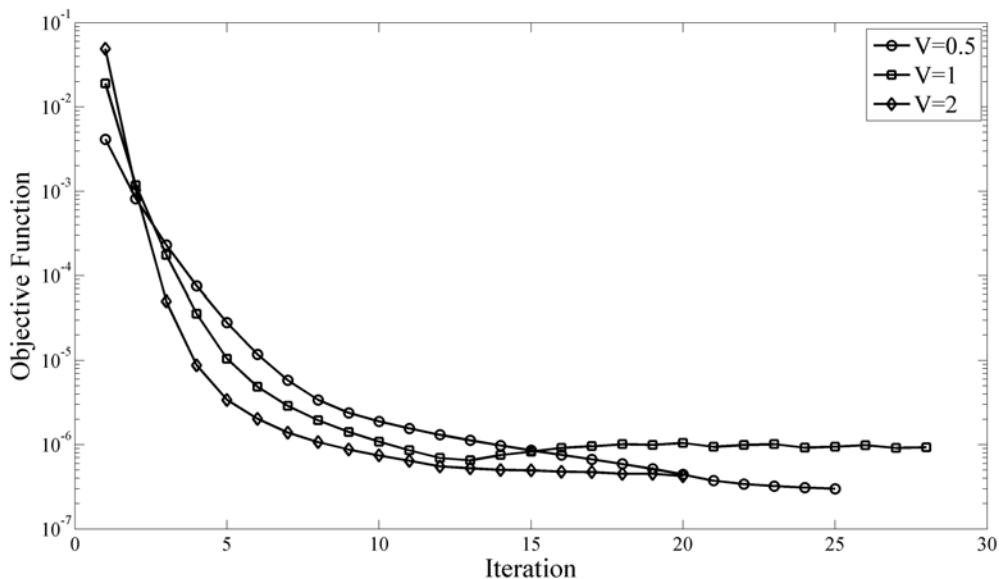
پس از تایید صحت عملکرد روش استفاده شده نوبت به کنترل حرکت سطح مشترک یا به عبارتی سرعت و شتاب آن می رسد. در این حالت نیز فرض می شود که ابتدا قالب از ماده‌ای مذاب با دمای یکنواخت T_i پر شده و در لحظه $t = 0$ ناگهان در معرض اعمال شار حرارتی قرار می گیرد. دمای بدون بعدی که در آن تغییر فاز رخ میدهد (دمای ذوب) $T_f = 0$ می باشد که این دما در حقیقت همان دمای مطلوب در موقعیت حسگر یا همان سطح مشترک جامد-مایع می باشد. به عبارت دیگر بدلیل اینکه دما در سطح مشترکی که دو فاز را از هم جدا می کند برابر با T_f است کافی است برای کنترل حرکت این سطح مشترک، دما در مکانهای مطلوب سطح مشترک برابر T_f شود. در حقیقت می توان موقعیت مطلوب سطح مشترک را به عنوان موقعیت قرارگیری سنسور دانست که دمای اندازه گیری شده یا مطلوب آن دمای ثابت T_f است. به منظور ارزیابی صحت نتایج بدست آمده در این حالت، جوابهای بدست آمده برای شرایط خاصی که دارای جواب تحلیلی است با جواب تحلیلی و سایر روشهای عددی استفاده شده در پژوهشهای گذشته مقایسه خواهد شد. برای مواد خالص در حالتی که سرعت ثابتی برای سطح مشترک مد نظر باشد، جواب تحلیلی برای شار حرارتی در مرز که منجر به ایجاد یک چنین سرعتی می شود به صورت زیر است [۴۲].

$$q(0,t) = -Ste \times V \times \exp(V^2 t) \quad (۸-۶)$$

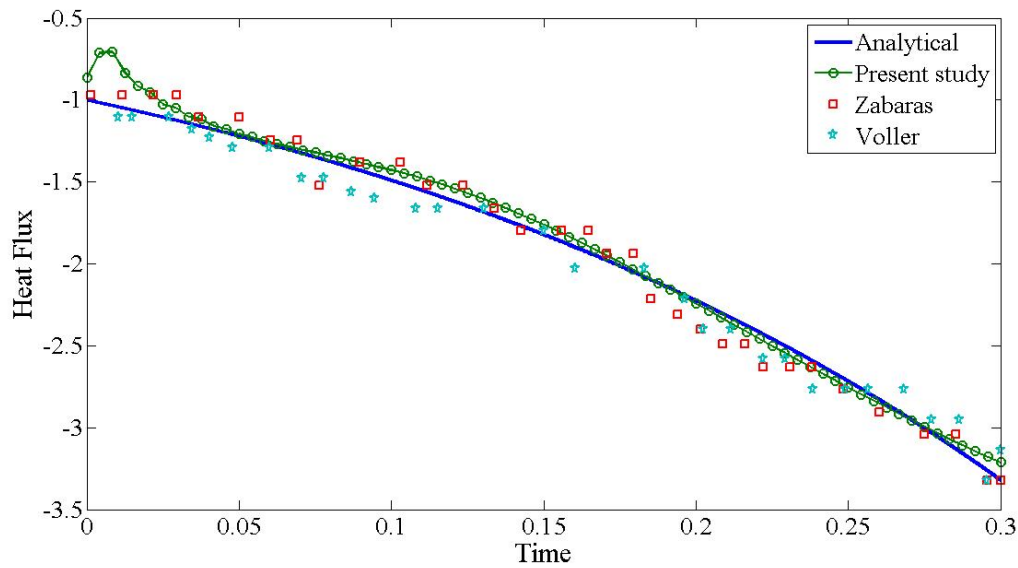
که در رابطه فوق، V سرعت سطح مشترک می باشد. با مقایسه بین شار تخمین زده شده، حل تحلیلی و سایر حلهای عددی موجود در حالتیکه $Ste = 0.5$ و $V = 2$ که در شکل (۶-۱۶) نشان داده شده است می توان دریافت که استفاده از این روش دقت بسیار بالایی در تخمین شار مرزی داشته جز در زمانهای اولیه که این پدیده ممکن است به دو دلیل رخ دهد. اولین عامل مربوط می شود به توزیع دمای اولیه

مذاب درون قالب و دومین دلیل مربوط می شود به طبیعت مسائل کنترلی است که در لحظات ابتدایی تطابق خوبی بین مقادیر مطلوب و محاسبه شده وجود ندارد.

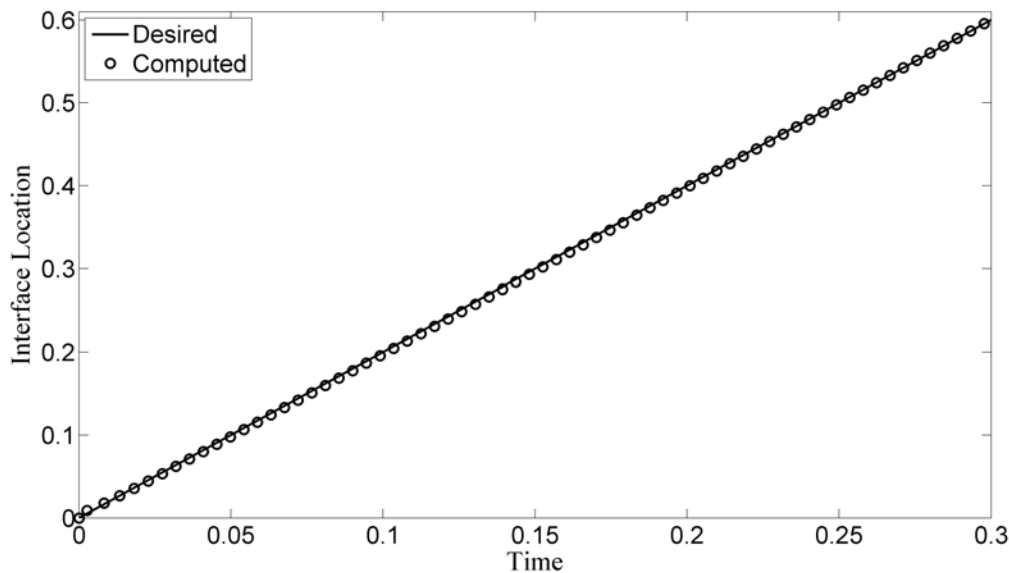
با اعمال شار حرارتی بدست آمده از تحلیل معکوس به عنوان شرایط مرزی برای مساله مستقیم و محاسبه توزیع دما و در نهایت موقعیت سطح مشترک مشخص می شود که با اعمال این شار حرارتی به سرعت مطلوب سطح مشترک دست یافته ایم. جهت مطالعه نحوه همگرایی تکرارها به سمت جواب بهینه، نرخ همگرایی تابع هدف برای مقادیر مختلف سرعت سطح مشترک در شکل (۶-۱۵) نشان داده شده است که نشان دهنده همگرایی مطلوب روش بهینه سازی استفاده شده به سمت جواب مطلوب می باشد. همچنین شکل (۶-۱۶-ب) نشان دهنده موقعیتهای مطلوب و محاسبه شده برای شرایط ذکر شده در بالا و با استفاده از شار حرارتی نشان داده شده در شکل (۶-۱۶-الف) می باشد که بیانگر دقت بسیار بالا در کنترل سرعت سطح مشترک است.



شکل (۶-۱۵): روند همگرایی تابع هدف برای کنترل سرعت سطح مشترک



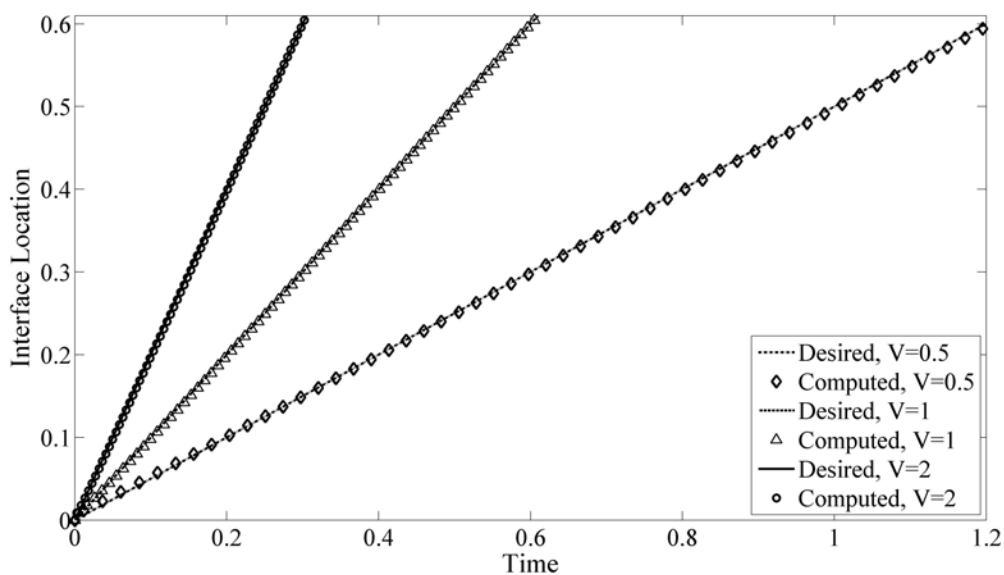
الف



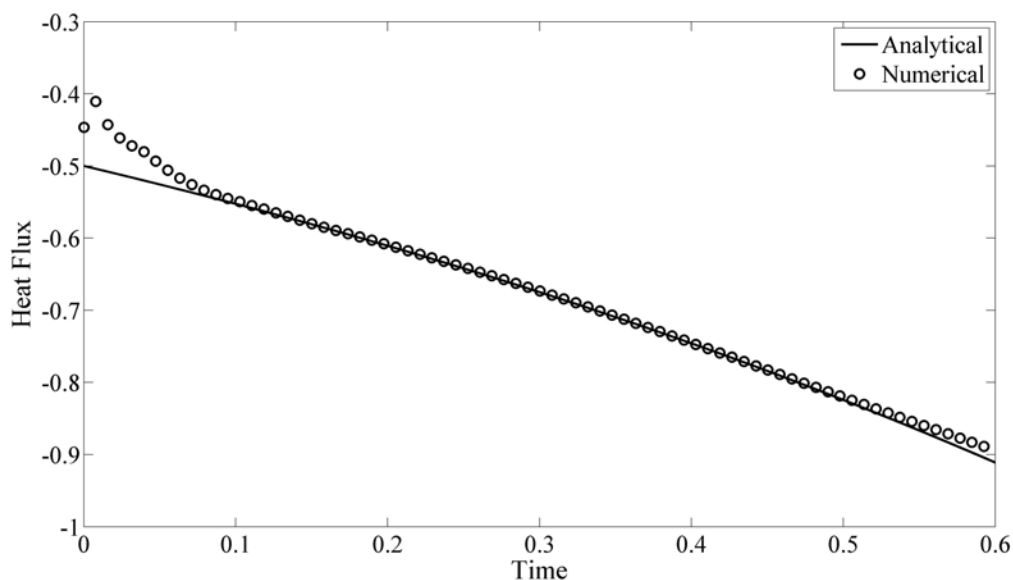
ب

شکل (۶-۱۶): کنترل سرعت سطح مشترک برای مواد خالص الف) مقایسه شار بدست آمده با سایر پژوهشها ب) مقایسه مکان سطح مشترک در دو حالت مطلوب و محاسبه شده
 شایان ذکر است که با توجه به نتیجه ای که در بخش مربوط به موقعیت قرارگیری حسگر شد و اینکه در این حالت کنترل سرعت، حسگر متحرک بوده و به تدریج از مرز فعال دور می شود، نتایج حاصله از دقت مطلوبی برخوردار می باشند.

در راستای ارزیابی صحت و دقت نتایج بدست آمده، شار حرارتی حاصل از حل معکوس را به عنوان ورودی برای مساله مستقیم در نظر گرفته و سپس با استفاده از روشی که در فصلهای گذشته ذکر شد به محاسبه سرعت یا موقعیت سطح مشترک جامد-مایع در زمانهای مختلف پرداختیم. همان گونه که قبلا ذکر شد بدلیل اینکه تغییر سرعت سطح مشترک می تواند تغییرات اساسی در ریزساختار و درشت ساختار ماده تحت انجماد ایجاد کند، مقادیر مختلفی برای سرعت سطح مشترک انتخاب شده و سرعت یا موقعیت سطح مشترک مطلوب و محاسبه شده در شکل (۶-۱۷) نشان داده شده است. طول قالب مورد نظر برای تمامی مقادیر سرعت یکسان بوده و لذا زمانهای شبیه سازی متفاوت خواهند بود. با توجه به نتایج ارائه شده در شکل (۶-۱۷) می توان دریافت که موقعیت و یا به عبارتی سرعت سطح مشترک با دقت بسیار بالایی کنترل شده که این مطلب به طور ضمنی بیانگر این است که در طی فرایند انجماد، قطعه ای با ریز ساختار دلخواه، خواص مکانیکی دلخواه و مناسب برای یک کاربرد مشخص حاصل شده است. نمونه ای از شار حرارتی مطلوب (تحلیلی) و محاسبه شده برای $Ste = 0.5$ و $V = 1$ نیز در شکل (۶-۱۸) به تصویر درآمده که بیانگر تطابق بسیار خوب میان نتایج تحلیلی و عددی حاصله از روش مذکور می باشد.

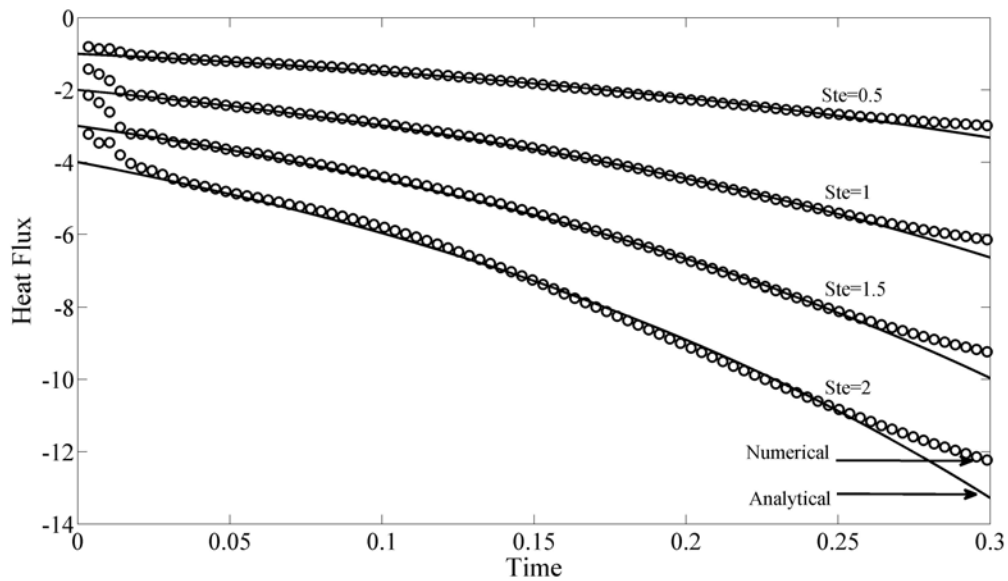


شکل (۶-۱۷): موقعیت سطح مشترک برای مقادیر مختلف سرعت مشترک

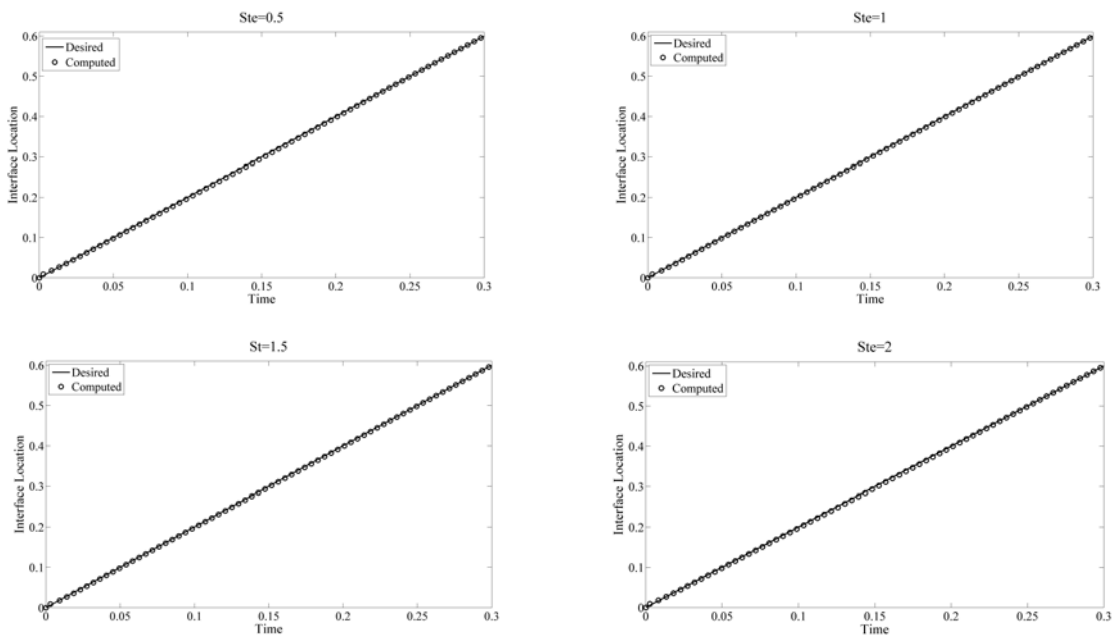


شکل (۶-۱۸): مقایسه شار حرارتی تحلیلی و عددی برای $V = 1$.

همان گونه که قبلا عنوان شد یکی از مهمترین خصوصیت‌هایی که یک حل معکوس به ویژه در انتقال حرارت در حین تغییر فاز بایستی دارا باشد، توانایی حل مساله برای طیفی از مواد مختلف با خواص ترموفیزیکی مختلف است. بدلیل اینکه در این رساله معادلات به صورت بی بعد در نظر گرفته شده اند تنها پارامتر بدون بعدی که در انجماد موادخالص از ماده ای به ماده دیگر دستخوش تغییر می شود تنها شکل بی بعد گرمای نهان یا همان عدد استفان می باشد. شار حرارتی تحلیلی به همراه شار حرارتی محاسبه شده از الگوریتم معکوس برای طیفی از اعداد استفان مختلف در شکل (۶-۱۹) و موقعیت‌های مطلوب و محاسبه شده سطح مشترک برای این طیف و $V = 2$ نیز در شکل (۶-۲۰) ارائه شده اند که نشان دهنده دقت بسیار خوب روش پیشنهادی هم در محاسبه شار حرارتی مورد نیاز و هم در محاسبه سرعت و یا مکان سطح مشترک می باشد. لذا نتیجه می شود که این روش می تواند برای تمامی مواد با خواص متفاوت استفاده شده و ماده ای با کیفیت مطلوب برای کاربردی مشخص را بدست دهد. یک ارزیابی کمی از نتایج بدست آمده برای اعداد استفان متفاوت در جدول (۶-۷) ارائه شده است.



شکل (۶-۱۹): مقایسه شار حرارتی تحلیلی و عددی برای مواد با خواص فیزیکی (عدد استفان) متفاوت



شکل (۶-۲۰): مقایسه موقعیت مطلوب و کنترل شده سطح مشترک برای مواد خالص با خواص فیزیکی (عدد استفان)

متفاوت

جدول (۶-۷): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای مورد نیاز در کنترل سرعت برای اعداد استغافان متفاوت

Ste	Objective Function	RMS(%)	Iteration
0.5	4.2331e-007	4.3965	20
1	1.5547e-006	3.7479	21
1.5	3.6226e-006	3.6886	20
2	9.5663e-006	3.6168	18

به منظور ارزیابی کمی نتایج بدست آمده و محاسبه درصد خطای حاصل از روش عددی برای محاسبه مکان سطح مشترک از عبارت زیر برای محاسبه ریشه متوسط مربعات خطای محاسبه سطح مشترک استفاده می شود.

$$e_{RMS} = \frac{\sqrt{(1/M) \sum_{m=1}^M (x_{desired,m} - x_{computed,m})^2}}{\sqrt{(1/M) \sum_{m=1}^M (x_{desired,m})^2}} \times 100, \quad (۶-۹)$$

مقادیر RMS خطای محاسبه سطح مشترک و شار حرارتی برای مقادیر مختلف سرعت ثابت سطح مشترک به همراه تعداد تکرارهای مورد نیاز و مقدار تابع هدف در تکرار نهایی در جدول (۶-۸) نشان داده شده اند.

جدول (۶-۸): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای مورد نیاز در کنترل سرعت برای سرعت‌های مختلف

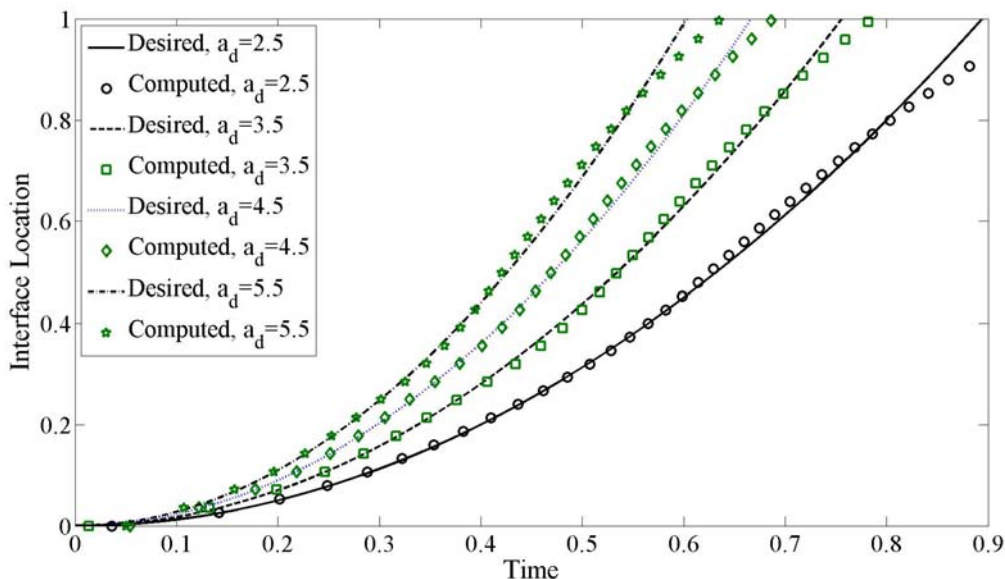
V	Objective Function	RMS Error(q)(%)	Iteration	RMS Error(Xs)(%)
0.5	3.0071e-007	2.4412	25	0.6192
1	9.1412e-007	2.7997	27	0.4304
2	4.2331e-007	4.3965	20	0.5526

جهت ارزیابی صحت نتایج برای حالتی که سرعت سطح مشترک ثابت نبوده و شتابدار باشد بدلیل عدم وجود جوابهای تحلیلی، شار بدست آمده از حل مساله معکوس را به عنوان ورودی مساله مستقیم در نظر گرفته و با مقایسه بین مکان سطح مشترک در دو حالت مطلوب و محاسبه شده می توان صحت نتایج

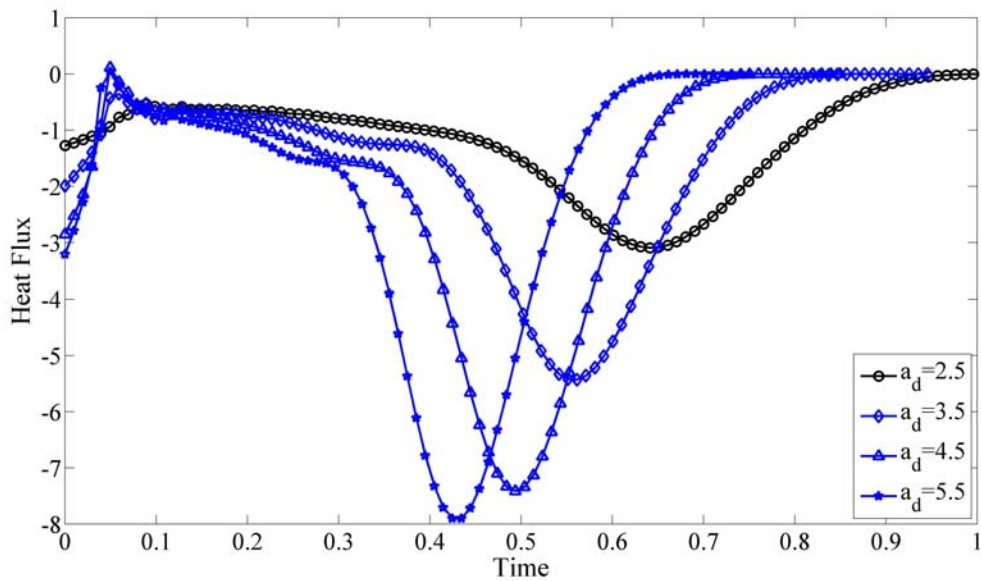
بدست آمده را تایید کرد. مقایسه ای بین مکانهای سطح مشترک در حالت مطلوب و محاسبه شده برای گستره ای از شتابهای مختلف سطح مشترک در شکل (۶-۲۱) و شرایط مرزی مورد نیاز برای دستیابی به این موقعیتهای مطلوب در شکل (۶-۲۲) ملاحظه می شوند. ارزیابی کمی دقت نتایج عددی حاصل با ملاحظه نتایج خطای متوسط موقعیت سطح مشترک نسبت به حالت مطلوب که در جدول (۶-۹) ارائه شده اند امکان پذیر است. با توجه به شکل (۶-۲۳) در می یابیم که روند کاهش تابع هدف، روند مطلوب و مناسبی بوده و مساله به خوبی به سمت مقدار بهینه همگرا شده است.

جدول (۶-۹): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای مورد نیاز در کنترل شتاب برای شتابهای مختلف

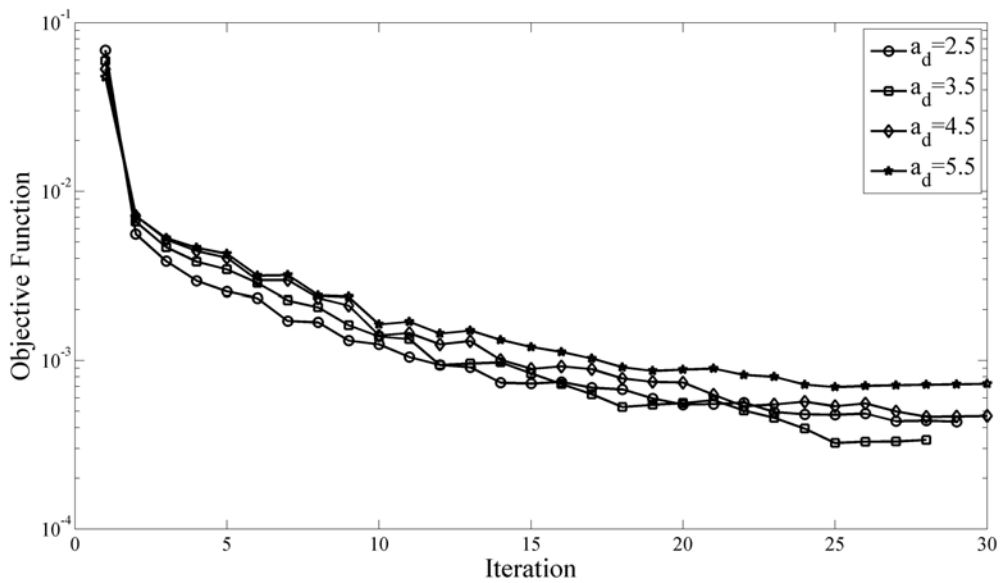
a_d	Objective Function	RMS Error(X_s)(%)	Iteration
2.5	4.3336e-004	3.8300	29
3.5	3.3740e-004	2.9388	28
4.5	4.7640e-004	2.1990	30
5.5	7.2911e-004	3.1100	30



شکل (۶-۲۱): مقایسه مکانهای مطلوب و محاسبه شده سطح مشترک برای مقادیر مختلف شتاب مشترک



شکل (۶-۲۲): مقایسه شار حرارتی بدست آمده برای مقادیر مختلف شتاب سطح مشترک



شکل (۶-۲۳): مقایسه نرخ همگرایی تابع هدف برای مقادیر مختلف شتاب سطح مشترک

۶-۳-انجماد یک بعدی آلیاژها

برای انجماد آلیاژها نیز نخست به بررسی کارایی روش بوسیله آزمودن آن با یک شار حرارتی مشخص و ارزیابی کمی و کیفی جوابهای تولید شده و مقایسه آن با شار حرارتی ورودی می پردازیم. در این حالت نیز دو نوع شار حرارتی که در بخش انجماد موادخالص عنوان شد مورد بررسی قرار می گیرند. به منظور تحلیل مساله معکوس انجماد آلیاژها در حالت یک بعدی، معادلات (۵-۱) تا (۵-۴) را در نظر می گیریم. علاوه بر آن توجه به این نکته نیز لازم است که برای انجماد آلیاژها دیگر $q_l(t) = 0$ نبوده و دارای مقدار خواهد بود. همان گونه که در شکل (۵-۱) مشخص است در انجماد آلیاژها سه ناحیه مختلف با خواص فیزیکی متفاوت حضور داشته که این سه ناحیه دارای دو مرز متحرک مشترک می باشند. در انجماد آلیاژها نیز عاملی که کیفیت قطعه ریخته شده را تعیین می کند سرعت همین دو سطح مشترک بین نواحی مختلف است. به همین دلیل برای کنترل کیفیت ماده، سرعت این دو سطح مشترک بایستی کنترل شود و بدلیل وجود دو عامل کنترلی نیاز به دو پارامتر یا شار حرارتی ورودی بوده و لذا علاوه بر $q_l(t)$ ، $q_s(t)$ نیز به صورت همزمان بایستی توسط روش ذکر شده در فصل قبل تخمین زده شود. همان گونه که در انجماد مواد خالص ذکر شد، ابتدا دو شار حرارتی با توابع مشخص که ذکر خواهند شد به عنوان ورودی به مساله مستقیم اعمال شده و سپس با ثبت تاریخچه زمانی دما در نقاط حسگرها و استفاده از روش انتقال حرارت معکوس به تخمین و بازسازی این شارهای ورودی پرداخته خواهد شد. به دلایلی که در قسمت قبل ذکر شد، دو شار حرارتی ورودی با اشکال مثلثی و تابع پله‌ای مطابق روابط ذیل انتخاب شده اند.

$$q_s(t) = \begin{cases} -8t - 1 & 0 \leq t \leq 0.125 \\ 8t - 3 & 0.125 \leq t \leq 0.25 \\ -1 & t \geq 0.25 \end{cases} \quad (۱۰-۶)$$

$$q_s(t) = -1 - 1u(t - 0.2) \quad (۱۱-۶)$$

توابع فوق برای مقادیر مختلف موقیعت مکانی حسگرها، نویز در داده های اندازه گیری شده، توزیع دمای اولیه مذاب، حدس اولیه روش گرادیان مزدوج و نوع و ترکیب آلیاژها بررسی و همچنین استقلال حل عددی از شبکه محاسباتی نیز برای این حالت ارزیابی شده است.

برای حالتی که هدف بازگرداندن شار حرارتی مثلثی و پله ای است، ابتدا مانند آنچه برای مواد خالص ذکر شد، فرض می کنیم که مرز بالا ایزوله شده و انتقال حرارت تنها از مرز پایین صورت گیرد. سپس در نظر بگیریم که تمام قالب به طول L از آلیاژی مذاب با دمای یکنواخت $T_i > T_{liq}$ پر شده و در لحظه $t = 0$ ناگهان مرز پایین در معرض یک شار حرارتی قرار گرفته و مقدار دما در مکان حسگر برای یک بازه زمانی $[0, t_f]$ ثبت شده که برای این مساله $t_f = 0.4$ در نظر گرفته شده است. بدین جهت که هدف از حل ابتدایی این مساله تعمیم آن به حالت کنترل سرعت سطح مشترک در آلیاژها می باشد و با توجه به حضور دو مرز مشترک متحرک مابین سه ناحیه موجود، دما در دو نقطه مختلف در طول قالب ثبت و به عنوان ورودی حل معکوس اعمال می شوند.

مقادیر خواص فیزیکی آلیاژهای گوناگون با ترکیبهای متفاوت در جدول (۶-۱۰) ارائه شده است.

جدول (۶-۱۰): خواص ترموفیزیکی آلیاژهای استفاده شده

Properties	Pb-10%Sn	Al-5%Cu
Stefan Number	0.86	0.56
Fusion Temperature	0	0
Liquidus Temperature	-0.15	-0.022
Solidus Temperature	-0.31	-0.175
Partition Coefficient	0.31	0.14
Solid Conductivity	1.5	2.2
Liquid Conductivity	1	1
Solid Heat Capacity	1.1	0.82
Liquid Heat Capacity	1	1

شار حرارتی مطلوب و محاسبه شده بوسیله دماهای ثبت شده در مکان حسگر و الگوریتم حل معکوس در حالت مثلثی برای آلیاژ Pb-Sn در شکل (۶-۲۴) نمایش داده شده است که x_m موقیت قرارگیری حسگر می باشد. لازم به ذکر است که مقدار حدس اولیه برای روش گرادیان مزدوج $q_s^0(t) = 0$ و معیار توقف الگوریتم بهینه سازی برابر $\varepsilon = 3 \times 10^{-8}$ در نظر گرفته شده است. مطابق این شکل و طی یک ارزیابی کیفی ملاحظه می شود که تخمین و محاسبه این شار حرارتی از دقت خوبی برخوردار بوده است و این نشان دهنده صحت و دقت روش و الگوریتم معکوس بکار گرفته شده است. علاوه بر این جهت ارزیابی کمی دقت نتایج بدست آمده، مقدار درصد جذر مربعات خطای متوسط طبق رابطه (۶-۳) در جدول (۶-۶) ارائه شده است.

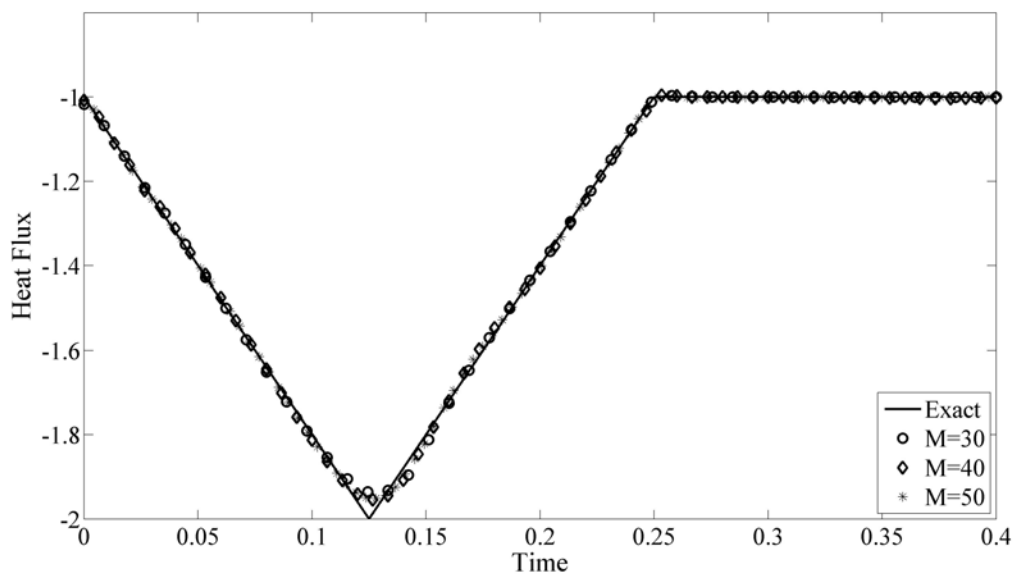
جهت بررسی نحوه همگرایی حل معکوس به سمت جواب بهینه، نرخ کاهش تابع هدف در شکل (۶-۲۵) نمایش داده شده است.

۶-۲-۱-۱- بررسی استقلال از شبکه محاسباتی

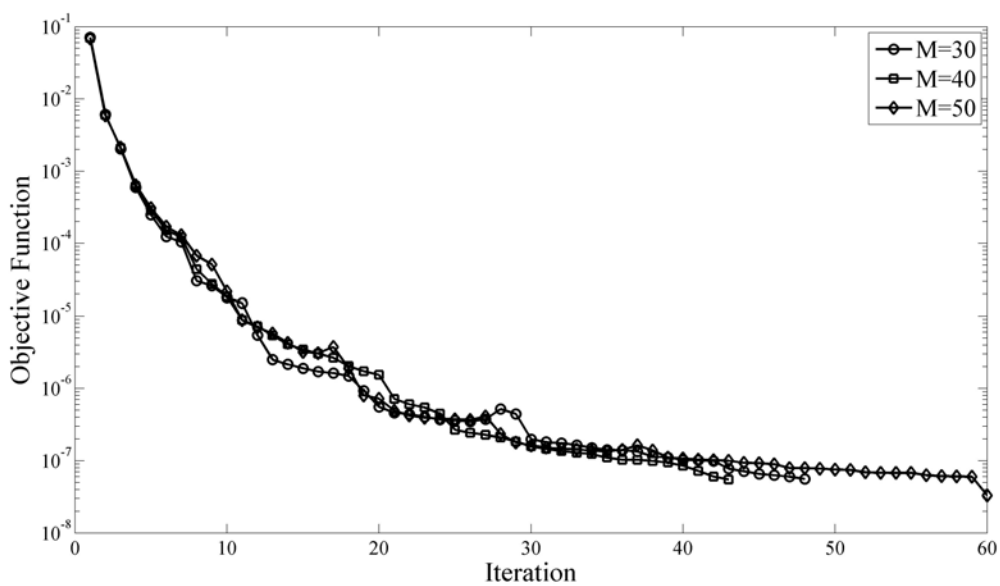
یکی از عوامل مهم در تحلیل های عددی چه در مسائل مستقیم و چه در مسائل معکوس، بررسی اثر تعداد گره ها بر نتایج بدست آمده است. به منظور ارزیابی میزان وابستگی حل معکوس به تعداد گره های شبکه یا به عبارتی اندازه مشهها، تحلیل معکوس برای دو شار حرارتی مذکور برای مقادیر مختلفی از نقاط شبکه انجام گرفته است.

مقدار تابع هدف در آخرین گام بهینه سازی، تعداد تکرار های لازم برای همگرایی روش و همچنین میزان خطای RMS برای دامنه ای با شبکه های متفاوت در جدول (۶-۱۱) ارائه شده اند. مطابق این نتایج، مقدار بهینه اندازه شبکه $N_x = 50$ انتخاب شده است. شار حرارتی بدست آمده با توجه به $x_{m1} = 0.1$ و $x_{m1} = 0.2$ برای تعداد گره های مختلف در شکل (۶-۲۴) نمایش داده شده است.

علاوه بر این نرخ کاهش تابع هدف نیز برای این مقادیر در شکل (۶-۲۵) آورده شده است.



شکل (۶-۲۴): مقایسه شار حرارتی مثلی برای اندازه های مختلف شبکه محاسباتی



شکل (۶-۲۵): نرخ همگرایی تابع هدف برای مقادیر مختلف اندازه شبکه محاسباتی

جدول (۶-۱۱): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای لازم در انجماد آلیاژها برای شبکه های مختلف

N_x	Objective Function	RMS Error (%)	Iteration
30	5.6008e-008	0.7928	49
40	5.5097e-008	0.6484	44
50	3.3055e-008	0.5690	60
60	3.9374e-008	0.7164	54

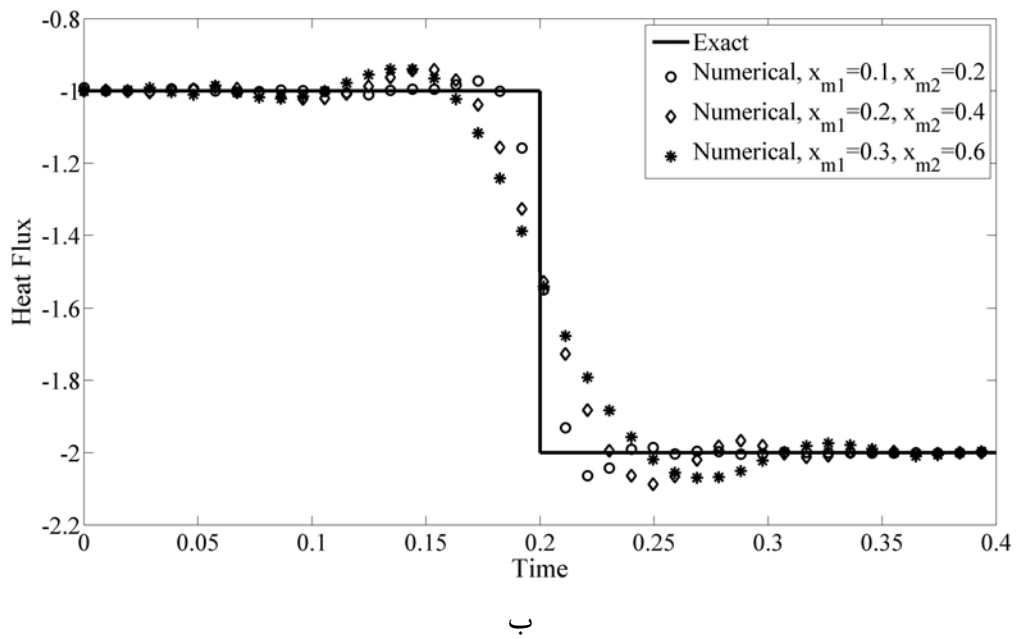
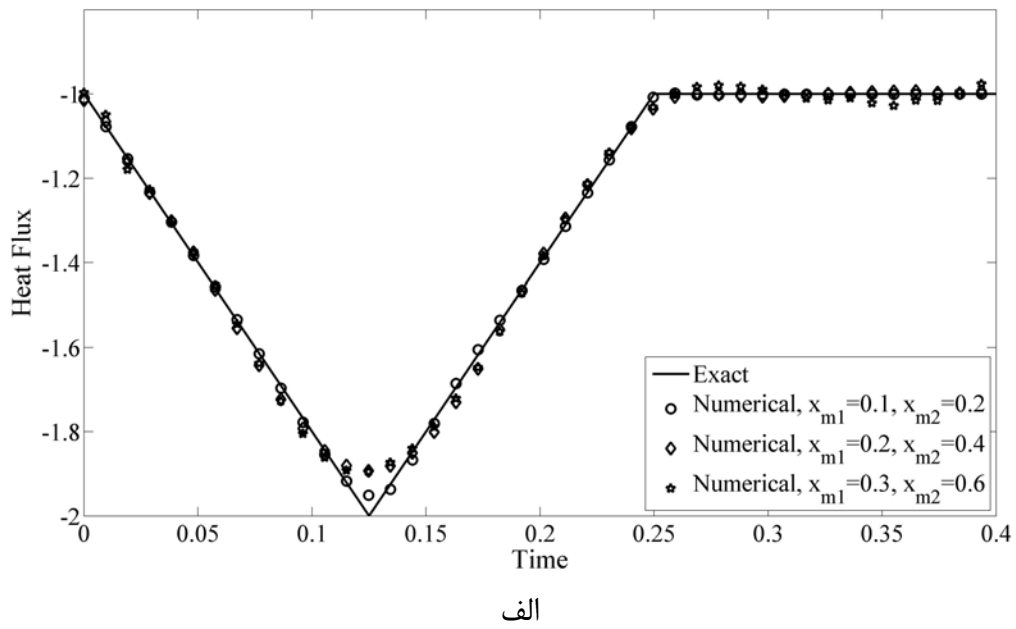
۶-۲-۱-۳- اثر موقعیت قرارگیری حسگرها

در این بخش نیز همانند آنچه برای مواد خالص ذکر شد، اثر موقعیت قرار گیری حسگرها بررسی خواهد شد. در انجماد آلیاژها به دلیلی که قبلا ذکر شد برای هر مساله به طور همزمان از دو حسگر در فواصل مختلف استفاده می شود. لذا حسگرها در طول قالب در فواصل (۰/۱ و ۰/۲)، (۰/۲ و ۰/۴) و (۰/۳ و ۰/۶) قرار داده شده، با ثبت تاریخچه زمانی دما در این نقاط و استفاده از آن به عنوان ورودی روش معکوس و مقایسه با شار ورودی به بررسی اثر موقعیت قرار گیری حسگر می پردازیم.

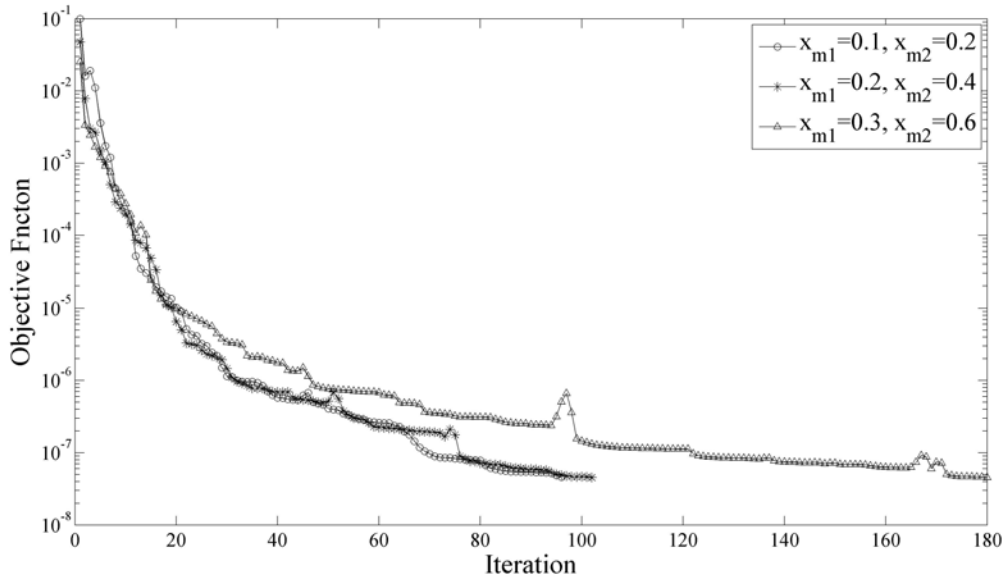
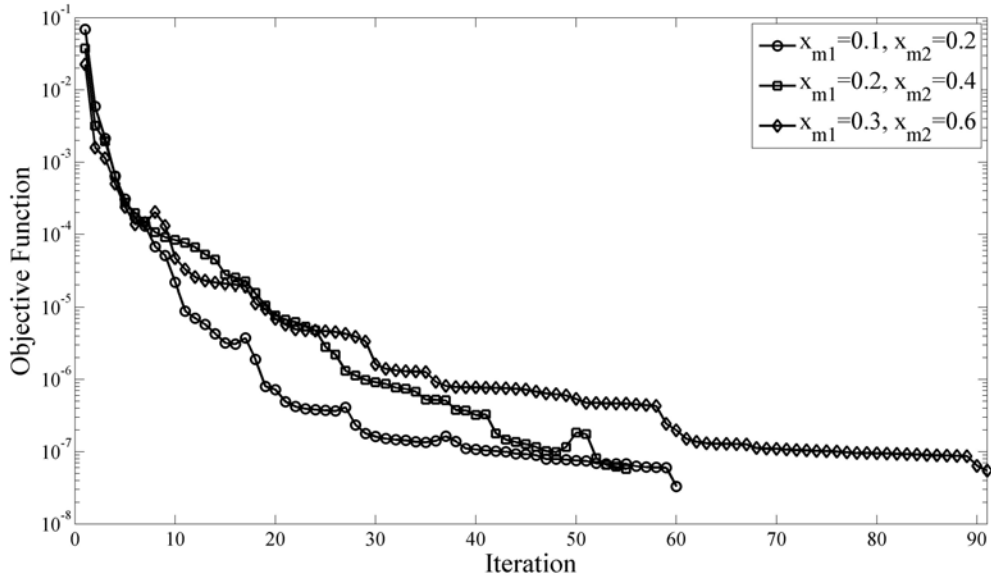
نتایج بدست آمده برای موقعیتهای مختلف حسگر و شارهای حرارتی مثلثی و پله ای در شکل (۶-۲۶) و جدول (۶-۱۲) نشان داده شده است. علاوه بر این شکل (۶-۲۷) نیز نشان دهنده روند همگرایی به سمت مقدار بهینه می باشد.

جدول (۶-۱۲): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای لازم در انجماد آلیاژها برای موقعیتهای مختلف حسگرها

Sensor Locations		Objective Function	RMS(%)	Iteration
$x_{m1} = 0.1$ $x_{m2} = 0.2$	Triangular	3.3055e-008	0.5690	60
	Step	4.5842e-008	4.4520	96
$x_{m1} = 0.2$ $x_{m2} = 0.4$	Triangular	5.7622e-008	1.6466	55
	Step	4.5335e-008	6.6661	102
$x_{m1} = 0.3$ $x_{m2} = 0.6$	Triangular	5.4964e-008	1.8141	91
	Step	4.5502e-008	7.8048	180



شکل (۶-۲۶): مقایسه شار حرارتی بدست آمده و مطلوب برای موقعیتهای مختلف حسگر، الف) شار مثلثی ب) شار پله ای



شکل (۶-۲۷): مقایسه روند همگرایی تابع هدف برای موقعیتهای مختلف حسگر، الف) شار مثلی ب) شار پله ای

بنابر این برای مساله کنترل سطح مشترک، هرچه حسگر از مرز فعال دورتر شود خطای محاسبه بیشتر شده و بنابر این انتظار می رود که دقت محاسبات نسبت به حالتی که حسگر ثابت باشد کاهش یابد.

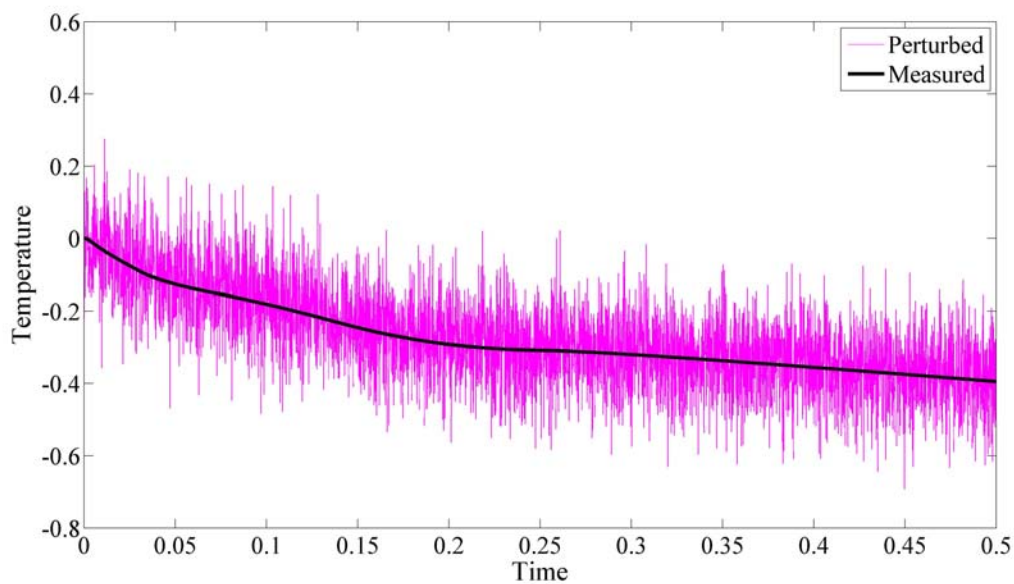
۶-۲-۱-۵- اثر میزان خطا در داده های ورودی

همانگونه که قبلا ذکر شد بدلیل طبیعت بدوضع مسائل معکوس حرارتی، جواب این گونه مسائل به شدت به اغتشاش در داده های ورودی حساس بوده و این اغتشاش می تواند وجود و یکتایی جواب را تحت تاثیر قرار دهد چرا که وجود یک اختلال در ورودی می تواند موجب نوسانات بزرگی در جواب خروجی شود. در این بخش نیز همانند آنچه در بخش مربوط به مواد خالص ذکر شد، ابتدا دماهای اندازه گیری شده طبق رابطه مربوطه به طور مصنوعی حول مقادیر اندازه گیری شده نوسان داده می شوند و سپس از این داده های آلوده به اغتشاش جهت بازسازی شار حرارتی ورودی استفاده می شود. نمونه ای از دماهای تغییر یافته در شکل (۶-۲۸) برای شار مثلثی و پله ای ارائه شده اند.

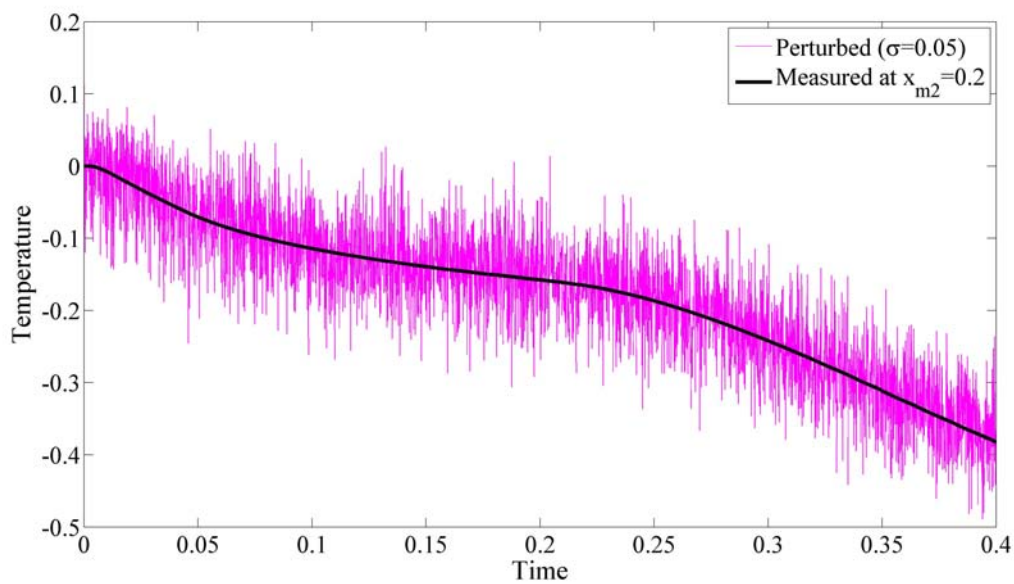
برای آلیاژها نیز مقادیر متفاوتی از انحراف معیار برای داده های ورودی در نظر گرفته شده و نتایج حاصل از تخمین شار حرارتی در شکل (۶-۲۹) و نرخ کاهش تابع هدف در شکل (۶-۳۰) برای مقادیر مختلفی از انحراف معیار داده های ورودی نمایش داده شده است. علاوه بر این مقادیر خطا و تعداد تکرارهای مورد نیاز برای همگرایی حل مساله به همراه مقدار تابع هدف در آخرین تکرار در جدول (۶-۱۳) درج شده است.

مطابق آنچه در این جدول و شکلها ملاحظه می شود، این روش از دقت بسیار خوبی حتی با وجود میزان بالای خطا در داده های ورودی (حدوداً ۲۰٪) برخوردار بوده و طبیعتاً با افزایش این مقدار خطا، از دقت حل مساله به میزان قابل توجهی کاسته می شود. البته ذکر این نکته ضروری است که به دلیل وجود

گرادیان خیلی شدید در شار حرارتی پله ای، حساسیت روش به اغتشاشات ورودی در مورد این نوع شار بسیار بالاتر خواهد بود.

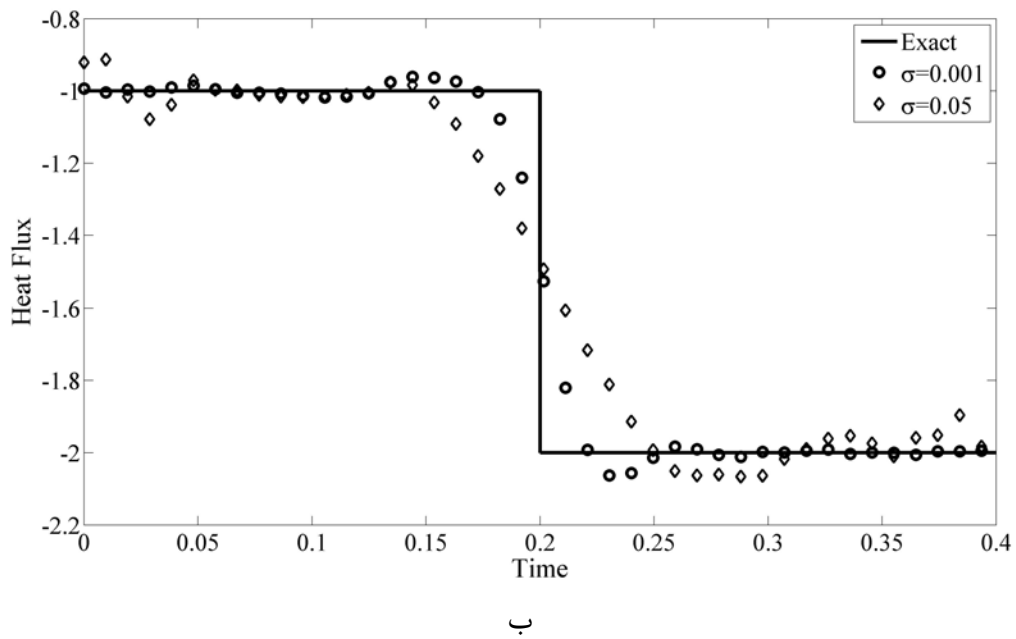
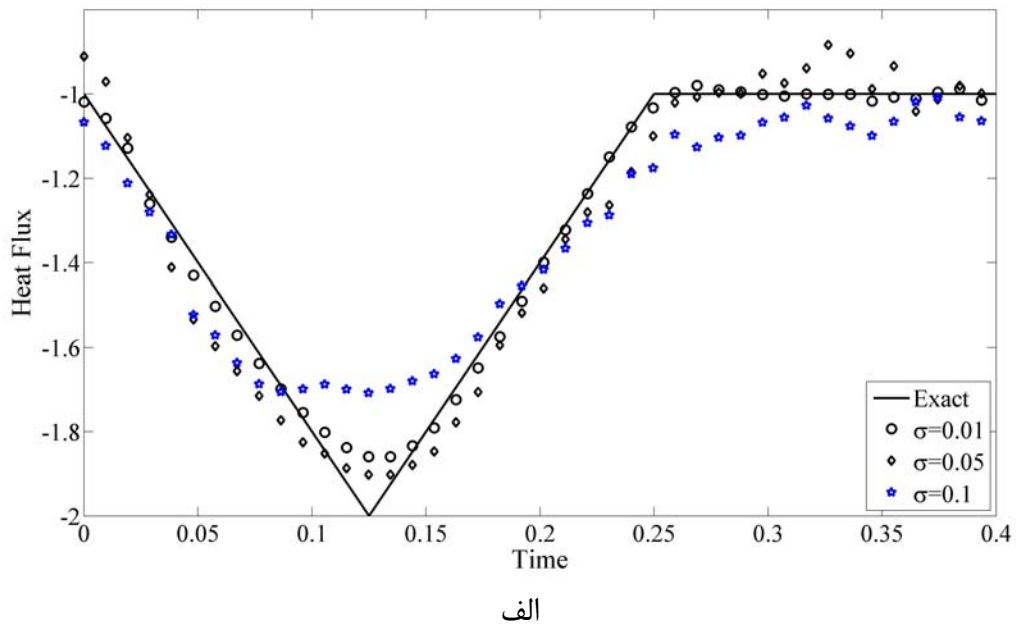


الف

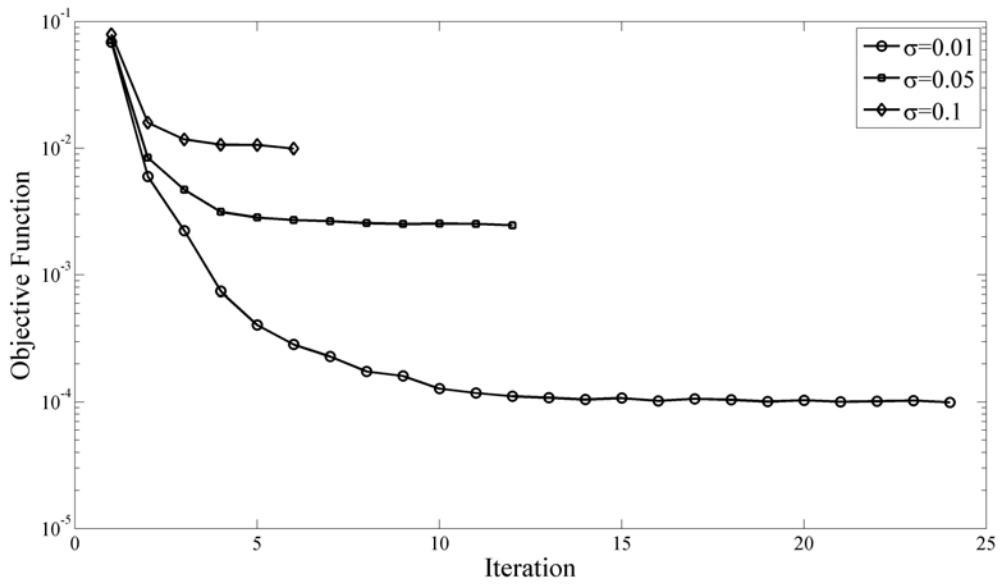


ب

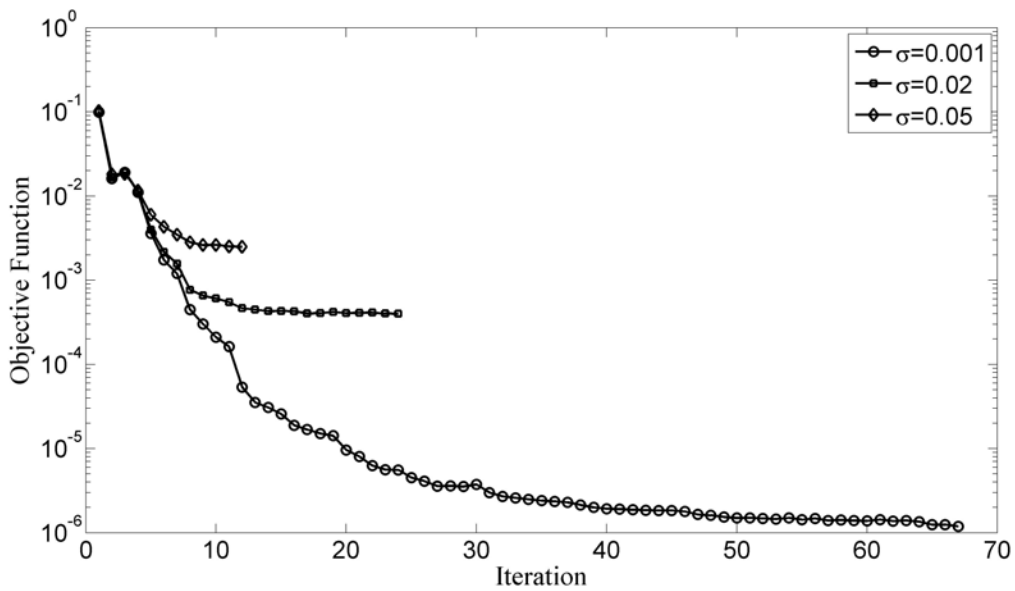
شکل (۶-۲۸): نمونه ای از دماهای اندازه گیری شده و اغتشاش یافته، الف) شار مثلثی ب) شار پله ای



شکل (۶-۲۹): شار حرارتی مطلوب و محاسبه شده برای مقادیر مختلف اغتشاش در داده های ورودی، الف) شار مثلی (ب) شار پله ای



الف



ب

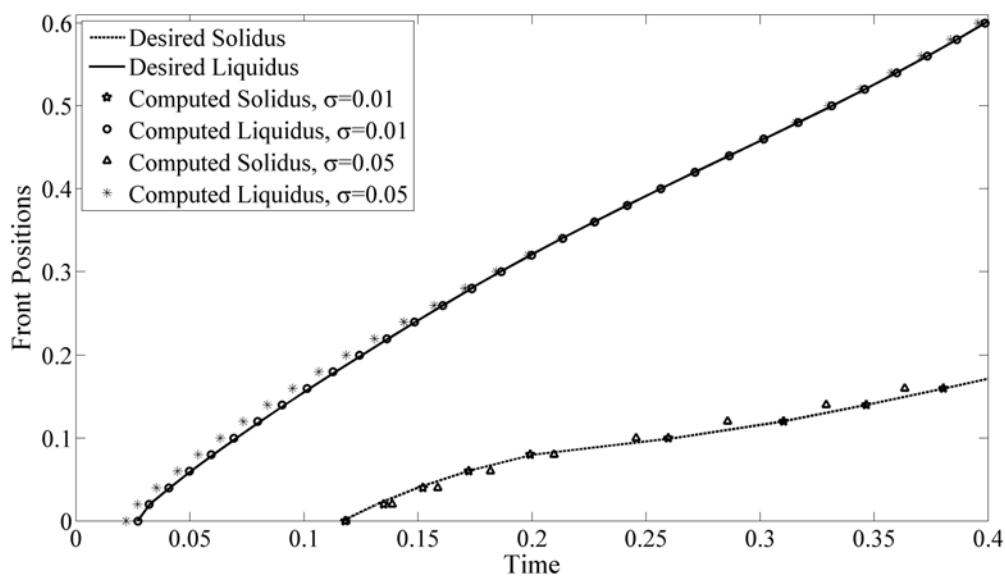
شکل (۶-۳۰): نرخ کاهش تابع هدف برای مقادیر مختلف اغتشاش در داده های ورودی، الف) شار مثلثی ب) شار پله ای

شکل (۶-۳۱) نیز نشان دهنده موقعیت مطلوب و محاسبه سطوح مشترک برای دو مقدار انحراف معیار مختلف می باشد که حاکی از دقت بسیار خوب روش در پیش بینی و کنترل حرکت سطوح مشترک حتی در مقادیر بالای اغتشاشات ورودی می باشد.

جدول (۶-۱۳): مقادیر تابع هدف، متوسط خطا و تکرارهای مورد نیاز در انجماد آلیاژها در حضور اغتشاش در داده‌های

ورودی

σ		Objective Function	RMS Error(%)
0.001	Triangular	1.8727e-006	0.8303
	Step	1.1873e-006	5.4134
0.01	Triangular	9.9331e-005	2.4020
	Step	9.7438e-005	7.2529
0.02	Triangular	3.9305e-004	3.8526
	Step	3.9981e-004	8.0213
0.05	Triangular	0.0025	5.3279
	Step	0.0025	8.9716
0.1	Triangular	0.0099	7.8578

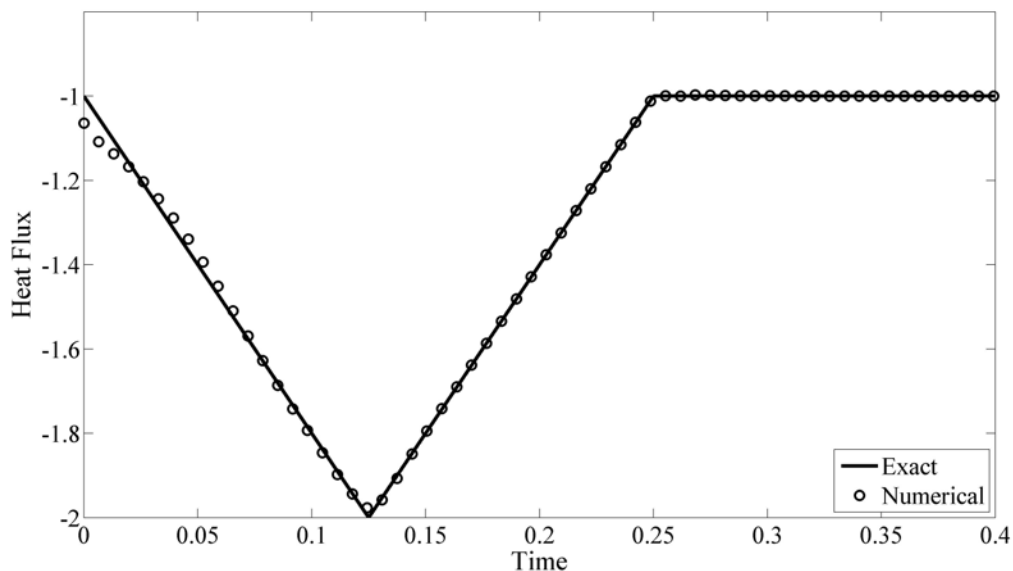


شکل (۶-۳۱): مکان مطلوب و محاسبه شده سطوح مشترک برای مقادیر متفاوت اغتشاشات ورودی و شار حرارتی پله ای

۶-۲-۱-۵- اثر ترکیب و نوع آلیاژ

یکی دیگر از عوامل مهم در تحلیل مسائل معکوس، بررسی عدم وابستگی جوابهای بدست آمده به نوع، جنس و خواص فیزیکی ماده مورد نظر می باشد. بدین منظور تحلیل معکوس برای یک آلیاژ دیگر (Al-

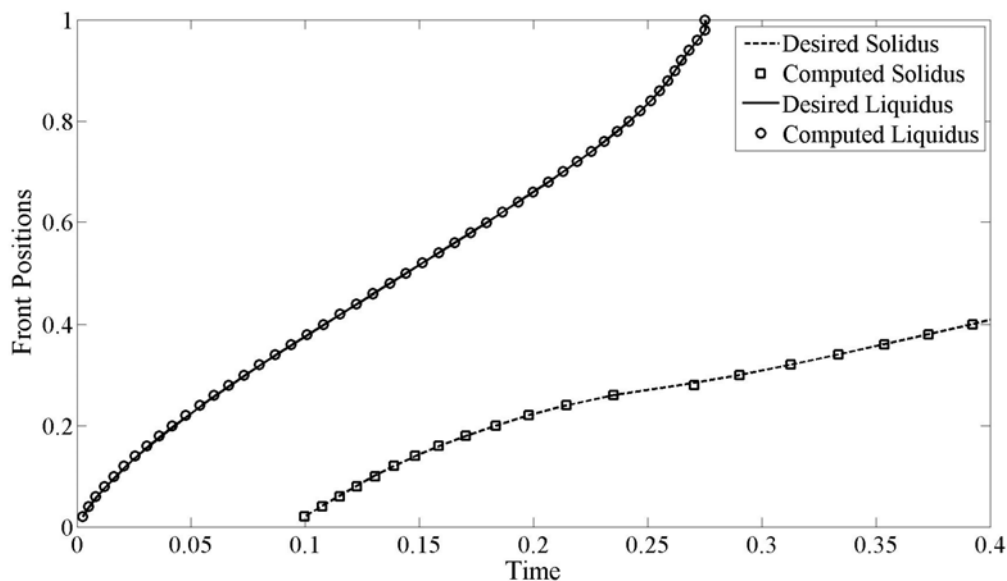
با خواص ترموفیزیکی مندرج در جدول (۶-۱۰) انجام شده و نتایج بدست آمده حاکی از عدم وابستگی جوابها به نوع و ترکیب آلیاژها می باشد. شار حرارتی تخمین زده شده توسط حل عددی معکوس به همراه شار حرارتی مطلوب برای این نوع آلیاژ در شکل (۶-۳۲) نشان داده شده است. همچنین موقعیت سطوح مشترک در زمانهای مختلف برای این حالتها در شکل (۶-۳۳) نمایش داده شده است. جدول (۶-۱۴) نیز بیانگر مقایسه ای کمی از نتایج بدست آمده بر حسب میزان خطای متوسط، تعداد تکرارها برای همگرایی و مقدار تابع هدف در تکرار نهایی می باشد.



شکل (۶-۳۲): مقایسه شار حرارتی مطلوب و محاسبه شده برای آلیاژ Al-Cu

جدول (۶-۱۴): مقادیر تابع هدف و متوسط خطا در انجماد آلیاژ آلومینیوم و برای موقعیتهای مختلف قرارگیری حسگرها

Sensor Locations	Objective Function	RMS Error(%)
$x_{m1} = 0.1$ $x_{m2} = 0.2$	1.2251e-007	0.9444
$x_{m1} = 0.2$ $x_{m2} = 0.4$	1.1473e-007	1.4910
$x_{m1} = 0.3$ $x_{m2} = 0.6$	2.7298e-007	2.1134



شکل (۶-۳۳): مقایسه مکان مطلوب و محاسبه شده سطوح مشترک برای Al-Cu

۶-۲-۲- کنترل سرعت سطح مشترک

یکی از مهمترین عواملی که در کیفیت آلیاژهای ریخته شده موثر است سرعت دو سطح مشترک Solidus و Liquidus یا به عبارتی ضخامت ناحیه میانی^۱ است. پس از تایید صحت نتایج روش مورد استفاده در قسمت قبل، در این بخش به کنترل ضخامت ناحیه میانی پرداخته که منجر به تولید قطعه ای با کیفیت مطلوب برای یک کاربرد خاص می شود. بدین منظور ابتدا فرض کنید که قالب از آلیاژ Pb-Sn با دمای $T_i \geq T_{liq}$ و خواصی که در جدول (۶-۱۰) ذکر شد پر شده است. چنانچه پیش از این نیز ذکر شد، هدف از حل معکوس انجماد آلیاژها یافتن شرایط مرزی در دو سوی قالب است به نحویکه منجر به ایجاد سرعتهای مطلوب در سطوح مشترک و یا ضخامت مطلوب ناحیه میانی شود. در این بخش شار حرارتی در مرز بالایی صفر نبوده و بایستی به صورت همزمان با شار حرارتی در مرز پایینی محاسبه شود. بنابر این تابع هدف بر مبنای اختلاف دمای مطلوب و محاسبه شده تعریف شده و با استفاده از روش

^۱ Mushy zone

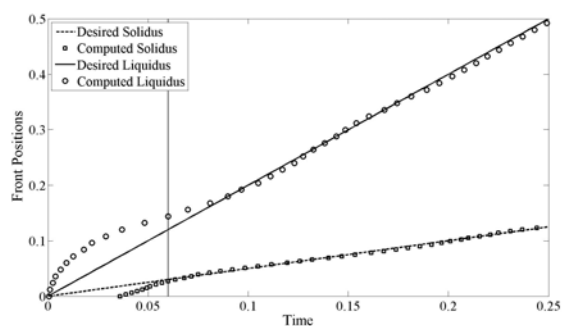
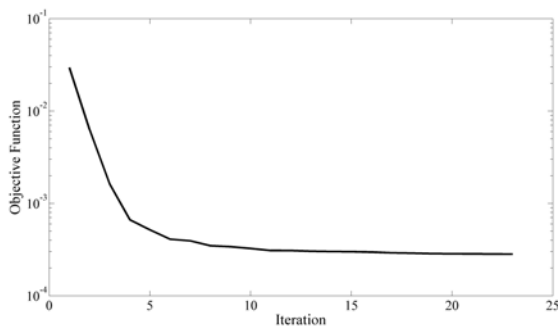
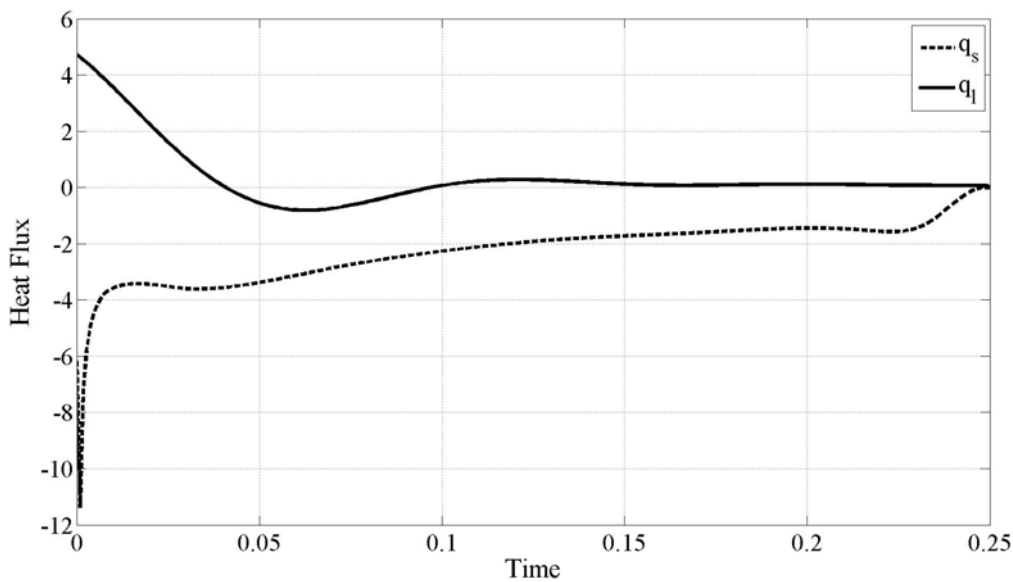
گرادیان مزدوج و معادلات الحاقی به کمینه کردن این تابع هدف می پردازیم که جزئیات روش مذکور در فصل پنجم عنوان شد.

شار حرارتی بدست آمده از حل معکوس برای مرزهای بالایی و پایینی (q_s و q_l) برای سرعتهای مختلف سطح مشترک یا به عبارتی ضخامتهای مختلف ناحیه میانی در حلتی که دمای اولیه $T_i = 0$ باشد در این قسمت بررسی خواهند شد. بدلیل عدم وجود جوابهای تحلیلی و عددی در این قسمت جهت بررسی صحت نتایج بدست آمده، شارهای حرارتی بدست آمده را به عنوان ورودی مساله مستقیم اعمال کرده و به محاسبه موقعیت سطوح مشترک می پردازیم.

شار حرارتی محاسبه شده به همراه روند همگرایی تابع هدف و همچنین موقعیتهای مطلوب و محاسبه شده سطوح مشترک برای سرعتهای مختلف سطوح مشترک و یا به عبارت دیگر برای ضخامتهای مختلف ناحیه میانی در شکلهای (۶-۳۴) تا (۶-۳۷) نشان داده شده اند. در تمامی حالتها سرعت سطح مشترک میانی-مایع (V_l) ثابت و برابر ۲ فرض شده و برای داشتن ضخامتهای مختلف تنها سرعت سطح مشترک جامد-میانی (V_s) تغییر خواهد کرد. مقادیر مختلفی که برای V_s انتخاب شده اند عبارت است از $V_s = 0.25, 0.5, 1, 1.25, 1.75$. با ملاحظه نتایج بدست آمده می توان نتیجه گرفت که کنترل حرکت دو سطح مشترک موجود بین سه ناحیه در حالتهای مختلف به خوبی صورت گرفته که با کنترل این سرعتها ضخامتهای مختلفی برای ناحیه میانی بدست آمده که می تواند بیانگر تولید آلیاژی خاص با کیفیت مورد نظر باشد.

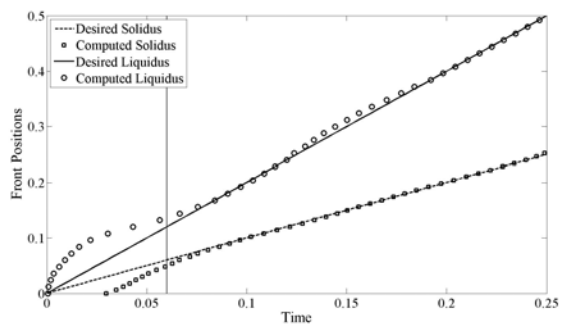
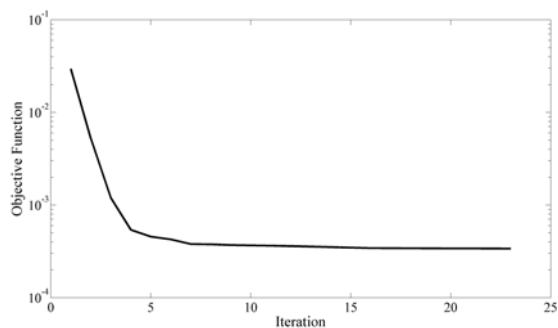
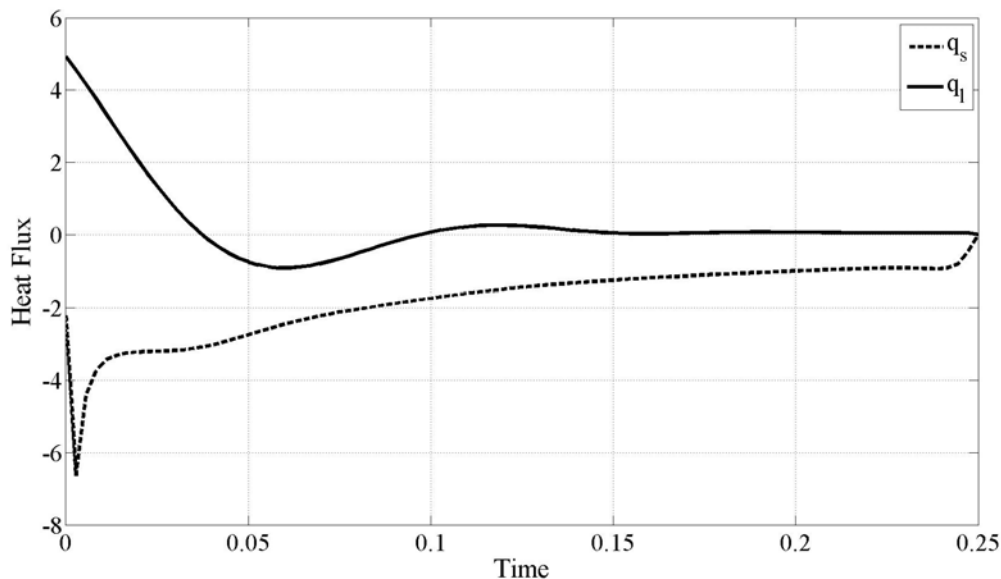
علاوه بر حالتهای قبلی که سرعت دو سطح مشترک متفاوت بود، برای داشتن ضخامت ثابتی برای ناحیه میانی بایستی سرعت دو سطح مشترک برابر باشد. بدلیل طبیعت پدیده انجماد در آلیاژها با توجه به اینکه T_{sol} و T_{liq} متفاوت می باشند برای داشتن ضخامت ثابت این ناحیه فرض می شود که سرعت سطح مشترک سالیدوس از لحظه $t = 0$ تا $t = 0.06$ دارای مقدار $V_s = 1$ و از آن لحظه به بعد مقداری برابر

با مقدار سرعت سطح مشترک لیکویدوس باشد. بدین ترتیب با در نظر گرفتن شکل (۶-۳۷) در می یابیم که پس از طی زمانهای ابتدایی که جواب هنوز به جواب حالت پایدار نرسیده است، سرعت دو سطح مشترک برابر بوده و ضخامت ناحیه میانی دارای مقدار ثابتی است. شارهای حرارتی مورد نیاز برای دستیابی به این حالت نیز در شکل نمایش داده شده اند.



شکل (۶-۳۴): مقایسه الف) شار حرارتی در دو مرز، ب) مکانهای مطلوب و کنترل شده سطوح مشترک و ج) نرخ کاهش

$$V_l = 2, V_s = 0.5 \text{ تابع هدف برای}$$

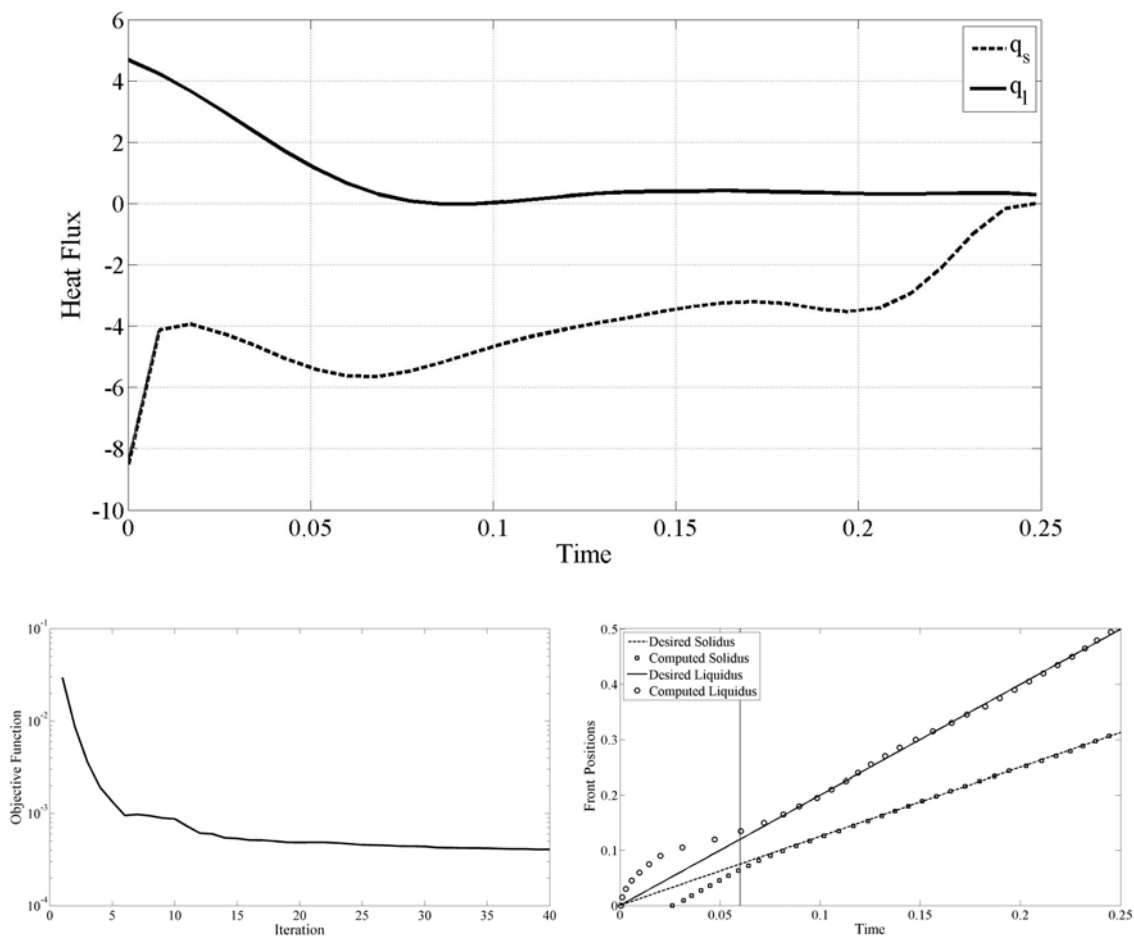


شکل (۶-۳۵): مقایسه الف) شار حرارتی در دو مرز، ب) مکانهای مطلوب و کنترل شده سطوح مشترک و ج) نرخ کاهش

$$V_l = 2, V_s = 1 \text{ تابع هدف برای}$$

با دقت در شارهای حرارتی بدست آمده می توان نتیجه گرفت که در مرز پایین همیشه شار خنک کن حرارتی نیاز است در صورتیکه در مرز بالا هر دو شار گرمایش و سرمایشی مورد نیاز است. دلیل این امر را می توان توزیع دمای اولیه مذاب و مقدار زیاد شار خنک کن در مرز پایین دانست چرا که دمای اولیه بیشتر از T_{liq} است و سطح مشترک سالیدوس در لحظه ابتدایی باید دقیقاً روی مرز قرار گیرد. بنابراین در لحظات ابتدایی شار خنک کن زیادی در مرز بایستی اعمال شود که این شار خنک کن موجب می شود که سطح مشترک لیکویدوس نیز با سرعت زیادی حرکت کند که ممکن است از سرعت مطلوب بیشتر

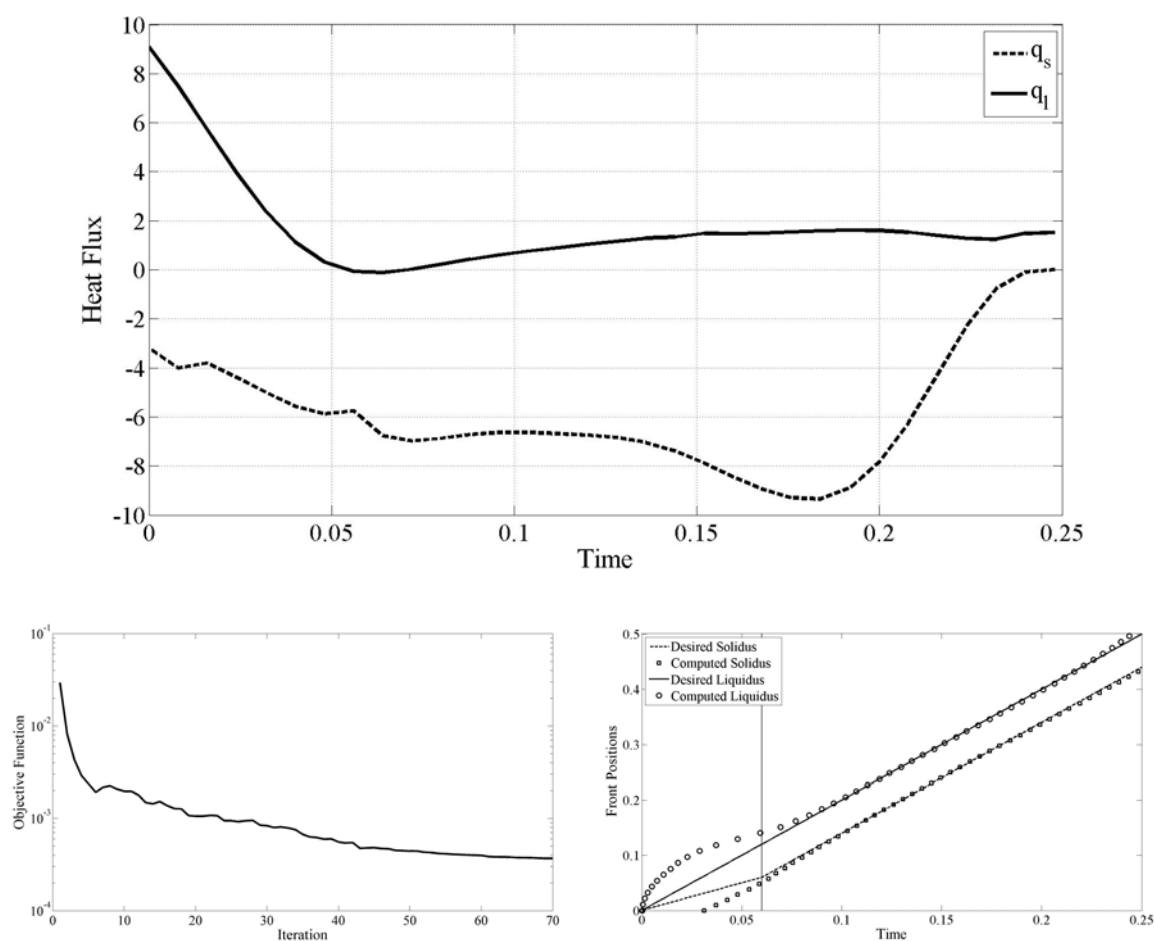
باشد. لذا برای کنترل این سرعت و بازگرداندن آن به میزان مطلوب، در مرز بالا در لحظات ابتدایی شار گرمایش بایستی اعمال گردد که در شکل‌های (۶-۳۴) تا (۶-۳۷) مشخص است. مقایسه ای بین این شارها در شکل (۶-۳۸) نیز ملاحظه می شود.



شکل (۶-۳۶): مقایسه الف) شار حرارتی در دو مرز، ب) مکانهای مطلوب و کنترل شده سطوح مشترک و ج) نرخ کاهش

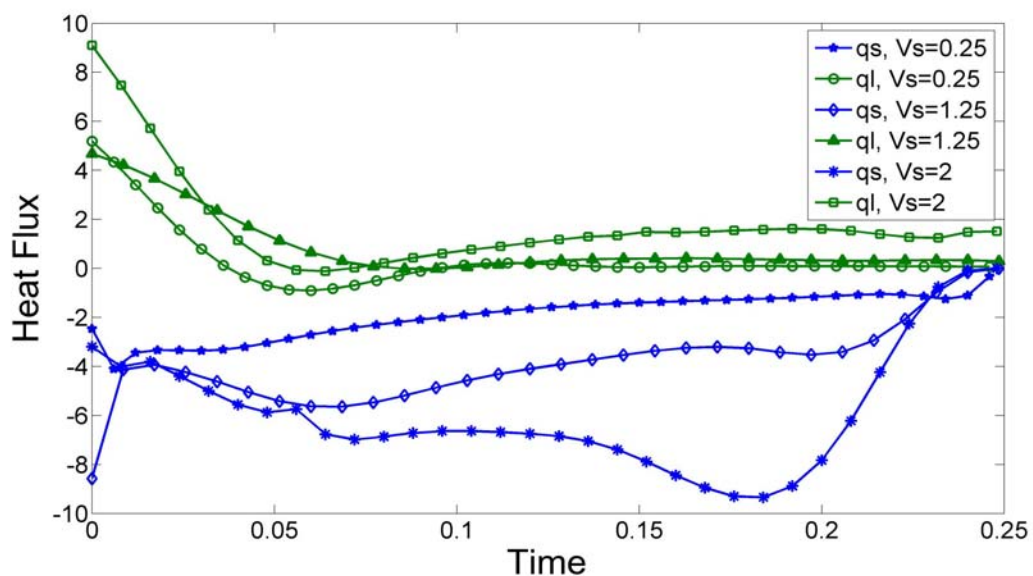
$$V_l = 2, V_s = 1.25 \text{ تابع هدف برای}$$

شایان ذکر است که با توجه به نتیجه ای که در بخش مربوط به موقعیت قرارگیری حسگر شد و اینکه در این حالت کنترل سرعت، حسگر متحرک بوده و به تدریج از مرز فعال دور می شود همچنین بدلیل وجود دو حسگر متحرک، نتایج حاصله از دقت مطلوبی برخوردار می باشند. مقادیر RMS خطا برای مقادیر مختلف سرعت سطوح مشترک به همراه تعداد تکرارهای مورد نیاز و مقدار تابع هدف در تکرار نهایی در جدول (۶-۱۵) نشان داده شده اند.



شکل (۶-۳۷): مقایسه الف) شار حرارتی در دو مرز، ب) مکانهای مطلوب و کنترل شده سطوح مشترک و ج) نرخ کاهش

$$V_l = 2, V_s = 2 \text{ تابع هدف برای}$$



شکل (۶-۳۸): مقایسه شار حرارتی در مرزهای پایینی و بالایی برای ضخامت‌های مختلف ناحیه میانی

جدول (۶-۱۵): مقادیر تابع هدف و متوسط خطا در کنترل سرعت سطح مشترک آلیاژها و برای سرعت‌های مختلف

Solidus Velocity	Liquidus Velocity	Objective Function	Iteration numbers	Solidus e_{RMS} %	Liquidus e_{RMS} %
0.25	2	3.1e-4	25	7.23	4.72
1.25	2	4.078e-4	41	4.25	5.63
1.75	2	8.33e-4	64	6.43	7.15
2	2	3.69e-4	70	5.86	4.70

۴-۶-انجماد مواد خالص و آلیاژها در حالت دو بعدی

همان گونه که در فصل پنجم معادلات حاکم بر مساله معکوس در مختصات دوبعدی ذکر گردید، در این بخش به مطالعه نتایج حاصل از حل معادلات فصل قبل می پردازیم. در مختصات دو بعدی نیز ابتدا کد عددی استفاده شده با روشی که برای مختصات یک بعدی گفته شد صحنه گذاری شده و سپس نتایج برای

مواد خالص و آلیاژها در حالتی که کنترل سرعت و شکل سطح مشترک صورت می گیرد ارائه خواهند شد.

علاوه بر معادلات حاکم بر مساله مستقیم و معکوس و همچنین روش بهینه سازی تابع هدف، یکی از اساسی ترین تفاوت‌هایی که میان مساله یک بعدی و دو بعدی وجود دارد تفاوت در وابستگی شار حرارتی مرزی است. در مختصات یک بعدی، شار حرارتی فقط تابع زمان بوده در صورتیکه در مختصات دو بعدی شار حرارتی مرزی علاوه بر زمان می تواند تابع مکان نیز باشد. لذا عامل دیگری که در مسائل دو بعدی می تواند بوسیله روشهای انتقال حرارت معکوس کنترل بهینه گردد، شکل سطح مشترک می باشد که دو نوع سطح مشترک تخت و سینوسی در این رساله مورد بررسی قرار گرفته است.

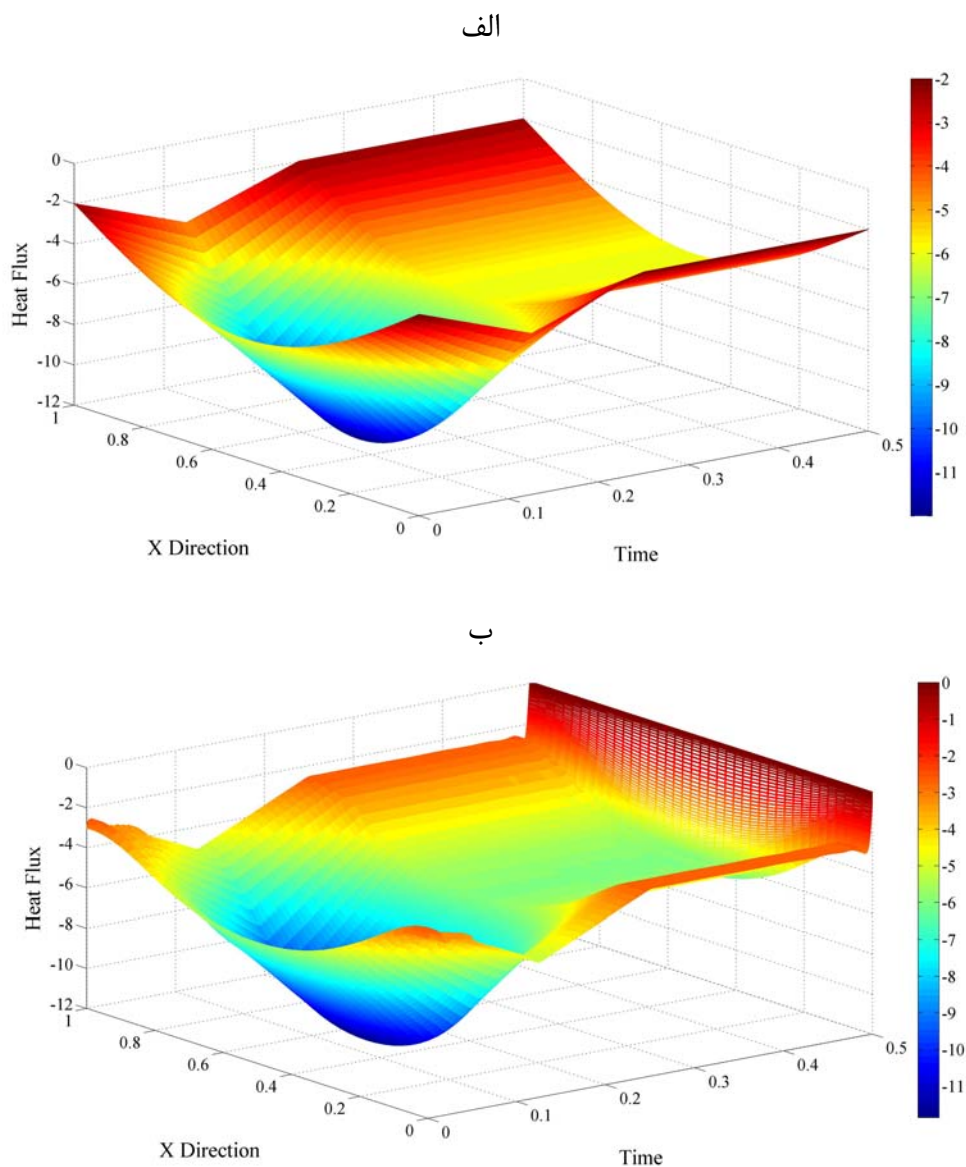
ابتدا در نظر بگیرید که قالب از ماده خالصی با شرایطی که در بخش قبلی ذکر شد پر شده و در لحظه $t = 0$ مرز پایین ناگهان در معرض یک شار حرارتی تابع زمان و مکان به شکل رابطه (۶-۱۲) قرار گیرد.

$$q(x, t) = -4[1 + 2 \sin \pi x]f(t)$$

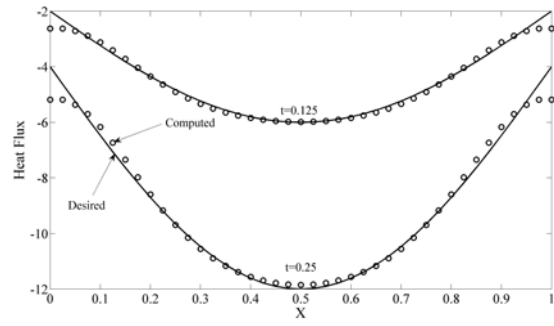
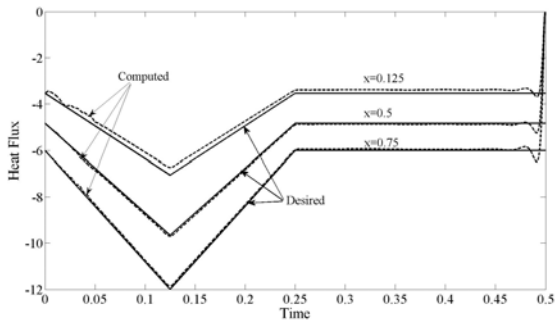
$$f(t) = \begin{cases} 0.5 + 4t, & 0 \leq t \leq 0.125 \\ 1 - 4(t - 0.125), & 0.125 \leq t \leq 0.25 \\ 0.5, & t \geq 0.25 \end{cases} \quad (۶-۱۲)$$

با ثبت تاریخچه زمانی دما در نقطه ای از دامنه محاسباتی و استفاده از آن به عنوان ورودی مساله معکوس به تخمین شار حرارتی می پردازیم. شار حرارتی محاسبه شده از حل معکوس و شار حرارتی مفروض برای تولید دماهای اندازه گیری شده در شرایطی که $Ste = 0.5$ انتخاب شده است در شکل (۶-۳۹) برای زمانها و مکانهای مختلف نمایش داده شده است. مطابق آنچه ملاحظه می شود، روش استفاده شده دقت بسیار مناسبی برای بازگرداندن شار حرارتی دارد. البته واضح است که دقت نتایج در زمان انتهایی به دلیلی که قبلا ذکر شد و همچنین در مرزها بدلیل استفاده از تقریب مشتق مرتبه اول با دقت کم، مناسب نمی باشد. این مطلب را می توان با ملاحظه شکل (۶-۴۰) که در آن شار حرارتی در زمانها و مکانهای

مختلف به طور جداگانه ترسیم شده اند و همچنین کانتورهای شار حرارتی در شکل (۴۱-۶) دریافت. علاوه بر این موقعیت و شکل سطح مشترک در زمانهای مختلف نیز در شکل (۴۲-۶) به نمایش درآمده است. با دقت در نتایج بدست آمده می توان دریافت که شار حرارتی بازسازی شده بوسیله حل معکوس از دقت بسیار خوبی برخوردار بوده است. شکل (۴۳-۶) نیز نشان دهنده روند بسیار مناسب همگرایی تابع هدف به سمت مقدار بهینه می باشد.



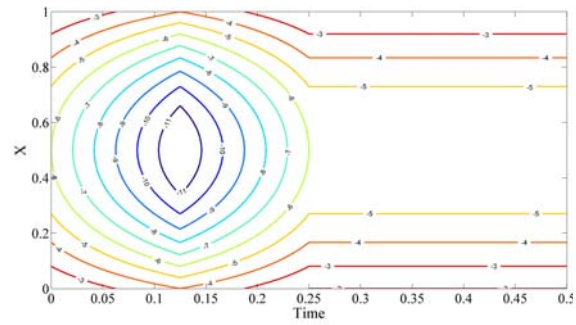
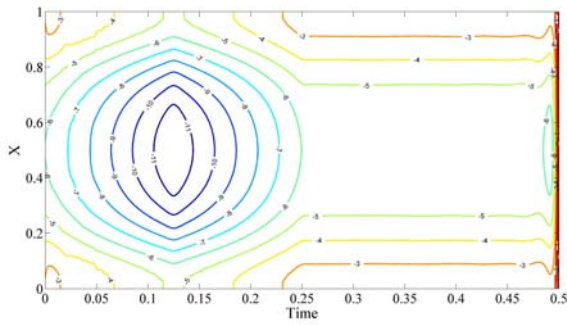
شکل (۴۳-۶): مقایسه بین الف) شار حرارتی اعمال شده برای تولید داده ها و ب) شار محاسبه شده از حل معکوس



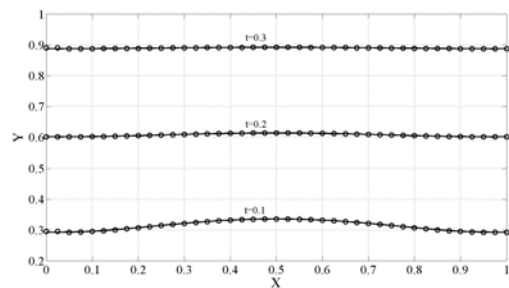
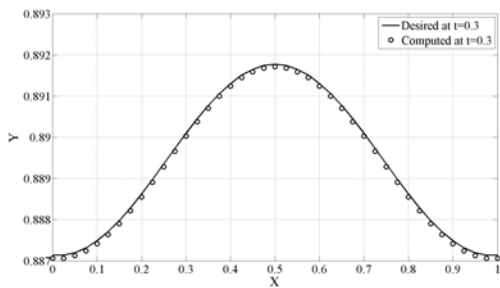
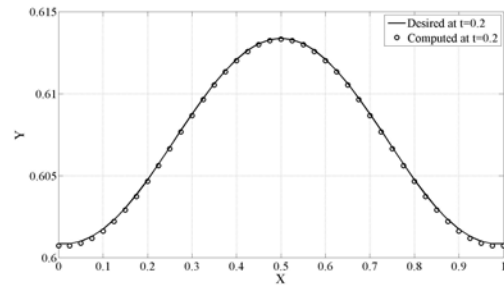
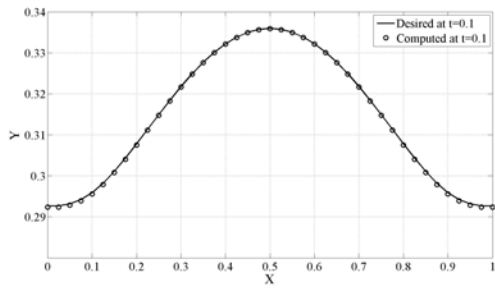
شکل (۶-۴۰): مقایسه شار حرارتی محاسبه شده و مطلوب در زمانها و مکانهای مختلف

ب

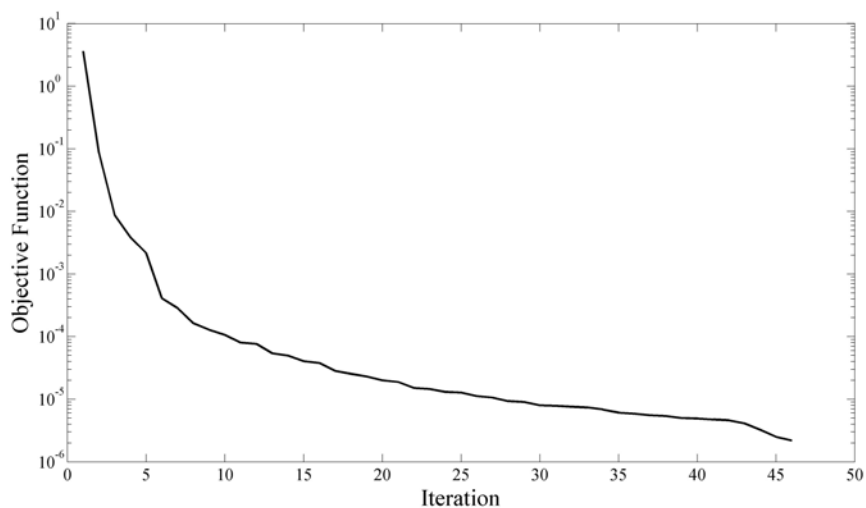
الف



شکل (۶-۴۱): مقایسه بین کانتورهای شار حرارتی الف) مطلوب، ب) محاسبه شده



شکل (۶-۴۲): مکانهای مطلوب و محاسبه شده سطح مشترک در مختصات دو بعدی

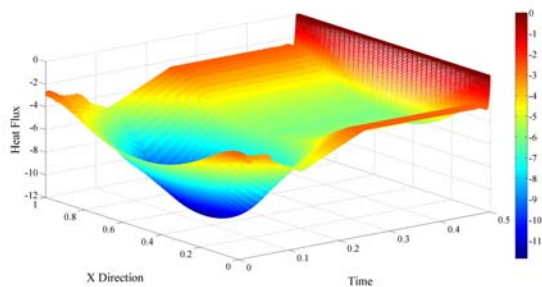
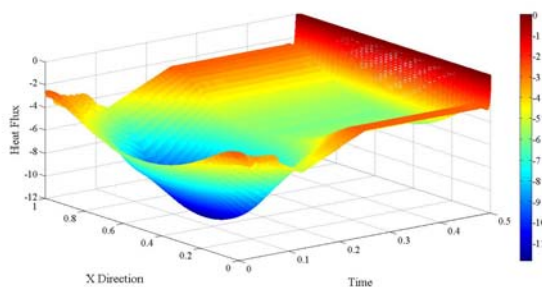


شکل (۴۳-۶): نرخ کاهش تابع هدف برای مختصات دو بعدی و شار حرارتی رابطه (۱۲-۶)

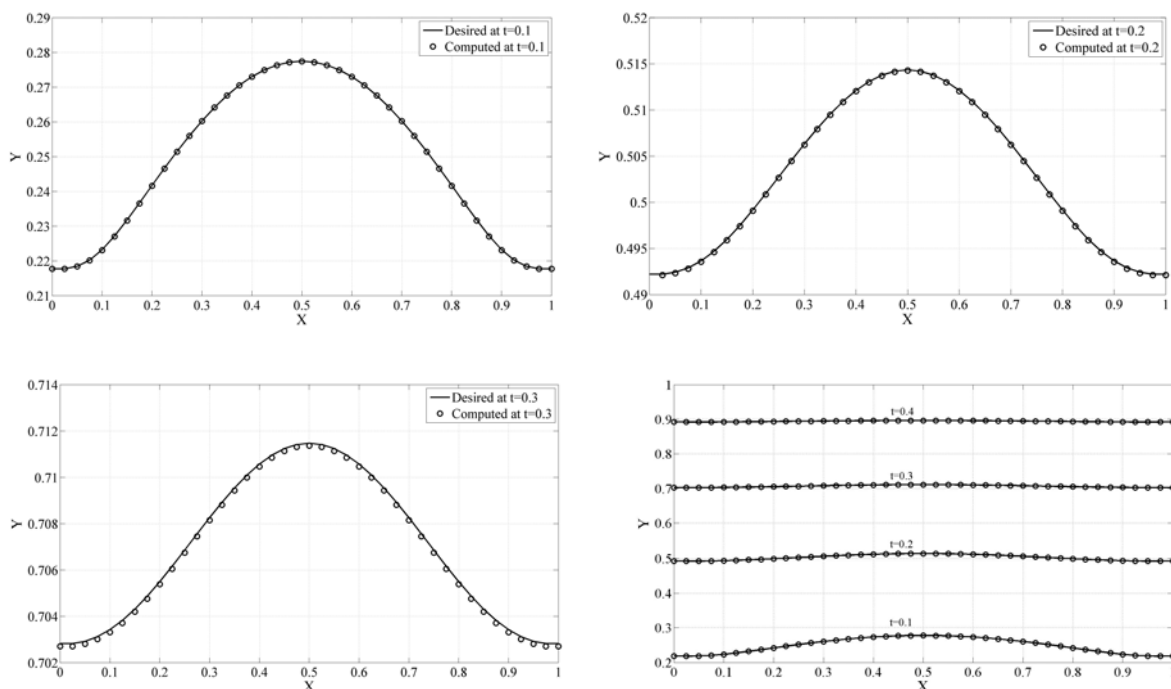
صحت روش استفاده شده برای مواد دیگر با خواص ترموفیزیکی متفاوت نیز انجام شده که شار حرارتی بدست آمده برای $Ste = 1, 1.5$ در شکل (۴۴-۶) ارائه شده است. همچنین موقعیت سطح مشترک در دو حالت مطلوب و محاسبه شده برای حالتی که $Ste = 1$ است در شکل (۴۵-۶) مشاهده می شود. شکل‌های (۴۶-۶) و (۴۷-۶) نیز به ترتیب نشانگر مقایسه ای بین کانتورهای دما در حالت مطلوب و محاسبه شده برای $Ste = 0.5, 1$ می باشد. با توجه به نتایج ارائه شده مشخص است که همانند مختصات یک بعدی، روش پیشنهادی قابل استفاده برای طیف وسیعی از مواد قابل استفاده است.

ب

الف

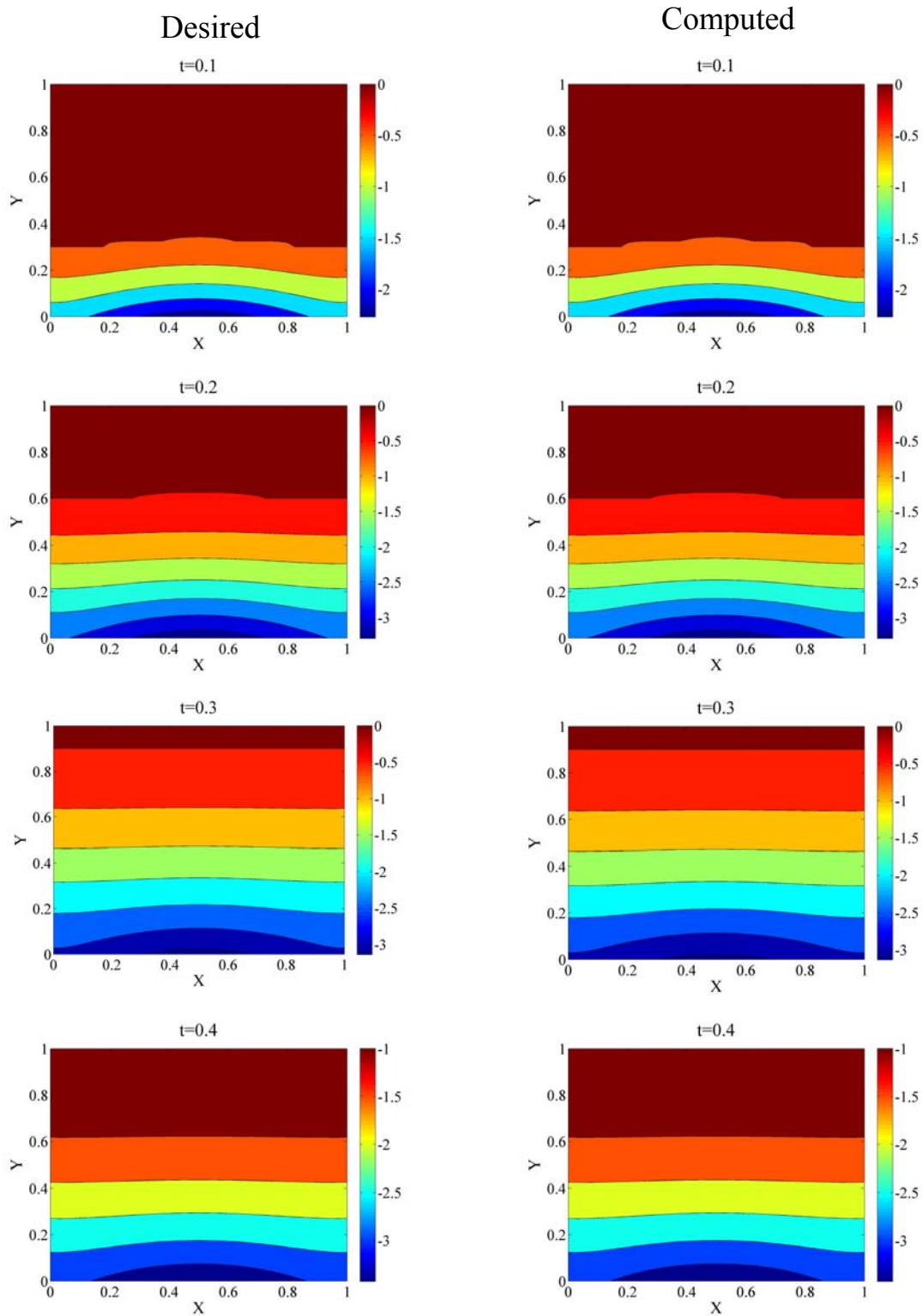


شکل (۴۴-۶): مقایسه بین شار حرارتی محاسبه شده الف) $Ste = 1$ ب) $Ste = 1.5$

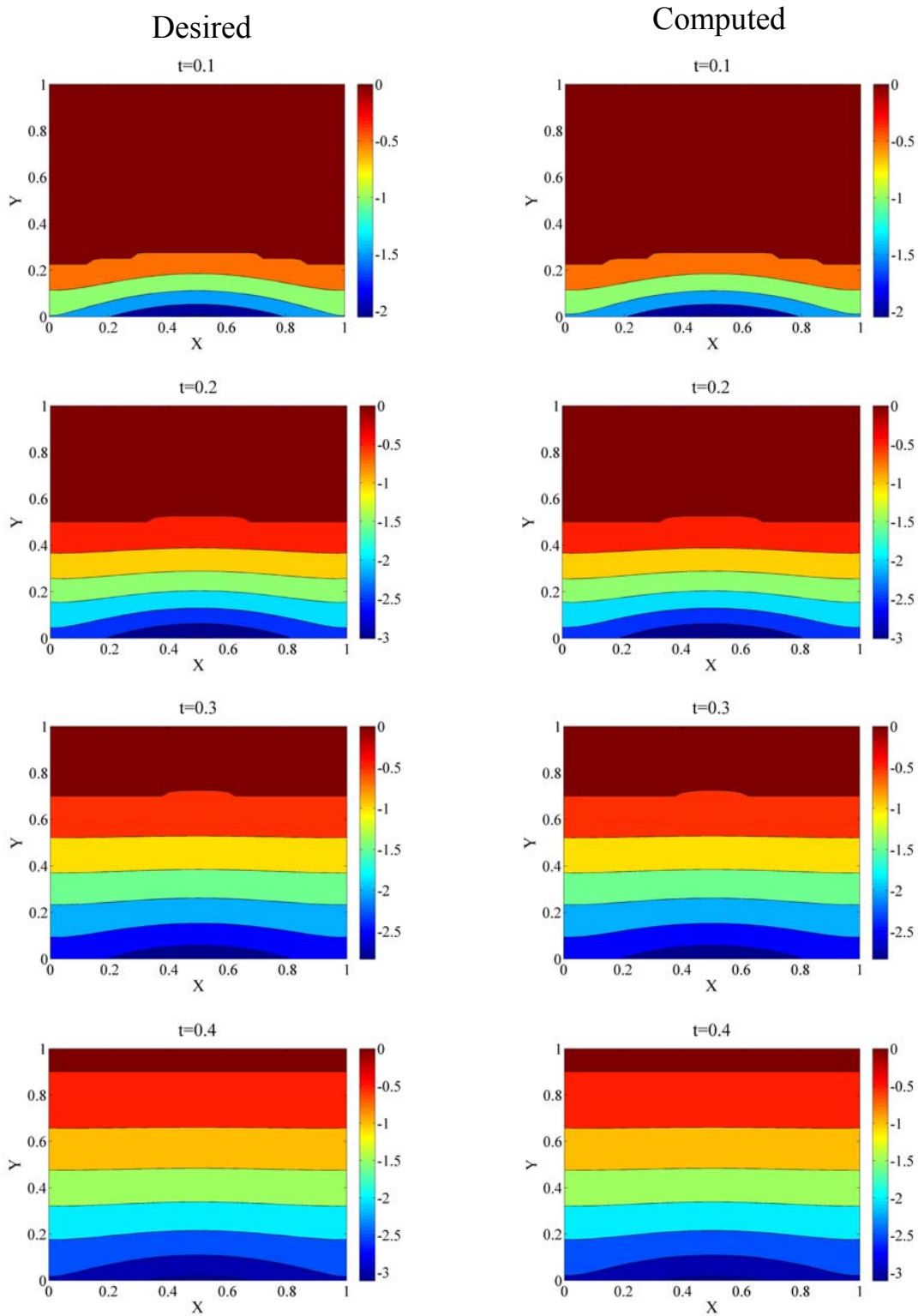


شکل (۴۵-۶): مکانهای مطلوب و محاسبه شده سطح مشترک برای $Ste = 1$

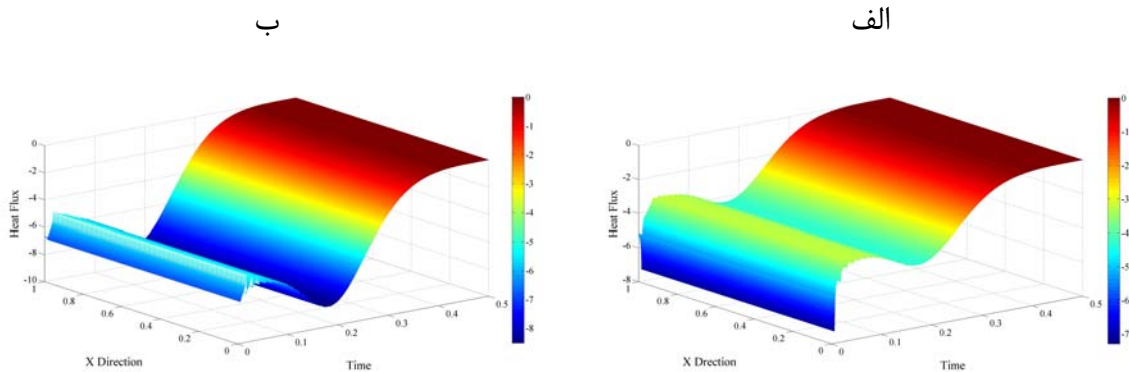
حال پس از بررسی صحت کد کامپیوتری بوسیله اعمال و تخمین شار حرارتی معلوم به کنترل حرکت و شکل سطوح مشترک برای مواد خالص و آلیاژها می پردازیم. ابتدا فرض می کنیم که قالب از ماده خالصی با دمای $T_i = 0.5$ پر شده و هدف کنترل سرعت سطح مشترک جامد-مایع باشد. شار حرارتی مورد نیاز برای دستیابی به سرعت ثابت سطح مشترک $V = 2$ برای $Ste = 0.5$ و $Ste = 1.5$ در شکل (۴۸-۶) نشان داده شده است. مقایسه ای بین موقعیتهای مطلوب و محاسبه شده سطح مشترک در شکل (۴۹-۶) برای مواد ذکر شده در قسمت قبل با شرایط مذکور نشان داده شده است. همچنین میزان خطای محاسباتی سطح مشترک بدست آمده نسبت به حالت طراحی و مطلوب در شکل درج شده است که نشان می دهد برای زمانهای ابتدایی و میانی میزان خطا در کنترل سطح مشترک حداکثر ۲٪ بوده و در زمانهای پایانی (بدلیل میل شار حرارتی به سمت مقدار حدس اولیه) مقدار خطا به ۶-۹٪ می رسد. کانتورهای بدست آمده برای دما در این حالت در زمانهای مختلف در شکل (۵۰-۶) ارائه شده اند.



شکل (۶-۴۶): مقایسه بین کانتورهای دما در حالت مطلوب و محاسبه شده برای $Ste = 0.5$

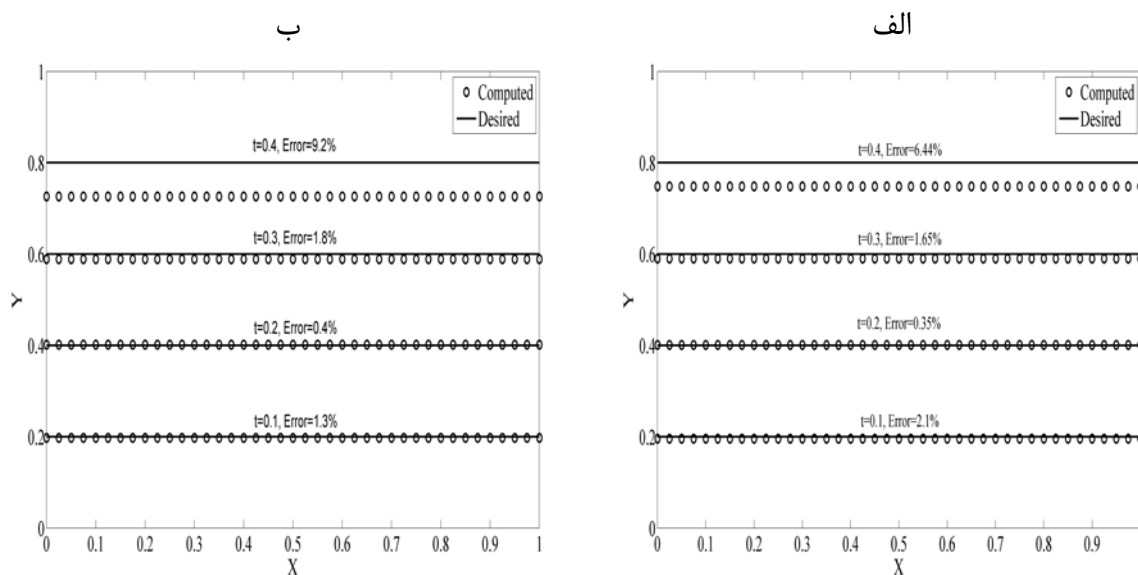


شکل (۶-۴۷): مقایسه بین کانتورهای دما در حالت مطلوب و محاسبه شده برای $Ste = 1$



شکل (۶-۴۸): شار حرارتی محاسبه شده در مختصات دو بعدی برای سرعت ثابت سطح مشترک الف) $Ste = 0.5$ (ب)

$Ste = 1.5$



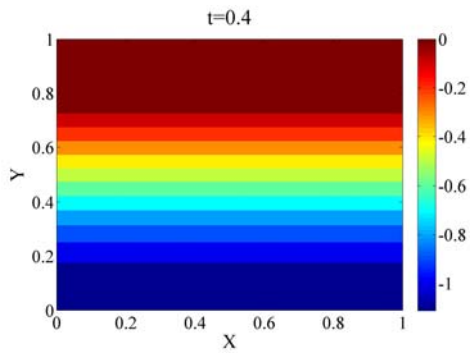
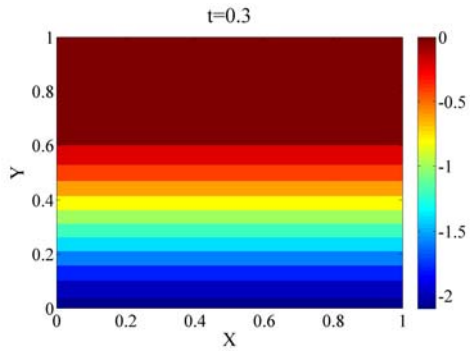
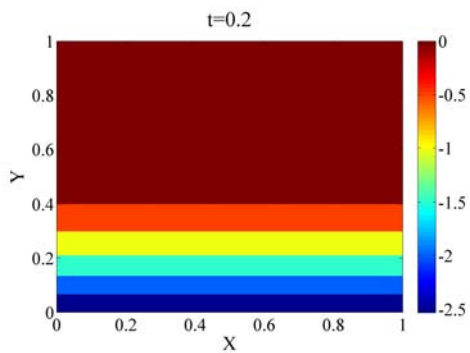
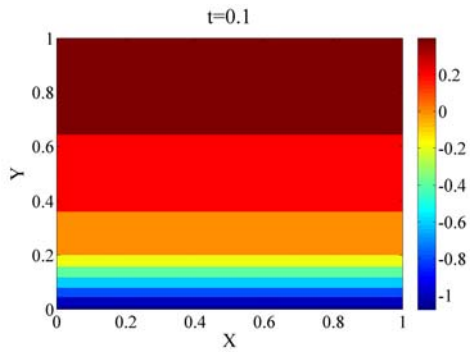
شکل (۶-۴۹): مکانهای مطلوب و محاسبه شده در مختصات دو بعدی برای سرعت ثابت سطح مشترک الف) $Ste = 0.5$

ب) $Ste = 1.5$

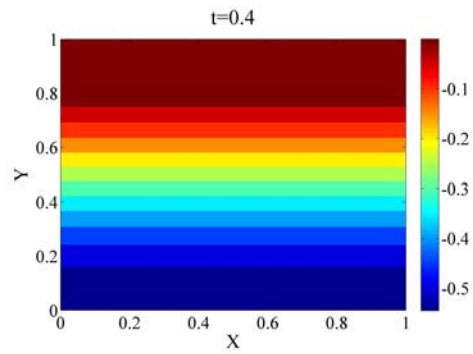
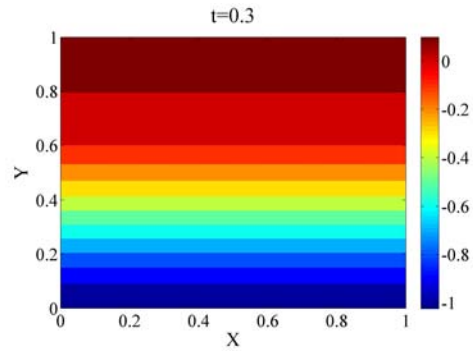
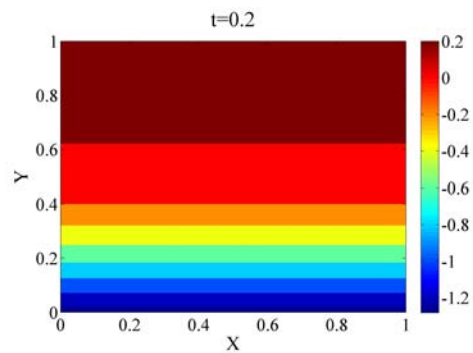
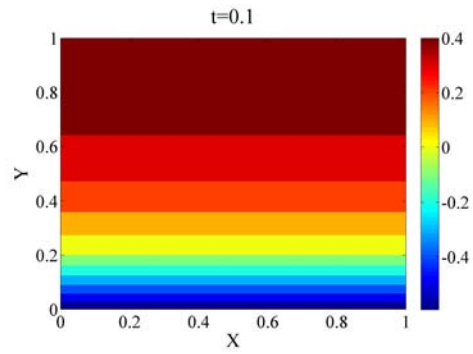
علاوه بر حالتی که سرعت سطح مشترک ثابت بوده و یک شکل مسطحی را داراست، عملکرد روش پیشنهادی برای حالتی که سطح مشترک مسطح نبوده و یک شکل سینوسی طبق رابطه زیر داشته باشد نیز ارزیابی شده است. در رابطه زیر $V = 2$ اختیار شده است.

$$y_s(x, t) = V(1 - 0.05 \cos(\pi x - 1))t \quad (۶-۱۳)$$

$Ste = 1.5$

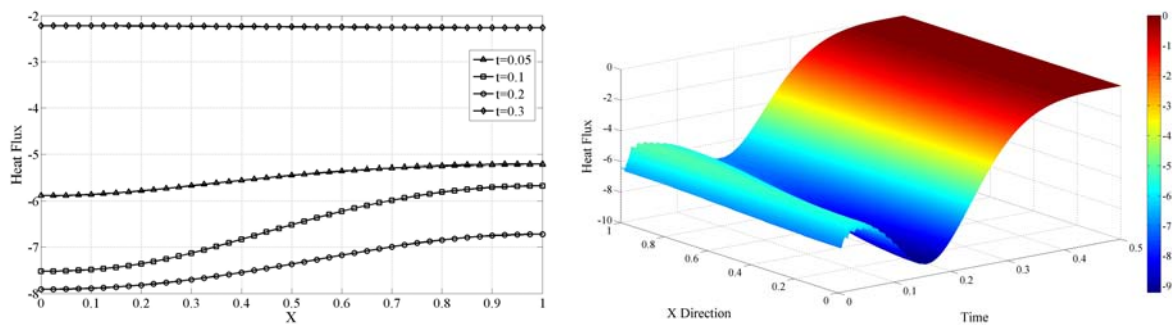


$Ste = 0.5$

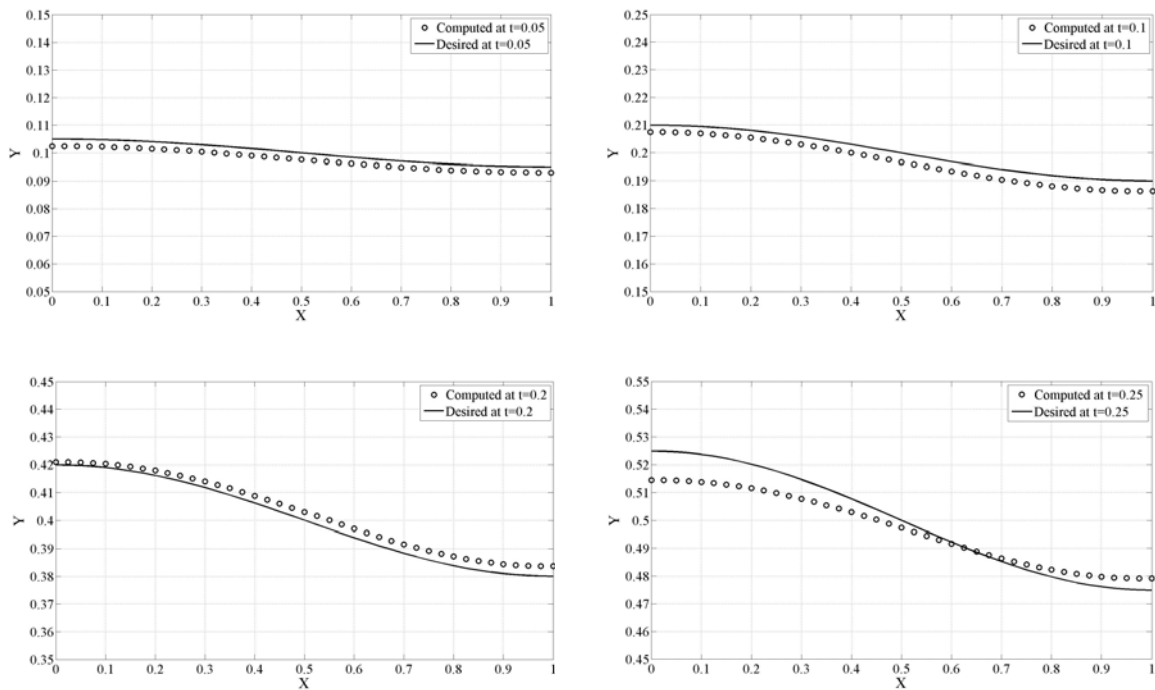


شکل (۶-۵): مقایسه کانتورهای دما برای سرعت ثابت سطح مشترک و اعداد استفان مختلف

شار حرارتی بدست آمده برای دستیابی به شکل سینوسی سطح مشترک به صورت تابعی از زمان و مکان و همچنین نسبت به مکان در زمانهای مختلف در شکل (۶-۵۱) ترسیم شده است. مکانهای مطلوب و محاسبه سطح مشترک نیز در زمانهای مختلف در شکل (۶-۵۲) ارائه شده اند. همان گونه که قبلا ذکر شد در این قسمت نیز با نزدیک شدن به زمانهای نهایی از دقت کنترل کاسته می شود اما به عنوان مثال در $t = 0.25$ ، حداکثر خطا در کنترل سطح مشترک به میزان حدود ۲٪ می رسد.

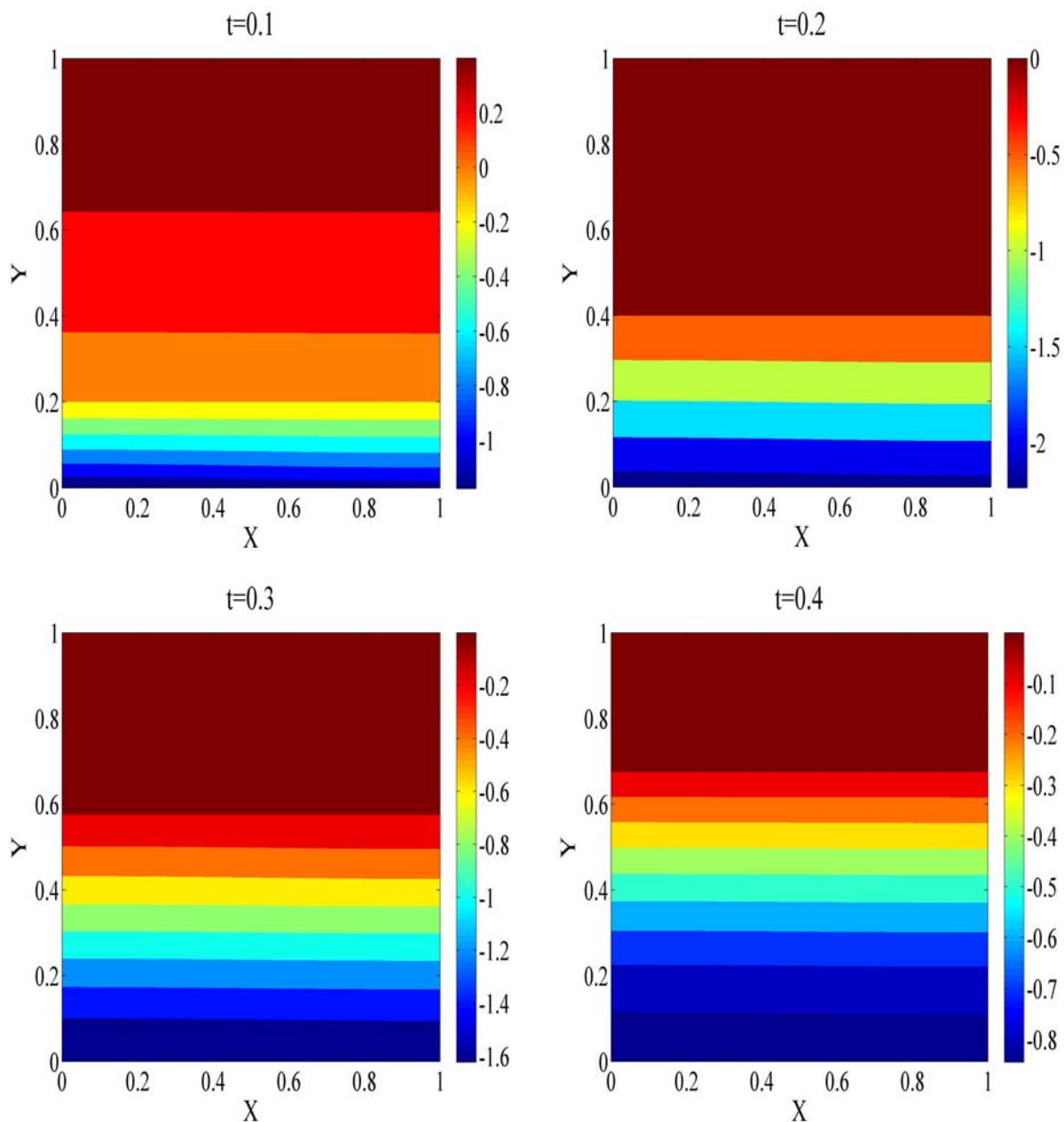


شکل (۶-۵۱): شار حرارتی محاسبه شده در مختصات دو بعدی و سرعت سطح مشترک طبق رابطه (۶-۱۳)

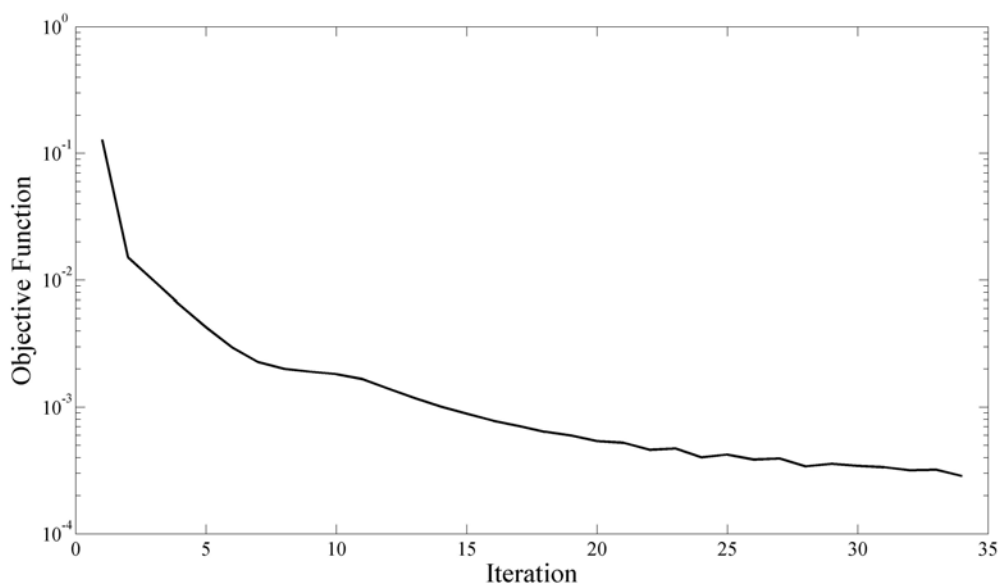


شکل (۶-۵۲): مکانهای مطلوب و محاسبه شده سطح مشترک در مختصات دو بعدی و سرعت سطح مشترک سینوسی

کانتورهای دمای محاسبه شده در این حالت نیز در شکل (۵۳-۶) نشان داده شده است. روند همگرایی و کاهش میزان تابع هدف به سمت میزان مورد نظر نیز در شکل (۵۴-۶) نمایش داده شده که نشان دهنده همگرایی بسیار خوب روش انتخاب شده می باشد.



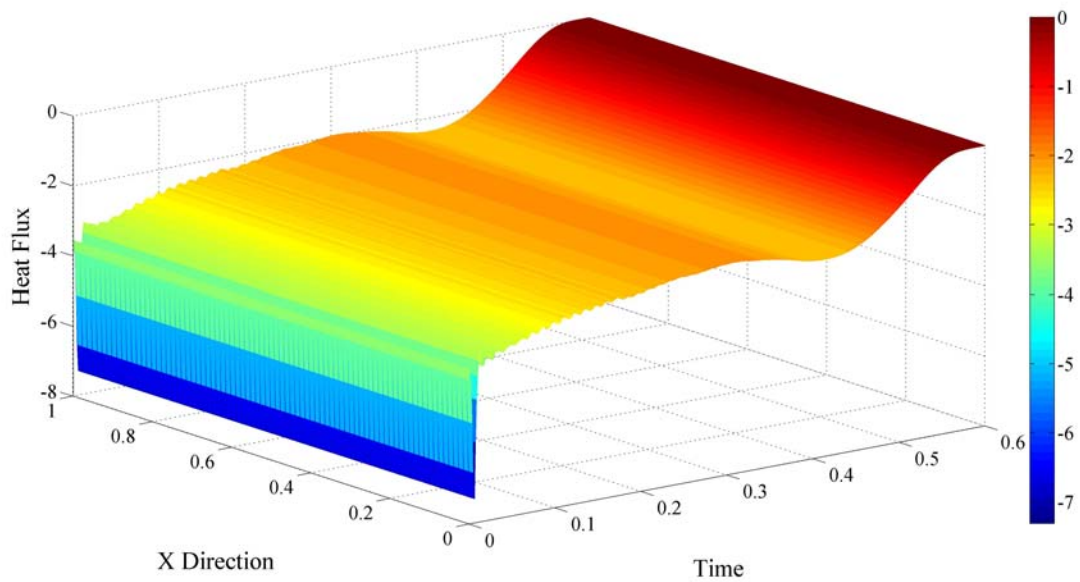
شکل (۵۳-۶): کانتورهای دما برای شکل سینوسی سطوح مشترک مواد خالص



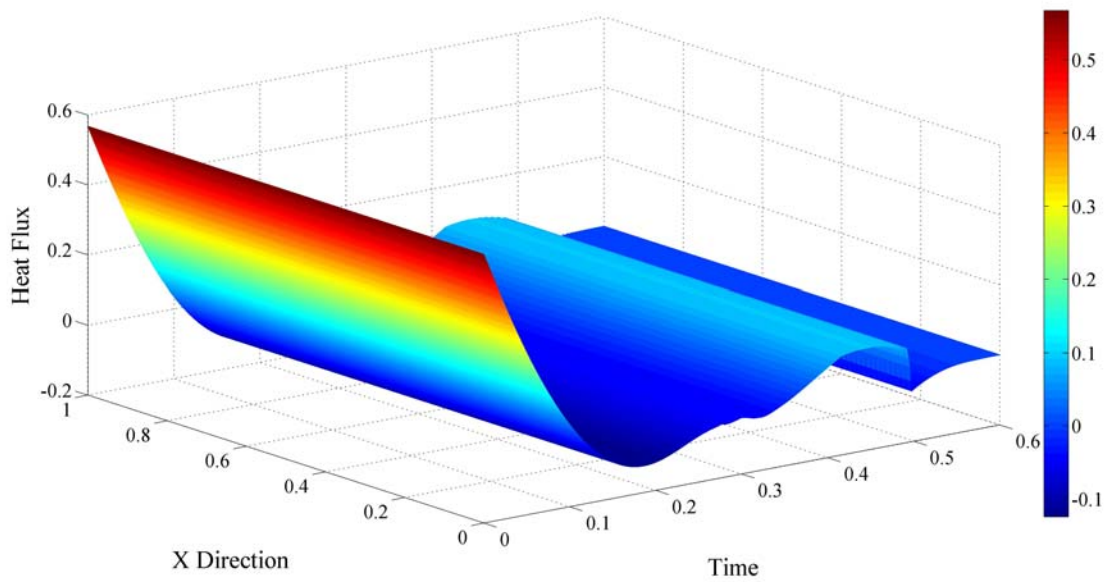
شکل (۵۴-۶): نرخ کاهش تابع هدف در مختصات دو بعدی و سرعت سطح مشترک طبق رابطه (۱۳-۶)

در حالتی که هدف بررسی کنترل سطوح مشترک برای آلیاژها باشد، ابتدا فرض می شود که قالب از آلیاژ با دمای اولیه $T_i = 0$ پر شده و هدف رسیدن به سرعت مطلوب سطوح مشترک باشد. برای این منظور ابتدا فرض می کنیم که مقدار سرعت مطلوب برای سطح مشترک جامد-میانی (Solidus) $V_s = 1$ و برای سطح مشترک میانی-مایع (Liquidus) $V_l = 2$ باشد. شکل (۵۵-۶) نشان دهنده شار حرارتی مورد نیاز در مرز پایینی $(q_s(x,t))$ و مرز بالایی $(q_l(x,t))$ می باشد. نتایج بدست آمده برای موقعیت مطلوب و محاسبه شده سطح مشترک در شکل (۵۶-۶) نمایش داده شده است. میزان درصد خطای متوسط نسبت به حالت مطلوب نیز روی شکل مشخص شده است. با توجه به نتایج بدست آمده در می یابیم که کنترل سرعت و مکان سطح مشترک به درستی و با دقت قابل قبولی صورت گرفته و لذا می توان به آلیاژی با کیفیت و خواص مشخص دست پیدا کرد. کانتورهای دما برای حالتی که سرعت سطوح مشترک سالیدوس و لیکیدوس ثابت باشند در شکل (۵۷-۶) رسم شده است. شکل (۵۸-۶) نیز نشانگر روند کاهش تابع هدف می باشد.

الف

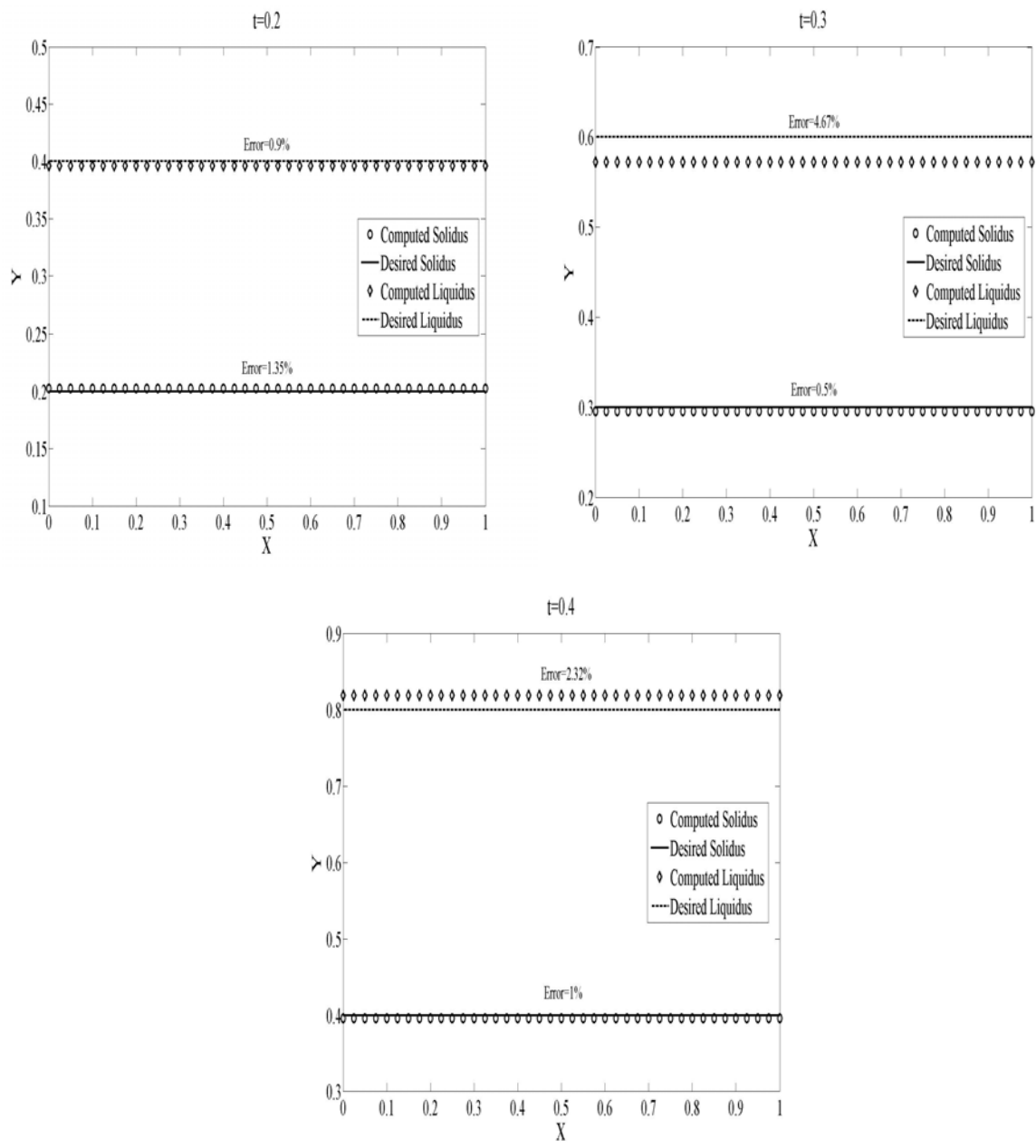


ب.



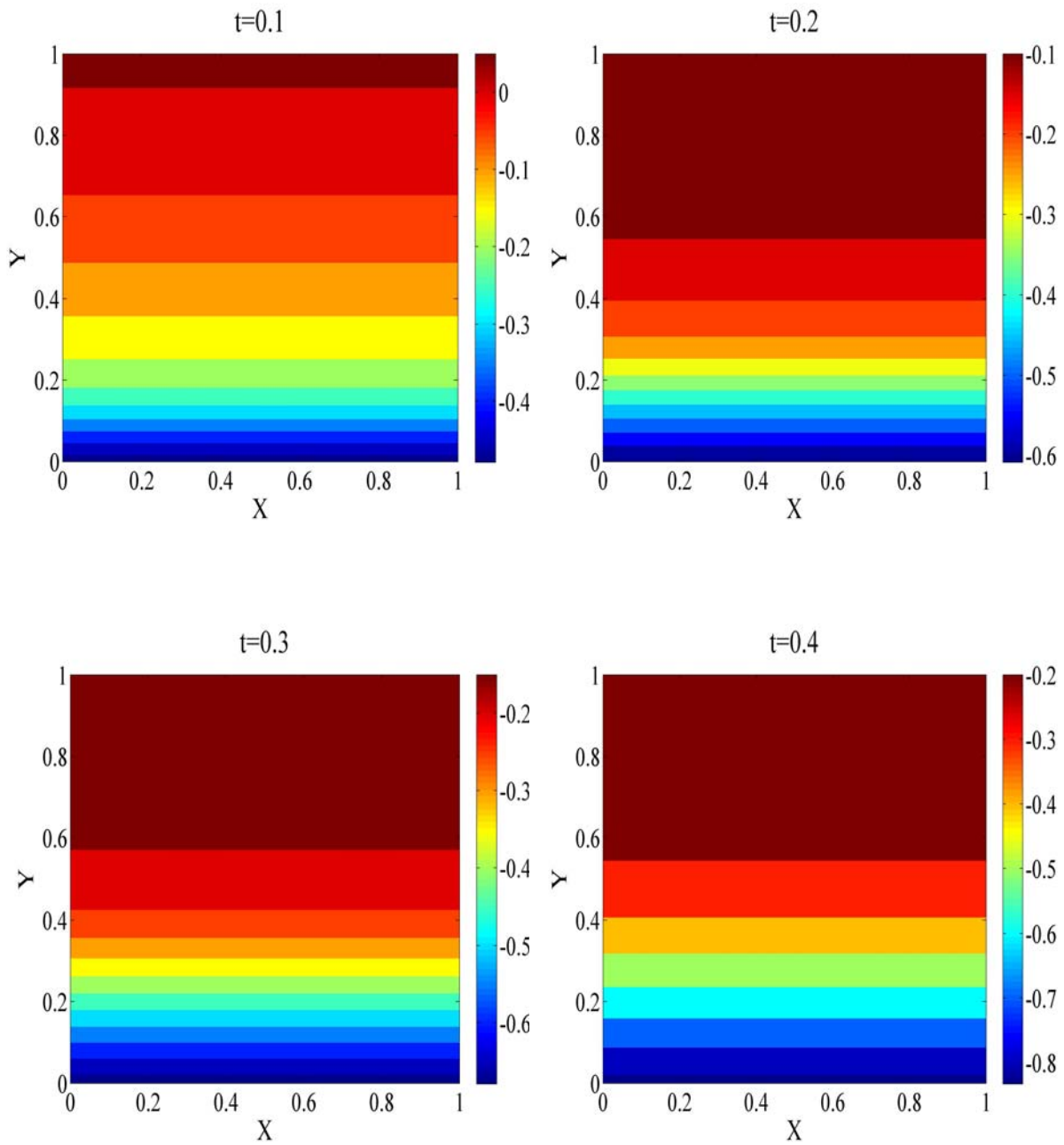
شکل (۶-۵۵): شار حرارتی محاسبه شده برای آلیاژها در مختصات دو بعدی و سرعت ثابت سطوح مشترک الف) شار در مرز

پایینی ب) شار در مرز بالایی

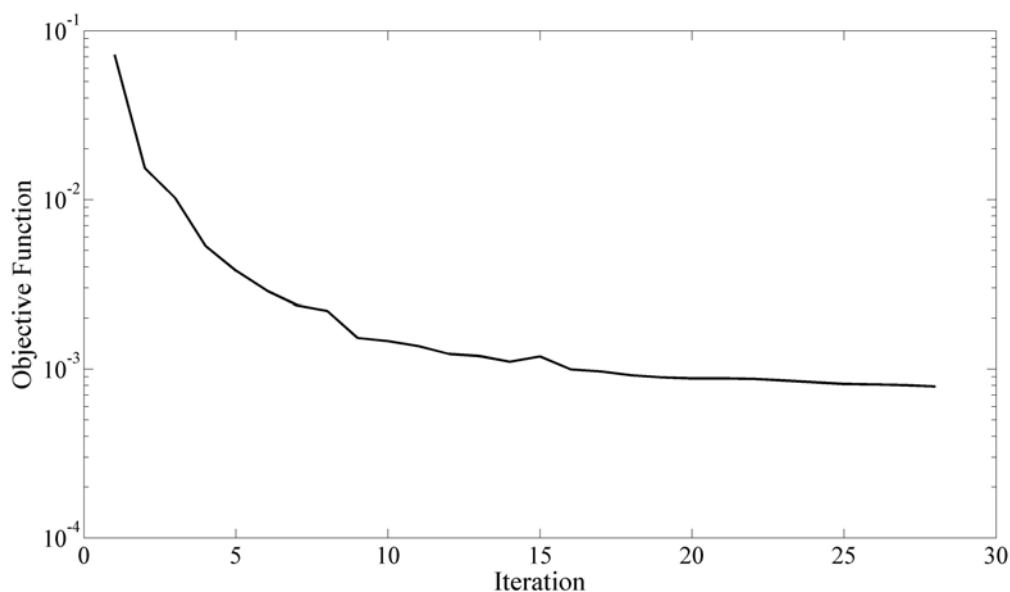


شکل (۶-۵۶): مکانهای مطلوب و محاسبه شده سطوح مشترک برای آلیاژها در مختصات دو بعدی و سرعت ثابت سطوح

مشترک



شکل (۶-۵۷): کانتورهای دما برای سرعت ثابت سطوح مشترک آلیاژها



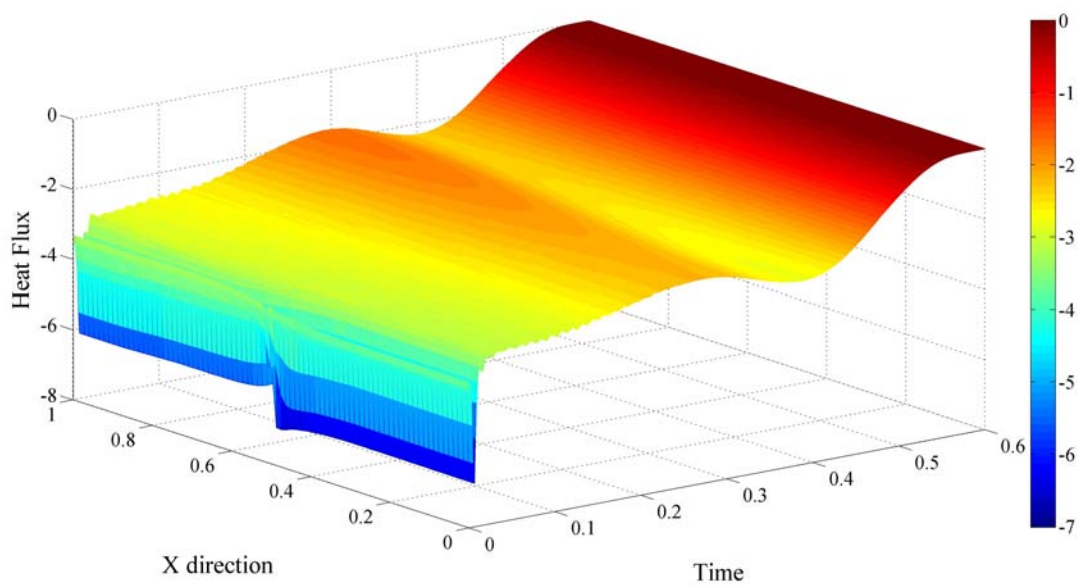
شکل (۶-۵۸): نرخ کاهش تابع هدف برای آلیاژها در مختصات دو بعدی و سرعت ثابت سطوح مشترک

شکل سینوسی سطح مشترک (رابطه (۶-۱۳)) برای انجماد آلیاژها نیز لحاظ شده به نحویکه هر دو سطح سالیدوس و لیکیدوس مطابق رابطه (۶-۱۳) در نظر گرفته شده اند. شار حرارتی در مرزهای بالا و پایین به ترتیب در شکلهای (۶-۵۹ الف و ب) ارائه شده اند.

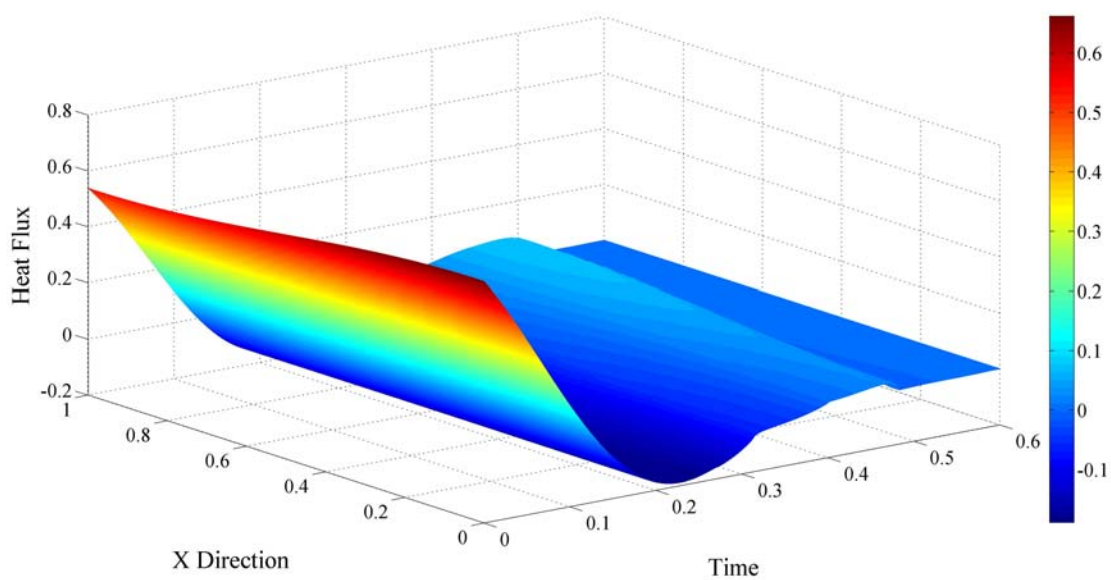
همچنین مکانهای مطلوب و محاسبه شده سطوح مشترک در دو زمان مختلف در شکل (۶-۶۰) نشان داده شده است. مطابق نتایج بدست آمده ملاحظه می شود که حداکثر خطای محاسباتی روش پیشنهادی در کنترل سطوح مشترک بین ۳-۷٪ می باشد. شکل (۶-۶۱) نیز نشان دهنده کانتورهای دما برای حالت سرعت سطوح مشترک سینوسی می باشد.

با توجه به نتایج حاصله می توان گفت که با استفاده از روش پیشنهاد شده در این رساله می توان کیفیت قطعات تولید شده در حین فرایندهای انجماد را با تنظیم شار حرارتی در مرزها کنترل کرده و به ماده ای با خواص فیزیکی و مکانیکی مطلوبی دست یافت.

الف

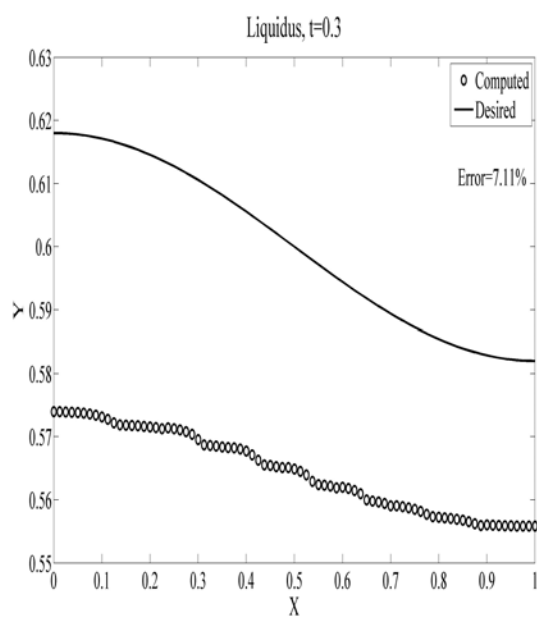
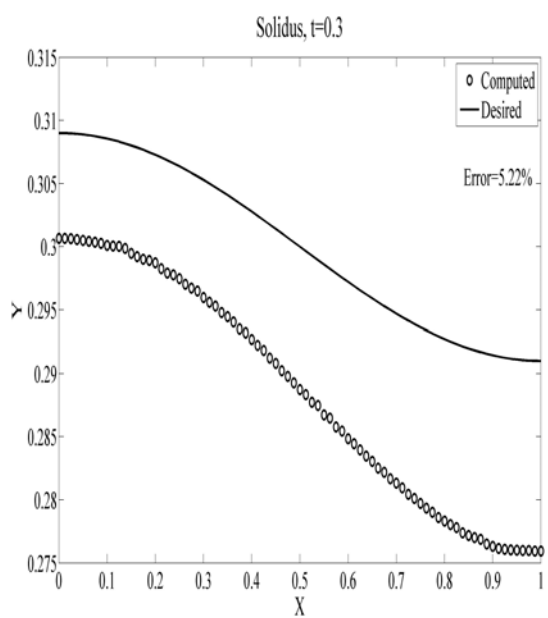
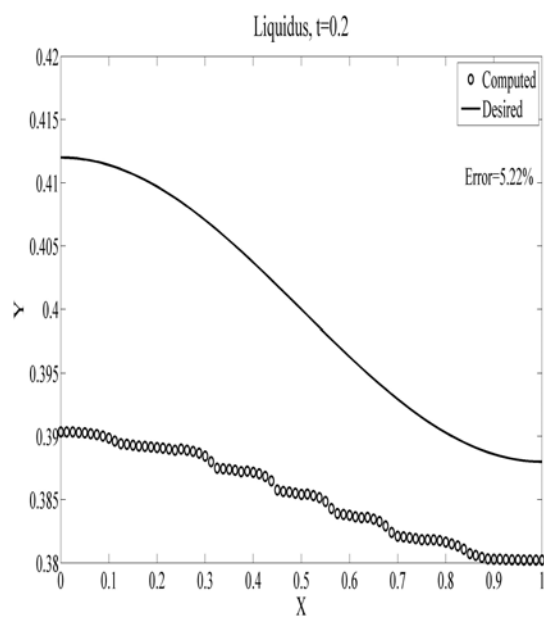
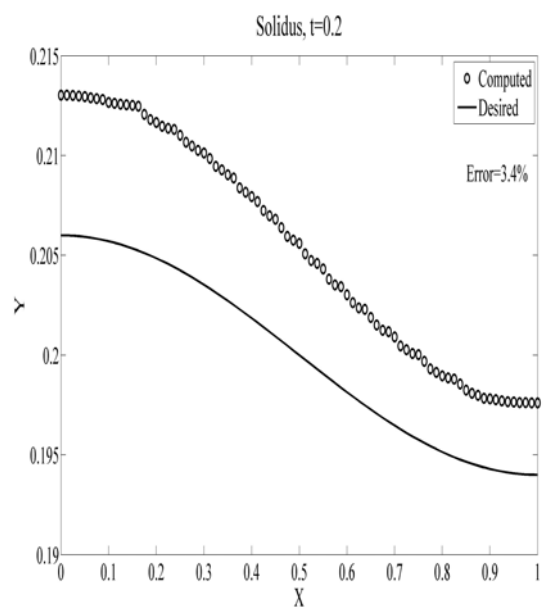


ب.



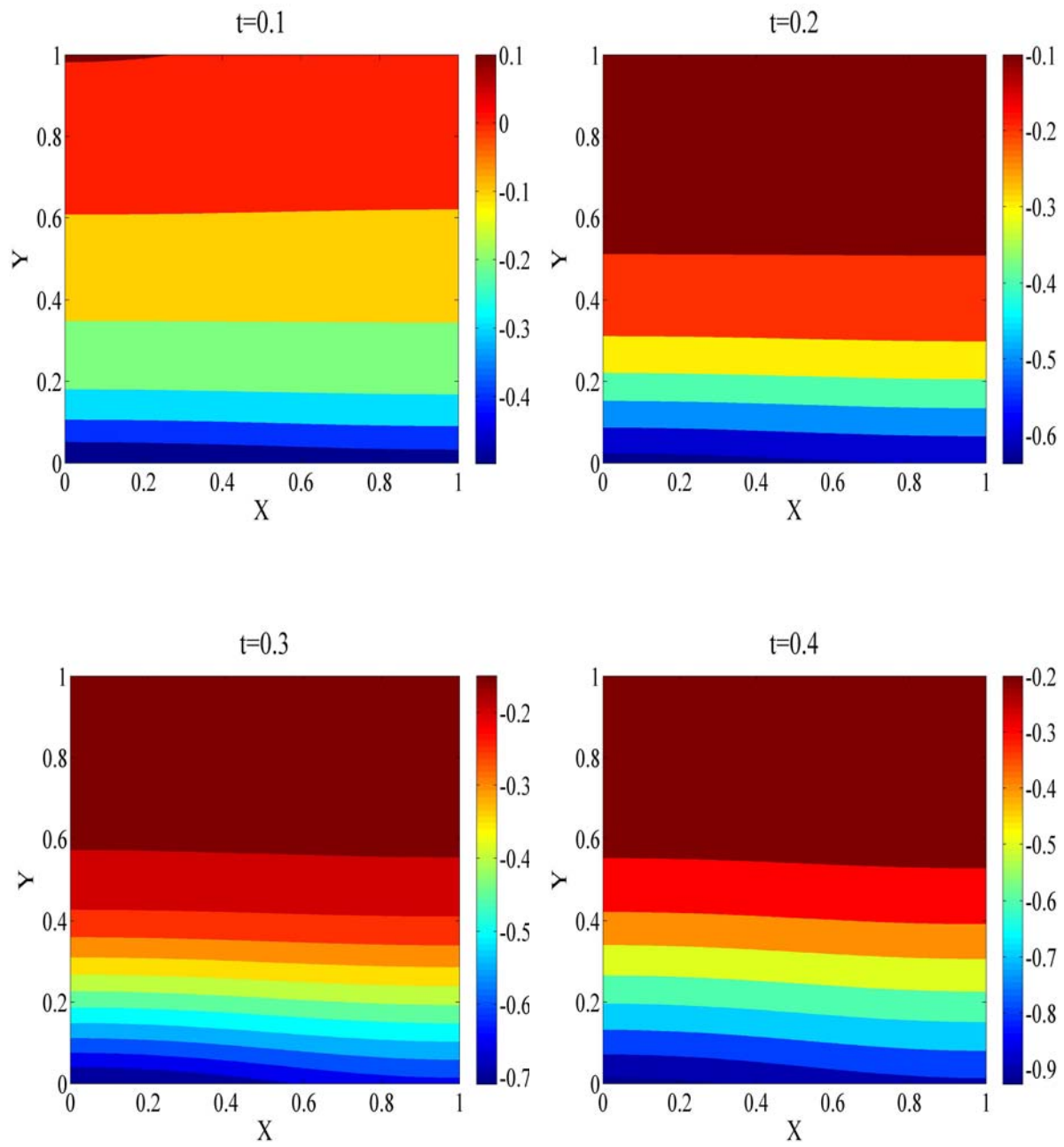
شکل (۶-۵۹): شار حرارتی محاسبه شده برای آلیاژها در مختصات دو بعدی و شکل سینوسی سطوح مشترک الف) شار در

مرز پایینی ب) شار در مرز بالایی



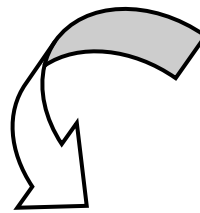
شکل (۶-۶): مکانهای مطلوب و محاسبه شده سطوح مشترک برای آلیاژها در مختصات دو بعدی و شکل سینوسی سطوح

مشترک



شکل (۶-۶): کانتورهای دما برای شکل سینوسی سطوح مشترک آلیاژها

فصل هفتم



نتیجه گیری و پیشنهادات

۷-۱- نتیجه گیری

در این رساله مساله معکوس انجماد برای آلیاژها با در نظر گرفتن اثر ناحیه میانی بررسی شده است. به دلیل کاهش حجم محاسبات و پیش گیری از حل معادلات مساله معکوس برای نواحی جامد، مایع و دوفازی از فرمولاسیون آنتالپی استفاده شده است. تحلیل وارزیابی مساله برای دو گروه مواد خالص و آلیاژها هم در مختصات یک بعدی و هم در مختصات دوبعدی انجام پذیرفته است. برای هر گروه ابتدا مساله برای یک شار حرارتی مشخص و استفاده از یک یا چند حسگر ثابت و ثبت دما در آن نقاط حل شده و پس از تایید صحت و دقت روش، مساله کنترل سطح مشترک مورد تحلیل قرار گرفته است. نحوه کار بدین ترتیب است که ابتدا با اعمال یک شار حرارتی مشخص در یکی از مرزها، دما در نقاط مشخصی از دامنه ثبت شده که دمای مطلوب نام دارند. از آنجا که هدف از حل معکوس در این حالت یافتن شار حرارتی مرزی است که منجر به تولید این توزیع دما در دامنه است، تابع هدف بر مبنای اختلاف میان این دما و دمای محاسبه شده در این نقطه تعریف می شود. به منظور بهینه (کمینه) کردن تابع هدف از روش گرادیان مزدوج به همراه روش الحاقی جهت محاسبه گرادیان تابع هدف استفاده شده است. اساس کار بدین نحو است که ابتدا محاسبات که مبتنی بر یک روش تکراری است از یک حدس اولیه شروع شده و با حرکت در جهت منفی بردار گرادیان تابع هدف (که از حل معادلات الحاقی بدست می آید) به کمینه کردن آن می پردازیم. لازم به ذکر است که در مساله مذکور موقعیت حسگر ثابت می باشد.

پس از تایید اعتبار کد استفاده شده، مساله مربوط به کنترل سرعت و شکل سطح مشترک بررسی شده که در این حالت موقعیت حسگر ثابت نبوده و متحرک است. البته ذکر این نکته ضروری است که در این حالت، دماهای اندازه گیری شده وجود ندارند. در حالت کنترل سطح مشترک از این واقعیت فیزیکی استفاده شده که دما در سطح مشترک جامد-مایع بایستی دمای ذوب، در سطح مشترک سالیدوس دمای

سالیدوس و در سطح مشترک لیکیدوس دمای لیکیدوس باشد. لذا با مشخص بودن سرعت سطح مشترک جهت دستیابی به کیفیت مشخص ماده تحت انجماد، موقعیت سطوح مشترک در هر زمان معلوم بوده و لذا دما در این مکانهای معلوم بایستی مقادیر دمای ذوب، دمای سالیدوس و دمای لیکیدوس باشد. رویه ذکر شده برای انجماد مواد خالص و آلیاژها در مختصات یک بعدی و دو بعدی انجام شده که نتایج آن به شرح ذیل است.

◀ مساله معکوس انجماد مواد خالص در حالت حسگر ثابت برای دو نوع شار حرارتی مثلثی و پله ای تحلیل شده و نتایج بدست آمده حاکی از دقت بسیار خوب روش در بازگرداندن شارهای حرارتی حتی با گرادیان شدید می باشد. مقدار خطای RMS در حدود ۰/۲٪ برای شار مثلثی و ۲٪ برای شار پله ای بوده است.

◀ بررسی ها نشان داد که روش پیشنهادی قابل استفاده برای طیف وسیعی از مواد خالص با اعداد استغان متفاوت بوده و با تغییر جنس ماده، تغییر عمده ای در روند حل مساله بهینه سازی و جوابهای بدست آمده ایجاد نمی شود.

◀ اثر موقعیت قرارگیری حسگرها در این حالت بررسی شده و نتیجه شد که با فاصله گرفتن حسگر از مرز فعال (مرزی که شار حرارتی روی آن اعمال می شود)، دقت روش تا حد قابل ملاحظه ای کاسته می شود. لذا می توان نتیجه گرفت که در حالت کنترل سطح مشترک که حسگر متحرک روی سطح مشترک قرار گرفته، دقت محاسبات نسبت به حالت حسگر ثابت و نزدیک مرز کاهش یابد. ملاحظه شد که تا رسیدن حسگر به مرز بالایی، دقت محاسبه شار حرارتی مثلثی حدود ۵٪ و شار پله ای حدود ۸٪ کاهش می یابد.

◀ به منظور ارزیابی عملکرد روش هنگام آلودگی داده های ورودی به اغتشاش، دماهای اندازه گیری شده به صورت مصنوعی و تصادفی حول همان مقدار نوسان داده شد که نتایج حاکی از عملکرد

مناسب روش با حدود ۱۰٪ اغتشاش در داده های ورودی می باشد. در این حالت، خطای محاسبات به میزان حدود ۱/۲٪ افزایش می یابد.

نتایج بدست آمده نشان داد که روش استفاده شده به توزیع دمای اولیه ناحیه مذاب و همچنین مقدار حدس اولیه روش گرادیان مزدوج وابسته نیست و با اطمینان می تواند برای مذابهایی با دماهای متفاوت استفاده شود. نتایج حاصل برای هر دو نوع شار مثلثی و پله ای تایید شده است.

در حالت کنترل سطح مشترک مواد خالص در مختصات یک بعدی، نتایج بدست آمده با جواب تحلیلی و سایر جوابهای عددی و نیمه تحلیلی موجود در این حالت مقایسه شده است. بررسی های کمی نشان می دهد که روش استفاده شده خطایی معادل ۴٪ در بازگرداندن شار حرارتی و ۰/۵٪ در کنترل سطح مشترک داشته است.

علاوه بر کنترل سرعت سطح مشترک، شتاب سطح مشترک نیز برای حالتی که مکان سطح مشترک تابعی غیر خطی از زمان باشد بررسی شده است. بدلیل عدم وجود جواب تحلیلی برای شار حرارتی در این حالت، شار حرارتی بدست آمده از حل معکوس به عنوان ورودی مساله مستقیم اعمال شده و مکان سطح مشترک محاسبه شده با حالت مطلوب مقایسه شده است. نتایج نشان می دهد که میزان خطای RMS مکان سطح مشترک برای این حالت حدود ۳/۵٪ بوده است.

در انجماد آلیاژها که خواص ترموفیزیکی در آن تابع دما بوده و دارای سه ناحیه با دو مرز متحرک می باشند نیز ابتدا از شارهای مثلثی و پله ای جهت بررسی صحت روش، استفاده شده است. نتایج بدست آمده نشان داد که خطای تخمین شار حرارتی مثلثی در حدود ۰/۵٪ و شار حرارتی پله ای حدود ۴/۵٪ می باشد. شایان ذکر است که در این مساله، دما در دو مکان حسگر ثبت شده است.

◀ نتایج بدست آمده در این حالت نیز نشان داد که با فاصله گرفتن از مرز فعال، دقت تخمین شار حرارتی کاهش می یابد.

◀ با اعمال داده های آلوده به اغتشاش به عنوان دماهای ورودی، ملاحظه شد که نوسان حدود ۲۰٪ در دماهای ورودی می تواند باعث افزایش خطای متوسط در حدود ۵٪ برای شار مثلثی و ۴٪ برای شار پله ای شود.

◀ تحلیل ذکر شده برای آلیاژی متفاوت با خواص فیزیکی متفاوت نیز انجام شده و نتایج بدست آمده بیانگر عدم وابستگی حل به نوع ماده است.

◀ یکی از عوامل مهم در کنترل کیفیت قطعه در انجماد آلیاژها، ضخامت ناحیه میانی است که با کنترل سرعت و حرکت دو سطح مشترک سالیدوس و لیکیدوس می توان به این مهم دست یافت. مقادیر مختلفی از سرعتهای سطوح مشترک که منجر به ضخامتهای مختلفی برای ناحیه میانی می شود مورد ارزیابی قرار گرفته و نتایج نشان دهنده دقت حدود ۴-۷٪ برای کنترل ضخامت این ناحیه می باشند. شارهای حرارتی بدست آمده در دو مرز سمت جامد و مایع نشان داد که همواره در مرز پایین شار خنک کن و در مرز بالایی در لحظاتی از زمان شبیه سازی نیازمند گرمایش هستیم. دلیل این امر توزیع دمای اولیه ناحیه مذاب بوده و اینکه برای داشتن سرعت مناسب سطح مشترک سالیدوس در ابتدا نیاز به یک شار حرارتی خنک کن بسیار زیاد داریم. لذا در لحظات ابتدایی به منظور کنترل سرعت سطح لیکیدوس و رسیدن آن به مقدار سرعت طراحی نیاز به گرمایش در سطح بالایی داریم چراکه مقدار شار خنک کن بسیار زیاد در مرز پایینی باعث خروج سرعت لیکیدوس از مقدار طراحی می شود.

◀ در مختصات دو بعدی نیز ابتدا از یک شار حرارتی معلوم برای تولید داده های اندازه گیری شده استفاده شده و سپس توسط روش معکوس ذکر شده، شار حرارتی معلوم با دقت بسیار خوبی

تخمین زده شده است. این شار حرارتی دارای شکلی مثلثی در حوزه زمان و سینوسی در حوزه مکان می باشد. با دقت در جوابهای بدست آمده مشخص است که نتایج حاصل از دقت بسیار بالایی برخوردار هستند و تنها در گره های نزدیک به مرزها دقت محاسبات اندکی کاهش می یابد.

◀ علاوه بر تخمین شار حرارتی معلوم، مساله کنترل سرعت و شکل سطح مشترک برای مواد خالص و آلیاژها انجام پذیرفت. نتایج بدست آمده نشان دهنده دقت قابل قبول روش در کنترل سرعت و شکل سینوسی سطح مشترک است.

با توجه به موارد ذکر شده می توان نتیجه گرفت که با استفاده از روش پیشنهاد شده در این رساله می توان کیفیت و خواص مواد تحت انجماد را با دقت خوبی کنترل کرد.

۷-۲- پیشنهادات برای پژوهشهای آینده

با ملاحظه آنچه در این رساله ذکر شد، مواردی برای بهبود و ادامه این پژوهش به شرح ذیل پیشنهاد می شوند:

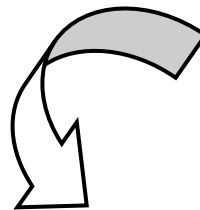
◀ کنترل شار حرارتی مرزی در مختصات سه بعدی برای مواد خالص و آلیاژها که مورد اول برای حالتی که شار حرارتی معلوم برای تولید دماهای اندازه گیری استفاده می شود انجام پذیرفته و نتایج خوبی حاصل شده است.

◀ استفاده از سایر روشهای بهینه سازی با دقت بیشتر مانند روش میزان متغییر برای بهینه سازی تابع هدف. (برای مواد خالص در حال انجام است)

◀ با توجه به اینکه در این رساله فقط انجماد جهتی رو به بالا در نظر گرفته شده، پیشنهاد می شود اثر جریان سیال و جابجایی طبیعی نیز برای ادامه کار در نظر گرفته شود.

- ◀ استفاده از میدانهای مغناطیسی و گرادیان آن برای کنترل سرعت سطح مشترک آلیاژها.
- ◀ با توجه به محدود بودن جوابهای تحلیلی و نیمه تحلیلی برای این گونه مسائل، تحقیق در مورد امکان حل تحلیلی مساله مربوط به آلیاژها.(در دست اقدام)
- ◀ امکان سنجی و انجام یک کار آزمایشگاهی برای کنترل کیفیت مواد تحت انجماد.

ضمیمه الف



**ارزیابی دقت روش
تفاضلات محدود فشرده**

الف-۱- ارزیابی دقت روش رانگ کوتای مرتبه سوم فشرده

به منظور ارزیابی دقت بالای روش ارائه شده، حل معادله دیفرانسیل زیر که با دو روش صریح و رانگ کوتای مرتبه سوم حل شده است مقایسه می شود:

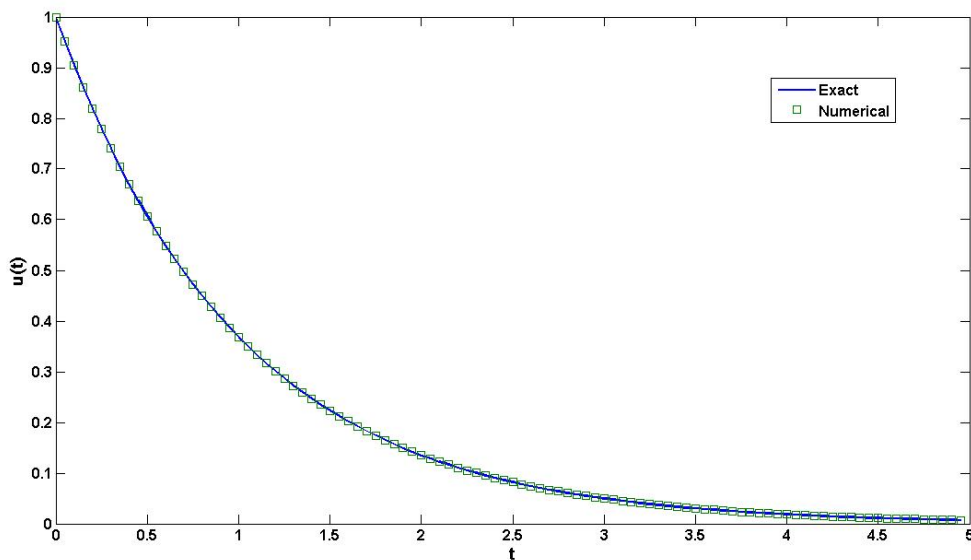
$$\frac{du}{dt} = -u(t) = -e^{-t} = R(u) \quad \text{(الف-۱)}$$

جواب دقیق معادله فوق با شرایط اولیه $u(0) = 1$ ، $u(t) = e^{-t}$ خواهد بود. با توجه به معادله (الف-۱) و شرط اولیه آن و با استفاده از روش اختلاف زمانی رانج کوتای مرتبه سوم فشرده، مطابق با جدول (۵-۱)، مقدار تابع $u(t)$ در زمان $t = 0.1$ با گام زمانی $\Delta t = 0.1$ به صورت جدول (الف-۱) محاسبه گردیده است. شایان ذکر است که مقدار دقیق تابع در $t = 0.1$ برابر با $u(0.1) = 0.904837$ می باشد.

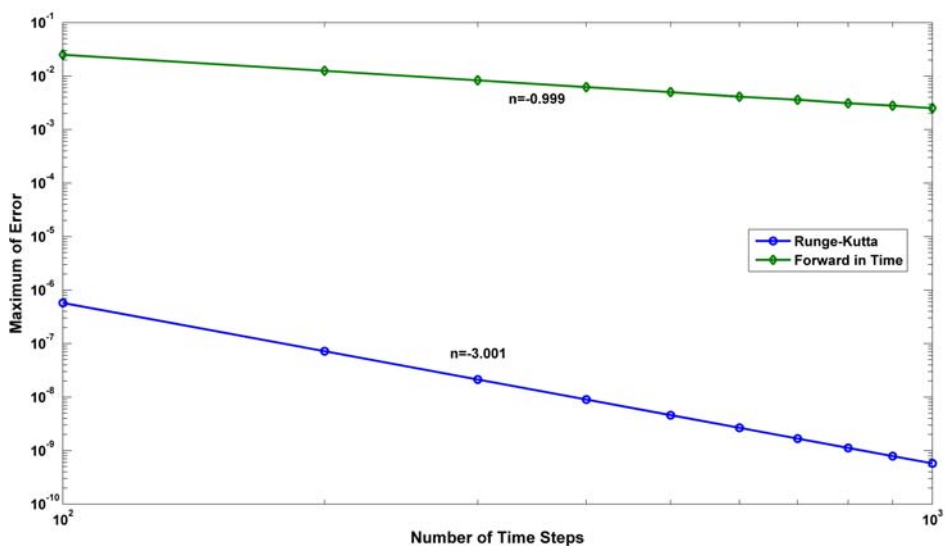
شکل (الف-۱) مقایسه بین نتایج عددی حاصل از روش رانج کوتای مرتبه سوم و حل دقیق تابع مدل را نشان می دهد. همچنین ماکزیمم خطا بین نتایج عددی حاصل از روش رانگ کوتا و روش صریح در شکل (الف-۲) رسم شده که به روشنی نشان دهنده صحیح بودن دقت مرتبه سوم این طرح می باشد.

جدول (الف-۱): طرح پیشروی زمانی رانج کوتای مرتبه سوم در یک گام زمانی

زمان	اولین موقعیت	دومین موقعیت
$t^n = 0$	$u^n = 1$	$R(1) = -1$
$t' = 0.0533$	$u' = 0.9466$	$R' = R(u') = -0.9480639$
$t'' = 0.066$	$u'' = 0.935497$	$R'' = R(u'') = -0.9355069$
$t^{n+1} = 0.1$	$u^{n+1} = 0.904836$	



شکل (الف-۱): مقایسه بین نتایج عددی حاصل از روش رانج کوتاه و حل دقیق تابع مدل



شکل (الف-۲): مرتبه دقت طرح پیشروی زمانی برای معادله مدل

الف-۲- مقایسه دقت روشهای تفاضلات محدود فشرده

به منظور ارزیابی دقت روش عددی مذکور و مقایسه آن با سایر روشهای عددی معمول، معادله مدل زیر به همراه شرایط مرزی و اولیه متناسب به شکل زیر را در نظر می‌گیریم.

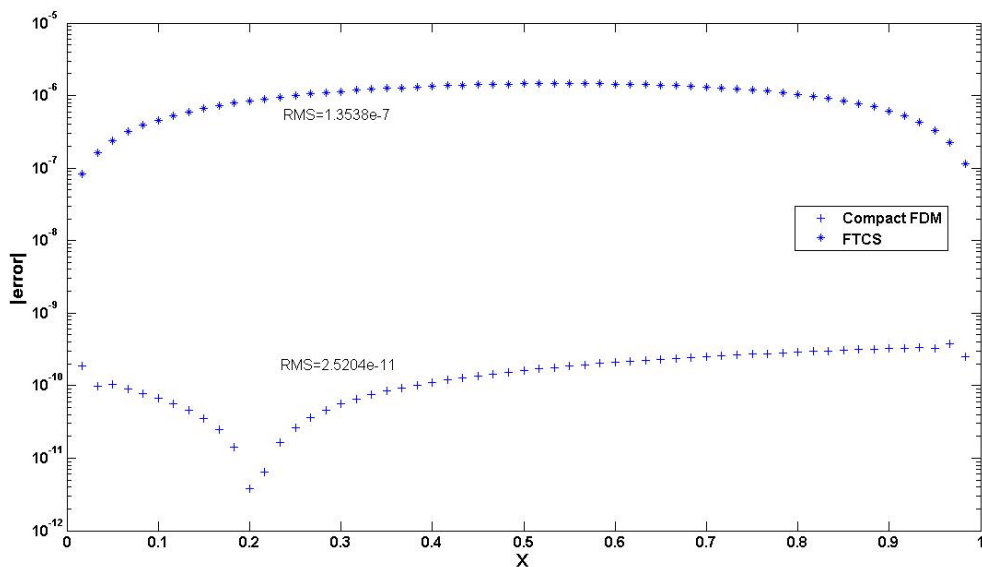
$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad \text{(الف-۲)}$$

$$T(x=0) = e^t \quad \text{(الف-۳)}$$

$$T(x=1) = e^{t+1} \quad \text{(الف-۴)}$$

$$T(t=0) = e^x \quad \text{(الف-۵)}$$

جواب دقیق مساله مفروض برابر با $T = e^{x+t}$ خواهد بود. معادله فوق به همراه شرایط مرزی و شرط اولیه فوق به هر دو روش تفاضلات محدود فشرده و همچنین طرح صریح $FTCS^1$ حل شده است. مقایسه ای بین خطای روش تفاضلات محدود فشرده و همچنین روش FTCS نسبت به حل دقیق در شکل (الف-۳) نمایش داده شده است. بر طبق نتایج ارائه شده بسیار واضح است که استفاده از این طرح عددی تفاضلات محدود فشرده به میزان قابل توجهی باعث کاهش خطای محاسبات عددی خواهد شد.



شکل (الف-۳): مقایسه خطای حاصل از روش تفاضلات محدود فشرده و روش FTCS برای معادله مدل (الف-۲)

¹ Forward in Time-Central Space

مراجع

1. Alifanov, O.M. (1994), **“Inverse Heat Transfer Problems”**, Berlin: Springer Verlag.
2. Beck, J.V., B. Blackwell, and C. Clair (1985), **“Inverse Heat Conduction : ill Posed Problems”**, New York: John wiley & Sons.
3. Ozisik, M.N. and H.R.B. Orlande (2000), **“Inverse Heat Transfer, Fundamentals and Applications”**, Taylor & Francis.
4. Flemings, M.C. (1974), **“Solidification Processing”**, New York: McGraw-Hill.
5. Xu, R. and G.F. Naterer (2004), “Controlled interface acceleration in unidirectional solidification”, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, 47(22), pp. **4821-4832**.
6. Zabarar, N., S. Mukherjee, and S. Richmond (1988), “An Analysis of Inverse Heat Transfer Problems with Phase Changes Using an Integral Method”, **Journal of Heat Transfer**, **110**, pp. **554-561**.
7. Ren, H. S. (2007), “Application of the heat-balance integral to an inverse Stefan problem” **International Journal of Thermal Sciences**, **46(2)**, pp. **118-127**.
8. Tadrari, O. and M. Lacroix (2006), “Prediction of protective banks in high temperature smelting furnaces by inverse heat transfer”, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, **49(13-14)**, pp. **2180-2189**.
9. Grzymkowski, R. and D. Slota (2006), “One-phase inverse stefan problem solved by adomian decomposition method”, **Computers & Mathematics with Applications**, **51(1)**, pp. **33-40**.
10. Slota, D. (2007), “Direct and inverse one-phase Stefan problem solved by the variational iteration method”, **Computers & Mathematics with Applications**, **54(7-8)**, pp. **1139-1146**.
11. Slodicka, M. and H. De Schepper (2005), “Determination of the heat-transfer coefficient during solidification of alloys”, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, **194(2-5)**, pp. **491-498**.
12. Ruan, Y., J.C. Liu, and O. Richmond (1994), “Determining the Unknown Cooling Condition and Heat Transfer Coefficient During Solidification of Alloys”, **Inverse Problems in Engineering**, **1**, pp. **45-69**.
13. Telejko, T. (2004), “Analysis of an inverse method of simultaneous determination of thermal conductivity and heat of phase transformation in steels”, **Journal of Materials Processing Technology**, **155-156**, pp. **1317-1323**.
14. Majchrzak, E., J. Mendakiewicz, and A.P. Belkhat (2005), “Algorithm of the mould thermal parameters identification in the system casting-mould-environment”, **Journal of Materials Processing Technology**, **164-165**, pp. **1544-1549**.

15. Spinelli, J.E., I.L. Ferreira, and A. Garcia (2006), "Evaluation of heat transfer coefficients during upward and downward transient directional solidification of Al-Si alloys", **Structural and Multidisciplinary Optimization**, **31(3)**, pp. 241-248.
16. Santos, C.A., J.M.V. Quaresma, and A. Garcia (2001), "Determination of transient interfacial heat transfer coefficients in chill mold castings", **Journal of Alloys and Compounds**, **319(1-2)**, pp. 174-186.
17. Santos, C.A., C.A. Siqueira, A. Garcia, J.M.V. Quaresma and J.A. Spim (2004), "Metal-mold heat transfer coefficients during horizontal and vertical Unsteady-State solidification of Al–Cu and Sn–Pb Alloys", **Inverse Problems in Science and Engineering**, **12(3)**, pp. 279 - 296.
18. Bialobrzewski, I. (2006), "Determination of the heat transfer coefficient by inverse problem formulation during celery root drying", **Journal of Food Engineering**, **74(3)**, pp. 383-391.
19. de Souza, E.N., N. Cheung, C.A. Santos and A. Garcia (2005), "Factors affecting solidification thermal variables along the cross-section of horizontal cylindrical ingots", **Materials Science and Engineering A**, **397(1-2)**, pp. 239-248.
20. Ferreira, I.L., J.E. Spinelli, J.C. Pires and A. Garcia (2005), "The effect of melt temperature profile on the transient metal/mold heat transfer coefficient during solidification", **Materials Science and Engineering A**, **408(1-2)**, pp. 317-325.
21. Huang, C.H., M.N. Ozisik, and B. Sawaf (1992), "Conjugate gradient method for determining unknown contact conductance during metal casting", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, **35(7)**, pp. 1779-1786.
22. Krishnan, M. and D.G.R. Sharma (1996), "Determination of the interfacial heat transfer coefficient h in unidirectional heat flow by Beck's non linear estimation procedure", **International Communications in Heat and Mass Transfer**, **23(2)**, pp. 203-214.
23. Loulou, T., E.A. Artyukhin, and J.P. Bardon (1999), "Estimation of thermal contact resistance during the first stages of metal solidification process: I--experiment principle and modelisation", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, **42(12)**, pp. 2119-2127.
24. Martorano, M.A. and J.D.T. Capocchi (2000), "Heat transfer coefficient at the metal-mould interface in the unidirectional solidification of Cu-8%Sn alloys", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, **43(14)**, pp. 2541-2552.
25. O'Mahoney, D. and D.J. Browne (2000), "Use of experiment and an inverse method to study interface heat transfer during solidification in the investment casting process", **Experimental Thermal and Fluid Science**, **22(3-4)**, pp. 111-122.
26. Sahin, H.M., K. Kocatepe, R. Kayikci and N. Akar (2006), "Determination of unidirectional heat transfer coefficient during unsteady-state solidification at metal casting-chill interface", **Energy Conversion and Management**, **47(1)**, pp. 19-34.

27. Yin, H. and M. Yao (2007), "Inverse problem-based analysis on non-uniform profiles of thermal resistance between strand and mould for continuous round billets casting", **Journal of Materials Processing Technology**, **183(1)**, pp. **49-56**.
28. Zabararas, N. (1994), "Dynamic programming approach to the inverse Stefan design problem", **Numerical Heat Transfer**, **26**, pp. **97-104**.
29. Zabararas, N. (1992), "On the design of two-dimensional Stefan processes with desired freezing front motions", **Numerical Heat Transfer**, **21**, pp. **307-325**.
30. Kang, S. and N. Zabararas (1995), "Control of the freezing interface motion in two-dimensional solidification processes using the adjoint method", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, **38**, pp. **63-80**.
31. Zabararas, N. and H.T. Enguyen (1995), "Control of the freezing interface morphology in solidification processes in the presence of natural convection", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, **38**, pp. **1555-1578**.
32. Zabararas, N. and G.Z. Yang (1997), "A functional optimization formulation and implementation of an inverse natural convection problem", **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, **144(3-4)**, pp. **245-274**.
33. Yang, G.Z. and N. Zabararas (1998), "An adjoint method for the inverse design of solidification processes with natural convection", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, **42**, pp. **1121-1144**.
34. Yang, G.Z. and N. Zabararas (1998), "The Adjoint Method for an Inverse Design Problem in the Directional Solidification of Binary Alloys", **Journal of Computational Physics**, **140(2)**, pp. **432-452**.
35. Sampath, R. and N. Zabararas (2001), "Adjoint variable method for the thermal design of eutectic directional solidification processes in an open-boat configuration", **Numerical Heat Transfer**, **39**, pp. **655-683**.
36. Sampath, R. and N. Zabararas (2001), "Inverse thermal design and control of solidification processes in the presence of a strong external magnetic field", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, **50**, pp. **2489-2520**.
37. Ganapathysubramanian, B. and N. Zabararas (2005), "Control of solidification of non-conducting materials using tailored magnetic fields", **Journal of Crystal Growth**, **276(1-2)**, pp. **299-316**.
38. Ganapathysubramanian, B. and N. Zabararas (2005), "On the control of solidification using magnetic fields and magnetic field gradients", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, **48(19-20)**, pp. **4174-4189**.
39. Hale, S.W., M. Keyhani, and J.I. Frankel (2000), "Design and control of interfacial temperature gradients in solidification", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, **43(20)**, pp. **3795-3810**.
40. Xu, R. and G.F. Naterer (2005), "Deterministic physical influence control of interfacial motion in thermal processing of solidified materials", **Experimental Thermal and Fluid Science**, **29(2)**, pp. **227-238**.

41. Slota, D., "Using genetic algorithms for the determination of an heat transfer coefficient in three-phase inverse Stefan problem", **International Communications in Heat and Mass Transfer**. In Press, Uncorrected Proof: pp. 4423.
42. Xu, R. and G.F. Naterer (2001), "Inverse method with heat and entropy transport in solidification processing of materials", **Journal of Materials Processing Technology**, **112(1)**, pp. **98-108**.
43. Okamoto, K. and B.Q. Li (2007), "A regularization method for the inverse design of solidification processes with natural convection", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, **50(21-22)**, pp. **4409-4423**.
44. Hinze, M. and S. Ziegenbalg (2007), "Optimal control of the free boundary in a two-phase Stefan problem", **Journal of Computational Physics**, **223(2)**, pp. **657-684**.
45. Okamoto, K. (2005), Ph.D. Thesis, "**Optimal Numerical Methods for Inverse Heat Conduction and Inverse Design Solidification Problems**", in School of Mechanical and Materials Engineering, Washington State University: Washington.
46. Samanta, D. (2006), Ph.D. Thesis, "**Computational techniques for the analysis and control of alloy solidification processes**", in Sibley School of Mechanical and Aerospace Engineering, Cornell University.
47. Sampath, R. (2001), Ph.D. Thesis, "**On the design and control of directional binary alloy solidification processes in the presence of a strong magnetic field**", in Sibley School of Mechanical and Aerospace Engineering, Cornell University.
48. Xu, R. (2003), Ph.D. Thesis, "**Deterministic Physical Influence Control of Interface Motion in Solidification Processes with Temperature Measurements**", in Department of Mechanical and Industrial Engineering, University of Manitoba: Manitoba.
49. Yang, Z. (1997), Ph.D. Thesis, "**The adjoint method for the inverse design of solidification processes with convection**", in Sibley School of Mechanical and Aerospace Engineering, Cornell University.
50. Ozisik, M.N. (1993), "**Heat Conduction**", New York: John Wiley & Sons.
51. Hill, J.M. and J.N. Dewynne (1987), "**Heat Conduction**", Blackwell Scientific Publication.
52. Shumakov, N.V. (1957), "A Method for Experimental Study of the Process of Heating in Solid Body", **Soviet Physics Technical Physics**, **2**, pp. **771-781**.
53. Stolz, G.J. (1960), "Numerical solutions to an inverse problem of heat conduction for simple shapes", **ASME Journal of Heat Transfer**, **82**, pp. **20-26**.
54. Mirsepassi, T.J. (1959), "Graphical evaluation of a convolution integral", **Mathematical Tables. and Other Aids to Computation**, pp. **202-212**.
55. Mirsepassi, T.J. (1959), "Heat-transfer charts for time-variable boundary conditions--semiinfinite solid", **British Chemical Engineering**, **4**, pp. **130-136**.

56. Blackwell, B.F. (1980), "An Efficient Technique for the Solution of the One - Dimensional Inverse Problem of Heat Conduction", **Technical Report**, Sandia Laboratories, Thermal Test and Analysis Division.
57. Imber, M. (1973), "A Temperature Extrapolation Method for the Hollow Cylinders", **AIAA Journal**, **11**, pp. 117-118.
58. Beck, J.V. (1962), "Calculation of Surface Heat Flux from an Internal Temperature History", **ASME Paper**, **62HT**, pp. 40.
59. Beck, J.V. (1968), "Surface Heat Flux Determination using an Integral Method", **Nuclear Engineering Design**, **7**, pp. 170-178.
60. Shidfar, A., G.R. Karamali, and J. Damirchi (2006), "An Inverse Heat Conduction Problem with a Nonlinear Source Term", **Nonlinear Analysis**, **65**, pp. 615-621.
61. Park, H.M. and O.Y. Chung (1999), "Comparison of Various Conjugate Gradient Methods for Inverse Heat Transfer Problems", **Chemical Engineering Communications**, **176(1)**, pp. 201 - 228.
62. Jarny, Y., M.N. Ozisik and J.P. Bardou (1991), "A General Optimization Method Using Adjoint Equation for Solving Multidimensional Inverse Heat Conduction", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, **34**, pp. 3387-3408.
63. Huang, C.-H. and S.-P. Wang (1999), "A three-dimensional inverse heat conduction problem in estimating surface heat flux by conjugate gradient method", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, **42(18)**, pp. 3387-3403.
64. Xiang, X. (2003), Ph.D. Thesis, "**Improvement of heat flux and heat conductance estimation with application to metal casting**", in Mechanical Engineering Department, Mississippi state university: Mississippi.
65. Shidfar, A. and A. Zakeri (2005), "A numerical technique for backward inverse heat conduction problems in one-dimensional space", **Applied Mathematics and Computation**, **171(2)**, pp. 1016-1024.
66. Kowsary, F., A. Behbahaninia, and A. Pourshaghaghay (2006), "Transient heat flux function estimation utilizing the variable metric method", **International Communications in Heat and Mass Transfer**, **33(6)**, pp. 800-810.
67. Kowsary, F., K. Pooladvand, and A. Pourshaghaghay (2007), "Regularized variable metric method versus the conjugate gradient method in solution of radiative boundary design problem", **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, **108(2)**, pp. 277-294.
68. Pourshaghaghay, A., K. Pooladvand, F. Kowsary and K. Karimi-Zand (2006), "An inverse radiation boundary design problem for an enclosure filled with an emitting, absorbing, and scattering media", **International Communications in Heat and Mass Transfer**, **33(3)**, pp. 381-390.

69. Egger, H, Y. Heng, W. Marquardt, A. Mhamdi (2009), "Efficient solution of a three-dimensional inverse heat conduction problem in pool boiling", **Inverse Problems**, **25**.
70. Heng, Y., A. Mhamdi, S. Gross, A. Reusken, M. Buchholz, H. Auracher and W. Marquardt (2008), "Reconstruction of local heat fluxes in pool boiling experiments along the entire boiling curve from high resolution transient temperature measurements", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, **51(21-22)**, pp. **5072-5087**.
71. Heng, Y., A. Mhamdi, E. Wagner, P. Stephan and W. Marquardt (2010), "Estimation of local nucleate boiling heat flux using a three-dimensional transient heat conduction model", **Inverse Problems in Science and Engineering**, **18**, pp. **279-294**.
۷۲. پورشقاقی، ع. (۱۳۸۴)، رساله دکتری، "حل مساله هدایت حرارتی معکوس با استفاده از روش میزان متغیر"، دانشکده فنی دانشگاه تهران.
۷۳. سوری، ع. (۱۳۸۶)، پایان نامه کارشناسی ارشد، "شبیه سازی فرآیندهای انجماد فلزات با استفاده از روش انتقال حرارت معکوس به منظور تخمین ضریب انتقال حرارت رسانشی مشترک"، دانشکده مکانیک، دانشگاه صنعتی شاهرود.
۷۴. متین، م. (۱۳۸۶)، پایان نامه کارشناسی ارشد، "تعیین ضریب هدایت حرارتی قطعه مدور در حین عملیات حرارتی به روش حل معکوس"، پایان نامه کارشناسی ارشد، دانشکده مکانیک، دانشگاه صنعتی شاهرود.
۷۵. بهبهانی نیا، ع. (۱۳۷۹)، رساله دکتری، "حل مساله هدایت حرارتی معکوس با استفاده از روش تخمین متوالی توابع و تقابل دوگانه المانهای مرزی"، دانشکده فنی دانشگاه تهران.
76. Tikhonov, A.N. and V.Y. Arsenin (1977), "Solution of Ill-Posed Problems", Washington DC: Winston & Sons.
77. Tadrari, O. and M. Lacroix (2006), "Prediction of protective banks in high temperature smelting furnaces by inverse heat transfer", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, **49(13-14)**, pp. **2180-2189**.
78. Hsu, T.R., N.S. Sun, and G.G. Chen (1992), "Mathematical modeling of two dimensional inverse heat conduction analysis", **ASME Journal of Heat Transfer**, **114**, pp. **553-557**.
79. Tikhonov, A.N., V.D. Kalner, and V.B. Glasko (1990), "Mathematical Modeling of Technology Processes and Inverse Problems in Mathematical Engineering", Moscow: Mashinostroienei.
80. Kurpisz, K. and A.J. Newak (1995), "Inverse Thermal Problems", Southampton: Computational Mechanics Publication.
81. Maghrebi, M.J. (1999), Ph.D. Thesis, "A Study of the Evolution of Intense Focal Structures in Spatially Developing Three-Dimensional Plane Wakes", Monash University, Clayton, Victoria, Australia.

82. Ozisik, M.N. (1993), "**Heat Conduction**", New York: John Wiley & Sons.

Abstract

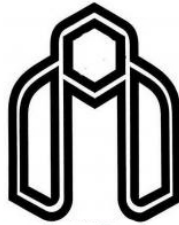
Solidification occurs in many industrial processes such as casting and welding. The macro-scale physical properties of the solidified material depend on its micro-scale structure. The product micro-structure during solidification is largely dependent on several factors such as cooling rate, temperature gradient at the interface, surface tension and interface velocity.

We need to control the solidification processes in order to assure the quality and reliability of the solidified product. The solid-liquid interface velocity in pure material solidification and mushy zone thickness in alloy solidification are the most important factors which affect the product micro-structures and quality. The main objective of this research is the control of the above mentioned parameters to reach the desired material quality during solidification of pure and alloy materials. Thus, it is essential to compute the boundary conditions which lead to desired interface velocity and mushy zone thickness. These problems are classified in the Inverse Heat Transfer Problems (IHTP).

The effect of mushy zone thickness is ignored in all previous researches subject to the application of IHTP in solidification processes. The mushy zone is a two phase region with solid fraction dependent (temperature) properties. The main goal of the thesis is to control the mushy zone thickness using IHTP. The objective function is defined based on the difference between desired and computed temperatures at the interface and minimized by Conjugate Gradient Method (CGM).

The enthalpy formulation is used to avoid solving the inverse problem for three regions respectively. The numerical simulation is validated by applying a known boundary heat flux and recording the temperatures inside the domain. Then, this is used for solidification control in one and two dimensional problems.

The numerical results show that the mushy zone thickness, shape and the material quality can be controlled by applying two control heat fluxes at the both mold sides, simultaneously. The obtained heat fluxes to control constant and variable mushy zone thicknesses showed that only cooling is required on solid side and both cooling and heating on liquid side, depending on the mushy zone thickness. Thus the obtained results can be used in many related industries to improve the solidified material quality.



Shahrood
University of
Technology

Shahrood University of Technology

Faculty of Mechanical Engineering

**Control of Solid-Liquid Interface in Solidification Processes using Inverse
Heat Transfer Methods**

Ali Abbas Nejad

Supervisors:

**Dr. Mohammad Javad Maghrebi,
Prof. Hassan Basirat Tabrizi**

July 2010