



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská



Modely fázového pole v materiálových vědách a jejich numerické řešení

Phase field models in materials science and their numerical solution

Diplomová práce

Autor: **Bc. Jan Palán**
Vedoucí práce: **Ing. Pavel Strachota, Ph.D.**
Akademický rok: 2022/2023

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

Student:	Bc. Jan Palán
Studijní program:	Matematické inženýrství
Název práce (česky):	Modely fázového pole v materiálových vědách a jejich numerické řešení
Název práce (anglicky):	Phase field models in materials science and their numerical solution
Jazyk práce:	čeština

Pokyny pro vypracování:

1. Proveďte rešerši a formulujte modely fázového pole používaných pro popis vývoje mikrostruktury materiálů, a to jak pro případ čisté látky, tak slitin.
2. Diskutujte možnosti matematického, resp. algoritmického popisu anizotropního růstu krystalů s různými krystalografickými orientacemi a jejich interakce v jedné oblasti.
3. S použitím kódu vyvinutého v rámci vašeho výzkumného úkolu proveďte systematickou studii vlivu použití nestrukturovaných sítí na výsledky simulací tuhnutí čisté látky.
4. Implementujte vhodné numerické schéma pro řešení zvolené úlohy fázového pole popisující vývoj mikrostruktury ve slitinách.
5. Proveďte výpočetní studii a pokuste se replikovat příslušné experimentální, resp. výpočetní výsledky z literatury ve fyzikálně reálné situaci.

Doporučená literatura:

1. N. Provatas, K. Elder, Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering, WILEY-VCH Verlag GmbH Co. KGaA, 2010.
2. Y. Wang et al., Simulation of Microstructure Evolution in Mg Alloys by Phase-Field Methods: A Review, Crystals (12), 2022, 1305. <https://doi.org/10.3390/cryst12091305>
3. P. Strachota, A. Wodecki, M. Beneš, Focusing the latent heat release in 3D phase field simulations of dendritic crystal growth. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 29 065009 (2021). ISSN: 0965-0393. <https://doi.org/10.1088/1361-651X/ac0f55>.
4. Z. Guo, S. M. Xiong, Study of dendritic growth and coarsening using a 3-D phase field model: Implementation of the Para-AMR algorithm. IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. (84), 2015, 012067.
5. I. Steinbach, Phase-field models in materials science, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. (17), 2009, 073001.
6. F. Moukalled, L. Mangani, M. Darwish et al., The finite volume methods in computational fluid dynamics. Springer, 2016.

Jméno a pracoviště vedoucí diplomové práce:

Ing. Pavel Strachota, Ph.D.
KM FJFI ČVUT v Praze
Trojanova 13
120 00 Praha 2

Jméno a pracoviště konzultanta:

Datum zadání diplomové práce: 31.10.2022

Datum odevzdání diplomové práce: 3.5.2023

Doba platnosti zadání je dva roky od data zadání.

V Praze dne 31.10.2022


.....
garant oboru


.....
vedoucí katedry




.....
děkan

Poděkování:

Chtěl bych zde poděkovat především svému školiteli Ing. Pavlu Strachotovi, Ph.D. za pečlivost, ochotu, lidské i odborné zázemí a hlavně trpělivost při vedení mé diplomové práce. Dále děkuji Ing. Tomáši Jakubcovi za ochotnou pomoc při práci s jeho knihovnou GTMesh.

Čestné prohlášení:

Prohlašuji, že jsem tuto práci vypracoval samostatně a uvedl jsem všechnu použitou literaturu.

V Praze dne 3. května 2023

Palán

Název práce:

Modely fázového pole v materiálových vědách a jejich numerické řešení

Autor: Bc. Jan Palán

Obor: Matematické inženýrství

Druh práce: Diplomová práce

Vedoucí práce: Ing. Pavel Strachota, Ph.D.
KM FJFI ČVUT v Praze, Trojanova 13, 120 00 Praha 2

Abstrakt: Tato diplomová práce se primárně zabývá simulací růstu krystalů při tuhnutí čisté podchlazené látky metodou fázového pole, popisující fázové rozhraní pomocí pozvolné přechodové vrstvy mezi kapalnou a pevnou fází. Nejprve je popsán matematický model i alternativní formulace pomocí Stefanovy úlohy, která explicitně popisuje polohu fázového rozhraní. Používaný anizotropní model pro čistou látku ve třírozměrném případě je založen na Finslerově geometrii. Dále jsou teoretické poznatky rozšířeny o model fázového pole pro tuhnutí binárních slitin. Hlavní náplní této práce je numerické řešení modelů fázového pole na nestruturovaných sítích. K jejich diskretizaci je použita metoda konečných objemů, jejíž výhoda spočívá v tom, že formální odvození semidiskrétního schématu je identické pro jakoukoliv síť. Implementace programu v C++ je založena na použití knihovny GTMesh. Poslední praktická část je věnována vizualizaci získaných numerických výsledků ze studie, jejíž cílem je především srovnání chování modelu fázového pole na nestruturované a strukturované síti.

Klíčová slova: anizotropie, krystalizace, metoda konečných objemů, model fázového pole, nestruturovaná síť, tuhnutí slitin

Title:

Phase field models in materials science and their numerical solution

Author: Bc. Jan Palán

Abstract: This thesis deals with the simulation of crystal growth during solidification of a pure supercooled substance using the phase field method, which describes the phase interface as a smooth transition layer between the liquid and solid state. Firstly, the mathematical model is presented. An alternative formulation using Stefan problem explicitly describes the position of the phase interface. The anisotropic model for pure substance in the three-dimensional case is based on Finsler geometry. Furthermore, the work summarizes the phase field approaches to modeling binary alloy solidification. The main objective is the numerical solution of the phase field models on unstructured meshes. Due to the easy adaptation to an unstructured mesh, the finite volume method is used to discretize models. The implementation of the program in C++ is based on the GTMesh library. Finally, numerical simulations are performed especially to compare the phase field model behavior on an unstructured mesh and on a structured one.

Key words: anisotropy, crystallization, finite volume method, phase field model, unstructured mesh, alloy solidification

Obsah

Úvod	10
1 Matematický a fyzikální model	11
1.1 Stefanova úloha	11
1.2 Model fázového pole pro čistou látku	14
1.2.1 Odvození modelu	16
1.2.2 Varianty reakčního členu	21
1.2.3 Anizotropie	22
1.3 Model fázového pole pro binární slitiny	26
1.3.1 Izotermická formulace	27
1.3.2 Neizotermická formulace	29
2 Numerický algoritmus	33
2.1 Numerické sítě	33
2.1.1 Strukturované sítě	33
2.1.2 Nestrukturované sítě	34
2.2 Metoda konečných objemů	35
2.2.1 Aproximace gradientu	37
2.3 Semidiskrétní schéma	40
2.4 Rungeova-Kuttova-Mersonova metoda	41
3 Výpočetní studie	42
3.1 Nastavení numerických simulací	42
3.2 Strukturované sítě	44
3.2.1 Dvourozměrný model	44
3.2.2 Třírozměrný model	45
3.2.3 Více krystalů	49
3.2.4 Slitiny	52
3.3 Nestrukturované sítě	56
3.3.1 Přeskálování modelu	56
3.3.2 Korekce gradientu	56
3.3.3 Srovnání strukturované a nestrukturované sítě	58
3.3.4 Výpočetní náročnost	76
Závěr	77

Úvod

Krystalizace [1] je formou tuhnutí, tedy fázového přechodu z kapalného do pevného skupenství, při němž částice látky tvoří pravidelnou strukturu. Poznatky ze zkoumání tuhnutí čisté látky je možné uvést do praxe hned v několika oborech, jako je například optika a výroba polovodičů, při níž jsou využívány křemíkové monokrystaly. Přirozeně, ještě širší využití má zkoumání tuhnutí slitin. Historicky starším způsobem, jak přistupovat ke zkoumání tuhnutí je Gibbsův přístup, z něhož vychází úloha známá jako Stefanův problém. Mladším je pak Van der Waalsův přístup, který vede k formulaci modelu fázového pole. S rozvojem numerických metod a výpočetní techniky se právě ten dostal do popředí díky snazší numerické řešitelnosti.

Tato práce navazuje na mou bakalářskou práci [2], kde jsem se seznámil s modelem fázového pole a implementoval numerické schéma řešící model pouze ve dvou rozměrech a na pravidelných sítích. Náplní této diplomové práce je seznámení se s další teorií týkající se modelu fázového pole, jako například Finslerovou geometrií a modely pro slitiny. Následně je s použitím knihovny GTMesh [3] Ing. Tomáše Jakubce vyvinuté na KM FJFI ČVUT pro práci s nestrukturovanými sítěmi a za použití metody konečných objemů implementován program řešící model fázového pole pro tuhnutí čisté látky ve třech dimenzích obecně na nestrukturovaných sítích. Motivací je snaha odstranit vliv interakce směrů hlavní krystalografické orientace se směry strukturované pravouhlé sítě, což lze pro dvourozměrné čtvercové sítě shlédnout v [2]. Na nestrukturované síti s dostatečně složitou geometrií bude každá buňka sítě natočená jinak, a proto lze doufat, že tento vliv použité sítě na výsledný tvar krystalu by pak mohl být minimální. Další náplní je nalezení správných realistických parametrů a prozkoumání chování modelu fázového pole pro slitiny, který není v bezrozměrném tvaru.

Práce je členěna do tří hlavních částí, z nichž úvodní část má rešeršní charakter a shrnuje fyzikální pozadí problému a odvození matematického modelu fázového pole, jak pro čistou látku, tak i pro binární slitiny. Dále jsou zde uvedeny různé podoby reakčního členu a popsán způsob vnesení anizotropie do modelu pomocí Finslerovy geometrie. Další část je věnována popisu strukturovaných i nestrukturovaných sítí a dále postupu odvození semidiskrétního schématu pomocí metody konečných objemů, přičemž je kladen důraz na stěžejní krok - aproximaci gradientu. Tím získáme soustavu dvou (resp. tří pro slitiny) obyčejných diferenciálních rovnic, a tu již můžeme řešit pomocí Rungeových-Kuttových metod. Poslední a nejdůležitější kapitola je věnována výpočetní studii s některými z uvedených modelů na strukturovaných i nestrukturovaných sítích. Simulace byly provedeny s využitím programu vyvinutého v C++ pro řešení modelu fázového pole na nestrukturovaných sítích. Cílem je prozkoumat chování uvedených modelů, nalézt parametry modelu pro získání dendritického tvaru krystalu a porovnat výsledky z nestrukturované a strukturované sítě. Ukážeme zde získané výsledky pro různé varianty modelů a anizotropie na několika sítích, vše s podrobně popsány parametry, jaké byly pro získání daných výsledků využity.

Kapitola 1

Matematický a fyzikální model

Tuhnutí je fázová přeměna prvního druhu, při níž se mění skupenství látky z kapalného na pevné. Podmínkou tuhnutí je ochlazení látky na teplotu nižší než je bod tání/tuhnutí. To samotné ovšem k iniciaci tuhnutí nestačí. Stav, kdy je látka ochlazená pod teplotu tuhnutí a zůstává v kapalném stavu, nazýváme podchlazení. V podchlazeném stavu může látka setrvat pouze v případě, kdy není přítomná pevná fáze a kapalinu lze v tomto stavu uchovat dlouhou dobu. Například vodu [4], jejíž bod tuhnutí je při normálním atmosférickém tlaku $0\text{ }^{\circ}\text{C}$, lze ochladit až na $-40\text{ }^{\circ}\text{C}$ a udržet ji v kapalném stavu. Pro iniciaci tuhnutí v podchlazené kapalině je nutné lehké lokální vybočení z rovnováhy, kterého lze dosáhnout například vložením pevné částice, od které poté začne podchlazená kapalina tuhnout.

Speciální formou tuhnutí je krystalizace. Při krystalizaci částice začínou tvořit pravidelné uspořádání, které nazýváme krystalová mřížka. Krystalových mřížek existuje několik základních typů, které rozlišujeme podle tvaru základní stavební buňky krystalu (např. čtverečná, šesterečná, krychlová). Nezbytný je k vytvoření krystalu dostatek času, protože krystalizující látka netuhne okamžitě, ale při nukleaci se tvoří krystalizační jádra, na která se začínou nabalovat další částice a postupně vzniká krystal.

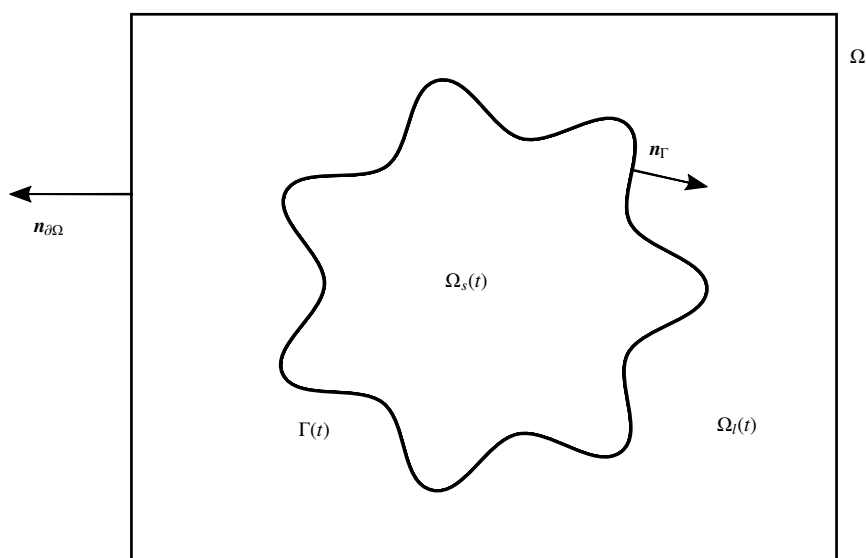
Tato kapitola rešeršního charakteru se věnuje odvození a představení různých modelů používaných k popisu fázového přechodu kapalina - pevná látka, a to jak pro případ tuhnutí homogenní látky, tak i tuhnutí binárních (dvousložkových) slitin. V minulosti se ke zkoumání vývoje kapalné a pevné fáze v čase vytvořily dva různé směry - Gibbsův a Van der Waalsův. Gibbsův přístup předpokládá ostré rozhraní mezi fázemi, na kterém mají některé termodynamické veličiny skokovou nespojitost. Navíc popisuje fázovou přeměnu pouze funkcí teploty, pomocí níž je definováno i fázové rozhraní. Van der Waalsův přístup popisuje fázové rozhraní jako pozvolnou přechodovou vrstvu mezi fázemi. Z těchto dvou přístupů k popisu tuhnutí čisté látky vycházejí Stefanova úloha a model fázového pole, ve kterém je k funkci teplotního pole přidán ještě stavový parametr fázového pole a fázové rozhraní je pak definováno pomocí něj, nezávisle na teplotě. Hlavním tématem této práce je právě model fázového pole, který bude proto odvozen, bude představeno několik odlišných variant modelu a také pomocí Finslerovy metriky zabudujeme do modelu jakožto důležitou součást anizotropii. Model fázového pole lze použít i pro modelování tuhnutí slitin. V této práci se omezíme na binární slitiny, přičemž představíme dva rozdílné přístupy, jež byly využívány k jejich popisu a modelování. Samozřejmě existují i obecnější modely pro popis tuhnutí více-složkových slitin [5].

1.1 Stefanova úloha

Historicky nejstarší úlohou popisující rozložení teploty a pohybu fázového rozhraní v homogenní látce během zamrzání kapaliny nebo naopak tání pevné látky je Stefanova úloha. Formulována byla koncem 19. století slovinským fyzikem Jožefem Stefanem, který se zabýval zkoumáním tvorby ledu ve vodě.

Základním kamenem tohoto modelu je Gibbsův přístup, jež pracuje pouze s funkcí teploty a uvažuje ostrou hranici mezi fázemi, přičemž rozhraní je definováno pomocí teploty tuhnutí. Na tomto ostrém rozhraní vznikají nespojitosti v některých termodynamických veličinách. Definice fázového rozhraní pouze pomocí teploty příslušné fázové přeměny se ukazuje jako nesprávná, protože tento model jako takový nedokáže postihnout dnes už dobře popsany [4] jev podchlazení, kdy kapalina nadále zůstává v kapalném stavu, přestože její teplota je nižší než bod tuhnutí. Tento model je také příliš jednoduchý pro popis dendritického růstu krystalu [6]. V následující části bude zběžně představeno použité značení (tabulka 1.1) a formulována Stefanova úloha. Při tomto budeme čerpat z podrobnějšího popisu v [6] a [2]. Mějme omezenou oblast $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, na níž probíhá zkoumaná fázová přeměna a časový interval \mathcal{J} . Pro $t \in \mathcal{J}$ označme (obr. 1.1)

$\Omega_l(t)$	kapalnou podoblast Ω ,
$\Omega_s(t)$	pevnou podoblast Ω ,
$\Gamma(t) = \Omega_l(t) \cap \Omega_s(t)$	fázové rozhraní.



Obrázek 1.1: Značení použité k popisu oblasti ve Stefanově úloze.

Pro teplotní pole T zavedeme na kapalně i pevně podoblasti funkcionály

$H_j = H_j(T)$	entalpie na jednotku objemu,
$S_j = S_j(T)$	entropie na jednotku objemu,
$F_j = F_j(T) = H_j(T) - TS_j(T)$	volné energie na jednotku objemu,

kde index $j \in \{l, s\}$ značí funkcionál definovaný na příslušné podoblasti Ω_l, Ω_s .

Dále definujeme

$$e = e(T) \quad \text{plošnou hustotu energie rozhraní,} \quad (1.1)$$

$$s = s(T) \quad \text{plošnou hustotu entropie rozhraní,} \quad (1.2)$$

$$f = f(T) = e(T) - Ts(T) \quad \text{plošnou hustotu volné energie rozhraní.} \quad (1.3)$$

Tabulka 1.1: Značení použité při popisu Stefanovy úlohy.

Značení	Definice
T	teplota
T^m	teplota fázového přechodu
λ_s, λ_l	tepelná vodivost v pevné a kapalně podoblasti
ρ	hustota materiálu
C	tepelná kapacita materiálu
L	latentní teplo fázového přechodu
σ	povrchové napětí
Δs	rozdíl entropie mezi fázemi
α	koeficient připojovací kinetiky na hranici
\mathbf{n}_Γ	normálový vektor k fázovému rozhraní $\Gamma(t)$ směřující ven z Ω_s
$\mathbf{n}_{\partial\Omega}$	vnější normálový vektor k $\partial\Omega$
v_Γ	normálová rychlost fázového rozhraní $\Gamma(t)$
\mathbf{g}	tepelný tok přes hranici oblasti $\partial\Omega$
$\kappa_\Gamma = \nabla \cdot \mathbf{n}_\Gamma$	střední křivost nadplochy $\Gamma(t)$

Při odvození Stefanovy úlohy vyjdeme ze systému rovnic fázového přechodu s podmínkou volné hranice, který má podle [6] tvar

$$\frac{\partial H_s(T)}{\partial t} = -\nabla \mathbf{q}_s \quad \text{v } \Omega_s(t), \quad (1.4a)$$

$$\frac{\partial H_l(T)}{\partial t} = -\nabla \mathbf{q}_l \quad \text{v } \Omega_l(t), \quad (1.4b)$$

$$T = \frac{H_l - H_s - \kappa e}{S_l - S_s - \kappa s} \quad \text{na } \Gamma(t), \quad (1.4c)$$

$$(\mathbf{q}_l - \mathbf{q}_s) \mathbf{n}_\Gamma = v_\Gamma (H_l - H_s) - v_\Gamma \kappa e - \frac{\partial e}{\partial t} \quad \text{na } \Gamma(t), \quad (1.4d)$$

$$v_\Gamma \mathbf{n}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega} = 0 \quad \text{na } \partial\Omega \cap \Gamma(t). \quad (1.4e)$$

Zde je dobré také poznamenat, že z důvodu přehlednosti se budeme snažit v celém textu odlišovat tučným fontem \mathbf{n} vektory od skalárů n . Dále do (1.4a), (1.4b) a (1.4d) dosadíme Fourierův zákon vedení tepla pro kapalnou i pevnou podoblast

$$\mathbf{q}_s = -\lambda_s(u) \nabla T, \quad (1.5)$$

$$\mathbf{q}_l = -\lambda_l(u) \nabla T. \quad (1.6)$$

Pro formulaci Stefanovy úlohy s povrchovým napětím je entalpie definována v podobě

$$H_l(T) = \int_0^T \rho_l(\tau) C_l(\tau) d\tau + L, \quad (1.7)$$

$$H_s(T) = \int_0^T \rho_s(\tau) C_s(\tau) d\tau. \quad (1.8)$$

Dále označíme rozdíl entropií na jednotku objemu

$$\Delta s = S_l - S_s. \quad (1.9)$$

Také uvažujeme [7] následující omezující předpoklady:

- $\frac{sT^m}{L} \ll 1$
- $\partial\Omega \cap \Gamma(t) = \emptyset, \forall t \in \mathcal{J}$
- $\lambda_l = \lambda_s$
- přítomnost kinetického podchlazení upravujícího teplotní vztah pro $\Gamma(t)$

Za těchto podmínek lze zjednodušit systém rovnic fázového přechodu s podmínkou volné hranice (1.4) a formulovat Stefanovu úlohu s povrchovým napětím

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla(\lambda \nabla T) = 0 \quad \text{v } \Omega_s(t) \times \mathcal{J} \cup \Omega_l(t) \times \mathcal{J}, \quad (1.10a)$$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}_\Gamma} \Big|_s - \lambda \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}_\Gamma} \Big|_l = Lv_\Gamma \quad \text{na } \Gamma(t), \quad (1.10b)$$

$$T - T^m = -\frac{\sigma}{\Delta s} \kappa_\Gamma - \alpha \frac{\sigma}{\Delta s} v_\Gamma \quad \text{na } \Gamma(t), \quad (1.10c)$$

$$b_c(T)|_{\partial\Omega} = 0 \quad \text{v } \partial\Omega \times \mathcal{J}, \quad (1.10d)$$

$$\Omega_s(0) = \Omega_{s,\text{ini}} \quad \text{v } \Omega, \quad (1.10e)$$

$$T|_{t=0} = T_{\text{ini}} \quad \text{v } \Omega, \quad (1.10f)$$

kde (1.10a) je klasická rovnice vedení tepla s nulovou pravou stranou - zdrojovým členem. Vztah (1.10b) představuje Stefanovu podmínku, která vyjadřuje nespojitost tepelného toku přes fázové rozhraní a (1.10c) je Gibbsova-Thomsonova podmínka. Rovnice (1.10d) přidává okrajovou podmínku pomocí operátoru $b_c(T)$, jež může být volen

$$\begin{aligned} b_c(T) &= T - T_{\partial\Omega} && \text{pro Dirichletovu okrajovou podmínku,} \\ b_c(T) &= (\lambda \nabla T - \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega} && \text{pro Neumannovu okrajovou podmínku.} \end{aligned}$$

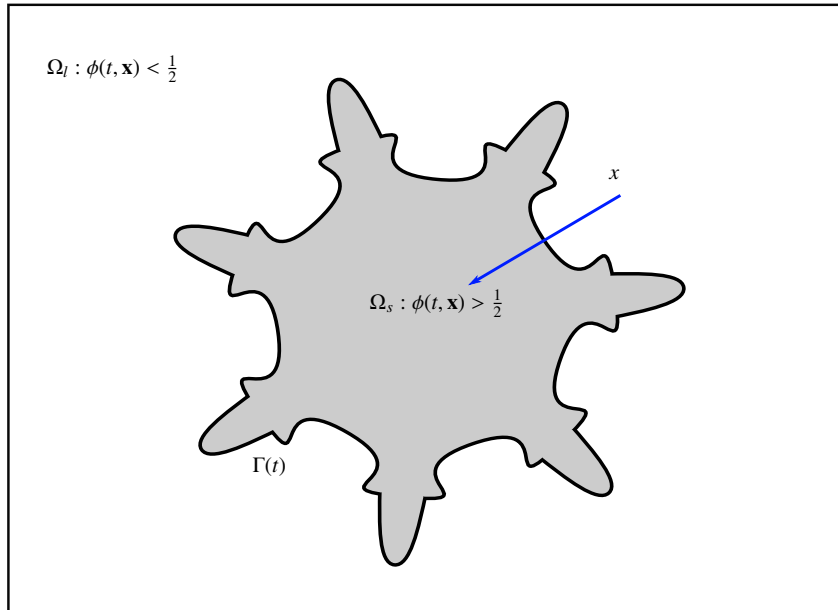
Vztahy (1.10e) a (1.10f) jsou počáteční podmínky úlohy udávající počáteční rozložení kapalné i pevné fáze a teplotního pole.

1.2 Model fázového pole pro čistou látku

Definice 1 (Fázové pole). Necht' $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ je omezená oblast. Stavový parametr $\phi \in C^2(\Omega)$, $\phi : \mathbb{R} \times \Omega \rightarrow \langle 0, 1 \rangle$, který splňuje, že oblast $\Gamma(t) = \left\{ \mathbf{x} \in \Omega \mid \phi(t, \mathbf{x}) = \frac{1}{2} \right\}$ je fázové rozhraní, lokálnímu neuspořádanému kapalnému stavu odpovídají hodnoty blízké nule a lokálnímu uspořádanému pevnému stavu hodnoty blízké jedné, nazveme **fázové pole**.

Model fázového pole pro homogenní látku je založený hlavně na práci Cahna a Hilliarda, kteří vyšli z Van der Waalsova přístupu. Ten narozdíl od Stefanova problému uvažuje pozvolnou přechodovou vrstvu mezi kapalnou a pevnou fází. Na této vrstvě jsou termodynamické veličiny spojité. Při popisu fázové přeměny už nestačí pouze teplotní pole T , proto je zaveden (definice 1) nový stavový parametr fázové pole ϕ . Hodnoty ϕ mezi 0 a 1 odpovídají již zmíněné tenké přechodové vrstvě (obr. 1.3) mezi fázemi, kterou označíme jako Ω_Γ . Její tloušťka je přímou úměrou svázána s difuzním parametrem ξ . V tomto modelu fázové rozhraní již není explicitně definováno pomocí teplotního pole, tudíž je tento model schopen zachytit jevy podchlazení a přehřátí. Dle definice 1 lze reprezentovat fázové rozhraní křivkou $\Gamma(t)$ a také si opět označíme (obr. 1.2)

$$\begin{aligned} \Omega_l(t) & \quad \text{kapalnou podoblast } \Omega, \\ \Omega_s(t) & \quad \text{pevnou podoblast } \Omega. \end{aligned}$$



Obrázek 1.2: Značení oblasti pro model fázového pole - orientovaná modrá úsečka x odpovídá ose v obrázku 1.3.

Následující část textu si klade za cíl matematicky korektně a co nejsrozumitelnější formou odvodit obecný model fázového pole pro případ čisté látky. Formální stránka tohoto popisu bude dále použita i pro odvození modelu pro binární slitiny, kde se na tento postup odkážeme. Hlavními zdroji při odvození a popisu bezrozměrného matematického modelu fázového pole pro čistou látku budou především [8], [9] a [2]. Narozdíl od těchto textů budeme používat značení, které je v souladu s většinou anglické literatury - tedy teplotu budeme značit T (místo u) a fázové pole ϕ (místo p). Z této změny plynou i některé další změny značení oproti citovaným zdrojům, které vedou k přehlednosti textu. Po odvození obecného modelu bude představeno několik konkrétních modelů lišících se ve tvaru reakčního členu a dále diskutována anizotropie a její zanesení do modelu.

Pro začátek shrneme veškerý matematický aparát, který bude během odvození využit.

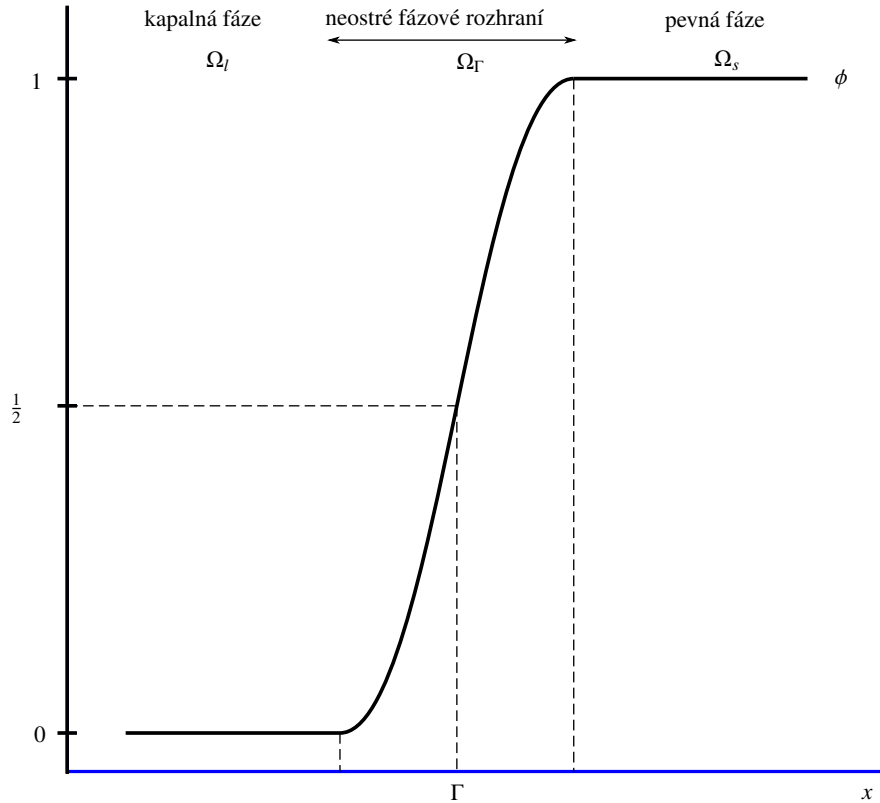
Poznámka 1. Na prostoru funkcí $C^2(\Omega)$ zavádíme skalární součin funkcí $f, g \in C^2(\Omega)$ jako

$$\langle f, g \rangle = \int_{\Omega} f(\mathbf{x})g(\mathbf{x})d\mathbf{x}.$$

Definice 2 (Fréchetova derivace). Necht' U, V jsou normované prostory, $U_1 \subset U$ je otevřená podmnožina U a f je zobrazení $f : U_1 \rightarrow V$. Řekneme, že zobrazení f je diferencovatelné v bodě \mathbf{x} , pokud existuje omezený lineární operátor $A : U \rightarrow V$ tak, že

$$\lim_{\|\mathbf{h}\|_U \rightarrow 0} \frac{\|f(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - f(\mathbf{x}) - A\mathbf{h}\|_V}{\|\mathbf{h}\|_U} = 0, \quad (1.11)$$

kde $\|\cdot\|_U$, respektive $\|\cdot\|_V$ značí normu na prostoru U , respektive V . Pak zobrazení A nazveme **totální (Fréchetovou) derivací** zobrazení f v bodě \mathbf{x} .



Obrázek 1.3: Průběh funkce ϕ na pozvolné přechodové vrstvě mezi kapalnou pevnou fází.

Věta 1 (Gaussova - Ostrogradského věta). Bud' $U \subset \mathbb{R}^3$ omezená otevřená oblast, její hranice ∂U je uzavřená plocha po částech třídy C^1 . Dále necht' pro \bar{U} označující uzávěr množiny U a složky vektorové funkce F platí $F_i \in C^1(U)$ a $F_i \in C(\bar{U})$, $i \in \{1, 2, 3\}$. Potom platí

$$\int_U \nabla \cdot F dV = \int_{\partial U} F \cdot n dS,$$

kde n je vektor vnější normály k ∂U .

Věta 2 (Greenova věta). Bud' $D \subset \mathbb{R}^2$ omezená otevřená oblast, její hranice ∂D je kladně orientovaná Jordanova křivka po částech třídy C^1 . Dále necht' $P, Q \in C^1(D)$ a $P, Q \in C(\bar{D})$. Potom platí

$$\int_{\partial D} (P dx + Q dy) = \iint_D \left(\frac{\partial Q}{\partial x} - \frac{\partial P}{\partial y} \right) dx dy.$$

Věta 3 (Rieszova věta o reprezentaci). Bud' $F : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ spojitý lineární funkcionál na Hilbertově prostoru \mathcal{H} . Pak existuje právě jeden vektor $\varphi \in \mathcal{H}$ takový, že platí

$$F x = \langle \varphi, x \rangle \quad \forall x \in \mathcal{H}.$$

1.2.1 Odvození modelu

Označme dimenzi zkoumané oblasti Ω jako $n = \dim \Omega$. Necht' $m \in \mathbb{N}$ a \mathcal{F} je termodynamická funkce (např. volná energie), vyjádřená jako integrál její objemové hustoty, závisující na sadě parametrů

$\{\phi_1, \dots, \phi_m\}$. Podle [8], [10] má funkcionál \mathcal{F} tvar

$$\mathcal{F}[\phi_1, \dots, \phi_m] = \int_{\Omega} (\omega(\phi_1, \dots, \phi_m) + G(\nabla\phi_1, \dots, \nabla\phi_m)) dx. \quad (1.12)$$

Ve výrazu (1.12) vystupuje objemová hustota volné energie ω a funkce gradientu G . Funkce ω se obvykle volí jako víceminimová s lokálními minimy ve stavech daných hodnotami parametrů $\{\phi_1, \dots, \phi_m\}$. Časový vývoj systému je pak popsán rovnicí modelu A (viz [11]).

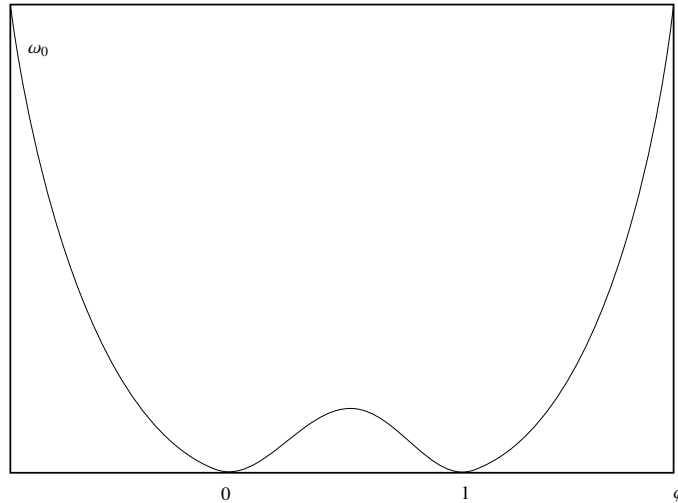
$$\tau_i \left\langle \frac{\partial \phi_i}{\partial t}, v \right\rangle = -\delta_{\phi_i} \mathcal{F}[\phi_1, \dots, \phi_m] v, \quad \forall v \in C^2(\Omega), i = 1, \dots, m, \quad (1.13)$$

kde $\delta_{\phi_i} \mathcal{F}$ je lineární zobrazení - Fréchetova derivace (definice 2) funkcionálu \mathcal{F} podle jednotlivých proměnných ϕ_i a τ_i je relaxační parametr.

V našem modelu, který budeme používat popisujeme stav systému jedním stavovým parametrem $\phi = \phi(t, \mathbf{x})$ a teplotním polem $T = T(t, \mathbf{x})$ - tedy volíme $m = 1$. Kapalná fáze má odpovídat oblasti s hodnotami parametru ϕ blízkými 0 a pevná fáze oblasti s hodnotami parametru blízkými 1. Přechod mezi kapalnou a pevnou fází má být realizován tenkou vrstvou, kde se veličina ϕ spojitě pohybuje od 0 k 1 (případně naopak). S těmito požadavky můžeme za funkci objemové hustoty ω zvolit $\omega = \omega_0 + W$, kde ω_0 je tzv. dvouminimový potenciál s minimy právě v požadovaných stavech odpovídajících kapalně a pevné fázi (obr. 1.4) a $W = W(T, \phi)$ je zatím blíže nspecifikovaný člen utvářející kompletní tvar reakčního členu pro jeho různé modifikace (sekce 1.2.2). Dvouminimový potenciál ω_0 je tvaru

$$\omega_0(\phi) = \frac{a}{4} \left(\left(\phi - \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{1}{4} \right)^2 = \frac{a}{4} \phi^2 (1 - \phi)^2, \quad (1.14)$$

kde $a > 0$ je škálovací konstanta.



Obrázek 1.4: Graf dvouminimového potenciálu ω_0 .

Dále budeme uvažovat oblast $\Omega \subset \mathbb{R}^n, n \in \{2, 3\}$. Jedná se o dimenze, které pro nás budou významné při numerických simulacích a samozřejmě mají praktické opodstatnění v reálném světě. Nakonec bude patrné, že výsledný tvar rovnic na dimenzi nezávisí. Při odvození modelu fázového pole pro čistou

jednosložkovou látku vyjdeme z funkcionalů entalpie \mathcal{H} a volné energie \mathcal{F} ve tvarech

$$\mathcal{H}[\phi, T] = \int_0^T \rho(\tau, \phi)c(\tau, \phi)d\tau + L(1 - \phi), \quad (1.15)$$

$$\mathcal{F}[\phi, T] = \int_{\Omega} (\omega(\phi, T; \xi) + G(\nabla\phi; \xi))d\mathbf{x}, \quad (1.16)$$

kde ρ , λ a c jsou materiálové konstanty a L je latentní teplo na jednotku objemu. Uvažujeme řídicí rovnici analogickou k (1.4a)

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = -\nabla \mathbf{q}, \quad (1.17)$$

kde \mathbf{q} označuje tepelný tok. Dosazením funkcionalu entalpie (1.15), použitím Fourierova zákona

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T \quad (1.18)$$

a dosazením funkcionalu (3.17f) do rovnice modelu A (1.13) přechází rovnice vývoje systému do následující soustavy:

$$\frac{\partial \mathcal{H}[\phi, T]}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda(T)\nabla T), \quad (1.19)$$

$$\tau \left\langle \frac{\partial \phi}{\partial t}, v \right\rangle = -\delta_{\phi} \mathcal{F}[\phi, T]v, \quad (1.20)$$

kde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ je skalární součin na $C^2(\Omega)$.

Z definice Fréchetovy derivace platí

$$\lim_{\|\delta\phi\| \rightarrow 0} \frac{\mathcal{F}[\phi + \delta\phi, T; \xi] - \mathcal{F}[\phi, T; \xi] - \delta_{\phi} \mathcal{F}[\phi, T]\delta\phi}{\|\delta\phi\|} = 0, \quad (1.21)$$

kde $\delta\phi$ značí malý přírůstek argumentu. Tvar $\delta_{\phi} \mathcal{F}$ najdeme, pokud si rozepíšeme přírůstek \mathcal{F} v bodě ϕ a následně použijeme Taylorův rozvoj v bodě ϕ do prvního řádu

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[\phi + \delta\phi, T; \xi] &= \int_{\Omega} \left(\omega(\phi + \delta\phi, T; \xi) + G(\nabla(\phi + \delta\phi); \xi) \right) d\mathbf{x} \\ &= \int_{\Omega} \left(\omega(\phi, T; \xi) + \frac{\partial \omega(\phi, T; \xi)}{\partial \phi} \delta\phi + G(\nabla\phi; \xi) + \frac{\partial G(\nabla\phi; \xi)}{\partial(\nabla\phi)} \cdot \nabla \delta\phi + O(|\delta\phi|^2) \right) d\mathbf{x}, \end{aligned} \quad (1.22)$$

kde $\frac{\partial G}{\partial(\nabla\phi)} = \left(\frac{\partial G}{\partial y_1}, \frac{\partial G}{\partial y_2}, \frac{\partial G}{\partial y_3} \right)$ a y_i jsou složky gradientu $\nabla\phi$.

Pro $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ použitím Gaussovy věty (věta 1) pro $\mathbf{F} = \frac{\partial G}{\partial(\nabla\phi)} \delta\phi$ a oblast Ω dostáváme

$$\int_{\Omega} \frac{\partial G}{\partial(\nabla\phi)} \cdot \nabla \delta\phi d\mathbf{x} = - \int_{\Omega} \nabla \cdot \frac{\partial G}{\partial(\nabla\phi)} \delta\phi d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} \frac{\partial G}{\partial(\nabla\phi)} \delta\phi \cdot \mathbf{n} dS, \quad (1.23)$$

kde \mathbf{n} značí vektor vnější normály k $\partial\Omega$. Ve dvourozměrném případě lze tuto úpravu provést analogicky pomocí Greenovy věty 2. Postačující podmínky, aby poslední člen výrazu na pravé straně (1.23), tedy integrál přes hranici sledované oblasti $\partial\Omega$, byl nulový, jsou

$$\delta\phi|_{\partial\Omega} = 0 \quad (1.24)$$

nebo

$$\frac{\partial G(\nabla\phi; \xi)}{\partial(\nabla\phi)} \cdot \mathbf{n} = 0. \quad (1.25)$$

Dosazením vztahu (1.23) do rovnice (1.22), vynulováním integrálu přes $\partial\Omega$ a následným odečtením $\mathcal{F}[p, u; \xi]$ dostáváme

$$\mathcal{F}[\phi + \delta\phi, T; \xi] - \mathcal{F}[\phi, T; \xi] = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial\omega(\phi, T; \xi)}{\partial\phi} - \nabla \cdot \frac{\partial G(\nabla\phi; \xi)}{\partial(\nabla\phi)} + O(|\delta\phi|^2) \right) \delta\phi dx. \quad (1.26)$$

Také je žádoucí zde poukázat na fakt, že provedení Taylorova rozvoje (1.22) pouze do prvního řádu je pro naše potřeby dostatečné, protože zbytek rozvoje - označme ho $R(\phi, T; \xi)$ - se chová jako $O(|\delta\phi|^2)$ a tedy v limitě z definice Fréchetovy derivace (1.11) nemá žádný vliv, protože

$$\lim_{\delta\phi \rightarrow 0} \frac{\int_{\Omega} R(\phi, T; \xi) dx}{|\delta\phi|} = 0. \quad (1.27)$$

Z rovnice (1.26) nyní označíme

$$\delta_{\phi}\mathcal{F}[\phi, T; \xi]\delta\phi = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial\omega(\phi, T; \xi)}{\partial\phi} - \nabla \cdot \frac{\partial G(\nabla\phi; \xi)}{\partial(\nabla\phi)} \right) \delta\phi dx \quad (1.28)$$

a pak vidíme, že díky platnosti (1.27) je splněna (1.21).

Využitím znalosti definice skalárního součinu z poznámky 1 výraz (1.28) je tvaru $\langle \varphi, \delta\phi \rangle$, kde funkce φ reprezentující Fréchetovu derivaci je

$$\varphi(t, \mathbf{x}) = \left(\frac{\partial\omega(\phi, T; \xi)}{\partial\phi} - \nabla \cdot \frac{\partial G(\nabla\phi; \xi)}{\partial(\nabla\phi)} \right) \Big|_{t, \mathbf{x}}. \quad (1.29)$$

Protože Fréchetova derivace je omezená, lze zobrazení $\delta_{\phi}\mathcal{F}[\phi, T]$ z rovnice (1.20) reprezentovat pomocí Rieszovy věty (věta 3) funkcí $\varphi \in C^2(\Omega)$ tak, že $\forall v \in C^2(\Omega)$ platí

$$\delta_{\phi}\mathcal{F}[\phi, T]v = \langle \varphi, v \rangle. \quad (1.30)$$

Dosazením (1.30) do (1.20) dostáváme rovnost $\forall v \in C^2(\Omega)$

$$\tau \left\langle \frac{\partial\phi}{\partial t}, v \right\rangle = -\langle \varphi, v \rangle, \quad (1.31)$$

$$\tau \left\langle \frac{\partial\phi}{\partial t} + \varphi, v \right\rangle = 0. \quad (1.32)$$

Rovnice (1.31) bude splněna, pokud bude bodově v oblasti Ω platit rovnost

$$\tau \frac{\partial\phi}{\partial t} = -\varphi. \quad (1.33)$$

Nakonec vyjádříme derivaci funkcionalu entalpie \mathcal{H} podle času, kterou potřebujeme do rovnice (1.19)

$$\frac{\partial\mathcal{H}[\phi, T]}{\partial t} = \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\phi} \frac{\partial\phi}{\partial t} = \rho(T)c(T) \frac{\partial T}{\partial t} - L \frac{\partial\phi}{\partial t} \quad (1.34)$$

a nyní už lze získané výrazy (1.29) a (1.34) dosadit do (1.19) a (1.33), čímž získáme výsledné rovnice

$$\rho(T)c(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(\lambda(T)\nabla T) + L \frac{\partial\phi}{\partial t}, \quad (1.35)$$

$$\tau(\xi) \frac{\partial\phi}{\partial t} = \nabla \cdot \frac{\partial G(\nabla\phi; \xi)}{\partial(\nabla\phi)} - \frac{\partial\omega(\phi, T; \xi)}{\partial\phi}, \quad (1.36)$$

s okrajovými podmínkami v souladu s podmínkami (1.24), (1.25), které mohou být

- Dirichletova typu

$$T|_{\partial\Omega} = T_{\partial\Omega}, \quad \phi|_{\partial\Omega} = \phi_{\partial\Omega}, \quad (1.37)$$

nebo

- Neumannova typu

$$\left. \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right|_{\partial\Omega} = 0, \quad \frac{\partial G}{\partial(\nabla\phi)} \cdot \mathbf{n} = 0. \quad (1.38)$$

Rovnice vedení tepla (1.35) společně s reakčně difuzní rovnicí, která je také nazývána Allenovou-Cahnovou (1.36), jednou z okrajových podmínek (1.37), (1.38) a počáteční podmínkou

$$T|_{t=0} = T_{\text{ini}}, \quad \phi|_{t=0} = \phi_{\text{ini}}, \quad (1.39)$$

tvoří obecný **systém rovnic fázového pole**.

Pro účely dalšího textu a přehlednost si přeznačíme tzv. reakční člen

$$f(\phi, T; \xi) := \frac{\partial \omega(\phi, T; \xi)}{\partial \phi}. \quad (1.40)$$

Podle [8] pro izotropní formulaci modelu fázového pole volíme

$$G(\nabla\phi; \xi) = \frac{\xi^2}{2} |\nabla\phi|^2, \quad (1.41)$$

kde ξ je onen relaxační parametr řídící tloušťku přechodové vrstvy fázového rozhraní. Derivací tedy dostáváme

$$\frac{\partial G(\nabla\phi; \xi)}{\partial(\nabla\phi)} = \xi^2 \nabla\phi. \quad (1.42)$$

Od modelu je dále požadováno, aby (1.36) při limitním přechodu $\xi \rightarrow 0$ byl v souladu s úlohou ostré hranice a tedy rovnice pro fázové pole ϕ přecházela v Gibbsovu-Thomsonovu podmínku

$$\Delta s \Delta T = -\sigma \kappa_{\Gamma} - \alpha \sigma v_{\Gamma},$$

kde pomocí původního značení z podkapitoly 1.1 značíme $\Delta T = T - T^m$. Tedy v podstatě chceme, aby při ztenčování přechodové vrstvy model fázového pole přešel ve Stefanovu úlohu s povrchovým napětím uvažující ostré fázové rozhraní. S odůvodněním v překrývací asymptotické analýze [7] volíme relaxační parametr

$$\tau(\xi) = \alpha \xi^2. \quad (1.43)$$

Použitím (1.40), (1.42) a (1.43) můžeme na intervalu \mathcal{J} a prostorové oblasti Ω model fázového pole pro čistou látku souhrnně zapsat

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = \nabla(\lambda \nabla T(t, \mathbf{x})) + L \frac{\partial \phi}{\partial t}(t, \mathbf{x}), \quad \text{v } \Omega \times \mathcal{J}, \quad (1.44a)$$

$$\xi^2 \alpha \frac{\partial \phi}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = \xi^2 \Delta \phi(t, \mathbf{x}) + f(\phi, T; \xi), \quad \text{v } \Omega \times \mathcal{J}, \quad (1.44b)$$

$$T|_{t=0} = T_{\text{ini}}, \quad \phi|_{t=0} = \phi_{\text{ini}}, \quad \text{v } \Omega, \quad (1.44c)$$

$$T|_{\partial\Omega} = T_{\partial\Omega} \text{ nebo } \nabla T \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{v } \partial\Omega \times \mathcal{J}, \quad (1.44d)$$

$$\phi|_{\partial\Omega} = \phi_{\partial\Omega} \text{ nebo } \nabla \phi \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{v } \partial\Omega \times \mathcal{J}. \quad (1.44e)$$

Tabulka 1.2: Definice veličin bezrozměrné formulace modelu.

Veličina	Definice	Jednotka	Význam
L_0	nastavitelný	m	škálování prostorové souřadnice
t_0	$(\rho c / \lambda) L_0^2$	s	škálování časové souřadnice
\tilde{T}	$1 + (T - T^m) / (T^m - T_{\text{ini}})$	1	teplota
\tilde{L}	$L / (\rho c (T^m - T_{\text{ini}}))$	1	latentní teplo
$\tilde{\alpha}$	$(\lambda / \rho c) \alpha$	1	koeficient připojovací kinetiky
$\tilde{\beta}$	$\beta L_0 (T^m - T_{\text{ini}})$	1	
$\tilde{\mathbf{x}}$	\mathbf{x} / L_0	1	prostorová souřadnice
\tilde{t}	t / t_0	1	čas

Dle [12] lze předefinováním veličin podle tabulky 1.2, kde nové veličiny označíme vlnkou, přejít k **bezrozměrné formulaci modelu fázového pole** (1.45). Všimněme si, že bez ohledu na hodnotu T_{ini} je v bezrozměrné formulaci $\tilde{T}_{\text{ini}} = 0$ a $\tilde{T}^* = 1$. Značení s vlnkou budeme v dalším textu pro přehlednost vynechávat, protože tento model budeme využívat pouze v bezrozměrné formulaci a není tedy třeba obě varianty rozlišovat. Úlohu v bezrozměrném tvaru lze psát

$$\frac{\partial T}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = \Delta T(t, \mathbf{x}) + L \frac{\partial \phi}{\partial t}(t, \mathbf{x}), \quad \text{v } \Omega \times \mathcal{J}, \quad (1.45a)$$

$$\xi^2 \alpha \frac{\partial \phi}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = \xi^2 \Delta \phi(t, \mathbf{x}) + f(\phi, T; \xi), \quad \text{v } \Omega \times \mathcal{J}, \quad (1.45b)$$

$$T|_{t=0} = T_{\text{ini}}, \quad \phi|_{t=0} = \phi_{\text{ini}}, \quad \text{v } \Omega, \quad (1.45c)$$

$$T|_{\partial\Omega} = T_{\partial\Omega} \text{ nebo } \nabla T \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{v } \partial\Omega \times \mathcal{J}, \quad (1.45d)$$

$$\phi|_{\partial\Omega} = \phi_{\partial\Omega} \text{ nebo } \nabla \phi \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{v } \partial\Omega \times \mathcal{J}. \quad (1.45e)$$

1.2.2 Varianty reakčního členu

Model splňuje asymptotické chování pro různé reakční členy $f(\phi, T; \xi)$, které jsou derivací objemové hustoty ω podle ϕ . Ta je volena jako $\omega = \omega_0 + W$ s dvouminimovým potenciálem ω_0 ve tvaru

$$\omega_0(\phi) = \frac{a}{4} \left(\left(\phi - \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{1}{4} \right)^2 = \frac{a}{4} \phi^2 (1 - \phi)^2, \quad (1.46)$$

kde $a > 0$ je škálovací konstanta. Derivací dvouminimového potenciálu podle ϕ dostáváme základní tvar reakčního členu

$$f_0(\phi) = \frac{\partial \omega_0}{\partial \phi} = a\phi(1 - \phi) \left(\phi - \frac{1}{2} \right). \quad (1.47)$$

Volbou W a následnou derivací lze získat různé varianty reakčního členu, a toto vedlo historicky ke vzniku mnoha různých modelů, jež se ukázaly jako nějakým způsobem fyzikálně odpovídající a numericky vhodné. Z těchto modelů zde pro zajímavost uvedeme tři tvary reakčního členu představené v [12] a [8].

Varianta 1

$$f(\phi, T; \xi) = f_0(\phi) - b\beta\xi(T - T^m) = a\phi(1 - \phi) \left(\phi - \frac{1}{2} \right) - b\beta\xi(T - T^m), \quad (1.48)$$

kde $a, b, \beta = \frac{\Delta s}{\sigma}$ jsou pozitivní konstanty.

Pro zachování fyzikálního významu zde navíc vyvstává explicitní podmínka svazující parametry a, b, β a ξ

$$b\beta\xi(T - T^m) \in \left(-\frac{\sqrt{3}}{36}a, +\frac{\sqrt{3}}{36}a \right). \quad (1.49)$$

Varianta 2

$$f(\phi, T, \nabla\phi; \xi) = f_0(\phi) + F(\phi, T, \nabla\phi) = a\phi(1 - \phi)\left(\phi - \frac{1}{2}\right) - b\xi^2\beta|\nabla\phi|(T - T^m). \quad (1.50)$$

V tomto modelu se $f_0(\phi)$ liší od $f(\phi, T, \nabla\phi; \xi)$ pouze v oblasti, kde je $\nabla\phi$ nenulový, tedy v oblasti Ω_Γ . U této varianty již není explicitní podmínka svazující β a ξ . V numerických simulacích modelu fázového pole pro čistou látku se proto omezíme pouze na tento tvar reakčního členu.

Varianta 3

$$f(\phi, T; \xi) = 2\phi(1 - \phi)\left(\phi - \frac{1}{2} - b\beta\xi\frac{1}{2}\Sigma(\phi; \varepsilon_0, \varepsilon_1)(T - T^m)\right), \quad (1.51)$$

kde funkce $\Sigma(\phi; \varepsilon_0, \varepsilon_1)$ má tvar

$$\Sigma(\phi; \varepsilon_0, \varepsilon_1) = \begin{cases} 0 & \phi \leq \varepsilon_0, \\ 1 & \phi \geq \varepsilon_1, \\ \frac{3(\phi - \varepsilon_0)^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_0)^2} - \frac{2(\phi - \varepsilon_0)^3}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_0)^3} & \phi \in (\varepsilon_0, \varepsilon_1). \end{cases} \quad (1.52)$$

Opět zde již není podmínka svazující β a ξ , zároveň si lze všimnout, že pro tento tvar reakčního členu není třeba vyčíslovat gradient jako u předchozí varianty (1.50), což může být výhodné. Pro vliv parametrů $\varepsilon_0, \varepsilon_1$ lze nahlédnout do [12]. V tomto modelu musí být [12] parametr b volen jako

$$b = \frac{1}{6} \left/ \left(\frac{\varepsilon_0^3}{15} + \frac{\varepsilon_0^2\varepsilon_1}{10} - \frac{3\varepsilon_0^2}{20} - \frac{\varepsilon_0\varepsilon_1}{5} + \frac{\varepsilon_0\varepsilon_1^2}{10} - \frac{3\varepsilon_1^2}{20} + \frac{\varepsilon_1^3}{15} + \frac{1}{6} \right) \right. \quad (1.53)$$

1.2.3 Anizotropie

Významným faktorem ovlivňujícím růst krystalů v přírodě je i anizotropie. Pokud chceme, aby model korespondoval s reálným procesem, musíme ji v modelu zohlednit. Anizotropní růst krystalu znamená upřednostnění některých směrů růstu před jinými. První a jednodušší způsob zavedení anizotropie do modelu je možný pouze ve dvourozměrném případě. V trojrozměrném modelu je jedním ze způsobů zavedení anizotropie použití Finslerovy geometrie. V přírodě se vyskytuje mnoho druhů anizotropií, z nichž pro některé si ukážeme konkrétní tvary funkcí, jimiž je možné je zanést do modelu.

1.2.3.1 Zjednodušený dvourozměrný případ

Pro zavedení anizotropie do modelu fázového pole v dvourozměrném případě uvažujeme podle [7] anizotropní Gibbsův-Thomsonův vztah

$$\alpha v_\Gamma = -g(\theta)\kappa - \beta(T - T^m), \quad (1.54)$$

kde θ představuje úhel mezi horizontální osou x a vnější normálou k fázovému rozhraní $\Gamma(t)$. Dále také klademe na funkci g dvě podmínky: musí být kladnou a omezenou funkcí proměnné θ . Funkce g je obvykle volena ve tvaru

$$g(\theta) = 1 - S \cos(m(\theta - \theta_0)), \quad (1.55)$$

kde $m \in \mathbb{N}$ je četnost anizotropie, $S \in \langle 0, 1 \rangle$ je síla anizotropie a θ_0 je směr hlavní krystalografické orientace. Allenova-Cahnova rovnice pak přejde do tvaru

$$\xi^2 \alpha \frac{\partial \phi}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = g(\theta)[\xi^2 \Delta \phi(t, \mathbf{x}) + f_0(\phi)] - b \xi^2 \beta |\nabla \phi|(T - T^m). \quad (1.56)$$

1.2.3.2 Finslerova geometrie

Narozdíl od předchozího způsobu zavedení anizotropie lze u toho pomocí Finslerovy metriky dokázat existenci řešení výsledného anizotropního modelu fázového pole [13].

Anizotropie je zavedena přímo do Allenovy-Cahnovy rovnice nahrazením eukleidovské normy na \mathbb{R}^n novou normou respektující požadovanou anizotropii. Při následujícím popisu problematiky Finslerovy geometrie budeme čerpat hlavně z [14], [15] a [16].

Definice 3 (Finslerova metrika). Bud' $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ otevřená a souvislá. Spojitou funkci $\varphi : \Omega \times \mathbb{R}^n \rightarrow \langle 0, +\infty \rangle$ nazveme Finslerovou metrikou pokud splňuje podmínky homogenity a omezenosti

$$(\forall t \in \mathbb{R}, \forall \mathbf{n} \in \mathbb{R}^n)(\varphi(\mathbf{x}, t\mathbf{n}) = |t|\varphi(\mathbf{x}, \mathbf{n})), \quad (1.57)$$

$$(\forall \mathbf{x} \in \Omega)(\exists \lambda, \Lambda > 0)(\lambda|\mathbf{n}| \leq \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{n}) \leq \Lambda|\mathbf{n}|). \quad (1.58)$$

Definice 4. Jednotkovou koulí při zobrazení φ se středem v $\mathbf{x} \in \Omega$ rozumíme množinu

$$B_\varphi(\mathbf{x}) = \{\mathbf{n} \in \mathbb{R}^n | \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{n}) \leq 1\}. \quad (1.59)$$

Definice 5 (Duální Finslerova metrika). Bud' $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ otevřená a souvislá. Spojitou funkci $\varphi^0 : \Omega \times \mathbb{R}^n \rightarrow \langle 0, +\infty \rangle$ nazveme duální Finslerovou metrikou k φ pokud platí

$$\varphi^0(\mathbf{n}^*) = \sup\{\mathbf{n}^* \cdot \mathbf{n} | \mathbf{n} \in B_\varphi(\mathbf{x})\}. \quad (1.60)$$

Definice 6. Bud' φ Finslerova metrika. Pak definujeme zobrazení $T : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ a $T^0 : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ následovně

$$T(\mathbf{n}) = \varphi(\mathbf{n})\varphi_n(\mathbf{n}), \quad (1.61)$$

$$T^0(\mathbf{n}) = \varphi^0(\mathbf{n})\varphi_n^0(\mathbf{n}). \quad (1.62)$$

Operátor T^0 je inverzní k T [14]. Pomocí operátoru T^0 definujeme ještě několik pojmů k získání φ -normálového vektoru, φ -normálové rychlosti a φ -střední křivosti, pomocí nichž lze rovnici fázového pole přeformulovat na anizotropní případ.

Definice 7. Bud' $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ hladká funkce, pro kterou $\nabla f \neq 0$ na celém \mathbb{R}^n . Potom nazýváme

$$\nabla_\varphi f = T^0(\nabla f) \quad (1.63)$$

φ -gradientem funkce f . Bud' $\boldsymbol{\pi}(\mathbf{x})$ hladké vektorové pole na \mathbb{R}^n . Nazýváme

$$\operatorname{div}_\varphi \boldsymbol{\pi} = \operatorname{div} \boldsymbol{\pi} + \boldsymbol{\pi} \cdot \nabla(\log(\operatorname{div}_n \varphi)) \quad (1.64)$$

φ -divergencí vektorového pole $\boldsymbol{\pi}$.

Pomocí předchozích definic lze zavést φ -normálový vektor $\mathbf{n}_{\varphi,\Gamma}$ a φ -normálovou rychlost $v_{\varphi,\Gamma}$ k rozhraní $\Gamma(t) = \left\{ \mathbf{x} \in \Omega \mid \phi(t, \mathbf{x}) = \frac{1}{2} \right\}$, které jsou [16] dány jako

$$\mathbf{n}_{\varphi,\Gamma} = -\varphi_{\mathbf{n}}^0(\nabla\phi) = -\frac{\nabla_{\varphi}\phi}{\varphi^0(\nabla\phi)}, \quad (1.65)$$

$$v_{\varphi,\Gamma} = \frac{1}{\varphi^0(\nabla\phi)} \frac{\partial\phi}{\partial t}. \quad (1.66)$$

Dále φ -střední křivost je definována

$$\kappa_{\varphi,\Gamma} = -\operatorname{div}_{\varphi}\mathbf{n}_{\varphi,\Gamma}. \quad (1.67)$$

Nyní již lze z Gibbsova-Thomsonova vztahu modifikovaného asymptotickou analýzou

$$\alpha v_{\varphi,\Gamma} = \kappa_{\varphi,\Gamma} - \beta(T - T^m) \quad (1.68)$$

odvodit [12] rovnici fázového pole s anizotropií

$$\xi^2 \alpha \frac{\partial\phi}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = \xi^2 \nabla \cdot \mathbf{T}^0(\nabla\phi) + f(\phi, T, \varphi^0(\nabla\phi); \xi). \quad (1.69)$$

Tím dostáváme kompletní podobu **anizotropního modelu fázového pole**

$$\frac{\partial T}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = \Delta T(t, \mathbf{x}) + L \frac{\partial\phi}{\partial t}(t, \mathbf{x}), \quad \text{v } \Omega \times \mathcal{J}, \quad (1.70a)$$

$$\xi^2 \alpha \frac{\partial\phi}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = \xi^2 \nabla \mathbf{T}^0(\nabla\phi) + f(\phi, T, \varphi^0(\nabla\phi); \xi), \quad \text{v } \Omega \times \mathcal{J}, \quad (1.70b)$$

$$T|_{t=0} = T_{\text{ini}}, \quad \phi|_{t=0} = \phi_{\text{ini}}, \quad \text{v } \Omega, \quad (1.70c)$$

$$T|_{\partial\Omega} = T_{\partial\Omega}, \quad \text{v } \partial\Omega \times \mathcal{J}, \quad (1.70d)$$

$$\mathbf{T}^0(\nabla\phi) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{v } \partial\Omega \times \mathcal{J}, \quad (1.70e)$$

kde

$$f(\phi, T, \varphi^0(\nabla\phi); \xi) = a\phi(1 - \phi) \left(\phi - \frac{1}{2} \right) - b\xi^2 \beta \varphi^0(\nabla\phi)(T - T^m). \quad (1.71)$$

Zbývá již pouze popsat konkrétní tvar metriky φ^0 pro námi požadované trojrozměrné modely. Podle [17] má tvar

$$\varphi^0(\mathbf{n}^*) = |\mathbf{n}^*| \psi(\mathbf{n}), \quad (1.72)$$

kde

$$\mathbf{n} = -\frac{\mathbf{n}^*}{|\mathbf{n}^*|} \quad (1.73)$$

a $\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow (0, +\infty)$ představuje anizotropní povrchovou energii závislou na normálovém směru k ploše \mathbf{n} . Pokud zvolíme $\mathbf{n}^* = \nabla\phi$, pak \mathbf{n} reprezentuje jednotkový vnější normálový vektor k fázovému rozhraní. Derivací vztahu (1.72) postupně (podrobně v [9]) získáme pro $i = 1, 2, 3$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}_i^*} \varphi^0(\mathbf{n}^*) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}_i^*} \left(|\mathbf{n}^*| \psi \left(-\frac{\mathbf{n}^*}{|\mathbf{n}^*|} \right) \right) = \dots = -n_i \psi(\mathbf{n}) - \frac{\partial \psi}{\partial n_i}(\mathbf{n}) + \sum_{k=1}^3 n_i n_k \frac{\partial \psi}{\partial n_k}(\mathbf{n}). \quad (1.74)$$

Dosazením (1.74) do i -té složky (1.62) získáme

$$T_i^0(\mathbf{n}^*) = |\mathbf{n}^*| \psi(\mathbf{n}) \left[-n_i \psi(\mathbf{n}) - \frac{\partial \psi}{\partial n_i}(\mathbf{n}) + \sum_{k=1}^3 n_i n_k \frac{\partial \psi}{\partial n_k}(\mathbf{n}) \right], \quad (1.75)$$

což rozepsáno pro jednotlivá $i = 1, 2, 3$ dává

$$T_1^0(\mathbf{n}^*) = |\mathbf{n}^*| \psi(\mathbf{n}) \left[(n_1^2 - 1) \frac{\partial \psi}{\partial n_1} + n_1 \left(n_2 \frac{\partial \psi}{\partial n_2} + n_3 \frac{\partial \psi}{\partial n_3} - \psi(\mathbf{n}) \right) \right], \quad (1.76a)$$

$$T_2^0(\mathbf{n}^*) = |\mathbf{n}^*| \psi(\mathbf{n}) \left[(n_2^2 - 1) \frac{\partial \psi}{\partial n_2} + n_2 \left(n_3 \frac{\partial \psi}{\partial n_3} + n_1 \frac{\partial \psi}{\partial n_1} - \psi(\mathbf{n}) \right) \right], \quad (1.76b)$$

$$T_3^0(\mathbf{n}^*) = |\mathbf{n}^*| \psi(\mathbf{n}) \left[(n_3^2 - 1) \frac{\partial \psi}{\partial n_3} + n_3 \left(n_1 \frac{\partial \psi}{\partial n_1} + n_2 \frac{\partial \psi}{\partial n_2} - \psi(\mathbf{n}) \right) \right]. \quad (1.76c)$$

Posledním a stěžejním krokem je volba konkrétního tvaru metriky φ^0 , respektive díky vztahu (1.72) volba anizotropní povrchové energie ψ , která určuje symetrii krystalu. Pro simulace je možné použít následující tvary ψ a jeho derivací převzaté z [9], [18] a [19].

4-četná anizotropie

$$\psi(\mathbf{n}) = 1 + A_1 \left[n_1^4 + n_2^4 + n_3^4 - 6(n_1^2 n_2^2 + n_2^2 n_3^2 + n_1^2 n_3^2) \right], \quad (1.77)$$

kde A_1 je parametr síly anizotropie a derivace ψ jsou

$$\frac{\partial \psi}{\partial n_1}(\mathbf{n}) = 4A_1 n_1 \left[n_1^2 - 3(n_2^2 + n_3^2) \right], \quad (1.78a)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial n_2}(\mathbf{n}) = 4A_1 n_2 \left[n_2^2 - 3(n_1^2 + n_3^2) \right], \quad (1.78b)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial n_3}(\mathbf{n}) = 4A_1 n_3 \left[n_3^2 - 3(n_1^2 + n_2^2) \right]. \quad (1.78c)$$

6-četná anizotropie

$$\psi(\mathbf{n}) = 1 + A_1 \left(n_1^4 + n_2^4 + n_3^4 - \frac{3}{5} \right) + A_2 \left[3(n_1^4 + n_2^4 + n_3^4) + 66n_1^2 n_2^2 n_3^2 - \frac{17}{7} \right], \quad (1.79)$$

kde A_1, A_2 jsou parametry síly anizotropie a derivace ψ jsou

$$\frac{\partial \psi}{\partial n_1}(\mathbf{n}) = n_1 \left[4(A_1 + 3A_2)n_1^2 + 132A_2 n_2^2 n_3^2 \right], \quad (1.80a)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial n_2}(\mathbf{n}) = n_2 \left[4(A_1 + 3A_2)n_2^2 + 132A_2 n_1^2 n_3^2 \right], \quad (1.80b)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial n_3}(\mathbf{n}) = n_3 \left[4(A_1 + 3A_2)n_3^2 + 132A_2 n_1^2 n_2^2 \right]. \quad (1.80c)$$

8-četná anizotropie

$$\psi(\mathbf{n}) = 1 + A_1 \left[n_1^8 + n_2^8 + n_3^8 - 28(n_1^6 n_2^2 + n_1^2 n_2^6 + n_2^6 n_3^2 + n_2^2 n_3^6 + n_1^6 n_3^2 + n_1^2 n_3^6) + 70(n_1^4 n_2^4 + n_2^4 n_3^4 + n_1^4 n_3^4) \right], \quad (1.81)$$

kde A_1 je parametr síly anizotropie a derivace ψ jsou

$$\frac{\partial \psi}{\partial n_1}(\mathbf{n}) = A_1 n_1 \left[n_1^4 (8n_1^2 - 168(n_2^2 + n_3^2)) + n_2^4 (280n_1^2 - 56n_2^2) + n_3^4 (280n_1^2 - 56n_3^2) \right], \quad (1.82a)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial n_2}(\mathbf{n}) = A_1 n_2 \left[n_2^4 (8n_2^2 - 168(n_1^2 + n_3^2)) + n_3^4 (280n_2^2 - 56n_3^2) + n_1^4 (280n_2^2 - 56n_1^2) \right], \quad (1.82b)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial n_3}(\mathbf{n}) = A_1 n_3 \left[n_3^4 (8n_3^2 - 168(n_1^2 + n_2^2)) + n_1^4 (280n_3^2 - 56n_1^2) + n_2^4 (280n_3^2 - 56n_2^2) \right]. \quad (1.82c)$$

Jelikož se budeme v praktické části práce věnovat vlivu anizotropie různě natočené vůči směru výpočetních buněk pravidelné krychlové sítě na růst krystalu, budeme ještě dále potřebovat otáčet hlavní směry anizotropie libovolným směrem. To lze udělat tak, že před dosazením vektoru $\mathbf{n}^* = \nabla \phi$ do výše uvedených vztahů použijeme na $\nabla \phi$ operaci rotace. Tu lze v třírozměrném prostoru reprezentovat pomocí násobení ortogonální matricí $\mathbf{x}_r = \mathbb{A}\mathbf{x}$, kde obecná matice \mathbb{A} rotace okolo jednotkového vektoru $\mathbf{o} = (o_1, o_2, o_3)^T$ o úhel α má tvar [20]

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} \cos \alpha + o_1^2(1 - \cos \alpha) & o_1 o_2(1 - \cos \alpha) - o_3 \sin \alpha & o_1 o_3(1 - \cos \alpha) + o_2 \sin \alpha \\ o_1 o_2(1 - \cos \alpha) + o_3 \sin \alpha & \cos \alpha + o_2^2(1 - \cos \alpha) & o_2 o_3(1 - \cos \alpha) - o_1 \sin \alpha \\ o_1 o_3(1 - \cos \alpha) - o_2 \sin \alpha & o_2 o_3(1 - \cos \alpha) + o_1 \sin \alpha & \cos \alpha + o_3^2(1 - \cos \alpha) \end{pmatrix}.$$

V našich simulacích se omezíme pouze na otočení kolem jedné z os kartézských souřadnic, přičemž budeme zkoumat výsledky právě v rovině, ve které bude anizotropie otočená. Použijeme otočení okolo osy z , tj. $\mathbf{o} = (0, 0, 1)^T$ a tedy matice rotace okolo osy z o úhel α je

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

1.3 Model fázového pole pro binární slitiny

V následující části textu se budeme zabývat představením obecného modelu fázového pole pro tuhnutí v binárních slitinách. Binární slitinou rozumíme směs dvou složek, jež budeme v následujícím textu označovat písmeny A a B. K popisu tak přidáváme koncentrační pole $c(\mathbf{x}, t)$ udávající koncentraci složky B rozpuštěné ve složce A v čase a prostoru. V procesu tuhnutí zde hraje roli jak difuze tepelná, tak difuze rozpuštěné látky. Numerické zachycení obou těchto jevů je však obtížné, jelikož tyto procesy probíhají ve velmi odlišném časovém měřítku. K postihnutí mnohem rychlejší tepelné difuze na stejné síti, je třeba mít tuto síť velmi jemnou a to podstatně zvyšuje výpočetní nároky úlohy. Mimo jiné také v počátcích proběhly pokusy o modelování tuhnutí slitin na adaptivní síti [21]. Z tohoto důvodu někteří autoři [22] odvodili model fázového pole pro tuhnutí slitin za izotermického předpokladu, přičemž teplota v modelu byla řešena buď přímo předepsanou pevnou hodnotou nebo například funkcí, jež lineárně závisela na jednom z rozměrů výpočetní oblasti. Zanedbávání tepelných efektů v systému lze [23] odůvodnit jako oprávněnou aproximaci, jelikož uvolnění latentního tepla z rozhraní je mnohem rychlejší než látková difuze, a proto se teplotní pole vyrovná v době mnohem kratší než je nutná pro přeuspořádání částic a tuhnutí je tedy v podstatě izotermické. Nicméně později studie [24] ukázala, že i při tuhnutí slitin může uvolňování latentního tepla významně ovlivnit dynamiku fázového přechodu. Představíme tedy modely pro oba tyto přístupy k popisu tuhnutí slitin.

1.3.1 Izotermická formulace

Při odvození modelu pro izotermické tuhnutí slitin předpokladem budeme čerpat hlavně z [25], [22] a [26]. Podobně jako v případě čisté látky zde vyjdeme z funkcionálu volné energie \mathcal{F} dle [25] ve tvaru

$$\mathcal{F} = \int_{\Omega} \left[f(\phi, c, T) + \frac{\varepsilon_{\phi}^2}{2} |\nabla\phi|^2 \right] dV, \quad (1.83)$$

kde $f(\phi, c, T)$ je hustota volné energie a ε_{ϕ} je konstanta. Rovnice pro fázové pole opět vychází z rovnice modelu A (1.13) a je dána jako

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = -M^{\phi} \delta_{\phi} \mathcal{F}, \quad (1.84)$$

kde M^{ϕ} je kladná konstanta mobility související s kinetickým koeficientem rozhraní. Časový vývoj koncentrace rozpuštěné látky je řízen rovnicí zachování hmoty

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}, \quad (1.85)$$

kde \mathbf{J} značí difuzní tok. Po dosazení $\mathbf{J} = -\nabla c$ bychom dostali přímo 2. Fickův zákon

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \Delta c. \quad (1.86)$$

Pro odvození modelu fázového pole však volíme obecněji $\mathbf{J} = -M(c, \phi) \nabla \mu$, kde $M(c, \phi) = M^c c(1 - c)$ je mobilita a potenciál μ pokládáme roven $\mu = \delta_c \mathcal{F}$. Tímto získáváme rovnici pro koncentraci

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (M^c c(1 - c) \nabla \delta_c \mathcal{F}). \quad (1.87)$$

Použitím funkcionálu volné energie (1.83) lze analogickým postupem jako v případě odvození modelu fázového pole pro čistou látku derivace $\delta_{\phi} \mathcal{F}$, $\delta_c \mathcal{F}$ identifikovat s funkcemi

$$\begin{aligned} \delta_{\phi} \mathcal{F} &\equiv \frac{\partial f}{\partial \phi} - \nabla \cdot \varepsilon_{\phi}^2 \nabla \phi, \\ \delta_c \mathcal{F} &\equiv \frac{\partial f}{\partial c}. \end{aligned} \quad (1.88)$$

Následně dosazením (1.88) a do (1.84) a (1.87) získáme obecný tvar [22] rovnic fázového pole pro binární slitinu

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = -M^{\phi} \left(\frac{\partial f}{\partial \phi} - \varepsilon_{\phi}^2 \Delta \phi \right), \quad (1.89)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot \left[M^c c(1 - c) \nabla \left(\frac{\partial f}{\partial c} \right) \right]. \quad (1.90)$$

Tyto rovnice jsou nazývány Allenova-Cahnova a Cahnova-Hilliardova. Parametry M^{ϕ} a M^c jsou kladné konstanty mobility svázané [22] s kinetickým koeficientem rozhraní a difuzním koeficientem rozpuštěné látky vztahy

$$M^{\phi} = (1 - c)M_A^{\phi} + cM_B^{\phi}, \quad (1.91)$$

$$M^c = \frac{(1 - p(\phi))D^S + p(\phi)D^L}{RT}, \quad (1.92)$$

kde D^S, D^L značí difuzní koeficienty v objemu pevné (solid) a kapalné (liquid) fáze, R je plynová konstanta a $p(\phi)$ je interpolační funkce.

Podobných modelů existuje více, některé [22], [27] například do výchozího funkcionálu volné energie přidávají navíc i gradientní člen pro koncentraci ve tvaru $\frac{\epsilon_c^2}{2}|\nabla c|^2$. Rovnice jsou doplněny o vhodné okrajové a počáteční podmínky.

Hustota volné energie $f(\phi, c, T)$

Při tvorbě hustoty volné energie budeme využívat dvouminimový potenciál

$$g(\phi) = \phi^2(1 - \phi)^2, \quad (1.93)$$

který je volen tak, že má minima $g(\phi_L = 0) = g(\phi_S = 1) = 0$. Dále budeme využívat interpolační funkci, kterou volíme dle [26] jako

$$p(\phi) = \frac{\int_0^\phi g(x)dx}{\int_0^1 g(x)dx} = \phi^3(6\phi^2 - 15\phi + 10). \quad (1.94)$$

Poznamenejme zde, že tato funkce splňuje vhodné požadavky, tedy $p(0) = 0, p(1) = 1$ a současně lze snadno odvodit, že

$$p'(\phi) = 3\phi^2(6\phi^2 - 15\phi + 10) + \phi^3(12\phi - 15) = 30\phi^4 - 60\phi^3 + 30\phi^2 = 30\phi^2(1 - \phi)^2 = 30g(\phi). \quad (1.95)$$

Tedy platí také, že $p'(0) = p'(1) = 0$, což v konečném důsledku zajišťuje, že $\frac{\partial f}{\partial \phi} = 0$, pokud $\phi = 0$ nebo $\phi = 1$.

Jedním ze způsobů konstrukce hustoty volné energie pro slitiny je vzít v úvahu, že slitina obsahuje dvě čisté látky A a B, z nichž obě jsou váženy relativní koncentrací. K tomu je nutné zahrnout vznikající entropické a entalpické interakce, jelikož slitina je směs atomů A a B v obou fázích. Toto lze [25] zapsat matematicky jako

$$f(\phi, c, T) = (1 - c)f_A(\phi, T) + cf_B(\phi, T) + RT[c \ln c + (1 - c) \ln(1 - c)] \quad (1.96)$$

$$+ c(1 - c)[M^S p(\phi) + M^L(1 - p(\phi))], \quad (1.97)$$

kde M^S a M^L jsou fenomenologické členy vyjadřující interakce mezi atomy A a B v pevné a kapalné fázi zkombinované pomocí interpolační funkce $p(\phi)$. Funkce f_A, f_B jsou volné energie jednotlivých složek A a B, jež lze rozepsat [22] jako

$$f_A(\phi, T) = (1 - p(\phi))f_A^L(T) + p(\phi)f_A^S(T) + W_A g(\phi), \quad (1.98)$$

kde W_A přidává energetický skok tvořící bariéru mezi kapalnou a pevnou fází při teplotě tání. Funkce $f_A^S, f_A^L, f_B^S, f_B^L$ jsou běžné volné energie obou složek v kapalném a pevném stavu a jsou pouze funkcemi teploty. Analogicky lze konstruovat $f_B(\phi, T)$. Dále uvedeme z [25] speciální tvary hustoty volné energie pro různé typy modelů pro binární slitiny.

1. $f(\phi, c, T)$ pro izomorfní slitiny

Termín izomorfní slitiny označuje případ, kdy jsou obě složky slitiny zcela mísitelné v kapalném i pevném skupenství, jako příklad lze použít třeba Cu-Ni slitiny. Pro složky s podobným atomovým poloměrem lze položit $W_A = W_B = W$ a také lze položit členy $M^S = M^L = 0$. Poté dostáváme tvar

$$f(\phi, c, T) = (f^L(T_A^m) - (T - T_A^m)s_A^L)(1 - c) + (f^L(T_B^m) - (T - T_B^m)s_B^L)c \quad (1.99)$$

$$- \left(\frac{L_A(T_A^m - T)}{T_A^m}(1 - c) + \frac{L_B(T_B^m - T)}{T_B^m}c \right) p(\phi) \quad (1.100)$$

$$+ Wg(\phi) + RT[c \ln c + (1 - c) \ln(1 - c)], \quad (1.101)$$

kde T_A^m, T_B^m jsou body tání jednotlivých složek slitiny, L_A, L_B jejich latentní tepla a s_A^L, s_B^L jsou hustoty entropie kapaliných A a B.

2. $f(\phi, c, T)$ pro eutektické slitiny

Pojem eutektická slitina se používá pro homogenní směs, jejíž bod tání je nižší než bod tání obou jednotlivých složek. Nejnižší možný bod tání pro všechny možné směšovací poměry daných látek se nazývá eutektická teplota. Předpokladem eutektické směsi je mísitelnost obou složek v kapalně fázi, zatímco v pevné fázi mísitelné nejsou. Z [25] opět pokládáme $W_A = W_B = W$. Dále lze s předpokladem ideální kapalně fáze položit $M^L = 0$ a interakce pevné fáze lze modelovat pomocí M^S například empirickým vztahem $M^S = (a_1T - a_2)(2c - 1) - (a_3T + a_4)$, kde konstanty $a_i, i = 1, 2, 3, 4$ jsou stanoveny z termodynamiky pro konkrétní slitinu. To dává výsledný tvar objemové hustoty

$$f(\phi, c, T) = (f^L(T_A^m) - (T - T_A^m)s_A^L)(1 - c) + (f^L(T_B^m) - (T - T_B^m)s_B^L)c \quad (1.102)$$

$$- \left(\frac{L_A(T_A^m - T)}{T_A}(1 - c) + \frac{L_B(T_B^m - T)}{T_B^m}c \right) p(\phi) \quad (1.103)$$

$$+ c(1 - c)[(a_1T - a_2)(2c - 1) - (a_3T + a_4)]p(\phi) \quad (1.104)$$

$$+ Wg(\phi) + RT[c \ln c + (1 - c) \ln(1 - c)]. \quad (1.105)$$

1.3.2 Neizotermická formulace

Neizotermická formulace modelu fázového pole pro binární slitiny se snaží vzít v úvahu tepelné účinky v podobě uvolňování latentního tepla v průběhu tuhnutí. Při odvození modelu budeme čerpat hlavně z [28] a [29], přičemž tato literatura pevné fázi přisuzuje hodnotu $\phi = 0$ a kapalně fázi $\phi = 1$. Proto na konci pro jednotnost provedeme substituci $\phi \rightarrow 1 - \phi$. Vyjdeme z entropické formulace [26] a definujeme funkcionál entropie

$$\mathcal{S} = \int_{\Omega} \left[s(\phi, e, c) + \frac{\varepsilon_{\phi}^2}{2} |\nabla \phi|^2 \right] dV, \quad (1.106)$$

kde s je termodynamická hustota entropie, ϕ je fázové pole, e je hustota vnitřní energie a c opět značí koncentraci látky B v látce A. Na funkci s klademe nárok, aby pro význačné hodnoty $\phi = 0, \phi = 1$ přecházela [29] v klasickou termodynamickou hustotu entropie pro homogenní kapalnou a pevnou fázi. Parametr ε_{ϕ} podobně jako v předchozích funkcionálech (1.83) a (1.12) zajišťuje gradientní korekce k hustotě entropie.

Pro dynamiku vyjdeme ze zákonů zachování pro e, c ve tvaru

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_e, \quad (1.107)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_c. \quad (1.108)$$

Podobně jako v případě izotermického modelu volíme toky $\mathbf{J}_e, \mathbf{J}_c$

$$\mathbf{J}_e = M^e \nabla \delta_e \mathcal{S}, \quad (1.109)$$

$$\mathbf{J}_c = M^c \nabla \delta_c \mathcal{S}, \quad (1.110)$$

kde M^c, M^e jsou kladné konstanty mobility. Řídící rovnice pro fázové pole ϕ je opět dána (1.84)

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M^{\phi} \delta_{\phi} \mathcal{S}. \quad (1.111)$$

Dále postupem korektně popsaným při odvození modelu fázového pole pro čistou látku a použitím základní termodynamiky [29] můžeme identifikovat derivace

$$\delta_e \mathcal{S} \equiv \frac{\partial s}{\partial e} = \frac{1}{T}, \quad (1.112)$$

$$\delta_c \mathcal{S} \equiv \frac{\partial s}{\partial c} = \frac{\mu_A - \mu_B}{T}, \quad (1.113)$$

$$\delta_\phi \mathcal{S} \equiv \frac{\partial s}{\partial \phi} + \nabla \cdot (\varepsilon_\phi^2 \nabla \phi), \quad (1.114)$$

kde μ_A, μ_B jsou chemické potenciály složek A a B.

V tomto bodě lze také způsobem dle [29] zanést do dvourozměrného modelu anizotropii do rovnice pro fázové pole ϕ a to položením

$$\varepsilon_\phi = \bar{\varepsilon}_\phi v = \bar{\varepsilon}_\phi (1 + \gamma_\varepsilon \cos(k_\varepsilon \theta)), \quad (1.115)$$

kde $\bar{\varepsilon}_\phi, \gamma_\varepsilon, k_\varepsilon$ jsou konstanty a θ představuje úhel mezi horizontální osou x a vnější normálou k fázovému rozhraní. Poté dle [29] dostáváme

$$\delta_\phi \mathcal{S} \equiv \frac{\partial s}{\partial \phi} - \bar{\varepsilon}_\phi^2 \nabla \cdot (v^2 \nabla \phi) - \bar{\varepsilon}_\phi^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(v \frac{dv}{d\theta} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) - \bar{\varepsilon}_\phi^2 \frac{\partial}{\partial y} \left(v \frac{dv}{d\theta} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right). \quad (1.116)$$

Uvažujeme Helmholtzovu vnitřní energii

$$f = (1 - c)\mu_A + c\mu_B \quad (1.117)$$

a použitím termodynamických zákonů dostáváme derivaci potřebnou do (1.114) jako

$$\frac{\partial s}{\partial \phi} = -\frac{1}{T} \frac{\partial f}{\partial \phi}. \quad (1.118)$$

Nyní tedy potřebujeme vyjádřit funkci f v proměnných ϕ, T a využít vztahy (1.117), (1.118). K tomu nejprve specifikujeme konkrétní tvar chemických potenciálů jako

$$\mu_A = f_A(\phi, T) + \omega(\phi)c^2 + \frac{RT}{V^m} \ln(1 - c), \quad (1.119)$$

$$\mu_B = f_B(\phi, T) + \omega(\phi)(1 - c)^2 + \frac{RT}{V^m} \ln c,$$

kde $f_A(\phi, T), f_B(\phi, T)$ jsou volné energie čistých materiálů A a B, R je plynová konstanta, V^m je molární objem a $\omega(\phi)$ je termodynamická konstanta reprezentující entalpii mísení a dále pokládáme idealisticky $\omega(\phi) \equiv 0$. Pro vyjádření závislosti funkcí f_A, f_B na teplotě a parametru fázového pole nejdříve specifikujeme s využitím interpolační funkce $p(\phi) = \phi^3(6\phi^2 - 15\phi + 10)$ vnitřní energii jednotlivých komponent

$$e_A = e_A^S + p(\phi)(e_A^L - e_A^S), \quad (1.120)$$

kde e_A^S, e_A^L jsou vnitřní energie látky A v kapalném a pevném stavu. Vnitřní energie pro čistou látku můžeme s předpokladem konstantní tepelné kapacity psát

$$e_A^S(T) = e_A^S(T_A^m) + C_A^S(T - T_A^m), \quad (1.121)$$

$$e_A^L(T) = e_A^L(T_A^m) + C_A^L(T - T_A^m), \quad (1.122)$$

kde T_A^m je bod tání látky A, C_A^S, C_A^L jsou tepelné kapacity pro pevnou a kapalnou fázi látky A. Pro materiály zájmu lze udělat aproximaci [29]

$$C_A^S = C_A^L = C_A. \quad (1.123)$$

Latentní teplo lze definovat

$$L_A = e_A^L(T_A^m) - e_A^S(T_A^m) \quad (1.124)$$

a konečně lze psát vnitřní energii jako funkci ϕ a T

$$e_A = e_A^L(T_A^m) + C_A(T - T_A^m) + p(\phi)L_A. \quad (1.125)$$

Nyní použitím termodynamického vztahu

$$f = e - Ts = e + T \frac{\partial f}{\partial T} \quad (1.126)$$

nalezneme funkci volné energie čistého materiálu s dvouminimovým potenciálem $g(\phi) = \phi^2(1 - \phi)^2$ ve tvaru

$$f_A(\phi, T) = W_A g(\phi) + [e_A^L(T_A^m) - C_A T_A^m + p(\phi)L_A] \left(1 - \frac{T}{T_A^m}\right) - C_A T \ln \frac{T}{T_A^m}, \quad (1.127)$$

kde W_A je konstanta. Naprosto analogicky záměnou indexů A a B lze postupovat při odvození $f_B(\phi, T)$. Pro přehlednost výsledných rovnic definujeme použitím (1.127) s využitím faktu (1.95)

$$H_A(\phi, T) = \frac{1}{T} \frac{\partial f_A}{\partial \phi} = W_A g'(\phi) + 30g(\phi)L_A \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_A^m}\right), \quad (1.128)$$

$$H_B(\phi, T) = \frac{1}{T} \frac{\partial f_B}{\partial \phi} = W_B g'(\phi) + 30g(\phi)L_A \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_B^m}\right). \quad (1.129)$$

Nyní již lze dosadit do (1.111) kombinaci vztahů (1.114), (1.117), (1.118), (1.119) a (1.127). S využitím vztahu (1.128) pak dostáváme rovnici pro fázové pole

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M^\phi \left(-\frac{1}{T} \frac{\partial f}{\partial \phi} + \varepsilon_\phi^2 \Delta \phi \right) = M^\phi \left(\varepsilon_\phi^2 \Delta \phi - (1 - c)H_A(\phi, T) - cH_B(\phi, T) \right), \quad (1.130)$$

kde lze navíc opět předpokládat, že M^ϕ závisí na jednotlivých komponentách

$$M^\phi = (1 - c)M_A^\phi + cM_B^\phi. \quad (1.131)$$

Rovnici pro koncentraci odvodíme z (1.108) s využitím vztahů (1.110) a (1.113)

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla M^c \nabla \frac{\mu_A - \mu_B}{T}, \quad (1.132)$$

kde si dále rozepíšeme člen

$$\nabla \frac{\mu_A - \mu_B}{T} = \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\frac{\mu_A - \mu_B}{T} \right) \nabla \phi + \frac{\partial}{\partial c} \left(\frac{\mu_A - \mu_B}{T} \right) \nabla c + \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\mu_A - \mu_B}{T} \right) \nabla T, \quad (1.133)$$

u kterého poznamenejme, že [28] $\nabla\delta_c\mathcal{S}$ musí být vyhodnocován při konstantním T a tedy při použití výpočtů

$$\frac{\partial}{\partial\phi}\left(\frac{\mu_A - \mu_B}{T}\right) = H_A(\phi, T) - H_B(\phi, T), \quad (1.134)$$

$$\frac{\partial}{\partial c}\left(\frac{\mu_A - \mu_B}{T}\right) = -\frac{R}{V^m} \frac{1}{c(1-c)} \quad (1.135)$$

Ize psát rovnici pro koncentraci

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot M^c \left(\frac{R}{V^m} \frac{\nabla c}{c(1-c)} + (H_B(\phi, T) - H_A(\phi, T))\nabla\phi \right). \quad (1.136)$$

Dále můžeme rozepsat

$$M^c = \frac{V^m}{R} c(1-c) [D^S + p(\phi)(D^L - D^S)] = \frac{V^m}{R} c(1-c) D^c, \quad (1.137)$$

kde D^S, D^L jsou klasické difuzní koeficienty pro pevnou látku a kapalinu. S tímto lze zapsat rovnici (1.136) jako

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot D^c \left(\nabla c + \frac{V^m}{R} c(1-c)(H_B(\phi, T) - H_A(\phi, T))\nabla\phi \right). \quad (1.138)$$

Rovnici pro teplotní pole T získáme z (1.107). Dosazením vztahů (1.109) a (1.112) získáme

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\nabla \cdot M^e \nabla \left(\frac{1}{T} \right) = -\nabla \cdot M^e \frac{\nabla T}{T^2}. \quad (1.139)$$

K dokončení odvození modelu učiníme následující oprávněné [23] volby:

$$\begin{aligned} e &= (1-c)e_A + ce_B, \\ C_A &= C_B = C, \\ M^e &= kT^2, \end{aligned} \quad (1.140)$$

kde k je tepelná vodivost a e_A, e_B jsou dány (1.125). Po dosazení (1.140) do (1.139) již získáme rovnici vedení tepla

$$\frac{\partial T}{\partial t} + [(1-c)L_A + cL_B] \frac{p'(\phi)}{C} \frac{\partial\phi}{\partial t} = D_{AB}\Delta T, \quad (1.141)$$

kde D_{AB} je difuzní koeficient slitiny. K těmto rovnicím jsou opět přidruženy vhodné okrajové a počáteční podmínky.

Na závěr substitucí $\phi \rightarrow 1 - \phi$ přecházíme k modelu, který má v souladu se zbytkem práce pevnou fází reprezentovanou hodnotou $\phi = 1$ a kapalnou fází hodnotou $\phi = 0$. Tak získáme soustavu rovnic

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D_{AB}\Delta T + [(1-c)L_A + cL_B] \frac{p'(\phi)}{C} \frac{\partial\phi}{\partial t}, \quad (1.142a)$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = M^\phi \left(\varepsilon_\phi^2 \Delta\phi + (1-c)H_A(\phi, T) + cH_B(\phi, T) \right), \quad (1.142b)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot [D^S + p(1-\phi)(D^L - D^S)] \left(\nabla c - \frac{V^m}{R} c(1-c)(H_B(\phi, T) - H_A(\phi, T))\nabla\phi \right). \quad (1.142c)$$

Kapitola 2

Numerický algoritmus

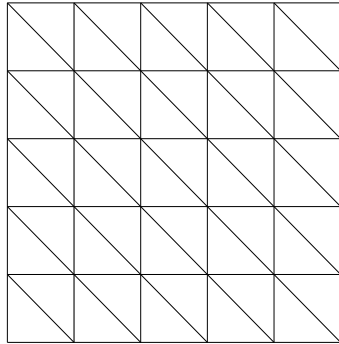
Jelikož modely fázového pole nejsou řešitelné analyticky, je k jejich řešení nutné využít numerických metod. Pro řešení parciálních diferenciálních rovnic samozřejmě existuje mnoho metod, jež lze použít pro výpočet aproximace řešení. Mezi nejjednodušší patří metoda sítí (metoda konečných diferencí), která byla použita v mé předchozí práci [2]. Při implementaci matematických modelů popsaných v kapitole 1 pro potřeby této práce se omezíme na použití metody konečných objemů. Tématem této kapitoly bude odvození semidiskrétního schématu pro naši úlohu, na kterou použijeme Rungeovu-Kuttovu-Mersonovu metodu pro řešení obyčejných diferenciálních rovnic. Prvním krokem každé metody je diskretizace výpočetní oblasti Ω pomocí numerické sítě. Jedná se vlastně o přechod ke konečnému počtu diskrétních bodů, ve kterých už jsme v počítačové simulaci schopni vyčíslovat a uchovávat hodnoty funkcí zájmu T , ϕ a c .

2.1 Numerické sítě

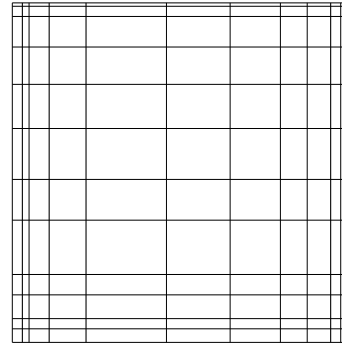
V numerické matematice jsou sítě používány k diskretizaci výpočetní oblasti Ω . Sít' se skládá z jednotlivých buněk, které jsou složeny z entit nižší dimenze - stěn, hran a vrcholů. Tyto objekty jsou v síti topologicky propojeny. Numerické sítě můžeme rozdělit na dva základní typy, a to na strukturované a nestrukturované.

2.1.1 Strukturované sítě

Strukturovaná sít' je rozdělení oblasti, kde přesná poloha entity je určena jejím oindexováním. Strukturované sítě (obr. 2.1) jsou vhodné pro diskretizaci oblastí s jednoduchou geometrií, jako je například sjednocení souhlasně orientovaných obdélníků ve dvou rozměrech, jež lze snadno pokrýt sítí čtvercovou, případně obdélníkovou. I ve strukturované síti je možné zjemňovat sít' v oblasti zájmu (obr. 2.1b), což může být při praktických výpočtech velmi užitečné. Naopak se nehodí k popisu oblastí se složitější geometrií. Tento problém lze vyřešit dvěma způsoby. Prvním je pokrytí výpočetní oblasti strukturovanou sítí a následné osekání přebývajících nepravidelných buněk na kraji výpočetní oblasti, druhou možností je použít sít' nestrukturovanou. Samozřejmě oba tyto způsoby lze i kombinovat. V praxi je málokdy výpočetní oblast jednoduchá, a proto je vhodné se zabývat výpočtem na nestrukturovaných sítích.



(a) Strukturovaná trojúhelníková síť

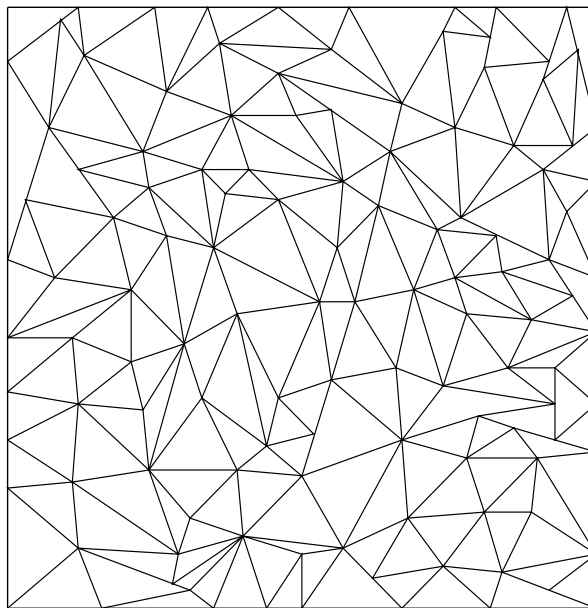


(b) Strukturovaná obdélníková síť

Obrázek 2.1: Příklady strukturovaných sítí na dvourozměrné čtvercové oblasti.

2.1.2 Nestrukturované sítě

Zásadní odlišností nestrukturovaných sítí od strukturovaných je, že zde nelze najít pravidlo svazující polohu entity s jejím indexem. Obecně se nestrukturovaná síť ve třech rozměrech může skládat z libovolných mnohostranných útvarů. Často jsou ale používány nestrukturované sítě složené ze stejných geometrických útvarů - například sítě složené ze čtyřstranných nebo trojúhelníků. Jako takové si teď nestrukturované sítě formálně upřesníme pomocí definice [3].



Obrázek 2.2: Příklad nestrukturované trojúhelníkové sítě dvourozměrné čtvercové oblasti.

Poznámka 2. Bud' $M \subset \Omega \subset \mathbb{R}^n$, kde $n \in \{2, 3\}$. Označíme $m(M)$ n -rozměrnou Lebesgueovu míru množiny M . Obdobně $\overline{m}(N)$ označuje $(n - 1)$ -rozměrnou Hausdorfovou míru množiny $N \subset \Omega \subset \mathbb{R}^n$.

Definice 8. Nestrukturovanou sítí na oblasti $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ nazveme množinu $\Pi \subset 2^\Omega$ takovou, že $\forall K \in \Pi$ je konvexní n -polytop, který nazveme buňkou. Dále existuje množina $(n-1)$ -polytopů $\mathcal{E} \subset 2^{\Omega-1}$ taková, že jsou splněny podmínky

$$\bigcup_{K \in \Pi} K = \Omega, \quad (2.1)$$

$$(\forall K \in \Pi)(\exists \mathcal{E}_K \subset \mathcal{E})(\cup_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \sigma = \partial K), \quad (2.2)$$

$$(\forall K, L \in \Pi)(K \neq L \implies ((\overline{m}(\overline{K} \cap \overline{L}) = 0) \vee (\exists \sigma \in \mathcal{E})(\overline{K} \cap \overline{L} = \sigma))), \quad (2.3)$$

$$(\exists P \subset \Omega)((\forall K \in \Pi)(\exists \mathbf{x}_K \in P)(\mathbf{x}_K \in \overline{K}) \wedge (\forall \mathbf{x} \in P)(\exists K \in \Pi)(\mathbf{x} \in \overline{K})), \quad (2.4)$$

$$(\forall K, L \in \Pi)(K \neq L \implies (\mathbf{x}_K \neq \mathbf{x}_L) \wedge (\overline{\mathbf{x}_K \mathbf{x}_L} \perp \overline{K} \cap \overline{L})). \quad (2.5)$$

Podmínku (2.5) pro tzv. přípustnost sítě, která zajišťuje pravý úhel mezi úsečkou spojující význačné body buněk a jejich společnou stěnou, nebudeme v našich sítích požadovat. Samozřejmě, aby to bylo možné, bude nutné tomu uzpůsobit numerické schéma a provést odpovídající korekci.

Pro přehlednost a zjednodušení následujícího textu zavedeme značení:

- $\mathcal{E}_{ext} = \{\sigma \in \mathcal{E} : \sigma \subset \partial\Omega\}$, $\mathcal{E}_{int} = \mathcal{E} - \mathcal{E}_{ext}$
- $\sigma = K|L$ značí, že $\sigma = \overline{K} \cap \overline{L}$
- $\mathcal{D}_{K,L} = |\overline{\mathbf{x}_K \mathbf{x}_L}|$ pro $K|L = \sigma \in \mathcal{E}_{int}$ a $\mathcal{D}_{K,\sigma} = |\overline{\mathbf{x}_K \mathbf{y}_\sigma}|$, $\sigma \in \mathcal{E}_K \cap \mathcal{E}_{ext}$, kde \mathbf{y}_σ je střed stěny σ
- \mathcal{H}^Π značí množinu funkcí $f : \mathcal{J} \times P \rightarrow \mathbb{R}$, kde P je množina význačných bodů z definice 8. Pro takové funkce označíme $\forall K \in \Pi$

$$f_K(t) = f(t, \mathbf{x}_K) \quad (2.6)$$

- $\forall \sigma \in \mathcal{E}$ a funkci f budeme značit $f_\sigma = f(\mathbf{y}_\sigma)$
- $\mathbf{n}_{K,\sigma}$ jednotkový normálový vektor k σ mířící ven z K

2.2 Metoda konečných objemů

Metoda konečných objemů [30] je numerická metoda pro řešení parciálních diferenciálních rovnic, jejíž výhodou je, že je snadno použitelná i pro nestrukturované sítě. Základní myšlenkou této metody je integrace původních rovnic přes jednotlivé buňky sítě a následné převedení objemových integrálů obsahujících divergenci na integrály plošné přes hranice buněk pomocí Gaussovy-Ostrogradského věty 4. Tento postup si zde detailně ukážeme pro rovnice v obecnějším tvaru, jež budou postihovat všechny rovnice modelů z kapitoly 1. Úlohu budeme řešit na výpočetní oblasti $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, kde $n \in \{2, 3\}$, a časovém intervalu \mathcal{J} s diskretizací oblasti pomocí obecně nestrukturované sítě, přičemž budeme používat značení zavedené v předchozím textu. Zapišeme nyní obecnější rovnici pokrývající řídicí rovnice pro teplotu jako

$$f(\phi, T, c) \frac{\partial T}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = \Delta T(t, \mathbf{x}) + g(\phi, T, c) \frac{\partial \phi}{\partial t}(t, \mathbf{x}) \quad \text{v } \Omega \times \mathcal{J} \quad (2.7)$$

a rovnici pro koncentraci

$$\frac{\partial c}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = \nabla \cdot \left(h(\phi, T, c) [\nabla c(t, \mathbf{x}) + i(\phi, T, c) \nabla \phi(t, \mathbf{x})] \right) + j(\phi, T, c) \quad \text{v } \Omega \times \mathcal{J}, \quad (2.8)$$

¹pro $n = 2$ jsou v \mathcal{E} hrany, pro $n = 3$ jsou v \mathcal{E} stěny buněk, dále pro jednoduchost používáme termín stěny

kde f, g, h, i, j jsou funkce závislé pouze na samotných hodnotách polí ϕ, T, c , ne na jejich gradientech. Rovnice pro fázové pole lze postihnout rovnicí (2.8) záměnou c a ϕ a položením $i(\phi, T, c) \equiv 0$, proto odvození metody konečných objemů provedeme bez újmy na obecnosti pouze pro (2.7) a (2.8). K těmto rovnicím opět náleží příslušná okrajová podmínka Neumannova či Dirichletova typu. K odvození opět použijeme Gaussovu-Ostrogradského větu, a proto připomeňme její znění.

Věta 4 (Gaussova - Ostrogradského věta). Bud' $U \subset \mathbb{R}^n$ omezená otevřená oblast, kde $n \in \{2, 3\}$. Necht' její hranice ∂U je uzavřená a po částech třídy C^1 . $F_i \in C^1(U)$ a $F_i \in C(\bar{U})$, $i \in \{1, \dots, n\}$. Potom platí

$$\int_U \nabla \cdot \mathbf{F} dV = \int_{\partial U} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dS,$$

kde \mathbf{n} je jednotkový vektor vnější normály k ∂U .

Prvním krokem je integrace rovnic (2.7) a (2.8) přes částečný konečný objem buňky K , čímž dostáváme

$$\int_K f(\phi, T, c) \frac{\partial T}{\partial t}(t, \mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_K \Delta T(t, \mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_K g(\phi, T, c) \frac{\partial \phi}{\partial t}(t, \mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (2.9a)$$

$$\int_K \frac{\partial c}{\partial t}(t, \mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_K \nabla \cdot \left(h(\phi, T, c) [\nabla c(t, \mathbf{x}) + i(\phi, T, c) \nabla \phi(t, \mathbf{x})] \right) + \int_K j(\phi, T, c) d\mathbf{x}. \quad (2.9b)$$

Nyní použitím faktu, že $\Delta = \nabla \cdot \nabla$ a Gaussovy-Ostrogradského věty na členy s gradienty

$$\int_K f(\phi, T, c) \frac{\partial T}{\partial t}(t, \mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\partial K} \nabla T(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} dS + \int_K g(\phi, T, c) \frac{\partial \phi}{\partial t}(t, \mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (2.10a)$$

$$\int_K \frac{\partial c}{\partial t}(t, \mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\partial K} \left(h(\phi, T, c) [\nabla c(t, \mathbf{x}) + i(\phi, T, c) \nabla \phi(t, \mathbf{x})] \right) \cdot \mathbf{n} dS + \int_K j(\phi, T, c) d\mathbf{x}. \quad (2.10b)$$

S využitím aditivity integrálu lze integrál přes ∂K rozložit na součet integrálů přes všechny stěny buňky K

$$\int_K f(\phi, T, c) \frac{\partial T}{\partial t}(t, \mathbf{x}) d\mathbf{x} = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \int_{\sigma} \nabla T(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} dS + \int_K g(\phi, T, c) \frac{\partial \phi}{\partial t}(t, \mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (2.11a)$$

$$\int_K \frac{\partial c}{\partial t}(t, \mathbf{x}) d\mathbf{x} = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \int_{\sigma} \left(h(\phi, T, c) [\nabla c(t, \mathbf{x}) + i(\phi, T, c) \nabla \phi(t, \mathbf{x})] \right) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} dS + \int_K j(\phi, T, c) d\mathbf{x}. \quad (2.11b)$$

Nyní s využitím znalosti hodnot polí ϕ, T, c ve význačných bodech sítě interpolujeme tyto hodnoty na stěny podle předpisu (2.15). Se znalostí hodnot polí ϕ, T, c ve význačných bodech a na stěnách, můžeme

v integrálech (2.11) provést následující aproximace

$$\int_K f(\phi, T, c) \frac{\partial T}{\partial t}(t, \mathbf{x}) d\mathbf{x} \approx m(K) f(\phi_K, T_K, c_K) \dot{T}_K, \quad (2.12a)$$

$$\int_K \frac{\partial c}{\partial t}(t, \mathbf{x}) d\mathbf{x} \approx m(K) \dot{c}_K, \quad (2.12b)$$

$$\int_K j(\phi, T, c) d\mathbf{x} \approx m(K) j(\phi_K, T_K, c_K), \quad (2.12c)$$

$$\int_\sigma \nabla T(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} dS \approx \bar{m}(\sigma) (\nabla T)_\sigma \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}, \quad (2.12d)$$

$$\int_\sigma h(\phi, T, c) \nabla c(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} dS \approx \bar{m}(\sigma) h(\phi_\sigma, T_\sigma, c_\sigma) (\nabla c)_\sigma \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}, \quad (2.12e)$$

$$\int_\sigma h(\phi, T, c) i(\phi, T, c) \nabla \phi(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} dS \approx \bar{m}(\sigma) h(\phi_\sigma, T_\sigma, c_\sigma) i(\phi_\sigma, T_\sigma, c_\sigma) (\nabla \phi)_\sigma \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}. \quad (2.12f)$$

Poslední neznámou, kterou je potřeba aproximovat pomocí známých hodnot jsou gradienty na stěně pro jednotlivá pole ϕ, T, c . Vyjádření toků pomocí dostupných hodnot je podstatným problémem a náplní samostatné sekce.

2.2.1 Aproximace gradientu

V následujících úvahách se pro snadnější značení oprostíme od časové závislosti, která v nich nebude hrát roli a budeme používat obecnou funkci $\Phi(\mathbf{x}) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, přičemž bude nutné rozlišit speciálně případy pro Neumannovu a Dirichletovu okrajovou podmínku. Potřebujeme znát gradient na stěně σ ve směru vnější normály $\mathbf{n}_{K,\sigma}$. Prvním způsobem je aproximace s pomocí Greenovy věty, kde vyjdeme z

$$m(K) (\nabla \Phi)_K \approx \int_K \nabla \Phi d\mathbf{x} = \int_{\partial K} \Phi \cdot n dS \approx \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \bar{m}(\sigma) \Phi_\sigma \mathbf{n}_{K,\sigma}, \quad (2.13)$$

a tedy dostáváme

$$(\nabla \Phi)_K \approx \frac{1}{m(K)} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \bar{m}(\sigma) \Phi_\sigma \mathbf{n}_{K,\sigma}, \quad (2.14)$$

kde Φ_σ je hodnota Φ na stěně $\sigma = \bar{K} \cap \bar{L}$. Tu získáme lineární interpolací se značením z obrázku 2.3 jako

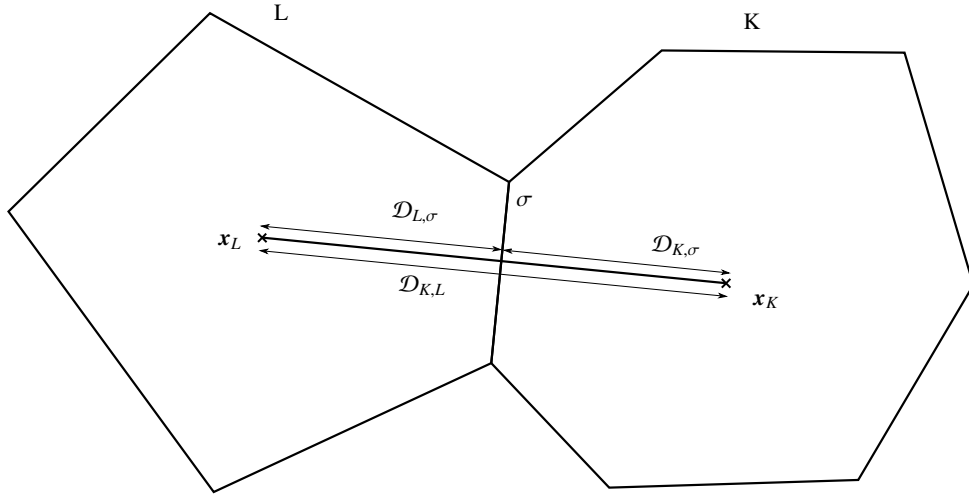
$$\Phi_\sigma = \frac{\mathcal{D}_{K,\sigma}}{\mathcal{D}_{K,L}} \Phi_L + \frac{\mathcal{D}_{L,\sigma}}{\mathcal{D}_{K,L}} \Phi_K. \quad (2.15)$$

Z gradientů ve středech buněk můžeme opět lineární interpolací získat gradienty na stěně

$$(\nabla \Phi)_\sigma = \frac{\mathcal{D}_{K,\sigma}}{\mathcal{D}_{K,L}} (\nabla \Phi)_L + \frac{\mathcal{D}_{L,\sigma}}{\mathcal{D}_{K,L}} (\nabla \Phi)_K. \quad (2.16)$$

Dalším způsobem k aproximaci toků na stěnách bez explicitního výpočtu gradientu, který ovšem funguje pouze pro přípustné sítě, je použití konečné diference

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{n}_{K,\sigma}} \right)_\sigma = (\nabla \Phi)_\sigma \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} = \frac{\Phi_L - \Phi_K}{\mathcal{D}_{K,L}} + \mathcal{O}(\mathcal{D}_{K,L}^2). \quad (2.17)$$



Obrázek 2.3: Interpolace veličin na stěnách vnitřních buněk

Jelikož budeme používat i sítě, které nebudou striktně splňovat podmínku přípustnosti, chtěli bychom pomocí tohoto výrazu provést korekci [31] původního gradientu z výrazu (2.16) tak, aby pro korigovaný gradient platilo

$$(\nabla\Phi)_{\sigma}^{corr} \cdot \mathbf{d}_{KL} = \frac{\Phi_L - \Phi_K}{\mathcal{D}_{K,L}}, \quad (2.18)$$

kde

$$\mathbf{d}_{KL} = \frac{\mathbf{x}_L - \mathbf{x}_K}{\mathcal{D}_{K,L}}. \quad (2.19)$$

Z rovnosti (2.18) dostaneme vhodný tvar korigovaného gradientu

$$(\nabla\Phi)_{\sigma}^{corr} = (\nabla\Phi)_{\sigma} + \left(\frac{\Phi_L - \Phi_K}{\mathcal{D}_{K,L}} - (\nabla\Phi)_{\sigma} \cdot \mathbf{d}_{KL} \right) \mathbf{d}_{KL}, \quad (2.20)$$

přičemž lze snadno ověřit, že platí

$$(\nabla\Phi)_{\sigma}^{corr} \cdot \mathbf{d}_{KL} = (\nabla\Phi)_{\sigma} \cdot \mathbf{d}_{KL} + \frac{\Phi_L - \Phi_K}{\mathcal{D}_{K,L}} \mathbf{d}_{KL} \cdot \mathbf{d}_{KL} - ((\nabla\Phi)_{\sigma} \cdot \mathbf{d}_{KL}) \mathbf{d}_{KL} \cdot \mathbf{d}_{KL} \quad (2.21)$$

$$= (\nabla\Phi)_{\sigma} \cdot \mathbf{d}_{KL} + \frac{\Phi_L - \Phi_K}{\mathcal{D}_{K,L}} - ((\nabla\Phi)_{\sigma} \cdot \mathbf{d}_{KL}) = \frac{\Phi_L - \Phi_K}{\mathcal{D}_{K,L}}. \quad (2.22)$$

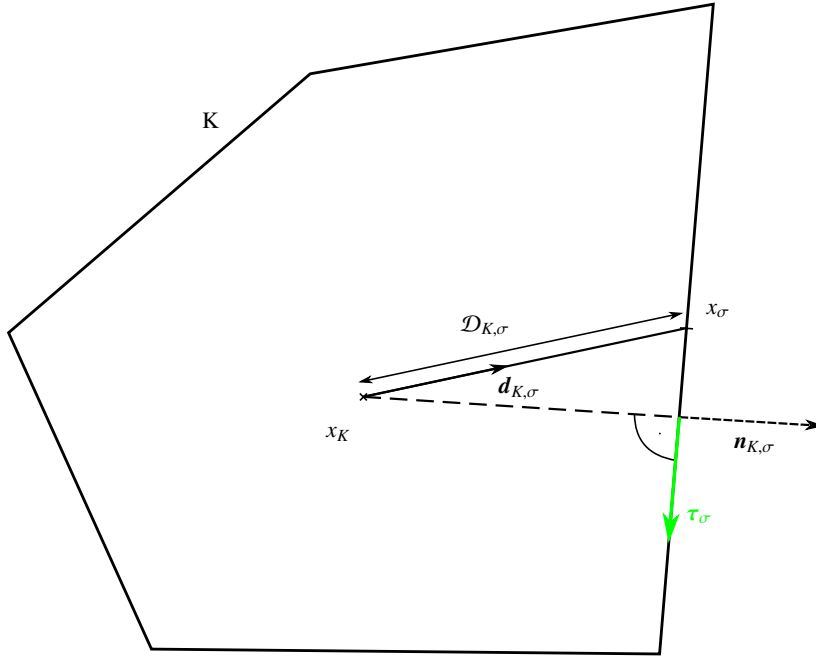
Interpolaci pochopitelně nelze použít na stěnách, které jsou na hranici výpočetní oblasti, a proto si zde musíme poradit jiným způsobem.

Pro Neumannovu okrajovou podmínku je situace jednoduchá a přímo dostáváme, že pro $\sigma \in \mathcal{E}_K \cap \partial\Omega$ platí

$$\nabla\Phi_K \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} = \frac{\partial\Phi_K}{\partial\mathbf{n}_{K,\sigma}} = 0. \quad (2.23)$$

Pro Dirichletovu okrajovou podmínku máme situaci na obrázku 2.4, kde na stěně σ máme předepsanou hodnotu Φ_{σ} ve středu stěny, která jakožto okrajová podmínka platí na celé stěně. Proto lze s jistotou tvrdit, že průmět gradientu do tečného směru k σ bude nulový, tedy

$$\nabla\Phi \cdot \boldsymbol{\tau}_{\sigma} = 0. \quad (2.24)$$



Obrázek 2.4: Aproximace gradientu na hranici oblasti

Z toho lze vyvodit, že veškerý příspěvek gradientu působí ve směru normálového vektoru ke stěně $\mathbf{n}_{K,\sigma}$, tedy

$$|\nabla\Phi \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}| = |\nabla\Phi| = \left| \frac{\partial\Phi}{\partial\mathbf{n}_{K,\sigma}} \right| \quad (2.25)$$

a

$$\nabla\Phi = \frac{\partial\Phi}{\partial\mathbf{n}_{K,\sigma}} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}. \quad (2.26)$$

Pomocí známých hodnot a aproximace pomocí konečné diference jsme schopni vyjádřit

$$\nabla\Phi \cdot \mathbf{d}_{K,\sigma} = \frac{\partial\Phi}{\partial\mathbf{d}_{K,\sigma}} \approx \frac{\Phi_\sigma - \Phi_K}{\mathcal{D}_{K,\sigma}} \quad (2.27)$$

a po dosazení z (2.26) dostáváme

$$\frac{\partial\Phi}{\partial\mathbf{n}} \mathbf{n}_{K,\sigma} \cdot \mathbf{d}_{K,\sigma} = \frac{\partial\Phi}{\partial\mathbf{d}_{K,\sigma}} \approx \frac{\Phi_\sigma - \Phi_K}{\mathcal{D}_{K,\sigma}}, \quad (2.28)$$

což po úpravě dává výsledný tvar aproximace gradientu na hraniční stěně

$$\frac{\partial\Phi}{\partial\mathbf{n}_{K,\sigma}} = \frac{\Phi_\sigma - \Phi_K}{\mathcal{D}_{K,\sigma}(\mathbf{n}_{K,\sigma} \cdot \mathbf{d}_{K,\sigma})}. \quad (2.29)$$

Nyní již můžeme pomocí výše objasněného postupu s využitím (2.20), (2.23) a (2.29) definovat operátor $F_{K,\sigma}$ pro funkci $w \in \mathcal{H}^{\Pi}$ s Dirichletovou okrajovou podmínkou $w_{\partial\Omega} \in C(\partial\Omega)$

$$F_{K,\sigma}(w, w_{\partial\Omega}) = \begin{cases} \overline{m}(\sigma)(\nabla w)_\sigma^{corr} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} & \forall \sigma \in \mathcal{E}_{int}, \sigma = K|L, \\ \overline{m}(\sigma) \frac{w_{\partial\Omega} - w_K}{\mathcal{D}_{K,\sigma}(\mathbf{n}_{K,\sigma} \cdot \mathbf{d}_{K,\sigma})} & \forall \sigma \in \mathcal{E}_{ext} \cap \mathcal{E}_K, \end{cases} \quad (2.30)$$

a pro $\tilde{w} \in \mathcal{H}^\Pi$ s Neumannovou okrajovou podmínkou

$$G_{K,\sigma}(\tilde{w}) = \begin{cases} \overline{m}(\sigma)(\nabla\tilde{w})_\sigma^{corr} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} & \forall \sigma \in \mathcal{E}_{int}, \sigma = K|L, \\ 0 & \forall \sigma \in \mathcal{E}_{ext}. \end{cases} \quad (2.31)$$

S tímto lze tok pro funkci w , jež splňuje Dirichletovu okrajovou podmínku nahradit

$$\int_\sigma \nabla w(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} dS \approx F_{K,\sigma}(w, w_{\partial\Omega}), \quad (2.32)$$

analogicky pro funkci \tilde{w} splňující nulovou Neumannovu okrajovou podmínku

$$\int_\sigma \nabla w(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} dS \approx G_{K,\sigma}(\tilde{w}). \quad (2.33)$$

Dále pro přehlednost následujícího zápisu definujeme

$$F_K(w, w_{\partial\Omega}) = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} F_{K,\sigma}(w, w_{\partial\Omega}) \quad \forall K \in \Pi, \quad (2.34)$$

$$G_K(\tilde{w}) = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} G_{K,\sigma}(\tilde{w}) \quad \forall K \in \Pi. \quad (2.35)$$

2.3 Semidiskrétní schéma

Použitím předchozího postupu získáme semidiskrétní schéma jako soustavu obyčejných diferenciálních rovnic, které má pro izotropní úlohu fázového pole pro čistou látku (1.45) s Dirichletovou podmínkou pro teplotu T a Neumannovou podmínkou pro fázové pole ϕ konečný tvar

$$m(K)\dot{T}_K(t) = F_K(T_\Pi(t), T_{\partial\Omega}) + Lm(K)\dot{\phi}_K(t), \quad \forall K \in \Pi, t \in \mathcal{J}, \quad (2.36a)$$

$$\alpha m(K)\dot{\phi}_K(t) = G_K(\phi_\Pi(t)) + \frac{m(K)}{\xi^2} f(\phi_K, T_K; \xi), \quad \forall K \in \Pi, t \in \mathcal{J}, \quad (2.36b)$$

$$f(\phi_K, T_K; \xi) = a\phi(1-\phi)\left(\phi - \frac{1}{2}\right) - b\xi^2\beta|\nabla\phi_K|(T - T^*), \quad \forall K \in \Pi. \quad (2.36c)$$

Pro anizotropní úlohu tuhnutí čisté látky (3.6) lze analogicky odvodit rovnice

$$m(K)\dot{T}_K(t) = F_K(T_\Pi(t), T_{\partial\Omega}) + Lm(K)\dot{\phi}_K(t), \quad \forall K \in \Pi, t \in \mathcal{J} \quad (2.37a)$$

$$\alpha m(K)\dot{\phi}_K(t) = G_K(\phi_\Pi(t)) + \frac{m(K)}{\xi^2} f(\phi_K, T_K, \phi^0(\nabla\phi_K); \xi) \quad \forall K \in \Pi, t \in \mathcal{J}, \quad (2.37b)$$

$$f(\phi_K, T_K, \phi^0(\nabla\phi_K); \xi) = a\phi(1-\phi)\left(\phi - \frac{1}{2}\right) - b\xi^2\beta\phi^0(\nabla\phi_K)(T - T^*), \quad \forall K \in \Pi, \quad (2.37c)$$

kde předpis pro $F_{K,\sigma}$ zůstává stejný (2.30) a $G_{K,\sigma}$ je díky zpracování členu s ∇T^0 pomocí věty 4 nutné předefinovat na

$$G_{K,\sigma}(\tilde{w}) = \begin{cases} \overline{m}(\sigma)T^0(\nabla\tilde{w}_K) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} & \forall \sigma \in \mathcal{E}_{int}, \sigma = K|L, \\ 0 & \forall \sigma \in \mathcal{E}_{ext}. \end{cases} \quad (2.38)$$

K soustavám (2.36) a (2.37) je třeba přidat počáteční podmínky

$$\phi_K(0) = \phi_{ini}(\mathbf{x}_K) \quad \forall K \in \Pi, \quad (2.39a)$$

$$T_K(0) = T_{ini}(\mathbf{x}_K) \quad \forall K \in \Pi, \quad (2.39b)$$

kteřé jsou v souladu s původní úlohou. Z důvodu velkého množství členů neuvádíme semidiskrétní schémata pro modely binárních slitin a necháváme jejich odvození analogickým postupem na čtenáři.

2.4 Rungeova-Kuttova-Mersonova metoda

Semidiskrétní schémata (2.36) a (2.37) jako soustavy obyčejných diferenciálních rovnic lze obecně zapsat ve tvaru

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}) \quad (2.40)$$

pro neznámý vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ a vektorovou funkci pravé strany $\mathbf{f} : \mathcal{J} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. K řešení takového systému obyčejných diferenciálních rovnic jsou velmi často používány Rungeovy-Kuttovy metody [32]. Pro popis algoritmu numerické metody zavedeme následující značení:

t	aktuální čas
T	konečný čas
τ	časový krok
τ_{ini}	počáteční časový krok
\mathbf{x}^τ	numerické řešení
\mathbf{x}_{ini}^τ	počáteční podmínka
δ	parametr přesnosti

V naší práci jsme zvolili Rungeovu-Kuttovu-Mersonovu metodu (viz [9] a [33]) s adaptivním časovým krokem, která je čtvrtého řádu přesnosti. Její algoritmus je popsán následujícím pseudokódem:

```

 $\tau := \tau_{ini}$ ;
 $\mathbf{x}^\tau := \mathbf{x}_{ini}^\tau$ ;
while (last) do
  if  $|T - t| < |\tau|$  then
     $\tau = T - t$ ;
    last = true;
  else
    last = false;
  end if
   $\mathbf{K}_1 = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}^\tau)$ ;
   $\mathbf{K}_2 = \mathbf{f}(t + \frac{\tau}{3}, \mathbf{x}^\tau + \frac{\tau}{3}\mathbf{K}_1)$ ;
   $\mathbf{K}_3 = \mathbf{f}(t + \frac{\tau}{3}, \mathbf{x}^\tau + \frac{\tau}{6}(\mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2))$ ;
   $\mathbf{K}_4 = \mathbf{f}(t + \frac{\tau}{2}, \mathbf{x}^\tau + \frac{\tau}{8}(\mathbf{K}_1 + 3\mathbf{K}_3))$ ;
   $\mathbf{K}_5 = \mathbf{f}(t + \tau, \mathbf{x}^\tau + \tau(\frac{1}{2}\mathbf{K}_1 - \frac{3}{2}\mathbf{K}_3 + 2\mathbf{K}_4))$ ;
   $\varepsilon = \max_{i \in \{1, 2, \dots, n\}} |0.2\mathbf{K}_1^i - 0.9\mathbf{K}_3^i + 0.8\mathbf{K}_4^i - 0.1\mathbf{K}_5^i|$ ;
  if  $\varepsilon < \delta$  then
     $\mathbf{x}^\tau = \mathbf{x}^\tau + \tau(\frac{1}{6}(\mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_5) + \frac{2}{3}\mathbf{K}_4)$ ;
     $t = t + \tau$ ;
    if (last) then break;
  end if
  if  $\varepsilon == 0$  then continue;
  end if
  end if
   $\tau = \left(\frac{\delta}{\varepsilon}\right)^{0.2} \frac{4}{5}\tau$ ;
end while

```

Kapitola 3

Výpočetní studie

Tato část práce je věnována prezentaci dosažených numerických výsledků. Použit je program v jazyce C++ pro řešení modelu fázového pole na nestrukturovaných sítích používající knihovnu GTMesh [3] a k výpočtům byl použit výpočetní cluster HELIOS na KM FJFI ČVUT v Praze. Zásadní for cykly v algoritmu byly paralelizovány pomocí OpenMP [34]. Studie je věnována prozkoumání chování vybraných modelů s ohledem na jednotlivé parametry a použitou síť. Dosažené výsledky jsou vizualizovány pomocí programů ParaView a Inkscape. U všech výsledků jsou pečlivě zaznamenány použité parametry, jak modelu, tak simulace. Kapitola rozdělíme na několik samostatných částí podle použitého modelu, numerické sítě, dimenze a zkoumaného jevu.

3.1 Nastavení numerických simulací

Nejprve shrneme nastavení počátečních a okrajových podmínek, numerické metody a sepíšeme přehledně parametry, které budeme u většiny simulací používat. Zvláštní případy pak popíšeme samostatně přímo v textu.

Prostorová diskretizace

Výpočetní oblast Ω používáme čtvercovou, resp. krychlovou oblast se středem v počátku kartézských souřadnic $(0, 0, 0)^T$. Při výpočtech na strukturovaných sítích, pokud není uvedeno u konkrétního výsledku jinak, používáme k diskretizaci čtvercové, resp. krychlové buňky s uniformním rozměrem, který označíme h . U nestrukturované sítě samozřejmě nejsme takový parametr schopni poskytnout, proto uvedeme \tilde{h} , které by odpovídalo stejnému počtu buněk na pravidelné krychlové síti ve stejné oblasti. Tento odhad využijeme k porovnání výsledků s identickými parametry na strukturované a nestrukturované síti. Podrobnější vlastnosti použitých nestrukturovaných sítí budeme diskutovat níže.

Počáteční a okrajové podmínky

Pro všechny simulace s modely fázového pole pro čistou látku volíme nulovou okrajovou podmínku Dirichletova typu pro teplotní pole T

$$T|_{\partial\Omega} = T_{\partial\Omega} = 0 \quad \text{v } \partial\Omega \times \mathcal{J} \quad (3.1)$$

a okrajovou podmínku Neumannova typu pro fázové pole ϕ

$$\nabla\phi \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{v } \partial\Omega \times \mathcal{J}, \quad (3.2)$$

kteřá pro anizotropní model založený na Finslerově geometrii přejde do tvaru

$$\mathbf{T}^0(\nabla\phi) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{v } \partial\Omega \times \mathcal{J}. \quad (3.3)$$

Nicméně, jelikož zárodek krystalu budeme většinou vkládat doprostřed výpočetní oblasti, prezentované simulace nenecháváme běžet až do stavu, kdy by se krystal dotýkal kraje výpočetní oblasti, protože poté už by byl získaný výsledek deformován použitou okrajovou podmínkou. Počáteční podmínku pro teplotní pole volíme

$$T(0, \mathbf{x}) = T_{\text{ini}}(\mathbf{x}) = 0. \quad (3.4)$$

Taková volba vyjadřuje uniformní podchlazení celé oblasti Ω , což je pro modelování tuhnutí podchlazené kapaliny logická volba. Zároveň je pak počáteční podmínka v souladu s okrajovou podmínkou pro T . Volbou počáteční podmínky pro ϕ je vloženo do oblasti krystalizační jádro, což je realizováno přiřazením hodnoty $\phi = 1$ jisté podmnožině Ω . V simulacích volíme tuto podmnožinu typicky jako kouli se středem v \mathbf{x}_0 a poloměrem R_0 , přičemž právě tyto dva parametry jsou volitelné při spouštění úlohy. Tedy

$$\phi(0, \mathbf{x}) = p_{\text{ini}}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & |\mathbf{x} - \mathbf{x}_0| \leq R_0, \\ 0 & |\mathbf{x} - \mathbf{x}_0| > R_0, \end{cases} \quad (3.5)$$

kde $|\cdot|$ značí klasickou euklidovskou normu.

Parametry numerických simulací

Zde jsou shrnuty všechny použité parametry modelu fázového pole pro čistou látku a numerické metody přehledně do tabulky 3.1. Veškeré parametry simulací jsou u jednotlivých výsledků přiložené ve stručnější formě. Pro izotropní i anizotropní model fázového pole pro čistou látku používáme reakční člen (1.50).

Tabulka 3.1: Nastavitelné parametry jednotlivých modelů a úlohy fázového pole pro čistou látku.

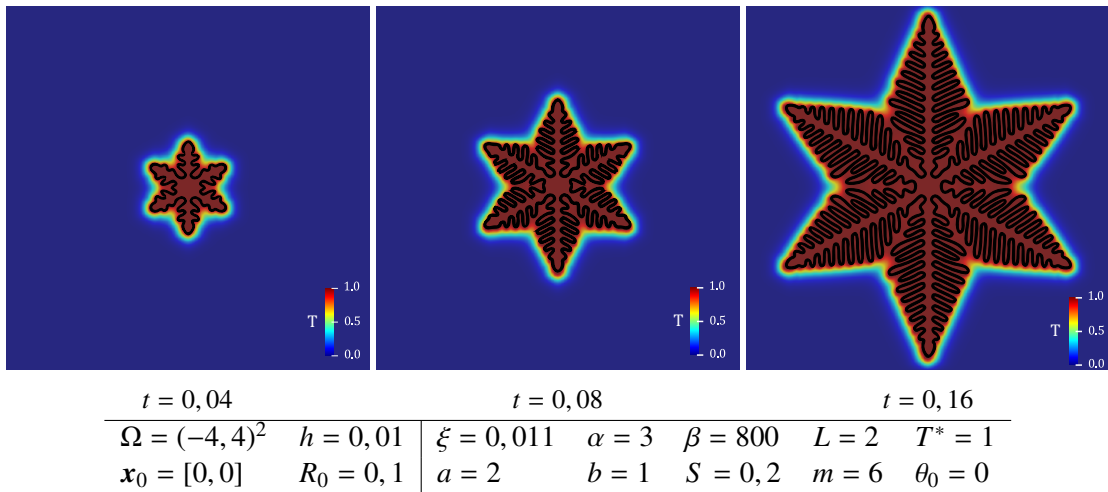
Ω	oblast ve dvou (třech) dimenzích
h	rozměr čtverečku (krychličky) diskretizace ze strukturované sítě
R_0	poloměr krystalizačního jádra
\mathbf{x}_0	střed krystalizačního jádra
a	-
b	-
ξ	parametr svázaný s šířkou fázového rozhraní
L	latentní teplo
α	koeficient připojovací kinetiky
β	parametr svázaný s velikostí podchlazení
T^*	teplota tání/tuhnutí
A_1	parametr anizotropie ve vztazích (1.77), (1.79) a (1.81)
A_2	parametr anizotropie ve vztahu (1.79)
m	četnost anizotropie - parametr v (1.55)
S	síla anizotropie - parametr v (1.55)
θ_0	hlavní směr krystalografické orientace - parametr v (1.55)

3.2 Strukturované sítě

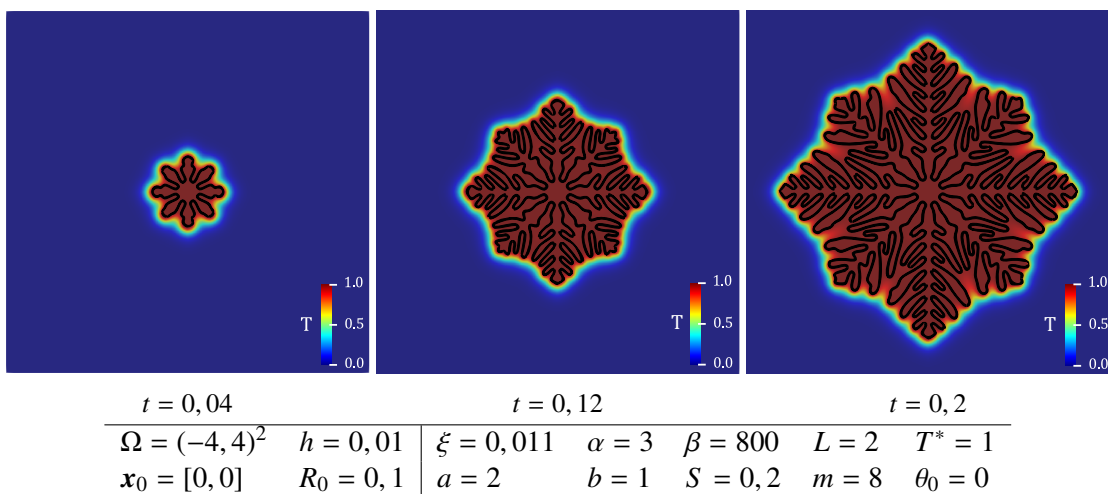
Nejprve je provedeno několik simulací pouze na strukturovaných sítích, které mají za cíl ověřit správnost programu a zdokumentovat chování modelu fázového pole v závislosti na některých vybraných parametrech. Zároveň na strukturovaných sítích provedeme několik pokusů s více krystalizačními jádry a modelem pro slitiny.

3.2.1 Dvourozměrný model

K předvedení funkčnosti algoritmu pro dvourozměrné sítě simulujeme dendritické tvary krystalů pro jednoduchý anizotropní model (1.56). Použité nastavení parametrů je podobné jako v [15]. Na obrázcích 3.1 a 3.2 rovněž demonstrujeme způsob vizualizace teplotního pole a barevnou škálu, kterou pro něj budeme používat i ve třírozměrných simulacích, kde budeme teplotní a fázové pole vizualizovat pomocí rovinných řezů. Černá křivka v teplotním poli představuje fázové rozhraní $\Gamma(t) = \left\{ \mathbf{x} \in \Omega \mid \phi(t, \mathbf{x}) = \frac{1}{2} \right\}$.



Obrázek 3.1: Dendritický tvar krystalu pomocí jednoduché šestičetné anizotropie.



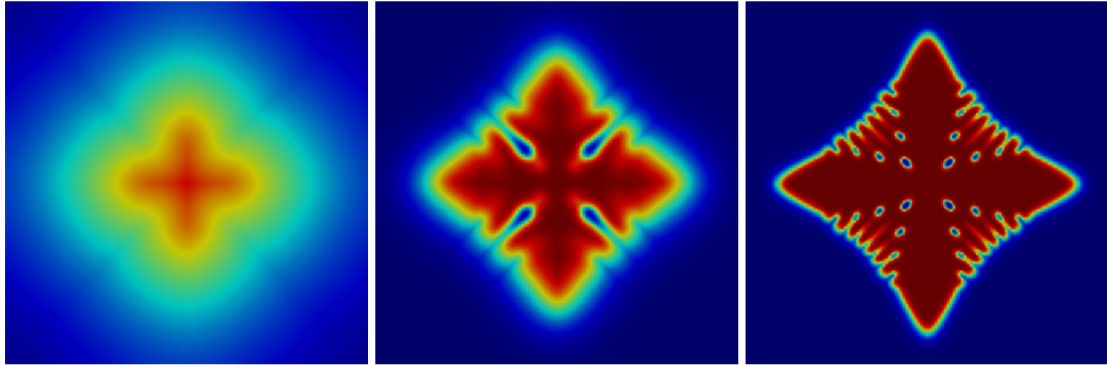
Obrázek 3.2: Dendritický tvar krystalu pomocí jednoduché osmičetné anizotropie.

3.2.2 Třírozměrný model

V třírozměrném případě jsme se zaměřili na vliv parametru ξ a rozlišení sítě na chování modelu na strukturované síti. Tato studie byla provedena na anizotropním modelu založeném na Finslerově geometrii (3.6) a to pro čtyřčetnou, šestičetnou i osmičetnou anizotropii, kde využijeme předpisy pro φ^0 a T^0 dané v části 1.2.3.2. Použity byly tři odlišné hodnoty parametru ξ a dvě strukturované sítě, z nichž obě mají krychlové buňky o celkovém počtu 120^3 a 240^3 . Parametry pro správné nastavení modelu byly převzaty z [9]. Obrázek 3.3 obsahuje tvary fázového pole na rovinném řezu, kde lze pozorovat, že tloušťka přechodové vrstvy mezi oblastmi s hodnotami $\phi = 1$ a $\phi = 0$ je opravdu svázána s velikostí parametru ξ . Se zmenšováním ξ se tato pozvolná přechodová vrstva ztenčuje, krystal dostává pevný tvar a zároveň tvoří složitější struktury. Poměr $\frac{\xi}{h}$ nesmí [2] ovšem být až příliš velký, v takovém případě by se počáteční krystalové zrno pouze rozplynulo, protože přechodová vrstva by byla příliš široká. Naopak, pokud by poměr $\frac{\xi}{h}$ byl příliš malý, krystal by se vůbec nezačal rozvíjet a udržel by si tvar vložený v počáteční podmínce. Složitější tvar krystalu při menším ξ lze pozorovat i na simulacích 3.4, 3.5 a 3.6, kde vizualizujeme tvar krystalu pomocí kontury oblasti

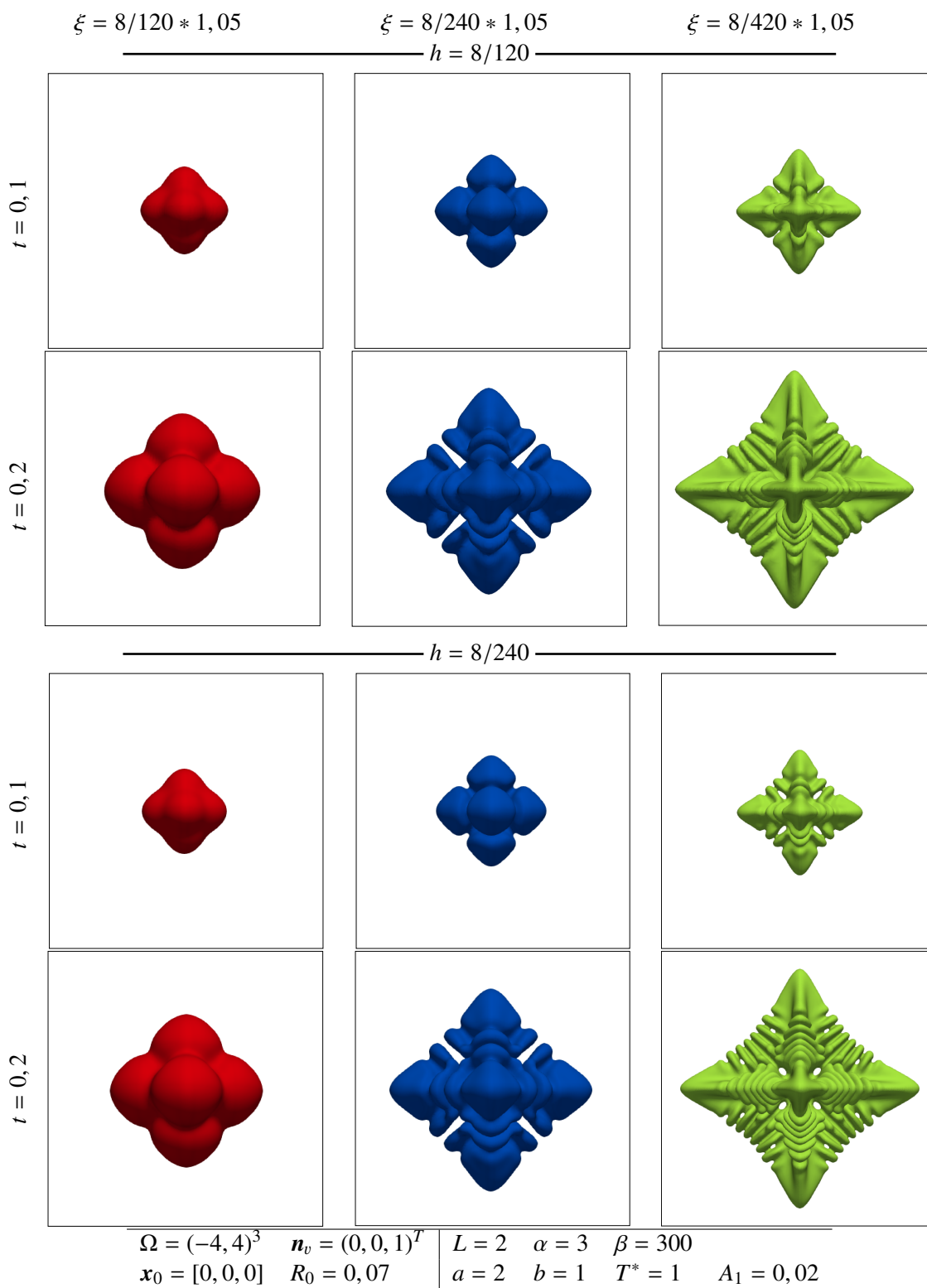
$$\Omega_s(t) = \left\{ \mathbf{x} \in \Omega \mid \phi(t, \mathbf{x}) \geq \frac{1}{2} \right\}.$$

K zobrazení výsledků je použita ortografická projekce krystalu s normálovým vektorem roviny zobrazení, který označíme \mathbf{n}_v a budeme ho uvádět u jednotlivých výsledků. Lze pozorovat, že na jemnější výpočetní síti, je ve většině případů také kontura krystalu značně složitější. Zajímavostí je, že na obrázku 3.6 se pro hrubou síť v kombinaci s příliš velkým ξ osmičetná anizotropie nezvládne na výsledném tvaru ani projevit, zatímco na jemnější síti už krystal vzniká v očekávaném tvaru.

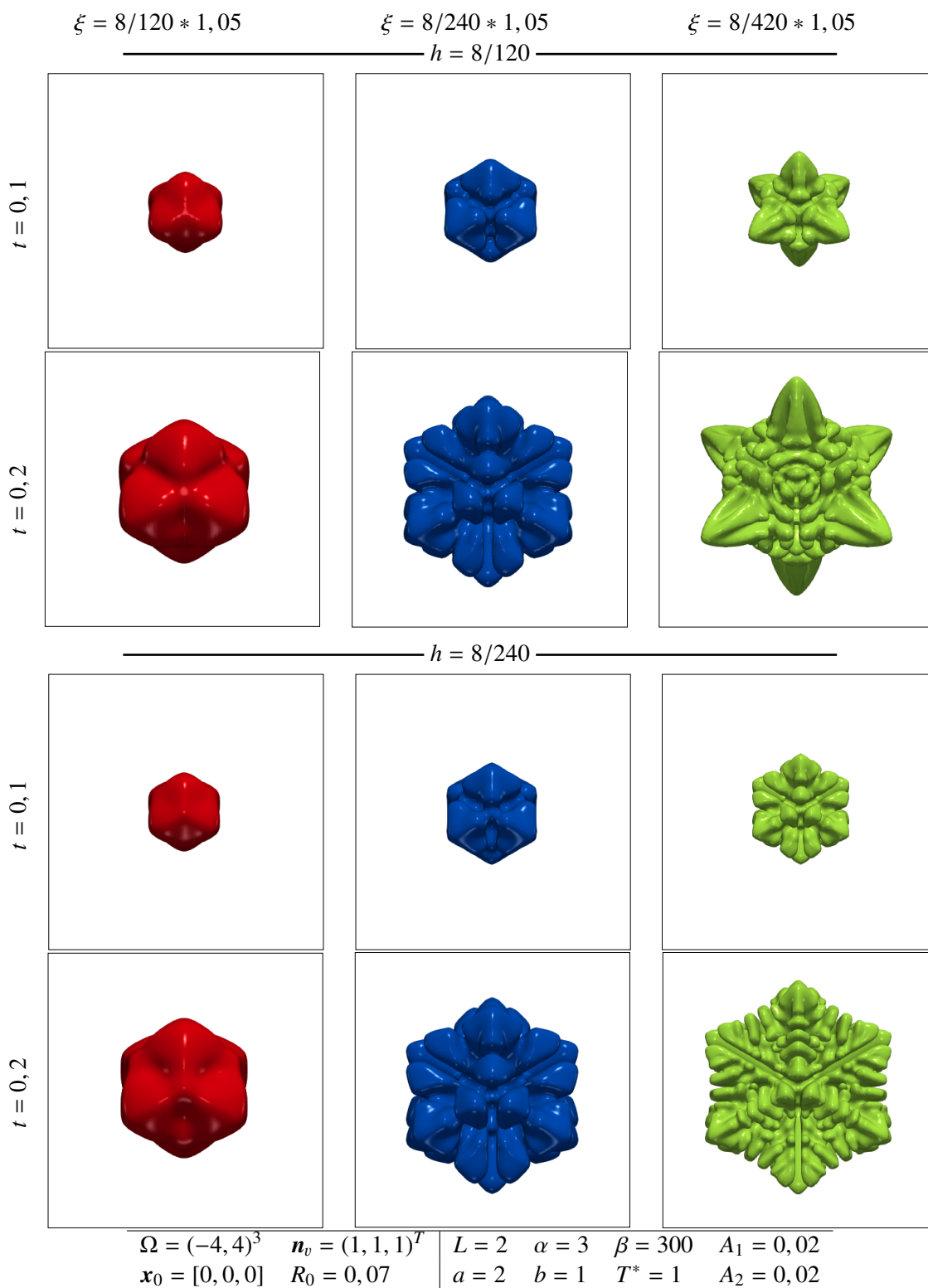


$\xi = 8/120 * 1,05$	$\xi = 8/240 * 1,05$	$\xi = 8/420 * 1,05$
$\Omega = (-4, 4)^3$	$h = 8/240$	$t = 0,2$ $L = 2$ $\alpha = 3$ $\beta = 300$
$\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$	$R_0 = 0,07$	$a = 2$ $b = 1$ $T^* = 1$ $A_1 = 0,02$

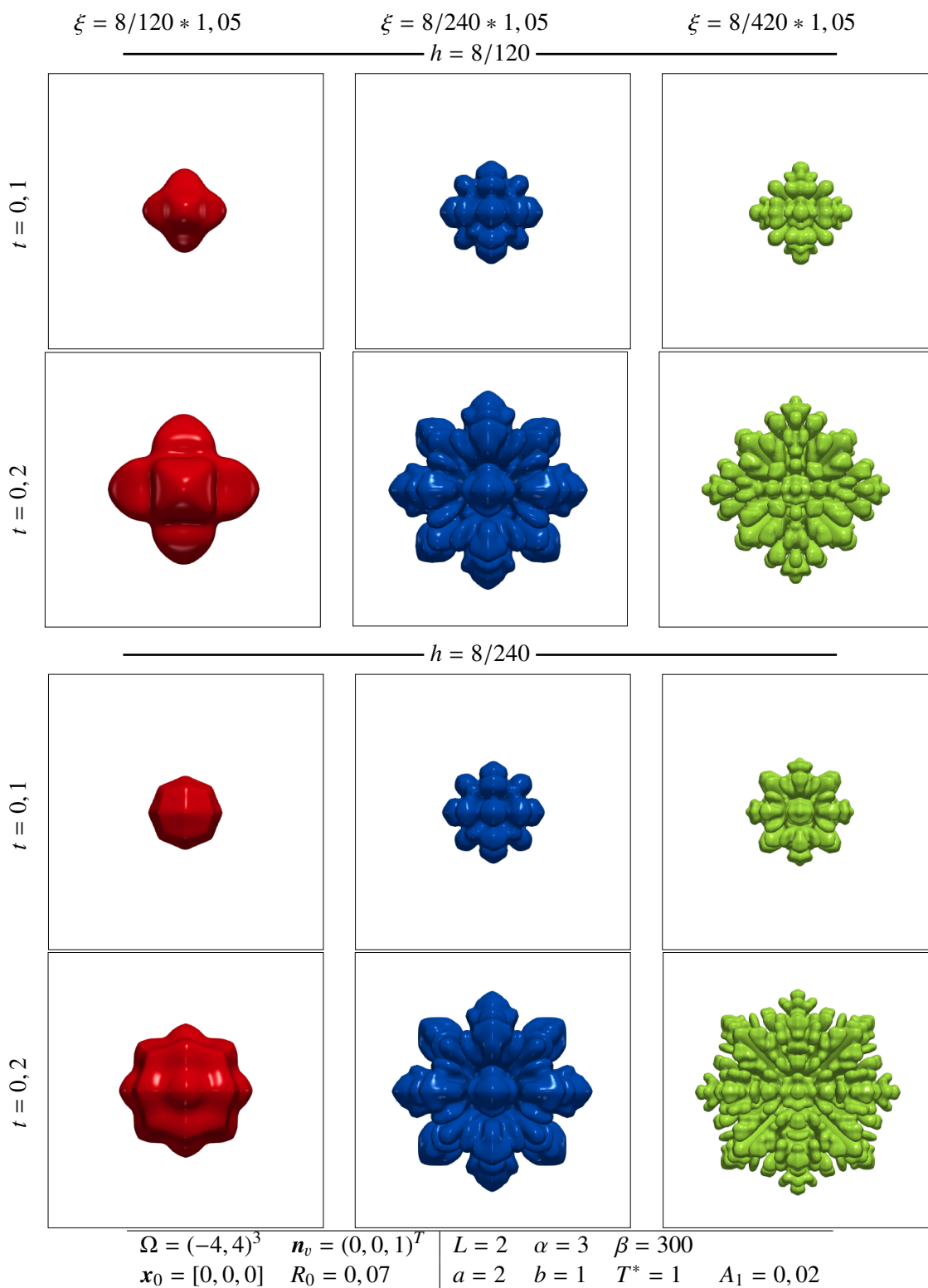
Obrázek 3.3: Vizualizace fázového pole na řezu rovinou $z = 0$



Obrázek 3.4: Výpočetní studie se čtyřčetnou Finslerovou anizotropií zaměřená na vliv ξ a h na tvar krystalu. Zobrazena je kontura pevné podoblasti $\Omega_s(t)$.



Obrázek 3.5: Výpočetní studie s šestičtetnou Finslerovou anizotropií zaměřená na vliv ξ a h na tvar krystalu. Zobrazena je kontura pevné podoblasti $\Omega_s(t)$.



Obrázek 3.6: Výpočetní studie s osmičtetnou Finslerovou anizotropií zaměřená na vliv ξ a h na tvar krystalu. Zobrazena je kontura pevné podoblasti $\Omega_s(t)$.

3.2.3 Více krystalů

Zajímavou úlohou je také vložení více krystalizačních zrn do jedné oblasti následné sledování chování krystalů, které se k sobě blíží a v důsledku toho se deformuje jejich tvar. Při této simulaci je oprávněné požadovat, aby každý krystal měl svou vlastní krystalografickou orientaci, případně i svou vlastní četnost anizotropie. Pokud bychom totiž pro anizotropní model (3.6) vložili do oblasti pomocí počáteční podmínky pro ϕ více krystalizačních zrn, měl by každý krystal stejnou anizotropii i orientaci. Jedním ze způsobů, jak docílit různých natočení pro jednotlivé krystaly je generovat orientace pro jednotlivá zrna a pak pomocí algoritmu [16] dělit oblast na části, kde se zachovává daná orientace. Jednodušším způsobem, který je dobře použitelný pro několik krystalizačních zrn, je zavedení proměnných ϕ_1, \dots, ϕ_m , přičemž každá bude mít svou rovnici a pomocí počáteční podmínky každé proměnné přiřadíme jedno krystalizační zrno. Pro anizotropní model (3.6) pak vzniká soustava rovnic s okrajovými a počátečními podmínkami

$$\xi^2 \alpha \frac{\partial \phi_i}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = \xi^2 \nabla \mathbf{T}_i^0(\nabla \phi_i) + f(\phi_i, T, \varphi^0(\nabla \phi_i); \xi), \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (3.6a)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = \Delta T(t, \mathbf{x}) + L \sum_{j=1}^m \left(\frac{\partial \phi_j}{\partial t}(t, \mathbf{x}) \right), \quad (3.6b)$$

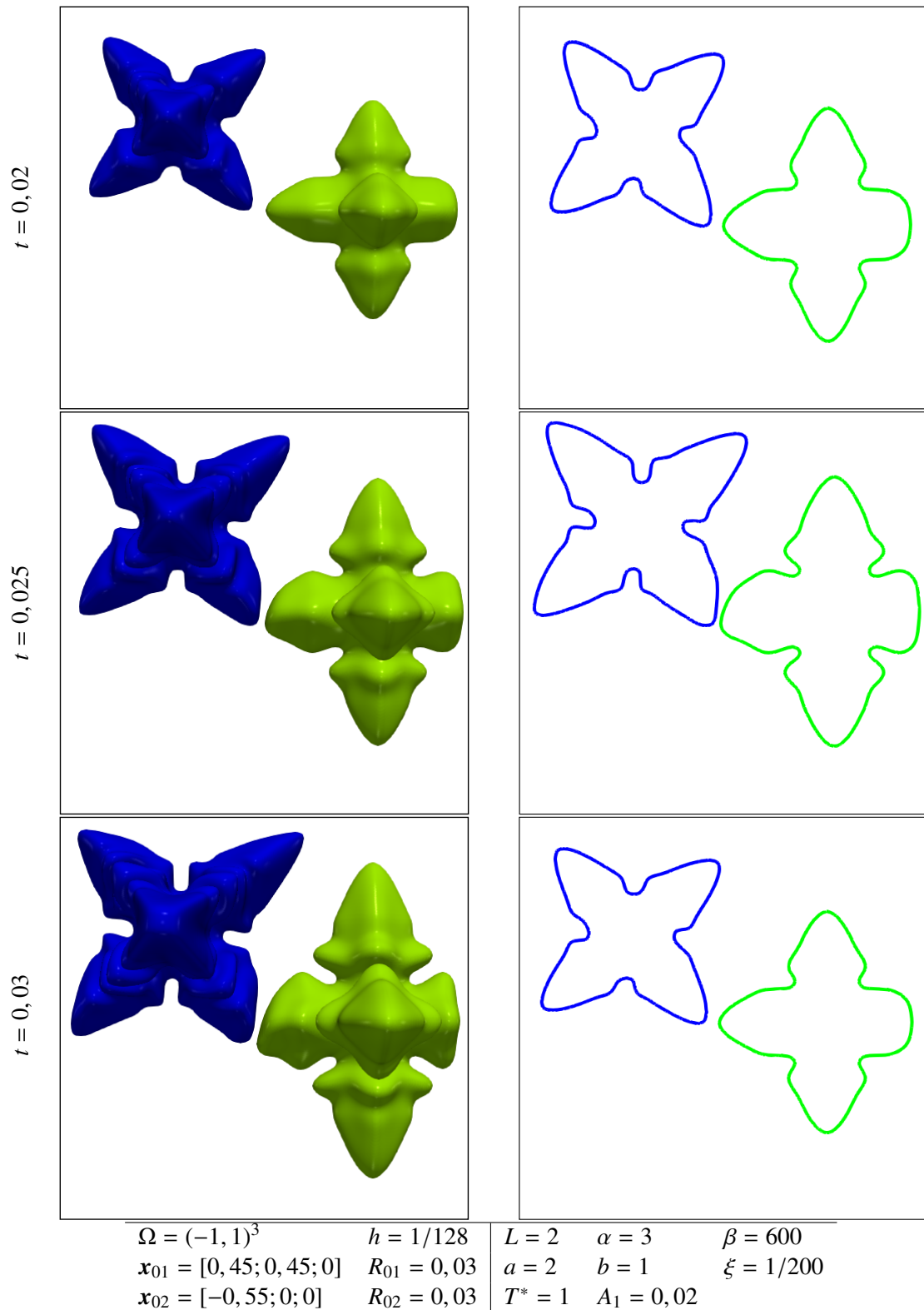
$$T|_{t=0} = T_{\text{ini}}, \quad \phi_i|_{t=0} = \phi_{i,\text{ini}}, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (3.6c)$$

$$T|_{\partial\Omega} = T_{\partial\Omega}, \quad (3.6d)$$

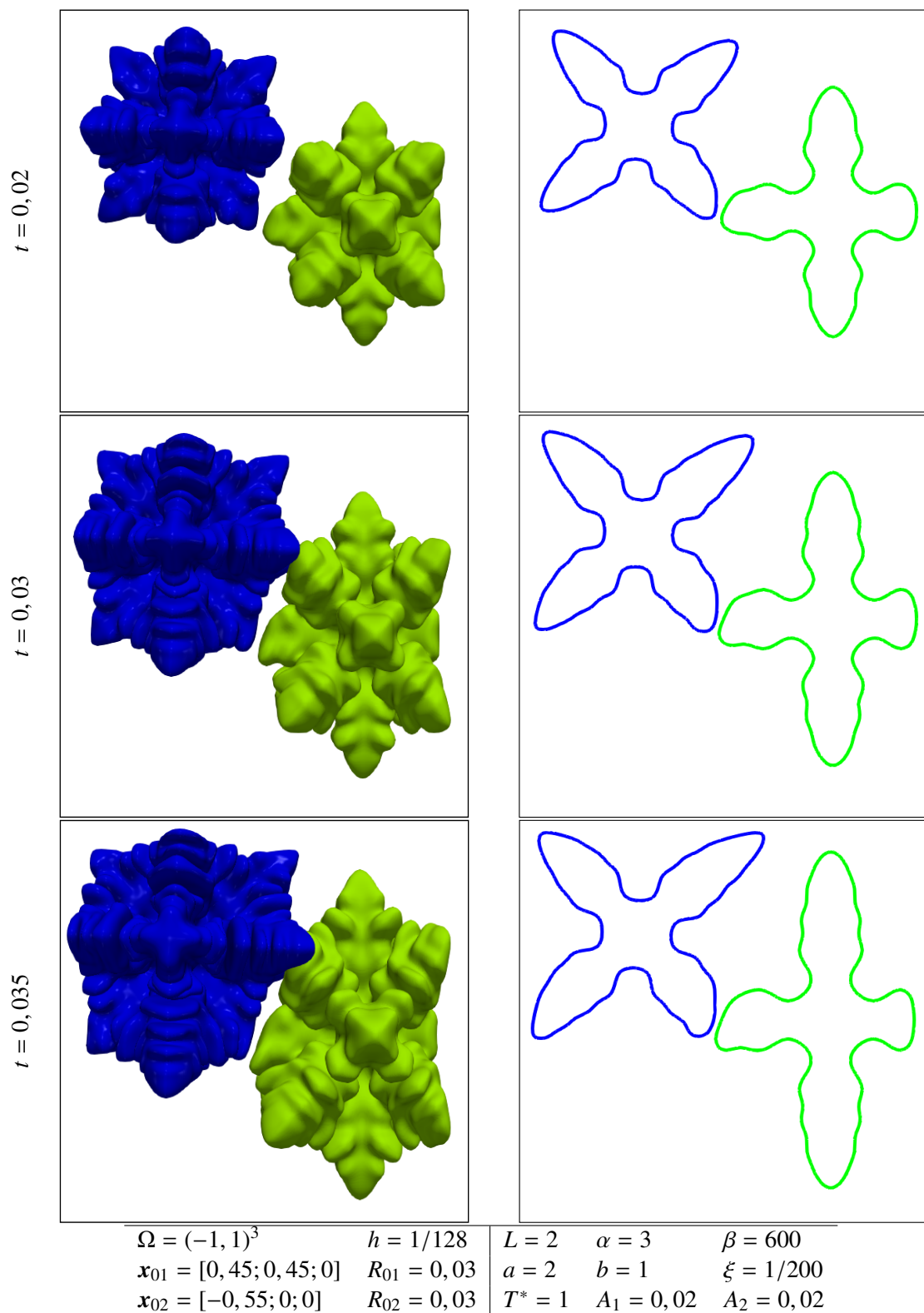
$$\mathbf{T}_i^0(\nabla \phi_i) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m. \quad (3.6e)$$

Jelikož pro každé i můžeme volit jiný tvar operátoru \mathbf{T}_i^0 , můžeme vkládat krystaly s různými typy anizotropie. Je zde také zřejmé, že otáčení krystalografické orientace můžeme pro každou proměnnou ϕ_i realizovat jinou maticí rotace a tedy každý krystal může mít námi zvolenou orientaci. Pomocí počátečních podmínek pro ϕ_i vkládáme disjunktní krystalizační jádra do oblasti. V rovnici vedení tepla pak vzniká suma časových derivací jednotlivých proměnných.

Vyvstává otázka, jestli rostoucí krystaly nepřerostou do sebe, když jsou reprezentovány pomocí různých proměnných. Obrázky 3.7 a 3.8 demonstrují výsledky pro tento přístup pro $m = 2$, přičemž vkládáme dvě krystalizační jádra tvaru koule s poloměry R_{01}, R_{02} a středy $\mathbf{x}_{01}, \mathbf{x}_{02}$. Ukazuje se, že nepřítomnost teplotního gradientu, která je způsobena uvolňováním latentního tepla druhým krystalem, je dostatečná k tomu, aby se růst krystalů zastavil a krystaly se nespojily. Při větším podchlazení by nemusel být tento důvod dostatečný. V takovém případě by bylo možné přidat na pravou stranu rovnice pro ϕ_i funkci, jež by měla nulovou hodnotu, pokud by jakákoliv jiná proměnná ϕ_j byla větší než například 0, 1. To by efektivně zamezilo šíření daného krystalu v proměnné ϕ_i pokud by se v tomto prostoru již nacházel krystal v některé z jiných proměnných. Zároveň je ze simulací vidět, že v oblasti, kde se krystaly potkávají, dochází k deformaci krystalického růstu z důvodu nedostatku volného prostoru v tomto směru. Na obrázcích 3.7 a 3.8 také lze pozorovat zastavení růstu krystalu u kraje výpočetní oblasti po ovlivnění okrajovou podmínkou. Tento jev nám zde nevádí, jelikož sledujeme především interakci krystalů uprostřed oblasti a nemusíme proto oblast zbytečně zvětšovat, čímž by vzrostla výpočetní náročnost.



Obrázek 3.7: Výpočetní studie se čtyřčetnou Finlserovou anizotropií a dvěma krystalizačními jádry s různou krystalografickou orientací. Zobrazujeme konturu fázového rozhraní na řezu rovinou $z = 0$ a z pohledu s $\mathbf{n}_v = (0, 0, 1)^T$. Krystal s modrou konturou má krystalografickou orientaci otočenou o $\pi/4$ okolo osy z .



Obrázek 3.8: Výpočetní studie s šestičetnou Finslerovou anizotropií a dvěma krystalizačními jádry s různou krystalografickou orientací. Zobrazujeme konturu fázového rozhraní na řezu rovinou $z = 0$ a z pohledu s $\mathbf{n}_v = (0, 0, 1)^T$. Krystal s modrou konturou má krystalografickou orientaci otočenou o $\pi/4$ okolo osy z .

3.2.4 Slitiny

Pro několik simulací tuhnutí slitin použijeme model (1.142). Tento model není v bezrozměrném tvaru, tudíž je zapotřebí použít fyzikálně realistické parametry. Rovněž je nutné mít i sít' odpovídající velikosti. Omezíme se na simulace ve dvou rozměrech, počáteční podmínku pro teplotu a koncentraci volíme konstantní T_{ini} a c_{ini} v celé oblasti. Počáteční podmínka pro fázové pole obsahuje opět kruhové krystalizační zrno se středem v x_0 a poloměrem R_0 . Pro realistické nastavení použijeme [29] nikl (látka A) a měď (látka B), přičemž parametry použité v simulaci uvádíme v tabulce 3.2. V modelu [29] se nachází parametr δ , který je analogií parametru ξ v modelu pro čistou látku a je svázán s šířkou rozhraní. Ten a několik dalších parametrů včetně povrchového napětí σ lze využít k nalezení vztahů

$$M_A^\phi = \frac{(T_A^m)^2 \beta_A}{6 \sqrt{2} L_A \delta_A}, M_B^\phi = \frac{(T_B^m)^2 \beta_B}{6 \sqrt{2} L_B \delta_B}, \quad (3.7a)$$

$$W_A = \frac{3\sigma_A}{\sqrt{2} T_A^m \delta_A}, W_B = \frac{3\sigma_B}{\sqrt{2} T_B^m \delta_B}, \quad (3.7b)$$

$$\varepsilon_\phi^2 = \frac{6 \sqrt{2} \sigma_A \delta_A}{T_A^m} = \frac{6 \sqrt{2} \sigma_B \delta_B}{T_B^m}. \quad (3.7c)$$

S několika aproximacemi pomocí průměrování dané veličiny mezi hodnotou pro nikl a měď můžeme zapsat všechny parametry, které budeme používat (tabulka 3.2).

Tabulka 3.2: Tabulka realistických parametrů pro model fázového pole pro binární slitiny niklu (látka A) a mědi (látka B).

Parametr	Hodnota	Jednotky
σ_A	$3,7 \cdot 10^{-5}$	J cm^{-2}
σ_B	$2,9 \cdot 10^{-5}$	J cm^{-2}
β_A	0,33	$\text{cm K}^{-1} \text{s}^{-1}$
β_B	0,39	$\text{cm K}^{-1} \text{s}^{-1}$
L_A	2350	J cm^{-3}
L_B	1728	J cm^{-3}
T_A^m	1728	K
T_B^m	1358	K
C	$4 \cdot 10^5$	$\text{J g}^{-1} \text{K}^{-1}$
D_S	10^{-6}	$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$
D_L	10^{-9}	$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$
V^m	7,42	cm^3
R	8,31	$\text{J K}^{-1} \text{mol}^{-1}$
D_{AB}	0,155	$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$

Obrázky 3.10 a 3.11 ilustrují vývoj fázového pole a koncentrace při tuhnutí slitiny s různou tloušťkou rozhraní nastavenou pomocí $\delta = \delta_A = \delta_B$. Můžeme sledovat podobnost s modelem čisté látky, kdy se zvětšováním δ se rozšiřuje fázové rozhraní. Koncentrace se podobně jako v literatuře [28] mírně zvyšuje v okolí fázového rozhraní. Nicméně s izotropním modelem dosahujeme pouze krystalu tvaru počáteční podmínky - kruhu. K zajímavějšímu tvaru by bylo nutné přidat anizotropii, čehož lze dosáhnout ve dvou rozměrech řešením rovnice s (3.8). Takto vzniklá rovnice pro fázové pole [29] ovšem není ve tvaru vhodném pro naše numerické schéma. Navíc tato anizotropie funguje pouze pro dvourozměrný model. Obrázek 3.9 zobrazuje výsledek s anizotropií vloženou do rovnice pro fázové pole pomocí funkce g pro

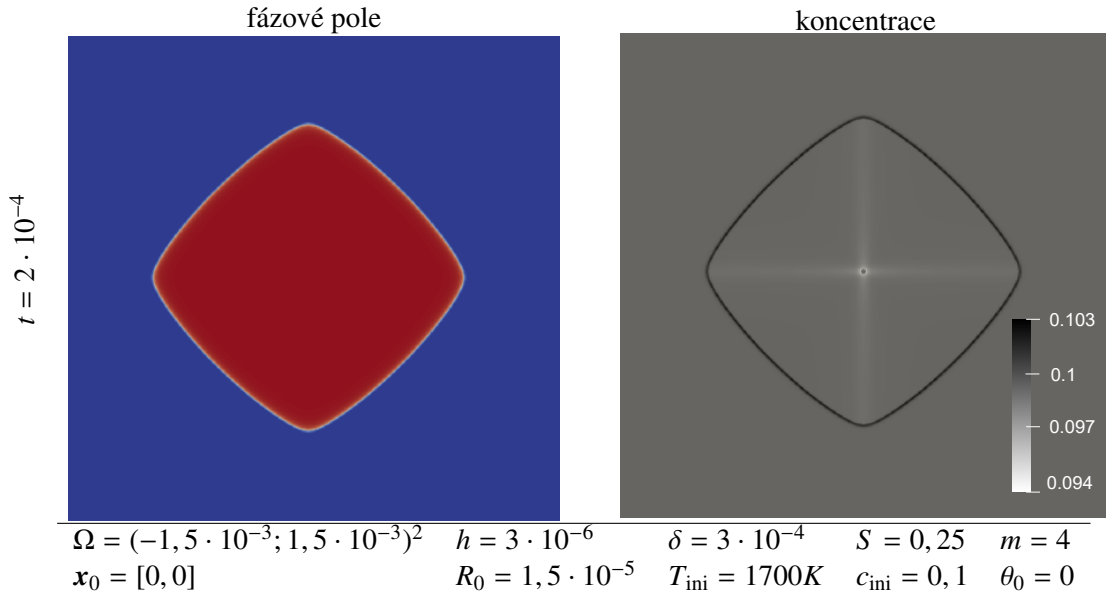
jednoduchou anizotropií

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M^\phi \left(\varepsilon_\phi^2 g(\theta) \Delta \phi + (1 - c) H_A(\phi, T) + c H_B(\phi, T) \right). \quad (3.8a)$$

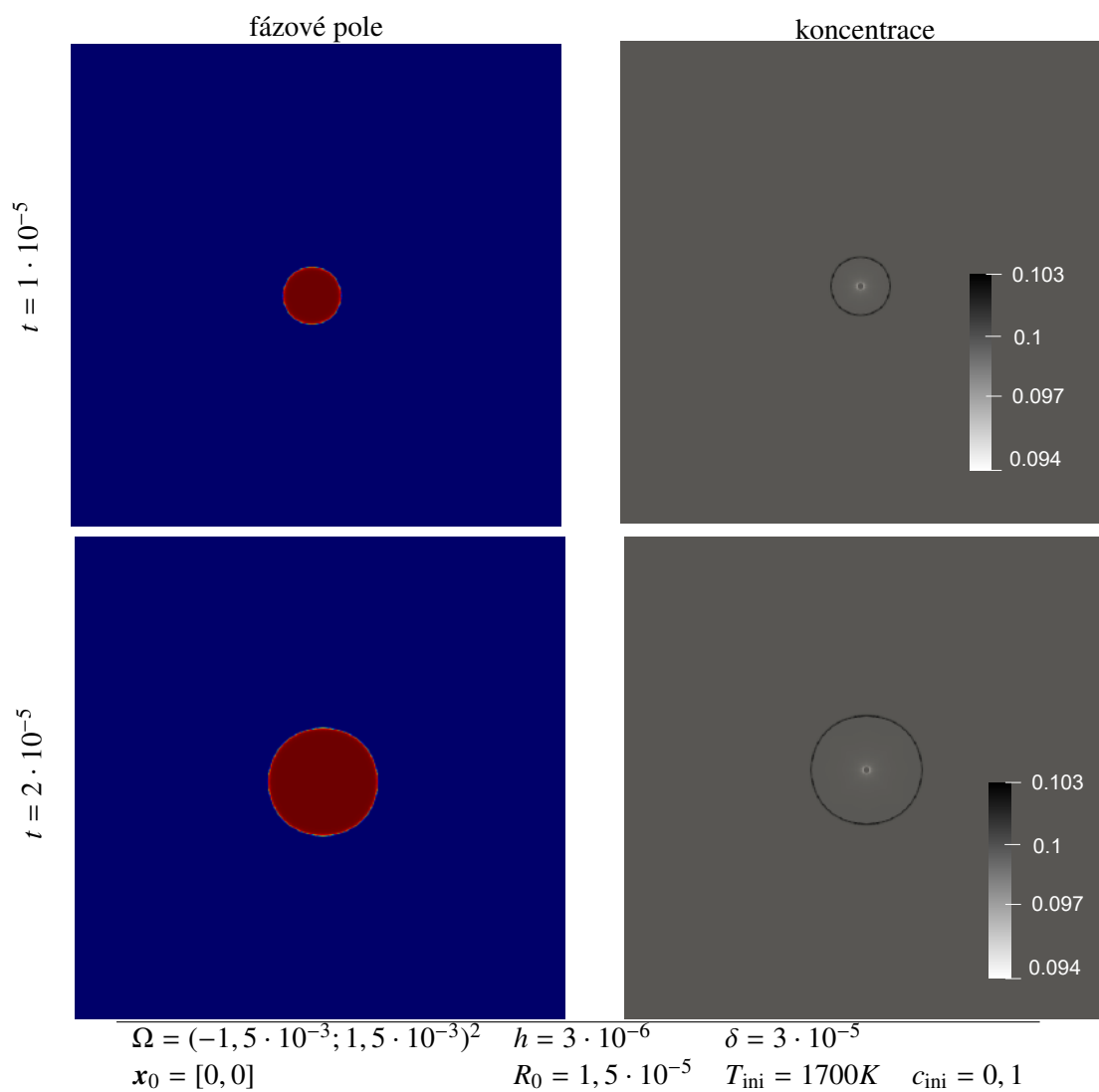
$$(3.8b)$$

Nicméně toto představuje pouze část anizotropické rovnice s (3.8), proto nedostáváme dendritický tvar krystalu jako v literatuře [29],[28]. Zajímavým námětem k další práci tímto směrem je možnost zkusit ve třech rozměrech do modelu vnutit Finslerovu anizotropii.

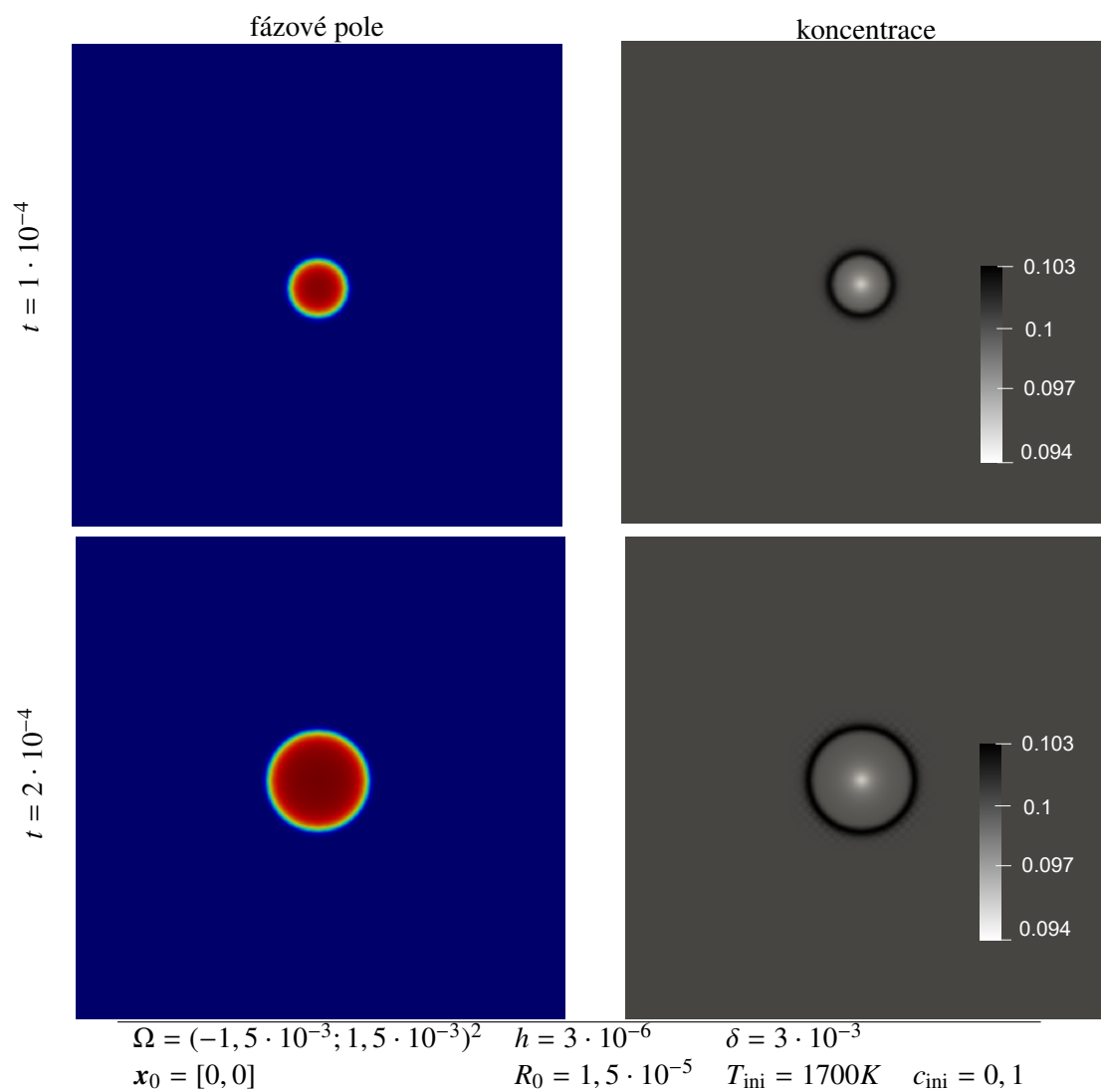
Mimo jiné jsem otestoval se stejnými parametry i možnost vypustit z modelu rovnici vedení tepla a teplotu nechat na konstantní hodnotě T_{ini} z počáteční podmínky. Na těchto jednoduchých tvarech krystalu rozdíl ve výsledcích nebyl nijak zvlášť patrný, nicméně časový krok Rungeovy-Kuttovy metody se tím z řádu 10^{-11} snížil na 10^{-8} . To znamená už velmi podstatné urychlení výpočtu a tímto pozorováním lze tak shledat historický izotermický předpoklad pro řešení modelu fázového pole pro slitiny velmi užitečným.



Obrázek 3.9: Simulace modelu fázového pole pro slitiny s vloženou jednoduchou anizotropií pomocí funkce $g(\theta)$. Zobrazeno je fázové pole a koncentrace na dvourozměrné výpočetní oblasti.



Obrázek 3.10: Simulace modelu fázového pole pro slitiny s menším parametrem δ . Zobrazeno je fázové pole a koncentrace na dvourozměrné výpočetní oblasti.



Obrázek 3.11: Simulace modelu fázového pole pro slitiny s větším parametrem δ . Zobrazeno je fázové pole a koncentrace na dvourozměrné výpočetní oblasti.

3.3 Nestrukturované sítě

Tato část je věnována řešení anizotropního modelu fázového pole pro čistou látku na nestrukturovaných sítích.

Jelikož bychom v testování chtěli využít ověřené nastavení parametrů z [9], kde byla využita výpočetní oblast $(0, 8)^3$, ale naše nestrukturovaná síť pokrývá oblast $(-1/2, 1/2)^3$, formulujeme ještě přeškálovaný model, který nám umožní při zachování rozlišení sítě a všech parametrů získat na menší oblasti totožný výsledek jako na oblasti velké. Tedy na síti obsahující 240^3 buněk pokrývající oblast $(-1/2, 1/2)^3$ pak budeme při zachování ostatních parametrů modelu schopni získat stejný krystal jako na síti s 240^3 buňkami pokrývající oblast $(-4, 4)^3$.

3.3.1 Přeškálování modelu

K přeškálování anizotropního modelu fázového pole pro čistou látku zavedeme škálovací parametr s , který budeme u jednotlivých simulací uvádět.

Označme tedy původní oblast jako $\tilde{\Omega} = (-s/2, s/2)^3$ a původní proměnnou $\tilde{\mathbf{x}}$. Od nové proměnné \mathbf{x} chceme, aby pokrývala výpočetní oblast $\Omega = (-1/2, 1/2)^3$. Tedy získáváme vztah $\mathbf{x} = \frac{1}{s}\tilde{\mathbf{x}}$, ze kterého odvodíme pro veličiny vyjádřené v nových proměnných vztahy

$$T(t, \mathbf{x}) = \tilde{T}(t, \tilde{\mathbf{x}}) = T\left(t, \frac{1}{s}\tilde{\mathbf{x}}\right) = \tilde{T}(t, s\mathbf{x}), \quad (3.9)$$

$$\phi(t, \mathbf{x}) = \tilde{\phi}(t, \tilde{\mathbf{x}}) = \phi\left(t, \frac{1}{s}\tilde{\mathbf{x}}\right) = \tilde{\phi}(t, s\mathbf{x}), \quad (3.10)$$

kde původní veličiny na $\tilde{\Omega}$ značíme vlnkou a v první rovnosti jsme využili požadovanou identitu funkcí pro škálování. Derivací (3.9) získáme

$$\tilde{\nabla}\tilde{T} = \frac{1}{s}\nabla T, \quad (3.11)$$

$$\tilde{\nabla}\tilde{\phi} = \frac{1}{s}\nabla\phi. \quad (3.12)$$

Po dosazení do (3.6) nakonec dostáváme přeškálovaný anizotropní model

$$\frac{\partial T}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = \frac{1}{s^2}\Delta T(t, \mathbf{x}) + L\frac{\partial\phi}{\partial t}(t, \mathbf{x}), \quad \text{v } \Omega \times \mathcal{J}, \quad (3.13a)$$

$$\xi^2\alpha\frac{\partial\phi}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = \frac{1}{s^2}\xi^2\nabla T^0(\nabla\phi) + f(\phi, T, \varphi^0(\nabla\phi); \xi, s), \quad \text{v } \Omega \times \mathcal{J}, \quad (3.13b)$$

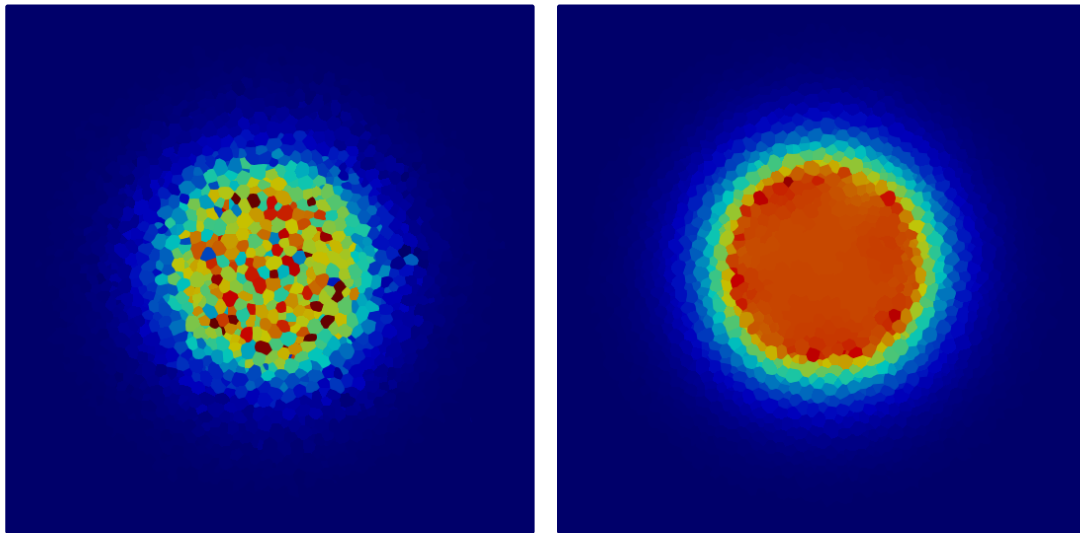
kde

$$f(\phi, T, \varphi^0(\nabla\phi); \xi, s) = a\phi(1 - \phi)\left(\phi - \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{s}b\xi^2\beta\varphi^0(\nabla\phi)(T - T^*). \quad (3.14)$$

3.3.2 Korekce gradientu

Prvním krokem při výpočtech na nestrukturované síti bylo porovnání chování izotropního modelu (1.45) s různými způsoby aproximace gradientu. Především chceme ověřit nutnost použití korekce gradientu (2.20) pro nepřipustnou síť srovnáním s výpočty pomocí jednodušších metod. Z obrázku 3.12 teplotního pole lze usoudit, že nelze použít k aproximaci toku pouze vztah pro výpočet gradientu ve význačném bodě (2.14) vycházející z věty o divergenci a následně interpolaci gradientu na stěnu (2.16).

Tento způsob aproximace toku na stěně se ukazuje jako naprosto nevhodný, protože do výpočtu gradientu na konkrétní stěně promlouvají i hodnoty z nesousedních buněk a bez použití korekce se poté model nechová správně. Dokonce i náhrada toku pouze pomocí diference (2.17) se chová lépe, přestože matematicky korektní je tento způsob pouze pro přípustné sítě, což naše síť není. Z toho lze také usuzovat, že naše síť není příliš vzdálená od sítě přípustné, tedy odchylka od pravého úhlu mezi stěnou a spojnicí význačných bodů buněk, které ke stěně náleží, není u většiny stěn příliš velká.



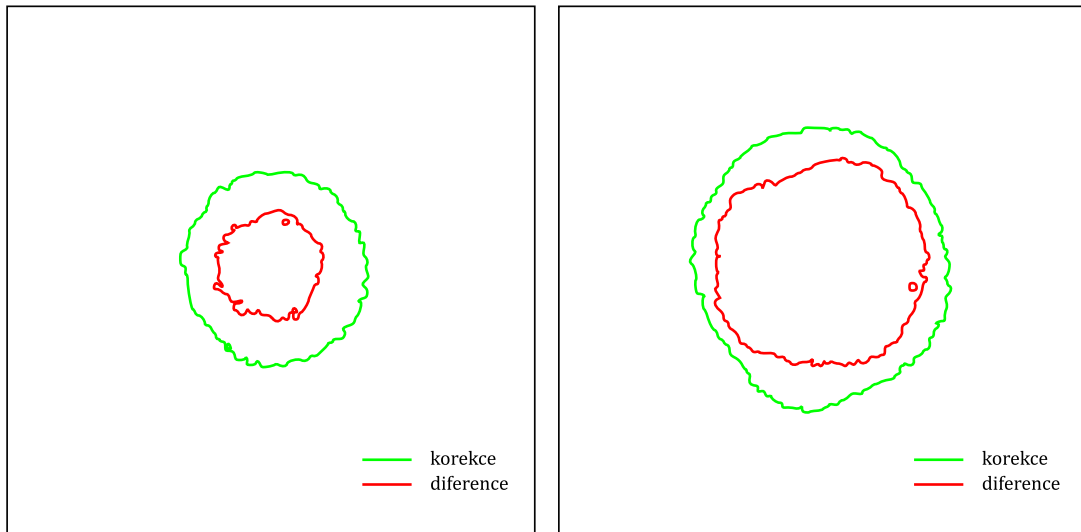
(a) aproximace gradientu pomocí věty o divergenci

(b) aproximace toku diferencí (2.17)

$\Omega = (-1/2, 1/2)^3$	$t = 0,012$	$\tilde{h} = 1/64$	$\xi = 1/200$	$\alpha = 3$	$\beta = 300$
$\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$	$R_0 = 0,03$	$a = 2$	$b = 1$	$L = 2$	$T^* = 1$

Obrázek 3.12: Srovnání teplotních polí pro různé aproximace toků na nepřípustné síti. Zobrazeno na řezu rovinou $z = 0$.

Následně jsme porovnali aproximaci toku pomocí diference (2.17) s aproximací využívající větu o divergenci (2.14), následnou interpolaci gradientu na stěny (2.16) a poté korekci gradientu (2.20). Obrázky 3.13 demonstrují tvar fázového rozhraní na rovinném řezu pro simulace s identickými parametry lišícími se pouze způsobem aproximace toku. Lze vidět, že aproximace pouze pomocí diference vykazuje jisté nedokonalosti jako trhliny v rostoucím krystalu a deformovaný tvar. V simulaci používající gradientní korekci si fázové rozhraní na řezu lépe drží tvar kruhu, což je očekávaný výsledek pro izotropní model a kruhovou počáteční podmínku pro ϕ .



$t = 0,004$		$t = 0,008$			
$\Omega = (-1/2, 1/2)^3$	$\tilde{h} = 1/128$	$\xi = 1/200$	$\alpha = 3$	$\beta = 600$	
$\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$	$R_0 = 0,01$	$a = 2$	$b = 1$	$L = 2$	$T^* = 1$

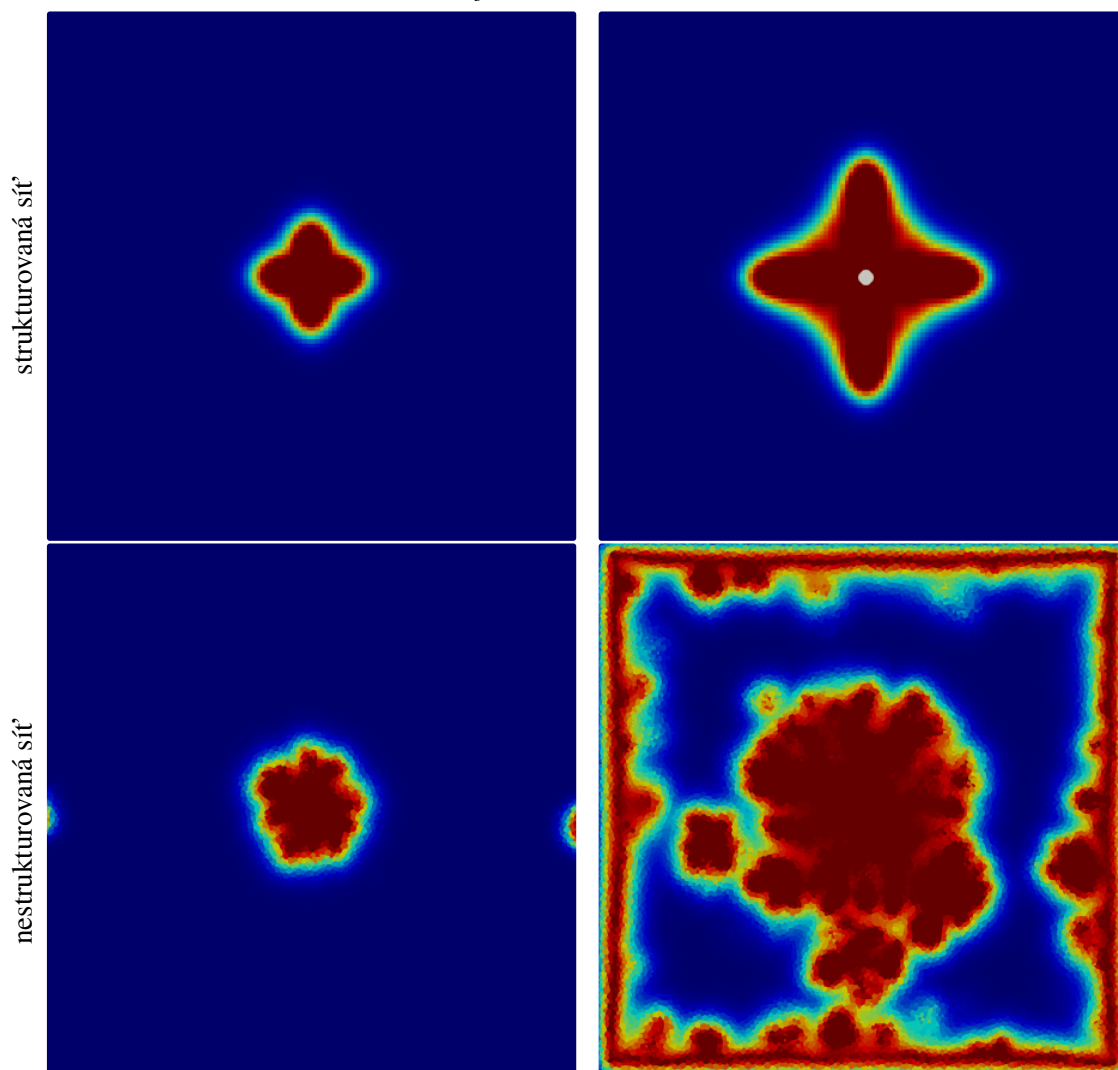
Obrázek 3.13: Srovnání fázových rozhraní pro různé aproximace toků na nepřístupné síti. Zobrazeno na řezu rovinou $z = 0$.

3.3.3 Srovnání strukturované a nestruturované sítě

K porovnání rozdílů chování modelu na strukturované a nestruturované síti použijeme model s anizotropií zavedenou pomocí Finslerovy geometrie. Pro srovnání budeme používat krychlovou strukturovanou síť s počtem buněk 128^3 . Tuto volbu jsme učinili na základě snahy zajistit co nejpodobnější rozměr jednotlivých buněk obou sítí. Používaná nestruturovaná síť, kterou budeme dále označovat jako mnohostěnovou, má celkem 2106130 buněk a tedy je použití strukturované sítě se $128^3 = 2097152$ buňkami intuitivní volbou. Snaha nějakým způsobem mít ve strukturované i nestruturované síti podobně velké buňky je nutná s ohledem na použití stejného parametru ξ pro obě sítě. Jak bylo zmíněno v části 3.2.2, příliš velké nebo malé ξ vůči rozměru buňky h vede k nesprávnému chování modelu. Proto kdyby rozdíl velikostí jednotlivých buněk mezi nestruturovanou a strukturovanou sítí byl příliš velký, nebylo by možné tyto výsledky vůbec porovnávat. Dalším problémem by mohl v nestruturované síti být příliš velký rozdíl ve velikosti buněk napříč sítí. Poté by mohla nastat situace, že v podoblasti diskretizované pomocí velkých buněk by se fázové rozhraní zastavilo na místě, zatímco v části sítě s jemnější diskretizací by se krystal stále rozvíjel, což by vedlo ke značným defektům v symetrii krystalu. Toto analyzujeme podrobněji dále.

Nejprve jsme chtěli využít známých a otestovaných parametrů modelu ze sekce 3.2.2 s využitím škálování modelu (3.13). Škálovaný model funguje správně, což lze ověřit tím, že výsledný tvar krystalu byl identický jako na obrázku 3.5. Na nestruturované mnohostěnové síti ovšem i s nejmenším ze tří použitých variant $\xi = 8/420 * 1,05$ začínal (obr. 3.14) krystal velmi rychle vznikat i od krajů oblasti a fázové rozhraní se příliš rozplývalo. Další simulace (obr. 3.15) ukázaly, že zmenšením podchlazení pomocí parametru β lze dosáhnout mnohem větší podobnosti ve výsledcích z obou sítí. V důsledku menšího podchlazení pak větvení krystalu neprobíhá tak snadno.

$$\xi = 8/420 * 1,05$$



strukturovaná síť

nestrukturovaná síť

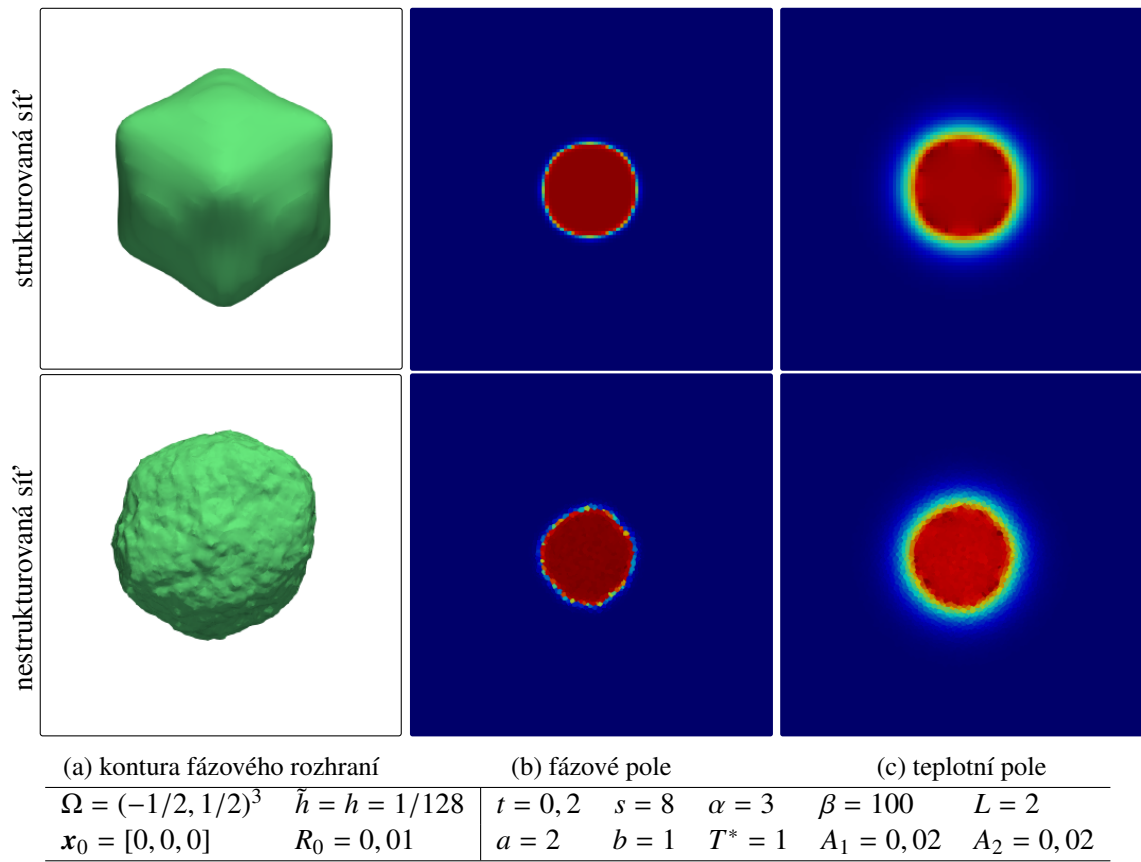
(a) $t = 0,04$

(b) $t = 0,1$

$\Omega = (-1/2, 1/2)^3$	$\tilde{h} = h = 1/128$	$s = 8$	$\alpha = 3$	$\beta = 300$	$L = 2$
$\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]$	$R_0 = 0,01$	$a = 2$	$b = 1$	$T^* = 1$	$A_1 = 0,02 \quad A_2 = 0,02$

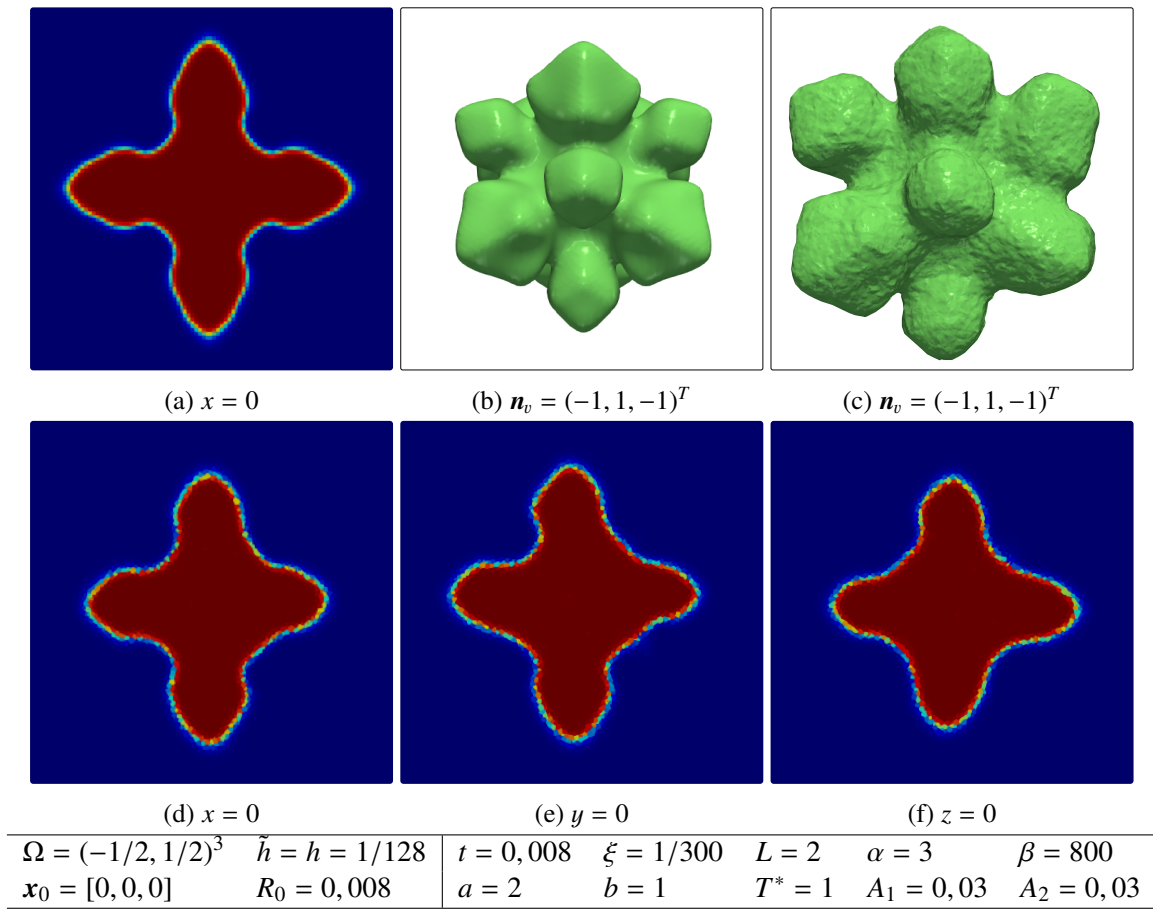
Obrázek 3.14: Srovnání teplotních polí na strukturované a nestrukturované mnohostěnové síti s využitím parametrů modelu z [9]. Použita šestičtá Finslerova anizotropie a zobrazeno na řezu rovinou $z = 0$.

$$\xi = 8/240 * 1,05$$

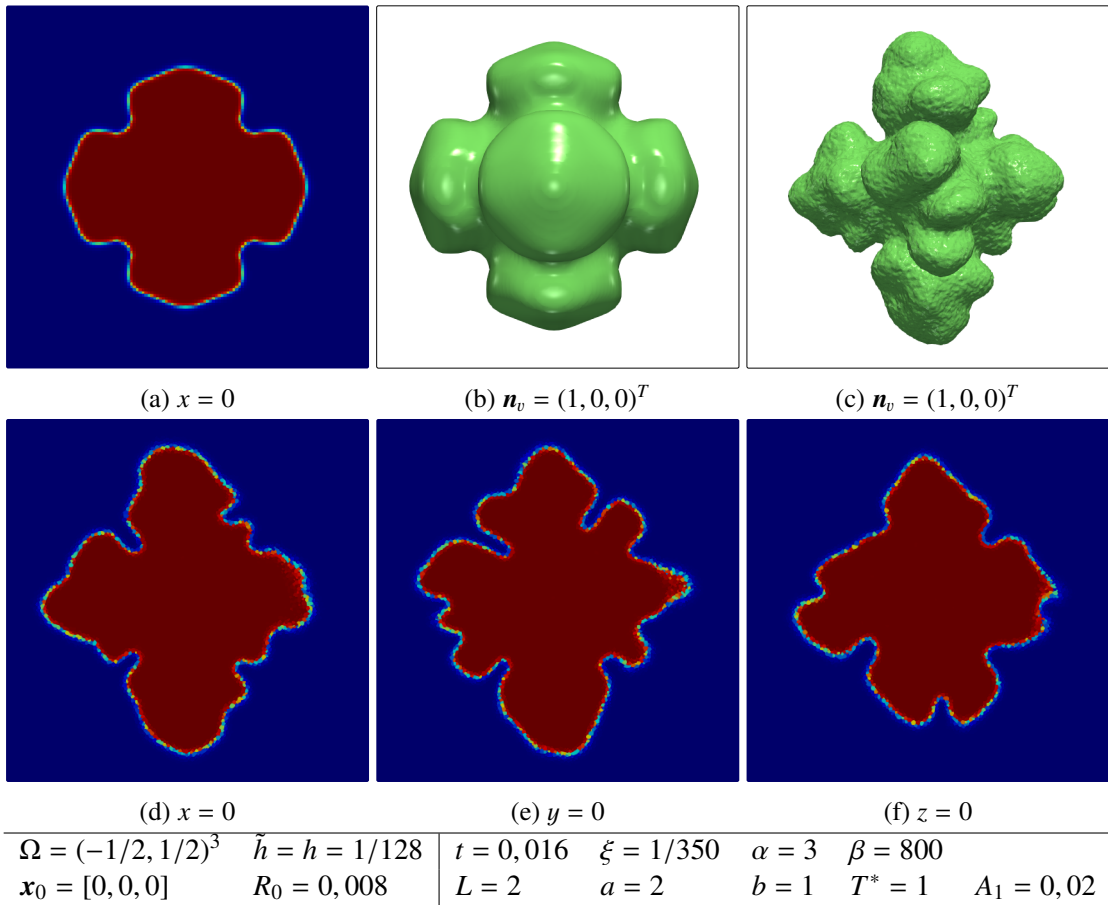


Obrázek 3.15: Porovnání výsledků na strukturované a nestrukturované mnohostěnové síti s šestičtetnou Finslerovou anizotropií. Kontury fázového rozhraní jsou zobrazeny s normálovým vektorem roviny zobrazení $\mathbf{n}_v = (1, 1, 1)^T$ a pole na řezu rovinou $z = 0$.

Poté jsme se pokusili najít nastavení parametrů, které by realizovalo lépe rozvinutý tvar krystalu na oblasti $(-1/2, 1/2)^3$ a porovnat tyto výsledky na strukturované a nestrukturované mnohostěnové síti. Z těchto simulací vznikly obrázky 3.16 a 3.17, kde jsou ortogonální projekcí zobrazeny kontury fázového rozhraní na obou sítích a zároveň vzhled fázového pole na rovinných řezech. Na strukturované síti je zobrazen pouze jeden řez rovinou $x = 0$, protože při čtyřčetné, respektive šestičetné anizotropii v kombinaci se symetrií sítě je vzhled fázového pole na řezech $y = 0$ a $z = 0$ identický. Z těchto obrázků lze usoudit, že zatímco s některými parametry (obr. 3.16) je podobnost obou krystalů poměrně zjevná, v jiných simulacích nelze najít téměř žádnou podobnost (obr. 3.17). Na řezech nestrukturovanou síti v obrázku 3.16 si lze také všimnout odlišnosti v jednom směru, což je s největší pravděpodobností způsobeno geometrií konkrétní sítě. Výsledky z nestrukturované mnohostěnové sítě jsou deformované a svým tvarem připomínají výsledky simulací s použitím šumu [12].



Obrázek 3.16: Porovnání výsledků na strukturované (a)-(b) a nestrukturované mnohostěnové (c)-(f) síti. Je zvolena šestičetná Finslerova anizotropie a vizualizováno fázové pole a jeho kontura. U jednotlivých obrázků přidáváme normálový vektor roviny zobrazení \mathbf{n}_v nebo rovnici rovinného řezu, který zobrazuje.



Obrázek 3.17: Porovnání výsledků na strukturované (a)-(b) a nestrukturované mnohostěnové (c)-(f) síti. Je zvolena čtyřčetná Finslerova anizotropie a vizualizováno fázové pole a jeho kontura. U jednotlivých obrázků přidáváme normálový vektor roviny zobrazení \mathbf{n}_v nebo rovnici rovinného řezu, který zobrazuje.

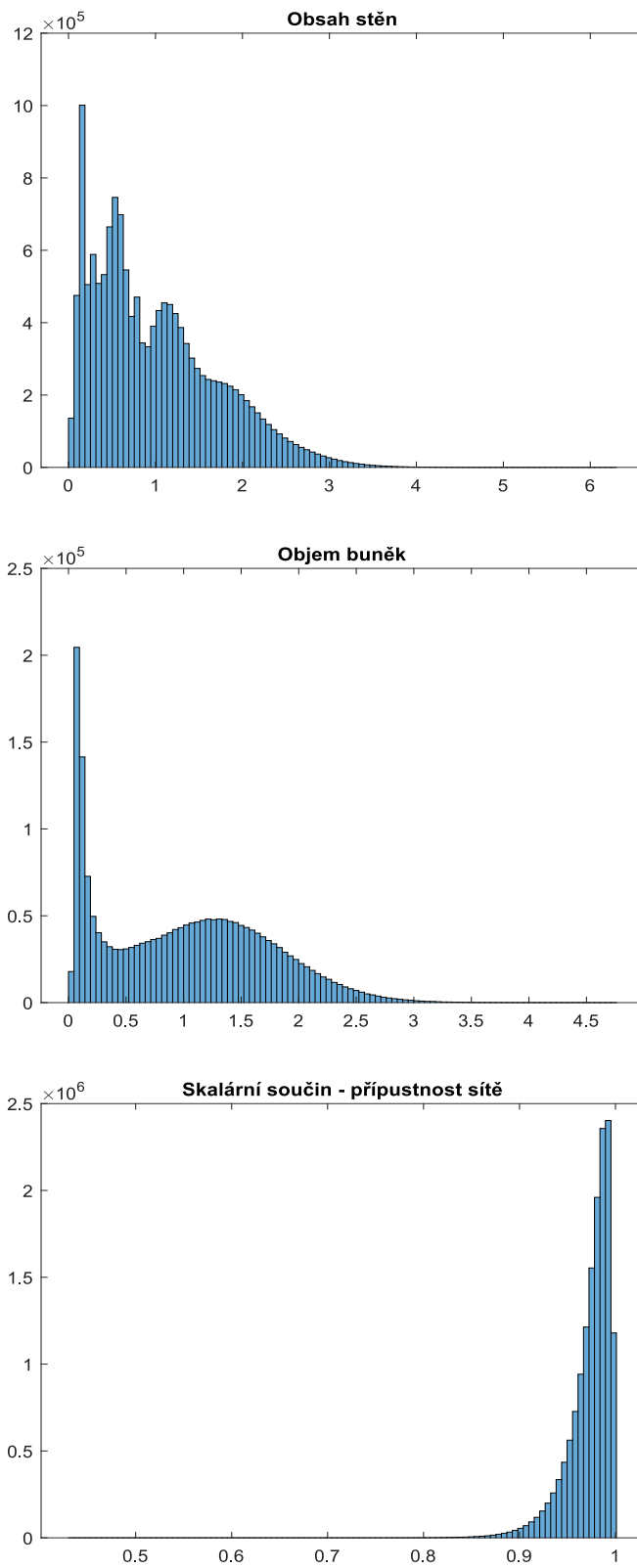
Z důvodu neúspěšného použití mnohostěnové sítě k uspokojivé replikaci výsledků ze sítě strukturované jsme se rozhodli síť zběžně analyzovat. Vypsáním podílů

$$\frac{\text{obsah stěny}}{\text{průměrný obsah stěny}}, \frac{\text{objem buňky}}{\text{průměrný objem buňky}}$$

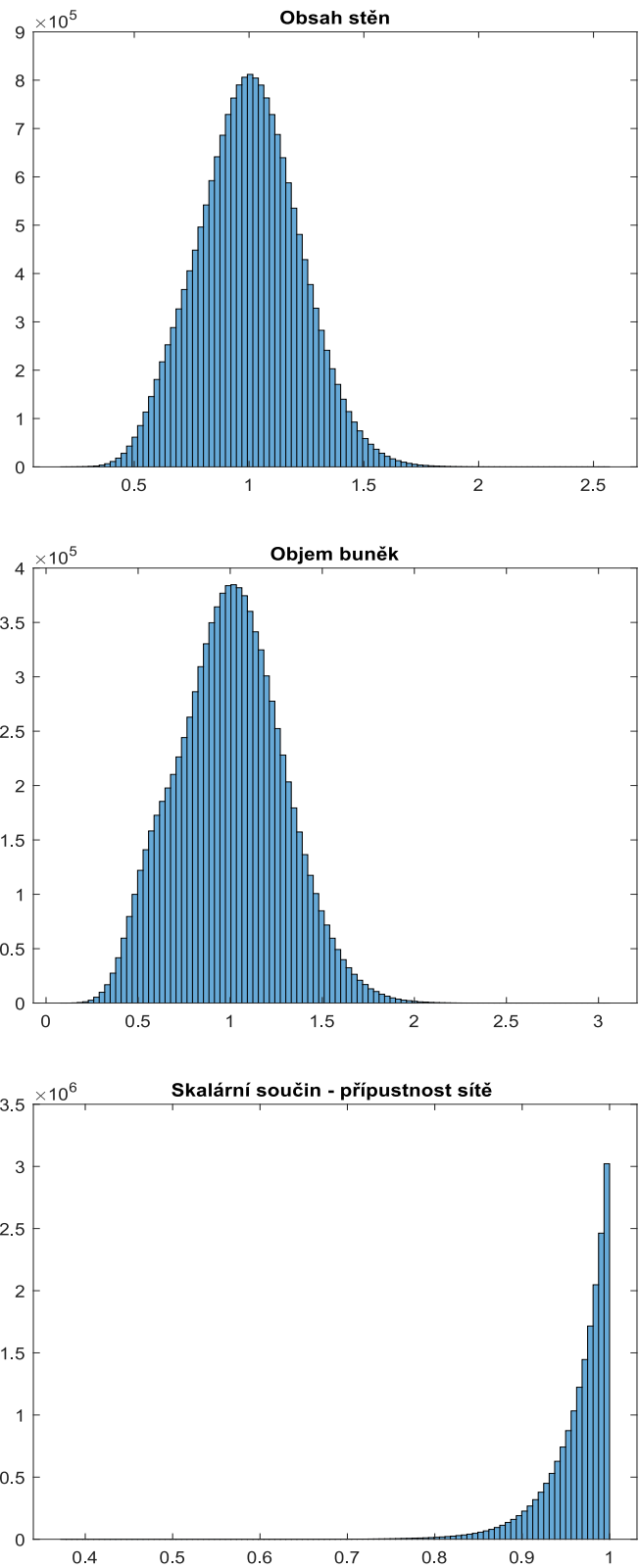
a skalárního součinu $\mathbf{d}_{KL} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}$ jednotkového normálového vektoru stěny a jednotkového vektoru mezi význačnými body (2.19) ke stěně příslušejících buněk a následným uspořádáním do histogramu (obr. 3.18) pomocí programu Matlab můžeme o naší mnohostěnové síti mnohé zjistit. Zmíněný skalární součin, který by pro striktně přípustnou síť byl vždy 1, je pro velkou většinu buněk mezi hodnotami 0,9 a 1, což znamená, že tato mnohostěnová síť se příliš neliší od přípustné sítě. Bohužel také lze vidět, že na úkor tohoto se v síti vyskytuje velké množství buněk velmi odlišného rozměru. Především mnoho buněk, které jsou velmi malé oproti průměrné velikosti buňky v celé síti. V důsledku toho pak to samé platí i pro stěny. Tento fakt, jak už bylo diskutováno, může způsobovat značné problémy v simulacích, kdy může nastat situace, že při pohybu přes velké buňky by se fázové rozhraní zastavilo na místě, zatímco v části sítě s diskretizací s těmito malými buňkami by se krystal stále rozvíjel. Velké množství malých buněk se také může negativně projevit zmenšením časového kroku v Rungeově-Kuttově metodě a v důsledku toho zpomalením výpočtu. Po tomto zjištění jsme se zdrželi dalších pokusů o simulace na této mnohostěnové

síti, protože díky velkému rozdílu mezi buňkami v síti by nepomohlo ani srovnání se strukturovanou sítí s jiným rozměrem buněk.

Se snahou o lepší numerické výsledky jsme tedy generovali novou nestrukturovanou síť pomocí programu Ansys Meshing. Hlavním požadavkem na tuto síť bylo, aby měla velmi podobné velikosti buněk napříč výpočetní oblastí a zároveň velikost buňky opět odpovídala strukturované síti se 128^3 buňkami. Tato nová síť již také neobsahuje mnohostěny, ale je složena výhradně ze čtyřstěnů a použijeme ji pro všechny následující simulace. Stejnou analýzou jako pro mnohostěnovou síť zjišťujeme (obr. 3.19), že rozdělení velikosti buněk je téměř Gaussovo a nejvíce buněk je o průměrné velikosti. Podobné tvrzení platí i pro stěny, zároveň také lze konstatovat, že skalární součin, který ověřujeme pro podmínku přípustnosti se odchyluje od 1 více než u předchozí mnohostěnové sítě.

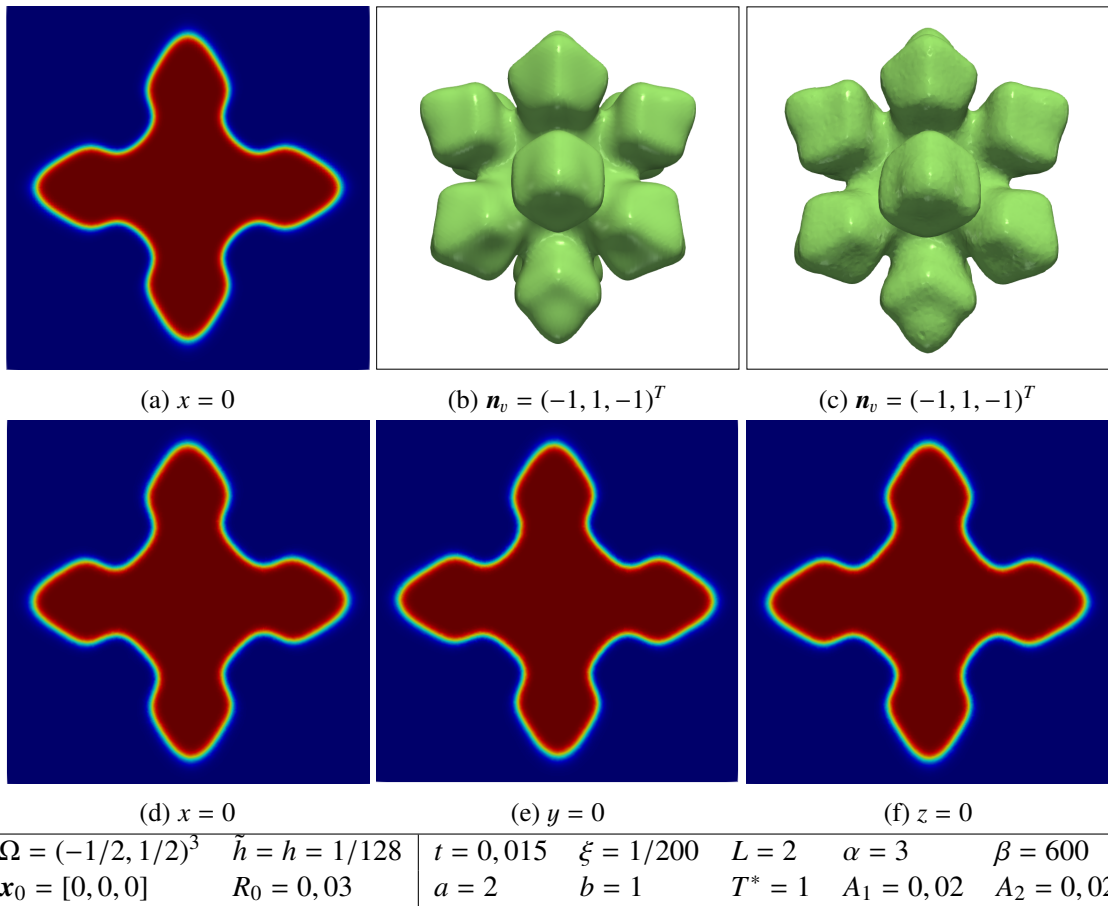


Obrázek 3.18: Histogramy získané pomocí Matlabu sloužící k analýze mnohostěnové nestrukturované sítě.

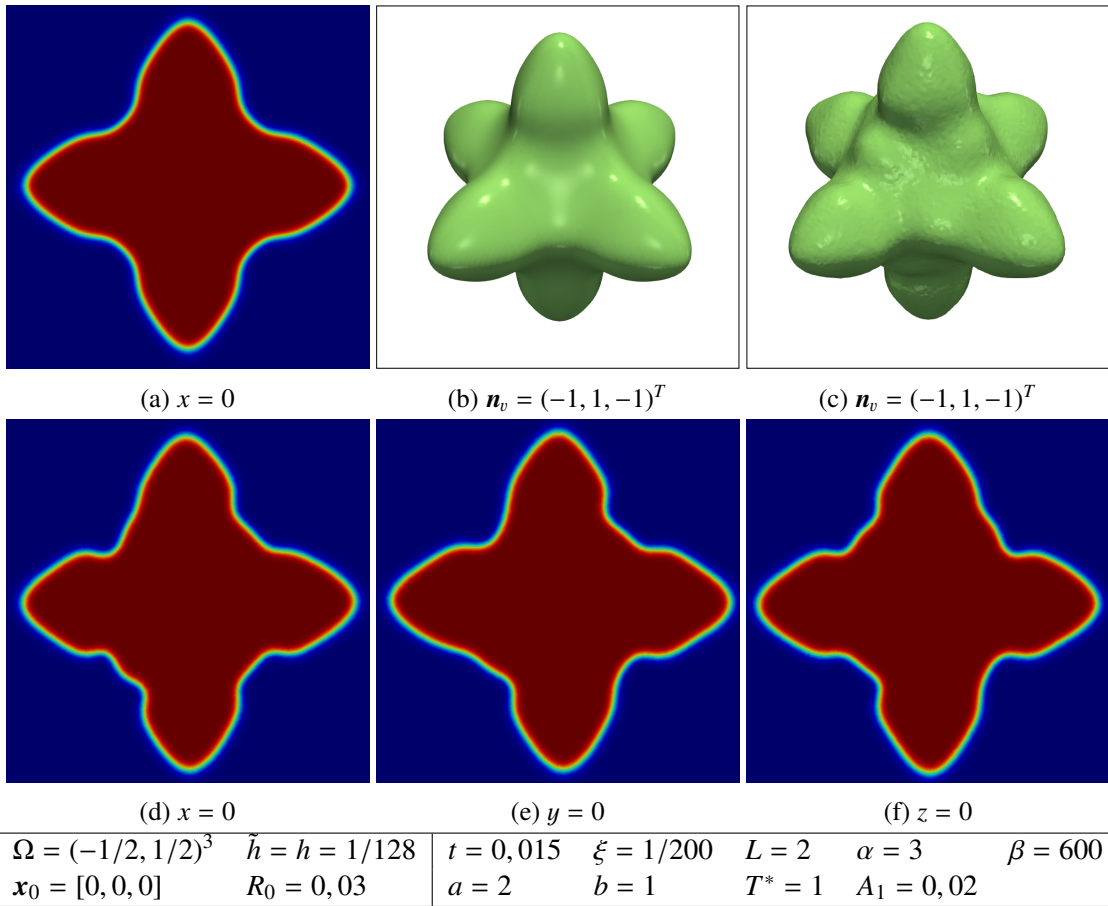


Obrázek 3.19: Histogramy získané pomocí Matlabu sloužící k analýze čtyřstěnové nestrukturované sítě.

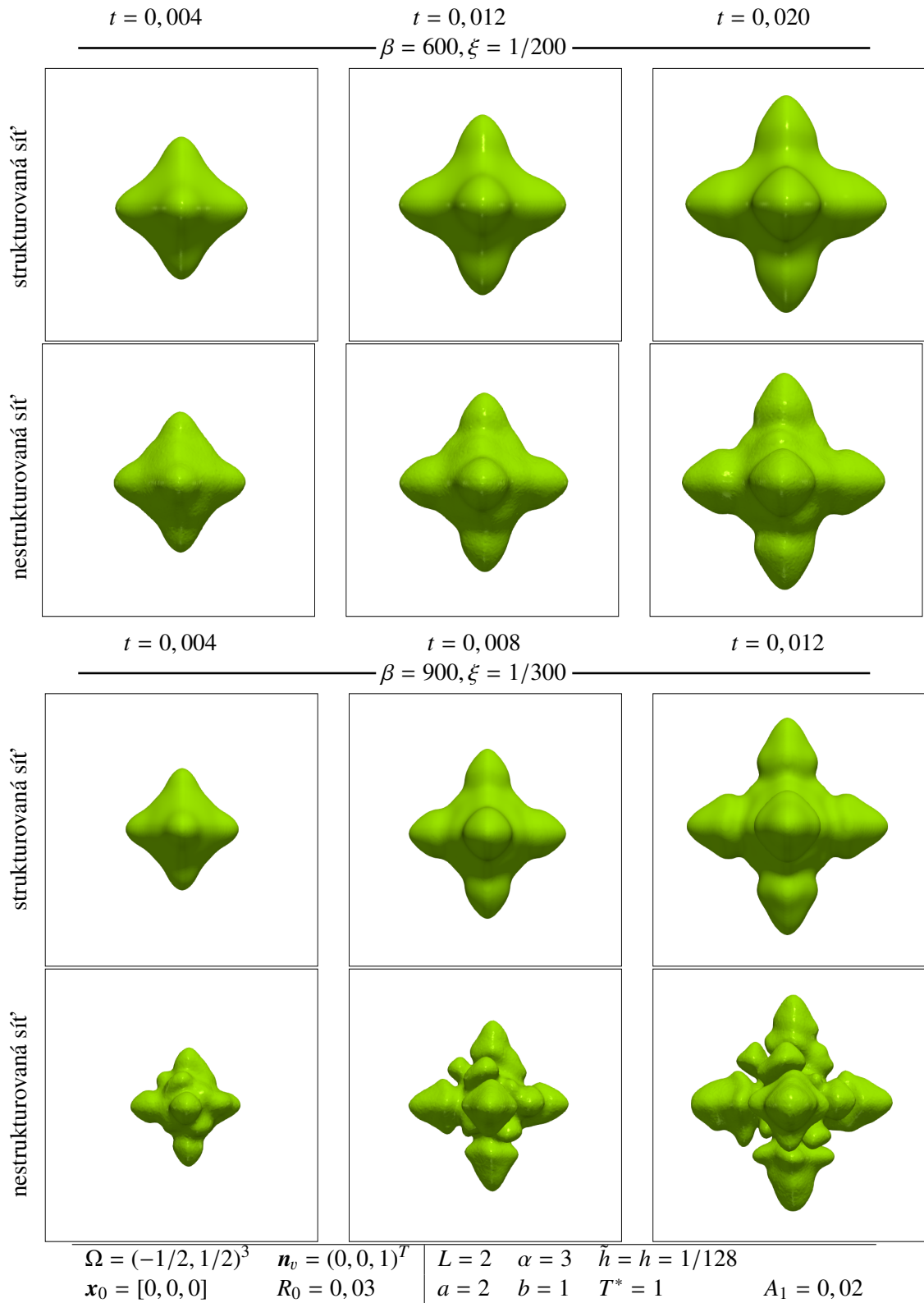
Prvotní simulace na čtyřstěnové síti (obr. 3.20 a 3.21), které prezentujeme analogicky jako pro mnohostěnovou síť obrázky 3.16 a 3.17, nám poskytují o mnoho větší podobnost mezi strukturovanou a nestrukturovanou sítí. Hlavně pro šestičetnou anizotropii na první pohled není vidět rozdíl, u čtyřčetné anizotropie se nachází drobný defekt, který je ale o mnoho menší než pro mnohostěnovou síť (obr. 3.17). Toto zjištění vedlo k provedení důkladnější studie pro srovnání výsledků simulací na čtyřstěnové a krychlové síti, jejíž výsledkem jsou obrázky 3.22-3.24. Zobrazena je kontura fázového rozhraní a provedeny jsou dvě sady simulací lišící se v nastavení parametrů β a ξ pro každou četnost anizotropie a každou síť. Ze studie je patrné, že výsledky na nestrukturované čtyřstěnové síti velmi dobře odpovídají výsledkům ze sítě strukturované především pro nastavení s větším parametrem ξ a menším β , jež způsobuje méně divoký růst krystalu. Pro druhé nastavení parametrů β a ξ už jsou odlišnosti mezi výsledky na obou sítích celkem dobře patrné, přičemž se projeví, že nestrukturovaná síť narozdíl od strukturované stále obsahuje buňky různých rozměrů.



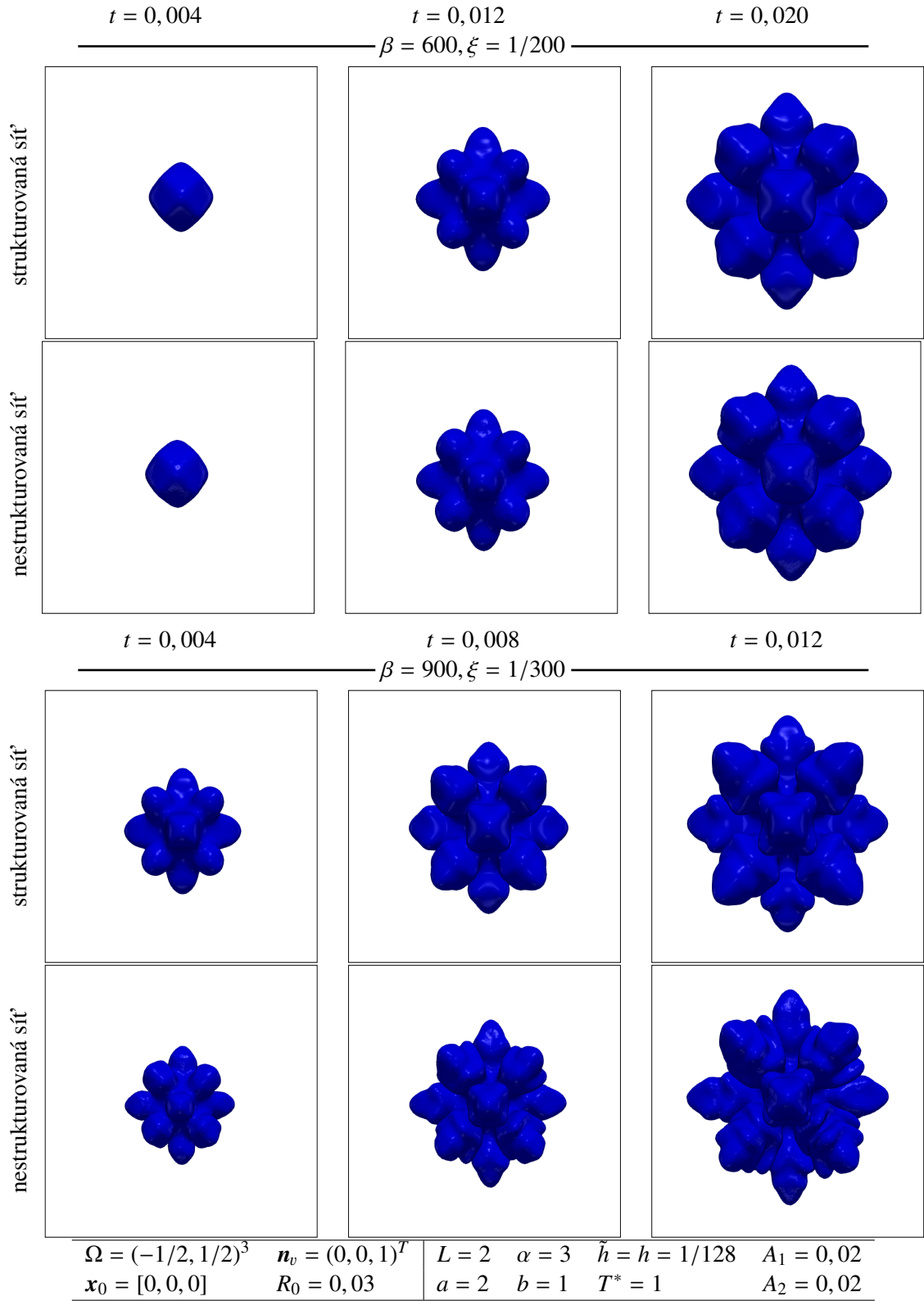
Obrázek 3.20: Porovnání výsledků na strukturované (a)-(b) a nestrukturované čtyřstěnové (c)-(f) síti. Je zvolena šestičetná Finslerova anizotropie a vizualizováno fázové pole a jeho kontura. U jednotlivých obrázků přidáváme normálový vektor roviny zobrazení \mathbf{n}_v nebo rovnici rovinného řezu, který zobrazuje.



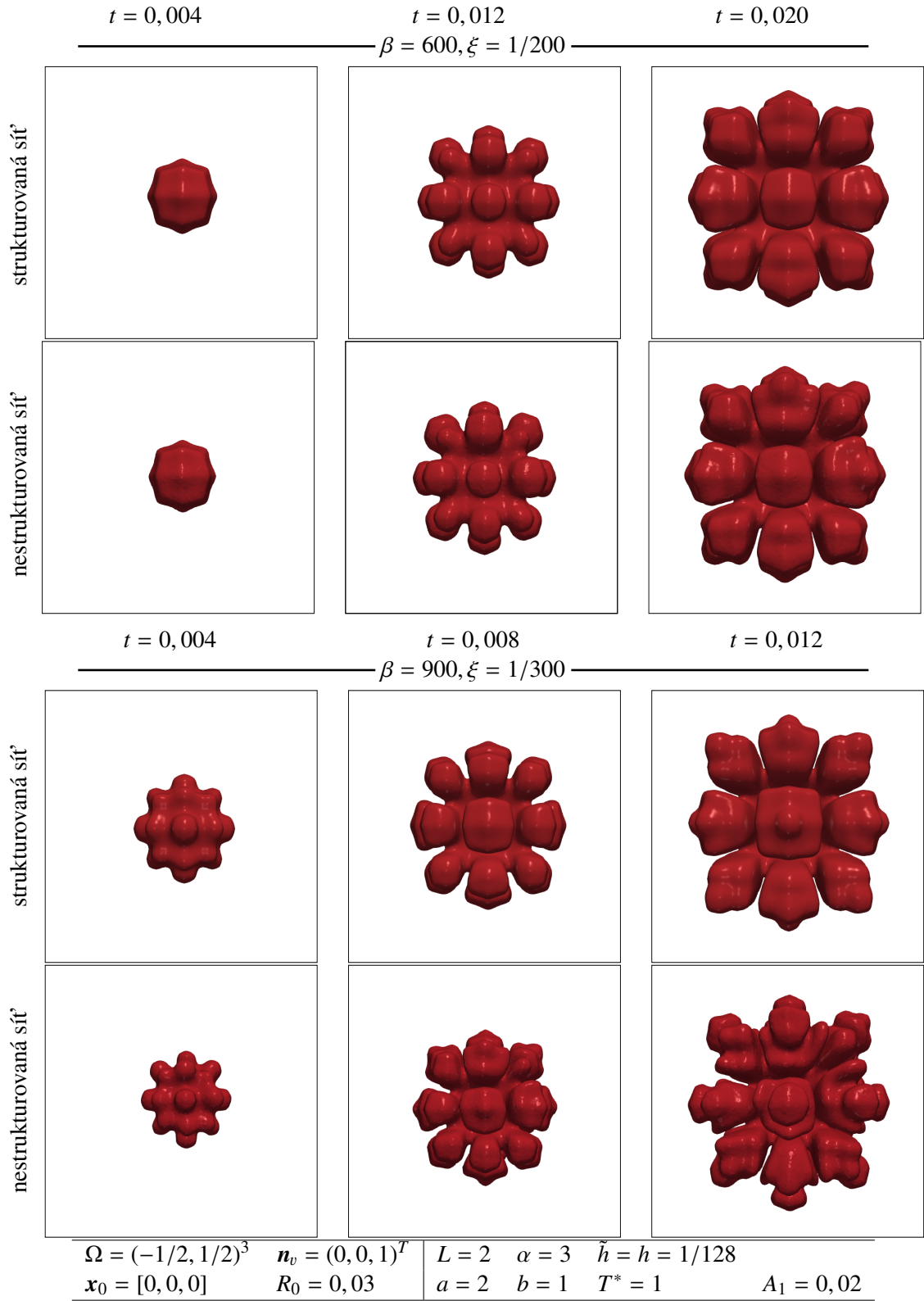
Obrázek 3.21: Porovnání výsledků na strukturované (a)-(b) a nestrukturované čtyřstěnové (c)-(f) síti. Je zvolena čtyřčetná Finslerova anizotropie a vizualizováno fázové pole a jeho kontura. U jednotlivých obrázků přidáváme normálový vektor roviny zobrazení \mathbf{n}_v nebo rovnici rovinného řezu, který zobrazuje.



Obrázek 3.22: Výpočetní studie s čtyřčetnou Finslerovou anizotropií zaměřená na srovnání strukturované a nestrukturované čtyřstěnové sítě s dvěma různými nastaveními parametrů β a ξ . Zobrazena je kontura pevné podoblasti $\Omega_s(t)$.



Obrázek 3.23: Výpočetní studie s šestičtetnou Finslerovou anizotropií zaměřená na srovnání strukturované a nestrukturované čtyřstěnové sítě s dvěma různými nastaveními parametrů β a ξ . Zobrazena je kontura pevné podoblasti $\Omega_s(t)$.



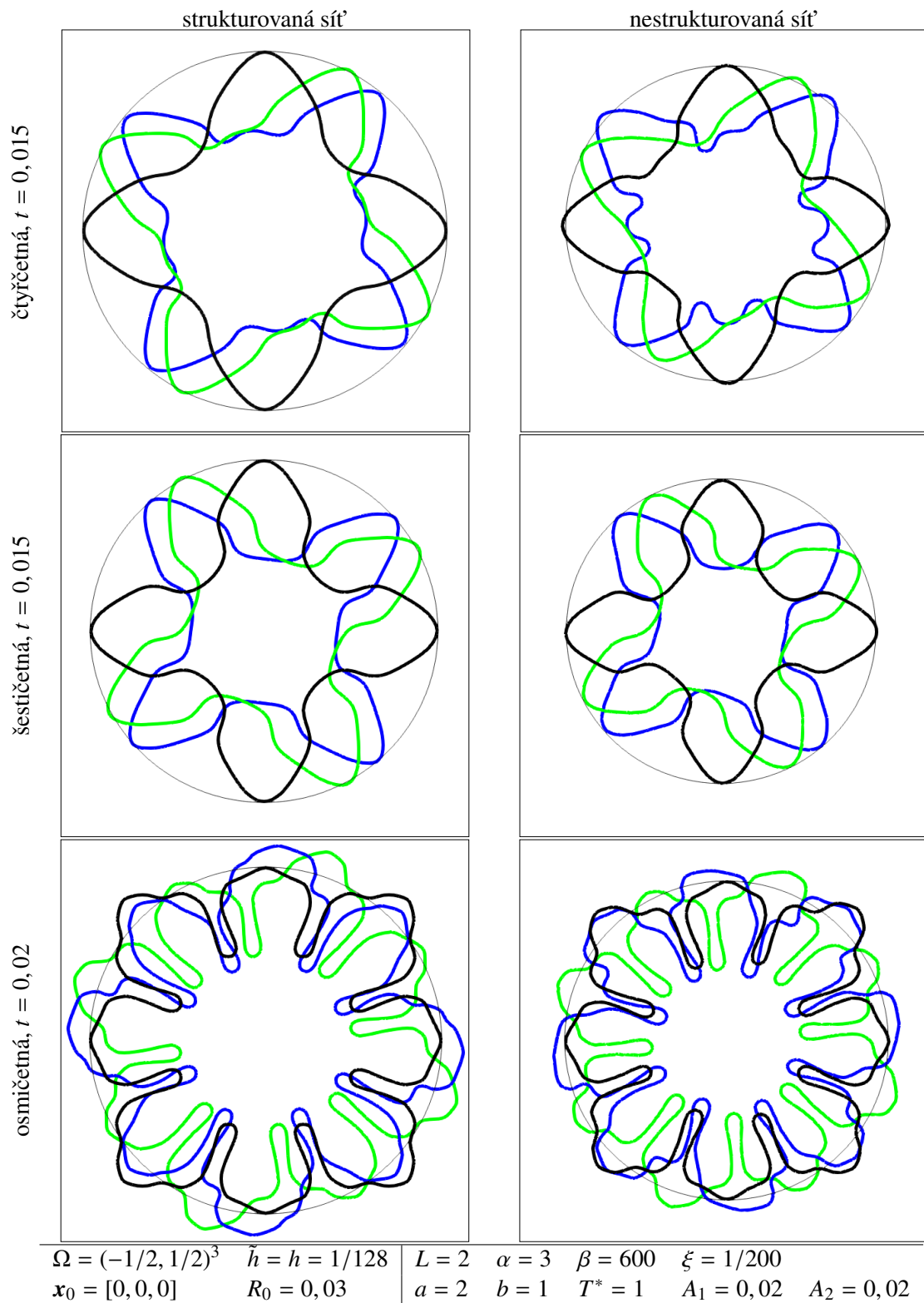
Obrázek 3.24: Výpočetní studie s osmičetnou Finslerovou anizotropií zaměřená na srovnání strukturované a nestrukturované čtyřstěnové sítě s dvěma různými nastaveními parametrů β a ξ . Zobrazena je kontura pevné podoblasti $\Omega_s(t)$.

S ohledem na naši motivaci pro použití nestrukturovaných sítí, kterou je odstranění vlivu orientace strukturované sítě na tvar krystalu jsme na čtyřstěnové síti provedli studii na různě otočených krystalech. Použijeme anizotropní model založený na Finslerově geometrii, přičemž otočíme krystal okolo osy z o úhel α jak bylo diskutováno v sekci 1.2.3 pomocí matice

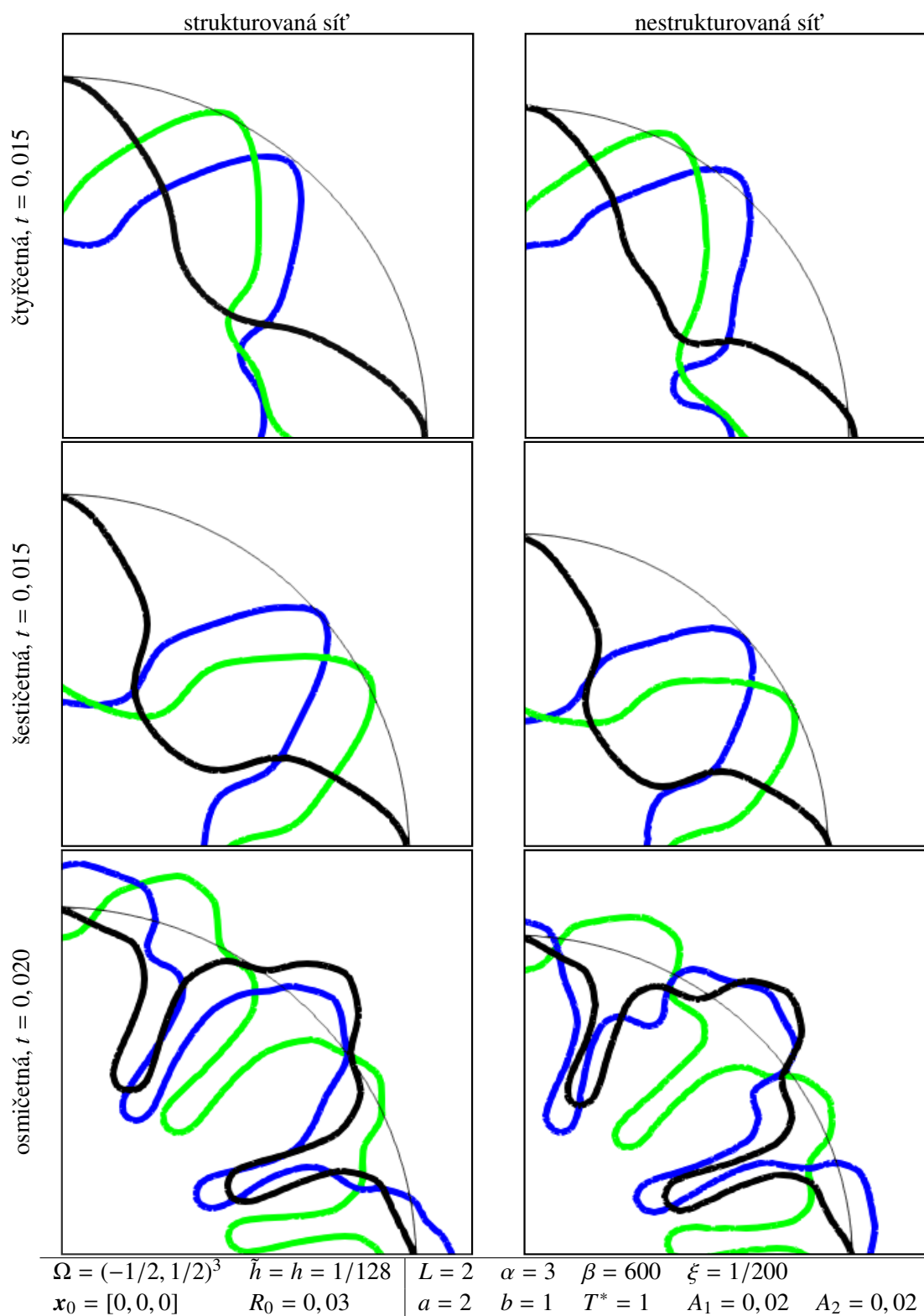
$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

K vizualizaci těchto výsledků využijeme linie reprezentující fázová rozhraní z jednotlivých simulací na rovinném řezu $z = 0$. Pro lepší orientaci je v obrázcích přidána kružnice se středem v $[0, 0, 0]$, což odpovídá středu krystalizačního zrna a s poloměrem daným nejkratším hlavním ramenem neotočeného krystalu. Studie je zachycena na obrázcích 3.25-3.28 a opět simulace provádíme pro různé druhy anizotropií a dvě možná nastavení parametrů β a ξ . Z výsledků pro kombinaci $\beta = 900$, $\xi = 1/300$ je patrné chování, které již bylo pozorováno na obrázcích 3.22-3.24. Na nestrukturované čtyřstěnné síti se již krystal začíná více větvit a chovat se divočeji než na síti strukturované, otočení krystalografické orientace na tomto nic nezmění. Pro šestičetnou anizotropii (obr. 3.27) ovšem pozorujeme jev, jež byl motivací. Zatímco na strukturované síti je mezi délkou ramen otočeného a neotočeného krystalu výrazný rozdíl, na síti nestrukturované se tento rozdíl značně zmenší a ramena jsou téměř stejně dlouhá.

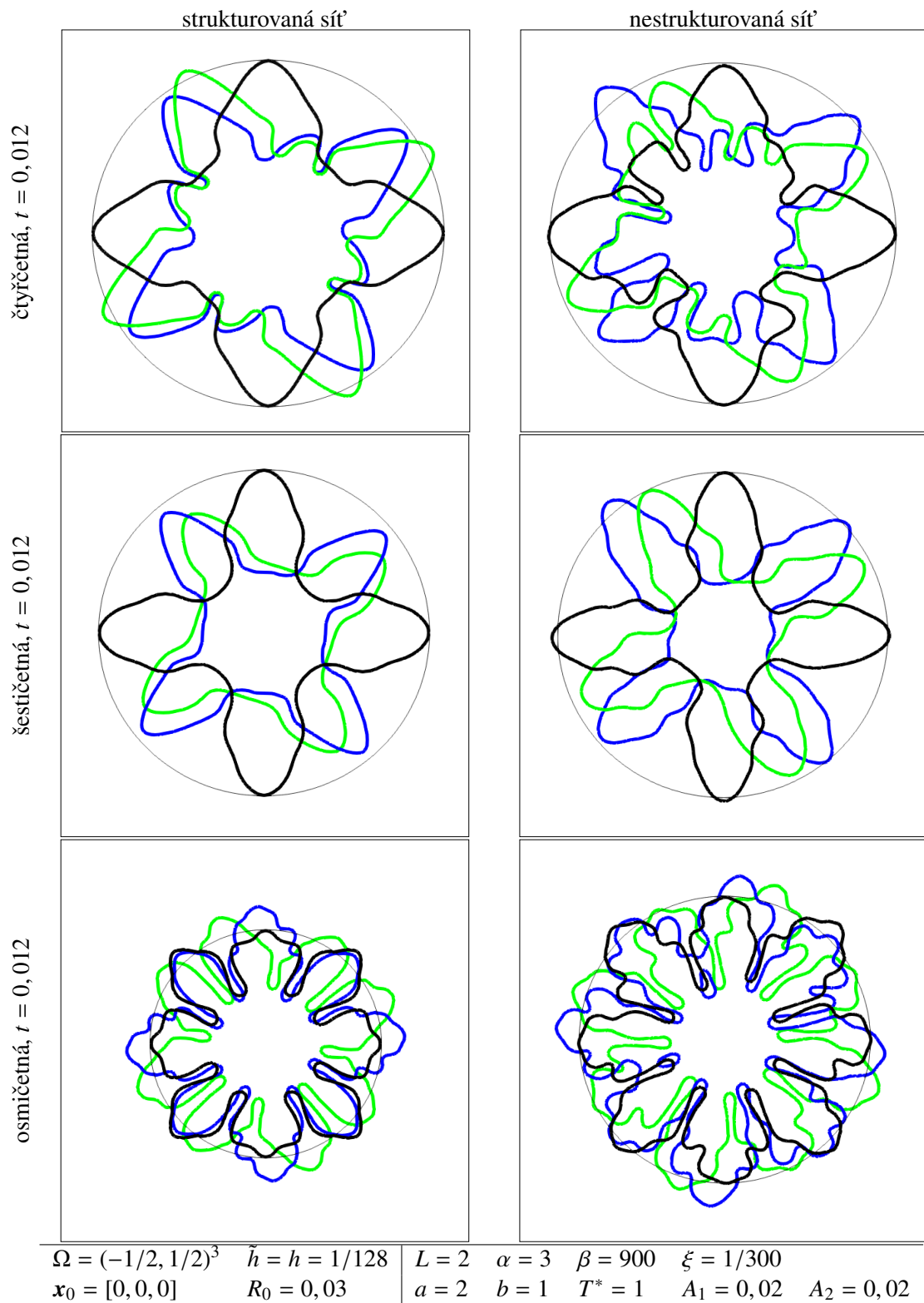
Naopak třeba v simulaci se čtyřčetnou symetrií a větší ξ na nestrukturované síti vznikají mnohem větší sekundární ramena, která se na strukturované síti téměř neobjevují. Závěrem je, že pro tuto síť snaha o odstranění vlivu orientace strukturované sítě nebyla plně úspěšná a ani na nestrukturované čtyřstěnné síti nemá krystal stejný tvar ať už ho otočíme jakkoliv. Je možné, že s ještě lépe generovanou sítí, která by měla většinu buněk velikostí opravdu blízko průměrné velikosti buňky, by byl výsledek lepší. Nicméně to pro praktické využití vyžaduje mít velmi dobrý generátor nestrukturované sítě se specifickými požadavky.



Obrázek 3.25: Výpočetní studie s Finslerovou anizotropií zaměřená na srovnání strukturované a nestrukturované čtyřstěnové sítě při otočení okolo osy z o různý úhel. Zobrazujeme fázové rozhraní na řezu podstatnou rovinou $z = 0$. Otočení o 0 je značeno černou linií, o $\pi/6$ zelenou a o $\pi/4$ modrou.



Obrázek 3.26: Výpočetní studie s Finslerovou anizotropií zaměřená na srovnání strukturované a nestrukturované čtyřstěnové sítě při otočení okolo osy z o různý úhel. Zobrazujeme zvětšenou část fázového rozhraní na řezu podstatnou rovinou $z = 0$. Otočení o 0 je značeno černou linií, o $\pi/6$ zelenou a o $\pi/4$ modrou.



Obrázek 3.27: Výpočetní studie s Finslerovou anizotropií zaměřená na srovnání strukturované a nestrukturované čtyřstěnové sítě při otočení okolo osy z o různý úhel. Zobrazujeme fázové rozhraní na řezu podstatnou rovinou $z = 0$. Otočení o 0 je značeno černou linií, o $\pi/6$ zelenou a o $\pi/4$ modrou.



Obrázek 3.28: Výpočetní studie s Finslerovou anizotropií zaměřená na srovnání strukturované a nestrukturované čtyřstěnové sítě při otočení okolo osy z o různý úhel. Zobrazujeme zvětšenou část fázového rozhraní na řezu podstatnou rovinou $z = 0$. Otočení o 0 je značeno černou linií, o $\pi/6$ zelenou a o $\pi/4$ modrou.

3.3.4 Výpočetní náročnost

Na závěr ještě okomentujme výpočetní náročnost simulací na nestrukturovaných sítích. V časové náročnosti je pozorován velký rozdíl. Pro porovnání využijeme identických simulací se stejným použitým hardwarem. Jeden výpočetní uzel clusteru HELIOS má 128 GB RAM paměti, 360 GB lokálního SSD úložiště a 2x16-jádrový procesor AMD EPYC 7281@2.1GHz. Zatímco výpočet na 1 uzlu s využitím paralelizace OpenMP na strukturované síti přibližně 6 minut, na naší nestrukturované mnohostěnové síti je to více než 6 hodin. Tedy přibližně 60x pomalejší. Z velké části je to způsobeno složitostí geometrie dané sítě, která zjevně obsahuje mnohostěny s velkým počtem stěn a vrcholů. Přestože neznáme přesnou geometrii sítě, můžeme tento fakt bez hlubší analýzy usoudit například z poměru počtů vrcholů obou sítí. Ten činí 12702219 pro nestrukturovanou mnohostěnovou síť, zatímco strukturovaná síť má vrcholů pouze 2146689. Na rozdíl v časové náročnosti nemá vliv pouze běh řešiče jako takový, velké množství času zabírá také průběžný export výsledků a sítě do souborů `.vtk`. Především je to způsobeno nemožností paralelizace, protože zápis musí probíhat postupně, aby soubor obsahoval správně topologické údaje sítě. To také prohlubuje rozdíl mezi oběma výpočty, protože jak už bylo řečeno, nestrukturovaná síť má mnohem více vrcholů, které se do souboru zapisují. Do tohoto promlouvá i omezení souboru `.vtk`, protože před exportem mnohostěnu je třeba je rozdělit na čtyřstěny, což lze obecně [3] tak, že uděláme střed každé stěny buňky a střed celé buňky a pak každou hranu, tj. 2 vrcholy vezmeme dohromady se středem stěny, jež k ní přísluší, a středem buňky. Tyto čtyři body vytvoří čtyřstěn. Toto dělení už například z jednoho čtyřstěnu vytvoří dvanáct menších čtyřstěnu. Pro buňky s mnoha stěnami bude situace ještě horší. To zvyšuje také požadavky na paměť - pro představu velikost souboru `.vtk` obsahujícího i data o polích ϕ a T je pro strukturovanou síť asi 220 MB, zatímco pro nestrukturovanou mnohostěnovou 9,4 GB. Pro čtyřstěnovou síť, kde toto dělení není nutné, je velikost souboru opět pouze 500 MB. Výpočet se na čtyřstěnové síti o něco zrychlí a je při stejných simulacích asi 50x pomalejší než na síti strukturované.

Závěr

V práci je shrnuta základní teorie potřebná k popisu fázového přechodu prvního druhu. Dále je formulována Stefanova úloha i model fázového pole pro čistou látku s odlišením několika variant modelu podle tvaru reakčního členu. Následně je představen anizotropní model - nejdříve je anizotropie vnesena pomocí jednoduchého způsobu ve dvourozměrném případě a poté pomocí teorie Finslerovy geometrie i v trojrozměrném případě. Dále je teoretická část věnována základním poznatkům o použití modelu fázového pole pro modelování tuhnutí binárních slitin. Druhá část práce se věnuje obecnému odvození semidiskrétního schématu pomocí metody konečných objemů pro rovnice, jež obsahují prezentované modely fázového pole. Ve schématu není předpokládána kolmost spojnice význačných bodů sousedních buněk s jejich společnou stěnou, a proto je diskutováno použití korekce aproximace gradientu. Semidiskrétní schéma je dále řešeno pomocí Rungeovy-Kuttovy-Mersonovy metody. V praktické části práce byl vytvořen program v jazyce C++ s využitím knihovny GTMesh pro práci s nestrukturovanými sítěmi, který je schopen řešit modely fázového pole obecně na strukturovaných i nestrukturovaných sítích ve dvou i třech rozměrech. S jeho pomocí byla provedena výpočetní studie na clusteru HELIOS na KM FJFI ČVUT. Poslední kapitola je věnována grafickému výstupu z této studie, jejíž cílem bylo prokázat funkčnost implementovaného programu, prozkoumat chování modelů fázového pole představených v teoretické části práce a především diskutovat použití nestrukturovaných sítí a jejich vliv na výsledný tvar fázového rozhraní. Hlavním přínosem práce jsou zajisté právě výsledky získané z nestrukturovaných sítí, na které je možné dále navázat například s větším zaměřením na analýzu použité sítě. Veškeré obrázky a vizualizace simulací v této práci byly vytvořeny a upraveny pomocí programů ParaView, Matlab a Inkscape.

Na strukturovaných sítích v sekci 3.2.2 se úspěšně podařilo replikovat výsledky z [9]. Konstatujeme, že použití nestrukturovaných sítí (sekce 3.3.3) vnáší do výsledků perturbace podobné jako vložení šumu přímo do modelu. Nicméně kromě tohoto faktu, na čtyřstěnové síti dosahujeme podobných výsledků jako na síti strukturované. Také na této síti nepozorujeme upřednostnění některých směrů růstu v důsledku souhlasné orientace krystalu i sítě, nicméně je výsledný tvar zase ovlivněn náhodností geometrie nestrukturované sítě. Použití mnohostěnové sítě není nijak opodstatněné, jelikož to nepřináší úsporu výpočetního času, navíc se v mnohostěnové síti nachází mnoho malých buněk, přes které se rozhraní zasekne a to velmi deformuje výsledný tvar krystalu. Pro tuhnutí binárních slitin sekce 3.2.4 obsahuje výsledky základního modelu s realistickými parametry Cu-Ni slitiny ve dvou rozměrech, přičemž lze pozorovat chování koncentračního pole v souladu s literaturou [29]. Také v souladu s literaturou vypuštěním rovnice vedení tepla z modelu se výrazně sníží výpočetní nároky, což odůvodňuje zmiňovaný izotermický předpoklad ze sekce 1.3.1. Také je proveden pokus s vložení jednoduché anizotropie (1.55). Zajímavým postupem v rámci modelování slitin pomocí fázového pole by mohlo být vyzkoušet pro tři rozměry vložit do modelu anizotropii pomocí Finslerovy geometrie a srovnat tyto výsledky s experimentálními případně řezu s dvourozměrnými výsledky z [35]. Případně také lze vyzkoušet chování těchto modelů na nestrukturovaných sítích, což ovšem bude vyžadovat velké množství výpočetního času.

Literatura

- [1] J. W. Mullin, *Crystallization*. Elsevier, 2001. ISBN: 0080530117
- [2] J. Palán, *Matematické modelování a numerická simulace růstu krystalů metodou fázového pole*. Bakalářská práce, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT v Praze, 2021.
- [3] T. Jakubec, *Numerical simulation of multiphase flow on 3D unstructured meshes with an arbitrary topology*. Diplomová práce, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT v Praze, 2020.
- [4] D. Turnbull, *The Undercooling of Liquids*. Scientific American, 212(1), 38-47, 1965.
- [5] A. Lahiri, *Phase-field Modeling of Phase Transformations in Multicomponent Alloys: A Review*. J Indian Inst Sci 102, 39–57, 2022.
- [6] M. E. Gurtin, *On the Two-Phase Stefan Problem with Interfacial Energy and Entropy*. Arch. Rational Mech. Anal., 96(3), 199–241, 1986.
- [7] M. Beneš, *Mathematical Analysis of Phase-Field Equations with Numerically Efficient coupling terms*. Interfaces Free Bound. 3(2), 201-221, 2001.
- [8] M. Beneš, *Mathematical and computational aspects of solidification of pure substances*. Acta Math. Univ. Comenian. (N.S.), 70(1), 123–151, 2000.
- [9] P. Strachota, *Analysis and Application of Numerical Methods for Solving Nonlinear Reaction-Diffusion Equations*. Dizertační práce, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT v Praze, 2012.
- [10] J. W. Cahn, J. E. Hilliard, *Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy*. J. Chem. Phys. 1, 28(2), 258–267, 1958.
- [11] P. C. Hohenberg, B. I. Halperin, *Theory of dynamic critical phenomena*. Rev. Mod. Phys., 49(3), 435–479, 1977.
- [12] P. Strachota, A. Wodecki, M. Beneš, *Focusing the Latent Heat Release in 3D Phase Field Simulations of Dendritic Crystal Growth*. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., 29(6), 065009, 2021.
- [13] M. Beneš, *Diffuse-interface treatment of the anisotropic mean-curvature flow*. Appl. Math., 48(6), 437–453, 2003.
- [14] G. Bellettini, M. Paolini, *Anisotropic motion by mean curvature in the context of Finsler geometry*. Hokkaido Math. J., 25, 537–566, 1996.
- [15] P. Dvořák, *Matematické modelování mikrostruktur při fázových přechodech*. Diplomová práce, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT v Praze, 2010.

- [16] A. Wodecki, *Mathematical Modeling and Numerical Simulation of Microstructure Evolution During Phase Transitions*. Diplomová práce, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT v Praze, 2018.
- [17] M. E. Gurtin, *Thermomechanics of evolving phase boundaries in the plane*. Oxford Mathematical Monographs, Oxford University Press, 1993.
- [18] W. R. Fehlner, S. H. Vosko, *A product representation for cubic harmonics and special directions for the determination of the Fermi surface and related properties*. Canadian Journal of Physics, 54(21), 2159-2169, 1976.
- [19] M. PunKay, *Modeling of anisotropic surface energies for quantum dot formation and morphological evolution*. NNIN REU Research Accomplishments, University of Michigan, 116–117, 2005.
- [20] J. Vince, *Vector Analysis for Computer Graphics*. Springer, London, 2021. ISBN: 978-1-4471-7504-9
- [21] C. W. Lan, Y. C. Chang, C. J. Shih, *Adaptive phase field simulation of non-isothermal free dendritic growth of a binary alloy*. Acta Materialia, 51(7), 1857-1869, 2003.
- [22] W. J. Boettinger, J. A. Warren, C. Beckermann, A. Karma, *Phase-field simulation of solidification*. Annual Review of Materials Research, 32(1), 163-194, 2002.
- [23] M. Conti, *Solidification of binary alloys: Thermal effects studied with the phase-field model*. Phys. Rev. E, 55(1), 765-771, 1997.
- [24] A. Karma, A. Sarkissian, *Interface dynamics and banding in rapid solidification*. Physical review. E, 47(1), 513-533, 1993.
- [25] N. Provatas, K. Elder, *Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering*. 2010. ISBN: 978-3-527-40747-7
- [26] S. L. Wang , R. F. Sekerka, A. A. Wheeler, B. T. Murray, S. R. Coriell, R. J. Braun, G. B. McFadden, *Thermodynamically-consistent phase-field models for solidification*. Physica D: Nonlinear Phenomena, 69(1-2), 189-200, 1993.
- [27] A. A. Wheeler, W. J. Boettinger, G. B. McFadden, *Phase-field model of solute trapping during solidification*. Phys. Rev. E, 47(3), 1893-1909, 1993.
- [28] I. Loginova, G. Amberg, J. Agren, *Phase-field simulations of non-isothermal binary alloy solidification*. Acta Materialia, 49(4), 573-581, 2001.
- [29] J. A. Warren, W. J. Boettinger, *Prediction of dendritic growth and microsegregation patterns in a binary alloy using the phase-field method*. Acta Metallurgica et Materialia, 43(2), 689-703, 1995.
- [30] R. Eymard, T. Gallouët, R. Herbin, *Finite volume methods*. Handbook of Numerical Analysis, 713-1018, 2000.
- [31] F. Moukalled, L. Mangani, M. Darwish, *The finite volume methods in computational fluid dynamics*. Springer, 2016. ISBN: 978-3-319-16873-9
- [32] J. C. Butcher, *Numerical methods for ordinary differential equations*. Wiley, Chichester, 2003. ISBN: 978-1-119-12150-3

- [33] J. Christiansen, *Numerical solution of ordinary simultaneous differential equations of the 1st order using a method for automatic step change*. Numer. Math., 14, 317–324, 1970.
- [34] B. Chapman, G. Jost, R. van der Pas, *Using OpenMP: Portable Shared Memory Parallel Programming*. Cambridge, Mass: MIT Press, 2008. ISBN: 978-0-262-53302-7
- [35] R. Xiao, G. An, Ch. Zhu, Z. Wang, S. Yang, *Comparative analysis of isothermal and non-isothermal solidification of binary alloys using phase-field model*. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 24(11), 3639-3644, 2014.