



Posudek na dizertační práci

Variational Methods in Phase Transition Modelling

Doktorand: Ing. Aleš Wodecki, KM-FJFI-ČVUT

Oponent: prof. Ing. Hanuš Seiner, PhD. DSc., Ústav Termomechaniky AVČR / KIPL-FJFI-ČVUT

Předkládaná dizertační práce Variational Methods in Phase Transition Modelling se zabývá matematickým a numerickým modelováním procesů tuhnutí pomocí metody fázového pole, konkrétně se zaměřením na řízení průběhu a morfologie tuhnoucího procesu pomocí optimálního řízení Dirichletových okrajových podmínek. Toto téma je aktuální a atraktivní nejen z hlediska samotné techniky matematického modelování, ale také z hledisek fyzikálních a technologických, protože pokročilé metody řízení vnějších podmínek (zejména teploty, jak je využíváno v práci) by mohly v budoucnu přispět k novým postupům přípravy pevných látek s cílenou mikrostrukturou.

Práce se dělí do šesti hlavních kapitol (nepočítaje úvod, krátký závěr a Appendix). První kapitola (Kap. 2) představuje detailně a srozumitelně použité postupy modelování metodou fázového pole, včetně odvození základního modelu. Druhá kapitola (Kap. 3) diskutuje zavedení nového reakčního členu, který vykazuje (oproti členům dostupným v literatuře) lepší asymptotické chování, a tím pádem i fyzikálnější popis. Funkčnost modelu s takto zavedeným členem je ukázána na několika numerických simulacích, kde je provedeno srovnání různých modelů a různých parametrů – objektem modelování je rychlé tuhnutí a dendritický růst krystalů niklu z taveniny.

Následující tři kapitoly (Kap. 4 až Kap. 6) se zabývají teorií optimálního řízení modelů fázového pole pomocí Dirichletových okrajových podmínek. Tyto kapitoly sahají do značné míry za hranice mojí odbornosti jako materiálového vědce-fyzika, nevyjadřuji se tedy k jejich odborné úrovni, pro laického čtenáře jsou však zpracovány přehledně a logicky a jejich hlavní výstupy jsou srozumitelné. Poslední kapitola (Kap. 7) pak obsahuje ukázky aplikace řízení okrajových podmínek pro jednodimenzionální a dvojdimenzionální simulace, typicky se snahou dosáhnout konkrétní morfologie rozložení parametru pořádku v cílovém čase. Tyto výsledky, zejména dvojdimenzionální simulace v podkapitole 7.2, prokazují vysokou funkčnost modelu.

Práce je na velmi dobré úrovni jazykově (je psána výbornou angličtinou), graficky, i co se týče zacházení s literaturou. Členění do kapitol je logické a přehledné, na matematickou práci je zde i dostatečné množství „vysvětlujících“ pasáží, snažících se dostat výsledky do kontextu s fyzikálními principy. Doktorand svoji vysokou erudici a hodnotnost výsledků prokázal také podílem na publikacích v kvalitních časopisech, z článků přímo se týkajících obsahu práce je již jeden vyšlý a dva v recenzním řízení, dále pak se doktorand podílel také na publikovaných výsledcích v oblasti modelování tuhnutí polykrystalů, opět včetně impaktovaného časopisu. Na této obecné úrovni mám k práci pouze jednu výhradu, a sice že zvolený název práce je poněkud široký a příliš dobře nepostihuje obsah práce – jedná se spíše o využití variačního počtu pro vývoj modelů fázového pole, než o přínos variačních metod samotným modelům fázových transformací obecně. S ohledem na rozsáhlou literaturu věnující se variačním úlohám ve fázových transformacích (bezdifuzní



transformace, spinodální rozklady, formování mikrostruktur, atd.) je tedy název poněkud zavádějící. Za přínos práce samotnému modelu fázového pole lze nepochybně považovat návrh nového reakčního členu, ten však zase nemá mnoho společného s variačními metodami.

Přes tuto drobnou výtku, která navíc zřejmě nevyplývá z rozhodnutí doktoranda, hodnotím práci jako **velmi zdařilou** a jednoznačně ji **doporučuji k obhajobě**.

K práci mám tři následující dotazy/připomínky, ke kterým bych rád, aby se doktorand vyjádřil v rámci obhajoby:

1. Vztahy (2.43) a (2.44) pro 4-četné a 6-četné symetrie v kubické mřížce na straně 14 jsou citovány jako z poměrně obskurního zdroje [59], přitom jsou to vztahy v popisu kubických krystalů používané již od 70 let [W.R. Fehner and S.H. Vosko, Can J Phys, 54 (1976), p. 2159]. Jedná se o první dva netriviální členy báze 3d polynomů s kubickou symetrií. Pro anizotropní krystalizaci v modelech fázového pole je zmiňuje např. klasická práce [M. Asta et al. Acta Materialia 57 (2009) 941-971]. V kapitole 7 však jsou simulace prováděny za předpokladu izotropní povrchové energie. Je možné anizotropii implementovat do simulací s řízením okrajové podmínky? A obráceně – jaký vliv na simulaci na obrázku 7.17 (za předpokladu izotropní povrchové energie) má neoptimální tvar původního krystalu?
2. Z klasického řešení Stefanova problému vyplývá, že na rozhraní mezi pevnou látkou a taveninou by měl být skok v tepelném toku (= skok v teplotním gradientu) odpovídající produkci latentního tepla. Z jednodimenzionálních simulací na obrázku 7.10 se ale toto nezdá být příliš splněno modelem fázového pole. Je to způsobeno příliš rychlými změnami okrajové podmínky oproti rychlosti pohybu rozhraní, nebo čím?
3. Obecnější otázka (zajímá mne doktorandův názor): Lze řízením okrajové podmínky tak, jak je použito v práci, dosáhnout stacionárního stavu rozložení parametru pořádku v $t \rightarrow \infty$? Intuitivně bych řekl, že nikoliv. Cílový stav je vždy jen okamžitá konfigurace dynamicky se vyvíjejícího rozložení teplotního a fázového pole. Lze však tento závěr zobecnit a v nějaké zjednodušené formě dokázat? Bylo by možné vytvořit časově periodické řízení, které by systém alespoň v blízkosti stacionárního stavu udržovalo, nebo ani to ne?

V Praze, 21.2. 2023

.....
prof. Ing. Hanuš Seiner, Ph.D., DSc.
Ústav termomechaniky AV ČR