

České vysoké učení technické v Praze  
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Katedra matematiky  
Obor: Matematické inženýrství



Matematické modelování a  
numerická simulace růstu krystalů  
metodou fázového pole

Phase field modeling and numerical  
simulation of crystal growth

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Vypracoval: Jan Palán  
Vedoucí práce: Ing. Pavel Strachota, Ph.D.  
Rok: 2021

## ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Student:	Jan Palán
Studijní program:	Aplikace přírodních věd
Studijní obor:	Matematické inženýrství
Studijní zaměření:	Matematické modelování
Název práce (česky):	Matematické modelování a numerická simulace růstu krystalů metodou fázového pole
Název práce (anglicky):	Phase field modeling and numerical simulation of crystal growth

### Pokyny pro vypracování:

- 1) Prostudujte literaturu s potřebným teoretickým pozadím pro matematické modelování fázových přechodů: mikroskopický a mezoskopický popis, Stefanova úloha, metody 'level set' a 'phase field', model anizotropního povrchového napětí. Shrnutí získaných znalostí přehledně sepište.
- 2) Formulujte úlohu fázového pole jako model tuhnutí čisté látky v uniformně podchlazeném prostředí ve dvourozměrné oblasti. Ujasněte si, jak souvisí parametry modelu s příslušnými fyzikálními veličinami.
- 3) Formulujte schéma konečných objemů nebo konečných diferencí pro prostorovou diskretizaci úlohy.
- 4) Implementujte numerický algoritmus založený na numerickém schématu z bodu 3. Zvolte vhodně metodu časové diskretizace.
- 5) Proveďte výpočetní studii demonstrující chování modelu pro různá nastavení parametrů.

Doporučená literatura:

- 1) D. Raabe, Computational Materials Science. WILEY-VCH Verlag, 1998.
- 2) M. E. Gurtin, Thermomechanics of Evolving Phase Boundaries in the Plane. Oxford University Press, 1993.
- 3) P. Strachota, Analysis and Application of Numerical Methods for Solving Nonlinear Reaction-Diffusion Equations. PhD thesis, Czech Technical University in Prague, 2012.
- 4) M. Beneš, Mathematical Analysis of Phase-Field Equations with Numerically Efficient coupling terms. Interfaces Free Bound 3, 2001, 201-221.
- 5) G. Bellettini, M. Paolini, Anisotropic Motion by Mean Curvature in the Context of Finsler Geometry. Hokkaido Math. J. 25, 1996, 537-566.

Jméno a pracoviště vedoucího bakalářské práce:

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

Jméno a pracoviště konzultanta:

Datum zadání bakalářské práce: 31.10.2020

Datum odevzdání bakalářské práce: 7.7.2021

Doba platnosti zadání je dva roky od data zadání.

V Praze dne 30.10.2020

  
.....  
garant oboru

  
.....  
vedoucí katedry



  
.....  
děkan

## **Prohlášení**

Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci vypracoval samostatně a použil jsem pouze podklady uvedené v příloženém seznamu.

V Praze dne .....

.....

Jan Palán

## **Poděkování**

Děkuji svému školiteli Ing. Pavlu Strachotovi, Ph.D. za cenné podněty, rady, poskytnuté materiály, trpělivost a pozitivní přístup při vedení mé bakalářské práce.

Jan Palán

*Název práce:*

## **Matematické modelování a numerická simulace růstu krystalů metodou fázového pole**

*Autor:* Jan Palán

*Obor:* Matematické inženýrství

*Zaměření:* Matematické modelování

*Druh práce:* Bakalářská práce

*Vedoucí práce:* Ing. Pavel Strachota, Ph.D.

Katedra matematiky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické v Praze

*Abstrakt:* Krystalizace je formou fázového přechodu z kapalného do pevného skupenství, při které se atomy uspořádají do krystalové mřížky. Stefanova úloha zkoumá časový vývoj rozhraní mezi kapalnou a pevnou fází při předpokladu ostrého rozhraní - dochází zde ke skokové nespojitosti termodynamických veličin. Tato práce se zabývá především modelem fázového pole vycházejícího z myšlenky pozvolného přechodu jedné fáze v druhou na tenké vrstvě. Analytické řešení modelu fázového pole neexistuje, proto je použito numerické řešení metodou konečných diferencí. Praktická část je věnována výpočetní studii pomocí programu implementovaného v jazyce C/C++. Cílem numerických simulací je porozumět vlivu jednotlivých parametrů na chování modelu.

*Klíčová slova:* krystalizace, fázové rozhraní, Stefanova úloha, model fázového pole, anizotropie

*Title:*

## **Phase field modeling and numerical simulation of crystal growth**

*Author:* Jan Palán

*Abstract:* Crystallization is a phase transition from liquid to solid state, in which the atoms are organized into a regular crystal structure. Stefan problem deals with the time evolution of the interface between the liquid and solid phases under the assumption of a sharp interface, i.e., with a step discontinuity of thermodynamic quantities. This work deals with the phase field model based on the idea of a gradual transition from one phase to another on a thin layer. There is no analytical solution of the phase field model, therefore the finite difference method is used. The practical part is dedicated to a computational study using a program implemented in C / C ++. Numerical simulations are performed in order to understand the influence of individual parameters on the model behavior.

*Key words:* crystallization, phase interface, Stefan problem, phase field model, anisotropy

# Obsah

<b>Úvod</b>	<b>7</b>
<b>1 Matematický a fyzikální model</b>	<b>8</b>
1.1 Stefanova úloha . . . . .	9
1.2 Model fázového pole . . . . .	13
1.2.1 Varianty reakčního členu . . . . .	20
1.2.2 Anizotropie . . . . .	21
<b>2 Numerické schéma</b>	<b>22</b>
2.1 Diskretizace úlohy . . . . .	22
2.2 Explicitní schéma . . . . .	25
<b>3 Implementace</b>	<b>27</b>
<b>4 Výpočetní studie</b>	<b>31</b>
4.1 Izotropní model . . . . .	34
4.2 Anizotropní model . . . . .	37
4.3 Teplotní šum . . . . .	41
4.4 Více krystalizačních jader . . . . .	47
<b>Závěr</b>	<b>49</b>
<b>Literatura</b>	<b>50</b>



# Úvod

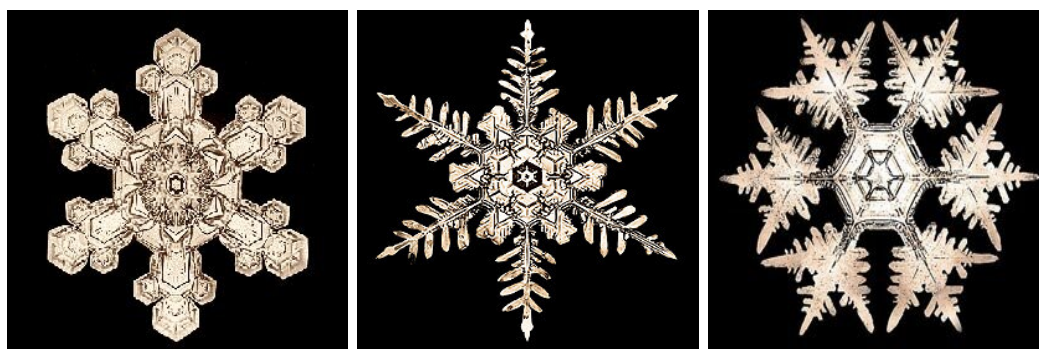
Krystalizace je velmi důležitý proces v několika technologických oborech - výroba polovodičů, optika, výroba kovových dílů, atd., je tedy zajímavé se tímto tématem zabývat, hlavně ve směrech, které lze v průmyslu využít. Jedná se o fázový přechod prvního druhu, při kterém látka přechází z kapalného skupenství do pevného a zároveň utváří pravidelnou strukturu, která se může lišit v závislosti na materiálu i podmínkách. Hlavním objektem zájmu při studiu tuhnutí je fázové rozhraní a jeho vývoj v čase. Ke zkoumání fázového rozhraní podle [1] existují historicky dva různé přístupy. Van der Waalsův přístup prezentuje fázové rozhraní jako pozvolnou přechodovou vrstvu mezi oběma fázemi, zatímco Gibbsův přístup interpretuje fázové rozhraní jako ostrý přechod mezi fázemi, na kterém nejsou termodynamické veličiny spojitě. Z teorie neostré hranice vychází model fázového pole, který je vhodnější pro řešení pomocí numerických metod.

Cílem této práce je porozumět modelu fázového pole a teorii, která k němu vede, a implementovat v jazyce C/C++ numerické schéma řešící dvourozměrný model. S pomocí programu a výpočetní studie prozkoumat chování modelu a ujasnit si význam jednotlivých parametrů, na což poté bude možné navázat v dalších pracích. Práce je členěna do čtyř částí. V úvodní kapitole je představeno fyzikální pozadí vedoucí k formulaci Stefanovy úlohy uvažující ostrou hranici mezi fázemi. Také je odvozen matematický model fázového pole vycházející z předpokladu neostré hranice a uvedena bezrozměrná formulace modelu. Je představeno několik modifikací modelu fázového pole lišících se tvarem reakčního členu v Allen-Cahnově rovnici a pomocí jednoduchého způsobu je zavedena anizotropie do dvourozměrného modelu. Jelikož analytické řešení modelu fázového pole neexistuje, je druhá část věnována popisu numerické metody konečných diferencí, která je využita k nalezení přibližného řešení modelu. Ve třetí kapitole je popsán proces implementace a představen software využitý při následné numerické simulaci. Poslední a nejhodnotnější kapitola této práce je věnována především grafické prezentaci výsledků dosažených při numerické simulaci, kde je prozkoumán vliv jednotlivých parametrů modelu na výsledný tvar krystalu a snahou je nalézt nastavení parametrů, které umožní dendritický růst krystalu.

# Kapitola 1

## Matematický a fyzikální model

Tuhnutí je fázový přechod prvního druhu, při kterém přechází látka z kapalného do pevného skupenství. K tomuto jevu dochází, když teplota překročí teplotu tání/tuhnutí. Jak ukazují experimenty, toto samotné ovšem k iniciaci tuhnutí nestačí. Podle [2] jsme schopni ochladit například vodu až na  $-40^{\circ}\text{C}$  (pod bod tuhnutí), a přesto nadále zůstává v kapalném stavu. Tento stav se nazývá podchlazení [2]. Další podmínkou pro iniciaci tuhnutí je lehké vybočení z rovnováhy. Speciální formou tuhnutí je krystalizace, což je forma fázového přechodu, kdy se částice uspořádávají do pravidelné krystalové mřížky. Krásným a známým příkladem krystalizace, který si asi každý vybaví, jsou sněhové vločky (viz obr. 1.1), ale touto formou tuhnou třeba také kovy, které mají široké uplatnění, a proto se vyplatí tento proces podrobně zkoumat.



Obrázek 1.1: Fotografie vloček volně dostupné na adrese <https://snowflakebentley.com>

Při krystalizaci je potřeba dostatek času k vytvoření krystalu. Látka netuhne okamžitě, ale při procesu zvaném nukleace se vytvářejí krystalizační jádra (místa s nižší energií, např. atomy jiné látky). Pokud jádro překoná kritickou velikost, začíná z tohoto místa vyrůstat postupně krystal nabalováním dalších a dalších částic. Pokud je krystalizačních jader více, vytvářející se zrna se postupem času začnou střetávat a vzniká polykrystal. Toto rozhraní mezi zrny může mít negativní vliv na kvalitu materiálu, proto se například na lopatky turbín, které musí být velmi odolné, používají monokrystaly - krystaly vzniklé pouze z jednoho krystalizačního jádra. Dalším

známým využitím monokrystalů je výroba polovodičů z monokrystalického křemíku.

Níže bude odvozen matematický model fázové přeměny mezi kapalnou a pevnou fází. Představíme dva přístupy jakými se můžeme k řešení tohoto problému postavit. První z nich je Gibbsův přístup, z něhož vychází Stefanova úloha (podkapitola 1.1). Druhým přístupem je Van der Waalsův, který v 50. letech rozpracovali Cahn a Hilliard do modelu fázového pole (podkapitola 1.32), který je hlavním předmětem této práce. Než se budeme podrobněji věnovat oběma úlohám, popíšeme si základní rozdíly mezi těmito dvěma přístupy.

### Gibbsův přístup

- uvažuje ostré rozhraní mezi kapalnou a pevnou fází (skok termodynamických veličin v místě hranice)
- práce pouze s funkcí teploty
- rozhraní je definováno teplotou tání/tuhnutí

### Van der Waalsův přístup

- uvažuje rozhraní jako tenkou vrstvu mezi fázemi, kde postupně přechází jedna fáze v druhou (termodynamické veličiny jsou zde spojité)
- zavádí navíc fázovou funkci  $p$  nabývající hodnoty z intervalu  $\langle 0, 1 \rangle$

## 1.1 Stefanova úloha

Matematický model šíření tepla, rozložení teploty a pohybu fázového rozhraní v homogenním prostředí během fázové přeměny kapalina - pevná látka (tedy tání nebo tuhnutí) nese jméno slovinského fyzika Jožefa Stefana, který jej na konci 19. století formuloval při zkoumání rychlosti tvorby ledu ve vodě. O 60 let dříve podobný problém řešili také Clapeyron<sup>1</sup> a Lamé<sup>2</sup>.

V krátkosti uvedeme postup odvození Stefanova problému s povrchovým napětím popsaným detailně v [3].

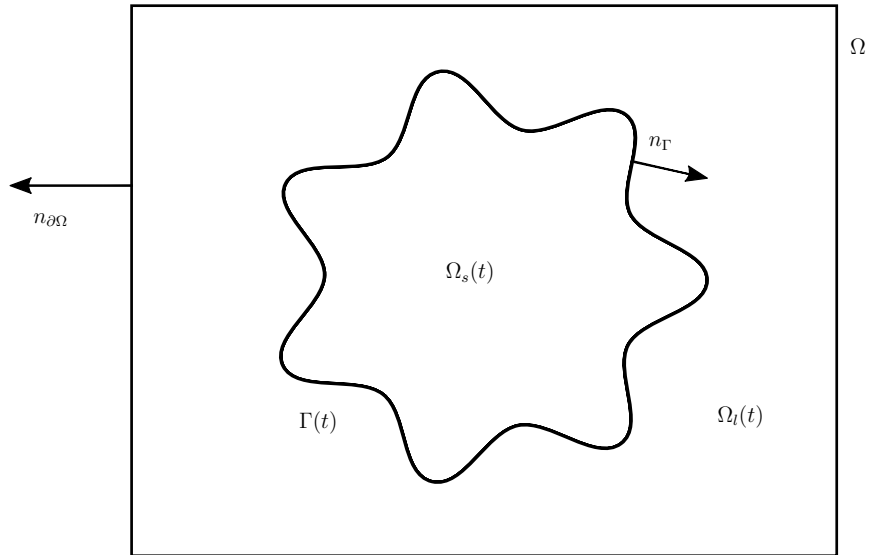
Mějme omezenou oblast  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ , kde probíhá fázová přeměna a časový interval  $\mathcal{J} = \langle 0, T \rangle$ . V každém čase  $t \in \mathcal{J}$  si označíme (viz obr. 1.2)

$$\begin{array}{ll} \Omega_l(t) & \text{kapalnou podoblast } \Omega, \\ \Omega_s(t) & \text{pevnou podoblast } \Omega, \\ \Gamma(t) = \Omega_l(t) \cap \Omega_s(t) & \text{fázové rozhraní.} \end{array}$$

---

<sup>1</sup>Benoît Paul Émile Clapeyron (1799-1864), francouzský inženýr a fyzik

<sup>2</sup>Gabriel Lamé (1795-1870), francouzský matematik



Obrázek 1.2: Zavedené značení pro popis oblasti v Stefanově úloze

Dále přehledně sepíšeme značení funkcí a konstant, které bude použito při popisu úlohy:

$u$	teplota,
$u^*$	teplota fázového přechodu,
$\lambda_s, \lambda_l$	tepelná vodivost v pevné a kapalně podoblasti,
$\rho$	hustota materiálu,
$c$	tepelná kapacita materiálu,
$L$	latentní teplo fázového přechodu,
$\sigma$	povrchové napětí,
$\Delta s$	rozdíl entropie mezi fázemi,
$\alpha$	koefficient připojovací kinetiky na hranici,
$\mathbf{n}_\Gamma$	normálový vektor k fázovému rozhraní $\Gamma(t)$ směřující ven z $\Omega_s$ ,
$\mathbf{n}_{\partial\Omega}$	vnější normálový vektor k $\partial\Omega$ ,
$v_\Gamma$	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 $\Gamma(t)$ .

Teplotní pole definované na  $\mathcal{J} \times \Omega$  označíme  $u$ . Definujme pro jednotlivé fáze funkcionály

$H_j = H_j(u)$	entalpie na jednotku objemu,
$S_j = S_j(u)$	entropie na jednotku objemu,
$F_j = F_j(u) = H_j(u) - uS_j(u)$	volná energie na jednotku objemu,

kde index  $j \in \{l, s\}$  značí funkci definovanou na kapalné nebo pevné podoblasti. Dále definujeme funkce na fázovém rozhraní  $\Gamma(t) = \Omega_l(t) \cap \Omega_s(t)$

$$\begin{aligned} e &= e(u) && \text{plošná hustota energie rozhraní,} \\ s &= s(u) && \text{plošná hustota entropie rozhraní,} \\ f &= f(u) = e(u) - us(u) && \text{plošná hustota volné energie rozhraní.} \end{aligned}$$

Nyní můžeme označit  $u^*$  teplotu fázové přeměny, jenž je určena z rovnosti volné energie pevné a kapalné fáze

$$F_l(u^*) = F_s(u^*).$$

Pomocí teploty  $u^*$  můžeme definovat latentní teplo na jednotku objemu jako změnu entalpie při fázovém přechodu beze změny teploty

$$L = H_l(u^*) - H_s(u^*).$$

Systém rovnic fázového přechodu s podmínkou volné hranice má podle [3] tvar:

$$\frac{\partial H_s(u)}{\partial t} = -\nabla \mathbf{q}_s \quad \text{v } \Omega_s(t), \quad (1.1a)$$

$$\frac{\partial H_l(u)}{\partial t} = -\nabla \mathbf{q}_l \quad \text{v } \Omega_l(t), \quad (1.1b)$$

$$u = \frac{H_l - H_s - \kappa e}{S_l - S_s - \kappa s} \quad \text{na } \Gamma(t), \quad (1.1c)$$

$$(\mathbf{q}_l - \mathbf{q}_s) \mathbf{n}_\Gamma = v_\Gamma (H_l - H_s) - v_\Gamma \kappa e - \frac{\partial e}{\partial t} \quad \text{na } \Gamma(t), \quad (1.1d)$$

$$v_\Gamma \mathbf{n}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega} = 0 \quad \text{na } \partial\Omega \cap \Gamma(t), \quad (1.1e)$$

kde použijeme Fourierův zákon pro kapalnou i pevnou podoblast  $\mathbf{q}_s = -\lambda_s(u) \nabla u$  a  $\mathbf{q}_l = -\lambda_l(u) \nabla u$ .

Abychom mohli zapsat Stefanovu úlohu s povrchovým napětím definujeme

$$\text{entalpii} \quad H_l(u) = \int_0^u \rho_l(u) c_l(u) du + L,$$

$$H_s(u) = \int_0^u \rho_s(u) c_s(u) du,$$

$$\text{rozdíl entropií na jednotku objemu} \quad \Delta s = S_l - S_s.$$

Pro zjednodušení systému rovnic musíme podle [4] vyslovit také následující podstatné předpoklady:

- škálování  $\frac{su^*}{L} \ll 1$
- prázdný průnik hranice a fázového rozhraní  $\partial\Omega \cap \Gamma(t) = \emptyset, \forall t \in \mathcal{J}$

- $\lambda_l = \lambda_s$
- přítomnost kinetického podchlazení, které upravuje teplotní vztah pro  $\Gamma(t)$

S těmito předpoklady můžeme zjednodušit systém rovnic (1.1) a zformulovat **Stefanovu úlohu s povrchovým napětím**:

$$\begin{aligned} \rho c \frac{\partial u}{\partial t} &= \nabla(\lambda \nabla u) && \text{v } \Omega_s(t) \times \mathcal{J} \cup \Omega_l(t) \times \mathcal{J}, && (1.2a) \\ \lambda \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}_\Gamma} \Big|_s - \lambda \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}_\Gamma} \Big|_l &= Lv_\Gamma && \text{na } \Gamma(t), && (1.2b) \\ u - u^* &= -\frac{\sigma}{\Delta s} \kappa_\Gamma - \alpha \frac{\sigma}{\Delta s} v_\Gamma && \text{na } \Gamma(t), && (1.2c) \\ b_c(u)|_{\partial\Omega} &= 0 && \text{v } \partial\Omega \times \mathcal{J}, && (1.2d) \\ \Omega_s(0) &= \Omega_{s,\text{ini}} && && (1.2e) \\ u|_{t=0} &= u_{\text{ini}} && \text{v } \Omega. && (1.2f) \end{aligned}$$

Rovnice

(1.2a) je rovnice vedení tepla, vznikne z obecných rovnic (1.1a), (1.1b) pouze dosazením za členy  $\mathbf{q}_s, \mathbf{q}_l$  a použitím definice entropie,

(1.2b) je Stefanova podmínka, která vyjádří nespojistost tepelného toku přes fázové rozhraní,

(1.2c) je Gibbsova-Thomsonova podmínka platná na hranici  $\Gamma(t)$  dávající do souvislosti normálovou rychlost fázového rozhraní a jeho křivost,

(1.2d) je okrajová podmínka zformulovaná pomocí operátoru  $b_c(u)$ , který může mít tvar

$$\begin{aligned} b_c(u) &= u_{\partial\Omega} && \text{Dirichletova okrajová podmínka,} \\ b_c(u) &= (\lambda \nabla u - \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega} && \text{Neumannova okrajová podmínka,} \end{aligned}$$

(1.2e),(1.2f) jsou počáteční podmínky pro počáteční rozložení pevné fáze a teploty.

Zanedbáním povrchového napětí  $\sigma$  přejde úloha (1.2) v původní **klasickou Stefanovu úlohu**:

$$\begin{aligned} \rho c \frac{\partial u}{\partial t} &= \nabla(\lambda \nabla u) && \text{v } \Omega_s(t) \times \mathcal{J} \cup \Omega_l(t) \times \mathcal{J}, && (1.3a) \\ \lambda \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}_\Gamma} \Big|_s - \lambda \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}_\Gamma} \Big|_l &= Lv_\Gamma && \text{na } \Gamma(t), && (1.3b) \\ u &= u^* && \text{na } \Gamma(t), && (1.3c) \\ u|_{\partial\Omega} &= u_{\partial\Omega} && \text{v } \partial\Omega \times \mathcal{J}, && (1.3d) \\ \Omega_s(0) &= \Omega_{s,\text{ini}} && && (1.3e) \\ u|_{t=0} &= u_{\text{ini}} && \text{v } \Omega, && (1.3f) \end{aligned}$$

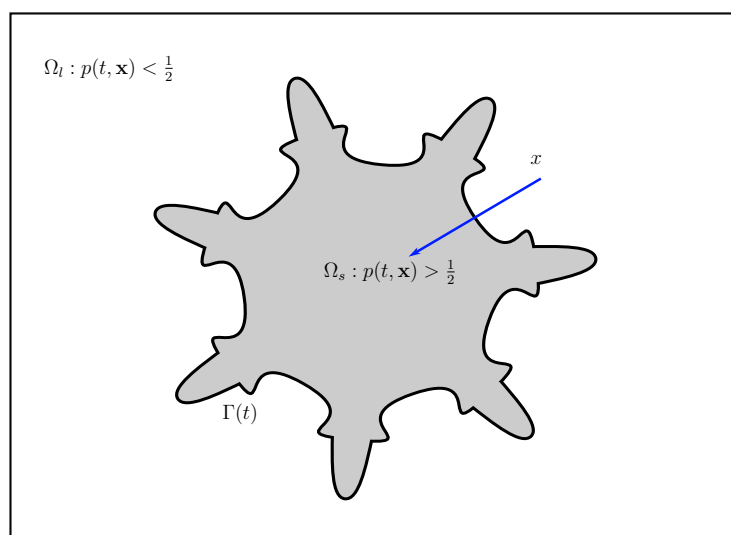
kteřou nelze považovat za dobrý fyzikální model v malém měřítku. Od úlohy s povrchovým napětím se liší úpravou okrajové podmínky (1.3d), kde volíme Dirichletův

tvar. Více podstatné však je, že z Gibbsovy-Thompsonovy podmínky se položením  $\sigma = 0$  stala rovnice (1.3c) vypovídající, že kapalná a pevná fáze je, oproti úloze (1.2), kde vstupují do hry členy s povrchovým napětím, určena pouze teplotou fázové přeměny. Klasická formulace Stefanova problému proto nezahrnuje dnes už poměrně dobře prozkoumaný pojem podchlazení a přehřátí.

## 1.2 Model fázového pole

**Definice 1** (Fázové pole). Necht  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  je omezená oblast. Potom funkci  $p \in C^2(\Omega)$ ,  $p : \mathbb{R} \times \Omega \rightarrow \langle 0, 1 \rangle$ , takovou, že  $\Gamma(t) = \{x \in \Omega | p(t, \mathbf{x}) = \frac{1}{2}\}$  je fázové rozhraní, lokálnímu kapalnému stavu odpovídající hodnoty blízké nule a lokálnímu pevnému stavu hodnoty blízké nule, nazveme **fázové pole**.

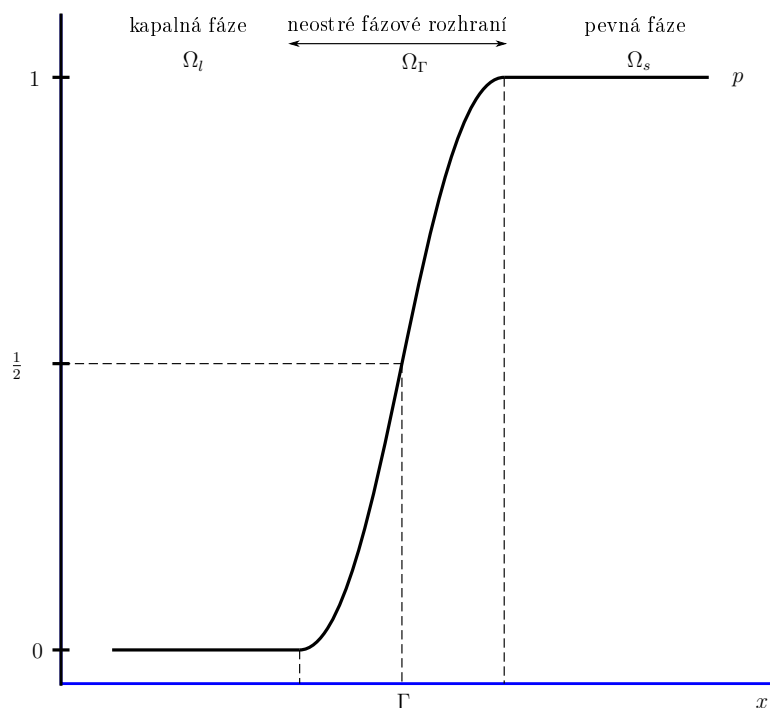
Model fázového pole vychází z práce Cahn<sup>3</sup> a Hilliarda<sup>4</sup>, kteří rozpracovali Van der Waalsův přístup uvažující neostrou hranici mezi fázemi. K popisu fázového přechodu je zaveden (viz. definice 1) další stavový parametr - **fázové pole** (nebo také fázová funkce)  $p$ , který díky spojitosti nabývá všech hodnot z intervalu  $\langle 0, 1 \rangle$ . Hodnoty  $p$  mezi 0 a 1 definují tenkou přechodovou vrstvu mezi fázemi, kterou označíme  $\Omega_\Gamma$ . Vztah parametru  $p$  s fázovým rozhraním je ilustrován na obrázku 1.4. Tloušťka přechodové vrstvy souvisí s parametrem  $\xi > 0$ . V souladu s definicí fázového pole můžeme fázové rozhraní ve dvou rozměrech stejně jako ve Stefanově úloze reprezentovat křivkou  $\Gamma(t)$  a pevnou a kapalnou podoblast označíme  $\Omega_s$  a  $\Omega_l$  (obr. 1.3). Oproti klasické Stefanově úloze tedy fázové rozhraní není určeno teplotním polem, čímž připouštíme jevy podchlazení a přehřátí.



Obrázek 1.3: Značení oblastí v modelu fázového pole - orientovaná úsečka  $x$  odpovídá ose v obrázku 1.4

<sup>3</sup>John W. Cahn (1928-2016), americký vědec, vystudoval fyzikální chemii

<sup>4</sup>John E. Hilliard (1926-1987), britský fyzik, vystudoval metalurgii



Obrázek 1.4: Přechodová vrstva, kde jedna fáze spojitě přechází v druhou

Při následném odvození a popisu bezrozměrného matematického modelu fázového pole budeme čerpat hlavně z [1] a [5].

Nejdříve ovšem shrneme matematický aparát, který budeme při odvození potřebovat.

**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). Nechť  $U, V$  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  $x$ , pokud existuje omezený lineární operátor  $A : U \rightarrow V$  tak, že

$$\lim_{\|h\|_U \rightarrow 0} \frac{\|f(x+h) - f(x) - Ah\|_V}{\|h\|_U} = 0. \quad (1.4)$$

Zobrazení  $A$  nazveme totální (Fréchetovou) derivací zobrazení  $f$  v bodě  $x$ .

**Věta 1** (Gaussova - Ostrogadského věta). Bud'  $U \subset \mathbb{R}^3$  omezená otevřená oblast, její hranice  $\partial U$  je uzavřená plocha po částech třídy  $C^1$ .  $F_i \in C^1(U)$  a  $F_i \in C(\bar{U})$ ,  $i \in \{1, 2, 3\}$ . Potom platí

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

kde  $\mathbf{n}$  je vektor vnější normály k  $\partial U$ .



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

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

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

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

### Odvození modelu

Označme dimenzi zkoumané oblasti  $\Omega$  jako  $d = \dim \Omega$ . Necht'  $m \in \mathbb{N}$  a  $\mathcal{F}$  je termodynamická funkce (např. volná energie), vyjádřená pomocí její objemové hustoty, závislé na sadě parametrů  $\{p_1, \dots, p_m\}$ . Podle [1] má  $\mathcal{F}$  tvar

$$\mathcal{F}[p_1, \dots, p_m] = \int_{\Omega} (\omega(p_1, \dots, p_m) + T(Dp_1, \dots, Dp_m)) dx. \quad (1.5)$$

Ve výrazu (2.13) vystupuje objemová hustota  $\omega$  a funkce gradientu  $T$ . Funkce  $\omega$  se obvykle volí jako víceminimová s lokálními minimy ve stavech daných hodnotami parametrů  $\{p_1, \dots, p_m\}$ . Časový vývoj systému je pak popsán rovnicí modelu A (viz. [6]).

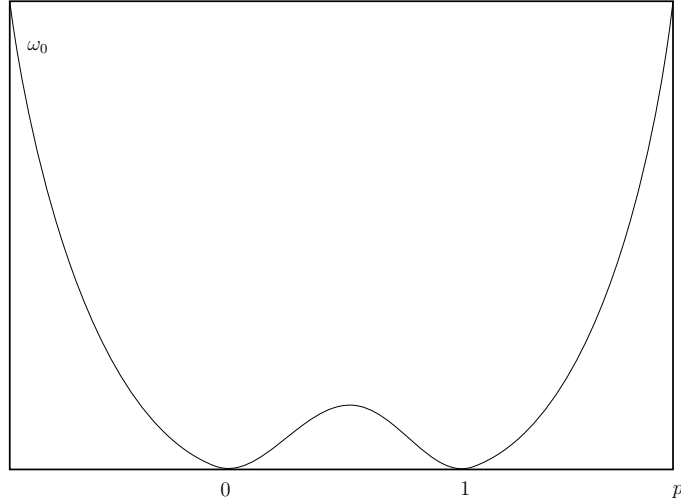
$$\tau_i \left\langle \frac{\partial p_i}{\partial t}, v \right\rangle = -\delta_{p_i} \mathcal{F}[p_1, \dots, p_m] v, \quad \forall v \in C^2(\Omega), i = 1, \dots, m, \quad (1.6)$$

kde  $\delta_{p_i} \mathcal{F}$  je lineární zobrazení - Fréchetova derivace funkcionálu  $\mathcal{F}$  podle jednotlivých proměnných  $p_i$  a  $\tau_i$  je relaxační parametr.

V našem konkrétním případě popisujeme stav systému parametrem  $p$  a teplotním polem  $u = u(t, \mathbf{x})$ . Stav kapalně fáze má odpovídat hodnotám parametru blízkým  $p = 0$  a stav pevně fáze hodnotám blízkým  $p = 1$ . Přechod mezi fázemi probíhá na tenké vrstvě a je třeba zahrnout jevy podchlazení a přehřátí. S těmito požadavky můžeme za  $\omega$  zvolit  $\omega = \omega_0 + W$ , kde  $\omega_0$  je tzv. dvouminimový potenciál s minimy právě v požadovaných stavech odpovídajících kapalně a pevně fázi (obr. 1.5) a  $W = W(u, p)$  je zatím blíže nespecifikovaný člen utvářející kompletní tvar reakčního členu pro jeho různé modifikace (viz. podkapitola 1.2.1). Dvouminimový potenciál je tvaru

$$\omega_0(p) = \frac{a}{4} \left( \left( p - \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{1}{4} \right)^2, \quad (1.7)$$

kde  $a > 0$  je konstanta.



Obrázek 1.5: Dvouminimový potenciál  $\omega_0$

Budeme uvažovat  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ,  $d \in \{2, 3\}$ , což je situace, která nás pro praktické aplikace samozřejmě zajímá nejvíce. Uvidíme, že tvar rovnic nebude záviset na dimenzi a tedy bude stejný i v dvourozměrném případě, kterým se budeme zabývat při numerických simulacích. Při odvození modelu pro čistou jednosložkovou látku vyjdeme z funkcionalů entalpie  $\mathcal{H}$  a volné energie  $\mathcal{F}$  ve tvaru

$$\mathcal{H}[u, p] = \int_0^u \rho(u', p) c(u', p) du' + L(1 - p), \quad (1.8)$$

$$\mathcal{F}[u, p] = \int_{\Omega} (\omega(p, u; \xi) + T(\nabla p; \xi)) dx, \quad (1.9)$$

kde  $\rho$ ,  $\lambda$  a  $c$  jsou materiálové konstanty a  $L$  je latentní teplo na jednotku objemu.  $\mathbf{q}$  označíme tepelný tok. S použitím Fourierova zákona  $\mathbf{q} = -\lambda \nabla u$  přechází rovnice vývoje systému - dosazení funkcionalu (1.9) do rovnice modelu A (1.6) - do následující soustavy

$$\frac{\partial \mathcal{H}[u, p]}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda(u) \nabla u), \quad (1.10)$$

$$\tau \left\langle \frac{\partial p}{\partial t}, v \right\rangle = -\delta_p \mathcal{F}[u, p] v, \quad (1.11)$$

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

Použitím definice Fréchetovy derivace v našem případě chceme, aby platilo

$$\lim_{\|\delta p\| \rightarrow 0} \frac{\mathcal{F}[p + \delta p, u; \xi] - \mathcal{F}[p, u; \xi] - \delta_p \mathcal{F}[p] \delta p}{\|\delta p\|} = 0 \quad (1.12)$$

Proto si rozepíšeme přírůstek  $\mathcal{F}$  v bodě  $p$  a následně použijeme Taylorův rozvoj v bodě  $p$  do prvního řádu:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[p + \delta p, u; \xi] &= \int_{\Omega} \left( \omega(p + \delta p, u; \xi) + T(\nabla(p + \delta p); \xi) \right) dx \\ &= \int_{\Omega} \left( \omega(p, u; \xi) + \frac{\partial \omega(p, u; \xi)}{\partial p} \delta p + T(\nabla p; \xi) + \frac{\partial T(\nabla p; \xi)}{\partial(\nabla p)} \cdot \nabla \delta p + \dots \right) dx, \end{aligned} \quad (1.13)$$

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

Pro třírozměrný případ použitím Gaussovy věty (věta 1) pro  $\mathbf{F} = \frac{\partial T}{\partial(\nabla p)} \delta p$  a oblast  $\Omega$  dostáváme

$$\int_{\Omega} \frac{\partial T}{\partial(\nabla p)} \cdot \nabla \delta p d\mathbf{x} = - \int_{\Omega} \nabla \cdot \frac{\partial T}{\partial(\nabla p)} \delta p d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} \frac{\partial T}{\partial(\nabla p)} \delta p \cdot \mathbf{n} dS, \quad (1.14)$$

kde  $\mathbf{n}$  značí vektor vnější normály k  $\partial\Omega$ . Ve dvourozměrném případě je postup analogický pomocí Greenovy věty (věta 2). Postačující podmínky, aby poslední člen rovnice (1.14), tedy integrál přes hranici sledované oblasti byl roven nule, jsou

$$\delta p|_{\partial\Omega} = 0 \quad (1.15)$$

nebo

$$\frac{\partial T(\nabla p; \xi)}{\partial(\nabla p)} \cdot \mathbf{n} = 0. \quad (1.16)$$

Dosazením vztahu (1.14) do rovnice (1.13), vynulováním integrálu přes  $\partial\Omega$  a následným odečtením  $\mathcal{F}[p, u; \xi]$  dostáváme

$$\mathcal{F}[p + \delta p, u; \xi] - \mathcal{F}[p, u; \xi] = \int_{\Omega} \left( \frac{\partial \omega(p, u; \xi)}{\partial p} - \nabla \cdot \frac{\partial T(\nabla p; \xi)}{\partial(\nabla p)} + \dots \right) \delta p d\mathbf{x}. \quad (1.17)$$

Zde je vhodné zmínit, že provedení Taylorova rozvoje (1.13) pouze do prvního řádu bylo dostatečné, jelikož zbytek rozvoje - označme ho  $R(p, u; \xi)$  - se chová jako  $O(|\delta p|^2)$  a tedy v limitě (1.4) nemá žádný vliv

$$\lim_{\delta p \rightarrow 0} \frac{\int_{\Omega} R(p, u; \xi) d\mathbf{x}}{|\delta p|} = 0 \quad (1.18)$$

Použitím (1.12) z rovnice (1.17) dostáváme Fréchetovu derivaci jako

$$\delta_p \mathcal{F}[p, u; \xi] \delta p = \int_{\Omega} \left( \frac{\partial \omega(p, u; \xi)}{\partial p} - \nabla \cdot \frac{\partial T(\nabla p; \xi)}{\partial(\nabla p)} \right) \delta p d\mathbf{x}. \quad (1.19)$$

Díky omezenosti totální derivace lze zobrazení  $\delta_p \mathcal{F}[u, p]$  z rovnice (1.11) pomocí Rieszovy věty (věta 3) reprezentovat funkcí  $\varphi \in C^2(\Omega)$  ve smyslu, že  $\forall v \in C^2(\Omega)$  platí

$$\delta_p \mathcal{F}[u, p] v = \langle \varphi, v \rangle.$$

Potom lze  $\varphi$  ztotožnit s  $\delta_p \mathcal{F}[u, p]$  a rovnice (1.11) bude splněna, pokud bude bodově v  $\Omega$  platit rovnost

$$\tau \frac{\partial p}{\partial t} = -\varphi. \quad (1.20)$$

Využitím poznámky 1 pak z rovnice (1.19) čteme funkci reprezentující Fréchetovu derivaci

$$\varphi(t, \mathbf{x}) = \left( \frac{\partial \omega(p, u; \xi)}{\partial p} - \nabla \cdot \frac{\partial T(\nabla p; \xi)}{\partial(\nabla p)} \right) \Big|_{t, \mathbf{x}}. \quad (1.21)$$

Vyjádřeme si ještě derivaci funkcionálu  $\mathcal{H}$  podle času, kterou potřebujeme do rovnice (1.10)

$$\frac{\partial \mathcal{H}[u, p]}{\partial t} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} = \rho(u)c(u) \frac{\partial u}{\partial t} - L \frac{\partial p}{\partial t} \quad (1.22)$$

a nyní už můžeme (1.21) a (1.22) dosadit do (1.10) a (1.20), čímž získáme rovnice

$$\rho(u)c(u) \frac{\partial u}{\partial t} = \nabla(\lambda(u)\nabla u) + L \frac{\partial p}{\partial t}, \quad (1.23)$$

$$\tau(\xi) \frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot \frac{\partial T(\nabla p; \xi)}{\partial(\nabla p)} - \frac{\partial \omega(p, u; \xi)}{\partial p}, \quad (1.24)$$

s okrajovými podmínkami odpovídajícím podmínkám (1.15), (1.16), které mohou být

- Dirichletova typu

$$u|_{\partial\Omega} = u_{\partial\Omega}, \quad p|_{\partial\Omega} = p_{\partial\Omega}, \quad (1.25)$$

nebo

- Neumannova typu

$$\left. \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} \right|_{\partial\Omega} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial(\nabla p)} \cdot \mathbf{n} = 0. \quad (1.26)$$

Rovnice vedení tepla (1.23) společně s reakčně difuzní rovnicí (Allenovou-Cahnovou) (1.24), jednou z okrajových podmínek (1.25), (1.26) a počáteční podmínkou

$$u|_{t=0} = u_0, \quad p|_{t=0} = p_{\text{ini}}, \quad (1.27)$$

tvorí **systém rovnic fázového pole**.

Přeznačíme reakční člen

$$f(u, p; \xi) := \frac{\partial \omega(p, u; \xi)}{\partial p}. \quad (1.28)$$

Dle [1] pro izotropní model volíme

$$T(\nabla p; \xi) = \frac{\xi^2}{2} |\nabla p|^2, \quad (1.29)$$

a tedy po zderivování máme

$$\frac{\partial T(\nabla p; \xi)}{\partial(\nabla p)} = \xi^2 \nabla p. \quad (1.30)$$

Dále od modelu požadujeme, aby rovnice fázového pole (1.24) při limitním přechodu  $\xi \rightarrow 0$  přecházela v Gibbsovu-Thomsonovu podmínku

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

kde značíme  $\Delta u = u - u^*$ . To odpovídá tomu, že při ztenčování přechodové vrstvy přejde model fázového pole ve Stefanovu úlohu s povrchovým napětím uvažující ostré fázové rozhraní. S odůvodněním v překrývací asymptotické analýze [4] volíme relaxační parametr

$$\tau(\xi) = \alpha\xi^2. \quad (1.31)$$

Použitím (1.28), (1.30) a (1.31) můžeme na intervalu  $\mathcal{J}$  a prostorové oblasti  $\Omega$  model fázového pole zapsat:

$$\rho c \frac{\partial u}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = \nabla(\lambda \nabla u(t, \mathbf{x})) + L \frac{\partial p}{\partial t}(t, \mathbf{x}), \quad \text{v } \Omega \times \mathcal{J}, \quad (1.32a)$$

$$\xi^2 \alpha \frac{\partial p}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = \xi^2 \Delta p(t, \mathbf{x}) + f(u, p; \xi), \quad \text{v } \Omega \times \mathcal{J}, \quad (1.32b)$$

$$u|_{t=0} = u_0, \quad p|_{t=0} = p_{\text{ini}}, \quad \text{v } \Omega, \quad (1.32c)$$

$$u|_{\partial\Omega} = u_{\partial\Omega} \text{ nebo } \nabla u \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{v } \partial\Omega \times \mathcal{J}, \quad (1.32d)$$

$$p|_{\partial\Omega} = p_{\partial\Omega} \text{ nebo } \nabla p \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{v } \partial\Omega \times \mathcal{J}. \quad (1.32e)$$

Tabulka 1.1: 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
$\tilde{u}$	$1 + (u - u^*) / (u^* - u_0)$	1	teplota
$\tilde{L}$	$L / (\rho c (u^* - u_0))$	1	latentní teplo
$\tilde{\alpha}$	$(\lambda / \rho c) \alpha$	1	koefficient přípojovací kinetiky
$\tilde{\beta}$	$\beta L_0 (u^* - u_0)$	1	
$\tilde{\mathbf{x}}$	$\mathbf{x} / L_0$	1	prostorová souřadnice
$\tilde{t}$	$t / t_0$	1	čas

Dle [7] předefinováním veličin podle tabulky 1.1, kde nové veličiny označíme vlnkou, přejdeme k **bezrozměrné formulaci modelu fázového pole** (1.33). Všimněme si, že bez ohledu na hodnotu  $u_0$  je v bezrozměrné formulaci  $\tilde{u}_0 = 0$  a  $\tilde{u}^* = 1$ . Značení s vlnkou budeme pro přehlednost dále vynechávat, pracovat budeme pouze s bezrozměrnou formulací a není tedy třeba obě varianty rozlišovat.

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = \Delta u(t, \mathbf{x}) + L \frac{\partial p}{\partial t}(t, \mathbf{x}), \quad \text{v } \Omega \times \mathcal{J}, \quad (1.33a)$$

$$\xi^2 \alpha \frac{\partial p}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = \xi^2 \Delta p(t, \mathbf{x}) + f(u, p; \xi), \quad \text{v } \Omega \times \mathcal{J}, \quad (1.33b)$$

$$u|_{t=0} = u_0, \quad p|_{t=0} = p_{\text{ini}}, \quad \text{v } \Omega, \quad (1.33c)$$

$$u|_{\partial\Omega} = u_{\partial\Omega} \text{ nebo } \nabla u \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{v } \partial\Omega \times \mathcal{J}, \quad (1.33d)$$

$$p|_{\partial\Omega} = p_{\partial\Omega} \text{ nebo } \nabla p \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{v } \partial\Omega \times \mathcal{J}. \quad (1.33e)$$

### 1.2.1 Varianty reakčního členu

Chování modelu fázového pole určuje do značné míry reakční člen  $f(u, p; \xi)$ , který je derivací  $\omega$  podle  $p$  a jak již bylo zmíněno, volíme  $\omega = \omega_0 + W$  s dvouminimovým potenciálem (1.7). Derivací  $\omega_0$  dostáváme základní tvar reakčního členu, který označíme jako

$$f_0(p) = \frac{\partial \omega_0}{\partial p} = ap(1-p) \left( p - \frac{1}{2} \right). \quad (1.34)$$

V reakčním členu se otevírá prostor pro různé varianty modelu. Pracujeme a modifikujeme potenciál  $\omega$  a derivací pak vznikají různé varianty reakčního členu  $f$ . Nicméně pro konečný tvar modelu a následnou implementaci nás zajímá až tvar reakčního členu, a tedy můžeme modifikace provádět přímo v něm. Většina variant reakčního členu obsahuje zmíněnou derivaci dvouminimového potenciálu  $f_0$ , k níž je něco přičteno. Při tom je třeba opatrnosti, aby nevhodný tvar reakčního členu nezpůsobil ztrátu fyzikálního významu modelu. Konkrétně potenciál  $\omega$  musí mít dvě lokální minima odpovídající význačným stavům. Pro reakční člen  $f$ , který je derivací  $\omega$  podle  $p$ , to pak znamená, že musí mít tři kořeny. Ukážeme si zde tři formy reakčního členu uvedené v [1].

#### Model 1

$$f(p, u; \xi) = f_0(p) - b\beta\xi(u - u^*) = ap(1-p) \left( p - \frac{1}{2} \right) - b\beta\xi(u - u^*), \quad (1.35)$$

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

U tohoto reakčního členu musí být pro zachování fyzikálního významu - tedy zachování tří kořenů polynomu - splněna podmínka

$$b\beta\xi(u - u^*) \in \left( -\frac{\sqrt{3}}{36}a, +\frac{\sqrt{3}}{36}a \right). \quad (1.36)$$

#### Model 2

Model s tímto tvarem reakčního členu je prezentován v [8].

$$f(p, u; \xi) = ap(1-p) \left( p - \frac{1}{2} - M(u - u^*; \xi) \right), \quad (1.37)$$

kde

$$M(u; \xi) = b\xi \arctan(\gamma_0(u - u^*)), \quad \gamma_0 > 0. \quad (1.38)$$

#### Model 3

$$f(p, u, \nabla p; \xi) = f_0(p) + F(u, p, \nabla p) = ap(1-p) \left( p - \frac{1}{2} \right) - b\xi^2\beta|\nabla p|(u - u^*). \quad (1.39)$$

V (1.39) si povšimneme, že z důvodu lepších výpočetních vlastností je do reakčního členu uměle přidána závislost na  $\nabla p$ . Velikost gradientu fázové funkce vystupující v reakčním členu je mimo fázové rozhraní zanedbatelná, proto je příspěvek reakčního členu mimo fázové rozhraní velmi malý. Zároveň díky této vlastnosti nebudeme tak striktně omezeni podmínkou zachování fyzikálního významu pro parametry  $b, \beta$  a  $\xi$  jako v modelu 1.

### 1.2.2 Anizotropie

V této části vneseme do modelu 3 anizotropii, tedy preferenci směrů, kam krystal roste rychleji. Omezíme se už pouze na dvourozměrný případ, což nám umožní zavést anizotropii poměrně jednoduchým způsobem. Ve třech dimenzích tento způsob nelze použít a je třeba zavést anizotropii složitěji. Jednou z možností je vnést anizotropii pomocí Finslerovy geometrie [9], čemuž se nebudeme v této práci věnovat, protože cílem je implementovat model fázového pole ve 2D.

Uvažujme [4] anizotropní Gibbsovu-Thomsonovu podmínku

$$\alpha v_\Gamma = -g(\theta)\kappa - \beta(u - u^*), \quad (1.40)$$

kde  $g$  je kladná, omezená funkce proměnné  $\theta$ , což je úhel mezi horizontální osou  $x$  a gradientem fázové funkce  $p$  (tj. normálou k fázovému rozhraní  $\Gamma$ ). Funkce  $g$  je obvykle volena ve tvaru

$$g(\theta) = 1 - S \cos(m(\theta - \theta_0)), \quad (1.41)$$

kde  $m \in \mathbb{N}$  je četnost anizotropie, tedy počet preferovaných směrů růstu krystalu,  $S \in (0, 1)$  je síla anizotropie a  $\theta_0$  je směr hlavní krystalografické orientace. Rovnice fázového pole s takto zavednou anizotropií přejde do tvaru

$$\xi^2 \alpha \frac{\partial p}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = g(\theta)[\xi^2 \Delta p(t, \mathbf{x}) + f_0(p)] - b\xi^2 \beta |\nabla p|(u - u^*). \quad (1.42)$$

# Kapitola 2

## Numerické schéma

Naše úloha nemá analytické řešení, musíme tedy použít numerické metody k nalezení přibližného řešení. V našem případě k tomu použijeme metodu sítí (lze se setkat také s názvem metoda konečných diferencí), jejíž princip spočívá v diskretizaci prostorové oblasti, časového intervalu, počátečních podmínek a nahrazení derivací tzv. diferencemi. Tím od soustavy parciálních diferenciálních rovnic druhého řádu přejdeme k soustavě algebraických rovnic, kterou již snadno vyřešíme.

### 2.1 Diskretizace úlohy

Připomeňme si konkrétní formulaci úlohy převzaté z [10] pro rovnici vedení tepla a rovnici fázového pole, která bude v práci řešena pomocí numerické metody. Zvolíme si Dirichletovy okrajové podmínky a podobu reakčního členu (1.39) z **modelu 3**. Zároveň využijeme funkci  $g(\theta)$  (1.41), která vnese do našeho modelu anizotropii. Tedy máme úlohu na oblasti  $(0, T) \times \Omega$ , kde  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = \Delta u(t, \mathbf{x}) + L \frac{\partial p}{\partial t}(t, \mathbf{x}), \quad (2.1)$$

$$\xi^2 \alpha \frac{\partial p}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = g(\theta) [\xi^2 \Delta p(t, \mathbf{x}) + f_0(p)] + F(u, p, \nabla p) \quad (2.2)$$

s okrajovými podmínkami Dirichletova typu na  $(0, T) \times \partial\Omega$

$$u(t, \cdot)|_{\partial\Omega} = u_{\partial\Omega}(t) = 0, \quad p(t, \cdot)|_{\partial\Omega} = p_{\partial\Omega}(t) = 0 \quad (2.3)$$

a s počátečními podmínkami na  $\Omega$

$$u(0, \mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x}) = 0, \quad p(0, \mathbf{x}) = p_{\text{ini}}(\mathbf{x}), \quad (2.4)$$

přičemž používáme značení  $g(\theta) = 1 - S \cos(m(\theta - \theta_0))$ ,  $f_0(p) = ap(1-p)(p - \frac{1}{2})$ ,  $F(u, p, \nabla p) = -b\xi^2\beta|\nabla p|(u - u^*)$ .



### Diskretizace oblasti $(0, T) \times \Omega$

Nyní přistoupíme k diskretizaci prostorové oblasti a časového intervalu. Jako prostorovou oblast si pro jednoduchost zvolíme oblast ve tvaru obdélníku (snadno můžeme každou oblast jiného tvaru uzavřít do obdélníku dostatečné velikosti). Časový interval  $(0, T)$  ekvidistantně rozdělíme na  $N + 1 \in \mathbb{N}$  časových vrstev:  $t^0, t^1, \dots, t^N$ , kde  $t^0 = 0$  a  $t^N = T$ . Označíme časový krok mezi sousedními vrstvami jako

$$\tau = \frac{T}{N}.$$

Pak je zřejmé, že

$$t^k = k\tau$$

pro  $k \in \{0, 1, \dots, N\}$ .

Podobně si budeme počínat v případě prostorové oblasti  $\Omega = (a_1, b_1) \times (a_2, b_2)$ , kterou rozdělíme na stejné obdélníčky pomocí ekvidistantního rozdělení intervalů v obou souřadnicích. Označme  $x_0, x_1, x_2, \dots, x_{N_1}$  body, které ekvidistantně dělí interval  $(a_1, b_1)$  a  $y_0, y_1, y_2, \dots, y_{N_2}$  body, které ekvidistantně dělí interval  $(a_2, b_2)$ . Proložíme-li těmito body přímkami kolmé k ose  $x$  (resp.  $y$ ), dostaneme pravoúhlou síť bodů, ve kterých budeme vyčíslovat numericky napočítávané funkce  $u, p$  v jednotlivých časových krocích. Je zřejmé, že jeden krok v síti ve směru osy  $x$  bude mít velikost

$$h_1 = \frac{b_1 - a_1}{N_1}$$

a krok ve směru osy  $y$  analogicky dostaneme jako

$$h_2 = \frac{b_2 - a_2}{N_2}.$$

Nakonec si přehledně označíme (viz. obr. 2.1) všechny body sítě v oblasti  $\Omega = (a_1, b_1) \times (a_2, b_2)$ :

$$\mathbf{x}_{i,j} = (a_1, a_2) + i(h_1, 0) + j(0, h_2),$$

kde  $i \in \{0, 1, \dots, N_1\}$  a  $j \in \{0, 1, \dots, N_2\}$ .

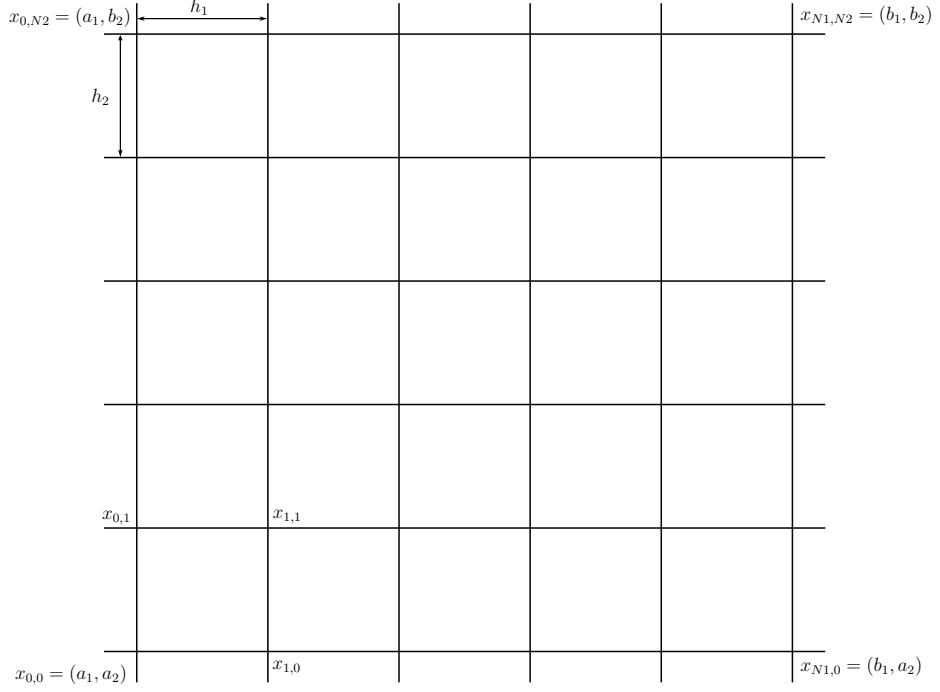
### Diskretizace diferenciálních rovnic

Diskretizaci provedeme tak, že derivace funkcí  $u$  a  $p$  nahradíme aproximacemi - tzv. diferencemi, které vycházejí z Taylorova rozvoje funkce. Základní používané diference pro náhradu první derivace v metodě sítí jsou:

$$\text{dopředná diference} \quad \frac{\partial f}{\partial x}(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + \mathcal{O}(h), \quad (2.5)$$

$$\text{zpětná diference} \quad \frac{\partial f}{\partial x}(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \mathcal{O}(h), \quad (2.6)$$

$$\text{centrální diference} \quad \frac{\partial f}{\partial x}(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2). \quad (2.7)$$



Obrázek 2.1: Značení použité pro diskretizaci dvourozměrné prostorové oblasti

V našem schématu použijeme pro náhradu časové derivace první z nich - dopřednou diferencí. Pro druhou derivaci (potřebujeme pro nahrazení Laplaceova operátoru  $\Delta u(t, \mathbf{x}) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, \mathbf{x}) + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(t, \mathbf{x})$ ) využijeme druhou centrální diferencí:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2). \quad (2.8)$$

V rovnicích (2.5)-(2.8) využíváme zápisu pomocí Landauovy notace  $\mathcal{O}(h)$ .

**Definice 3.** Pro spojitou reálnou funkci  $g$  definovanou na  $H_{x_0} \subset \mathbb{R}$  a  $r \in \mathbb{R}$ , kde  $H_{x_0}$  je okolí bodu  $x_0 \in \mathbb{R}$ , píšeme  $g(x) = \mathcal{O}(h^r)$ , pokud  $(\exists M > 0)(\forall x \in H_{x_0} \setminus \{x_0\}) (|\frac{g(x)}{h^r}| \leq M)$ .

Dále je třeba přejít k síťovým funkcím, které jsou definované pouze v uzlech naší sítě. Označme tedy pro prostorový krok  $h = (h_1, h_2)$  množinu všech uzlů sítě

$$\bar{\omega}_h = \{\mathbf{x}_{i,j} | i = 0, 1, \dots, N_1, j = 0, 1, \dots, N_2\}$$

a dále množinu všech časových vrstev při kroku  $\tau$

$$\iota^\tau = \{t^k | k = 0, 1, \dots, N\}.$$

S pomocí těchto množin zavedeme prostor síťových funkcí s časovým krokem  $\tau$  a prostorovým krokem  $h$

$$\mathcal{H}_h^\tau = \{w_h^\tau | w_h^\tau : \iota^\tau \times \bar{\omega}_h \rightarrow \mathbb{R}\}.$$

**Poznámka 2.** Pro jednoduchost zápisu budeme pro práci se síťovými funkcemi používat značení

$$w_{i,j}^k := (w_h^\tau)_{i,j}^k := w_h^\tau(t^k, \mathbf{x}_{i,j}).$$

Konkrétně s využitím diferencí budeme v uzlech nahrazovat:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t^k, \mathbf{x}_{i,j}) \approx \frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^k}{\tau},$$

$$\Delta u(t^k, \mathbf{x}_{i,j}) \approx \frac{u_{i+1,j}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i-1,j}^k}{h_1^2} + \frac{u_{i,j+1}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i,j-1}^k}{h_2^2}.$$

### Diskretizace počátečních podmínek

Počáteční podmínky jednoduše diskretizujeme v souladu s naším značením vyčíslením v bodech  $x_{i,j}$  pro  $i \in \{0, 1, \dots, N_1\}$  a  $j \in \{0, 1, \dots, N_2\}$

$$u_{i,j}^0 = u_0(x_{i,j}),$$

$$p_{i,j}^0 = p_{\text{ini}}(x_{i,j}).$$

Homogenní okrajové podmínky Dirichletova typu (2.3) odpovídají tomu, že v modelu držíme na hranici oblasti konstantní teplotu (podchlazení) a konstantní fázi. Toho v numerickém algoritmu docílíme jednoduše tím, že v krajních bodech naší sítě ponecháme konstantní hodnoty z počáteční podmínky pro všechny časové hladiny.

## 2.2 Explicitní schéma

Původní úlohu (2.1) nahradíme úlohou diferenční dosazením diferencí, které jsme si připravili a zápisem počátečních a okrajových podmínek ve tvaru pomocí síťových funkcí. V jednotlivých uzlech pak pro  $k \in \{0, 1, \dots, N-1\}$ ,  $i \in \{1, \dots, N_1-1\}$  a  $j \in \{1, \dots, N_2-1\}$  dostáváme:

$$\frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^k}{\tau} = \left( \frac{u_{i+1,j}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i-1,j}^k}{h_1^2} + \frac{u_{i,j+1}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i,j-1}^k}{h_2^2} \right) + L \frac{p_{i,j}^{k+1} - p_{i,j}^k}{\tau}, \quad (2.9)$$

$$\alpha \frac{p_{i,j}^{k+1} - p_{i,j}^k}{\tau} = g_{i,j}^k \left( \frac{p_{i+1,j}^k - 2p_{i,j}^k + p_{i-1,j}^k}{h_1^2} + \frac{p_{i,j+1}^k - 2p_{i,j}^k + p_{i,j-1}^k}{h_2^2} + \frac{1}{\xi^2} (f_0)_{i,j}^k \right) + F_{i,j}^k. \quad (2.10)$$

Dále rozepíšeme členy

$$(f_0)_{i,j}^k = ap_{i,j}^k \left( p_{i,j}^k - \frac{1}{2} \right) (1 - p_{i,j}^k), \quad (2.11)$$

$$g_{i,j}^k = 1 - A \cos \left( m \left( \arctan \left( \frac{\delta_1 p_{i,j}^k}{\delta_2 p_{i,j}^k} \right) - \theta_0 \right) \right), \quad (2.12)$$

$$F_{i,j}^k = -b\xi^2 \beta \sqrt{(\delta_1 p_{i,j}^k)^2 + (\delta_2 p_{i,j}^k)^2} (u_{i,j}^k - u^*), \quad (2.13)$$

$$\text{kde } \delta_1 p_{i,j}^k = \frac{p_{i+1,j}^k - p_{i-1,j}^k}{2h_1} \text{ a } \delta_2 p_{i,j}^k = \frac{p_{i,j+1}^k - p_{i,j-1}^k}{2h_2}.$$

Z tvaru rovnic (2.10) a (2.9) si všimneme, že se v nich nachází pouze jeden člen příslušné funkce z následující (právě vypočítávané) časové vrstvy  $k + 1$ , tedy jsme schopni ho přímo z rovnice vyjádřit pomocí parametrů úlohy a hodnot v předchozí časové vrstvě  $k$ , které známe.

$$u_{i,j}^{k+1} = u_{i,j}^k + \tau \left( \frac{u_{i+1,j}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i-1,j}^k}{h_1^2} + \frac{u_{i,j+1}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i,j-1}^k}{h_2^2} \right) + L(p_{i,j}^{k+1} - p_{i,j}^k), \quad (2.14)$$

$$p_{i,j}^{k+1} = p_{i,j}^k + \frac{\tau}{\alpha} g_{i,j}^k \left( \frac{p_{i+1,j}^k - 2p_{i,j}^k + p_{i-1,j}^k}{h_1^2} + \frac{p_{i,j+1}^k - 2p_{i,j}^k + p_{i,j-1}^k}{h_2^2} + \frac{1}{\xi^2} (f_0)_{i,j}^k \right) + \frac{\tau}{\alpha} F_{i,j}^k. \quad (2.15)$$

Taková metoda, kdy jsme členy z napočítávané časové vrstvy schopni vyjádřit vzorcem pouze pomocí předchozích časových vrstev, se nazývá explicitní. Nejprve napočítáme rovnicí (2.15), abychom člen  $p_{i,j}^{k+1}$  mohli použít do rovnice (2.14). Pomocí tohoto předpisu jsme schopni využitím počáteční podmínky, která nám dává hodnoty pro  $k = 0$ , napočítat hodnoty  $u_{i,j}^k$  a  $u_{i,j}^k$  pro všechny body sítě a všechny časové vrstvy. Lze ukázat [11], že nutná a postačující podmínka stability numerického schématu je

$$\frac{\tau}{h^2} < C, \quad (2.16)$$

kde  $C$  označuje takzvané Courantovo číslo.

# Kapitola 3

## Implementace

Tato kapitola je vyhrazena problematice implementace a softwaru používaného v praktické části práce. Program je implementován v jazyce C/C++. Jelikož algoritmická část programu je pouze přepsáním numerického schématu do zdrojového kódu, nebudeme se této části více věnovat a představíme spíše jednotlivé části programu, které mohou být zajímavé jako je paralelizace for cyklu či výstupní formát pro výsledná data. Také uvedeme praktické zkušenosti s překládáním programu z příkazové řádky a spouštění úloh na výpočetním klastru HELIOS, který je jako většina superpočítačů vystavěn na platformě Linux.

### Paralelizace - OpenMP

Do programu začleníme jednoduchou paralelizaci for cyklů pomocí OpenMP [12]. K rozdělení práce cyklu mezi více vláken postačí jednoduchá direktiva (obr. 3.1 vložena před for cyklus. Každé vlákno poté vykoná část iterací tohoto cyklu. Paralelizovat práci tímto způsobem lze zřejmě pouze pro cykly procházející přes pole hodnot  $u$  či  $p$  odpovídající hodnotám v uzlech sítě. Cyklus přes časové hladiny nelze rozdělit mezi vlákna, jelikož vždy hodnoty v následující časové hladině počítáme pomocí hodnot v předchozí hladině.

```
#pragma omp parallel for
for (i=0; i<N; i++)
{
  ...
}
```

Obrázek 3.1: Paralelizace for cyklu pomocí OpenMP

### Zadávání parametrů, překlad programu

Způsob předávání parametrů modelu je v mém programu implementován pomocí samostatného hlavičkového souboru (obr. 3.2), kde jsou přehledně na jednom místě a je snadné všechny přenastavit podle potřeb další simulace. Nevýhoda tohoto způsobu nastavování parametrů spočívá v tom, že vždy při přepsání parametrů je nutno znovu

celý program přeložit. Tento fakt v našem případě nepředstavuje problém, díky nenáročnosti programu trvá překlad pouze pár sekund. Překlad programu provádíme z příkazové řádky například pomocí krátkého shell skriptu (obr. 3.3).

```

/*rozměry oblasti*/
const double X = 2.0;
const double Y = 2.0;
const double R = 0.03; //polomer kr. zrna

/*diskretizace*/
const int M = 600;
const int N = 600;
const double T = 0.0000001; //casovy krok

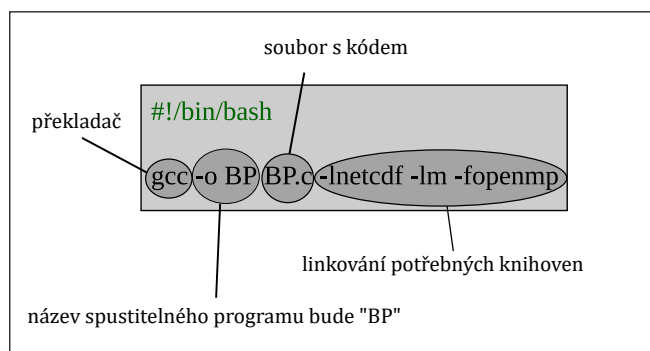
const int pocetkroku = 100000;

/*konstanty - parametry ulohy*/
const double xi = 0.003;
const double LT = 2.0; //latentni teplo
const double alfa = 3.0;
const double beta = 1000.0;
const double tt = 1.0; //teplota tani/tuhnuti
const double koefpol = 2.0;

const int m = 4; //cetnost symetrie
const double sa = 0.8; //mensi nez 1, sila anizotropie
const double theta0 = 0.0; //parametr anizotropie

```

Obrázek 3.2: Hlavičkový soubor s parametry numerického schématu a modelu fázevého pole



Obrázek 3.3: Shell skript pro překlad kódu do spustitelného programu i s popisem jednotlivých příkazů

### Výstup - formát NetCDF

Pro výstup z programu zapisujeme pole hodnot  $u$  a  $p$  v pravidelných intervalech (po určitém počtu časových hladin). K zápisu využíváme soubor knihoven Network Common Data Form (NetCDF) pro práci s vědeckými daty. Ukázka funkce zapisující data do souboru formátu NetCDF je na obrázku 3.4. Následnou vizualizaci provádíme v programu ParaView, který tento formát umí přečíst a dokonce pokud

budeme jednotlivé NetCDF soubory pojmenovávat po řadě "jmenosouboru000.nc", "jmenosouboru001.nc", atd., při otevření souborů načte ParaView všechny tyto soubory jako sekvenci snímků s časovou návazností a lze ihned spustit animaci, na které uvidíme časový vývoj simulace.

```

void NetCDFw( char *ncfile, double *u, double *p)
{
    int ndims = 2;
    int dim1id, dim2id;
    int ncid, uid, pid;

    int retval;
    if((retval = nc_create(ncfile, NC_NETCDF4, &ncid))) { ncError(retval); } //vytvoreni noveho netCDF souboru

    if((retval = nc_def_dim(ncid, "dimenze1", M, &dim1id))) { ncError(retval); } //definice dimenzi, M, N jsou rozmery pole (site)
    if((retval = nc_def_dim(ncid, "dimenze2", N, &dim2id))) { ncError(retval); }

    int dimids[ndims]; //pocet dimenzi datoveho pole
    dimids[0] = dim1id; // ulozeni velikosti jednotlivych dimenzi
    dimids[1] = dim2id;

    if((retval = nc_def_var(ncid, "u", NC_DOUBLE, ndims, dimids, &uid))) { ncError(retval); } //definice promennych u a p
    if((retval = nc_def_var(ncid, "p", NC_DOUBLE, ndims, dimids, &pid))) { ncError(retval); }

    if((retval = nc_enddef(ncid))) { ncError(retval); }

    if((retval = nc_put_var(ncid, uid, &u[0]))) { ncError(retval); } //predani pole hodnot predanych funkci do netCDF
    if((retval = nc_put_var(ncid, pid, &p[0]))) { ncError(retval); }

    if((retval = nc_close(ncid))) { ncError(retval); }

    return;
}

```

Obrázek 3.4: Příklad funkce vytvářející soubor NetCDF a zapisující do něj hodnoty předané jí jako argument

## HELIOS - spouštění úloh

Výpočetní klastr HELIOS na katedře matematiky FJFI ČVUT je vysoce výkonný systém propojených výpočetních uzlů, na kterém jsou plánovány a prováděny výpočetní úlohy. Pro přístup uživatelů slouží interaktivní přihlašovací uzel, kde provádí uživatelé kompilaci kódu, nastavují parametry úlohy a odesílají úlohy do front. Pracovat na přihlašovacím uzlu lze vzdáleně pomocí příkazové řádky (SSH) nebo pomocí vzdálené grafické plochy (X2Go). Na přihlašovacím uzlu lze provádět pouze nenáročné výpočty, ke složitějším výpočtům jsou určeny výpočetní uzly. Ke spuštění úlohy na výpočetním uzlu je třeba vytvořit skript pro odeslání úlohy a následně zařazení úlohy do fronty z příkazové řádky pomocí příkazu **qsub názevskriptu**. Ukázka takového skriptu pro odeslání OpenMP úlohy je na obrázku 3.5. Řádek **PBS -l select=4:mem=16G:ncpus=32:omphreads=32** je příkaz určující zdroje, které pro běh spouštěné úlohy požadujeme. Konkrétně tento skript požaduje pro úlohu 4 výpočetní uzly, každý s 32 procesorovými jádry (CPU), 16GB paměti a 32 vláken na každém uzlu (paralelizace). Samozřejmě zdroje, které můžeme požadovat jsou omezeny dostupnými zdroji každé konkrétní fronty a technickými parametry klastru. Pozornost při spouštění úlohy je třeba věnovat parametru walltime. Úlohy

ve frontě jsou řazeny pro co největší efektivitu práce a tak nasatavením vysoké hodnoty v tomto parametru může být spuštění úlohy oddáleno ve prospěch úloh jiných. Také ovšem nelze nastavit walltime příliš nízký, protože pokud se úloha nestihne dokončit ve vymezeném čase, bude program ukončen, aniž doběhne do konce. Proto je dobré umět odhadnout čas, který bude pro vaši úlohu potřeba. K tomu mohou dopomoci tyto příkazy ve skriptu - **echo 'Job started at: `date`'** , **echo 'Job finished at: `date`'** . Do výstupního souboru s hlášením o úloze vypíše čas, kdy byla úloha spuštěna a kdy byla dokončena. To je užitečné při odhadu času potřebného pro příští simulace s podobnými parametry. Při zjemňování sítě lze využít vztah (2.16) k odhadu potřebného zmenšení časového kroku  $\tau$ . Z toho lze vyvodit o kolik přibližně se změní čas potřebný pro simulaci. Například pokud zvolíme poloviční prostorový krok  $h$ , bude mít síť 4x víc uzlů (dvourozměrný přípa z (2.16) lze vidět, že je třeba 4x zmenšit časový krok - tedy 4x více časových hladin. Čas potřebný pro simulaci s dvakrát menším prostorovým krokem  $h$  na stejné oblasti a stejném časovém intervalu bude tedy **16x** delší než pro původní úlohu. Pro lepší představu času potřebného k simulacím uvádíme, že pro úlohu se sítí o rozměrech  $600 \times 600$  a 100000 časových hladin, která je ve výpočetní studii často využívána, výpočet trvá přibližně 75 minut na 8 jádrech a 65 minut na 16 jádrech.

```
#!/bin/bash

#PBS -N jménoulohy

#PBS -l walltime=24:00:00 //ocekavany cas vypoctu

#PBS -q cpu_a //navez fronty, do ktere chceme ulohu zaradit

#PBS -j oe //vytvori textovy soubor s pripadnymi chybovymi hlaskami

#PBS -l select=4:mem=16G:ncpus=12:ompthreads=32

cd $PBS_O_WORKDIR //vystup bude ulozen do aktualniho adresare

module load openmpi/2.1.5-gcc_4.8.5-psm2 //nacteni modulu potrebných pro beh programu

echo "Job started at: `date`"
./BP //spusteni drive prelozeneho programu
echo "Job finished at: `date`"
```

Obrázek 3.5: Skript pro zařazení výpočetní úlohy do fronty na výpočetním klastru



# Kapitola 4

## Výpočetní studie

Tato část práce je věnována prozkoumání chování modelu ve vztahu k jednotlivým parametrům a grafickému znázornění dosažených výsledků pomocí programů ParaView a úpravou obrázků v Inkscape. Testování si neklade za cíl věnovat se reálnému nastavení fyzikálních materiálů, a proto nelze získané výsledky identifikovat s nějakým materiálem z praxe. Kapitolu rozdělíme na několik částí podle zkoumaného parametru a vlivu na výsledný krystal. Nejprve ovšem shrneme nastavení počátečních a okrajových podmínek, numerické metody, ukážeme si způsob vizualizace a barevnou škálu, kterou budeme používat pro většinu numerických simulací.

### Časový a prostorový krok

Z důvodu zachování symetrie ve směrech vodorovné a svislé osy se při numerických simulacích omezíme na čtvercové síť aplikované na čtvercové oblasti typu  $(0, M) \times (0, M)$ . V řeči značení z kapitoly 2 pokládáme  $N_1 = N_2 = N$  a zároveň  $h_1 = h_2 = h$ . Časovou diskretizaci je díky volbě explicitního schématu potřeba uzpůsobit velikosti prostorového kroku  $h$  tak, aby byla splněna podmínka stability. V opačném případě bude schéma divergovat.

### Počáteční a okrajové podmínky

Volíme nulové okrajové podmínky Dirichletova typu pro fázové pole  $p$  i teplotní pole  $u$ , tj.

$$u(t, \cdot)|_{\partial\Omega} = u_{\partial\Omega}(t) = 0, \quad p(t, \cdot)|_{\partial\Omega} = p_{\partial\Omega}(t) = 0. \quad (4.1)$$

V numerickém schématu tedy v krajních uzlech sítě získané diskretizací oblasti bude hodnota  $p$  i  $u$  nezávisle na čase 0. Toho docílíme tak, že v krajních uzlech nastavíme v souladu s počáteční podmínkou pole  $u$  i  $p$  rovno 0. Tedy při značení z kapitoly 2

$$u_{i,j}^0 = 0, p_{i,j}^0 = 0, (i \in \{0, N\}, j \in \{0, 1, \dots, N\}) \vee (j \in \{0, N\}, i \in \{0, 1, \dots, N\}).$$

Zachování okrajové podmínky v platnosti pro každou časovou hladinu docílíme v numerickém schématu omezením iterací pouze na vnitřní uzly sítě. V krajních uzlech ponecháme tedy nastavenou počáteční hodnotu po celý průběh výpočtu.

Počáteční podmínku pro  $u$  volíme

$$u(0, \mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x}) = 0,$$

což odpovídá uniformnímu podchlazení v celé oblasti  $\Omega$  a zároveň je tato volba v souladu s okrajovou podmínkou pro  $u$ .

Volbou počáteční podmínky pro  $p$  vkládáme do oblasti krystalizační jádro, ze kterého může začít krystalický růst. Jde tedy o označení podmnožiny množiny  $\Omega$ , ve které nastavíme parametr fázového pole  $p = 1$ , což odpovídá pevné fázi a ve zbytku oblasti ponecháme hodnotu  $p = 0$ . V následujících simulacích (kromě poslední části se simulacemi s více krystalizačními jádry) je jako tato podmnožina volen kruh se středem ve středu oblasti (souřadnice  $S = [\frac{M}{2}, \frac{M}{2}]$ ) a poloměrem  $R$ , který slouží jako parametr nastavovaný uživatelem při spouštění úlohy. Tedy

$$p(0, \mathbf{x}) = p_{\text{ini}}(\mathbf{x}) = \chi_{B(S,R)},$$

kde  $B(S, R)$  značí kruh se středem v bodě  $S$  a poloměrem  $R$  a  $\chi_U$  značí charakteristickou funkci množiny  $U$ .

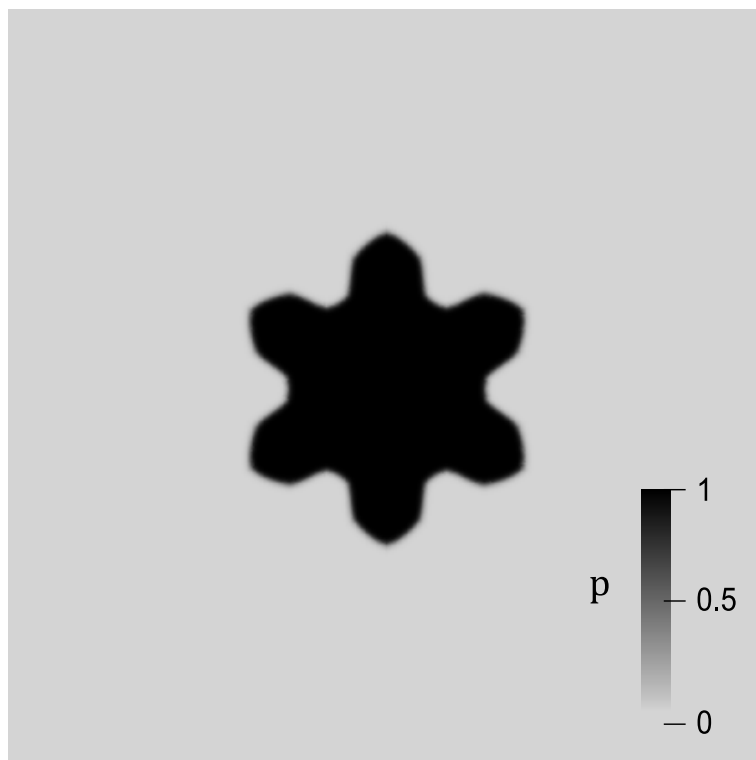
### Tabulky parametrů a barev

Shrneme si všechny použité parametry úlohy a numerické metody přehledně do tabulky 4.1.

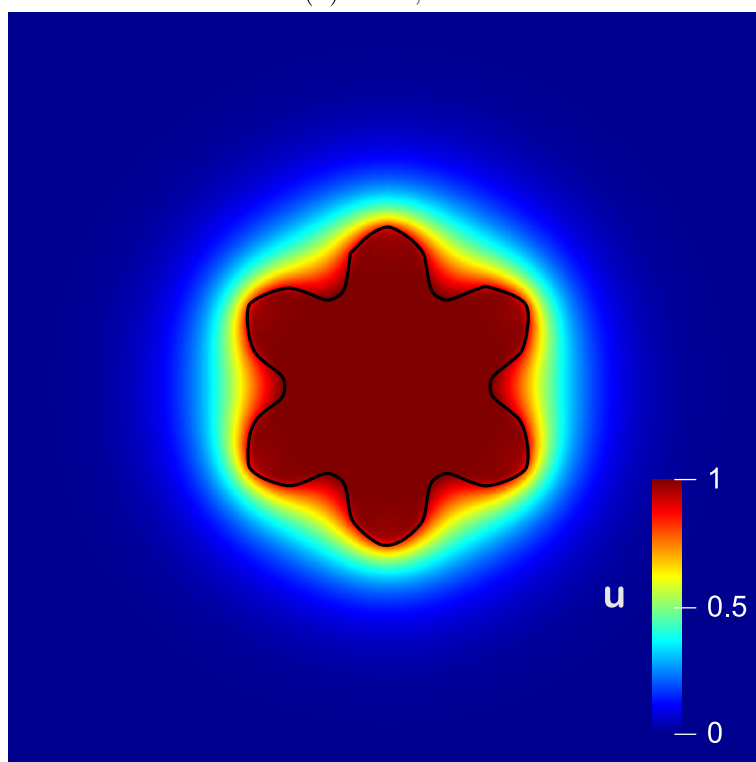
Tabulka 4.1: Nastavitelné parametry simulací tuhnutí čisté látky

$\Omega$	prostorová oblast
$\tau$	časový krok
$h$	prostorový krok
$R$	poloměr krystalizačního jádra
$a$	
$b$	
$\xi$	parametr ovlivňující tloušťku fázového rozhraní
$L$	latentní teplo
$\alpha$	
$\beta$	parametr určující velikost podchlazení
$u^*$	teplota tání/tuhnutí
$m$	četnost anizotropie
$S$	síla anizotropie
$\theta_0$	hlavní směr krystalické orientace

V celém průběhu studie jsou používány následující barevné škály pro pole  $p$  (obr. 4.1a) a pro pole  $u$  (obr. 4.1b), do kterého je pro lepší orientaci vkresleno černou barvou fázové rozhraní. K obrázkům je vždy přiložena tabulka parametrů, se kterými byla simulace spuštěna společně s informací o časovém okamžiku, z něž pochází daný snímek řešení.



(a)  $t = 0,005$



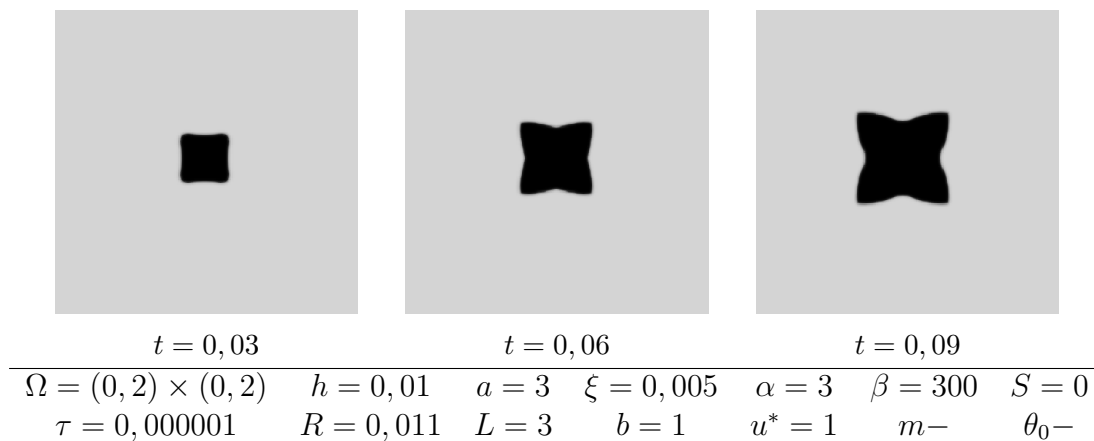
(b)  $t = 0,005$

$\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$	$h = 0,001$	$a = 2$	$\xi = 0,002$	$\alpha = 3$	$\beta = 1000$	$S = 0,8$
$\tau = 0,0000001$	$R = 0,01$	$L = 2$	$b = 1$	$u^* = 1$	$m = 6$	$\theta_0 = 0$

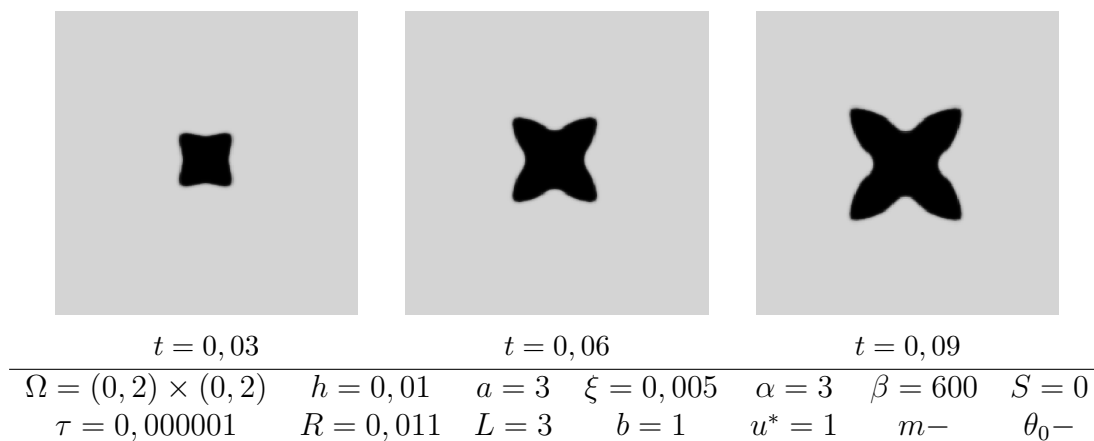
Obrázek 4.1: Barevné škály a tabulka parametrů používané k prezentaci dosažených výsledků v následujícím textu

## 4.1 Izotropní model

Nejprve bude zkoumáno chování izotropního modelu - tedy pokládáme sílu anizotropie rovnou nule - a to zejména z pohledu chování modelu pro zvětšující se parametr  $\beta$ . Proto uvedeme obrázky z několika simulací s totožným počátečním nastavením a budeme zvětšovat  $\beta$ .



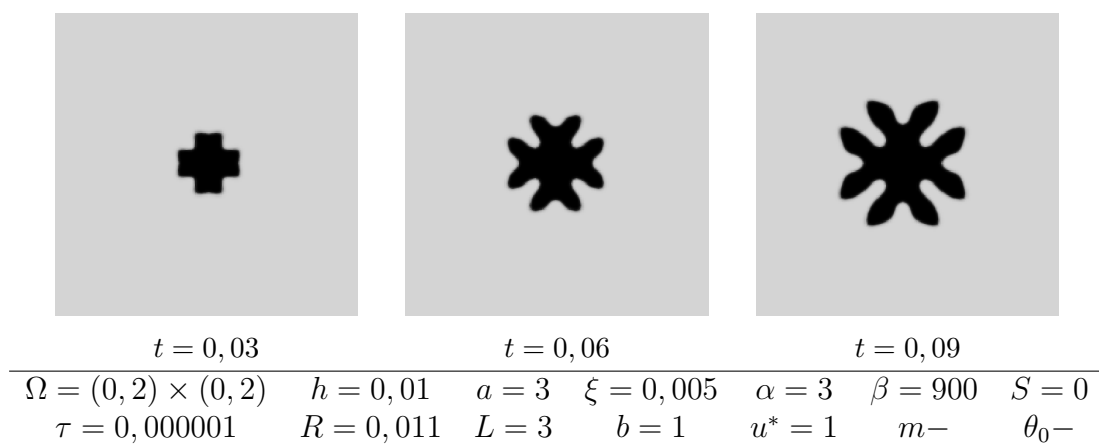
Obrázek 4.2:  $\beta = 300$



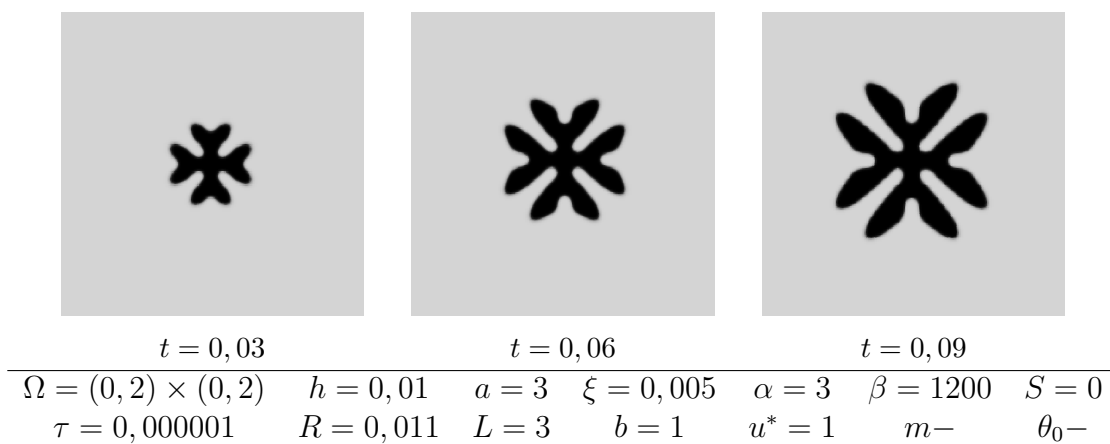
Obrázek 4.3:  $\beta = 600$

Ze série simulací (obr. 4.2-4.6) pozorujeme, že s rostoucím podchlazením způsobeným zvětšováním parametru  $\beta$  se zvyšuje tendence krystalu se větvit do více směrů a vytvářet složitější strukturu. V poslední simulaci pozorujeme, že  $\beta$  už je příliš velké a krystal nám začíná růst i z krajů oblasti, což není žádoucí. Podobný negativní efekt nastane, když bude parametr  $\xi$  ovlivňující tloušťku rozhraní příliš velký vzhledem k prostorovému kroku. Krystal pak opět začne růst od kraje oblasti a zároveň se fázové rozhraní příliš rozplyne (obr. 4.7).

Naopak příliš malé  $\xi$  vzhledem k prostorovému kroku způsobí, že žádný růst krystalu neproběhne (obr. 4.8). Pro pohyb fázového rozhraní je třeba, aby napříč šířkou rozhraní bylo alespoň několik uzlů sítě. Příliš velké  $\beta$  lze vyvážit zmenšením  $\xi$ , protože čím menší je  $\xi$ , tím větší  $\beta$  si můžeme dovolit bez narušení fázového rozhraní a růstu krystalu od kraje oblasti. Tuto skutečnost lze vypořadovat i z tvaru reaktivního

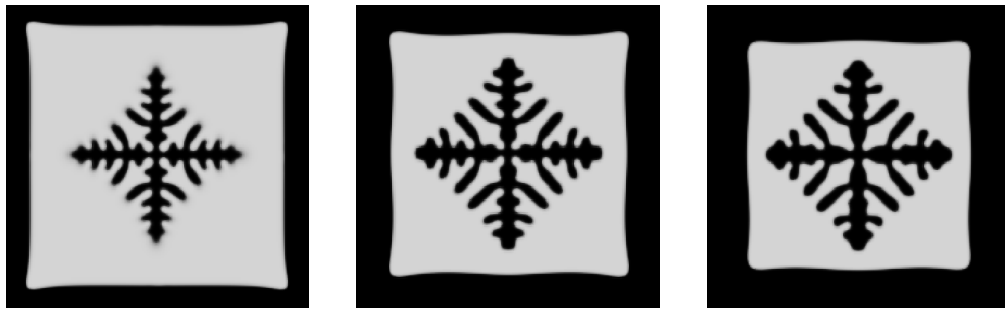


Obrázek 4.4:  $\beta = 900$



Obrázek 4.5:  $\beta = 1200$

členu (1.39) modelu 3. Zmenšení  $\xi$  z výše zmíněného důvodu vyžaduje zmenšit také prostorový krok  $h$ , což kvůli podmínce stability numerického schématu vynucuje zmenšení časového kroku  $\tau$ . Jemnější síť i prostorovou diskretizací sice dostáváme lepší aproximaci řešení, ale velmi narůstají nároky na paměť i časová náročnost simulace.



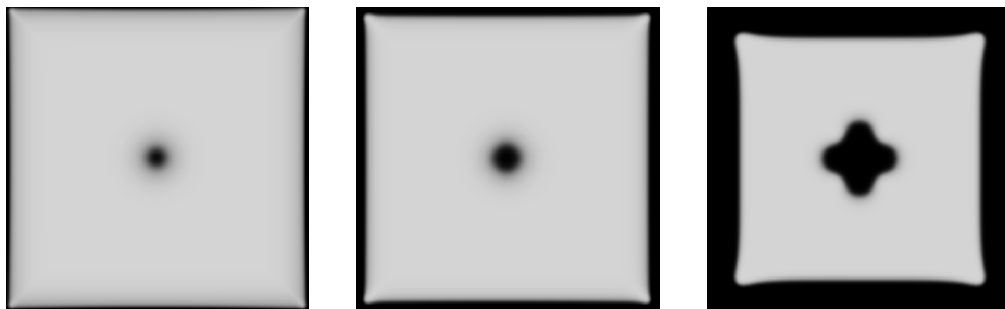
$t = 0,03$

$t = 0,06$

$t = 0,09$

$\Omega = (0, 2) \times (0, 2)$	$h = 0,01$	$a = 3$	$\xi = 0,005$	$\alpha = 3$	$\beta = 3000$	$S = 0$
$\tau = 0,000001$	$R = 0,011$	$L = 3$	$b = 1$	$u^* = 1$	$m-$	$\theta_0-$

Obrázek 4.6:  $\beta = 3000$



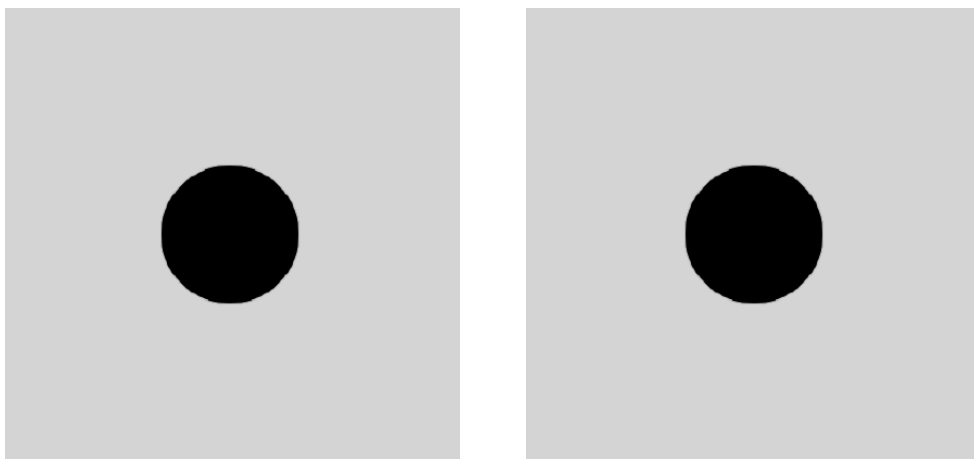
$t = 0,0375$

$t = 0,075$

$t = 0,375$

$\Omega = (0, 2) \times (0, 2)$	$h = 0,005$	$a = 3$	$\xi = 0,01$	$\alpha = 3$	$\beta = 900$	$S = 0$
$\tau = 0,0000005$	$R = 0,011$	$L = 3$	$b = 1$	$u^* = 1$	$m-$	$\theta_0-$

Obrázek 4.7: Vliv příliš velkého  $\xi$  na chování modelu



(a)  $t = 0,0375$

(b)  $t = 0,375$

$\Omega = (0, 2) \times (0, 2)$	$h = 0,005$	$a = 3$	$\xi = 0,001$	$\alpha = 3$	$\beta = 900$	$S = 0$
$\tau = 0,0000005$	$R = 0,011$	$L = 3$	$b = 1$	$u^* = 1$	$m-$	$\theta_0-$

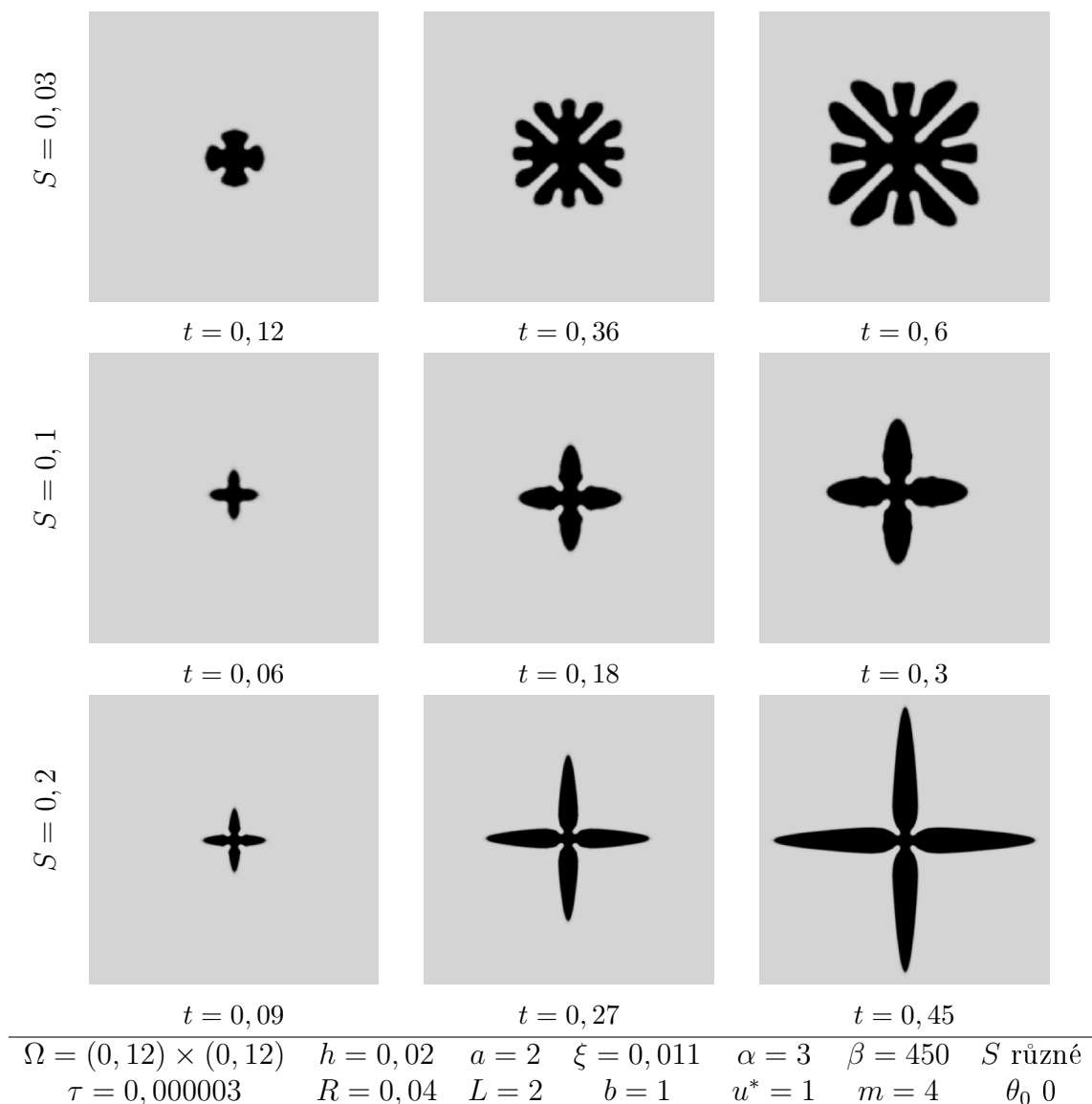
Obrázek 4.8: Vliv příliš malého  $\xi$  na chování modelu

## 4.2 Anizotropní model

V následující části bude prozkoumán anizotropní model, a to především z pohledu parametrů  $S$  a  $\theta_0$  z funkce

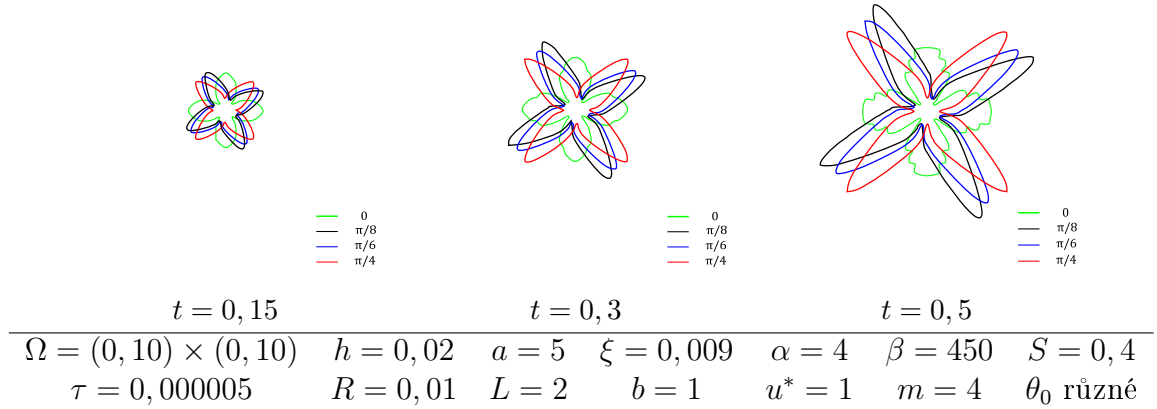
$$g(\theta) = 1 - S \cos(m(\theta - \theta_0)) \quad (4.2)$$

vnášející anizotropii do 2D modelu. Parametr  $m$  určující počet hlavních směrů růstu volíme nejčastěji 4 a 6. V části 4.3 budou prezentovány i některé výsledky s pětičetnou a osmičetnou symetrií. Na obrázku 4.9 prezentujeme vliv síly anizotropie na tvar krystalu. Je snadno pozorovatelné, že čím větší je parametr  $S$ , tím výrazněji krystalický růst probíhá hlavními směry.

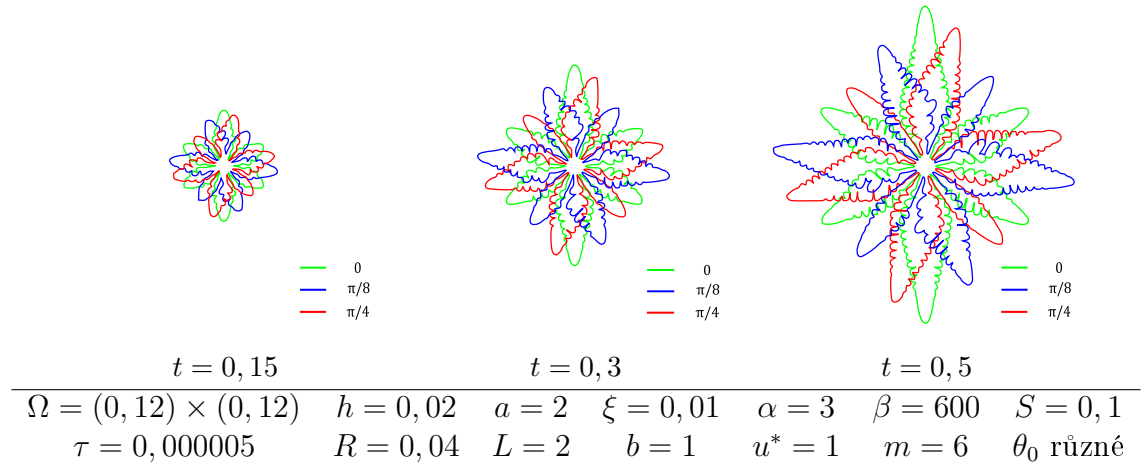


Obrázek 4.9: Tři simulace čtyřčetné symetrie s různou silou anizotropie - je uvedena po straně každé série obrázků

Změna parametru  $\theta_0$  způsobuje otočení preferovaných směrů růstu právě o úhel  $\theta_0$ . Na obrázcích 4.10 a 4.11 ilustrujeme vliv tohoto parametru pomocí křivek reprezentujících fázová rozhraní několika simulací pro čtyřčetnou a šestičetnou symetrii. Nejvýraznější rozdíl nastává pro čtyřčetnou symetrii, kde preferované směry krystalu s  $\theta_0 = 0$  jsou souhlasné s osami numerické sítě a proto vznikají boční sekundární větve krystalu. Otočením se tento vztah mezi hlavními směry krystalu a numerickou sítí poruší a krystal se již nevětví.



Obrázek 4.10: Fázová rozhraní různě natočených krystalů se stejnými parametry - čtyřčetná symetrie

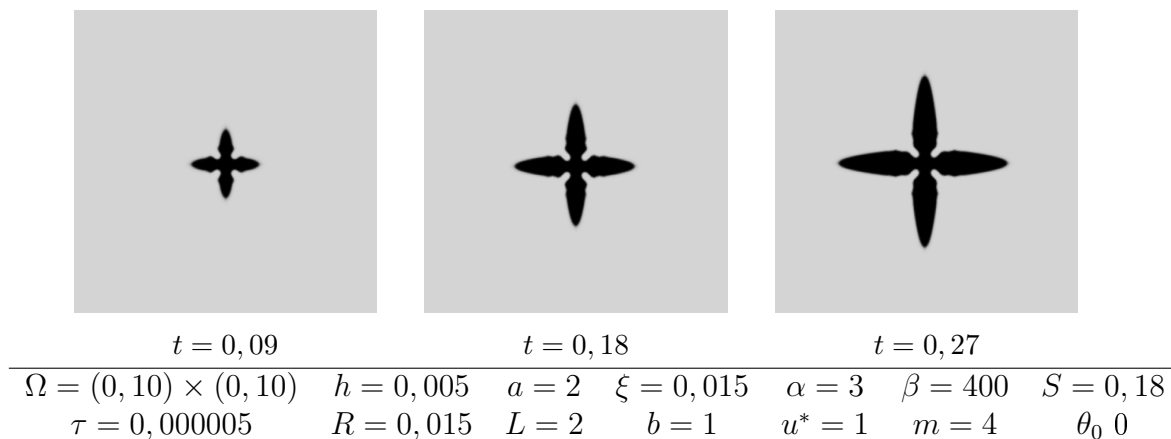


Obrázek 4.11: Fázová rozhraní různě natočených krystalů se stejnými parametry - šestičetná symetrie



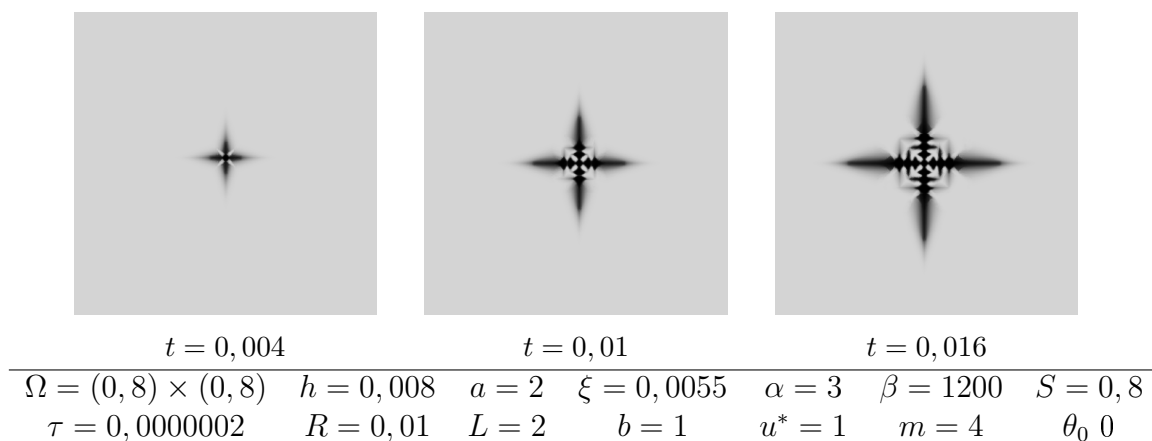
Cílem pro simulace s anizotropním modelem je nalézt parametry, které umožní dendritický růst krystalu. Dendrit v geologii označuje skupinku malých krystalů se strukturou fraktálu. Tvarem mohou připomínat například větve stromů. Typickým příkladem je již zmíněná sněhová vločka.

Pro čtyřčetnou symetrii většina pokusů o nastavení správných parametrů skončila tak jako na obrázku 4.12, kde pozorujeme vznik malých náznaků, že se krystal rozvětví z hlavních ramen, ale postupem času se tyto "zoubky" zaoblí a boční větve krystalu nevznikne. Jediná simulace, při které pro čtyřčetnou symetrii vznikl krystal



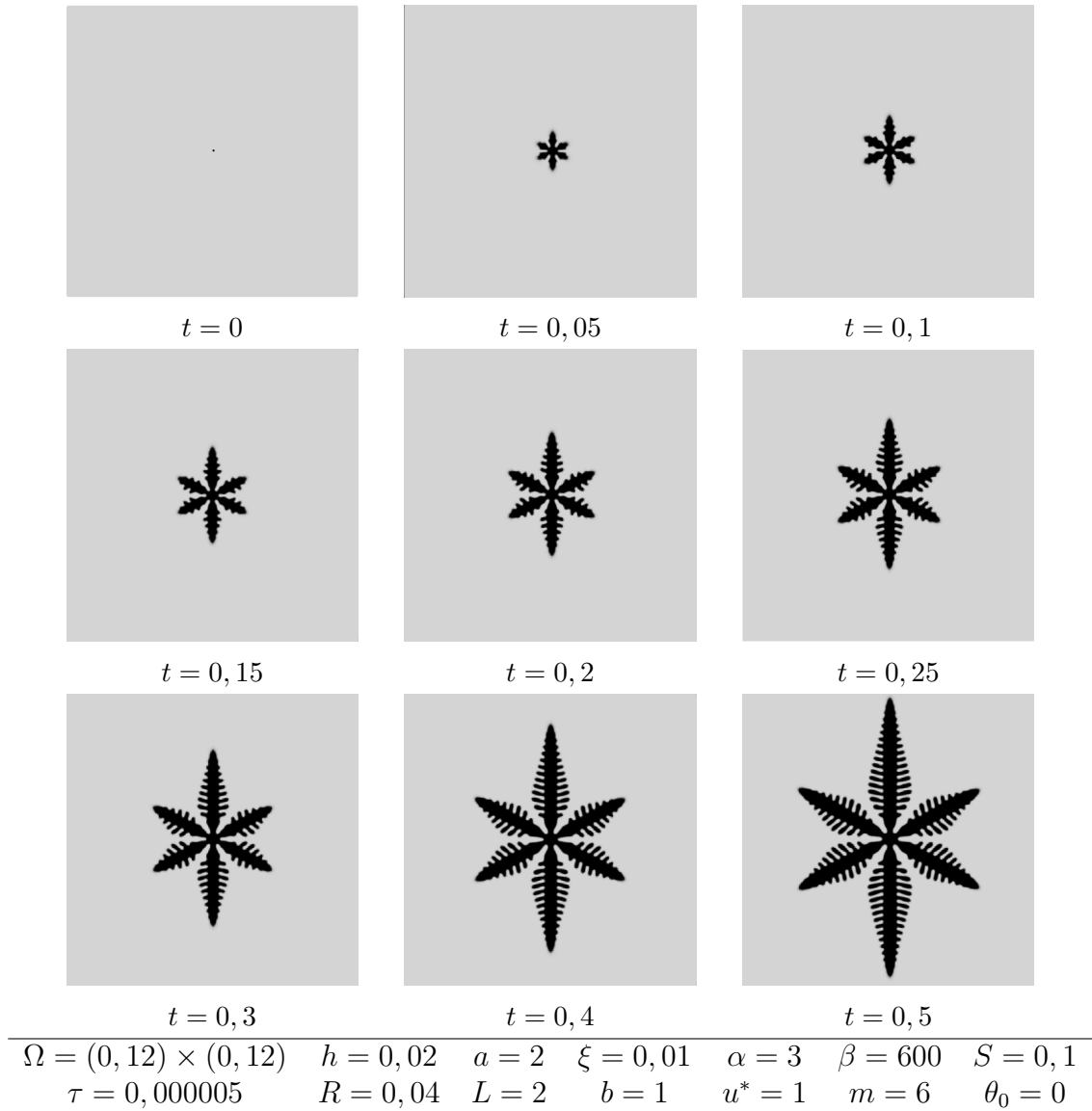
Obrázek 4.12: Pokus o simulaci krystalu s dendritickým tvarem - čtyřčetná symetrie

alespoň vzdáleně připomínající tvar dendritu, je na obrázku 4.13. Parametry této simulace ovšem nezachovávají fyzikální vlastnosti modelu. Fázové rozhraní je příliš široké v důsledku příliš velkého  $\beta$  a  $\xi$  vzhledem k protorovému kroku. Zároveň síla anizotropie  $S = 0,8$  je příliš velká a při takové hodnotě  $S$  už vnesení anizotropie do modelu pomocí funkce  $g$  (4.2) nezachová fyzikální vlastnosti. Pro dendritický růst krystalu se čtyřčetnou symetrií tak nejspíše bude nutné provést simulaci modelu ve 3D, kde je anizotropie zavedena pomocí Finslerovy metriky.



Obrázek 4.13: Pokus o simulaci krystalu s dendritickým tvarem - čtyřčetná symetrie

Pro šestičetnou symetrii byla tato výpočetní studie úspěšnější a podařilo se nalézt ideální parametry pro vznik dendritické struktury (viz. obr. 4.14). Jevem, který je na simulaci s šestičetnou anizotropií dobře rozpoznatelný, je vliv sítě. Dva směry růstu krystalu (nahoru a dolů) jsou viditelně výraznější než ostatní čtyři. Je to důsledek toho, že právě tyto dva směry mají shodnou orientaci s pravoúhloú sítí použitou při diskretizaci oblasti. Tento vliv numerického schématu je možné zmenšit volbou jemnější sítě - menšího prostorového kroku. Například na obrázku 4.1a s jemnější sítí už vypadá všech šest směrů krystalu přibližně stejně. Samozřejmě je pak nutno zmenšit i časový krok (podmínka stability) a vzroste časová náročnost simulace.



Obrázek 4.14: Šestičetná symetrie a dendritická struktura

### 4.3 Teplotní šum

V další fázi testování lehce upravíme model a vneseme do něj teplotní šum, tedy lokální drobné odchylky teploty a prozkoumáme, jaký vliv to bude mít na tvar výsledné simulace. V diskretizované reakčně-difuzní rovnici (2.10) při značení z kapitoly 2 upravíme původní člen (2.13)

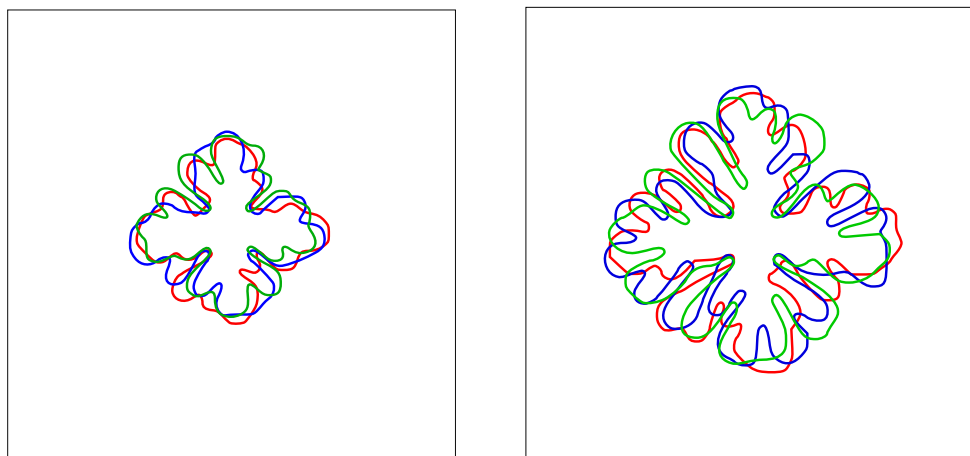
$$F_{i,j}^k = -b\xi^2\beta\sqrt{(\delta_1 p_{i,j}^k)^2 + (\delta_2 p_{i,j}^k)^2}(u_{i,j}^k - u^*)$$

na nový tvar

$$F_{i,j}^k = -b\xi^2\beta\sqrt{(\delta_1 p_{i,j}^k)^2 + (\delta_2 p_{i,j}^k)^2}(u_{i,j}^k + C_{i,j} - u^*)$$

pro všechny uzly sítě a časové hladiny. Číslo  $C_{i,j}$  je náhodně generovaná hodnota z intervalu  $\langle 0, C \rangle$ , kde  $C$  značíme maximální hodnotu teplotního šumu, což je parametr zadávaný při spouštění simulace. Pro nižší výpočetní nároky je v každém konkrétním uzlu sítě hodnota  $C_{i,j}$  stejná pro všechny časové hladiny, tedy stačí síť náhodných čísel vygenerovat pouze jednou a ne v každém časovém kroku. V reálné situaci se samozřejmě teplotní šum s časem mění a je tedy otázkou do jaké míry je tato aproximace realistická.

Důsledkem náhodného generování teplotního šumu je to, že při každé jednotlivé simulaci se stejnými parametry modelu dostaneme jiný výsledný tvar krystalu. Tuto skutečnost demonstrujeme na následujícím obrázku 4.15, kde jsou zobrazeny tři fázová rozhraní krystalů vzniklých při simulacích se stejnými počátečními podmínkami i parametry.



$t = 0, 13$

$t = 0, 26$

$\Omega = (0, 5) \times (0, 5)$	$h = 0, 01$	$a = 3$	$\xi = 0, 01$	$\alpha = 3$	$\beta = 600$	$S = 0, 05$
$\tau = 0, 000002$	$R = 0, 025$	$L = 2$	$b = 1$	$u^* = 1$	$m = 4$	$\theta_0 = 0$

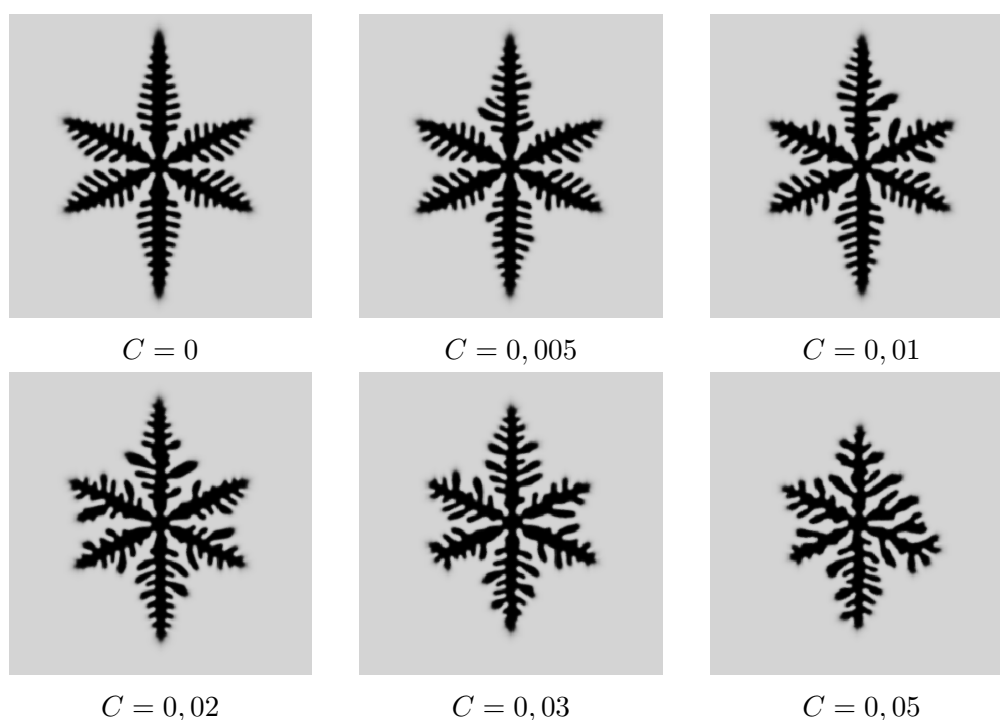
Obrázek 4.15: Fázová rozhraní ze tří simulací se stejnými parametry ve dvou časových okamžicích s maximální hodnotou šumu  $C = 0, 03$

Dále také zkoumáme vliv maximální hodnoty šumu  $C$  na změnu tvaru krystalu. Zároveň postupně zvětšujeme  $C$  až do situace, že tento příliš velký teplotní šum

zdeformuje krystal do nepřirozených tvarů, které už původní krystal připomínají pouze vzdáleně. V tabulce 4.2 uvádíme společné parametry modelu pro sérii simulací, ve kterých postupně zvětšujeme šum a jeho maximální hodnotu uvedeme u každého obrázku.

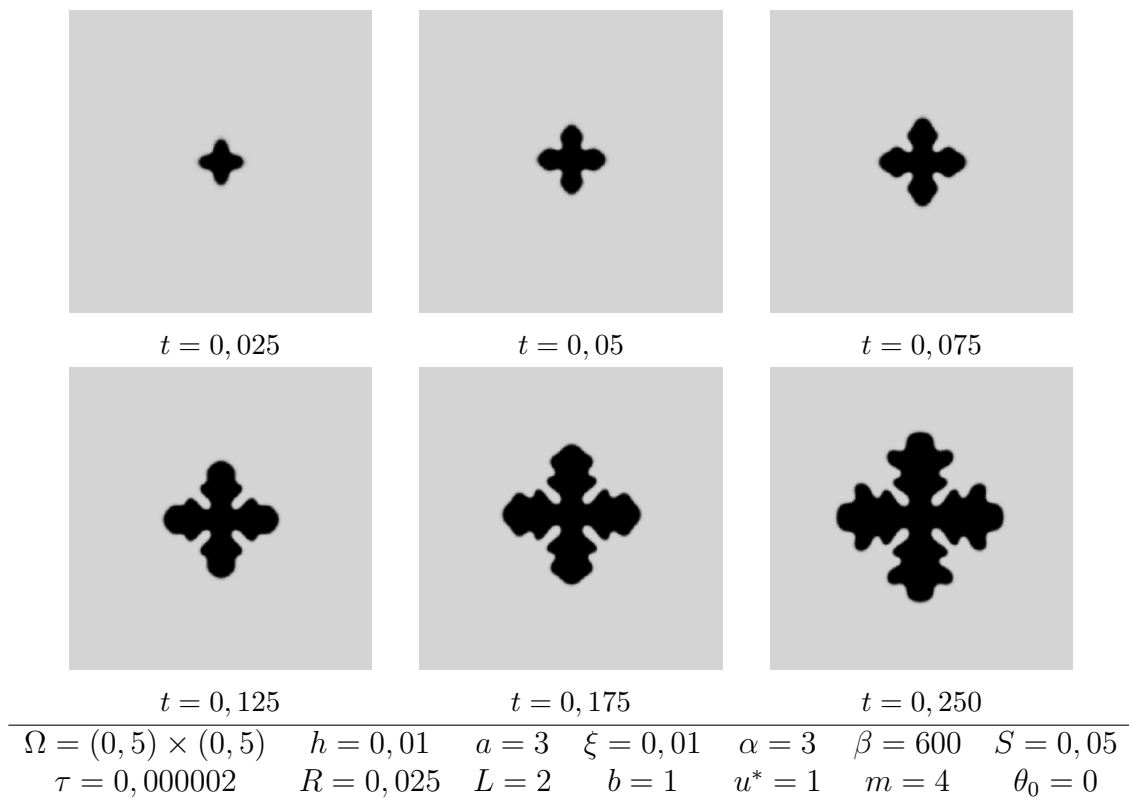
Tabulka 4.2: Parametry modelu pro simulace z obrázku 4.16

$\Omega = (0, 8) \times (0, 8)$	$\tau = 0,000005$
$h = 0,02$	$R = 0,04$
$a = 2$	$b = 1$
$\xi = 0,01$	$L = 2$
$\alpha = 3$	$\beta = 700$
$u^* = 1$	$m = 6$
$S = 0,12$	$\theta_0 = 0$

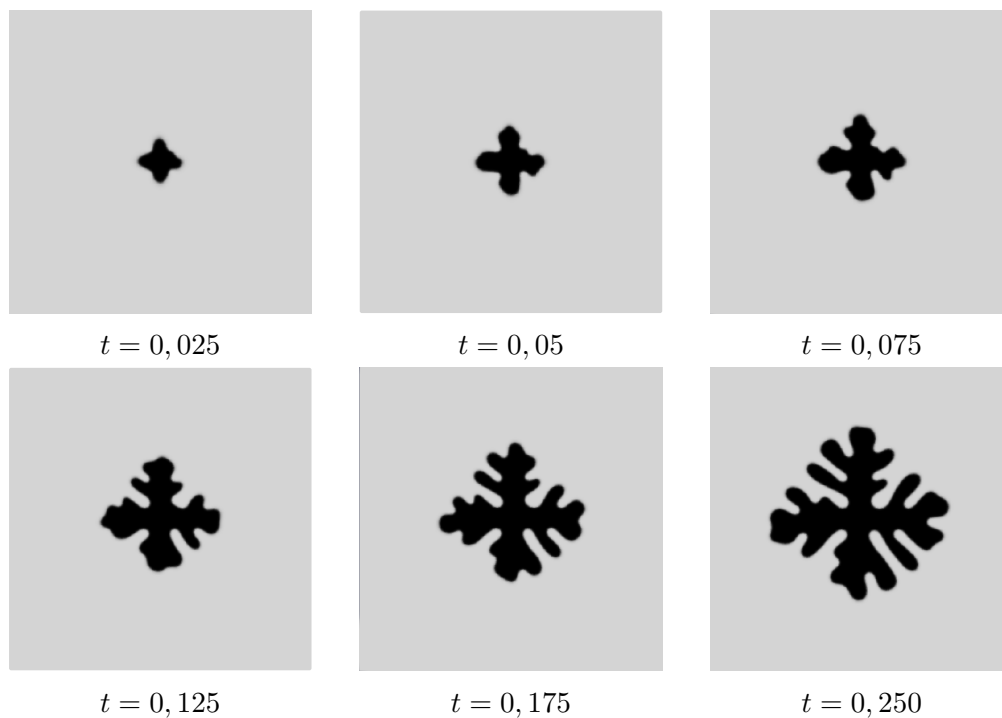


Obrázek 4.16: Série simulací zobrazených v totožném čase  $t = 0,15$  lišící se pouze maximální hodnotou šumu, jež je uvedena pod každým jednotlivým obrázkem

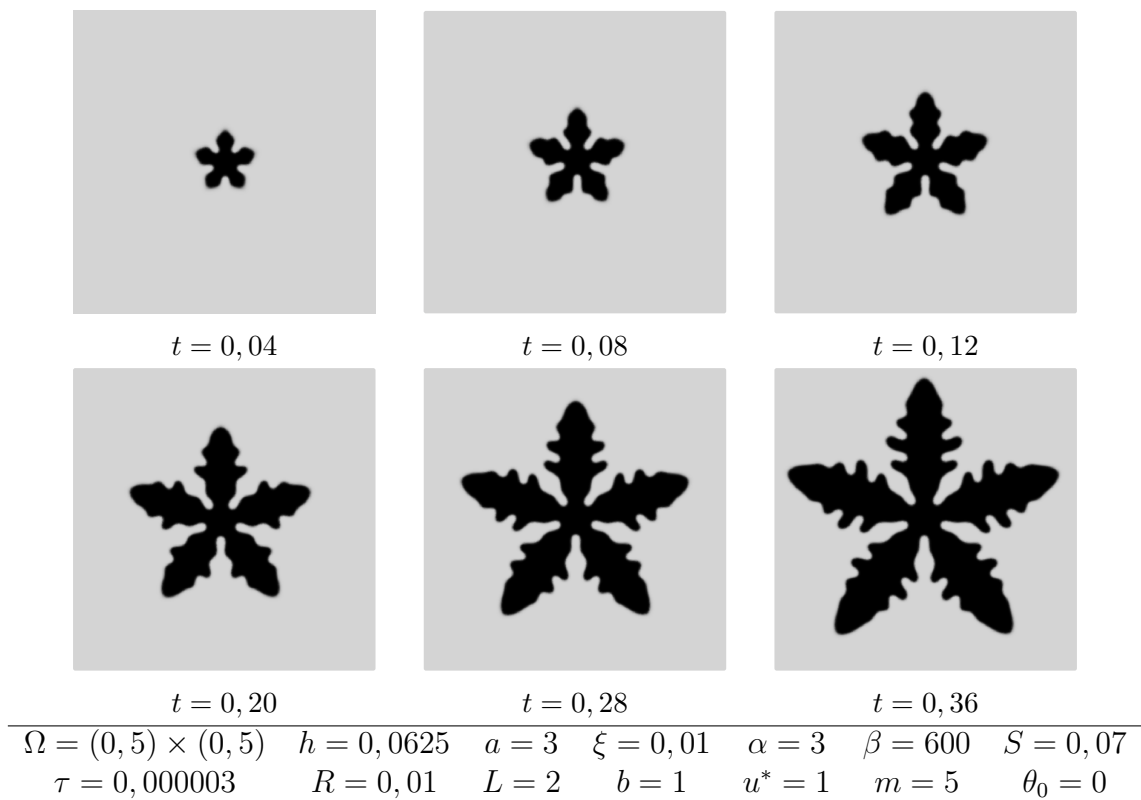
Z testování vlivu maximální hodnoty šumu (obr. 4.16) dojdeme k závěru, že pro lehkou modifikaci tvaru krystalu a získání zajímavých výsledků je vhodné volit například hodnoty  $C = 0,01$  nebo  $C = 0,02$ . Provedeme tedy studii vlivu šumu na výsledný tvar krystalu pro různý počet preferovaných směrů - konkrétně pro čtyřčetnou, pětičetnou, šestičetnou a osmičetnou anizotropii. Výsledky budeme prezentovat následující sérií obrázků, kde pro porovnání vždy zobrazíme vývoj tvaru krystalu s teplotním šumem a bez něj při zachování všech dalších parametrů modelu konstantních (proto je uvedeme pro každý typ symetrie pouze jednou).



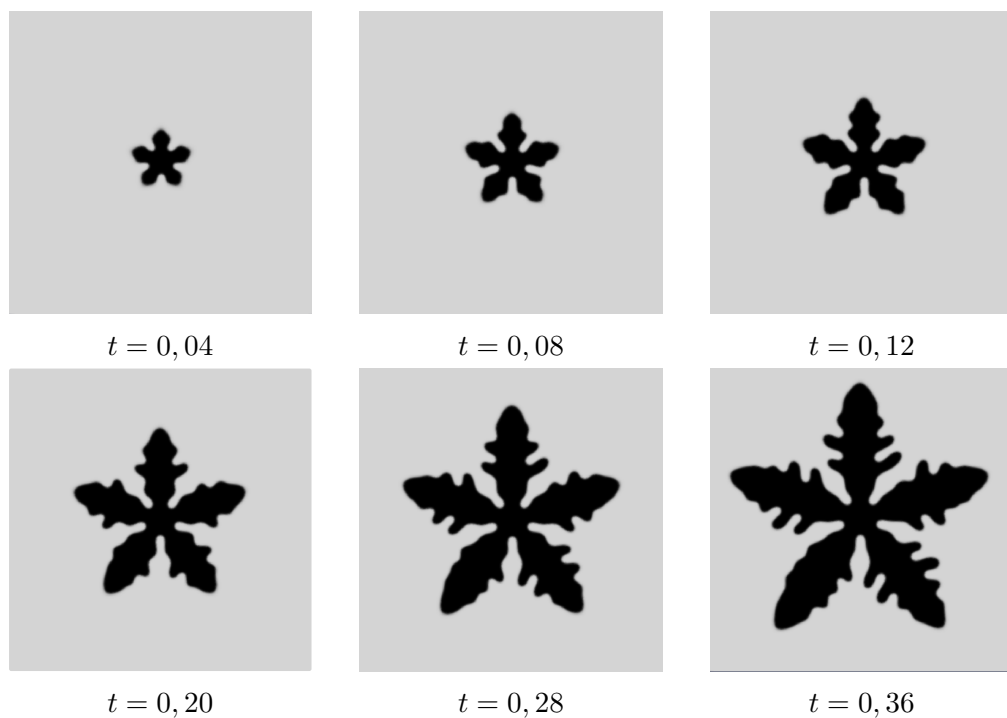
Obrázek 4.17: Čtyřčetná symetrie bez teplotního šumu



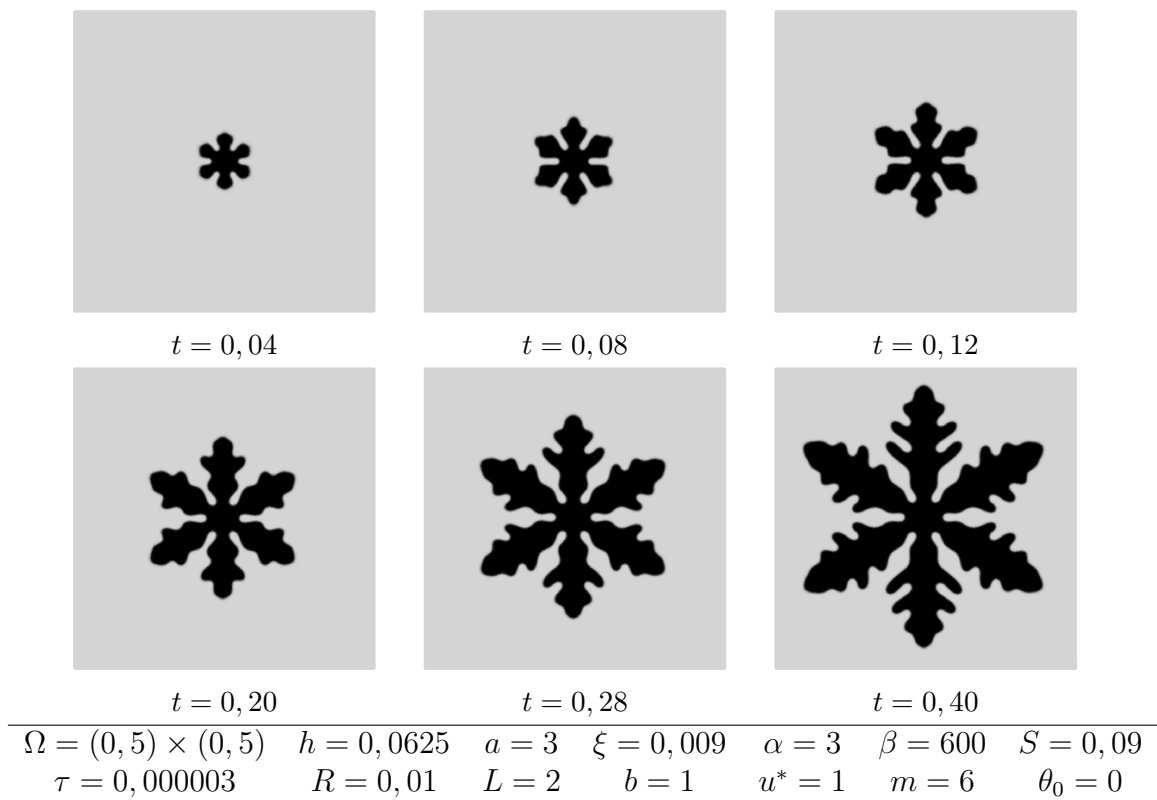
Obrázek 4.18: Čtyřčetná symetrie s teplotním šumem s maximální hodnotou  $C = 0,02$



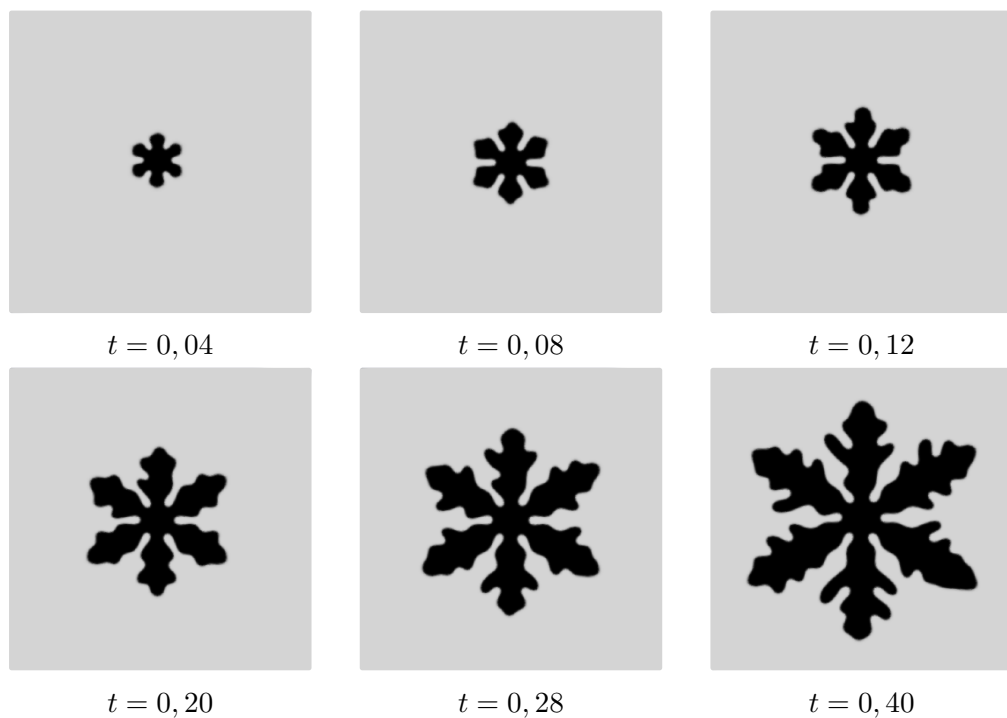
Obrázek 4.19: Pětičetná symetrie bez teplotního šumu



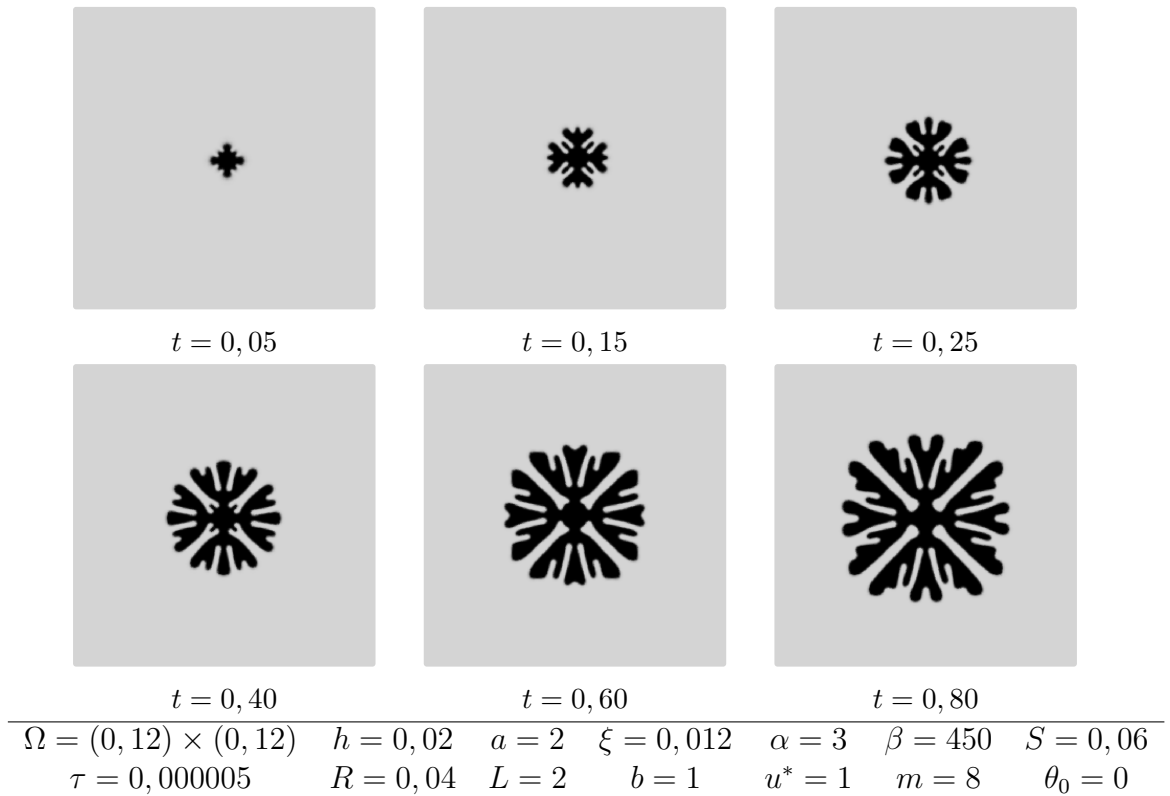
Obrázek 4.20: Pětičetná symetrie s teplotním šumem s maximální hodnotou  $C = 0,01$



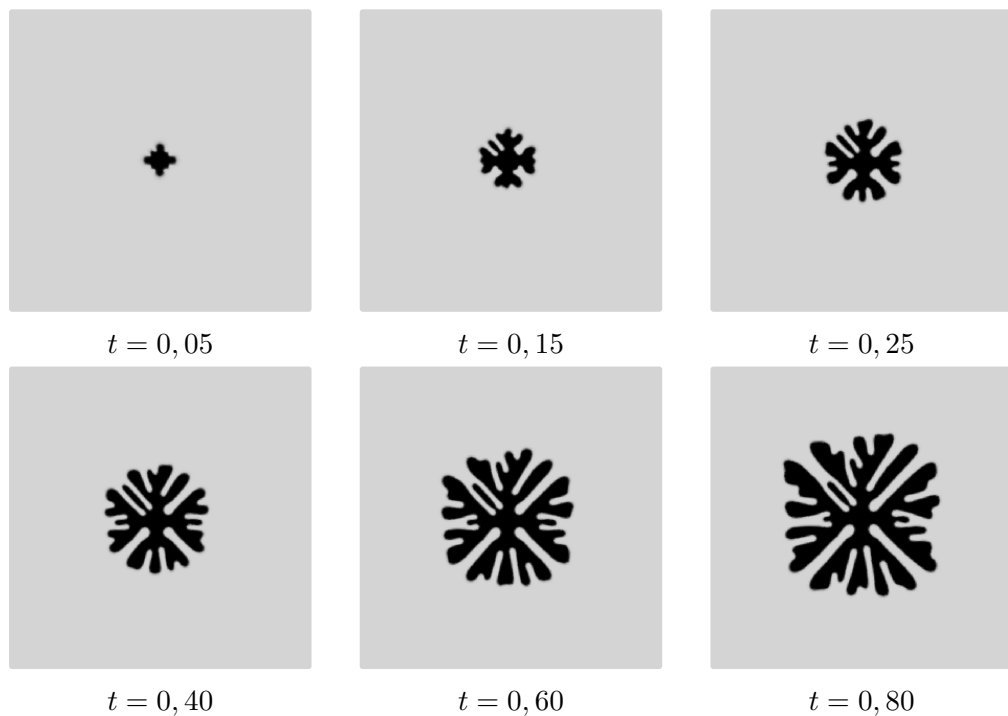
Obrázek 4.21: Šestičetná symetrie bez teplotního šumu



Obrázek 4.22: Šestičetná symetrie s teplotním šumem s maximální hodnotou  $C = 0,02$



Obrázek 4.23: Osmičetná symetrie bez teplotního šumu



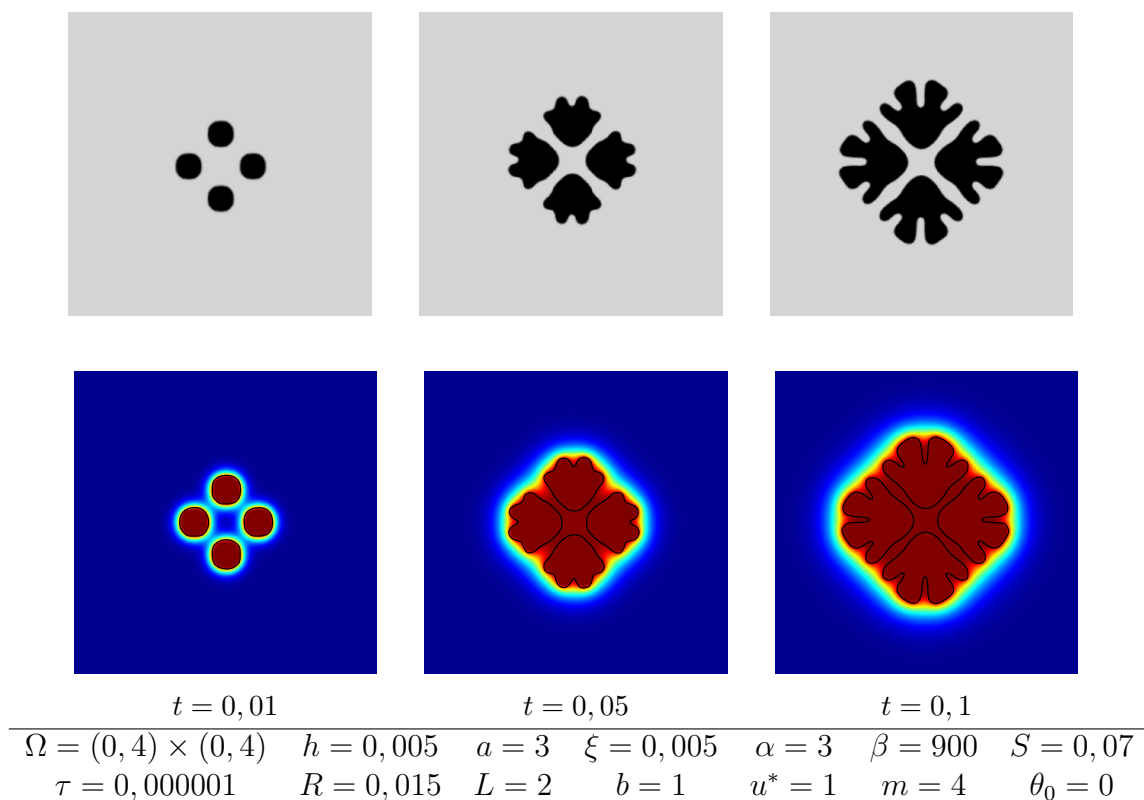
Obrázek 4.24: Osmičetná symetrie s teplotním šumem s maximální hodnotou  $C = 0,01$



## 4.4 Více krystalizačních jader

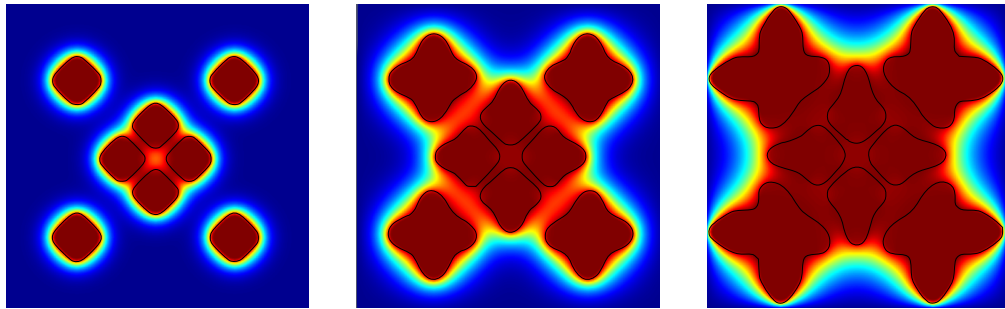
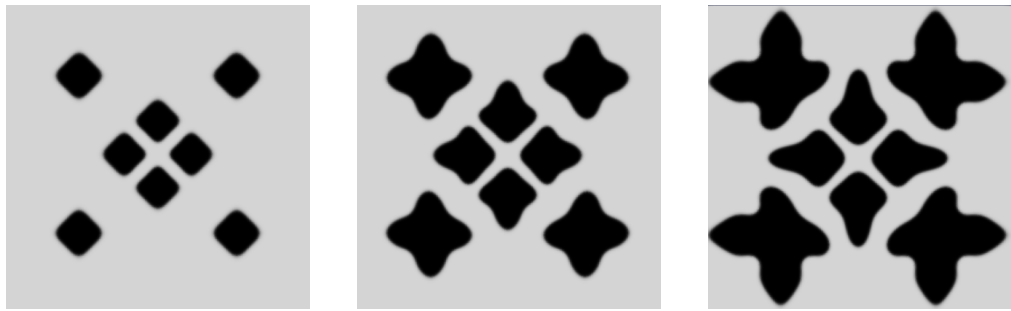
Na závěr prozkoumáme chování více krystalů v jedné oblasti. Zajímat nás bude chování krystalů zejména v místech, kde by se měly potenciálně během růstu střetnout. Tuto situaci demonstrujeme pro několik nastavení parametrů a také pro různé počáteční polohy krystalizačních jader, které umístíme pravidelně do sledované oblasti  $\Omega$ .

Hlavním jevem viditelným ve všech simulacích (obr. 4.25, 4.26, 4.27) je to, že jednot-



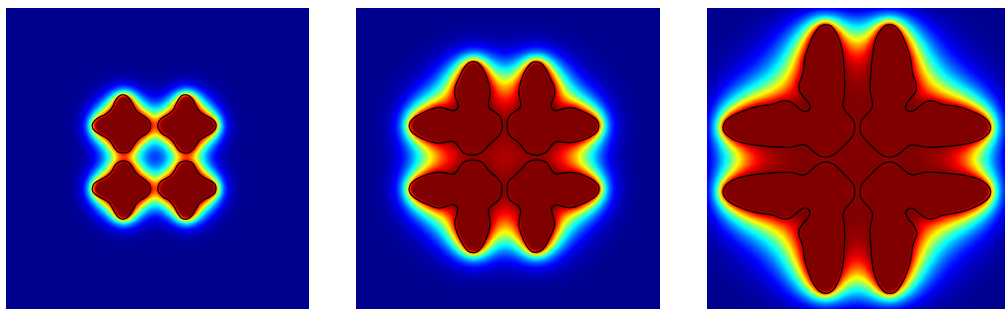
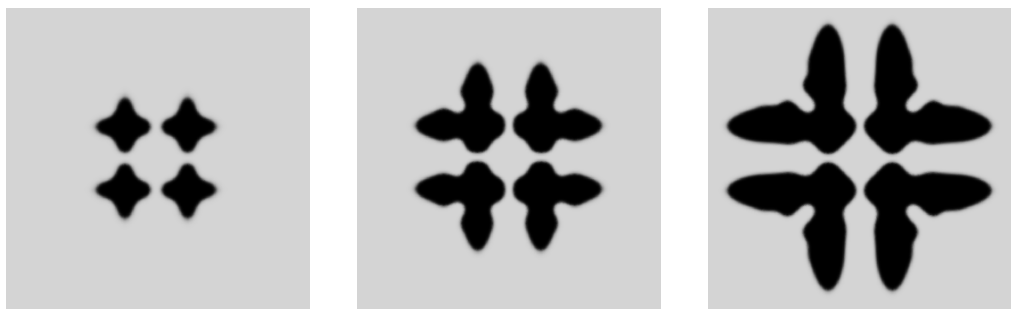
Obrázek 4.25: Simulace č. 1 s více krystalizačními jádry - porovnání teplotního a fázového pole

livá krystalizační zrna se nespojí v jeden krystal. Naopak vznikne mezi jednotlivými zrny zřetelná mezera, ve které už krystalický růst dále nepokračuje. Zajímavé při tom je, že v této oblasti mezi jednotlivými zrny tuhnutím uvolněné latentní teplo zvýší teplotu postupně až na teplotu tuhnutí. Mezery bychom pozorováním pouze teplotního pole nebyli schopni odhalit. Pro zacelení těchto mezer a spojení krystalů by bylo třeba hlubší podchlazení.



$t = 0,015$		$t = 0,045$		$t = 0,0825$		
$\Omega = (0,3) \times (0,3)$	$h = 0,003$	$a = 2$	$\xi = 0,007$	$\alpha = 3$	$\beta = 400$	$S = 0,2$
$\tau = 0,0000015$	$R = 0,01$	$L = 2$	$b = 1$	$u^* = 1$	$m = 4$	$\theta_0 = 0$

Obrázek 4.26: Simulace č. 2 s více krystalizačními jádry - porovnání teplotního a fázového pole



$t = 0,015$		$t = 0,045$		$t = 0,09$		
$\Omega = (0,3) \times (0,3)$	$h = 0,003$	$a = 2$	$\xi = 0,007$	$\alpha = 3$	$\beta = 600$	$S = 0,15$
$\tau = 0,0000015$	$R = 0,01$	$L = 2$	$b = 1$	$u^* = 1$	$m = 4$	$\theta_0 = 0$

Obrázek 4.27: Simulace č. 3 s více krystalizačními jádry - porovnání teplotního a fázového pole

# Závěr

V práci je představeno fyzikální pozadí fázového přechodu, popsána Stefanova úloha a odvozen matematický model fázového pole. Podklady využití v této teoretické části práce jsou uvedeny v seznamu literatury. Následně je popsáno explicitní numerické schéma aplikované na zmíněný model fázového pole ve dvourozměrném případě a uvedeno několik zajímavostí z procesu implementace a přístupu k výpočetnímu klastru HELIOS . Pomocí programu implementovaného v C/C++ je pro lepší pochopení zkoumáno chování modelu ve vztahu k jednotlivým parametrům. Grafický výstup z této výpočetní studie je obsahem poslední kapitoly, která je tedy nejhodnotnější částí práce. K vizualizaci dosažených výsledků byly použity programy ParaView a Inkscape.

Během tvorby této bakalářské práce se mi podařilo seznámit se s problémem fázového přechodu a porozumět rozdílu mezi přístupy uvažující ostré a pozvolné fázové rozhraní. Úspěšně jsem aplikoval metodu konečných diferencí na model fázového pole ve 2D a implementoval program v jazyce C/C++ s využitím paralelizace for cyklu pomocí OpenMP. Za velmi přínosnou považuji výpočetní studii, a to z důvodu osvojení základů práce s výpočetním klastrem během spouštění úloh a také lepšího porozumění vlivu jednotlivých parametrů na chování modelu. Z nejhodnotnějších výsledků bych zmínil nalezení parametrů pro dendritický růst krystalu při šestičetné symetrii.

Znalosti a zkušenosti získané touto prací lze využít jako podklad k další práci s touto tematikou a dále jí rozvíjet. Jelikož pro čtyřčetnou anizotropii se nepodařilo nalézt vhodné parametry umožňující dendritický růst krystalu, nabízí se vnést do modelu anizotropii pokročilejším způsobem pomocí Finslerovy metriky s nadějí, že poté se to podaří. Mezi další směry, kterými lze navázat na tuto práci patří zlepšení numerického schématu, pokročilejší paralelizace, implementace a prozkoumání modelu s dalšími variantami reakčního členu, nastavení fyzikálně realistických parametrů odpovídajících skutečnému materiálu a také přechod k řešení modelu fázového pole ve 3D.

# Literatura

- [1] M. Beneš, *Mathematical and computational aspects of solidification of pure substances*. Acta Math. Univ. Comenian. (N.S.), svazek 70, č. 1, 2000, 123–151.
- [2] D. Turnbull, *The Undercooling of Liquids*. Scientific American, svazek 212, č. 1, 1965, 38–47.
- [3] M. E. Gurtin, *On the two-phase Stefan problem with interfacial energy and entropy*. Arch. Ration. Mech. An., svazek 96, č. 3, 1986, 199–241.
- [4] M. Beneš, *Mathematical Analysis of Phase-Field Equations with Numerically Efficient coupling terms*. Interfaces Free Bound 3, 2001, 201–221.
- [5] P. Strachota, *Analysis and Application of Numerical Methods for Solving Non-linear Reaction-Diffusion Equations*. Dizertační práce, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT, 2012.
- [6] P. C. Hohenberg, B. I. Halperin, *Theory of dynamic critical phenomena*. Rev. Mod. Phys. 49, 1977, 435–479.
- [7] 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., in press, 2021. DOI: 10.1088/1361-651X/ac0f55
- [8] R. Kobayashi, *Modeling and Numerical Simulations of Dendritic Crystal Growth*. Physica D 63, 1993, 410–423.
- [9] G. Bellettini, M. Paolini, *Anisotropic motion by mean curvature in the context of Finsler geometry*. Hokkaido Math. J. 25, 1996, 537–566.
- [10] M. Beneš, *Phase field model of microstructure growth in solidification of pure substances*. Dizertační práce, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT, 1997.
- [11] R. Courant, K. Friedrichs, H. Lewy, *Über die partiellen Differenzgleichungen der mathematischen Physik*. Mathematische Annalen 100, 1928, 32–74.
- [12] B. Chapman, G. Jost, R. van der Pas, *Using OpenMP: Portable Shared Memory Parallel Programming*. Cambridge, Mass: MIT Press, 2008.
- [13] P. Dvořák, *Matematické modelování mikrostruktur při fázových přechodech*. Bakalářská práce, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT, 2008.

- [14] P. Dvořák, *Matematické modelování mikrostruktur při fázových přechodech*. Diplomová práce, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT, 2010.