



Posudek vedoucího bakalářské práce studenta **Jana Palána**
**"Matematické modelování a numerická simulace růstu krystalů metodou
fázového pole"**

Úvod. Matematické modelování a počítačové simulace jsou v materiálových vědách stále běžnějším nástrojem. V naší výzkumné skupině máme bohaté zkušenosti s implementací numerických metod pro phase-field modely růstu krystalů i s využitím rovnice fázového pole (Allenovy-Cahnovy rovnice) v jiných aplikacích. V poslední době jsme významně pokročili v porozumění matematicko-fyzikálního pozadí problému, navrhli jsme a publikovali nové varianty modelu, máme prvotní výsledky v automatickém řízení procesů tuhnutí pomocí optimalizačních metod a řadu nápadů na další práci. Téma práce představuje potřebný úvod do problematiky, aby student porozuměl smyslu matematického modelu a získal základní zkušenosti s implementací numerických metod pro jeho řešení na počítači. To se bezesporu velmi dobře podařilo a věřím, že v dalších letech bude Jan schopen přispět k pokročilému výzkumu, který vedeme.

Shrnutí odvedené práce. První část práce je věnována shrnutí známých přístupů k modelování fázových přechodů se snahou přiblížit výchozí fyzikální principy a odvodit model fázového pole pro tuhnutí čisté látky. Odvození Allenovy-Cahnovy parciální diferenciální rovnice jsme se pokusili vyložit matematicky korektním způsobem, na rozdíl od většiny předchozích publikovaných textů, kde je nevhodně požíván pojem Fréchetovy derivace funkcionálu volné energie. To se sice nepodařilo (mojí zásluhou) zcela dokonale, nicméně jde o hodnotný příspěvek pro případné další studenty, kteří mohou rešeršní část práce využít ke studiu. Odvozený model fázového pole je na konci kapitoly rozšířen zavedením jednoduché formy anizotropie ve 2D.

Druhá část práce je věnována formulaci schématu konečných diferencí pro úlohu fázového pole ve 2D. Třetí krátká kapitola se věnuje implementaci numerického algoritmu s využitím OpenMP paralelizace a spouštění výsledného kódu na superpočítači HELIOS, který provozuje katedra matematiky FJFI.

Závěrečná čtvrtá kapitola obsahuje výsledky docela rozsáhlé výpočetní studie, která sleduje různé faktory, které ovlivňují kvalitativní chování modelu (tvar a větvení krystalu). Jedná se mj. o sílu a četnost anizotropie, teplotní šum a rozlišení numerické sítě. Na konci kapitoly jsou i experimenty s více krystalizačními jádry, kde se zkoumá interakce několika rostoucích krystalů přes teplotní pole. Všechny výsledky jsou prezentovány v přehledné formě prostřednictvím vizualizací teplotního a fázového pole. Informace o nastavení modelu jsou vhodně organizovány do tabulek uvedených u každé vizualizace.

Hodnocení. S Janem jsme i v obtížném období lockdownů pravidelně konzultovali online a neodradily ho ani neustálé výpadky připojení, se kterými se musel potýkat. Zadání práce se podařilo beze zbytku splnit a s výsledky jsem velmi spokojen. Kvalita textu je též na velmi dobré úrovni a Jan byl schopen při jeho tvorbě pracovat do značné míry samostatně, bez nutnosti významnějších korektur z mé strany, což zdaleka nebývá pravidlem. Moje pomoc tak byla potřebná zejména při formulaci odvození modelu fázového pole a částečně pro doladění značení ve schématu konečných diferencí. Student se úspěšně seznámil s problematikou a existuje řada možností, jak na odvedenou práci snadno navázat v rámci výzkumného úkolu a diplomové práce. Práci vřele doporučuji k obhajobě a navrhuji hodnotit ji známkou

A (výborně).

Praha 14. srpna 2021

Ing. Pavel Strachota, Ph.D.

Ing. Pavel Strachota, Ph.D.

katedra matematiky

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

České vysoké učení technické v Praze

Trojanova 13

120 00 Praha 2

Tel: (+420) 224 358 563

E-mail: pavel.strachota@fjfi.cvut.cz