

## Oponentský posudek na bakalářskou práci

Autor: Jan Palán

Název: Matematické modelování a numerická simulace růstu krystalů metodou fázového pole

Posudek vypracoval: Ing. Aleš Wodecki

Předložená práce se věnuje metodě fázového pole (phase field) pro aplikaci na modelování fázových přechodů a počítačovým simulacím s použitím metody konečných diferencí. V úvodu se autor zabývá motivací pro studium fázových přechodů. Stručně jsou zde představeny dva z možných přístupů jejich modelování: Gibbsův a Van der Waalsův.

První kapitola má rešeršní charakter. Zde je metoda fázového pole odvozena a zasazena do historického kontextu. Autor se zde také věnuje Stefanově úloze a naznačuje souvislosti mezi touto úlohou a metodou fázového pole.

Druhá kapitola popisuje velice detailně numerické schéma metody konečných diferencí pro řešení rovnic fázového pole ve 2D na pravidelné mřížce. Autor odvodí explicitní schéma pro numerický výpočet rovnic fázového pole a zmiňuje nutnou a postačující podmínku stability numerického schématu.

Třetí kapitola se věnuje implementaci. Zde autor se věnuje pouze zajímavým aspektům souvisejícím s implementací jako je paralelizace nebo obsluha výpočetního clusteru.

Čtvrtá kapitola je věnována numerickým experimentům. Tato kapitola představuje autorův hlavní přínos. Autor se zde zaměřil na srovnání simulací anizotropního a izotropního charakteru. V anizotropních simulacích zkoumá různé četnosti anizotropie. Dále je pak komentován vliv numerické sítě na výpočty a vliv teplotních oscilací (šumu) na průběh růstu krystalu.

Práce je dobře členěná a napsána srozumitelným jazykem. V rešeršní části je prezentována problematika logicky s dostatečně širokým záběrem.

Autor demonstroval, že zvládnul implementaci numerického řešiče a zhodnocení výsledků a tímto splnil všechny body zadání. Konkrétně oceňuji numerickou část, kde je demonstrován vliv mnoha různých aspektů (anizotropie, šum, numerická síť) ovlivňujících růst krystalů.

Nedostatky práce jsou minimální, například:

- Strana 15. - 19. Systém rovnic fázového pole je odvozen. Avšak formalismus, který je k tomu použit, je nekonzistentní. Např.  $C2(\Omega)$  je jen hustou podmnožinou  $L2(\Omega)$  a tak se nelze opřít o Rieszovu reprezentaci.
- Strana 38. Z obrázku 4.11 nelze nic moc rozpoznat vzhledem k velké hustotě překrývajících se čar.

Na závěr bych chtěl autora požádat o komentář k numerickým experimentům (kapitola 4), konkrétně:

- V sekci 4.3 diskutujete vliv teplotního šumu na výsledky simulací. Mají tyto experimenty fyzikální motivaci?

I přes zmíněné výhrady hodnotím tuto práci stupěm A - výborně.

V Praze dne 12/8/2021

Ing. Aleš Wodecki