

การศึกษารูปแบบตัวของขอบเกรนโดยวิธี

Phase Field Crystal

A Study of Grain Boundary Interaction Using the  
Phase Field Crystal Method

นางสาวภาวิดา สมพงษ์กุล

MS. PASITA SOMSONGKUL

นายศักดิ์สิทธิ์ สุขเกษม

MR. SAKSIT SUKKASEM

นายศิวกร ไน้

MR. SIWAKORN NOREE

ปริญญาโทฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรวิศวกรรมศาสตรบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมอุตสาหการ คณะวิศวกรรมศาสตร์

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

ปีการศึกษา 2556

การศึกษาการแข็งตัวของขอบเกรนโดยวิธี

Phase Field Crystal

A Study of Grain Boundary Interaction Using the  
Phase Field Crystal Method

นางสาวภาชิตา สมส่งกุล

MS.PASITA SOMSONGKUL

นายศักดิ์สิทธิ์ สุขเกษม

MR.SAKSIT SUKKASEM

นายศิวกร โนรี

MR.SIWAKORN NOREE

ปริญญานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรวิศวกรรมศาสตรบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมอุตสาหการ คณะวิศวกรรมศาสตร์

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

ปีการศึกษา 2556

# A Study of Grain Boundary Interaction Using the Phase Field Crystal Method

MS.PASITA SOMSONGKUL

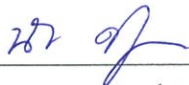
MR.SAKSIT SUKKASEM

MR.SIWAKORN NOREE

A THESIS SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT  
OF THE REQUIREMENT FOR THE DEGREE OF  
BACHELOR OF ENGINEERING IN INDUSTRIAL ENGINEERING  
FACULTY OF ENGINEERING  
KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG  
ACADAMIC YEAR 2013

คณะวิศวกรรมศาสตร์  
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง  
ใบรับรองปริญญาานิพนธ์

หัวข้อปริญญาานิพนธ์	การศึกษาการแข็งตัวของขอบเกรนโดยวิธี Phase Field Crystal A Study of Grain Boundary Interaction Using the Phase Field Crystal Method			
นักศึกษา	นางสาวภาชิตา	สมสงกุล	รหัสประจำตัวนักศึกษา	53011258
	นายศักดิ์สิทธิ์	สุขเกษม	รหัสประจำตัวนักศึกษา	53011558
	นายศิวกร	โนรี	รหัสประจำตัวนักศึกษา	53011579
หลักสูตร	วิศวกรรมศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาวิศวกรรมอุตสาหการ			
อาจารย์ผู้ควบคุมปริญญาานิพนธ์				



(ดร. นีรินทร์ พิสุทธอนนท์)

หัวข้อปริญญานิพนธ์	การศึกษาการแข็งตัวของขอบเกรนโดยวิธี Phase Field Crystal		
นักศึกษา	นางสาวภาชิตา สมส่งกุล	รหัสประจำตัวนักศึกษา	53011258
	นายศักดิ์สิทธิ์ สุขเกษม	รหัสประจำตัวนักศึกษา	53011558
	นายศิวกร โนรี	รหัสประจำตัวนักศึกษา	53011579
หลักสูตร	วิศวกรรมศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาวิศวกรรมอุตสาหการ		
ปีการศึกษา	สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง		
	2556		
อาจารย์ผู้ควบคุมปริญญานิพนธ์	ดร. นิรันดร์ พิสุทธอนันท์		

### บทคัดย่อ

ปริญญานิพนธ์นี้เป็นการศึกษาการเติบโตของขอบเกรนโดยการใช้วิธี Phase Field Crystal ซึ่ง Phase Field Crystal Method เป็นวิธีการศึกษาอะตอมของวัสดุโดยการใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์โดยอดีตนั้นมีการใช้โมเดล 2 แบบคือ Atomistic Model และ Continuum Model ซึ่ง Model ทั้ง 2 แบบนี้มีข้อดีและข้อด้อยต่างกันคือ Atomistic Model จะต้องใช้เวลาในการประมวลผลนานแต่จะให้ความละเอียดสูงตรงข้ามกับ Continuum Model ที่จะมีการประมวลผลที่รวดเร็วกว่าแต่ให้ความละเอียดต่ำ เห็นเพียงพื้นผิวเท่านั้น ไม่เห็นที่อยู่ตำแหน่งที่แท้จริงของอะตอมโดย Phase Field Crystal Method ที่ใช้นี้จะเป็นการรวมกันของ Atomistic Model และ Continuum Model ซึ่งจะทำให้เกิดการประมวลผลเร็วกว่า Atomistic Model และมีความละเอียดที่สูงกว่าของ Continuum Model การศึกษาอะตอมของวัสดุโดย Phase Field Crystal Method จำเป็นต้องใช้โปรแกรม Matlab เข้ามาช่วย ซึ่งการศึกษาเริ่มด้วยการศึกษาสมการการแพร่โดยโปรแกรม Matlab ทั้งนี้เพื่อเป็นการฝึกฝนเพื่อให้เกิดความสามารถในการใช้โปรแกรม Matlab เท่านั้น เมื่อมีความชำนาญมากขึ้นจึงเริ่มศึกษาสมการของ Phase Field Crystal และเขียน Code ที่ใช้โปรแกรม Matlab เพื่อแก้ไขสมการของ Phase Field Crystal หลังจากนั้นจึงเริ่มทำการทดสอบการ Simulate Grain Boundary เพื่อให้เห็นภาพของเนื้อวัสดุและในขณะเดียวกันได้ทำการศึกษาทฤษฎีเกี่ยวกับการแข็งตัวของขอบเกรน และจึงนำความรู้ทั้งหมดมาวิเคราะห์การแข็งตัวของขอบเกรนโดยแบบจำลอง Phase Field Crystal

Thesis Title	A Study of Grain Boundary Interaction Using the Phase Field Crystal Method	
Thesis Advisee	Ms. Pasita	Somsongkul
	Mr. Saksit	Sukkasem
	Mr. Siwakorn	Noree
Degree	Bachelor of Engineering in Industrial Engineering King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang	
Academic year	2013	
Thesis Advisor	Dr. Nirand	Pisutha-Arnond

### Abstract

The aim of this project is to study grain boundary by using the phase field crystal method (PFC). The PFC method is a computational tool that can be used to study material behaviors. The PFC method is advantageous over two conventional class of material modeling tools: atomistic models and continuum models. The atomistic model, despite being accurate in describing material behaviors, can be too computationally expensive. The continuum model, while capable of describing experimentally observable phenomena, is too simplistic when dealing physics at atomic scales. The PFC method takes the advantage from both classes of model; it has atomic resolution while operating on the experimentally observable time scale. We first familiarized ourselves with computational experiments by coding a diffusion equation in Matlab, running the simulation and visualizing the results. The diffusion equation is a good case study because of its similar form of equations to those of the PFC equations. Then, we coded the PFC equation in Matlab and study the grain boundary behavior.

## กิตติกรรมประกาศ

ปริญญาานิพนธ์เรื่อง การศึกษาการแข็งตัวของขอบเกรนโดยวิธี Phase Field Crystal สามารถสำเร็จลุล่วงได้ด้วย ความกรุณาของ ดร. นิรันดร์ พิสุทธิอาณันทอาจารย์ผู้ควบคุมปริญญาานิพนธ์ที่ได้ให้โอกาสในการศึกษาปริญญาานิพนธ์ฉบับนี้ รวมทั้งให้แนวคิด ความรู้ คำเสนอแนะ ความช่วยเหลือ ตลอดจนแก้ไขข้อบกพร่องต่างๆของปริญญาานิพนธ์ฉบับนี้ด้วยความเอาใจใส่เสมอมา ทำให้สามารถปริญญาานิพนธ์ฉบับนี้เสร็จสมบูรณ์และบรรลุได้ตามเป้าหมาย คณะผู้ศึกษาจึงขอกราบขอบพระคุณเป็นอย่างสูง

ขอขอบพระคุณบิดา มารดา และทุกคนในครอบครัวที่ให้การสนับสนุน รวมทั้งเป็นกำลังใจตลอดระยะเวลาในการศึกษาปริญญาานิพนธ์

ขอขอบพระคุณอาจารย์ประจำสาขาวิชาวิศวกรรมอุตสาหกรรมทุกท่าน สำหรับความรู้ คำแนะนำต่าง โดยเฉพาะอย่างยิ่งอาจารย์ภรณ์ชัยและอาจารย์วิภู ให้ความกรุณาติดตามความคืบหน้าของปริญญาานิพนธ์ฉบับนี้ตั้งแต่แรกเริ่ม ให้คำเสนอแนะแนวทางในการศึกษาปริญญาานิพนธ์ฉบับนี้ตามลำดับ รวมถึงชี้ให้เห็นถึงข้อบกพร่องของการศึกษา จนทำให้ปริญญาานิพนธ์ฉบับนี้เสร็จสมบูรณ์

ขอขอบคุณเพื่อนๆ สาขาวิศวกรรมอุตสาหกรรมทุกคน สำหรับความช่วยเหลือและกำลังใจที่มอบให้ตลอดมา

นางสาวภาชิตา	สมสงกุล
นายศักดิ์สิทธิ์	สุขเกษม
นายศิวกร	โนรี

## สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อภาษาไทย.....	ก
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ.....	ข
กิตติกรรมประกาศ.....	ค
สารบัญ.....	ง
สารบัญรูป.....	ช
<b>บทที่1 บทนำ</b>	
1.1 กล่าวนำ.....	1
1.2 วัตถุประสงค์ของปริญญาานิพนธ์.....	1
1.3 ขอบเขตของปริญญาานิพนธ์.....	1
1.4 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ.....	2
<b>บทที่2 ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง</b>	
2.1 กล่าวนำ.....	3
2.2 COMPUTATIONALMETHODS.....	3
2.2.1 Atomistic model.....	3
2.2.2 Continuum model.....	4
2.3 PHASE FIELD CRYSTAL MODEL.....	4
2.3.1 ลักษณะเฉพาะของ Phase Field Crystal Method.....	5
2.3.1.1 Atomic resolution.....	5
2.3.1.2 Diffusive time scale.....	5
2.3.2 สมการที่นำมาใช้สำหรับ Phase Field Crystal Method.....	5
2.3.2.1 Phase Field Crystal Equation.....	5
2.3.2.2 Evolution Equation.....	5
2.3.3 Two-dimension phase diagram.....	6
2.4 เกรนและขอบเกรน.....	7
2.4.1 การแข็งตัว (solidification) ของโลหะ หรือ โลหะผสม.....	7
2.4.1.1 นิวคลีเอชัน(nucleation).....	7
2.4.1.2 การเติบโตของนิวคลีไอ.....	7
2.5 MATLAB.....	7
2.5.1 การทำงาน.....	7

## สารบัญ (ต่อ)

	หน้า
<b>บทที่3</b> <b>วิธีการดำเนินงาน</b>	
3.1    กล่าวนำ.....	8
3.2    การศึกษาข้อมูลเบื้องต้นโดยใช้สมการการแพร่.....	8
3.2.1    Diffusion Equation .....	8
3.3    การศึกษาวิธีการทำแบบจำลอง Phase Field Crystal.....	9
3.3.1    Periodic boundary.....	9
3.4    การแปลงสมการตัวแปร เป็น สมการทางคอมพิวเตอร์.....	10
3.4.1    สมการการแพร่.....	11
3.4.2    สมการ Phase Field Crystal.....	11
3.4.3    สมการการหาค่า $\nabla^2$ .....	12
3.4.4    สมการอินทิเกรตค่า $\Phi$ .....	12
3.5    การอธิบาย Code ในโปรแกรม.....	12
3.5.1    การอธิบายตัวแปร.....	13
3.5.2    Main Code.....	14
3.5.3    Integrate_Yp Code.....	18
3.5.4    Update_boundary Code.....	20
3.5.5    Calculate_laplacian Code.....	21
<b>บทที่4</b> <b>ผลการทดลอง</b>	
4.1    กล่าวนำ.....	23
4.2    การมองแทบสีแสดงค่าความน่าจะเป็นที่เกิดอะตอม.....	23
4.3    ภาพจากการทดลอง.....	24
4.4    การเปรียบเทียบผลการทดลอง.....	38
<b>บทที่5</b> <b>สรุปและวิเคราะห์ผลการดำเนินงาน</b>	
5.1    สรุปผลการดำเนินงาน.....	40
5.1.1    ผลที่ได้รับ.....	40
5.2    ข้อเสนอแนะ.....	40
เอกสารอ้างอิง.....	41

## สารบัญรูป

	หน้า
รูปที่ 2.1 แสดงผลตัวอย่าง Atomistic model.....	4
รูปที่ 2.2 แสดงผลตัวอย่าง Continuum model.....	4
รูปที่ 2.3 Two-dimension phase diagram.....	6
รูปที่ 3.1 ผลจากสมการการแพร่ใน 1 มิติ.....	9
รูปที่ 3.2 ผลจากสมการการแพร่ใน 2 มิติ.....	9
รูปที่ 3.3 การทำ Ghost Cell ใน 1 แถว.....	10
รูปที่ 3.4 การทำ Ghost Cell ในรูปแบบ เมทริกซ์ 4x4.....	10
รูปที่ 3.5 Main Code.....	14
รูปที่ 3.6 ฟังก์ชัน Integrate_Yp.....	18
รูปที่ 3.7 ฟังก์ชัน Update_Boundary.....	20
รูปที่ 3.8 ฟังก์ชัน Calculate_Laplacian.....	21
รูปที่ 4.1 แทบสีแสดงค่าความน่าจะเป็นที่จะพบอะตอม.....	24
รูปที่ 4.2 ผลการทดลองที่ $t = 10,000$ .....	25
รูปที่ 4.3 ผลการทดลองที่ $t = 1,000,000$ .....	25
รูปที่ 4.4 ผลการทดลองที่ $t = 5,000,000$ .....	26
รูปที่ 4.5 ผลการทดลองที่ $t = 6,000,000$ .....	27
รูปที่ 4.6 ผลการทดลองที่ $t = 6,500,000$ .....	27
รูปที่ 4.7 ผลการทดลองที่ $t = 7,000,000$ .....	28
รูปที่ 4.8 ผลการทดลองที่ $t = 7,250,000$ .....	29
รูปที่ 4.9 ผลการทดลองที่ $t = 7,500,000$ .....	29
รูปที่ 4.10 ผลการทดลองที่ $t = 8,000,000$ .....	30
รูปที่ 4.11 ผลการทดลองที่ $t = 8,500,000$ .....	31
รูปที่ 4.12 ผลการทดลองที่ $t = 8,750,000$ .....	31
รูปที่ 4.13 ผลการทดลองที่ $t = 10,000,000$ .....	32
รูปที่ 4.14 ผลการทดลองที่ $t = 12,000,000$ .....	33
รูปที่ 4.15 ผลการทดลองที่ $t = 14,000,000$ .....	33
รูปที่ 4.16 ผลการทดลองที่ $t = 19,000,000$ .....	34
รูปที่ 4.17 ผลการทดลองที่ $t = 20,000,000$ .....	35
รูปที่ 4.18 ผลการทดลองที่ $t = 24,000,000$ .....	35
รูปที่ 4.19 ผลการทดลองที่ $t = 42,000,000$ .....	36

## สารบัญรูป (ต่อ)

	หน้า
รูปที่ 4.20 ผลการทดลองที่ $t = 42,050,000$ .....	37
รูปที่ 4.21 ผลการทดลองที่ $t = 42,100,000$ .....	37
รูปที่ 4.22 การเปรียบเทียบของผลการทดลองที่ $t = 4,000,000$ และ $6,000,000$ .....	38
รูปที่ 4.23 การเปรียบเทียบของผลการทดลองที่ $t = 6,000,000$ และ $10,000,000$ .....	38
รูปที่ 4.24 การเปรียบเทียบของผลการทดลองที่ $t = 10,000,000$ และ $19,000,000$ .....	39
รูปที่ 4.25 การเปรียบเทียบของผลการทดลองที่ $t = 19,000,000$ และ $42,100,000$ .....	39

# บทที่ 1

## บทนำ

### 1.1 กล่าวนำ

ในการศึกษาอะตอมของวัสดุจะทำโดยการทดลองในห้องทดลอง ซึ่งการทดลองในห้องทดลองนั้นใช้เวลาและงบประมาณในการทดลองมาก เราจึงนำโปรแกรมคอมพิวเตอร์เข้ามาช่วย ทั้งนี้เพื่อลดระยะเวลาและค่าใช้จ่ายในการทดลอง โดยวิธีที่เรานำมาใช้ได้แก่วิธี Phase Field Crystal ซึ่งเป็นทฤษฎีใหม่ที่ดึงข้อดีของ Atomistic Model และ Continuum Model มาใช้ ซึ่งได้แก่ความละเอียดของโมเดลและความรวดเร็วในการประมวลผล แต่วิธี Phase Field Crystal ก็ยังคงมีข้อจำกัดคือความเร็วในการประมวลผลยังด้อยกว่า Continuum Model รวมทั้งยังไม่สามารถให้ความละเอียดได้เท่ากับ Atomistic Model โดยแบบจำลองที่ได้จะเห็นเพียงพื้นผิวที่มีความน่าจะเป็นที่อะตอมจะอยู่มากเท่านั้น ไม่ใช่ตำแหน่งที่แท้จริงอะตอมเหมือนกับ Atomistic Model ซึ่งโครงการนี้มีวัตถุประสงค์เพื่อศึกษาแบบจำลอง Phase Field Crystal Method ในทางทฤษฎี และเพื่อทำการทดลองแบบ Simulation โดยใช้ Computer แทนการทดลองจริง โดยขอบเขตของโครงการได้แก่การศึกษาศาสตร์การแพร่และโปรแกรม Matlab ศาสตร์การของ Phase Field Crystal , เขียน Code ที่ใช้โปรแกรม Matlab เพื่อแก้ไขสมการของ Phase Field Crystal , ทดสอบการ Simulate Grain Boundary เพื่อให้เห็นภาพของเนื้อวัสดุ , ศึกษาทฤษฎีเกี่ยวกับการแข็งตัวของขอบเกรนและวิเคราะห์การแข็งตัวของขอบเกรนโดยแบบจำลอง Phase Field Crystal ซึ่งจะเป็นการพัฒนาความสามารถในการใช้โปรแกรม Matlab , ได้เกิดการเรียนรู้ลักษณะทางกายภาพที่เปลี่ยนแปลงไปของวัสดุรวมถึงสามารถใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์เข้ามาช่วยในการสร้างแบบจำลองของอะตอมวัสดุเพื่อทดแทนการทดลองจริงในห้องทดลอง

### 1.2 วัตถุประสงค์ของปริญญานิพนธ์

- 1.2.1 เพื่อศึกษาแบบจำลอง Phase Field Crystal Method ในทางทฤษฎี
- 1.2.2 เพื่อทำการทดลองแบบ Simulation โดยใช้ Computer แทนการทดลองจริง

### 1.3 ขอบเขตของปริญญานิพนธ์

- 1.3.1 ศาสตร์การการแพร่และโปรแกรม MATLAB
- 1.3.2 ศาสตร์การของ Phase Field Crystal
- 1.3.3 เขียน Code ที่ใช้ในโปรแกรม MATLAB เพื่อแก้ไขสมการของ Phase Field Crystal
- 1.3.4 ทดสอบการ Simulate Grain Boundary เพื่อให้เห็นภาพของเนื้อวัสดุ
- 1.3.5 ศึกษาทฤษฎีเกี่ยวกับการแข็งตัวของขอบเกรน
- 1.3.6 วิเคราะห์การแข็งตัวของขอบเกรนโดยแบบจำลอง Phase Field Crystal

#### 1.4 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1.4.1 ได้เรียนรู้ลักษณะทางกายภาพที่เปลี่ยนแปลงไปของวัสดุ

1.4.2 สามารถใช้โปรแกรม MATLAB ได้

1.4.3 แบบจำลองนี้อาจช่วยในการทดแทนการทดลองทางวิทยาศาสตร์ของวัสดุ

## บทที่ 2

### ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง

#### 2.1 กล่าวนำ

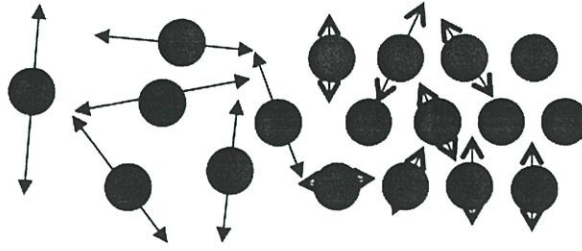
ในบทที่ 2 นี้จะเป็นการกล่าวถึงทฤษฎีที่เกี่ยวข้องกับการศึกษาการเติบโตของขอบเกรนโดยใช้วิธี Phase Field Crystal ทั้งหมด ซึ่งกล่าวถึงในส่วนของการศึกษาคุณสมบัติของวัสดุต่างๆด้วย วิธีทางคอมพิวเตอร์พื้นฐานได้แก่วิธี Atomistic model และวิธี Continuum model รวมถึงกล่าวถึงวิธี Phase Field Crystal ซึ่งเป็นวิธีที่ได้ใช้ในการศึกษาปริศยานิพนธ์เล่มนี้ นอกจากนี้ยังกล่าวถึงทฤษฎีของการเกิดเกรนและขอบเกรนของอะตอมของวัสดุไว้ด้วย เพื่อให้ง่ายต่อผู้สนใจในการศึกษาและเกิดความเข้าใจ

#### 2.2 COMPUTATIONAL METHODS

เป็นวิธีหนึ่งในการศึกษาคุณสมบัติต่างๆของวัสดุโดยแต่เดิมนั้นสามารถศึกษาคุณสมบัติต่างๆของวัสดุได้โดยการทดลองภายในห้องแลป ซึ่งจำเป็นต้องใช้ระยะเวลาในการทดลองที่นานและมีค่าใช้จ่ายในการทดลองสูง แต่ปัจจุบันมีการนำเทคโนโลยีทางคอมพิวเตอร์เข้ามาช่วย เพื่อเป็นการลดเวลาและงบประมาณในการศึกษาอะตอมของวัสดุที่จะใช้ผลิตชิ้นงานลง โดยการใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์นี้ยังสามารถใช้ทดสอบคุณสมบัติต่างๆของวัสดุทดแทนการทดลองจริงในห้องแลปได้ เนื่องจากให้ผลการทดลองที่มีความใกล้เคียงกันสูง ซึ่งนอกเหนือจากช่วยลดเวลาและงบประมาณ การใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์นี้ยังสามารถบอกคุณสมบัติบางประการของวัสดุที่การทดลองจริงในห้องแลปสามารถทำได้ยากอีกด้วยด้วย Computational Methods แบ่งเป็น 2 วิธี

##### 2.2.1 Atomistic model

เป็นการศึกษาการเปลี่ยนแปลงของเนื้อวัสดุ โดยเป็นวิธีที่จะศึกษาการเปลี่ยนแปลงของอะตอมภายในระยะเวลาหนึ่งๆ ซึ่ง Atomistic simulation มีข้อเด่นคือเป็นการจำลองลักษณะการเปลี่ยนแปลงของอะตอมที่มีความละเอียดสูงมาก คือจะแสดงการเปลี่ยนแปลงต่อหนึ่งหน่วยเวลาได้ถึงระดับหน่วยของ fs.(femto second) หรือ nn.(nanosecond) โดยนอกจาก Atomistic simulation จะให้ความละเอียดที่สูงมากแล้วยังให้ความถูกต้องแม่นยำที่สูงมากเช่นเดียวกัน แต่ Atomistic simulation ก็จำเป็นต้องใช้ระยะเวลาในการศึกษาที่นานมากด้วย เพราะว่าในธรรมชาติแล้วนั้น อะตอมจะมีการสั่นตัวอยู่ตลอดเวลาโดยการจำลองลักษณะการเปลี่ยนแปลงของอะตอมในระยะเวลาเพียงแค่ 1 fs.(femtosecond) อาจต้องใช้เวลานานนับปี [REF. V.W.L Chan , N. Pisutha-Arnond , K.Thornton.The Phase-Field crystal Method : An Overview,Development,and Applications.]



รูปที่ 2.1 แสดงผลตัวอย่าง Atomistic model

### 2.2.2 Continuum model

เป็นการศึกษาการเปลี่ยนแปลงของเนื้อวัสดุ โดยวิธีสังเกตจากคุณสมบัติต่างๆที่เปลี่ยนไป ว่ามีการเปลี่ยนแปลงไปอย่างไรแล้วจึงนำมาใช้ทำนาย จะไม่มีการศึกษาถึงในระดับของอะตอม ซึ่งวิธีการนี้เป็นวิธีที่ไม่จำเป็นต้องใช้ระยะเวลาในการศึกษานานมากนัก แต่ก็ให้ผลได้ระดับที่คนทั่วไปสนใจ คือแสดงผลในหน่วยของ ชั่วโมง หรือนาที ซึ่งวิธีนี้ไม่สามารถบอกความละเอียดที่มากได้ อาจไม่สามารถทำนายอะไรได้เพิ่มเติมนอกเหนือจากเดิมที่ทราบอยู่แล้ว โดยให้ความถูกต้องที่ต่ำแต่ก็ยังเป็นวิธีที่ถือว่าพอจะใช้งานได้



รูปที่ 2.2 แสดงผลตัวอย่าง Continuum model

จะเห็นได้ว่าทั้ง 2 วิธีนี้ทั้งข้อดีและข้อด้อยต่าง ๆ กัน คือ Atomistic Model จำเป็นต้องใช้เวลาในการประมวลผลนาน แต่จะได้ความละเอียดสูง ผิดกับ Continuum Model ที่จะมีการประมวลผลที่รวดเร็ว แต่จะเห็นเพียงแค่พื้นผิวธรรมดา ไม่เห็นพื้นที่ของอะตอมที่อยู่ในเนื้อวัสดุ จึงเกิดวิธีการใหม่ คือ “Phase Field Crystal model” [REF. V.W.L Chan , N. Pisutha-Arnond , K.Thornton.The Phase-Field crystal Method : An Overview,Development,and Applications.]

### 2.3 PHASE FIELD CRYSTAL MODEL

เป็นเทคนิคใหม่ในการศึกษาการแข็งตัวของผลึกโดยพิจารณาจาก free energy ในรูปแบบของ functional ซึ่ง free energy ในที่นี้คือพลังงานอย่างน้อยที่สุดที่จะพบอะตอม โดยการลดพลังงานนี้จะนำไปสู่การศึกษาการเปลี่ยนรูปร่างและการแข็งตัวของผลึกโดยหัวใจของกระบวนการนี้คือการจำลองการเจริญเติบโตของเกรน , dendritic , การแข็งตัวยูเทคติก รวมถึงการเจริญเติบโตของการสร้างแผ่นฟิล์มบางของผลึก ซึ่งสามารถนำแบบจำลองนี้ ไปใช้เพื่อศึกษาพฤติกรรมและคุณสมบัติของวัสดุ ของทั้งสารบริสุทธิ์และโลหะผสม [REF. N.Provatas ,J.A. Dantzig ,B.Athreya ,P.Chan ,POStefanovic ,N.Goldenfeld ,and K.R.Elder.Using the Phase-Field Crystal Method in the Multi-Scale Modeling of Microstructure Evolution.]

### 2.3.1 ลักษณะเฉพาะของ Phase Field Crystal Method

Phase Field Crystal Method เป็นวิธีการศึกษาคุณสมบัติของวัสดุโดยใช้วิธีทางคอมพิวเตอร์วิธีการใหม่ ที่เกิดจากการประยุกต์ของสองวิธีเดิมเข้าด้วยกัน ได้แก่ วิธี Atomistic model และวิธี Continuum model ซึ่งทำให้ Phase Field Crystal Method นั้นเกิดเป็นจุดเด่นเฉพาะตัว 2 ประการ คือ

#### 2.3.1.1 Atomic resolution

คือมีความละเอียดเชิงของอะตอมซึ่งเราสามารถจำลองการ interaction ของอะตอมได้ โดยที่การที่เราเห็นอะตอมในรูปของอะตอม ไม่ใช่เห็นเป็นเพียงพื้นผิวที่ต่อเนื่อง

#### 2.3.1.2 Diffusive time scale

คือ Phase Field Crystal Method สามารถแสดงผลอยู่ในช่วงใดของเวลาก็ได้ ซึ่งเวลานั้นสามารถที่จะเปลี่ยนได้ขึ้นอยู่กับระบบที่เรา กำลังศึกษา ว่าเรากำลังศึกษาระบบอะไรอยู่

### 2.3.2 สมการที่นำมาใช้สำหรับ PFC

สมการของ Phase Field Crystal เป็นเวอร์ชันหนึ่งของสมการการแพร่ โดยไม่ได้มีที่มาจากสมการทางฟิสิกส์แต่มีที่มาจากสมการแพทเทิน ซึ่งมีคนศึกษาการเกิดแพทเทินที่เกิดขึ้นตามธรรมชาติไว้เพื่ออธิบายการเกิดแพทเทินตามธรรมชาติต่างๆ เช่นการกระจายตัวของน้ำเมื่อมีการตกของก้อนหิน , การแข็งตัวเป็นผลึกของแกร็ดทิมะ ว่าเหตุการณ์ต่างๆเหล่านี้เกิดขึ้นได้อย่างไรโดยนำสมการแพทเทินเข้ามาใช้เนื่องจากว่ามีความเหมือนกับลักษณะของอะตอมที่อยู่ใน Crystal สมการที่นำมาใช้สำหรับ PFC มี 2 สมการ ได้แก่

#### 2.3.2.1 Phase Field Crystal Equation

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla^2 (\omega (\nabla^2) \psi + \psi^3)$$

#### 2.3.2.2 Evolution Equation

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r})}{\partial t} = \Gamma \nabla^2 \frac{\delta \mathcal{F}_s(\phi(\mathbf{r}))}{\delta \phi(\mathbf{r})} + \eta$$

สมการนี้ใช้ศึกษาการเปลี่ยนแปลงของ  $\Phi$  ที่เปลี่ยนไปตามเวลา โดยการเปลี่ยนแปลงนี้เป็นการเปลี่ยนแปลงที่ลดพลังงานของระบบโดย

$\Phi$  คือความน่าจะเป็นที่จะมีอะตอม (ซึ่ง  $\Phi$  ถูกบังคับโดยสมการการแพร่)

$F_s$  คือพลังงานต่อหน่วยพื้นที่

$\nabla$  คือตัวเปลี่ยนเวลาให้เข้ากับสเกลที่ต้องการ )

$g$  คือค่าคงที่

$\alpha$  คือค่าคงที่

$\lambda$  คือค่าคงที่

$\Gamma$  คือค่าคงที่

$q_0$  คือค่าคงที่

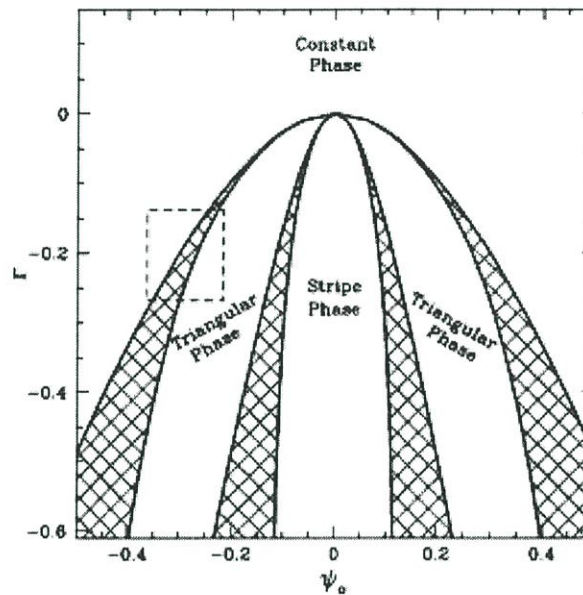
$\omega$  คือฟังก์ชันตัวดำเนินการ

$r$  คือค่าคงที่ ที่บอกถึงอุณหภูมิ

ซึ่งพจน์ที่เป็น local term (ที่ไม่มี  $\nabla^2$ ) เป็นพจน์ที่ทำให้ระบบเข้าสู่ของเหลว ( $\Phi$  เป็นฟังก์ชันที่เป็นค่าคงที่)

และ Non-local term เป็นพจน์ที่ทำให้  $\Phi$  กลายเป็นของแข็ง เพราะ  $\Phi$  จะกลายเป็นค่าที่ไม่เป็นฟังก์ชันคงที่ (มีลักษณะเป็นคาบ 'periodic function')

### 2.3.3 Two-dimension phase diagram



รูปที่ 2.3 Two-dimension phase diagram

จากรูป Two-dimension phase diagram แสดงความสัมพันธ์ของสถานะในแต่ละช่วงที่เกิดขึ้นจากการคำนวณด้วยสมการที่ได้มาจากสมการ free energy

ในการเขียน Code สำหรับโปรแกรม Matlab เพื่อจำลองการเติบโตของ Grain Boundary เราจะเลือกใช้ค่าพิกัดของ Two-dimension phase diagram ในบริเวณของ Triangular Phase เนื่องจากมีโครงสร้างเป็นหกเหลี่ยม ซึ่งมีความใกล้เคียงกับโครงสร้าง 2 มิติ [REF. N.Provatas ,J.A. Dantzig ,B.Athreya ,P.Chan ,P.Stefanovic ,N.Goldenfeld ,and K.R.Elder.Using the Phase-Field Crystal Method in the Multi-Scale Modeling of Microstructure Evolution.]

## 2.4 เกรนและขอบเกรน

### 2.4.1 การแข็งตัว (solidification) ของโลหะ หรือ โลหะผสม

การแข็งตัว (solidification) ของโลหะ หรือ โลหะผสม มี 2 ขั้นตอน คือ

#### 2.4.1.1 นิวเคลียส(nucleation)

เป็นขั้นตอนการเกิดนิวเคลียส (nuclei) ในมวลโลหะหลอมเหลวสูง เป็นปรากฏการณ์ที่อะตอมของโลหะที่หลอมเหลว เกาะเป็นอนุภาคเล็กๆ และโตขึ้นเรื่อยๆ จนกระทั่งอนุภาคมีขนาดวิกฤต (critical size) และก่อกลายเป็นนิวเคลียส (nucleus) ที่เสถียร และเป็นผลึกต่อไปเรียกว่า "เกรน" โดยผลึกจะเริ่มแข็งตัวจากนิวเคลียสก่อน โดยจะเกิดขึ้นพร้อมกันหลายจุด เมื่อผลึกได้มีขนาดโตขึ้นเรื่อยๆ จะมีการจับตัวของผลึกเหล่านั้นตามรูปทรงผลึกของโลหะชนิดนั้นๆ โดยการจับรวมตัวของผลึกเหล่านี้จะเกิดขึ้นพร้อมกับการเย็นตัวของโลหะ เรียกกระบวนการเช่นนี้ว่า "dendrite" การเติบโตนี้จะแผ่ออกไปจนกว่าโลหะจะแข็งตัวหมดแล้ว

#### 2.4.1.2 การเติบโตของนิวเคลียส

เมื่อเกิดนิวเคลียสขึ้น อะตอมภายในผลึกจะจับเรียงตัวกันอย่างเป็นระเบียบ เรียกโลหะที่ประกอบเป็นผลึกนี้ว่า โลหะหลายผลึก โดยแต่ละผลึกนี้เรียกว่าเกรน ผิวสัมผัสระหว่างผลึกเรียกว่า ขอบเกรน จำนวนนิวเคลียสมีผลต่อจำนวนผลึกในโลหะ ถ้ามีน้อยเกรนที่ได้จะหยาบและใหญ่ แต่ถ้าจำนวนผลึกในโลหะมีมากเกรนที่ได้นั้นจะละเอียด

## 2.5 MATLAB

แมตแล็บ (MATLAB) เป็นซอฟต์แวร์ใช้สำหรับการคำนวณและการเขียนโปรแกรม ที่มีความสามารถตั้งแต่ การพัฒนาอัลกอริธึม การสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ และการทำซิมูเลชันของระบบ การสร้างระบบควบคุม และโดยเฉพาะเรื่อง image processing และ wavelet การสร้างเมตริกซ์ ผลิตโดย บริษัทแมตเวิร์กส์

แมตแล็บเป็นโปรแกรมที่ใช้กันอย่างแพร่หลายในวงกรวิทยาศาสตร์และ วิศวกรรม MATLAB ย่อมาจาก Matrix Laboratory แมตแล็บได้เริ่มต้น ขึ้นเพื่อต้องการให้เราสามารถแก้ปัญหาตัวแปรที่มีลักษณะเป็นเมตริกซ์ได้ง่ายขึ้น แมตแล็บ

### 2.5.1 การทำงาน

แมตแล็บสามารถทำงานได้ทั้งในลักษณะของการเขียนคำสั่งเข้าไปที่ละคำสั่ง เพื่อให้แมตแล็บประมวลผลไปเรื่อยๆ หรือสามารถที่จะรวบรวมชุดคำสั่งเหล่านั้นเป็นโปรแกรมก็ได้ โดยในการเก็บข้อมูลนั้น ข้อมูลทุกตัวจะถูกเก็บใน ลักษณะของ แถวลำดับ คือในแต่ละตัวแปรจะได้รับการแบ่งเป็นส่วนย่อยเล็กๆ ซึ่งการใช้ตัวแปรเป็นแถวลำดับ จะทำให้เราสามารถทำงานได้รวดเร็วขึ้น

# บทที่ 3

## วิธีการดำเนินงาน

### 3.1 กล่าวนำ

ในบทที่ 3 นี้จะเป็นการกล่าวถึงวิธีการทำงานตั้งแต่เริ่มทำงานตอนแรกไปจนถึงส่วนสุดท้ายในการทำงานซึ่งจะมีการอธิบายถึงส่วนต่างๆมากมายในสิ่งที่ได้ทำมาทั้งหมดว่าสิ่งที่ทำมานั้นจำเป็นต้องทำแบบนี้เพื่ออะไร ทำไปเพื่ออะไร รวมไปถึงการอธิบายการทำงานใน Code ที่ได้เขียนขึ้นมาใช้ และ ความหมายของฟังก์ชันเสริมและ ตัวแปรต่างๆที่ได้กำหนดขึ้นมา เพื่อที่จะทำให้เขียน Code ขึ้นมาได้อย่างสมบูรณ์ยิ่งขึ้น

### 3.2 การศึกษาข้อมูลเบื้องต้นโดยใช้สมการการแพร่

ในส่วนนี้จะทำการศึกษาวิธีการ Code Matlab จากสมการการแพร่ เพื่อให้คุ้นเคยกับการใช้โปรแกรมและรู้จักกับคำสั่งต่างๆที่ต้องใช้ในการทำสมการ Phase Field Crystal ต่อไป เนื่องจากสมการการแพร่ มีรูปแบบของสมการที่คล้ายคลึงกับสมการที่จะนำไปใช้ในการทำ Phase field crystal

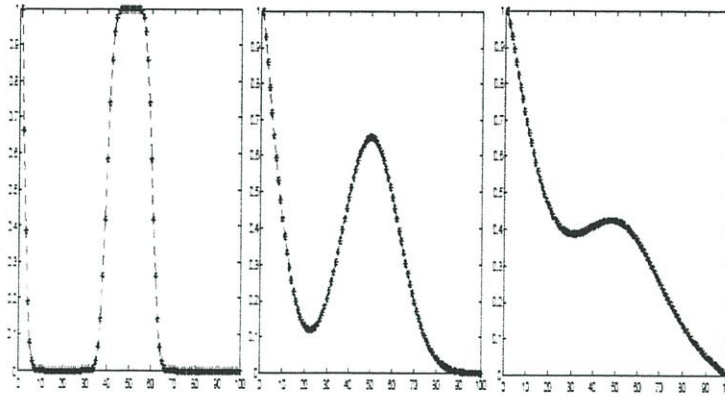
#### 3.2.1 Diffusion Equation

เนื่องจากโปรแกรม Matlab เป็นโปรแกรมที่ไม่เคยศึกษาการใช้งานและการเขียนโปรแกรมมาก่อน จึงได้เริ่มทำการศึกษาการเขียนโปรแกรมในเบื้องต้นจากการทำ Simulation ของสมการการแพร่ของความเข้มข้นในแบบ 1 มิติ โดยมีแกนในแนวนอน คือตำแหน่งของจุดที่สังเกต และ แกนแนวตั้งคือค่าความเข้มข้นโดยสมการที่เราใช้คือ

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla^2 c$$

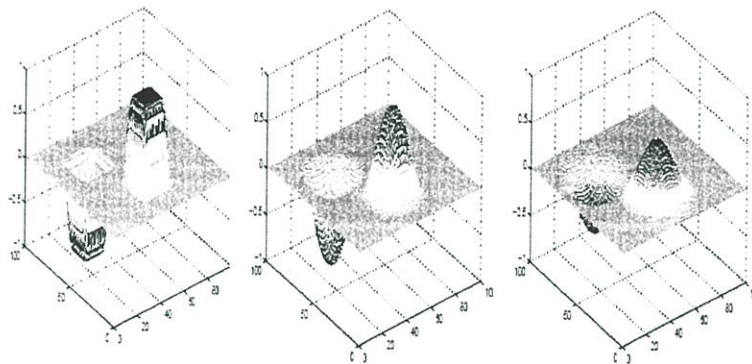
ซึ่งมีความใกล้เคียงกับสมการ PFC นั่นก็คือสมการ

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla^2 (\omega (\nabla^2) \psi + \psi^3)$$



รูปที่ 3.1 ผลจากสมการการแพร่ใน 1 มิติ

ในเวลาต่อมาได้ศึกษาวิธีการเขียนโปรแกรมเพิ่มเติมจากสมการการแพร่ในแบบ 2 มิติโดยมีแกนแนวนอนคือตำแหน่งของจุดที่สังเกต และแกนแนวตั้งเป็นค่าความเข้มข้น



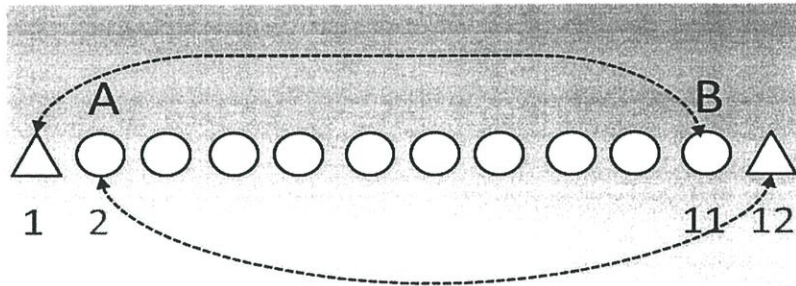
รูปที่ 3.2 ผลจากสมการการแพร่ใน 2 มิติ

จากภาพ จะเห็นได้ว่า กราฟที่เกิดขึ้นมาในตอนแรก จะมีค่าความเข้มข้นที่ต่างกันมาก แต่เมื่อเวลาเปลี่ยนไป จะเห็นได้ว่าค่าความเข้มข้นในจุดต่างๆ พยายามที่จะปรับตัวให้สมดุลกันมากขึ้น หรือก็คือ การลด Entropy ของระบบ

### 3.3 การศึกษาวิธีการทำแบบจำลอง Phase Field Crystal

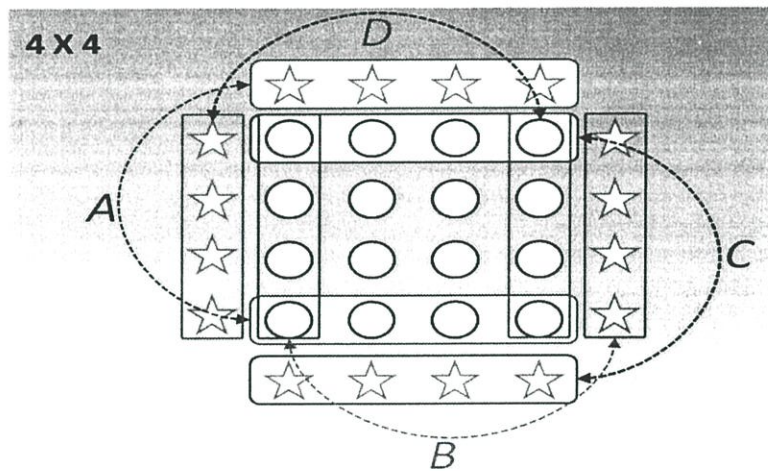
#### 3.3.1 Periodic boundary

เป็นการจำลองอะตอมที่เรียงตัวกันเป็นคาบ เพื่อกำจัดขอบเขตของการวาดกราฟที่ได้ให้ต่อเนื่องกันไป แม้จะสุดเขตของการมองเห็นจากภาพแต่อะตอมตัวสุดท้ายในดำนั้น ก็จะไปปรากฏเป็นอะตอมตัวแรกในอีกด้านหนึ่งของภาพเสมอ เป็นการดึงข้อมูลจากจุดที่เลยขอบเขตที่สามารถมองเห็นไปแล้วมาแสดงผลในจุดแรกในฝั่งตรงกันข้าม



1<sup>st</sup> = B = 11<sup>th</sup>  
 2<sup>nd</sup> = A = 12<sup>th</sup>

รูปที่ 3.3 การทำ Ghost Cell ใน 1 แถว



รูปที่ 3.4 การทำ Ghost Cell ในรูปแบบ เมทริกซ์ 4x4

จากรูปที่ 3.4 จะเห็นว่า รูปดาวที่เกิดขึ้นรอบๆ จะไม่ใช่ตัวที่แสดงผลในกรอบที่เราสังเกต แต่จะเป็น Ghost Cell ที่สมมติขึ้นมาเพื่อที่จะทำให้เกิดขอบเขตอนันต์ หรือ periodic boundary ในโปรแกรมของเรา ยกตัวอย่างแถวรูปดาวด้านขวา จะมีข้อมูลที่เท่ากับแถววงกลมแนวตั้งแถวแรก ตามรอยเส้นประตัวอักษร B ที่ชี้ถึง แถวรูปดาวและแถววงกลมทั้ง 2 แถวซึ่งเช่นเดียวกับเส้นประ A C และ D ที่ชี้แถวที่มีข้อมูลเท่ากัน สรุปได้ว่าแถวของวงกลมแถวแรกด้านใดก็ตาม จะมีค่าเท่ากับแถวรูปดาวที่ขนานกันอยู่ในฝั่งตรงข้ามเสมอ

### 3.4 การแปลงสมการตัวแปร เป็น สมการทางคอมพิวเตอร์

การทำงานในครั้งนี้ได้ใช้สมการทางคณิตศาสตร์ในการคำนวณค่าของระบบ แต่โปรแกรม Matlab ไม่สามารถที่จะประมวลผลจากการใส่สมการทางคณิตศาสตร์ลงไป ใน Code ได้ จึงต้องทำการแปลงสมการทางคณิตศาสตร์เหล่านั้นมาเป็นสมการที่คอมพิวเตอร์สามารถที่จะอ่านค่า และ ประมวลผลออกมาได้

### 3.4.1 สมการการแพร่

สมการการแพร่ที่ใช้คือ  $\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla^2 c$  กำหนดให้  $c$  ขึ้นอยู่กับค่า  $(t, x)$  คือ  $c(t_j, x_i) = c_i^j$   
สมการที่ได้คือ

$$\frac{c_i^{j+1} - c_i^j}{\Delta t} = \frac{c_{i+1} + c_{i-1} - 2c_i}{(dx)^2}$$

เนื่องจากว่าต้องการหาค่า  $c_i^{j+1}$  จึงทำการย้ายข้างสมการสมการใหม่ที่ได้คือ

$$c_i^{j+1} = \frac{\Delta t}{(dx)^2} (c_{i+1} + c_{i-1} - 2c_i) + c_i^j$$

ซึ่งก็คือการหาค่า Yp1

### 3.4.2 สมการ Phase Field Crystal

สมการหลักคือ  $\frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla^2 (\omega(\nabla^2)\psi + \psi^3)$  ก่อนอื่นต้องทำการแปลงสมการซึ่งจะได้ว่า

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \nabla^2 ([r + (1 + \nabla^2)^2]\psi + \psi^3) \\ &= \nabla^2 ([r + 1 + 2\nabla^2 + \nabla^4]\psi + \psi^3) \\ &= \nabla^2 [r + 1 + 2\nabla^2 + \nabla^4]\psi + \nabla^2(\psi^3) \\ &= (\nabla^2 r)\psi + (\nabla^2)\psi + [\nabla^2(2\nabla^2)]\psi + [\nabla^2(\nabla^4)]\psi + (\nabla^2)\psi^3 \\ &= r(\nabla^2\psi) + \nabla^2\psi + 2(\nabla^4\psi) + (\nabla^6\psi) + (\nabla^2)\psi^3 \\ &= \nabla^2\psi(r + 1) + 2(\nabla^4\psi) + (\nabla^6\psi) + (\nabla^2)\psi^3 \end{aligned}$$

ในบรรทัดนี้จะเห็นได้ว่าในCodeนั้นสมการนี้คือค่าตัวแปรAซึ่งใน Codeที่ถูกเขียนในรูปสมการทางคอมพิวเตอร์ดังนี้

$$A = \text{Lap2} \cdot (r+1) + 2 \cdot (\text{Lap4}) + \text{Lap6} + \text{Lap2Y3}$$

จากสมการค่า Lap2 =  $\nabla^2$ , Lap4 =  $\nabla^4$ , Lap6 =  $\nabla^6$ , Lap2Y3 =  $(\nabla^2)\psi^3$  จะเห็นว่าค่า  $\psi$  จะไม่มีตัวแปรในCode เนื่องจากเราได้ใส่ค่า  $\psi$  ในการคำนวณแต่แรกอยู่แล้วโดยการหาค่า Yp1 ต่อไปจะต้องใช้ differential Algebra โดยใช้ Forward Different และ Central Different จะได้สมการใหม่ที่ได้คือ

$$\frac{\psi_{i,j}^{n+1} - \psi_{i,j}^n}{dt} = (\nabla^2\psi(r + 1) + 2(\nabla^4\psi) + (\nabla^6\psi) + (\nabla^2)\psi^3)^n$$

ซึ่งในสมการ PFC นี้สิ่งที่ต้องการจะหาก็คือค่า  $\psi_{i,j}^{n+1}$  ซึ่งตัวแปรนี้ก็คือตัวที่บ่งบอกถึงความน่าจะเป็นที่จะพบเจอกับอะตอมในเวลาต่อไป หรือคือค่า Yp1 ใน Code จึงทำการจัดสมการใหม่จะได้ว่า

$$\psi_{i,j}^{n+1} = dt \cdot (\nabla^2\psi(r + 1) + 2(\nabla^4\psi) + (\nabla^6\psi) + (\nabla^2)\psi^3)^n + \psi_{i,j}^n$$

โดยใน Code ที่เขียนนั้นคือ

$$Yp1 = dt \cdot A + Yp$$

จากสมการจะเห็นว่าค่า Yp1 =  $\psi_{i,j}^{n+1}$  และค่า A ก็เป็นตัวแปรเก็บค่าของสมการก่อนหน้านี้ และ Yp =  $\psi_{i,j}^n$

### 3.4.3 สมการการหาค่า $\nabla^2$

จากสมการที่ว่า  $\nabla^2 \Phi = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}$  ในการคำนวณเราจะแยกเป็น 2 พจน์ ก็คือ พจน์  $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2}$  และ  $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}$  ต่อมาจึงทำการแทนค่าของตัวแปรทั้ง 2 พจน์นั้นเข้ามาโดยเริ่มจากพจน์แรกคือ

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = \frac{\Phi_{j+1} + \Phi_{j-1} + 2\Phi_j}{(dy)^2}$$

และ พจน์ต่อมาคือ

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = \frac{\Phi_{i+1} + \Phi_{i-1} + 2\Phi_i}{(dx)^2}$$

ต่อเนื่งมาจากสมการแรกเมื่อนำมาแทนค่าลงไปแล้วเราจะได้สมการใหม่คือ

$$\nabla^2 \Phi = \frac{\Phi_{i+1,j} + \Phi_{i-1,j} + \Phi_{i,j+1} + \Phi_{i,j-1} - 4\Phi_{i,j}}{(dx)^2}$$

จะเห็นว่า  $dy$  ได้หายไปเพราะว่าค่าของ  $dx$  และ  $dy$  มีค่าเท่ากันจึงนำมารวมกันเป็นค่า  $dx$  เพียงค่าเดียว ซึ่งใน Code นั้นจะแสดงอยู่ในรูปของ

$$\text{out}(i,j) = (A(i+1,j) + A(i-1,j) + A(i,j+1) + A(i,j-1) - 4*A(i,j))/dx^2$$

จะเห็นว่าค่าตัวแปร  $A = \Phi$

### 3.4.4 สมการอินทิเกรตค่า $\Phi$

เนื่องจากต้องการจะหาค่าเฉลี่ยของค่า  $\Phi$  เพื่อตรวจสอบความถูกต้องของผลที่ได้ สมการที่ใช้ในการคำนวณก็คือ

$$\bar{\Phi} = \frac{1}{A} \int \int \Phi(x,y) dx dy$$

โดยจะเริ่มอินทิเกรตจากแกน  $Y$  ซึ่งจะได้สมการว่า

$$\int_a^b f(y) (dy) = \frac{b-a}{2N} ( f(y_1) + (2(f(y_2) .. f(y_{n-1}))) + f(y_n) )$$

ในสมการในคอมพิวเตอร์จะเขียนได้ว่า

$$F(i) = ((by - ay)/(2*ny)) * ( z(i,1) + s + z(i,ny+1) )$$

จะเห็นว่าในตรงกลางระหว่าง  $( z(i,1) )$  กับ  $z(i,ny+1)$  มีตัวแปร  $s$  อยู่ตรงกลาง ซึ่งเป็นตัวแปรเก็บค่าของ  $2(f(y_2) .. f(y_{n-1}))$  ซึ่งได้เขียนไว้ใน Code คือ

$$s = s + (2*z(i,j))$$

หลังจากได้ผลออกมาแล้วจะทำการอินทิเกรตในแกน  $X$  ต่อไป โดยจะได้สมการดังนี้

$$\int_a^b f(x) (dx) = \frac{b-a}{2N} ( f(x_1) + (2(f(x_2) .. f(x_{n-1}))) + f(x_n) )$$

และได้ทำการแปรงค่าเป็นสมการทางคอมพิวเตอร์คือ

$$H = ((bx - ax) / (2*nx)) * ( F(1) + d + F(nx+1) )$$

จะเห็นว่ามีตัวแปร  $d$  ที่ใช้เก็บค่า  $2(f(x_2) .. f(x_{n-1}))$  ซึ่งได้เขียนไว้ใน Code คือ

$$d = d + (2 * F(i))$$

### 3.5 การอธิบาย Code ในโปรแกรม

ในโปรแกรมที่ได้เขียนขึ้นมาจะมีตัวแปรต่างๆอยู่มากมายที่ได้กำหนดขึ้นมาเองเพื่อที่จะทำให้ง่ายต่อการเขียน code ให้โปรแกรมทำงานได้ โดยจะเริ่มอธิบายว่าตัวแปรต่างๆนั้นมีความหมายว่าอย่างไร

### 3.5.1 การอธิบายตัวแปร

$n$  = จำนวนจุดที่ใช้วาดกราฟในมิติแกน X

$m$  = จำนวนจุดที่ใช้วาดกราฟในมิติแกน Y

$r$  = เป็นค่าคงที่ ที่บอกถึงค่าความเยื้องยวด

$dx$  = ค่าคงที่ ที่บอกถึงความห่างระหว่างจุดในแกน X และ แกน Y

$dt$  = ค่าคงที่ ที่บอกถึงความห่างระหว่างจุดในแกนเวลา

$t\_end$  = ค่า  $t$  สุดท้ายที่โปรแกรมจะทำงาน

$t\_print$  = จะทำการแสดงผลเป็นภาพ ทุกๆค่า  $t$  ที่หารด้วย ค่า  $t\_print$  ลงตัว

$t\_save$  = จะบันทึกข้อมูล ทุกๆค่า  $t$  ที่หารด้วยค่า  $t\_save$  ลงตัว

$resume$  = จะใช้ true เมื่อต้องการเริ่มต่อจากอันเก่า หรือ false เมื่อต้องการที่จะเริ่มใหม่

$t\_resume$  = ค่า  $t$  ของข้อมูลที่บันทึกไว้ เพื่อโหลดข้อมูลนั้นมารันผลต่อไป จะใช้ได้ เมื่อคำสั่ง  $resume$  เป็น true

$Yp$  = ค่าของความน่าจะเป็นที่จะเจออะตอม หรือค่าฟิ ( $\phi$ )

$Yp1$  = ค่าของความน่าจะเป็นที่จะเจออะตอมในเวลาต่อไป

$z$  = ความกว้างของเมทริกซ์ที่เราสนใจโดยมีความกว้างเป็นคาบเมื่อเริ่มที่จุดไหนจะไปจบที่จุดที่มีค่าเดียวกันเสมอ หรือก็คือ

Ghost Cell ตัวสุดท้าย

$Lap2$  = เป็นตัวแปรที่เก็บค่าจากการคำนวณตัว Laplacian ที่ยกกำลัง 2 อยู่

$Lap4$  = เป็นตัวแปรที่เก็บค่าจากการคำนวณตัว Laplacian ที่ยกกำลัง 4 อยู่

$Lap6$  = เป็นตัวแปรที่เก็บค่าจากการคำนวณตัว Laplacian ที่ยกกำลัง 6 อยู่

$Lap2Y3$  = เป็นตัวแปรที่เก็บค่าจากการคำนวณตัว Laplacian ที่ยกกำลัง 2 อยู่ และคูณกับค่า  $\phi$  ยกกำลัง 3 อยู่

$update\_boundary$  = เป็นฟังก์ชันเสริมที่ช่วยในการทำ Periodic Boundary ขึ้นมา

$integrate\_Yp$  = เป็นฟังก์ชันเสริมที่ช่วยในการอินทิเกรต ค่า  $Yp$  เพื่อตรวจสอบความถูกต้องของค่า  $Yp$  ที่ได้

$calculate\_laplacian$  = เป็นฟังก์ชันที่ใช้คำนวณ Laplacian ( $\nabla$ )

ในการเขียน Code มาทั้งหมดนั้นจะมีตัวโปรแกรมหลักที่มีชื่อว่า Main Code จะเป็น Code หลักของระบบคำสั่ง หรือตัวแปรต่างๆจะถูกเขียนไว้ในส่วนนี้เป็นเกือบทั้งหมด หลังจากนั้นจะเป็นการอธิบายฟังก์ชันเสริมที่เขียนเพิ่มขึ้นมาเพื่อให้ Main Code ไม่ยาวเกินไปจนอ่านยาก จึงใช้ตัวแปรเก็บค่าที่ได้จากฟังก์ชันต่างๆมาใช้แทน โดยจะมีด้วยกัน 3 ฟังก์ชันที่เพิ่มขึ้นมาคือฟังก์ชัน  $integrate\_Yp$ , ฟังก์ชัน  $update\_boundary$  และ ฟังก์ชัน  $calculate\_laplacian$  โดยทั้ง 3 ฟังก์ชันที่กล่าวถึงนี้เป็นสิ่งที่ช่วยให้เราไม่มีตัวแปรมากเกินไปใน Main Code เพราะจะทำให้สับสนได้ จึงได้ใช้ฟังก์ชันต่างๆมาใช้แทน โดยจะมีการเรียกใช้จากชื่อฟังก์ชันซึ่งจะสามารถเห็นได้จาก code ที่จะแสดงให้เห็นในส่วนต่อไป

วิธีอ่านจะอธิบายโดย ฝั่งซ้ายของตารางจะเป็นตัว Code จริงในการทำงาน และในด้านขวาของตาราง จะเป็นคำอธิบายการทำงาน และความหมายของ Code ที่เขียนในในบรรทัดนั้น

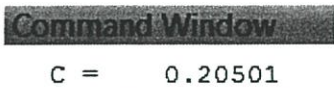
### 3.5.2 Main Code

```
1 - clear;clc;close;
2 - %Input
3 - n = 400; %Number of points in x-axis
4 - m = 400;
5 - r = -0.2;
6 - dx = 0.5;
7 - dt = 1e-5;
8 - t_end = 40000000;
9 - t_print = 50000;
10 - t_save = 500;
11 - resume = true;
12 - t_resume = 23841000;
13 - %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
14 - if resume
15 -     filename = ['Yp' num2str(t_resume) '.mat'];
16 -     load(filename)
17 -     t_start = t_resume;
18 - else
19 -     Yp = 0.3 + 0.05*rand( n+2, m+2) -0.12;
20 -     Yp1 = zeros ( n+2, m+2);
21 -     t_start = 1 ;
22 - end
23 - %Initialized array
24 - z = Yp(2:n+2 , 2:n+2);
25 - C = integrate_Yp(z,dx,dx);
26 -
27 - for t = t_start:t_end
28 -     Yp = update_boundary(Yp,n,m);
29 -     Lap2 = calculate_laplacian(Yp,dx,n,m);
30 -     Lap2 = update_boundary(Lap2,n,m);
31 -     Lap4 = calculate_laplacian(Lap2,dx,n,m);
32 -     Lap4 = update_boundary(Lap4,n,m);
33 -     Lap6 = calculate_laplacian(Lap4,dx,n,m);
34 -     Lap6 = update_boundary(Lap6,n,m);
35 -     Lap2Y3 = calculate_laplacian(Yp.^3,dx,n,m);
36 -     Lap2Y3 = update_boundary(Lap2Y3,n,m);
37 -     A = Lap2.*(r+1) + 2.*(Lap4) + Lap6 + Lap2Y3;
38 -     Yp1 = dt.*A + Yp;
39 -     Yp = Yp1;
40 -
41 -     if mod(t,t_print) == 0
42 -         contour(Yp1);
43 -         colorbar
44 -         axis equal tight
45 -         title(['t = ' num2str(t)])
46 -         fprintf('t = %i \n', t)
47 -         pause(0.2);
48 -         save2pdf(['t_' num2str(t)])
49 -     end
50 -     if mod(t,t_save) == 0
51 -         save(['Yp' num2str(t)], 'Yp')
52 -     end
53 -
54 - end
```

รูปที่ 3.5Main Code

## Main Code

<pre>clear;clc;close;</pre>	<p>ในส่วนแรกของ code จะเป็นการลบข้อมูลเก่าที่อาจจะมียังค้างอยู่ในโปรแกรมก่อน เพื่อให้ผลที่ได้ไม่ผิดพลาดเพราะมีผลจาก code อื่นมามีผลด้วย</p>
<pre>n = 400; m = 400; r = -0.2; dx = 0.5; dt = 1e-5; t_end = 40000000; t_print = 50000; t_save = 500; resume = true; t_resume = 23841000;</pre>	<p>ส่วนนี้จะเป็นการกำหนดตัวแปรของ Code ทั้งหมดที่เป็น input เข้าไปให้กับการทำงานของระบบ ซึ่งความหมายของตัวแปรต่างๆได้อธิบายไปแล้วในด้านบน ซึ่งตัวเลขต่างๆที่ใส่เข้าไปจะกลายเป็นตัวแปร input ให้การทำงานของโปรแกรมในครั้งนั้นๆ</p>
<pre>if resume filename = ['Yp' num2str(t_resume) '.mat']; load(filename) t_start = t_resume;</pre>	<p>ในส่วนนี้คือถ้า มีคำสั่งให้ resume ทำงาน (การใส่ true หลังตัวแปร resume) ก็จะดึงข้อมูลจากไฟล์ที่บันทึกไว้ในที่เดียวกันที่มีชื่อของไฟล์ว่า “ Yp เลขที่ใส่ในตัวแปร t_resume).mat” ตัวอย่างเช่น Yp23841000.mat แล้วก็เริ่มโปรแกรมจากค่า t ในตัวแปร t_resume ต่อไป</p>
<pre>else Yp = 0.3 + 0.05*rand( n+2, m+2) -0.12; Yp1 = zeros ( n+2, m+2); t_start = 1 ; end</pre>	<p>Else เป็นคำสั่งที่ใช้คู่กับ if ในส่วนนี้คือ ถ้า ไม่มีการทำงานของตัวแปร resume ( การใส่ false หลังตัวแปร resume ) ก็จะมีการเริ่มโปรแกรมใหม่ตั้งแต่ต้น โดยมีการสุ่มค่าจากคำสั่ง rand และ กำหนด Yp1 เป็น เมตริกซ์ที่มีค่าเป็น 0 ทั้งหมด โดยมีขนาดเท่ากับ (402 x 402) แล้วตัวแปร t_start = 1 คือการเริ่มที่ค่า t = 1</p>
<pre>z = Yp(2:n+2 , 2:n+2);</pre>	<p>บรรทัดนี้คือการกำหนดความกว้างของ z ที่เราเริ่มจากตำแหน่งที่ 2 เพราะการทำ Periodic Boundary ต้องมีการทำ Ghost Cell ขึ้นมาจำลองไว้ ในตำแหน่งแรกและ สุดท้าย ของจุดที่เราจะใช้ และที่จุดสุดท้ายเป็น n+2 เพราะตำแหน่ง n+2 คือตำแหน่งที่เป็นจุดเดียวกับตำแหน่งที่ 2 ซึ่งจะทำให้เกิดเป็นคาบขึ้นมา</p>

<pre>C = integrate_Yp(z,dx,dx);</pre>	<p>บรรทัดนี้เป็นการตรวจสอบค่า Yp ที่ได้สุ่มมาว่าสามารถใช้ได้จริงหรือไม่ จึงทำการตรวจสอบโดยทำการอินทิเกรตค่า Yp ที่ได้ก่อนนำไปใช้จริง จึงใช้ฟังก์ชัน integrate_Yp เข้ามาช่วย</p> <p>เมื่อกดเริ่มทำงาน ค่า C ก็จะแสดงผลออกมาใน command window เสมอเพื่อดูว่าค่าที่ได้นั้นมีค่าถูกต้องหรือไม่</p> 
---------------------------------------	---

<pre>for t = t_start:t_end Yp = update_boundary(Yp,n,m); Lap2 = calculate_laplacian(Yp,dx,n,m); Lap2 = update_boundary(Lap2,n,m); Lap4 = calculate_laplacian(Lap2,dx,n,m); Lap4 = update_boundary(Lap4,n,m); Lap6 = calculate_laplacian(Lap4,dx,n,m); Lap6 = update_boundary(Lap6,n,m); Lap2Y3 = calculate_laplacian(Yp.^3,dx,n,m); Lap2Y3 = update_boundary(Lap2Y3,n,m);</pre>	<p>ในส่วนนี้เป็นการแปลงสมการ PFC จากสมการทางคณิตศาสตร์ มาเป็น สมการที่สามารถจะเขียนลงไปในโปรแกรม Matlab ได้ โดยในส่วนนี้จะมีการใช้ฟังก์ชันเพิ่มเติม 2 ฟังก์ชัน นั่นคือ update_boundary และ calculate_laplacian โดยค่า Lap2 , Lap4 และ Lap6 จะเป็นตัวแปรที่เก็บค่าของตัว laplacian ที่ยกกำลังเลขที่ต่อท้ายอยู่ ซึ่ง จะเห็นว่าฟังก์ชัน calculate_laplacian นี้มีการยกกำลังเพิ่มทีละ 2 ในการทำ laplacian ยกกำลัง 4 เราจึงใช้ตัวแปรเริ่มจากค่าของ laplacian ยกกำลัง 2 ก่อนแล้วและในการยกกำลัง 6 ก็เช่นกันจะเริ่มจากการใช้ตัวแปร lap4 เข้ามาในการยกกำลังเป็น lap6 ต่อไป และจะเห็นว่าทุกบรรทัดนั้นมีฟังก์ชัน update_boundary อยู่ซึ่งเป็นการทำให้ส่วนที่อาจจะเกินขอบเขตที่สนใจไปนั้นมาอยู่ในรูปของ Ghost Cell ในฝั่งตรงข้าม ซึ่งก็คือฟังก์ชันที่ทำ Periodic Boundary ให้กับระบบ</p>
---	---

<pre>A = Lap2.*(r+1) + 2.*(Lap4) + Lap6 + Lap2Y3; Yp1 = dt.*A + Yp; Yp = Yp1;</pre>	<p>A คือตัวแปรเก็บค่าที่ได้จากสมการ</p> $\frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla^2 \psi(r+1) + 2(\nabla^4 \psi) + (\nabla^6 \psi) + (\nabla^2 \psi^3)$ <p>หลังจากนั้นเราก็ได้นำค่าที่ได้จากการคำนวณที่เก็บอยู่ในตัวแปร A มาคำนวณต่อเพื่อหาค่า Yp1 หรือการเปลี่ยนแปลงของอะตอมในเวลาต่อไปซึ่งจะเห็นได้ว่าเราใช้ตัวแปร A มาแทนสมการด้านบนทั้งหมดแล้วเพื่อง่ายในการเขียนต่อไป โดยสมการคือ <math>\psi^{n+1} = dt(A) + \psi^n</math> และบรรทัดสุดท้ายเป็นการทำให้ค่าที่ได้จากตัวแปร Yp1 ไปเก็บไว้ในตัวแปร Yp</p>
<pre>if mod(t,t_print) == 0     contour(Yp1); colorbar     axis equal tight     title(['t = ' num2str(t)]) fprintf('t = %i \n', t)     pause(0.2);     save2pdf(['t_' num2str(t)]) end</pre>	<p>ในส่วนนี้จะป็นคำสั่งให้แสดงผลออกมาเป็นรูปภาพ โดยจะแสดงผลทุกๆค่า t ที่ ทารด้วยค่าตัวแปร t_print ลงตัว เพื่อเราสามารถดูผลคล่่าวๆจากการทำงานของโปรแกรม</p> <p>และในส่วนล่่างคำสั่ง save2pdf จะเป็นคำสั่งที่เราสั่งให้บันทึกภาพไว้เป็นไฟล์นามสกุล .pdf โดยใช้ค่า t เป็นชื่อไฟล์ ตัวอย่างเช่น t_2000000.pdf</p>
<pre>if mod(t,t_save) == 0     save(['Yp' num2str(t)], 'Yp') end</pre>	<p>บรรทัดนี้เป็นการบันทึกข้อมูลโดยเราจะบันทึกข้อมูลเมื่อค่า t ทารด้วยค่าตัวแปร t_save ลงตัว เพื่อที่จะเก็บค่าต่างๆที่ได้จากการทำงานของโปรแกรมไว้ เพื่อที่จะสามารถนำข้อมูลในเวลา t ใดๆมาใช้ได้ เช่นการใช้คำสั่ง resume ก็ต้องใช้ไฟล์ที่บันทึกไว้ในส่วนนี้เพื่อเริ่มทำงานต่อไป</p>

### 3.5.3 Integrate\_Yp Code

```
1  function C = integrate_Yp(z,dx,dy)
2
3      %Number of points
4  -   [Nx, Ny] = size(z);
5  -   nx = Nx-1;
6  -   ny = Ny-1;
7
8  -   ay = 1;
9  -   by = ( dy * ny ) + ay;
10
11  -   ax = 1;
12  -   bx = ( dx * nx) + ax;
13
14  -   F = zeros (nx+1,1);
15
16  -   for i = 1 : nx+1
17  -       s=0;
18  -       for j = 2:ny
19  -           s = s + (2*z(i,j));
20  -       end
21  -       F(i) = ((by - ay)/(2*ny)) * ( z(i,1) + s + z(i,ny+1) );
22  -   end
23
24
25  -   d = 0;
26  -   for i = 2 : nx
27  -       d = d + ( 2*F(i));
28  -   end
29
30  -   H = (( bx - ax ) / (2*nx)) * ( F(1) + d + F(nx+1));
31
32  -   C = H / (( bx - ax ) * ( by - ay ));
33
34  -   fprintf('C = %10.5f \n', C)
35
```

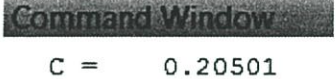
รูปที่ 3.6 ฟังก์ชัน integrate\_Yp

## Integrate\_Yp Code

function C = integrate_Yp(z,dx,dy)	บรรทัดนี้เป็นการบอกถึงว่าเราจะใช้ตัวแปร C ในการเก็บค่าที่ได้จากการคำนวณของฟังก์ชัน integrate_Yp ค่าของตัวแปร C ก็คือค่าเฉลี่ยของ Yp
[Nx, Ny] = size(z); nx = Nx-1; % Nx point , nx space ny = Ny-1; % Ny point , ny space	บรรทัดที่ 1 เป็นการกำหนดว่าขนาดที่ใช้คือ [Nx , Ny] แต่ว่าในการอินทิเกรต เราต้องใช้พื้นที่ในการคำนวณ จึงต้องกำหนดตัวแปร nx และ ny เพิ่มขึ้นมา ในบรรทัดที่ 2 และ 3 โดย nxและny คือช่องว่างระหว่างจุดที่เกิดขึ้นทั้งหมด
ay = 1; by = ( dy * ny ) + ay;	เป็นการกำหนดตัวแปรในแกน Y เพื่อหาค่าความต่างระหว่างจุดแรก และ จุดสุดท้าย
ax = 1; bx = ( dx * nx ) + ax;	เป็นการกำหนดตัวแปรในแกน X เพื่อหาค่าความต่างระหว่างจุดแรก และ จุดสุดท้าย
F = zeros (nx+1,1);	กำหนดตัวแปร F เป็นเมทริกซ์ ที่มีค่า 0 ขนาดในแกน x มีค่าเท่ากับ nx+1 ( เป็นจุด หรือตัวแปรNx ) และในแกน Y คือ 1 ซึ่งมีไว้เก็บค่าที่ได้จากการอินทิเกรต

<pre> for i = 1 : nx+1     s=0;     for j = 2:ny         s = s + (2*z(i,j));     end     F(i) = ((by - ay)/(2*ny)) * ( z(i,1) + s + z(i,ny+1) ); end </pre>	<p>ในส่วนนี้จะทำการเริ่มจากการอินทิเกรตแกนYก่อน จะเห็นว่าตัวแปร s เพิ่มขึ้นมาเพื่อเก็บค่าของ 2 xz(i,j) เพื่อใช้ในการคำนวณ โดยได้ใช้ Trapezoid Rule ที่เป็นการอินทิเกรตฟังก์ชัน โดยสมการมาจาก</p> $\int_a^b f(y)(dy) = \frac{b-a}{2N} ( f(y_1) + (2(f(y_2) \cdot f(y_{n-1}))) + f(y_n) )$ <p>แต่ในการใช้จริงเราได้มีการสร้าง Ghost Cell มาด้วย เราจึงต้องกำหนดค่าสุดท้ายเป็น n+1 โดยค่าที่ได้จะถูกเก็บอยู่ในตัวแปร F(i)</p>
---	--

<pre>d = 0; for i = 2 : nx     d = d + ( 2*F(i)); end H = (( bx - ax ) / (2*nx)) * ( F(1) + d + F(nx+1));</pre>	<p>ในส่วนนี้จะเหมือนกับส่วนที่แล้วแต่เป็นการอินทิเกรตในแนวแกน X โดยได้กำหนดตัวแปร d มาใช้เก็บค่า <math>2 \times F(i)</math> จากกฎ Trapezoid Rule ก็จะนำมาแทนค่าในสมการ</p> $\int_a^b f(x)(dx) = \frac{b-a}{2N} ( f(x_1) + (2 ( f(x_2) .. f(x_{n-1}) ) ) + f(x_n) )$ <p>ค่าที่ได้ก็จะถูกเก็บอยู่ในตัวแปร H</p>
---	---

<pre>C = H / (( bx - ax ) * ( by - ay ));</pre>	<p>บรรทัดนี้ได้กำหนดตัวแปร C เพิ่มขึ้นมาเพราะเราต้องทำการหาค่าเฉลี่ยของตัวแปร H ก่อน จากสมการก็คือการนำตัวแปร H มาหารด้วย พื้นที่ทั้งหมด ก็จะได้ออกมาเป็นค่าเฉลี่ย แล้วจึงเก็บค่าที่ได้ไว้ในตัวแปร C</p>
<pre>fprintf('C = %10.5f \n', C)</pre>	<p>บรรทัดนี้คือคำสั่งให้แสดงผลของตัวแปร C ใน command window</p> 

### 3.5.4 Update\_boundary Code

```

1  function out = update_boundary(in,n,m)
2  -   out = in;
3  -   out(1,:) = in(n+1,:);
4  -   out(n+2,:) = in(2,:);
5
6  -   out(:,1) = in(:,m+1);
7  -   out(:,m+2) = in(:,2);
8  -   end

```

รูปที่ 3.7 ฟังก์ชัน update\_boundary

function out = update_boundary(in,n,m)	ฟังก์ชันนี้เป็นการสร้าง Periodic Boundary ของกราฟที่วาดขึ้นมา โดยจะทำการจำลองจุดขึ้นมาในรอบๆของขอบเขตที่เรามองเห็นจริงตามทฤษฎี Ghost Cell
out = in;	ส่วนนี้เป็นการกำหนดให้ตัวแปร in จะต้องเท่ากับกับตัวแปร out โดยจะดึงข้อมูลที่ถูเก็บไว้ในตัวแปร in มาใส่ในตัวแปร out เพื่อให้มีค่าตรงกัน
out(1,:) = in(n+1,:);	เป็นการกำหนดค่า out โดยนำค่าจากตัวแปร in คือตำแหน่งที่ n+1 ในแกนXทุกตัวในแนวแกนY มาใส่ในตำแหน่งที่ 1 ของแกนXทุกตัวในแนวแกนY
out(n+2,:) = in(2,:);	เป็นการกำหนดค่า out โดยนำค่าจากตัวแปร in คือตำแหน่งที่ 2 ในแกนXทุกตัวในแนวแกนY มาใส่ในตำแหน่งที่ n+2 ของแกนXทุกตัวในแนวแกนY
out(:,1) = in(:,m+1);	เป็นการกำหนดค่า out โดยนำค่าจากตัวแปร in คือตำแหน่งที่ m+1 ในแกนYทุกตัวในแนวแกนX มาใส่ในตำแหน่งที่ 1 ของแกนYทุกตัวในแนวแกนX
out(:,m+2) = in(:,2); end	เป็นการกำหนดค่า out โดยนำค่าจากตัวแปร in คือตำแหน่งที่ 2 ในแกนYทุกตัวในแนวแกนX มาใส่ในตำแหน่งที่ m+2 ของแกนYทุกตัวในแนวแกนX

### 3.5.5 Calculate\_laplacian Code

```

1  function out = calculate_laplacian(A, dx, n, m)
2  %
3  -   out = zeros(n+2, m+2);
4  %
5  -   for i = 2:n+1
6  -       for j = 2:m+1
7  -           out(i, j) = (A(i+1, j) + A(i-1, j) + A(i, j+1) + A(i, j-1) - 4*A(i, j))/dx^2;
8  -       end
9  -   end
0
1  -   end

```

รูปที่ 3.8 ฟังก์ชัน Calculate\_laplacian

function out = calculate_laplacian(A,dx,n,m)	จากสมการ $\nabla^2 \Phi = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}$ คือการหาค่ายกกำลัง 2 ของ laplacian จึงได้ใช้ฟังก์ชันนี้ในการหาค่า laplacian ที่ยกกำลัง 2
out = zeros(n+2,m+2);	กำหนดให้ตัวแปร out เป็นเมทริกซ์ที่เก็บค่า 0 ไว้โดยมีขนาดเท่ากับ (n+2,m+2) หรือขนาด 402 x 402 มีการเพิ่มอีก 2 ทั้ง 2 ข้างเพราะมีการเพิ่ม Ghost Cell เข้ามา

<pre> for i = 2:n+1     for j = 2:m+1         out(i,j) = (A(i+1,j) + A(i-1,j) + A(i,j+1) + A(i,j-1) - 4*A(i,j))/dx^2;     end end end </pre>	<p>ในส่วนนี้เป็นการแปลงสมการ <math>\nabla^2 \Phi = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}</math> มาเป็นสมการที่สามารถเขียนลงไปโปรแกรม Matlab ได้ โดยเริ่มจาก</p> $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = \frac{\Phi_{j+1} + \Phi_{j-1} + 2\Phi_j}{(dy)^2} \text{ และ}$ $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = \frac{\Phi_{i+1} + \Phi_{i-1} + 2\Phi_i}{(dx)^2}$ <p>จากสมการหลักจึงต้องจับ 2 สมการนี้มาบวกกันทำให้ได้สมการที่เราใช้คือ</p> $\nabla^2 \Phi = \frac{\Phi_{i+1,j} + \Phi_{i-1,j} + \Phi_{i,j+1} + \Phi_{i,j-1} - 4\Phi_{i,j}}{(dx)^2}$ <p>นั่นคือสมการที่เขียนลงไป code ซึ่งคำนวณได้ใส่ไว้ในตัวแปร out</p>
--	--

ทั้งหมดนี้คือ Code ที่เขียนขึ้นมาเพื่อสร้างแบบจำลอง Phase Field Crystal ในครั้งนี้

## บทที่ 4

### ผลการทดลอง

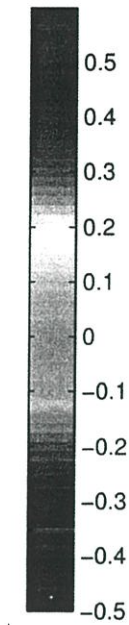
#### 4.1 กล่าวนำ

ในบทนี้จะเป็นการนำผลที่ได้จากการทำงานของ Code ที่เขียนขึ้นมาโดยผลที่ได้จะเป็นรูปภาพที่แสดงถึงค่าความเข้มข้น หรือ ความน่าจะเป็นที่จะสามารถพบเจอกับอะตอมได้ นอกเหนือจากนั้นยังสามารถที่จะเห็น การแข็งตัว การเกิดเกรน และการเกิด dislocation ตามขอบเกรนที่เกิดขึ้นมาได้

#### 4.2 การมองแท็บสีแสดงค่าความน่าจะเป็นที่จะเกิดอะตอม

จากการทำงานของ Code ที่เขียนขึ้นมานั้นผลที่ออกมาจะเห็นเป็นภาพเพื่อดูการเจริญเติบโตของเกรนโดยภาพที่ได้นำมาแสดงผลให้รับชมนั้นได้มีแท็บสีแสดงค่าความเข้มข้น หรือ ค่าของความน่าจะเป็นที่จะสามารถพบเจออะตอมได้โดยจะแบ่งเป็นสีต่างๆขึ้นอยู่กับค่าของข้อมูลที่มีในจุดนั้นว่ามีค่ามาก หรือมีค่าน้อยของค่าความน่าจะเป็นที่จะพบเจออะตอมซึ่งจะทำให้การมองภาพจากผลการทดลองนั้นได้ชัดเจนและง่ายยิ่งขึ้น โดยแท็บสีที่แสดงผลนั้นได้ทำการปรับค่าของตัวเลขที่แสดงถึงค่าความน่าจะเป็นที่จะพบเจออะตอมใหม่แล้ว

โดยในครั้งแรกแท็บสีที่แสดงผลนั้นค่าจะเปลี่ยนไปเรื่อยๆไม่มีการคงที่ของตัวเลขที่บอกค่า จึงทำให้การสังเกตนั้นอาจจะสับสนได้เพราะสีเหมือนกันแต่เลขที่บอกค่าอาจไม่เท่ากันในรูปคนละรูป โดยได้ปรับปรุงแท็บสีนี้จากการสังเกตการทดลองในรอบแรกว่าผลที่ได้อยู่ในช่วงของค่าใด หลังจากนั้นจึงทำการปรับค่าตัวเลขในแท็บสีใหม่ให้ค่าที่แสดงผลนั้นเป็นตัวเลขที่คงที่ไม่เปลี่ยนแปลงเพื่อการแสดงผลให้ได้ความชัดเจนมากยิ่งขึ้น และจะสามารถเปรียบเทียบได้อย่างง่ายมากยิ่งขึ้นจากสีที่เกิดขึ้นมาได้ เพื่อแยกแยะความแตกต่างของค่าความน่าจะเป็นที่จะพบเจออะตอมในจุดต่างๆได้

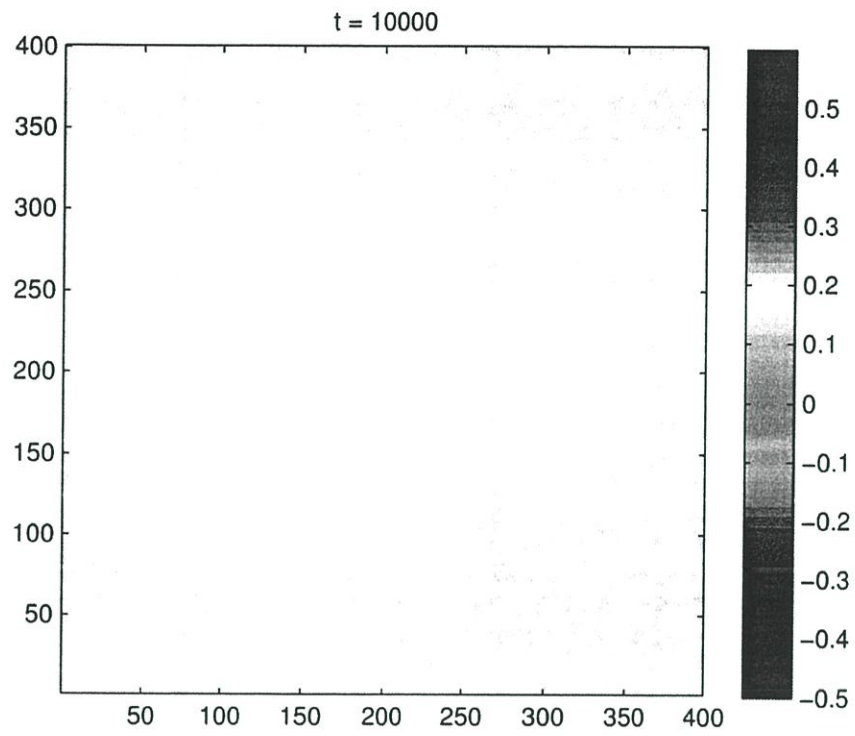


รูปที่ 4.1 แทบสีแสดงค่าความน่าจะเป็นที่จะพบอะตอม

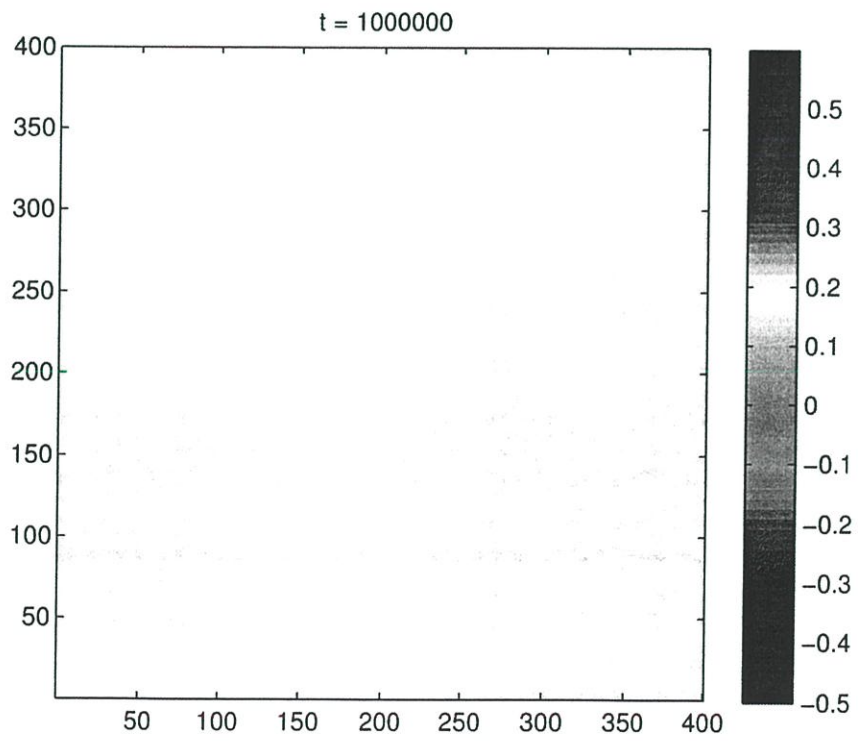
จากแทบสีด้านบนจะเห็นได้ว่ามีสีตั้งแต่ สีแดง สีส้ม สีเหลือง สีเขียว สีฟ้า และสีน้ำเงิน ซึ่งจะเห็นได้ว่าในด้านข้างของสีต่าง ๆ นั้นจะมีเลขที่บ่งบอกถึงค่าของความน่าจะเป็นที่จะพบอะตอมในจุดนั้น โดยจุดที่มีค่าความน่าจะเป็นที่จะพบเจอกับอะตอมมากจะแสดงผลออกมาในสีแดงหรือในโทนสีที่ค่อนข้างมาทางสีแดง และ ในจุดที่มีโอกาสพบอะตอมน้อยก็จะแสดงผลออกมาในทางสีน้ำเงินหรือในโทนสีที่ค่อนข้างเข้ามาทางสีน้ำเงินมากขึ้นเช่นกัน

#### 4.3 ภาพจากการทดลอง

นี่คือภาพที่เริ่มต้นการทำงาน จะเห็นได้ว่าสีที่ออกมาเริ่มจากการเป็นสีเหลืองเกือบทั้งหมดเพราะค่าต่างๆยังมีค่าใกล้เคียงกันมากเพราะยังไม่แข็งตัวจึงมีค่าความน่าจะเป็นที่จะเจออะตอมไม่แตกต่างกันมากนัก

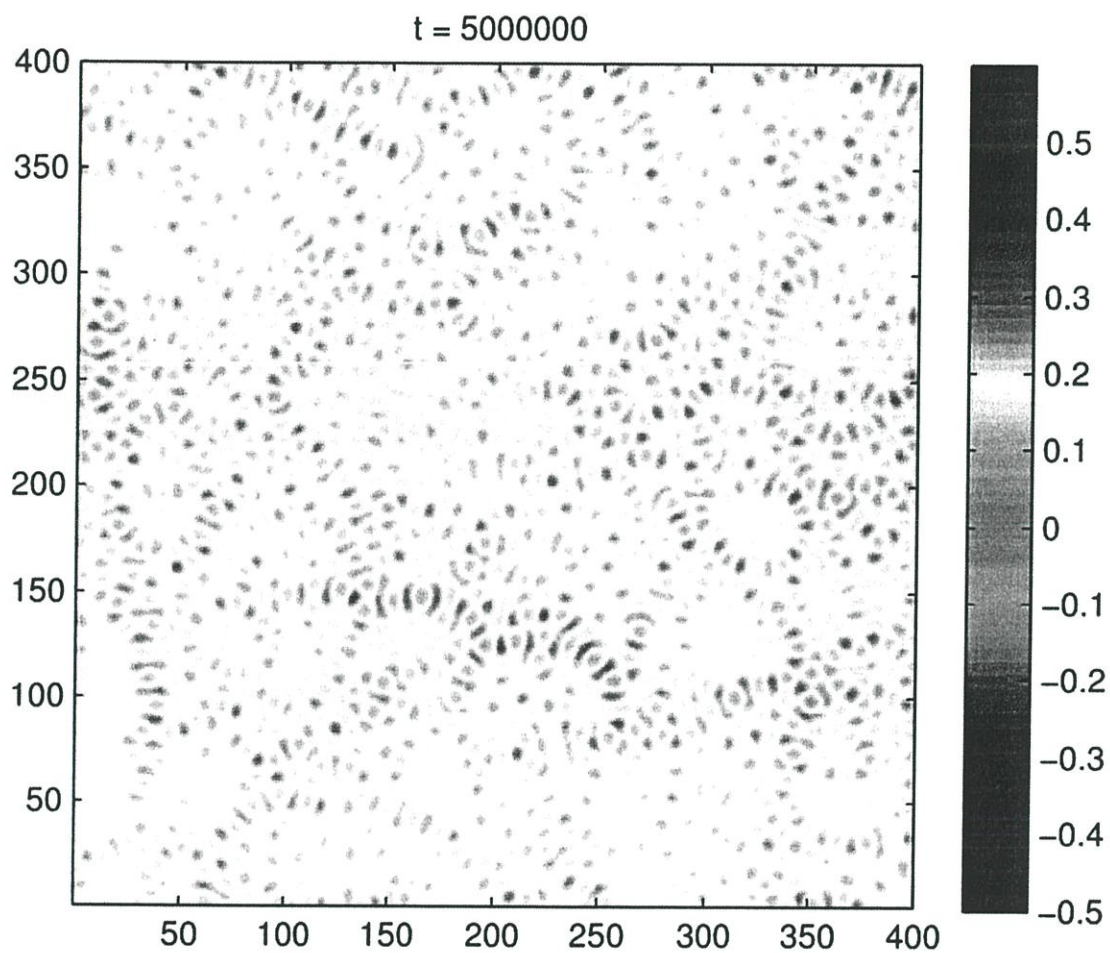


รูปที่ 4.2 ผลการทดลองที่  $t = 10,000$

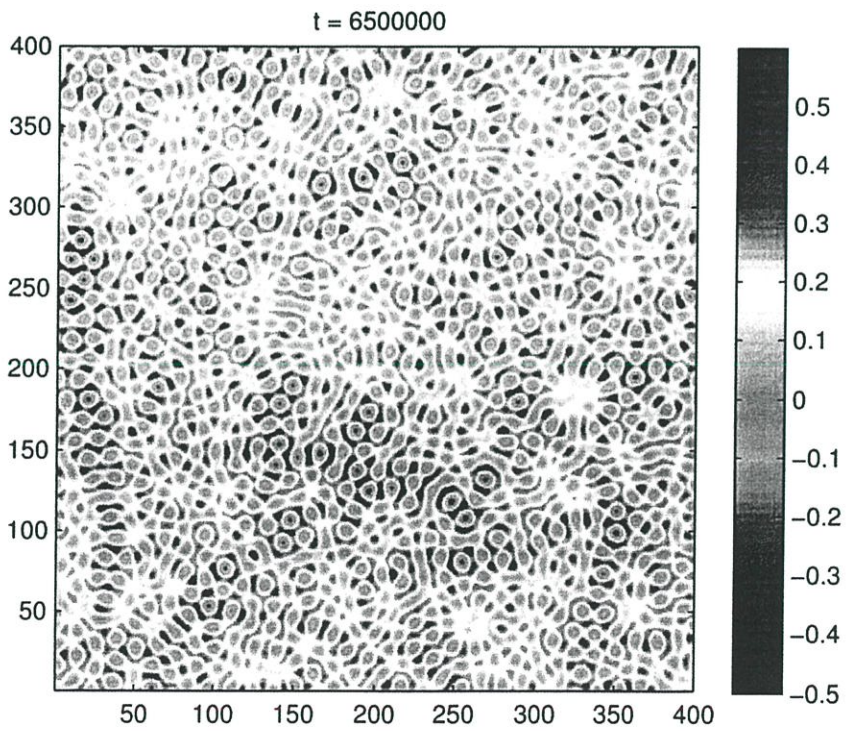
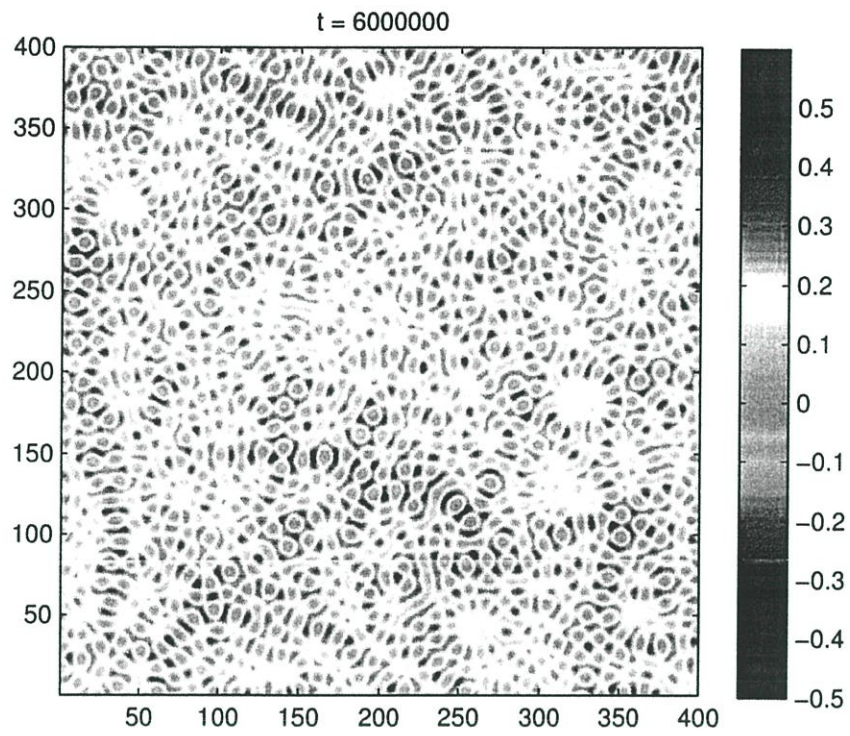


รูปที่ 4.3 ผลการทดลองที่  $t = 1,000,000$

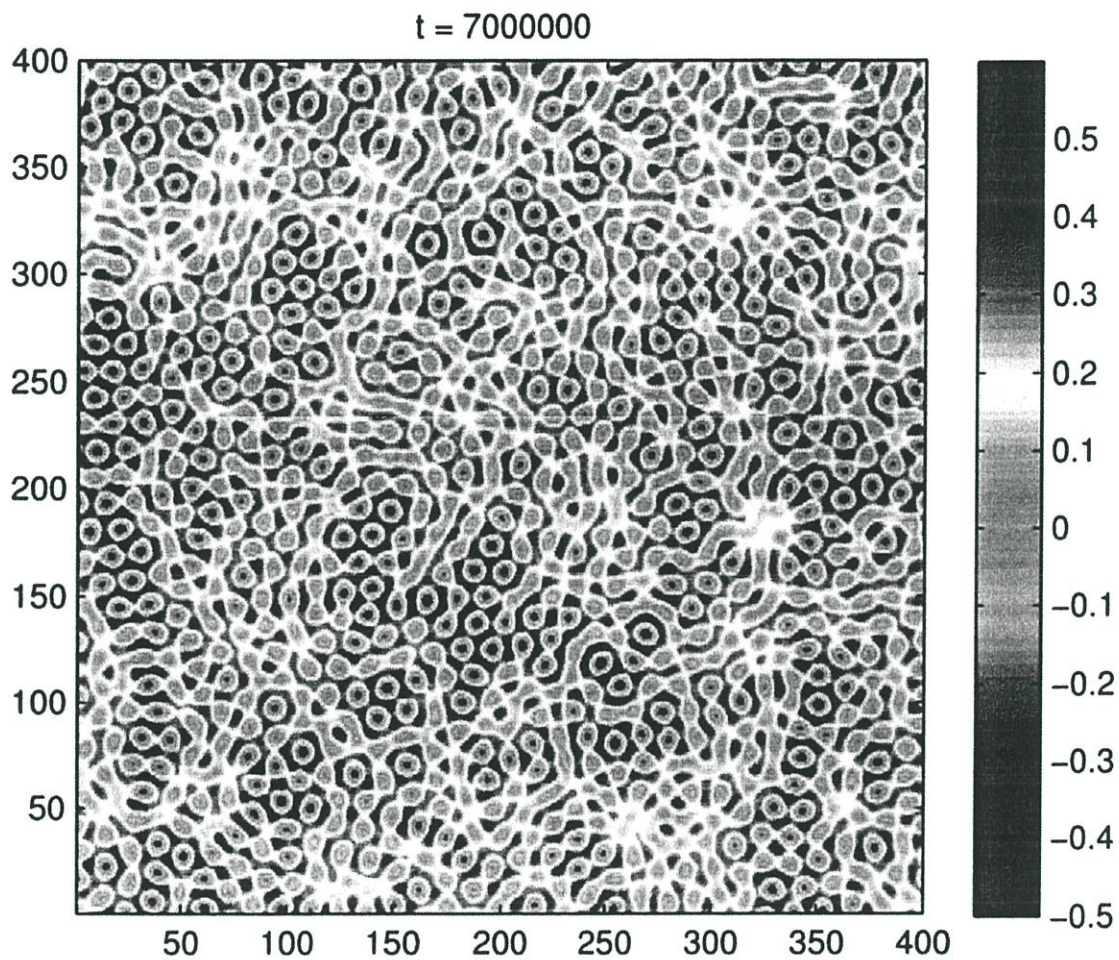
จะเห็นได้ว่าในเมื่อเข้าค่า  $t$  ที่ 5,000,000 แล้วจะเริ่มมองการเกิดตัวของอะตอมขึ้นมาบ้าง แต่ก็ยังไม่สามารถเห็นได้อย่างชัดเจน เนื่องจากเพิ่งเริ่มเกิดขึ้น โดยจะเห็นเป็น วงสีฟ้าอ่อน และ ขอบรอบๆวงนั้นที่เริ่มเป็นสีส้มแดงให้เห็นถึงค่าความน่าจะเป็นที่เริ่มต่างกัันนั่นเอง



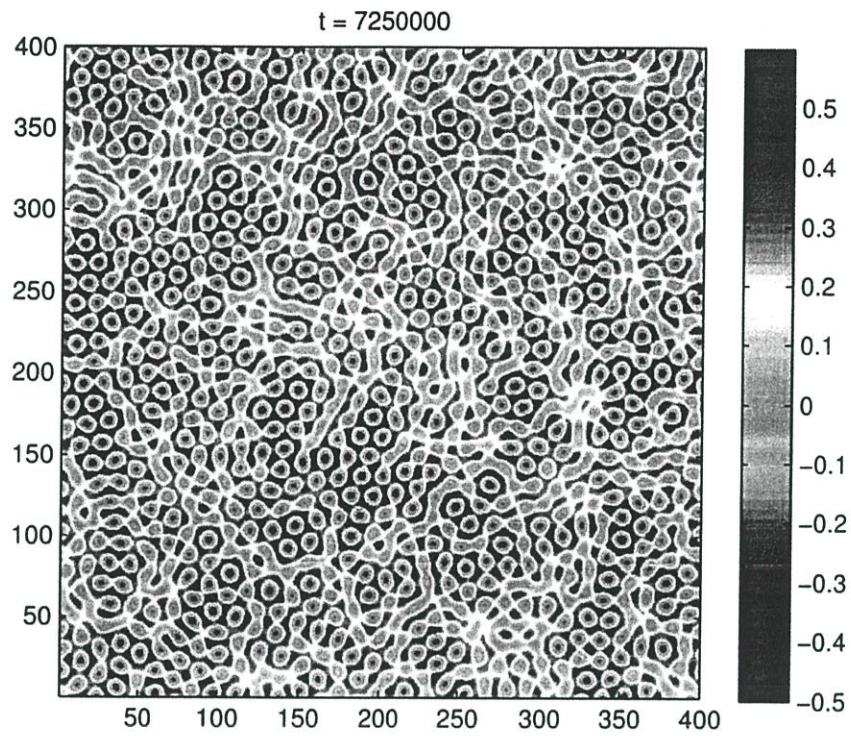
รูปที่ 4.4 ผลการทดลองที่  $t = 5,000,000$



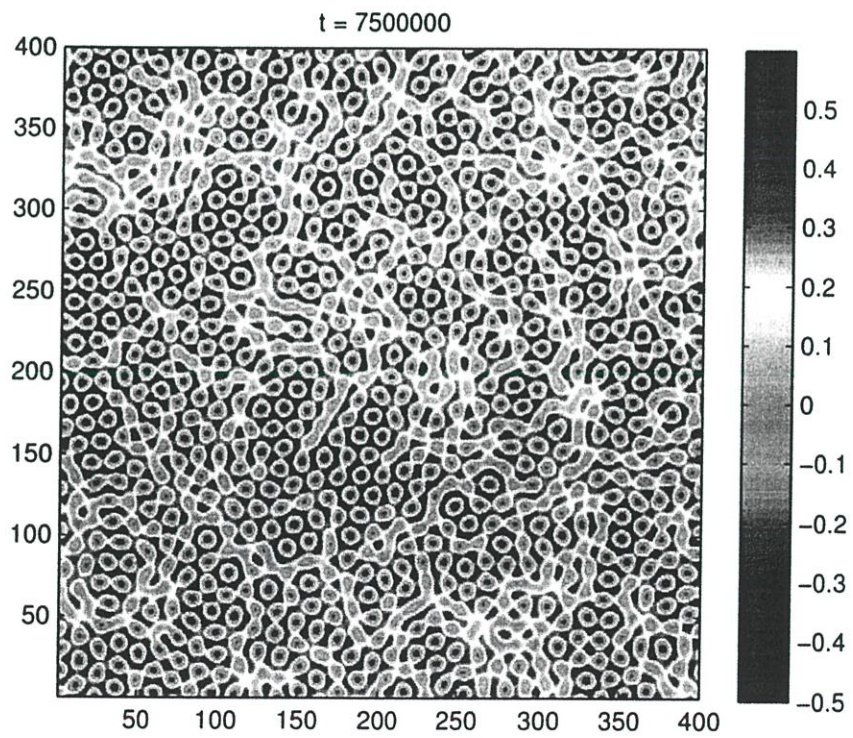
เมื่อเข้ามาตั้งแต่ค่า  $t$  ที่ 7,000,000 จะเห็นการแข่งตัวของเกรนมากขึ้น เริ่มเห็นการแบ่งแยกของค่าความน่าจะเป็นที่ จะพบเจออะตอมมากขึ้น แต่ผลที่เห็นก็ยังไม่ชัดเจนมากเพราะยังมีแค่บางส่วนเท่านั้นที่เกิดการแข่งตัว



รูปที่ 4.7 ผลการทดลองที่  $t = 7,000,000$

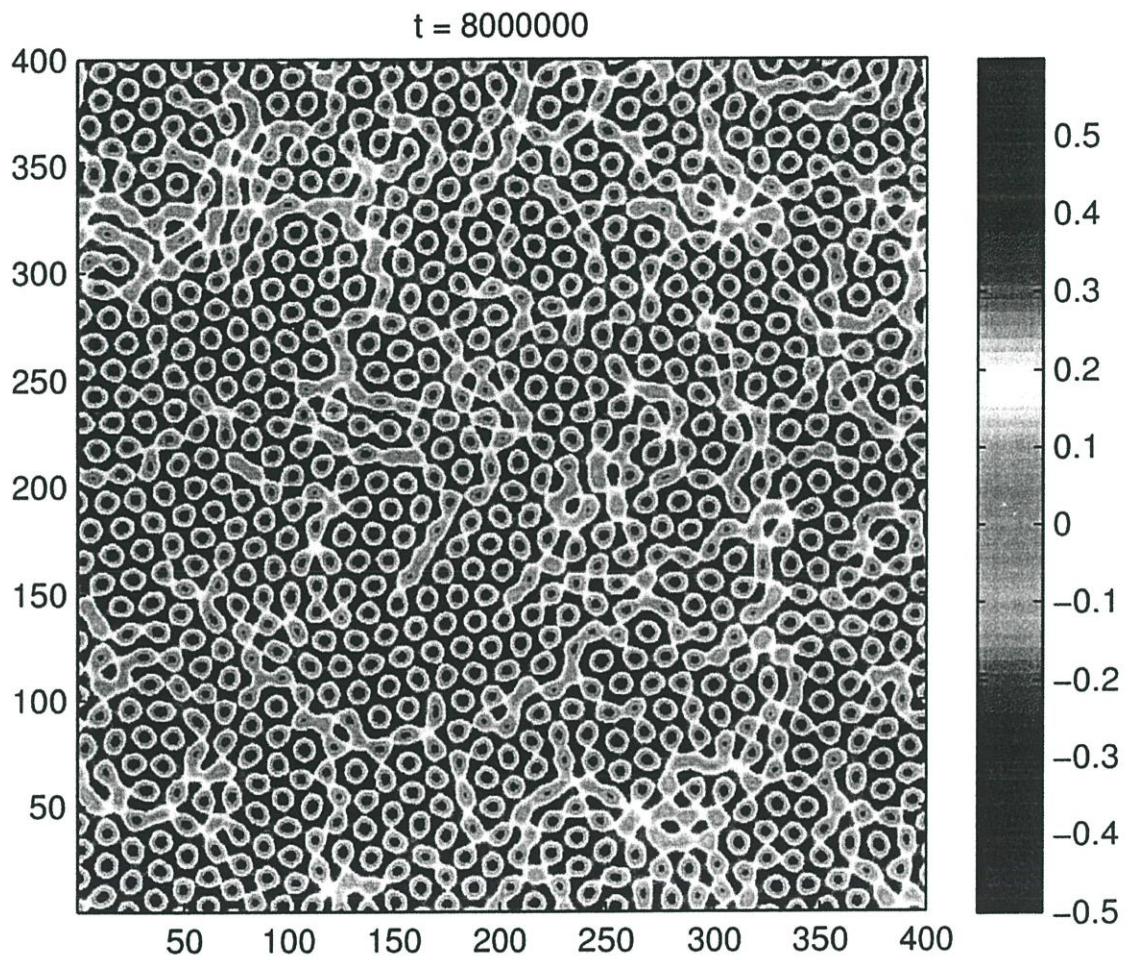


รูปที่ 4.8 ผลการทดลองที่  $t = 7,250,000$

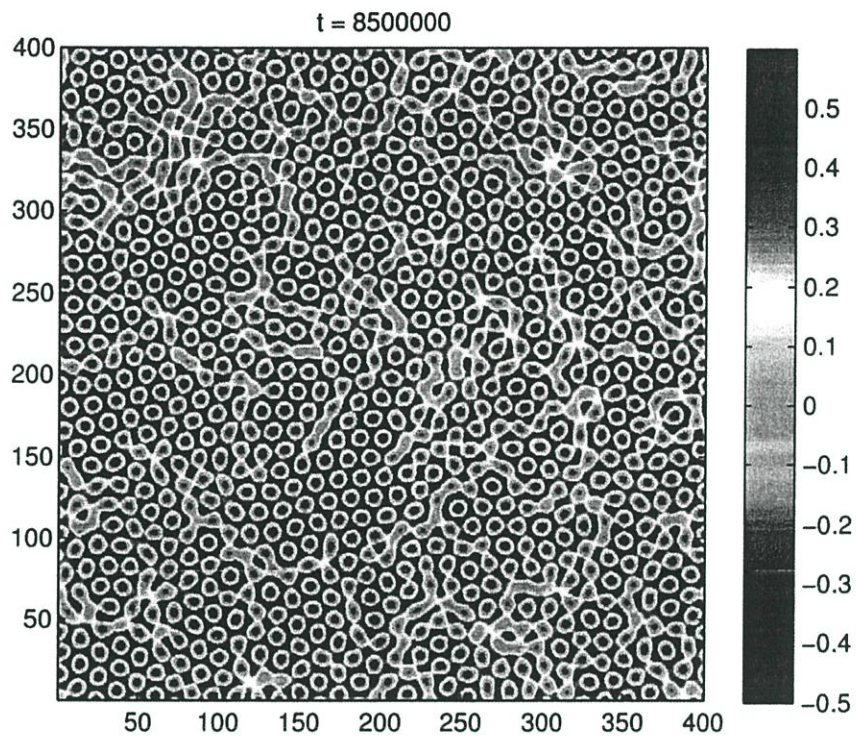


รูปที่ 4.9 ผลการทดลองที่  $t = 7,500,000$

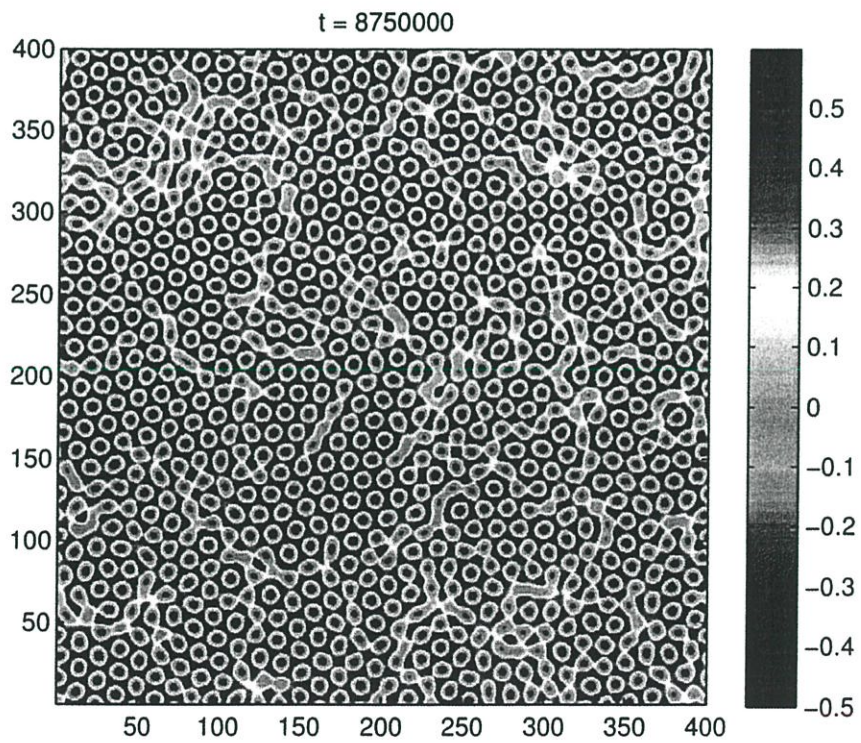
ในส่วนนี้เริ่มเกิดเกรนและจะสังเกตเห็นขอบของเกรนต่างๆค่อยๆเคลื่อนตัวมาชนกันซึ่งอาจจะทำให้เกิด dislocation ของขอบเกรนได้



รูปที่ 4.10 ผลการทดลองที่  $t = 8,000,000$

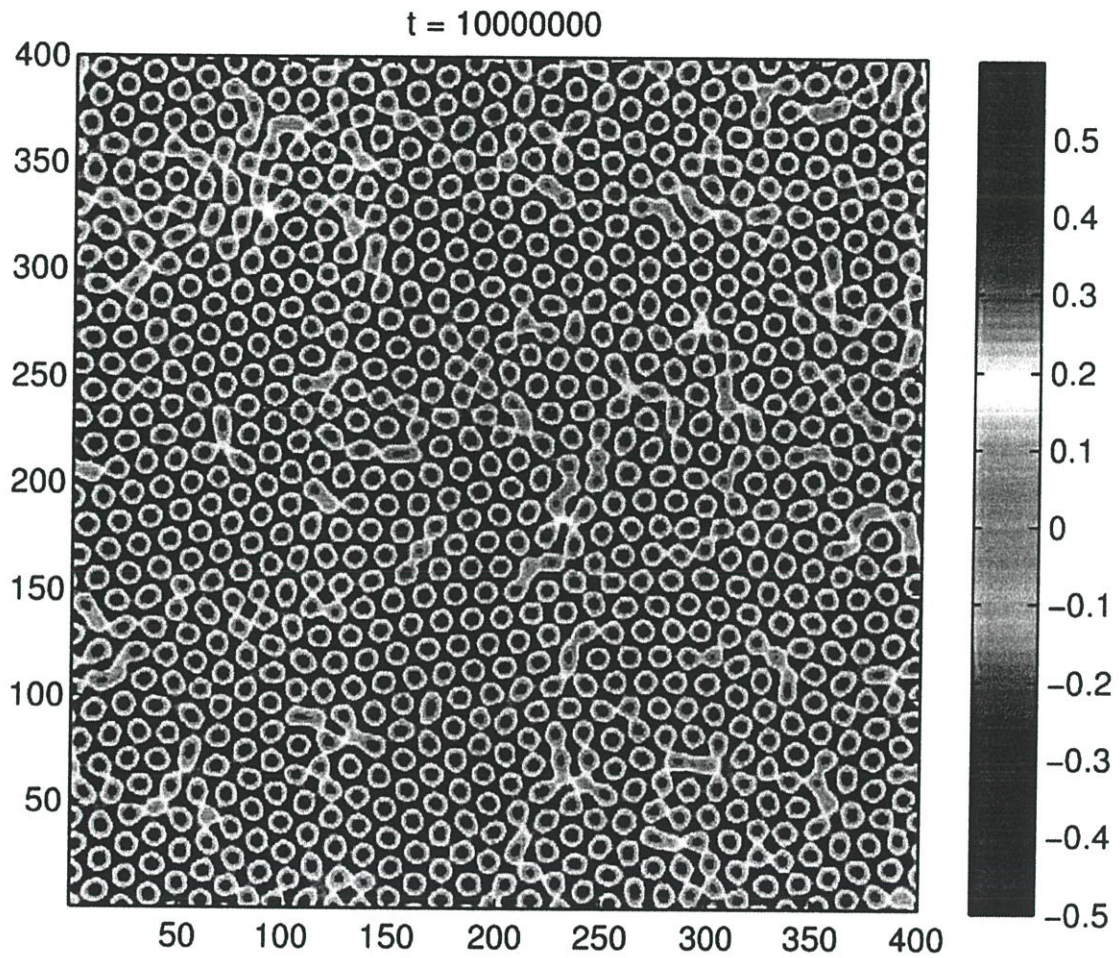


รูปที่ 4.11 ผลการทดลองที่  $t = 8,500,000$

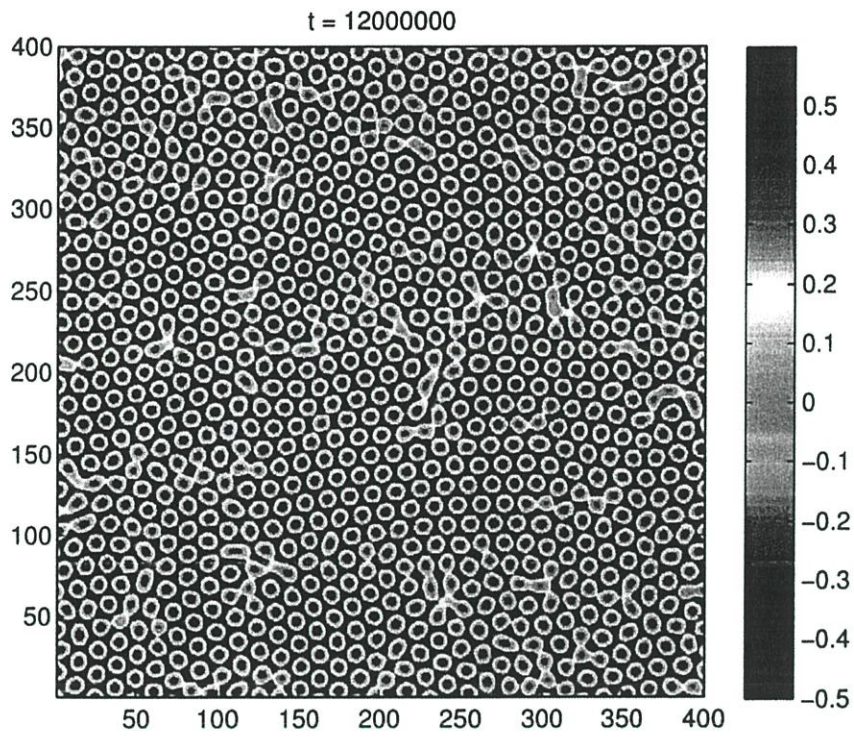


รูปที่ 4.12 ผลการทดลองที่  $t = 8,750,000$

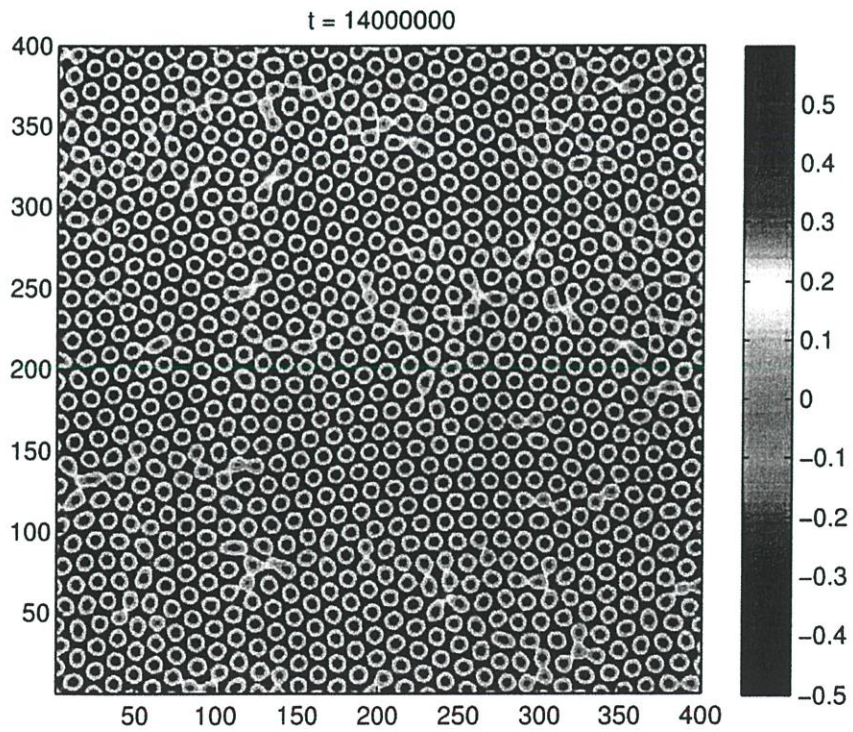
เมื่อมาถึงค่า  $t$  ตั้งแต่ 10,000,000 จะเห็นว่าเราสามารถเห็นเกรนได้ชัดเจนมากขึ้นขอบของเกรนในบางส่วนเริ่มที่จะชนเข้าหากัน อะตอมเริ่มเรียงตัวกันอย่างชัดเจน แต่ก็ยังมีบางส่วนที่ยังแข็งตัวอย่างไม่สมบูรณ์อยู่



รูปที่ 4.13 ผลการทดลองที่  $t = 10,000,000$

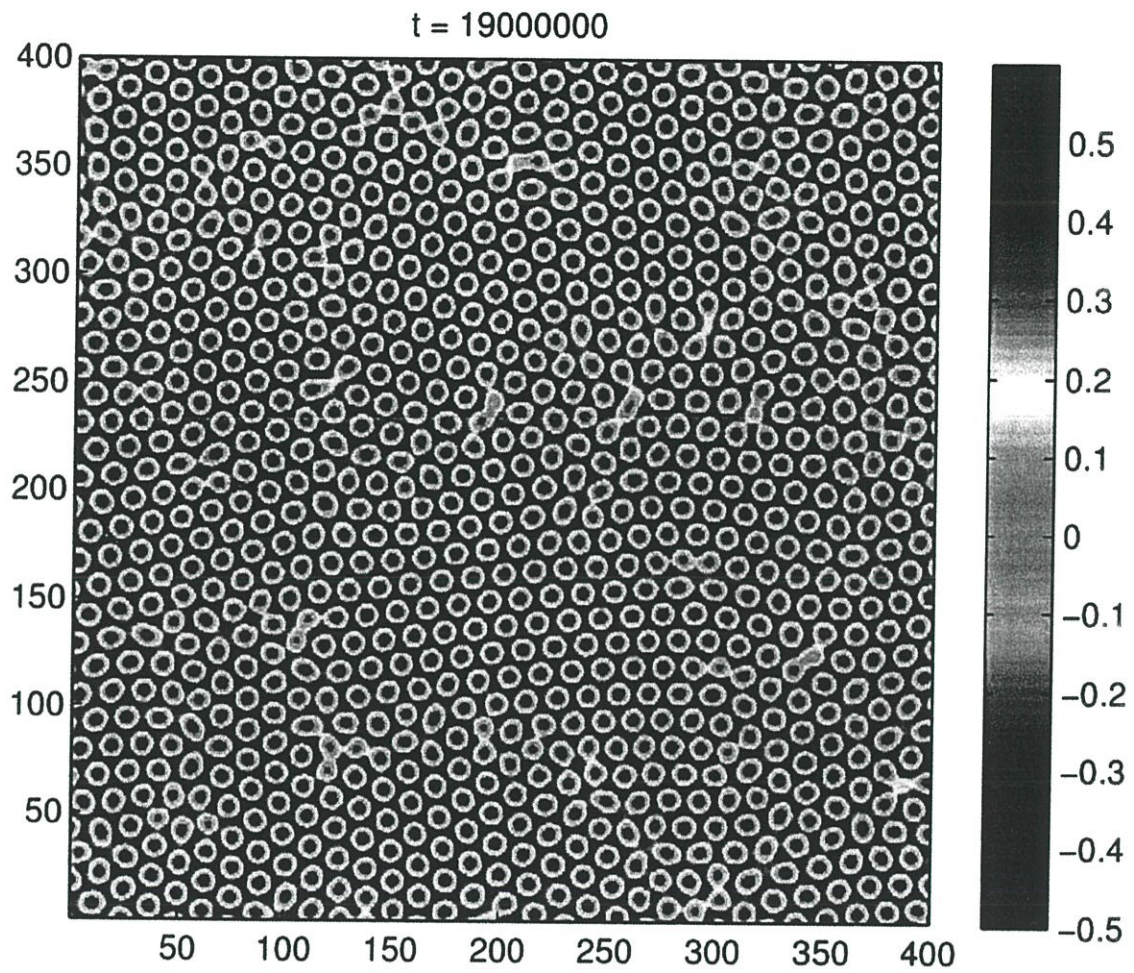


รูปที่ 4.14 ผลการทดลองที่  $t = 12,000,000$

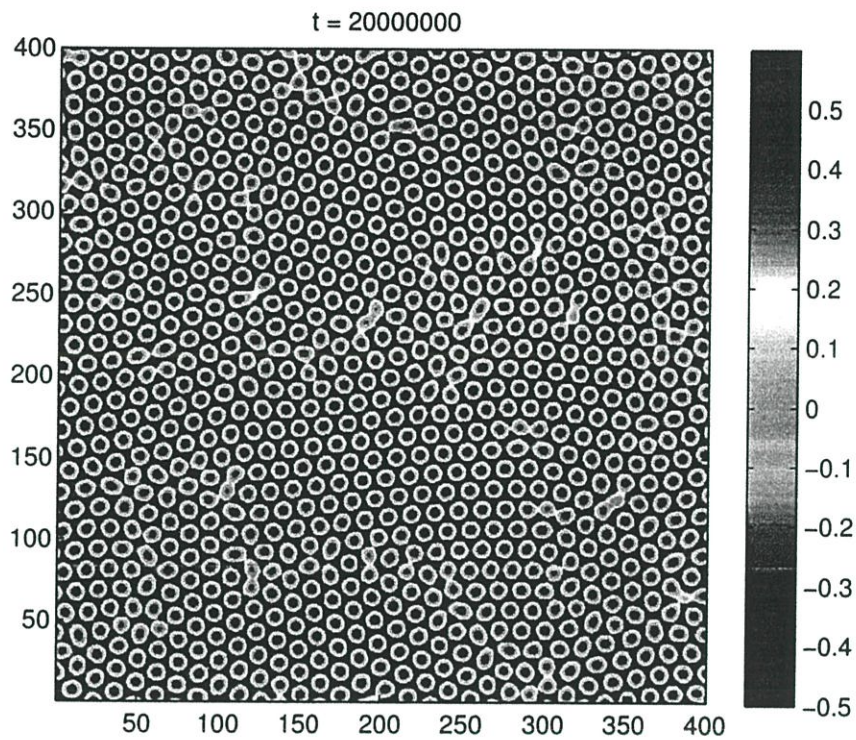


รูปที่ 4.15 ผลการทดลองที่  $t = 14,000,000$

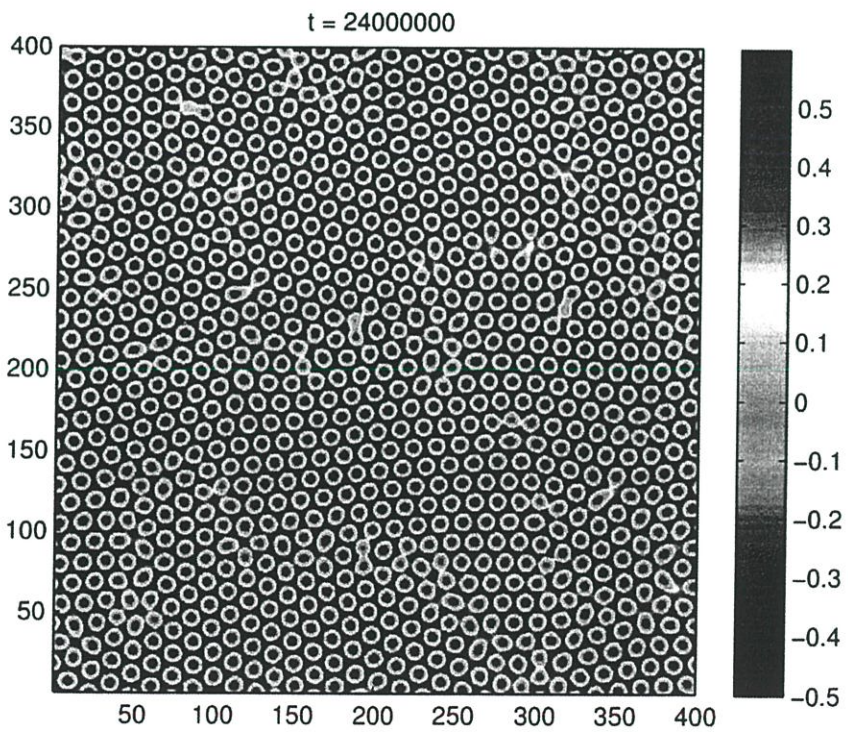
เมื่อเข้าค่า  $t$  ตั้งแต่ 19,000,000 มาจะเห็นว่าเกิดเกรนขึ้นเกือบทั้งหมด มีการเกิด dislocation ของขอบเกรนและพยายามที่จะปรับเปลี่ยนโครงสร้างให้เข้ากันได้ระหว่างเกรนที่ชนกัน



รูปที่ 4.16 ผลการทดลองที่  $t = 19,000,000$

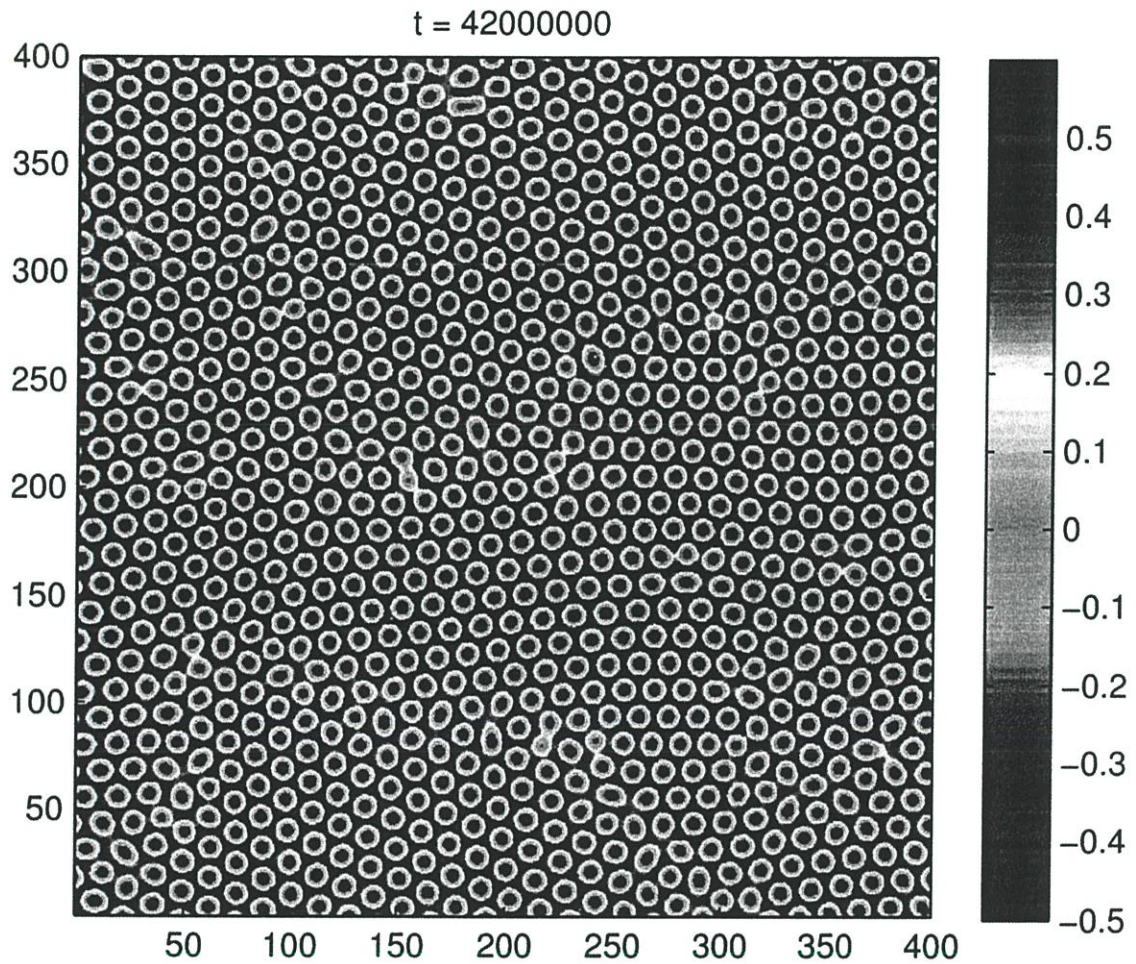


รูปที่ 4.17 ผลการทดลองที่ t = 20,000,000

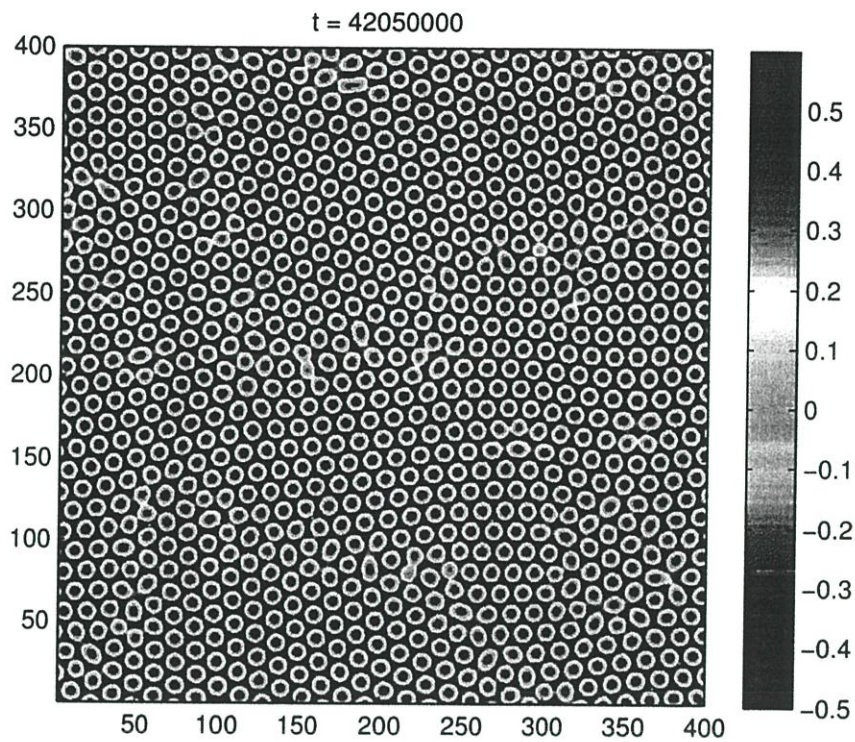


รูปที่ 4.18 ผลการทดลองที่ t = 24,000,000

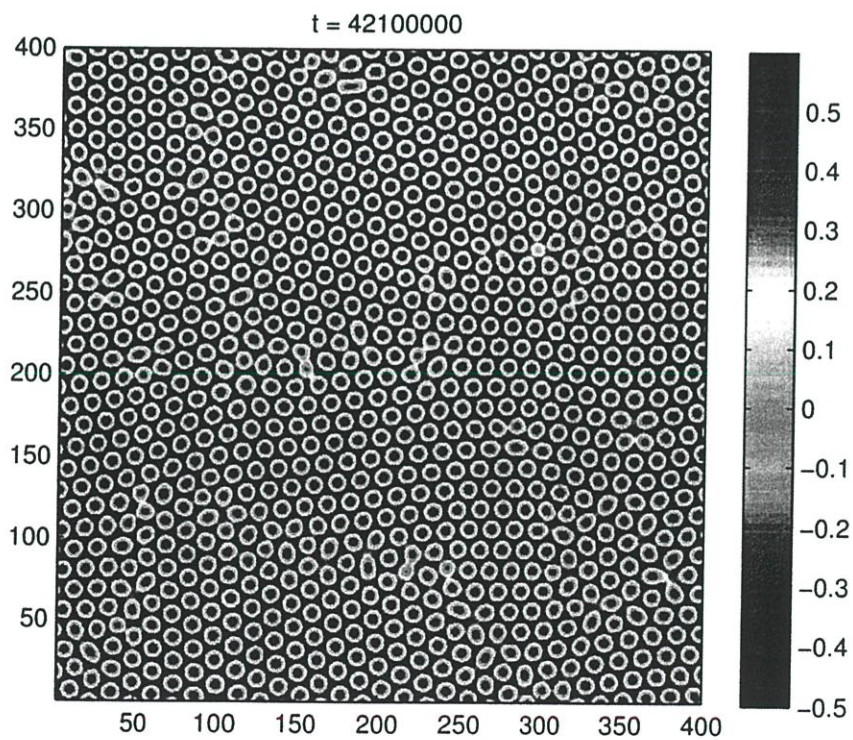
ในขณะที่  $t = 42,000,000$  จะเห็นว่ามีการเปลี่ยนแปลงไปไม่มากนัก เพียงแต่เกรนที่เกิดขึ้นในระบบจะปรับสภาพตัวเองให้เข้ากันได้มากยิ่งขึ้นเช่นการลดจำนวนอะตอมในบริเวณที่เกิดการชนกันของขอบเกรน หรือ การปรับอะตอมให้เป็นวงกลมที่สมบูรณ์มากขึ้นจากการบิดไปมาของเกรน ในส่วนนี้อาจจะดูเหมือนว่าเกรนเรียงตัวดีแล้ว แต่ว่าเมื่อดูให้ชัดจะเห็นว่า การเรียงตัวของอะตอมยังเข้ากันได้ไม่ดีพอ และยังมีบางจุดที่ยังพยายามที่จะลดอะตอมในส่วนนั้นอยู่เพื่อปรับสภาพของเกรนที่เกิดขึ้นมา



รูปที่ 4.19 ผลการทดลองที่  $t = 42,000,000$



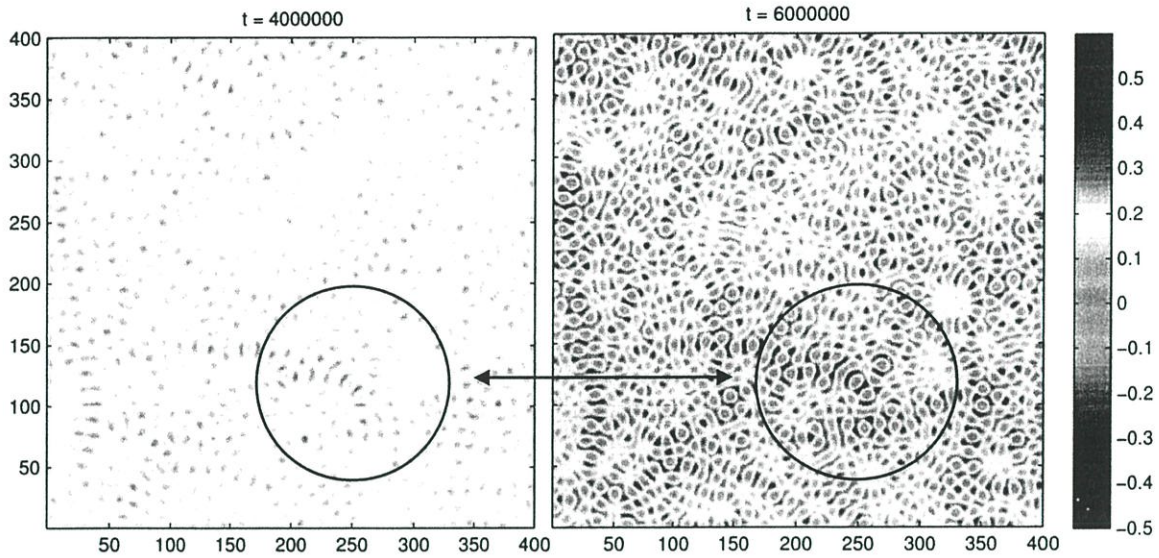
รูปที่ 4.20 ผลการทดลองที่  $t = 42,050,000$



รูปที่ 4.21 ผลการทดลองที่  $t = 42,100,000$

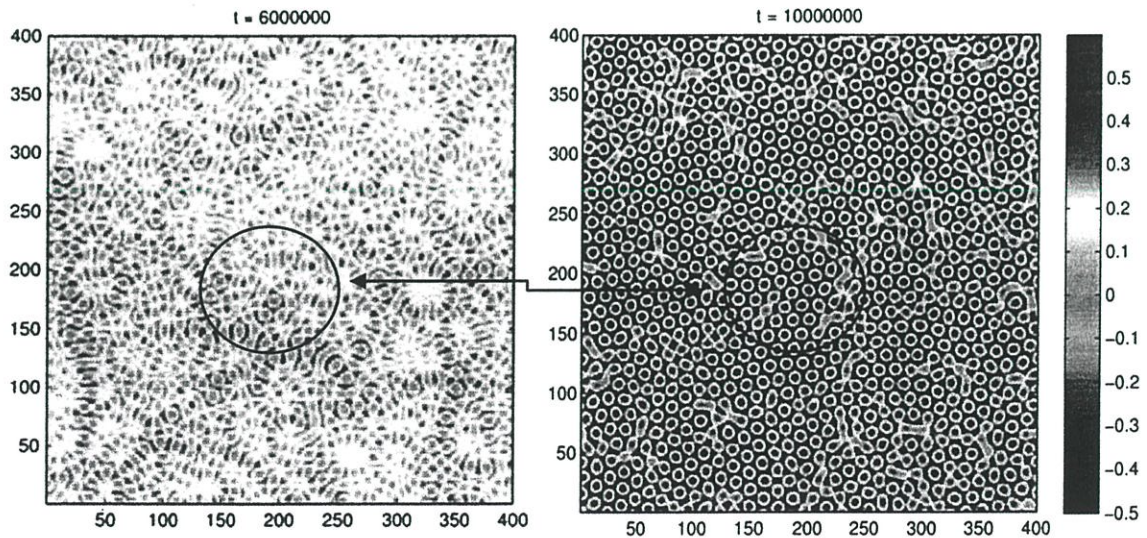
#### 4.4 การเปรียบเทียบผลการทดลอง

เนื่องจากผลที่ได้ออกมาเป็นภาพ ในส่วนนี้จะนำภาพในแต่ละช่วงเวลามาทำการเปรียบเทียบกัน



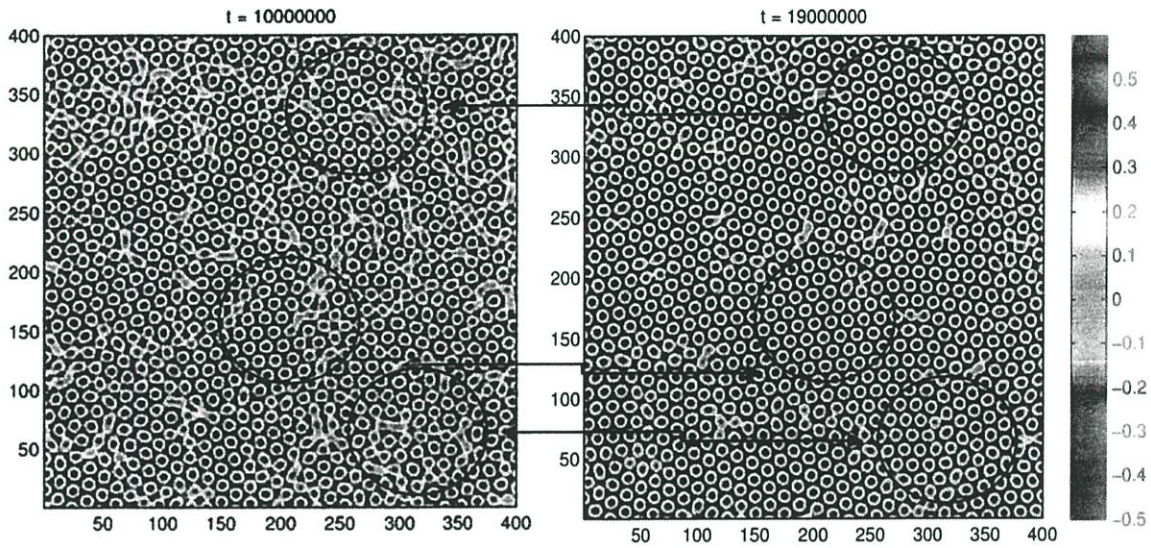
รูปที่ 4.22 การเปรียบเทียบของผลการทดลองที่  $t = 4,000,000$  และ  $6,000,000$

จากภาพที่ 4.22 จะเห็นว่าในวงกลมของภาพซ้ายมือจะยังไม่เห็นการเกิดของอะตอมจะเห็นเพียงสีเหลืองเข้มเพียงเล็กน้อยเท่านั้น แต่เมื่อเปรียบเทียบกับวงกลมด้านขวามือจะเริ่มเห็นเกิดอะตอมขึ้นมาและสีเริ่มแตกต่างกันคือเกิดสีส้ม และ สีฟ้า ในจุดที่เกิดของอะตอม



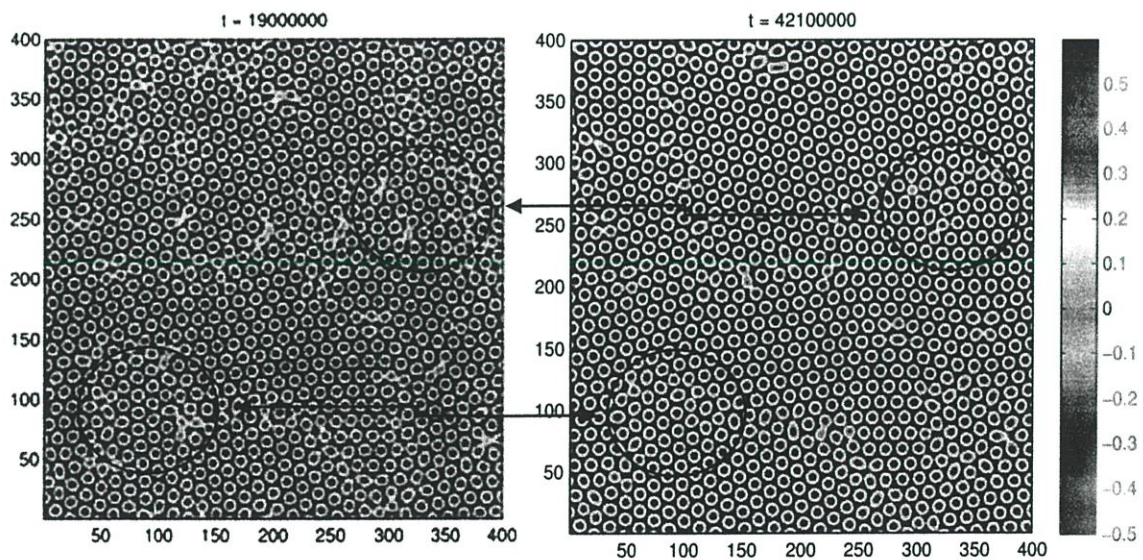
รูปที่ 4.23 การเปรียบเทียบของผลการทดลองที่  $t = 6,000,000$  และ  $10,000,000$

จากภาพที่ 4.23 การเกิดขึ้นของอะตอมมีความชัดเจนมากยิ่งขึ้น จากรูปผลการทดลองที่  $t = 10,000,000$  ถึงแม้ว่าจะมีความชัดเจนเพิ่มขึ้นแต่พฤติกรรมของการอะตอมนั้นพยายามที่จะหมุนเพื่อสร้างขอบเกรนต่อไป อีกทั้งอะตอมบางส่วนยังไม่แข็งตัว



รูปที่ 4.24 การเปรียบเทียบของผลการทดลองที่  $t = 10,000,000$  และ  $19,000,000$

จากภาพที่ 4.24 จะสังเกตเห็นว่าในบริเวณที่วงกลมมีการจัดเรียงตัวของอะตอมที่เป็นระเบียบมากขึ้น



รูปที่ 4.25 การเปรียบเทียบของผลการทดลองที่  $t = 19,000,000$  และ  $42,100,000$

จากภาพที่ 4.25 เกิดการหมุนเพื่อปรับสภาพของระบบ อีกทั้งมีการเคลื่อนตัวของอะตอมเพื่อพยายามสร้างอะตอมใหม่ จะสังเกตเห็นแนวของขอบเกรนได้อย่างชัดเจนขึ้น

## บทที่ 5

### สรุปผลและวิเคราะห์ผลการดำเนินงาน

#### 5.1 สรุปผลการดำเนินงาน

ปริญญานิพนธ์ฉบับนี้จัดทำขึ้นเพื่อศึกษาแบบจำลองการเกิดปฏิกิริยาของขอบเกรน โดยใช้วิธีการศึกษา Phase field crystal โดยแบบจำลองดังกล่าวใช้เพื่อศึกษาการเกิดความเปลี่ยนแปลงในระดับอะตอมของวัสดุในขณะที่เกิดการแข็งตัว โดยเริ่มแรกได้ทำการศึกษาทฤษฎีเบื้องต้นเกี่ยวกับ Phase Field crystal และ สมการที่เกี่ยวข้องสำหรับการเขียนคำสั่งด้วยโปรแกรม Matlab โดยจะทำการแปลงสมการที่เกี่ยวข้องเหล่านั้นให้อยู่ในรูปของสมการอย่างง่ายเพื่อใช้สำหรับโปรแกรม Matlab จากนั้นทำการประมวลผลสมการดังกล่าว โดยโปรแกรม Matlab จะเก็บข้อมูลไว้ด้วยการบันทึกเป็นรูปภาพในขั้นตอนแต่ละครั้ง หลังจากที่ได้รูปภาพจากการประมวลผลของโปรแกรม Matlab ที่ได้บันทึกเอาไว้ จะสังเกตการเปลี่ยนแปลงของแบบจำลองในแต่ละช่วงเวลา เพื่อสังเกตการเปลี่ยนแปลงของเกรน

##### 5.1.1 ผลที่ได้รับ

จากการสังเกตการเปลี่ยนแปลงของรูปภาพที่ได้จากการบันทึกผลของโปรแกรม Matlab ทำให้สังเกตเห็นการเปลี่ยนแปลงของอะตอมในช่วงเวลาที่เปลี่ยนไป จะสังเกตเห็นการเกิดเกรนขึ้นในบริเวณของขอบเขตที่ทำการศึกษา โดยแบบจำลองดังกล่าวอาจใช้สำหรับทดแทนการทดลองในห้องทดลองทางวิทยาศาสตร์ได้ ถ้าในส่วนที่สนใจจะทำการศึกษานั้นสอดคล้องกับแบบจำลองนี้ จะเป็นการลดค่าใช้จ่ายในการทำการทดลองในห้องทดลองทางวิทยาศาสตร์และช่วยลดระยะเวลาในการทำการทดลองได้ในอนาคต

#### 5.2 ข้อเสนอแนะ

ผลของการประมวลผลของแบบจำลองนี้ มีความแม่นยำในการประมวลผลน้อยกว่าผลที่ได้จากทดลองทางวิทยาศาสตร์ เนื่องจากในห้องทดลองวิทยาศาสตร์นั้นมีเครื่องมือและอุปกรณ์ ที่สามารถตรวจสอบวัสดุใดๆได้มีความหลายหลายและแม่นยำสูงกว่าแบบจำลองด้วยโปรแกรม อีกทั้งแบบจำลองนี้อาจจำเป็นที่จะต้องใช้ระยะเวลาในการประมวลผลด้วยโปรแกรม Matlab ที่นานขึ้น เพื่อที่ทำการสังเกตการณ์การเปลี่ยนแปลงของอะตอม ทำให้สามารถวิเคราะห์การเกิดปฏิกิริยาของขอบเกรนได้มากกว่านี้ เนื่องจากผลที่ได้เกรนที่เกิดขึ้นยังไม่ต่อกันอย่างสมบูรณ์ เนื่องจากเวลาที่ใช้ทดลองมีจำกัด

## เอกสารอ้างอิง

1. V.W.L Chan , N. Pisutha-Arnond , K.Thornton.The Phase-Field crystal Method : An Overview,Development,and Applications.
2. N.Provatas ,J.A. Dantzig ,B.Athreya ,P.Chan ,P0Stefanovic ,N.Goldenfeld ,and K.R.Elder.Using the Phase-Field Crystal Method in the Multi-Scale Modeling of Microstructure Evolution.