

การใช้นับจำลอง Phase-Field Crystal
ในการจำลองการแข็งตัวของโลหะ
USING THE PHASE-FIELD CRYSTAL METHOD TO
SIMULATE SOLIDIFICATION OF METALS

นายณัฐภัทร ทวีศรี
MR. NATTAPAT TAWEESRI

ปริญญาโท เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรวิศวกรรมศาสตรบัณฑิต
สาขาวิชาวิศวกรรมอุตสาหการ คณะวิศวกรรมศาสตร์
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
ปีการศึกษา 2556

การใช้แบบจำลอง Phase-Field Crystal

ในการจำลองการแข่งขันตัวของโลหะ

USING THE PHASE-FIELD CRYSTAL METHOD TO
SIMULATE SOLIDIFICATION OF METALS

นายณัฐภัทร ทวีศรี

MR. NATTAPAT TAWESRI

ปริญญานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรวิศวกรรมศาสตรบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมอุตสาหการ คณะวิศวกรรมศาสตร์

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

ปีการศึกษา 2556

USING THE PHASE-FIELD CRYSTAL METHOD TO
SIMULATE SOLIDIFICATION OF METALS

MR. NATTAPAT TAWEESRI

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
ACADEMIC YEAR 2013

คณะวิศวกรรมศาสตร์

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

ใบรับรองปริญญาานิพนธ์

หัวข้อปริญญาานิพนธ์

การใช้แบบจำลอง Phase-Field Crystal ในการจำลองการแข็งตัวของโลหะ

USING THE PHASE-FIELD CRYSTAL METHOD TO SIMULATE
SOLIDIFICATION OF METALS

นักศึกษา

นายณัฐภัทร ทวีศรี รหัสประจำตัว 53010501

หลักสูตร

วิศวกรรมศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาวิศวกรรมอุตสาหการ

อาจารย์ผู้ควบคุมปริญญาานิพนธ์

ดร.นิรันดร์ พิสุทธอนนท์

หัวข้อปริญญาานิพนธ์	การใช้แบบจำลอง Phase-Field Crystal ในการจำลองการแข็งตัวของโลหะ
นักศึกษา	นายณัฐภัทร ทวีศรี
หลักสูตร	วิศวกรรมศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาวิศวกรรมอุตสาหการ
	สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
ปีการศึกษา	2556
อาจารย์ผู้ควบคุมปริญญาานิพนธ์	ดร.นิรันดร์ พิสุทธอานนท์

บทคัดย่อ

โครงการปริญญาานิพนธ์นี้จัดทำขึ้นเพื่อศึกษาการใช้แบบจำลอง Phase-Field Crystal ในการจำลองการแข็งตัวของโลหะ โดยแบบจำลองนี้สามารถทำนายการแข็งตัวของสสารได้ จากผลการดำเนินงานของกลุ่มผู้วิจัยพบว่าตัวแปรที่ทำให้การแข็งตัวของโลหะมีอัตราที่ไม่เท่ากัน ได้แก่ อุณหภูมิ ซึ่งมีผลต่อการเกิดความเย็นยิ่งยวด (Undercool) โดยทำหน้าที่เป็นแรงผลักดัน (Driving Force) ของระบบที่ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงเฟส ดังนั้นเมื่ออุณหภูมิมีน้อย (ติดลบมาก) ทำให้การเย็นจัดต่ำกว่าจุดเยือกแข็ง (Supercool) มีมาก ส่งผลให้การแข็งตัวเกิดขึ้นได้เร็ว ในการศึกษานี้ได้ควบคุมกลไกที่สำคัญในการเปลี่ยนแปลงเฟส 2 กลไกให้เท่ากันในทุกการทดลอง คือ การเกิดนิวเคลียส (Nucleation) และการแพร่ (Diffusion) การเกิดนิวเคลียสเท่ากันเนื่องจากได้กำหนดค่าเริ่มต้นของการเกิดนิวเคลียสด้วยข้อมูลเริ่มต้นเป็นค่าเดียวกัน และแบบจำลองนี้ได้ทำการสุ่มค่าในลำดับถัดไปจากข้อมูลเริ่มต้น การแพร่เท่ากันเนื่องจากสัมประสิทธิ์การเคลื่อนที่ของอะตอม (Mobility Coefficient) นั้นไม่ได้เป็นฟังก์ชันของอุณหภูมิ การแพร่ในทุกอุณหภูมิจึงเท่ากันหมด ดังนั้นอัตราการเปลี่ยนแปลงเฟสจึงขึ้นอยู่กับแรงผลักดันของระบบเพียงอย่างเดียว ซึ่งหากทำให้การเกิดนิวเคลียสและการแพร่เป็นฟังก์ชันของอุณหภูมิ จะทำให้ผลที่ได้เปลี่ยนแปลงไปและเหมือนกับความเป็นจริงมากขึ้น

Thesis Title	Using the Phase-Field Crystal Method to Simulate Solidification of Metals
Student	Mr. Nattapat Taweessri
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 purpose of this thesis is to study an application of the phase-field crystal method to simulate solidification of metals. This model can be used to predict the solidification of materials. From the results, we find that the rate of transformation depends on the degree of undercooling; undercooling is one of the driving forces for phase transformation. So when the degree of supercooling is high (low temperature), the transformation rate is high. In this study, we control two important factors that affect phase transformation; we made an assumption that nucleation and diffusion are temperature independent. The independence of nucleation on temperature is achieved by using initial data for all simulation at different temperatures. The independence of diffusion on temperature is realized through equal mobility coefficient at all temperatures. Therefore, rate of transformation in this particular study only depends on the degree of supercooling. In order to make the simulations more realistic, one should add the dependence of nucleation and diffusion on temperature in the future work.

กิตติกรรมประกาศ

ปริญญาานิพนธ์เรื่อง การใช้แบบจำลอง Phase-Field Crystal ในการจำลองการแข็งตัวของโลหะ สามารถสำเร็จ
ลุล่วงไปได้ด้วยดี ผู้วิจัยขอกราบขอบพระคุณบุคคลทุกคนที่มีส่วนเกี่ยวข้องส่งผลให้ปริญญาานิพนธ์ฉบับนี้เสร็จสมบูรณ์

ดร.นิรันดร์ พิสุทธอนันท์ อาจารย์ที่ปรึกษาปริญญาานิพนธ์ ผู้วิจัยขอกราบขอบพระคุณเป็นอย่างสูง สำหรับการ
ให้โอกาสในการศึกษาปริญญาานิพนธ์ฉบับนี้ รวมทั้งความรู้ คำแนะนำ ความช่วยเหลือ และความเอาใจใส่ในทุกๆด้าน
ตลอดเวลาที่ผ่านมา

ขอบคุณเพื่อนทุกคนสำหรับความช่วยเหลือจนทำให้ปริญญาานิพนธ์สำเร็จลุล่วง และคอยเป็นกำลังใจที่ดีตลอดมา

นายณัฐภัทร ทวีศรี

สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อภาษาไทย.....	ก
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ.....	ข
กิตติกรรมประกาศ.....	ค
สารบัญ.....	ง
สารบัญตาราง.....	ช
สารบัญรูป.....	ซ
บทที่ 1 บทนำ	
1.1 ที่มาและความสำคัญของโครงการ.....	1
1.2 วัตถุประสงค์ของโครงการ.....	1
1.3 ขอบเขตของโครงการ.....	1
1.4 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ.....	2
บทที่ 2 ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง	
2.1 ทฤษฎีของแบบจำลอง Phase-Field Crystal.....	3
2.2 การ Discitization.....	4
2.3 การศึกษาเบื้องต้น.....	5
2.4 การศึกษาแบบจำลอง Phase-Field Crystal.....	7
2.5 การอินทิเกรตเชิงตัวเลข (Numerical integration).....	10

สารบัญ (ต่อ)

	หน้า
2.6 Periodic boundary.....	11
2.7 การ Central finite difference.....	11
2.8 การ Laplacian.....	11
2.9 การเกิด Nucleation-Growth.....	12
บทที่ 3 การออกแบบและวิธีการดำเนินงาน	
3.1 การเขียนคำสั่งโดยใช้โปรแกรม MATLAB ในการศึกษาเบื้องต้น.....	14
3.1.1 คำสั่งการสร้างแบบจำลองการแพร่ในแบบ 1 มิติ จากสมการของการแพร่.....	14
3.1.2 คำสั่งการสร้างแบบจำลองการแพร่ในแบบ 2 มิติ จากสมการของการแพร่.....	15
3.2 การเขียนคำสั่งโดยใช้โปรแกรม MATLAB ในการศึกษาแบบจำลอง Phase-Field Crystal.....	16
3.2.1 คำสั่งการสร้างแบบจำลองการแข็งตัวของโลหะที่อุณหภูมิต่างๆ.....	16
3.2.1.1 คำสั่งฟังก์ชันการคำนวณค่าเฉลี่ยของความน่าจะเป็นในการเจออะตอม.....	18
3.2.1.2 คำสั่งฟังก์ชันการ Calculate laplacian.....	19
3.2.1.3 คำสั่งฟังก์ชันการ Update periodic boundary.....	20
บทที่ 4 ผลการดำเนินงาน	
4.1 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.05 ที่เวลาต่างๆ.....	22
4.2 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.1 ที่เวลาต่างๆ.....	24
4.3 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.15 ที่เวลาต่างๆ.....	26

สารบัญ (ต่อ)

หน้า

4.4	แบบจำลองการแข่งขันตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.2 ที่เวลาต่างๆ.....	28
4.5	แบบจำลองการแข่งขันตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.25 ที่เวลาต่างๆ.....	30
4.6	แบบจำลองการแข่งขันตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.3 ที่เวลาต่างๆ.....	32
4.7	แบบจำลองการแข่งขันตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.35 ที่เวลาต่างๆ.....	34
4.8	แบบจำลองการแข่งขันตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.4 ที่เวลาต่างๆ.....	36
บทที่ 5	สรุปและวิเคราะห์ผลการดำเนินงาน	
5.1	วิเคราะห์ผลการดำเนินงาน.....	38
5.2	ข้อเสนอแนะและแนวทางในการศึกษาต่อ.....	40
	หนังสืออ้างอิง.....	41
	ภาคผนวก.....	ผ 1

สารบัญตาราง

หน้า

ตารางที่ 3.1 คำสั่งและความหมายของคำสั่งการสร้างแบบจำลองการแพร่ในแบบ 1 มิติ จากสมการของการแพร่.....	14
ตารางที่ 3.2 คำสั่งและความหมายของคำสั่งการสร้างแบบจำลองการแพร่ในแบบ 2 มิติ จากสมการของการแพร่.....	15
ตารางที่ 3.3 คำสั่งและความหมายของคำสั่งการสร้างแบบจำลองการแข่งขันตัวของโลหะที่อุณหภูมิต่างๆ.....	17
ตารางที่ 3.4 คำสั่งและความหมายของคำสั่งฟังก์ชันการคำนวณค่าเฉลี่ยของความน่าจะเป็นในการเจออะตอม.....	18
ตารางที่ 3.5 คำสั่งและความหมายของคำสั่งฟังก์ชันการ Calculate laplacian.....	19
ตารางที่ 3.6 คำสั่งและความหมายของคำสั่งฟังก์ชันการ Update periodic boundary.....	20

สารบัญรูป

	หน้า
รูปที่ 2.1 Atomistic models.....	3
รูปที่ 2.2 Continuum models.....	4
รูปที่ 2.3 การแพร่ในแบบ 1 มิติ ขณะเวลาที่ 100.....	6
รูปที่ 2.4 การแพร่ในแบบ 1 มิติ ขณะเวลาที่ 10,000.....	6
รูปที่ 2.5 การแพร่ในแบบ 2 มิติ ขณะเวลาที่ 100.....	6
รูปที่ 2.6 การแพร่ในแบบ 2 มิติ ขณะเวลาที่ 10,000.....	6
รูปที่ 2.7 Triangular phase.....	7
รูปที่ 2.8 Stripe phase.....	7
รูปที่ 2.9 Constant phase.....	7
รูปที่ 2.10 Phase diagram.....	8
รูปที่ 2.11 ฟังก์ชัน $f(x)$ ซึ่งแสดงด้วยเส้นสีน้ำเงินมีค่าประมาณด้วยฟังก์ชันเชิงเส้นซึ่งแสดงด้วยเส้นสีแดง.....	10
รูปที่ 2.12 การเกิด Nucleation-Growth.....	12
รูปที่ 3.1 คำสั่งการสร้างแบบจำลองการแพร่ในแบบ 1 มิติ จากสมการของการแพร่.....	14
รูปที่ 3.2 คำสั่งการสร้างแบบจำลองการแพร่ในแบบ 2 มิติ จากสมการของการแพร่.....	15
รูปที่ 3.3 คำสั่งการสร้างแบบจำลองการแข่งขันตัวของโลหะที่อุณหภูมิต่างๆ.....	16
รูปที่ 3.4 คำสั่งฟังก์ชันการคำนวณค่าเฉลี่ยของความน่าจะเป็นในการเจออะตอม.....	18
รูปที่ 3.5 คำสั่งฟังก์ชันการ Calculate laplacian.....	19
รูปที่ 3.6 คำสั่งฟังก์ชันการ Update periodic boundary.....	20

สารบัญรูป (ต่อ)

	หน้า
รูปที่ 4.1 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.05 ขณะเวลา 50,000.....	22
รูปที่ 4.2 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.05 ขณะเวลา 1,000,000.....	22
รูปที่ 4.3 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.05 ขณะเวลา 2,000,000.....	23
รูปที่ 4.4 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.1 ขณะเวลา 50,000.....	24
รูปที่ 4.5 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.1 ขณะเวลา 1,000,000.....	24
รูปที่ 4.6 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.1 ขณะเวลา 2,000,000.....	25
รูปที่ 4.7 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.15 ขณะเวลา 50,000.....	26
รูปที่ 4.8 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.15 ขณะเวลา 1,000,000.....	26
รูปที่ 4.9 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.15 ขณะเวลา 2,000,000.....	27
รูปที่ 4.10 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.2 ขณะเวลา 50,000.....	28
รูปที่ 4.11 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.2 ขณะเวลา 1,000,000.....	28
รูปที่ 4.12 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.2 ขณะเวลา 2,000,000.....	29
รูปที่ 4.13 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.25 ขณะเวลา 50,000.....	30
รูปที่ 4.14 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.25 ขณะเวลา 1,000,000.....	30
รูปที่ 4.15 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.25 ขณะเวลา 2,000,000.....	31
รูปที่ 4.16 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.3 ขณะเวลา 50,000.....	32
รูปที่ 4.17 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.3 ขณะเวลา 1,000,000.....	32
รูปที่ 4.18 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.3 ขณะเวลา 2,000,000.....	33

สารบัญรูป (ต่อ)

หน้า

รูปที่ 4.19	แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.35 ขณะเวลา 50,000.....	34
รูปที่ 4.20	แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.35 ขณะเวลา 1,000,000.....	34
รูปที่ 4.21	แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.35 ขณะเวลา 2,000,000.....	35
รูปที่ 4.22	แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.4 ขณะเวลา 50,000.....	36
รูปที่ 4.23	แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.4 ขณะเวลา 1,000,000.....	36
รูปที่ 4.24	แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.4 ขณะเวลา 2,000,000.....	37
รูปที่ 5.1	Phase diagram.....	39
รูปที่ 5.2	การเกิด Nucleation-Growth.....	39

บทที่ 1

บทนำ

1.1 ที่มาและความสำคัญของโครงการ

การศึกษาทางด้านวัสดุศาสตร์ในอดีตจะใช้การทดลองในการศึกษาวัสดุ แต่บางครั้งการทดลองนั้นใช้ระยะเวลาและมีความซับซ้อนสูง การใช้ทฤษฎีในการศึกษาวัสดุถึงแม้ว่าจะเป็นอีกทางเลือกหนึ่ง แต่ความซับซ้อนของสมการทางฟิสิกส์ทำให้การใช้ทฤษฎีเพื่ออธิบายหรือทำนายคุณสมบัติของวัสดุจริงนั้นเป็นไปได้ยาก แต่ในปัจจุบันเราสามารถใช้อุปกรณ์คอมพิวเตอร์ความเร็วสูงมาช่วยในการแก้สมการทางฟิสิกส์ที่ซับซ้อน ทำให้การใช้ทฤษฎีเพื่ออธิบายหรือทำนายคุณสมบัติของวัสดุจริงเป็นไปได้มากขึ้น แบบจำลอง Phase-Field Crystal เป็นสมการทางฟิสิกส์ ซึ่งถูกคิดค้นขึ้นมาในช่วงระยะเวลา 20 ปีที่ผ่านมา แบบจำลองนี้ถือว่าเป็นแบบจำลองที่ใหม่และยังมีการศึกษาอย่างต่อเนื่อง แบบจำลองนี้มีความเป็นไปได้ที่จะทำนายถึงคุณสมบัติของวัสดุ นอกจากนั้นยังสามารถลดระยะเวลาและลดค่าใช้จ่ายในการทดลอง จึงเป็นเรื่องที่น่าสนใจในการศึกษา

ด้วยความซับซ้อนของสมการที่นำมาใช้สำหรับแบบจำลอง Phase-Field Crystal จึงจำเป็นที่จะต้องทราบถึงการเขียนโปรแกรมเพื่อแก้สมการของการแพร่ให้ได้ก่อน เพราะสมการของการแพร่มีส่วนที่คล้ายกับสมการของการแข็งตัวของโลหะ แต่ต่างกันตรงที่สมการของการแข็งตัวของโลหะสามารถแสดงความสัมพันธ์ของอะตอมได้

1.2 วัตถุประสงค์ของโครงการ

1. สร้างโปรแกรมเพื่อนำไปแก้สมการคณิตศาสตร์ของการแข็งตัวของโลหะ
2. จำลองการแข็งตัวของโลหะที่สถานการณ์ต่างๆโดยตัวแปรที่ต่างกัน
3. ศึกษาความสัมพันธ์ของโครงสร้างจุลภาคของระบบกับคุณสมบัติทางกายภาพของวัสดุ

1.3 ขอบเขตของโครงการ

1. สร้างแบบจำลอง Phase-Field Crystal โดยใช้โปรแกรม MATLAB
2. สร้างแบบจำลองการแข็งตัวของโลหะในแบบ 2 มิติ

1.4 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1. ได้เรียนรู้การเขียนโปรแกรมเพื่อนำไปแก้สมการคณิตศาสตร์ของการแข็งตัวของโลหะ
2. ได้แบบจำลอง Phase-Field Crystal ออกมา ซึ่งสามารถนำมาประยุกต์ใช้ได้จริง

บทที่ 2

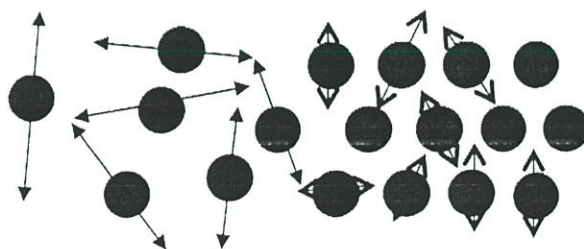
ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง

2.1 ทฤษฎีของแบบจำลอง Phase-Field Crystal

ในปัจจุบันสามารถใช้คอมพิวเตอร์ความเร็วสูงมาช่วยในการแก้สมการทางฟิสิกส์ที่ซับซ้อน โดยใช้วิธี Computational methods ทำให้การใช้ทฤษฎีเพื่ออธิบายหรือทำนายคุณสมบัติของวัสดุจริงเป็นไปได้มากขึ้น และสามารถลดระยะเวลาและลดค่าใช้จ่ายในการทดลอง ซึ่ง Computational methods แบ่งได้เป็น 2 วิธี

2.1.1 Atomistic models หรือ Microscopic models

เป็นการศึกษาการเปลี่ยนแปลงของวัสดุ โดยเป็นวิธีที่จะศึกษาการเปลี่ยนแปลงของอะตอมภายในระยะเวลาหนึ่งๆ เป็นการจำลองลักษณะการเปลี่ยนแปลงของอะตอมที่มีความละเอียดสูงมาก ซึ่ง Atomistic models มีจุดเด่นจากการให้ความละเอียดที่สูงมากและให้ความถูกต้องแม่นยำที่สูงมาก แต่จุดด้อยของ Atomistic models คือ การใช้ระยะเวลาในการศึกษาที่นาน เพราะโดยปกติอะตอมจะมีการสั่นตัวอยู่ตลอดเวลา ซึ่งการจำลองลักษณะการเปลี่ยนแปลงของอะตอมในระยะเวลาสั้นๆ อาจจะต้องใช้เวลานาน



รูปที่ 2.1 Atomistic models

(Chan, Pisutha-Armond, and Thornton, 2012)

2.1.2 Continuum models หรือ Macroscopic models

เป็นการศึกษาการเปลี่ยนแปลงของวัสดุ โดยวิธีสังเกตจากคุณสมบัติต่างๆที่เปลี่ยนไป ว่ามีการเปลี่ยนแปลงไปอย่างไรแล้วจึงนำมาใช้ทำนาย โดยจะไม่ศึกษาถึงในระดับอะตอม ซึ่งจุดเด่นของ Continuum models คือ เป็นวิธีที่ไม่จำเป็นต้องใช้ระยะเวลาในการศึกษานานมากนัก แต่จุดด้อยของ Continuum models คือ การให้ความถูกต้องที่มีความแม่นยำต่ำ และไม่สามารถบอกความละเอียดที่มากได้



รูปที่ 2.2 Continuum models (Chan et al., 2012)

2.1.3 แบบจำลอง Phase-Field Crystal

แบบจำลอง Phase-Field Crystal เป็นการศึกษาการเปลี่ยนแปลงของวัสดุอีกทางเลือกหนึ่งโดยการรวมข้อดีจากทั้งวิธี Atomistic models และ Continuum models ซึ่งทำให้วิธีนี้ใช้เวลาในการศึกษารวดเร็วกว่า Atomistic models และให้ความถูกต้องแม่นยำมากกว่า Continuum models โดยแบบจำลอง Phase-Field Crystal เป็นวิธีการศึกษาพื้นผิวที่มีความน่าจะเป็นที่จะมีอะตอมอยู่ โดยไม่ใช่ตำแหน่งที่อะตอมอยู่จริงเหมือนกับ Atomistic models

2.2 การ Discitization

สมการที่อยู่ในรูป Analytical form เช่น $\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla^2 c$ เป็นตัวแปรที่มีรูปแบบต่อเนื่อง (Continuous) ซึ่งเป็นการกระทำในรูปแบบ Differential ในการแก้สมการจึงต้องใช้วิธีคำนวณด้วยมือ ไม่สามารถคำนวณในโปรแกรมคอมพิวเตอร์ได้ แต่สมการที่อยู่ในรูป Discretized form เช่น $c_i^{j+1} = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (c_{i+1}^j + c_{i-1}^j - 2c_i^j) + c_i^j$ เป็นตัวแปรที่มีรูปแบบตัวเลข (Discrete Numbers) ซึ่งเป็นการกระทำในรูปแบบ Algebraic ดังนั้นในการแก้สมการจึงสามารถคำนวณในโปรแกรมคอมพิวเตอร์ได้ จึงจำเป็นที่จะต้องทำสมการที่อยู่ในรูป Analytical form ให้อยู่ในรูป Discretized form เพื่อนำสมการมาใช้ในการเขียนโปรแกรม MATLAB

2.3 การศึกษาเบื้องต้น

เนื่องจากความซับซ้อนของสมการที่นำมาใช้สำหรับแบบจำลอง Phase-Field Crystal จึงจำเป็นที่จะต้องทราบถึงการเขียนโปรแกรมเพื่อแก้สมการของการแพร่ให้ได้ก่อน เพราะสมการของการแพร่มีส่วนที่คล้ายกับสมการของการแข็งตัวของโลหะ แต่ต่างกันตรงที่สมการของการแข็งตัวของโลหะสามารถแสดงความสัมพันธ์ของอะตอมได้ ดังนั้นในการศึกษาเบื้องต้นนี้จึงมีความสำคัญต่อการเขียนโปรแกรมเพื่อแก้สมการของการแข็งตัวของโลหะ

2.3.1 การแพร่

สมการของการแพร่ (Diffusion equation) แสดงถึง การเปลี่ยนแปลงของความหนาแน่น โดยสสารจะแพร่ ออกจากความหนาแน่นสูงไปยังความหนาแน่นต่ำ โดยอยู่ในรูปของสมการดังนี้

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla^2 c \quad (2.1)$$

c = ความเข้มข้น (Concentration)

t = เวลา (Time)

ซึ่งสมการของการแพร่นั้นสามารถทำให้อยู่ในรูปแบบทั้ง 1 มิติ และ 2 มิติ ได้ดังต่อไปนี้

2.3.1.1 สมการของการแพร่ในแบบ 1 มิติ อยู่ในรูปของสมการดังนี้

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (2.2)$$

ใน 1 มิติ ค่า $c(x_j, t_j)$ ทำให้อยู่ในรูป c_i^j และ ∇^2 ทำให้อยู่ในรูป $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

จากรูปแบบต่อเนื่อง (Continuous) ต้องทำให้อยู่ในรูปแบบตัวเลข (Discretized) อยู่ในรูปของสมการดังนี้

$$c_i^{j+1} = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (c_{i+1}^j + c_{i-1}^j - 2c_i^j) + c_i^j \quad (2.3)$$

i = พื้นที่ในแกน x (Space of x -axis)

j = เวลา (Time)

2.3.1.2 สมการของการแพร่ในแบบ 2 มิติ อยู่ในรูปของสมการดังนี้

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \quad (2.4)$$

ใน 2 มิติ ค่า $c(x_i, y_j, t_k)$ ทำให้อยู่ในรูป $C_{i,j}^k$ และ ∇^2 ทำให้อยู่ในรูป $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$

จากรูปแบบต่อเนื่อง (Continuous) ต้องทำให้อยู่ในรูปแบบตัวเลข (Discretized) อยู่ในรูปของสมการดังนี้

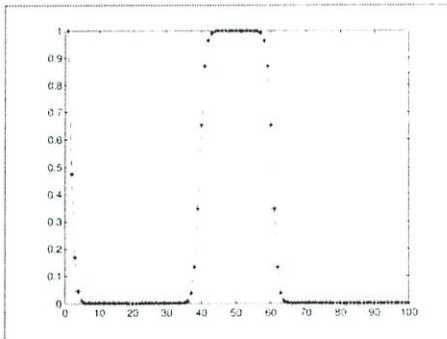
$$C_{i,j}^{k+1} = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (C_{i+1,j}^k + C_{i-1,j}^k + C_{i,j+1}^k + C_{i,j-1}^k - 4C_{i,j}^k) + C_{i,j}^k \quad (2.5)$$

i = พื้นที่ในแกน x (Space of x -axis)

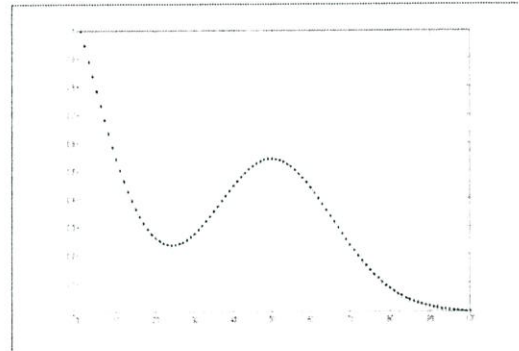
j = พื้นที่ในแกน y (Space of y -axis)

k = เวลา (Time)

นำสมการของการแพร่ในแบบ 1 มิติ เพื่อสร้างภาพเคลื่อนไหวของแบบจำลองการแพร่ในแบบ 1 มิติ

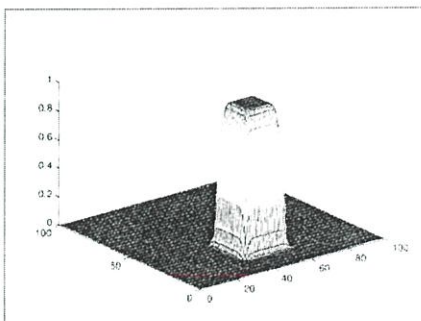


รูปที่ 2.3 การแพร่ในแบบ 1 มิติ ขณะเวลาที่ 100

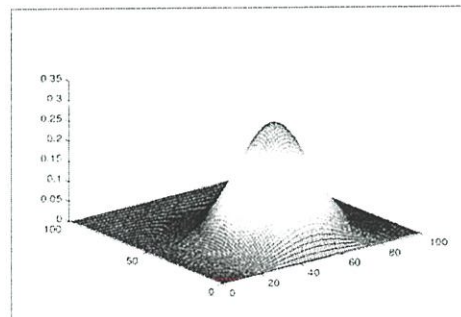


รูปที่ 2.4 การแพร่ในแบบ 1 มิติ ขณะเวลาที่ 10,000

นำสมการของการแพร่ในแบบ 2 มิติ เพื่อสร้างภาพเคลื่อนไหวของแบบจำลองการแพร่ในแบบ 2 มิติ



รูปที่ 2.5 การแพร่ในแบบ 2 มิติ ขณะเวลาที่ 100



รูปที่ 2.6 การแพร่ในแบบ 2 มิติ ขณะเวลาที่ 10,000

ดังนั้นจากผลการดำเนินงานจึงเป็นสิ่งที่บ่งบอกได้ว่าทำการศึกษาเบื้องต้นสำเร็จ เพราะสามารถเขียนโปรแกรมเพื่อแก้สมการของการแพร่ และสามารถสร้างภาพเคลื่อนไหวของแบบจำลองการแพร่ในแบบ 1 มิติและ 2 มิติ

2.4 การศึกษาแบบจำลอง Phase-Field Crystal

สำหรับสมการที่นำมาใช้สำหรับแบบจำลอง Phase-Field Crystal ได้แก่

2.4.1 ฟังก์ชันพลังงานอิสระ (Free energy functional)

ฟังก์ชันพลังงานอิสระนั้นทำให้เกิดเฟสต่างๆใน Phase diagram ได้แก่ ได้ Constant phase Stripe phase และ Triangular phase โดย Constant phase เป็นเฟสของเหลว Stripe phase เป็นเฟสของแข็งที่เป็นเส้นและขีดในลักษณะ 2 มิติ ซึ่งไม่ตรงกับความเป็นจริงใน 3 มิติ แต่ Triangular Phase เป็นเฟสของแข็งโดยจุดที่ติดกันทุกจุดเป็น 3 เหลี่ยมเล็กๆประกอบกัน ซึ่ง Triangular Phase นั้นมีลักษณะที่คล้ายกับอะตอมมากที่สุด จึงเป็นเฟสที่พิจารณาในการใช้แบบจำลอง Phase-Field Crystal ในการจำลองการแข็งตัวของโลหะ



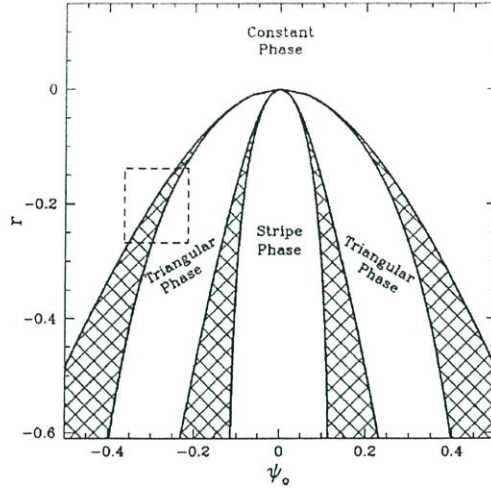
รูปที่ 2.7 Triangular phase



รูปที่ 2.8 Stripe phase



รูปที่ 2.9 Constant phase



รูปที่ 2.10 Phase diagram (Elder and Grant, 2004)

โดยฟังก์ชันพลังงานอิสระอยู่ในรูปของสมการดังนี้

$$\mathcal{F} = \int d\vec{r} \left(\frac{\phi}{2} [a\Delta T + \lambda(q_0^2 + \nabla^2)^2] \phi + u \frac{\phi^4}{4} \right) \quad (2.6)$$

\mathcal{F} = ฟังก์ชันพลังงานอิสระ (Free energy functional)

ϕ = ความหนาแน่นของความน่าจะเป็นในการพบอะตอม (Atomic probability density)

λ, u = ค่าคงที่ (Constant)

ทำสมการฟังก์ชันพลังงานอิสระให้ไม่มีหน่วย (Non-dimensionalization) โดยกำหนดให้

$$\vec{x} = \vec{r}q_0, \psi = \phi \sqrt{\frac{u}{\lambda q_0^4}}, r = \frac{a\Delta T}{\lambda q_0^4}, \tau = \Gamma \lambda q_0^6 t \quad (2.7)$$

นำค่าจากสมการ 2.7 แทนค่าในสมการ 2.6 ได้ดังนี้

$$F = \frac{\mathcal{F}}{\mathcal{F}_0} = \int d\vec{x} \left[\frac{\psi}{2} \omega(\nabla^2) \psi + \frac{\psi^4}{4} \right] \quad (2.8)$$

สมการฟังก์ชันพลังงานอิสระที่ไม่มีหน่วย อยู่ในรูปของสมการดังนี้

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla^2 (\omega(\nabla^2) \psi^t + (\psi^t)^3) \quad (2.9)$$

$$\omega(\nabla^2) = r + (1 + \nabla^2)^2 \quad (2.10)$$

แทนค่าจากสมการ 2.10 ในสมการ 2.9 ได้ดังนี้

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = (r + 1)\nabla^2 \psi^t + 2\nabla^4 \psi^t + \nabla^6 \psi^t + \nabla^2 (\psi^t)^3 \quad (2.11)$$

ทำให้อยู่ในรูปแบบตัวเลข (Discretized) ได้ดังนี้

$$\frac{\psi^{t+1} - \psi^t}{\Delta t} = (r + 1)\nabla^2 \psi^t + 2\nabla^4 \psi^t + \nabla^6 \psi^t + \nabla^2 (\psi^t)^3 \quad (2.12)$$

จัดรูปสมการได้ดังนี้

$$\psi^{t+1} = \Delta t [(r + 1)\nabla^2 \psi^t + 2\nabla^4 \psi^t + \nabla^6 \psi^t + \nabla^2 (\psi^t)^3] + \psi^t \quad (2.13)$$

จากการจัดรูปสมการ จึงนำสมการ 2.13 ไปคำนวณในโปรแกรมคอมพิวเตอร์ได้ โดยที่ ψ^t ในสมการ คือ ค่าความน่าจะเป็นในการเจออะตอม ซึ่งในการเขียนคำสั่งโดยใช้โปรแกรม MATLAB จะแทนด้วย cn

2.4.2 สมการวิวัฒนาการ (Evolution equation)

เป็นกฎการอนุรักษ์พลังงาน ในระบบปิด โดยการสลายพลังงานนั้น ตามหลักการที่พลังงานจะลดลงเมื่อเวลาผ่านไป และเกิดการเพิ่มขึ้นของเอนโทรปีของระบบตามกฎข้อที่ 2 ของเทอร์โมไดนามิกส์ โดยสมการวิวัฒนาการอยู่ในรูปของสมการดังนี้

$$\frac{\partial \phi(r)}{\partial t} = \Gamma \nabla^2 \frac{\delta \mathcal{F}(\phi(r))}{\delta \phi(r)} + \eta \quad (2.14)$$

ϕ = ความเข้มข้น (Concentration)

t = เวลา (Time)

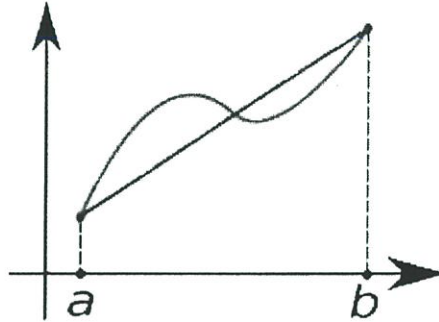
r = การเปลี่ยนเวลาของการจำลองระบบ

Γ = สัมประสิทธิ์การเคลื่อนที่ของอะตอม (Mobility coefficient)

η = การสั่นของอะตอมโดยการสุ่ม (Noise)

2.5 การอินทิเกรตเชิงตัวเลข (Numerical integration)

ใช้ Trapezoid rule เพื่อหา Integral ของ function ด้วยการประมาณพื้นที่ใต้กราฟ หรือพื้นผิวเป็นส่วนย่อยๆ ที่มีรูปร่างเป็นพื้นที่แบบสี่เหลี่ยมคางหมู Trapezoid rule จึงใช้เพื่อคำนวณหาปริมาตรใต้พื้นผิว



รูปที่ 2.11 ฟังก์ชัน $f(x)$ ซึ่งแสดงด้วยเส้นสีน้ำเงินมีค่าประมาณด้วยฟังก์ชันเชิงเส้นซึ่งแสดงด้วยเส้นสีแดง

โดย Trapezoid rule อยู่ในรูปของสมการดังนี้

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b - a) \left[\frac{f(a)+f(b)}{2} \right] \quad (2.15)$$

ซึ่ง Uniform grid ของ Trapezoid rule ที่อยู่ในรูป Discretized form เพื่อนำมาใช้ในการคำนวณในโปรแกรมคอมพิวเตอร์ อยู่ในรูปของสมการดังนี้

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2N} (f(x_1) + 2f(x_2) + 2f(x_3) + \dots + 2f(x_N) + f(x_{N+1})) \quad (2.16)$$

ซึ่งในการใช้แบบจำลอง Phase-Field Crystal สำหรับการสร้างฟังก์ชันการคำนวณค่าเฉลี่ยของความน่าจะเป็นในการเจออะตอม จะต้องทำการอินทิเกรตเชิงตัวเลขของฟังก์ชัน 2 ตัวแปร (x,y) แล้วใช้ Trapezoid rule ซึ่งการอินทิเกรตนั้นจะต้องทำการอินทิเกรต 2 ครั้ง คือ อินทิเกรตในแนวแกน x และอินทิเกรตในแนวแกน y โดยอยู่ในรูปของสมการดังนี้

$$\iint_{aa}^{bc} f(x,y)dxdy \quad (2.17)$$

2.6 Periodic boundary

เป็นการจำลองอะตอมที่เรียงตัวกันเป็นคาบ เพื่อกำจัดขอบเขตของกราฟที่ได้ให้ต่อเนื่องกันไป แม้จะอยู่สุดขอบเขตของการมองเห็นแต่อะตอมตัวสุดท้ายในด้านนั้นจะไปปรากฏเป็นอะตอมตัวแรกในอีกด้านหนึ่งของภาพเสมอ Periodic boundary จึงเป็นการดึงข้อมูลจากจุดที่เลยขอบเขตที่สามารถมองเห็น มาแสดงผลในจุดแรกของฝั่งตรงกันข้าม

2.7 การ Central finite difference

เป็นการแปลง ∇^2 ให้อยู่ในรูปของ $\frac{c_{i-1}+c_{i+1}-2c_i}{2dx^2}$ ซึ่งสามารถนำมาใช้ในการคำนวณในโปรแกรมคอมพิวเตอร์

2.8 การ Laplacian

ค่า $\nabla^2 \psi^t$ จากสมการ 2.13 หาค่าโดยการทำ Laplacian 1 รอบ

จึงต้องทำการประยุกต์ฟังก์ชันการ Calculate laplacian โดยอยู่ในรูปของตัวแปร lap_cn

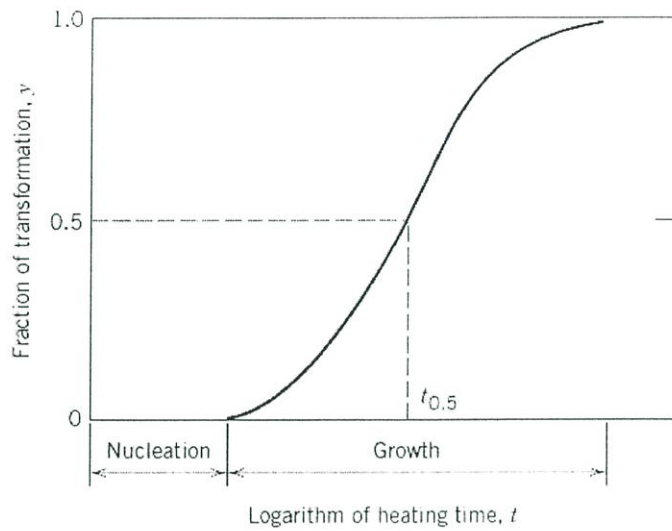
ค่า $\nabla^4 \psi^t$ จากสมการ 2.13 หาค่าโดยการทำ Laplacian 2 รอบ

จึงต้องทำการประยุกต์ฟังก์ชันการ Calculate laplacian โดยอยู่ในรูปของตัวแปร lap2_cn

ค่า $\nabla^6 \psi^t$ จากสมการ 2.13 หาค่าโดยการทำ Laplacian 3 รอบ

จึงต้องทำการประยุกต์ฟังก์ชันการ Calculate laplacian โดยอยู่ในรูปของตัวแปร lap3_cn

2.9 การเกิด Nucleation-Growth



รูปที่ 2.12 การเกิด Nucleation-Growth

จากกราฟแสดงการเปลี่ยนแปลงและเวลา ระยะเวลา Nucleation คือ การเกิดเม็ดของเฟสใหม่ โดยตัวอย่างนี้ คือ การเกิดเม็ดของแข็งที่เรียกว่านิวเคลียส โดยเม็ดเหล่านี้จะค่อยๆเติบโต ในช่วง Nucleation หมายถึง มีการเกาะตัวบ้าง สลายตัวบ้าง เมื่อเกิดการเกาะตัวเป็นก้อนจะทำให้เพิ่มพลังงาน แต่ถ้ามีขนาดใหญ่เกินขนาดวิกฤติจะมีการลดพลังงานของระบบ ถ้าเกาะตัวแล้วมีขนาดใหญ่เพียงพอจะเจริญเติบโตจึงมีช่วงที่รอ และจะไม่เติบโตเป็นของแข็ง ถ้าไม่มีขนาดที่เพียงพอ และในช่วง Growth หมายถึง เป็นช่วงที่เติบโตเต็มที่จนเป็นของแข็ง

บทที่ 3

การออกแบบและวิธีการดำเนินงาน

การเขียนโปรแกรมเพื่อนำไปแก้สมการคณิตศาสตร์ของการแข็งตัวของโลหะโดยใช้แบบจำลอง Phase-Field Crystal ในการจำลองการแข็งตัวของโลหะ มีขั้นตอนการดำเนินงาน ดังนี้

1. เขียนโปรแกรมเพื่อแก้สมการของการแข็งตัวของโลหะ โดยนำ Functions มาประยุกต์ใช้ในการเขียนโปรแกรม เพราะสามารถลดจำนวนการเขียนคำสั่งได้
2. กำหนดค่าของขอบ (Boundary condition) ในที่นี้ใช้ Periodic boundary conditions เพื่อจำลองระบบที่ห่างจากขอบเขตทางกายภาพในปริมาณที่มาก
3. กำหนดค่าเริ่มต้นของ ϕ โดยค่าเริ่มต้นของ ϕ ที่ใช้จะต้องเหมือนกันหมดในแต่ละอุณหภูมิ ซึ่งในที่นี้กำหนดตามสมการ ดังนี้

$$\phi(\vec{x}) = \bar{\phi} + \delta\phi(\vec{x}) \quad (3.1)$$

โดย $\bar{\phi}$ คือ ค่าเฉลี่ยของฟังก์ชัน

และ $\delta\phi(\vec{x})$ คือ ฟังก์ชันค่า random value ที่มีค่าเฉลี่ยเท่ากับ 0

4. กำหนดค่าคงที่ ซึ่งในที่นี้กำหนด
 - ค่าเฉลี่ยของความน่าจะเป็นในการเจออะตอม (Average cn) = 0.2
 - dx (Length of the space interval) = 0.5
 - dt (Length of the time interval) = 4e-5
 - จำนวนช่องตามแกนพื้นที่ (Number of intervals along the space axis) n = 400 m = 400
 - อุณหภูมิ r = -0.05, -0.1, -0.15, -0.2, -0.25, -0.3, -0.35 และ -0.4
5. ทำการ Run program ที่ค่าอุณหภูมิ r ต่างๆกัน โดย Run จนถึงเวลา t = 2,000,000
6. ทำการเก็บผลการทดลอง โดยการ Plot และสังเกตค่า ϕ ที่เวลาต่างๆกัน

3.1 การเขียนคำสั่งโดยใช้โปรแกรม MATLAB ในการศึกษาเบื้องต้น

3.1.1 คำสั่งการสร้างแบบจำลองการแพร่ในแบบ 1 มิติ จากสมการของการแพร่

```

1 - clear %Clear memory
2 - clc %Clear screen
3 - n = 100; %Number of intervals along the space axis
4 - m = 10000; %Number of intervals along the time axis
5 - tprint = 100; %Print interval
6 - dx = 1; %Lengh of the space interval
7 - dt = 0.01; %Length of the time interval
8 - %Initialize arrays
9 - cj = zeros(1,n); %Array of concentration in the current time
10 - cj1= zeros(1,n); %Array of concentration in the next time step
11 - cj(40:60)=1; %Initial condition
12 - for j=1:m %Time loop
13 -     %Boundary conditions
14 -     cj1(1)=1;
15 -     cj1(n)=0;
16 -     for i=2:n-1 %Space loop
17 -         cj1(i)=dt/dx^2*(cj(i+1)+cj(i-1)-2*cj(i))+cj(i); %The discretized equation
18 -     end
19 -     cj = cj1; %Update the concentration array of the current time
20 -     plot(cj,'*b--') %Plot
21 -     pause(0.1) %Slow the Matlab down so that we can see a result.
22 -     if mod(j,tprint) == 0
23 -         save2pdf(['pic' num2str(j)])
24 -     end
25 - end

```

รูปที่ 3.1 คำสั่งการสร้างแบบจำลองการแพร่ในแบบ 1 มิติ จากสมการของการแพร่

ตารางที่ 3.1 คำสั่งและความหมายของคำสั่งการสร้างแบบจำลองการแพร่ในแบบ 1 มิติ จากสมการของการแพร่

คำสั่ง	ความหมาย
$cj=zeros(1,n)$	สร้างเมตริกซ์ศูนย์ที่มีขนาดแถวจำนวน 1 และคอลัมน์จำนวน n ซึ่งเป็นชุดข้อมูลของความเข้มข้นในเวลาปัจจุบัน
$cj1=zeros(1,n)$	สร้างเมตริกซ์ศูนย์ที่มีขนาดแถวจำนวน 1 และคอลัมน์จำนวน n ซึ่งเป็นชุดข้อมูลของความเข้มข้นในเวลาถัดไป
$cj(40:60)=1$	กำหนดค่าเริ่มต้น โดยกำหนดให้ตั้งแต่ 40 ถึง 60 เท่ากับ 1
$cj1(1)=1$	กำหนดขอบ โดยกำหนดให้ชุดข้อมูลที่ 1 ของความเข้มข้นในเวลาถัดไป เท่ากับ 1
$cj1(n)=0$	กำหนดขอบ โดยกำหนดให้ชุดข้อมูลที่ n ของความเข้มข้นในเวลาถัดไป เท่ากับ 0
$cj1(i)=dt/dx^2*(cj(i+1)+cj(i-1)-2*cj(i))+cj(i)$	สมการของการแพร่ในรูปแบบตัวเลข (Discretized) ในแบบ 1 มิติ
$cj=cj1$	การ Update ชุดข้อมูลของความเข้มข้นในเวลาปัจจุบัน

3.1.2 คำสั่งการสร้างแบบจำลองการแพร่ในแบบ 2 มิติ จากสมการของการแพร่

```

1 - clear %Clear memory
2 - clc %Clear screen
3 - p = 100; %Number of intervals along the space axis
4 - q = 100;
5 - r = 10000; %Number of intervals along the time axis
6 - tprint = 100; %Print interval
7 - dx = 1; %Lengh of the space interval
8 - dy = 1;
9 - dh = dx; %dh=dy
10 - dt = 0.01; %Length of the time interval
11 - %Initialize arrays
12 - ck = zeros(p,q); %Array of concentration in the current time
13 - ck1= zeros(p,q); %Array of concentration in the next time step
14 - ck(20:40,40:60)=1; %Initial condition
15 - for k=1:r %Time loop
16 -     %Boundary conditions
17 -     ck(:,q)=0; %top
18 -     ck(:,1)=0; %bottom
19 -     ck(1,:)=0; %left
20 -     ck(p,:)=0; %right
21 -     for i=2:p-1 %Space loop
22 -         for j=2:q-1
23 -             ck1(i,j)=dt/dx^2*( ck(i+1,j) ...
24 -                 +ck(i-1,j) ...
25 -                 +ck(i,j+1) ...
26 -                 +ck(i,j-1) ...
27 -                 -4*ck(i,j))+ck(i,j); %The discretized equation
28 -         end
29 -     end
30 -     ck = ck1; %Update the concentration array of the current time
31 -     mesh(ck) %Plot
32 -     pause(0.01) %Slow the Matlab down so that we can see a result.
33 -     if mod(k,tprint) == 0
34 -         save2pdf(['pic' num2str(k)'])
35 -     end
36 - end

```

รูปที่ 3.2 คำสั่งการสร้างแบบจำลองการแพร่ในแบบ 2 มิติ จากสมการของการแพร่

ตารางที่ 3.2 คำสั่งและความหมายของคำสั่งการสร้างแบบจำลองการแพร่ในแบบ 2 มิติ จากสมการของการแพร่

คำสั่ง	ความหมาย
ck=zeros(p,q)	สร้างเมตริกซ์ศูนย์ที่มีขนาดแถวจำนวน p และคอลัมน์จำนวน q ซึ่งเป็นชุดข้อมูลของความเข้มข้นในเวลาปัจจุบัน
ck1=zeros(p,q)	สร้างเมตริกซ์ศูนย์ที่มีขนาดแถวจำนวน p และคอลัมน์จำนวน q ซึ่งเป็นชุดข้อมูลของความเข้มข้นในเวลาถัดไป
ck(20:40,40:60)=1	กำหนดค่าเริ่มต้น โดยกำหนดให้ตั้งแต่ 20 ถึง 40 และตั้งแต่ 40 ถึง 60 เท่ากับ 1
ck(:,q)=0	กำหนดขอบบน โดยกำหนดให้ชุดข้อมูลที่คอลัมน์ q เท่ากับ 0
ck(:,1)=0	กำหนดขอบล่าง โดยกำหนดให้ชุดข้อมูลที่คอลัมน์ 1 เท่ากับ 0
ck(1,:)=0	กำหนดขอบซ้าย โดยกำหนดให้ชุดข้อมูลที่แถว 1 เท่ากับ 0
ck(p,:)=0	กำหนดขอบขวา โดยกำหนดให้ชุดข้อมูลที่แถว p เท่ากับ 0
ck1(i,j)=dt/dx^2*(ck(i+1,j)+ck(i-1,j)+ck(i,j+1)+ck(i,j-1)-4*ck(i,j))+ck(i,j)	สมการของการแพร่ในรูปแบบตัวเลข (Discretized) ในแบบ 2 มิติ
ck=ck1	การ Update ชุดข้อมูลของความเข้มข้นในเวลาปัจจุบัน

3.2 การเขียนคำสั่งโดยใช้โปรแกรม MATLAB ในการศึกษาแบบจำลอง Phase-Field Crystal

3.2.1 คำสั่งการสร้างแบบจำลองการแข่งขันตัวของโลหะที่อุณหภูมิต่างๆ

```
1 - clear %Clear memory
2 - clc %Clear screen
3 - close all; %Close all figures
4 - n = 400; %Number of intervals along the space axis
5 - m = 400;
6 - dx = 0.5; %Lengh of the space interval
7 - dt = 4e-5; %Length of the time interval
8 - r = -0.05;
9 - t_print = 50000;
10 - t_end = 2000000;
11 - t_save = 1000;
12 - t_load = 1000000;
13 - resume = true;
14 %Initialize arrays
15 - cn = zeros(n+2,m+2); %Array of concentration in the current time
16 - if resume
17 -     load(['data' num2str(t_load) '.mat'],'cn') ;
18 - else
19 -     cn1= zeros(n+2,m+2); %Array of concentration in the next time step
20 -     cn(2:n+1,2:m+1)=rand(n,m)-0.7; %Initial condition
21 - end
22 -     average_cn = calc_average(cn(2:n+2,2:m+2),dx,dx);
23 - lap_cn = zeros(n+2,m+2); %Array of Laplacian
24 - lap2_cn = zeros(n+2,m+2); %Array of Laplacian
25 - lap3_cn = zeros(n+2,m+2); %Array of Laplacian
26 - lap_cn3 = zeros(n+2,m+2); %Array of Laplacian
27 - cn = smoothn(cn,5);
28 - for t=t_load:t_end %Time loop
29 -     %Update Periodic Boundary
30 -     cn = function_update_periodic_boundary(cn,n,m);
31 -     %Calculation
32 -     lap_cn = function_calculate(cn,dx,n,m);
33 -     lap_cn = function_update_periodic_boundary(lap_cn,n,m);
34 -     %
35 -     lap2_cn = function_calculate(lap_cn,dx,n,m);
36 -     lap2_cn = function_update_periodic_boundary(lap2_cn,n,m);
37 -     %
38 -     lap3_cn = function_calculate(lap2_cn,dx,n,m);
39 -     lap3_cn = function_update_periodic_boundary(lap3_cn,n,m);
40 -     %
41 -     lap_cn3 = function_calculate(cn.^3,dx,n,m);
42 -     lap_cn3 = function_update_periodic_boundary(lap_cn3,n,m);
43 -     %
44 -     square = (1+r)*lap_cn + 2*lap2_cn + lap3_cn + lap_cn3;
45 -     cn1 = square * dt + cn;
46 -     cn = cn1; %Update the concentration array of the current time
47 -     if mod(t,t_print)==0
48 -         contour(cn(2:n+1,2:m+1)) %Plot
49 -         axis equal tight;
50 -         colorbar
51 -         fprintf('t = %i \n', t)
52 -         title(['t = ', num2str(t)])
53 -         pause(0.1) %Slow the Matlab down so that we can see a result.
54 -         save2pdf(['pic' num2str(t)])
55 -     end
56 -     if mod(t,t_save)==0
57 -         save(['data' num2str(t)], 'cn');
58 -     end
59 - end
```

รูปที่ 3.3 คำสั่งการสร้างแบบจำลองการแข่งขันตัวของโลหะที่อุณหภูมิต่างๆ

ตารางที่ 3.3 คำสั่งและความหมายของคำสั่งการสร้างแบบจำลองการแข็งตัวของโลหะที่อุณหภูมิต่างๆ

คำสั่ง	ความหมาย
$cn(2:n+1,2:m+1)=rand(n,m)-0.7$	กำหนดค่าเริ่มต้น โดยกำหนดให้ตั้งแต่ 2 ถึง $n+1$ และ 2 ถึง $m+1$ เท่ากับค่าสุ่ม(0.5) ลบด้วย 0.7
$average_cn=calc_average(cn(2:n+2,2:m+2),dx,dx)$	ฟังก์ชันที่ต้องการ Input 2 ค่า คือ $cn(2:n+2,2:m+2)$ และ dx โดยจะทำให้ผลลัพธ์ที่ออกมา คือ ค่าเฉลี่ยของความน่าจะเป็นในการเจออะตอม
$cn=function_update_periodic_boundary(cn,n,m)$	ฟังก์ชันที่ต้องการ Input 3 ค่า คือ cn , n และ m โดยจะทำให้ผลลัพธ์ที่ออกมา คือ การ Update Ghost cell
$lap_cn=function_calculate(cn,dx,n,m)$	หาค่า Laplacian ของตัวแปร $\nabla^2\psi^t$
$lap_cn=function_update_periodic_boundary(lap_cn,n,m)$	การ Update Ghost cell ของ Input คือ lap_cn
$lap2_cn=function_calculate(lap_cn,dx,n,m)$	หาค่า Laplacian ของตัวแปร $\nabla^4\psi^t$
$lap2_cn=function_update_periodic_boundary(lap2_cn,n,m)$	การ Update Ghost cell ของ Input คือ $lap2_cn$
$lap3_cn=function_calculate(lap2_cn,dx,n,m)$	หาค่า Laplacian ของตัวแปร $\nabla^6\psi^t$
$lap3_cn=function_update_periodic_boundary(lap3_cn,n,m)$	การ Update Ghost cell ของ Input คือ $lap3_cn$
$lap_cn3=function_calculate(cn.^3,dx,n,m)$	หาค่า Laplacian ของตัวแปร $\nabla^2(\psi^t)^3$
$lap_cn3=function_update_periodic_boundary(lap_cn3,n,m)$	การ Update Ghost cell ของ Input คือ lap_cn3
$square=(1+r)*lap_cn+2*lap2_cn+lap3_cn+lap_cn3$	กำหนดค่า Laplacian ให้อยู่ในรูปเดียวกับ สมการ 2.12
$cn1= square*dt+cn$	กำหนดชุดข้อมูล Update ที่เก็บค่าความน่าจะเป็นในการเจออะตอม ให้อยู่ในรูปเดียวกับ สมการ 2.13

ซึ่งคำสั่งการสร้างแบบจำลองการแข็งตัวของโลหะ ประกอบไปด้วยฟังก์ชันอยู่ 3 ฟังก์ชัน ได้แก่

3.2.1.1 คำสั่งฟังก์ชันการคำนวณค่าเฉลี่ยของความน่าจะเป็นในการเจออะตอม

```

1   function [out] = calc_average(z,dx,dy)
2 -   [Nx Ny]=size(z);
3 -   n = Nx - 1;
4 -   m = Ny - 1;
5 -   a = 0 ;
6 -   b = dy*m ;
7 -   c = dx*n ;
8 -   for i = 1:n+1
9 -       s = z(i,1) ;
10 -      for j = 2:n
11 -          s = s + 2*z(i,j) ;
12 -      end
13 -      s = s + z(i,n+1) ;
14 -      inty(i) = (b-a)/2/n * s;
15 -   end
16 -   s = inty(1);
17 -   for j = 2:n
18 -       s = s + 2*inty(j) ;
19 -   end
20 -   s = s + inty(n+1) ;
21 -   intyx = (c-a)/2/n * s;
22 -   area = (c-a)*(b-a);
23 -   out = 1/area * intyx;
24 -   fprintf('%20.10f \n',out)

```

รูปที่ 3.4 คำสั่งฟังก์ชันการคำนวณค่าเฉลี่ยของความน่าจะเป็นในการเจออะตอม

ในการสร้างฟังก์ชันการคำนวณค่าเฉลี่ยของความน่าจะเป็นในการเจออะตอม จะต้องทำการอินทิเกรตเชิงตัวเลขของฟังก์ชัน 2 ตัวแปร (x,y) แล้วใช้ Trapezoid rule ซึ่งการอินทิเกรตนั้นจะต้องทำการอินทิเกรต 2 ครั้ง คือ อินทิเกรตในแนวแกน x และอินทิเกรตในแนวแกน y โดยเริ่มจากอินทิเกรตในแนวแกน y และจึงอินทิเกรตในแนวแกน x

ตารางที่ 3.4 คำสั่งและความหมายของคำสั่งฟังก์ชันการคำนวณค่าเฉลี่ยของความน่าจะเป็นในการเจออะตอม

คำสั่ง	ความหมาย
$inty(i)=(b-a)/2/n*s$	การอินทิเกรตในแนวแกน y โดยที่ $(b-a)/2/n$ หมายถึง $\frac{b-a}{2N}$ และ s หมายถึง $(f(x_1) + 2f(x_2) + 2f(x_3) + \dots + 2f(x_N) + f(x_{N+1}))$
$intyx=(c-a)/2/n*s$	การอินทิเกรตของฟังก์ชัน 2 ตัวแปร (x,y) โดยที่ $(c-a)/2/n$ หมายถึง $\frac{c-a}{2N}$ และ s หมายถึง $(f(x_1) + 2f(x_2) + 2f(x_3) + \dots + 2f(x_N) + f(x_{N+1}))$
$area=(c-a)*(b-a)$	พื้นที่ในการอินทิเกรต โดย a เป็นจุดเริ่มต้น b เป็นความยาวในแกน y และ c เป็นความยาวในแกน x
$out=1/area*intyx$	ค่าเฉลี่ยของความน่าจะเป็นในการเจออะตอมเป็นผลลัพธ์ที่ได้จากการนำค่าการอินทิเกรตของฟังก์ชัน 2 ตัวแปร (x,y) หารด้วยพื้นที่

3.2.1.2 คำสั่งฟังก์ชันการ Calculate laplacian

```

1  function [out] = function_calculate(phi,h,n,m)
2
3  -   out = zeros(n,m);
4
5  -   for j = 2:m+1
6  -       for i = 2:n+1;
7  -           out(i,j) = (...
8
9
10          phi(i+1,j)...
11          + phi(i-1,j)...
12          + phi(i,j+1)...
13          + phi(i,j-1)...
14          - 4*phi(i,j)...
15          )/h^2;
16
17 -   end
18 -   end
19 -   end

```

รูปที่ 3.5 คำสั่งฟังก์ชันการ Calculate laplacian

ตารางที่ 3.5 คำสั่งและความหมายของคำสั่งฟังก์ชันการ Calculate laplacian

คำสั่ง	ความหมาย
function_calculate(phi,h,n,m)	ฟังก์ชันที่ต้องการ Input 4 ค่า คือ phi, h, n และ m ซึ่ง phi คือ ค่าความน่าจะเป็นในการเจออะตอม h, n และ m คือ ขนาด โดยจะทำให้ผลลัพธ์ที่ออกมา คือ การ Laplacian
out=zeros(n,m)	กำหนดผลลัพธ์ให้อยู่รูปของเมตริกซ์ศูนย์ที่มีขนาด แถวจำนวน n และคอลัมน์จำนวน m
out(i,j)=(phi(i+1,j)+phi(i-1,j)+phi(i,j+1)+phi(i,j-1)-4*phi(i,j))/h^2	การหาผลลัพธ์โดยกำหนดให้เป็นการ Laplacian

3.2.1.3 คำสั่งฟังก์ชันการ Update periodic boundary

```

1   function [out] = function_update_periodic_boundary(cn,n,m)
2
3       %column
4   -   cn(:,1) = cn(:,m+1);
5   -   cn(:,m+2) = cn(:,2);
6       %row
7   -   cn(1,:) = cn(n+1,:);
8   -   cn(n+2,:) = cn(2,:);
9
10  -   out = cn;
11
12  -   end

```

รูปที่ 3.6 คำสั่งฟังก์ชันการ Update periodic boundary

ตารางที่ 3.6 คำสั่งและความหมายของคำสั่งฟังก์ชันการ Update periodic boundary

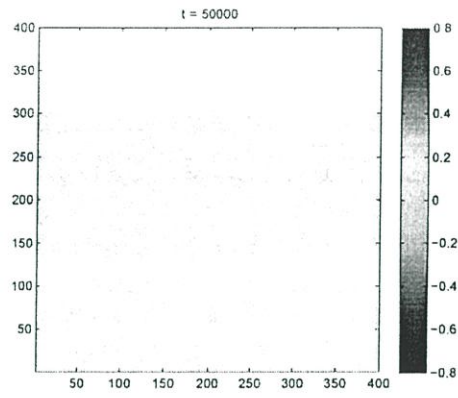
คำสั่ง	ความหมาย
function_update_periodic_boundary(cn,n,m)	ฟังก์ชันที่ต้องการ Input 3 ค่า คือ cn, n และ m ซึ่ง cn คือ ชุดข้อมูลที่เก็บค่าความน่าจะเป็นในการเจออะตอม และ n, m คือ ขนาด โดยจะทำให้ผลลัพธ์ที่ออกมา คือ การ Update Ghost cell
cn(:,1)=cn(:,m+1) cn(:,m+2)=cn(:,2)	กำหนดคอลัมน์ให้ Update periodic boundary
cn(1,:)=cn(n+1,:) cn(n+2,:)=cn(2,:)	กำหนดแถวให้ Update periodic boundary
out=cn	กำหนดผลลัพธ์ให้อยู่รูปของชุดข้อมูลที่เก็บค่าความน่าจะเป็นในการเจออะตอม

บทที่ 4

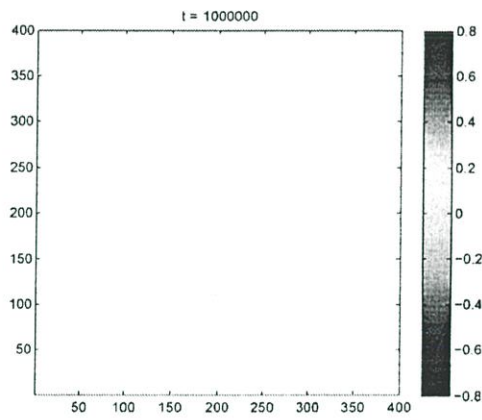
ผลการดำเนินงาน

จากผลการดำเนินงานจะได้แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะแสดงถึงแผนภาพจำลองโลหะเหลว ซึ่งเป็นของเหลวที่ไม่เรียบ (Inhomogeneous Fluid) จากของเหลวเปลี่ยนเป็นของแข็ง แสดงถึงการเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นของอะตอมขณะที่เวลาต่างๆ ซึ่งแถบสีทางด้านขวา หมายถึง ค่าที่ใช้แทนความน่าจะเป็นในการเจออะตอม ซึ่งไม่มีหน่วย โดยที่สีแดง หมายถึง ความน่าจะเป็นที่มีค่าสูงในการเจออะตอม และสีน้ำเงิน หมายถึง ความน่าจะเป็นที่มีค่าต่ำในการเจออะตอม โดยจำลองการแข็งตัวของโลหะที่ขณะอุณหภูมิต่างๆ ได้แก่ -0.05, -0.1, -0.15, -0.2, -0.25, -0.3, -0.35 และ -0.4 และจำลองในเวลาต่างๆ ตั้งแต่ช่วงเวลา 50,000 จนถึง 2,000,000

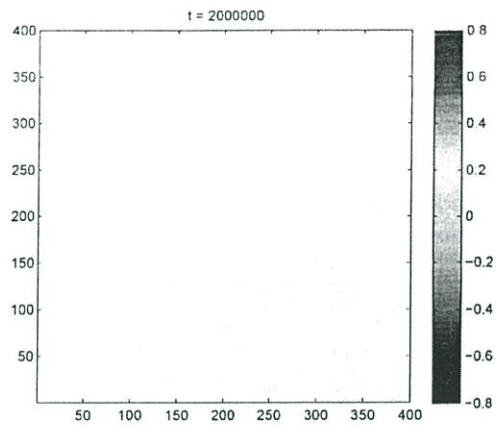
4.1 แบบจำลองการแข่งขันตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.05 ที่เวลาต่างๆ



รูปที่ 4.1 แบบจำลองการแข่งขันตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.05 ขณะเวลา 50,000



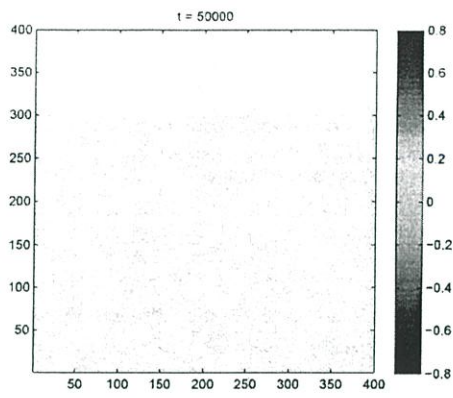
รูปที่ 4.2 แบบจำลองการแข่งขันตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.05 ขณะเวลา 1,000,000



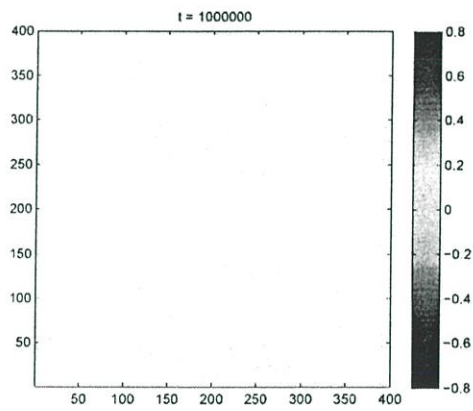
รูปที่ 4.3 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.05 ขณะเวลา $2,000,000$

แสดงให้เห็นว่าการลดอุณหภูมิในของเหลวที่อุณหภูมิ -0.05 ยังอยู่ใน Constant Phase ซึ่งเป็นของเหลวอยู่ โดยยังไม่เกิดการแข็งตัวของโลหะ และการเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นของอะตอมมีค่าน้อยมาก

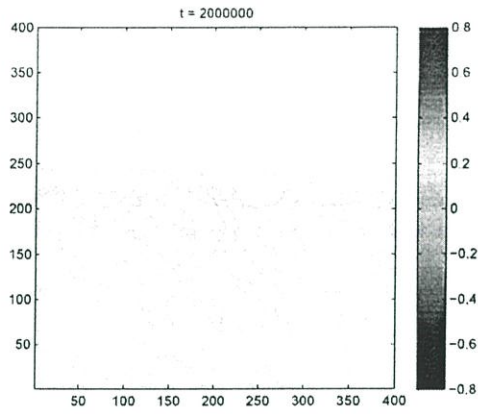
4.2 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.1 ที่เวลาต่างๆ



รูปที่ 4.4 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.1 ขณะเวลา 50,000



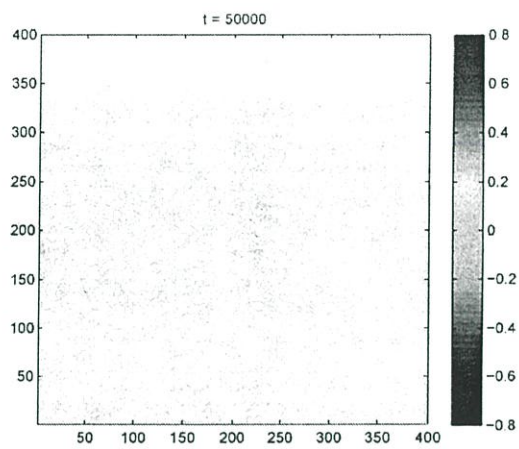
รูปที่ 4.5 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.1 ขณะเวลา 1,000,000



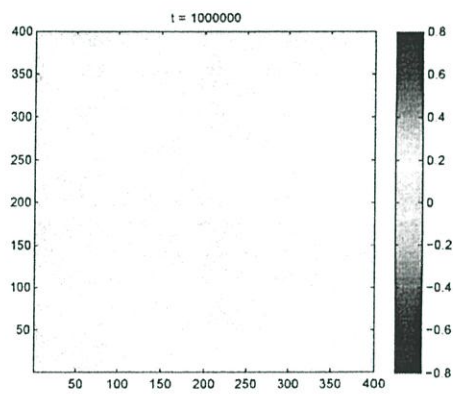
รูปที่ 4.6 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.1 ขณะเวลา 2,000,000

แสดงให้เห็นว่าการลดอุณหภูมิในของเหลวที่อุณหภูมินี้ได้เริ่มอยู่ใน Triangular phase ซึ่งเป็นของแข็ง โดยเริ่มเกิดการแข็งตัวของโลหะแต่ยังไม่เกิดการแข็งตัวมาก การจัดเรียงตัวของอะตอมยังเรียงตัวไม่เป็นระเบียบ และการเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นของอะตอมยังมีค่าน้อยมาก

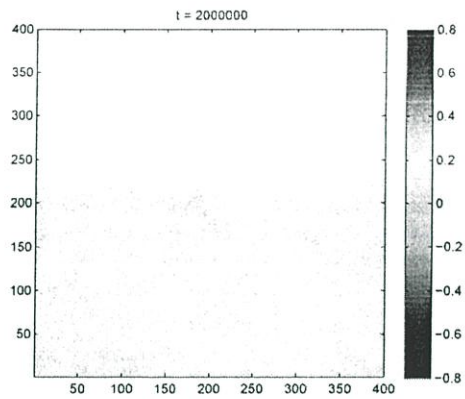
4.3 แบบจำลองการแข่งขันตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.15 ที่เวลาต่างๆ



รูปที่ 4.7 แบบจำลองการแข่งขันตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.15 ขณะเวลา 50,000



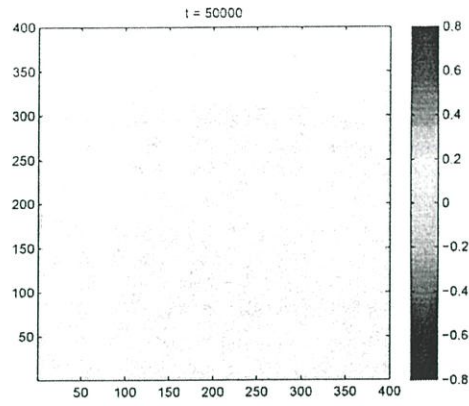
รูปที่ 4.8 แบบจำลองการแข่งขันตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.15 ขณะเวลา 1,000,000



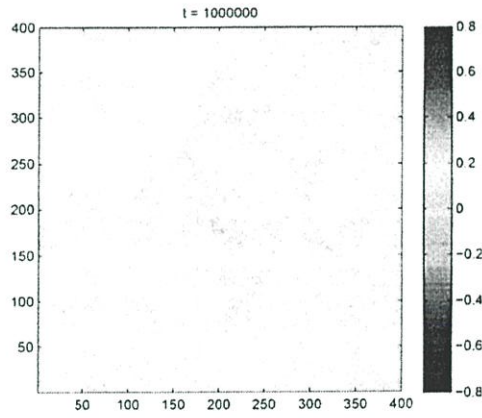
รูปที่ 4.9 แบบจำลองการแข่งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.15 ขณะเวลา $2,000,000$

แสดงให้เห็นว่าการลดอุณหภูมิในของเหลวที่อุณหภูมินี้ได้อยู่ใน Triangular phase ซึ่งเป็นของแข็ง การจัดเรียงตัวของอะตอมเริ่มเรียงตัวเป็นระเบียบมากขึ้น แต่การเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นของอะตอมยังมีค่าน้อย

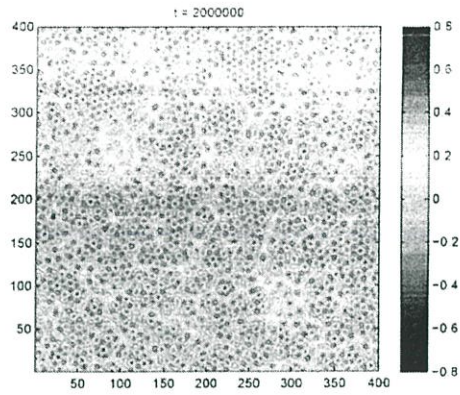
4.4 แบบจำลองการแข่งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.2 ที่เวลาต่างๆ



รูปที่ 4.10 แบบจำลองการแข่งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.2 ขณะเวลา 50,000



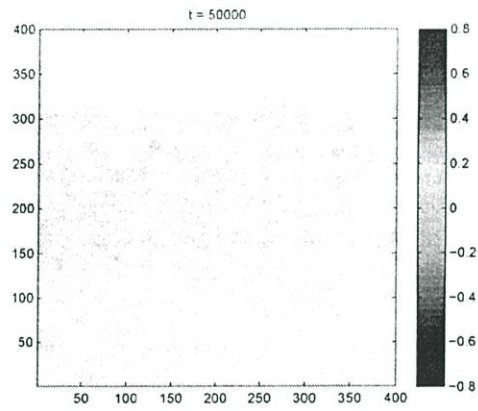
รูปที่ 4.11 แบบจำลองการแข่งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.2 ขณะเวลา 1,000,000



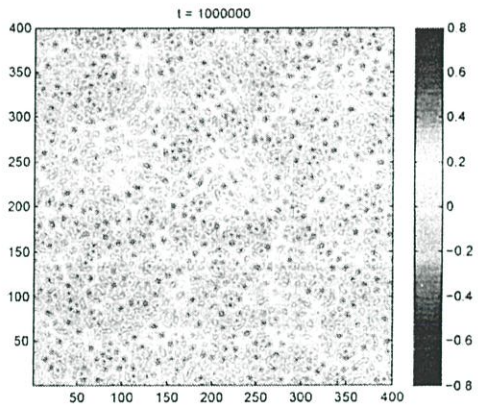
รูปที่ 4.12 แบบจำลองการแข่งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.2 ขณะเวลา 2,000,000

แสดงให้เห็นว่าอะตอมเริ่มจัดเรียงตัวกันตามรูปแบบของ Triangular phase ที่เป็นรูปทรงสามเหลี่ยมในหลายๆมุม และอยู่ใน Triangular phase ซึ่งเป็นของแข็ง การจัดเรียงตัวของอะตอมเรียงตัวเป็นระเบียบมากขึ้น และการเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นของอะตอมเริ่มมีค่ามากขึ้น

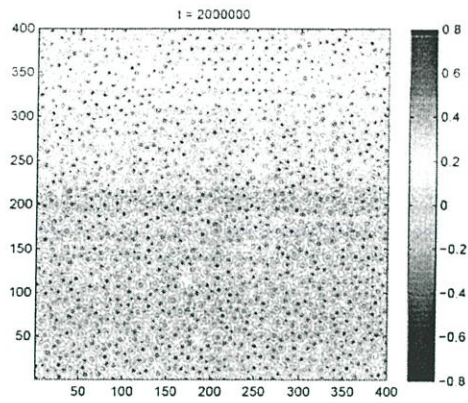
4.5 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.25 ที่เวลาต่างๆ



รูปที่ 4.13 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.25 ขณะเวลา 50,000



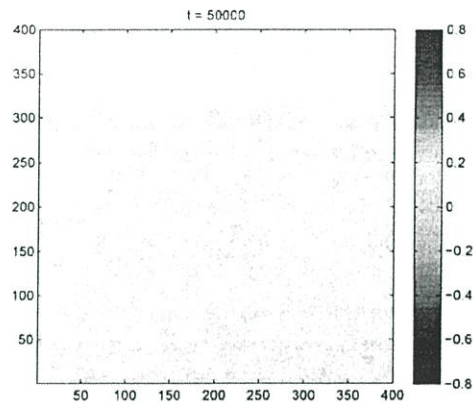
รูปที่ 4.14 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.25 ขณะเวลา 1,000,000



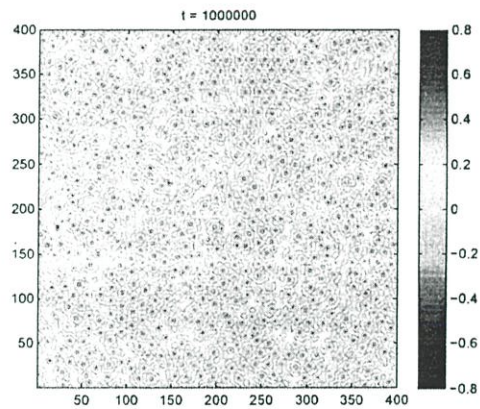
รูปที่ 4.15 แบบจำลองการแข่งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.25 ขณะเวลา $2,000,000$

แสดงให้เห็นว่าอะตอมเริ่มจัดเรียงตัวกันตามรูปแบบของ Triangular phase ที่เป็นรูปทรงสามเหลี่ยมในทุกๆมุม และอยู่ใน Triangular phase ซึ่งเป็นของแข็ง การจัดเรียงตัวของอะตอมเรียงตัวเป็นระเบียบมากขึ้น และการเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นของอะตอมเริ่มมีค่ามากขึ้น

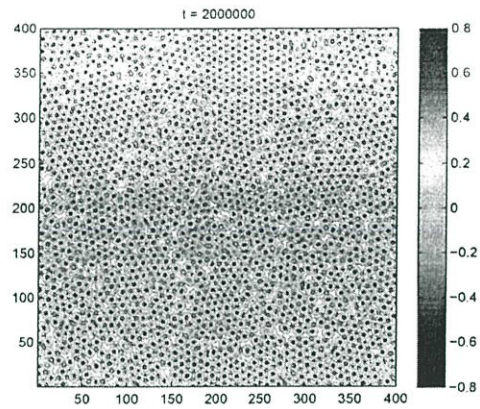
4.6 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.3 ที่เวลาต่างๆ



รูปที่ 4.16 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.3 ขณะเวลา 50,000



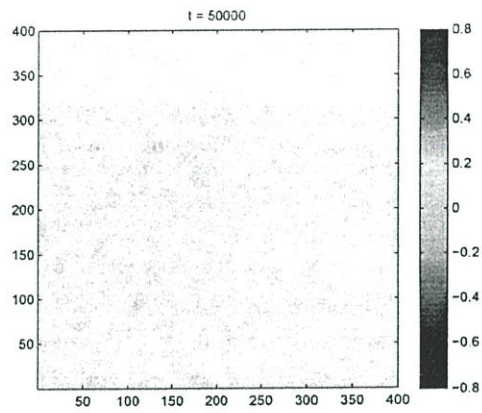
รูปที่ 4.17 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.3 ขณะเวลา 1,000,000



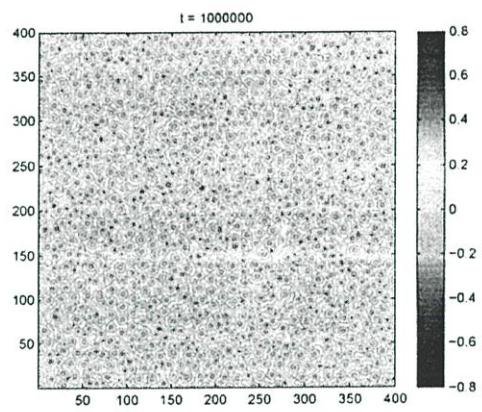
รูปที่ 4.18 แบบจำลองการแข่งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.3 ขณะเวลา $2,000,000$

แสดงให้เห็นว่าอะตอมเริ่มจัดเรียงตัวกันตามรูปแบบของ Triangular phase ที่เป็นรูปทรงสามเหลี่ยมในทุกๆมุม และอยู่ใน Triangular phase ซึ่งเป็นของแข็ง การจัดเรียงตัวของอะตอมเรียงตัวเป็นระเบียบมากขึ้น และการเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นของอะตอมมีค่ามากขึ้น

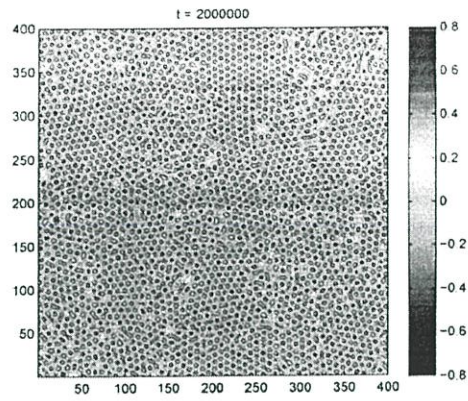
4.7 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.35 ที่เวลาต่างๆ



รูปที่ 4.19 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.35 ขณะเวลา 50,000



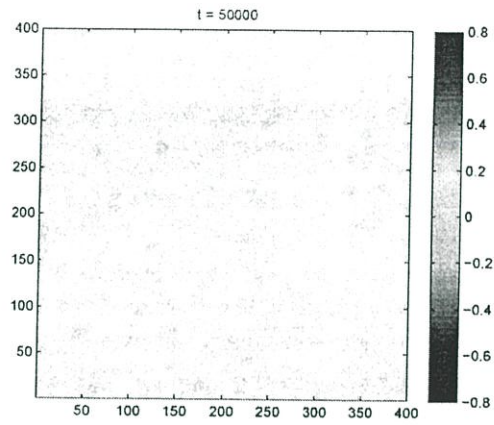
รูปที่ 4.20 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.35 ขณะเวลา 1,000,000



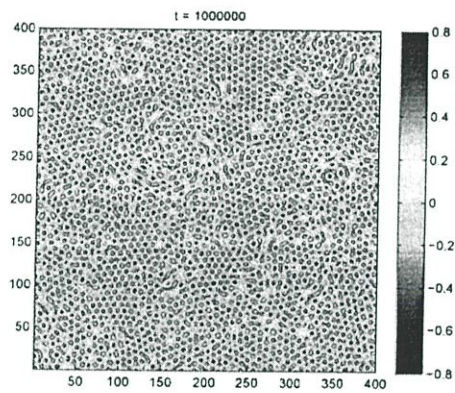
รูปที่ 4.21 แบบจำลองการแข็งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.35 ขณะเวลา $2,000,000$

แสดงให้เห็นว่าอะตอมได้จัดเรียงตัวกันตามรูปแบบของ Triangular phase ที่เป็นรูปทรงสามเหลี่ยมในทุกๆมุม และอยู่ใน Triangular phase ซึ่งเป็นของแข็ง ดังนั้นจากการทำให้อุณหภูมิต่ำลงมากขึ้น จึงส่งผลให้การแข็งตัวของโลหะเกิดขึ้นได้อย่างรวดเร็วมากขึ้น และการเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นของอะตอมมีค่ามากขึ้น

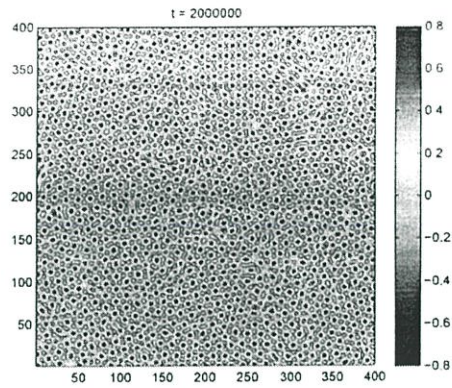
4.8 แบบจำลองการแข่งขันตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.4 ที่เวลาต่างๆ



รูปที่ 4.22 แบบจำลองการแข่งขันตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.4 ขณะเวลา 50,000



รูปที่ 4.23 แบบจำลองการแข่งขันตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.4 ขณะเวลา 1,000,000



รูปที่ 4.24 แบบจำลองการแข่งตัวของโลหะขณะอุณหภูมิ -0.4 ขณะเวลา $2,000,000$

แสดงให้เห็นว่าอะตอมได้จัดเรียงตัวกันอย่างสมบูรณ์ตามรูปแบบของ Triangular phase ที่เป็นรูปทรงสามเหลี่ยมในทุกๆมุม และอยู่ใน Triangular phase ซึ่งเป็นของแข็ง ดังนั้นจากการทำให้อุณหภูมิต่ำลงมากที่สุด จึงส่งผลให้การแข่งตัวของโลหะเกิดขึ้นได้อย่างรวดเร็วที่สุด และการเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นของอะตอมมีค่ามากที่สุด

บทที่ 5

สรุปและวิเคราะห์ผลการดำเนินงาน

5.1 วิเคราะห์ผลการดำเนินงาน

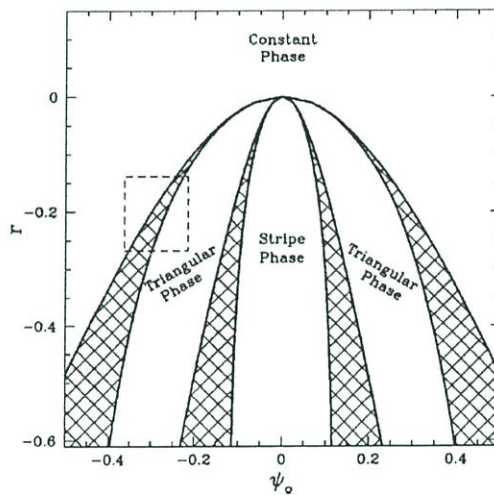
ในการจำลองการแข็งตัวของโลหะที่เวลาต่างๆ ขณะอุณหภูมิต่างๆ ได้แก่ -0.05, -0.1, -0.15, -0.2, -0.25, -0.3, -0.35 และ -0.4 จากการสังเกตแบบจำลองการแข็งตัวของโลหะพบว่า การแข็งตัวของโลหะเกิดขึ้นขณะอุณหภูมิ -0.1, -0.15, -0.2, -0.25, -0.3, -0.35 และ -0.4 ในขณะที่อุณหภูมิ -0.05 จะไม่เกิดการแข็งตัวของโลหะ เนื่องจากอุณหภูมิต่ำเกินไป ส่งผลให้ไม่เกิดการแข็งตัวของโลหะ เพราะการเกิดความเย็นยิ่งยวด (Undercool) นั้นไม่เพียงพอ แต่หากอุณหภูมิต่ำลงมากขึ้น จะส่งผลอัตราการเปลี่ยนแปลงเฟสมีค่ามากขึ้น เพราะการเกิดความเย็นยิ่งยวดที่มากขึ้น จะทำหน้าที่เป็นแรงผลักดัน (Driving Force) ของระบบที่ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงเฟสได้มากขึ้น

จากการดำเนินงานที่ผ่านมา โดยการใช้แบบจำลอง Phase-Field Crystal ในการจำลองการแข็งตัวของโลหะ แสดงถึงการเปลี่ยนแปลงจากเฟสของเหลวกลายเป็นเฟสของแข็ง พบว่าตัวแปรที่ทำให้การแข็งตัวของโลหะมีอัตราที่ไม่เท่ากัน ได้แก่ อุณหภูมิ ซึ่งมีผลต่อการเกิดความเย็นยิ่งยวด (Undercool) ซึ่งทำหน้าที่เป็นแรงผลักดัน (Driving Force) ของระบบที่ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงเฟส ดังนั้นเมื่ออุณหภูมิต่ำน้อย (ติดลบมาก) ทำให้การเย็นจัดต่ำกว่าจุดเยือกแข็ง (Supercool) มีมาก ส่งผลให้การแข็งตัวของโลหะเกิดขึ้นได้อย่างรวดเร็ว

ในการศึกษานี้ได้ควบคุมกลไกที่สำคัญในการเปลี่ยนแปลงเฟส 2 กลไกให้เท่ากันในทุกการทดลอง คือ การเกิดนิวเคลียส (Nucleation) และการแพร่ (Diffusion) การเกิดนิวเคลียสเท่ากันเนื่องจากได้กำหนดค่าเริ่มต้นของการเกิดนิวเคลียสด้วยข้อมูลเริ่มต้นเป็นค่าเดียวกัน และแบบจำลองนี้ได้ทำการสุ่มค่าในลำดับถัดไปจากข้อมูลเริ่มต้น การแพร่เท่ากันเนื่องจากสัมประสิทธิ์การเคลื่อนที่ของอะตอม (Mobility Coefficient) นั้นไม่ได้เป็นฟังก์ชันของอุณหภูมิ การแพร่ในทุกอุณหภูมิจึงเท่ากันหมด ดังนั้นอัตราการเปลี่ยนแปลงเฟสจึงขึ้นอยู่กับแรงผลักดันของระบบเพียงอย่างเดียว ซึ่งหากทำให้การเกิดนิวเคลียสและการแพร่เป็นฟังก์ชันของอุณหภูมิ จะทำให้ผลที่ได้เปลี่ยนแปลงไปและเหมือนกับความเป็นจริงมากขึ้น

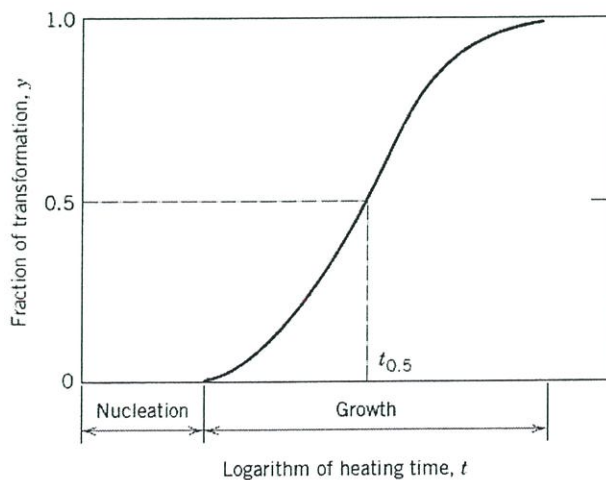
จาก Phase diagram แสดงให้เห็นว่าการกระชากอุณหภูมิในของเหลวที่อุณหภูมิ -0.05 ยังอยู่ใน Constant Phase เป็นของเหลวอยู่ แต่ในขณะอุณหภูมิ $-0.1, -0.15, -0.2, -0.25, -0.3, -0.35$ และ -0.4 ได้อยู่ใน Triangular phase ซึ่งเป็นของแข็ง เมื่อทำให้อุณหภูมิต่ำลงมากขึ้นเรื่อยๆ จึงทำให้เกิดการเป็นของแข็งมากขึ้น

การเปลี่ยนแปลงจากเฟสของเหลวกลายเป็นเฟสของแข็ง ซึ่งการเกิดได้เร็วหรือช้าขึ้นอยู่กับความเย็นยิ่งยวด (Undercool) หมายถึง การที่อุณหภูมิของเฟสอยู่ต่ำกว่าที่ควรจะเป็นใน Phase diagram ระยะห่างจึงเรียกว่า Degree of Undercool หาก Degree of Undercool มีระยะห่างที่มากขึ้น จึงเกิดการเปลี่ยนแปลงเฟสได้เร็ว เพราะทำหน้าที่เป็นแรงผลักดัน (Driving Force) ของระบบที่ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงเฟสได้เร็วขึ้น



รูปที่ 5.1 Phase diagram

การเกิด Nucleation ในการใช้แบบจำลอง Phase-Field Crystal ไม่ได้กำหนดระยะเวลา Nucleation เพราะแบบจำลองเริ่มด้วยการ Random จึงไม่สามารถจำลอง Nucleation ได้ ซึ่งแบบจำลองในทุกๆ อุณหภูมิจึงเริ่มที่จุดเริ่มต้นของเส้นสีแดง ดังนั้นการใช้แบบจำลอง Phase-Field Crystal นี้จึงอยู่ในช่วง Growth หมายถึง เป็นช่วงที่เติบโตจนเห็นการแข็งตัวของโลหะเป็นของแข็ง



รูปที่ 5.2 การเกิด Nucleation-Growth

5.2 ข้อเสนอแนะและแนวทางในการศึกษาต่อ

1. ทำให้การแพร่เป็นฟังก์ชันของอุณหภูมิ โดยการกำหนดสัมประสิทธิ์การเคลื่อนที่ของอะตอม (Mobility Coefficient) ให้เป็นฟังก์ชันของอุณหภูมิ ในกรณีที่ทราบค่าสัมประสิทธิ์การเคลื่อนที่ของอะตอม เพราะจะทำให้ผลที่ได้ตรงกับความเป็นจริงมากขึ้น
2. ทำให้การเกิดนิวเคลียสเป็นฟังก์ชันของอุณหภูมิ เพราะจะทำให้ผลที่ได้ตรงกับความเป็นจริงมากขึ้น

หนังสืออ้างอิง

- Chan, V.W.L., Pisutha-Arnond, N., and Thornton, K., 2012. The Phase-Field Crystal Method: An Overview, Development, and Applications. n.p. : Elsevier.
- Elder, K.R., and Grant, M., 2004. Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals. n.p. : The American Physical Society.
- Provatas, N., and Elder, K., 2010. Phase-Field Methods in Material Science and Engineering. Weinheim : Wiley-VCH.
- Provatas, N., Dantzig, J.A., Athreya, B., Chan, P., Stefanovic, P., Goldenfeld, N., and Elder, K.R., 2007. Using the Phase-Field Crystal Method in the Multi-Scale Modeling of Microstructure Evolution. n.p. : JOM.

ภาคผนวก

```

1 - clear %Clear memory
2 - clc %Clear screen
3 - n = 100; %Number of intervals along the space axis
4 - m = 10000; %Number of intervals along the time axis
5 - tprint = 100; %Print interval
6 - dx = 1; %Length of the space interval
7 - dt = 0.01; %Length of the time interval
8 - %Initialize arrays
9 - cj = zeros(1,n); %Array of concentration in the current time
10 - cj1= zeros(1,n); %Array of concentration in the next time step
11 - cj(40:60)=1; %Initial condition
12 - for j=1:m %Time loop
13 -     %Boundary conditions
14 -     cj1(1)=1;
15 -     cj1(n)=0;
16 -     for i=2:n-1 %Space loop
17 -         cj1(i)=dt/dx^2*(cj(i+1)+cj(i-1)-2*cj(i))+cj(i); %The discretized equation
18 -     end
19 -     cj = cj1; %Update the concentration array of the current time
20 -     plot(cj,'b--') %Plot
21 -     pause(0.1) %Slow the Matlab down so that we can see a result.
22 -     if mod(j,tprint) == 0
23 -         save2pdf(['pic' num2str(j)])
24 -     end
25 - end

```

รูปที่ ผ 1 คำสั่งการสร้างแบบจำลองการแพร่ในแบบ 1 มิติ จากสมการของการแพร่

```

1 - clear %Clear memory
2 - clc %Clear screen
3 - p = 100; %Number of intervals along the space axis
4 - q = 100;
5 - r = 10000; %Number of intervals along the time axis
6 - tprint = 100; %Print interval
7 - dx = 1; %Lengh of the space interval
8 - dy = 1;
9 - dh = dx; %dh=dy
10 - dt = 0.01; %Length of the time interval
11 %Initialize arrays
12 - ck = zeros(p,q); %Array of concentration in the current time
13 - ck1= zeros(p,q); %Array of concentration in the next time step
14 - ck(20:40,40:60)=1; %Initial condition
15 - for k=1:r %Time loop
16     %Boundary conditions
17     ck(:,q)=0; %top
18     ck(:,1)=0; %bottom
19     ck(1,:)=0; %left
20     ck(p,:)=0; %right
21     for i=2:p-1 %Space loop
22         for j=2:q-1
23             ck1(i,j)=dt/dx^2*( ck(i+1,j) ...
24                 +ck(i-1,j) ...
25                 +ck(i,j+1) ...
26                 +ck(i,j-1) ...
27                 -4*ck(i,j))+ck(i,j); %The discretized equation
28         end
29     end
30     ck = ck1; %Update the concentration array of the current time
31     mesh(ck) %Plot
32     pause(0.01) %Slow the Matlab down so that we can see a result.
33     if mod(k,tprint) == 0
34         save2pdf(['pic' num2str(k)])
35     end
36 - end

```

รูปที่ ๒ คำสั่งการสร้างแบบจำลองการแพร่ในแบบ 2 มิติ จากสมการของการแพร่

```

1 - clear %Clear memory
2 - clc %Clear screen
3 - close all; %Close all figures
4 - n = 400; %Number of intervals along the space axis
5 - m = 400;
6 - dx = 0.5; %Length of the space interval
7 - dt = 4e-5; %Length of the time interval
8 - r = -0.05;
9 - t_print = 50000;
10 - t_end = 2000000;
11 - t_save = 1000;
12 - t_load = 1000000;
13 - resume = true;
14 %Initialize arrays
15 - cn = zeros(n+2,m+2); %Array of concentration in the current time
16 - if resume
17 -     load(['data' num2str(t_load) '.mat'],'cn') ;
18 - else
19 -     cn1= zeros(n+2,m+2); %Array of concentration in the next time step
20 -     cn(2:n+1,2:m+1)=rand(n,m)-0.7; %Initial condition
21 - end
22 - average_cn = calc_average(cn(2:n+2,2:m+2),dx,dx);
23 - lap_cn = zeros(n+2,m+2); %Array of Laplacian
24 - lap2_cn = zeros(n+2,m+2); %Array of Laplacian
25 - lap3_cn = zeros(n+2,m+2); %Array of Laplacian
26 - lap_cn3 = zeros(n+2,m+2); %Array of Laplacian
27 - cn = smoothn(cn,5);
28 - for t=t_load:t_end %Time loop
29 -     %Update Periodic Boundary
30 -     cn = function_update_periodic_boundary(cn,n,m);
31 -     %Calculation
32 -     lap_cn = function_calculate(cn,dx,n,m);
33 -     lap_cn = function_update_periodic_boundary(lap_cn,n,m);
34 -     %
35 -     lap2_cn = function_calculate(lap_cn,dx,n,m);
36 -     lap2_cn = function_update_periodic_boundary(lap2_cn,n,m);
37 -     %
38 -     lap3_cn = function_calculate(lap2_cn,dx,n,m);
39 -     lap3_cn = function_update_periodic_boundary(lap3_cn,n,m);
40 -     %
41 -     lap_cn3 = function_calculate(cn.^3,dx,n,m);
42 -     lap_cn3 = function_update_periodic_boundary(lap_cn3,n,m);
43 -     %
44 -     square = (1+r)*lap_cn + 2*lap2_cn + lap3_cn + lap_cn3;
45 -     cn1 = square * dt + cn;
46 -     cn = cn1; %Update the concentration array of the current time
47 -     if mod(t,t_print)==0
48 -         contour(cn(2:n+1,2:m+1)) %Plot
49 -         axis equal tight;
50 -         colorbar
51 -         fprintf('t = %i \n', t)
52 -         title(['t = ', num2str(t)])
53 -         pause(0.1) %Slow the Matlab down so that we can see a result.
54 -         save2pdf(['pic' num2str(t)])
55 -     end
56 -     if mod(t,t_save)==0
57 -         save(['data' num2str(t)], 'cn');
58 -     end
59 - end

```

รูปที่ ๓ คำสั่งการสร้างแบบจำลองการแข่งขันตัวของโลหะที่อุณหภูมิต่างๆ

```

1   function [out] = calc_average(z,dx,dy)
2 -   [Nx Ny]=size(z);
3 -   n = Nx - 1;
4 -   m = Ny - 1;
5 -   a = 0 ;
6 -   b = dy*m ;
7 -   c = dx*n ;
8 -   for i = 1:n+1
9 -       s = z(i,1) ;
10 -      for j = 2:n
11 -          s = s + 2*z(i,j) ;
12 -      end
13 -      s = s + z(i,n+1) ;
14 -      inty(i) = (b-a)/2/n * s;
15 -   end
16 -   s = inty(1);
17 -   for j = 2:n
18 -       s = s + 2*inty(j) ;
19 -   end
20 -   s = s + inty(n+1) ;
21 -   intyx = (c-a)/2/n * s;
22 -   area = (c-a)*(b-a);
23 -   out = 1/area * intyx;
24 -   fprintf('%20.10f \n',out)

```

รูปที่ ๘ 4 คำสั่งฟังก์ชันการคำนวณหาค่าเฉลี่ยของความน่าจะเป็นในการเจออะตอม

```

1 function [out] = function_calculate(phi,h,n,m)
2
3 out = zeros(n,m);
4
5 for j = 2:m+1
6     for i = 2:n+1;
7         out(i,j) = (...
8             phi(i+1,j)...
9             + phi(i-1,j)...
10            + phi(i,j+1)...
11            + phi(i,j-1)...
12            - 4*phi(i,j)...
13            )/h^2;
14     end
15 end
16
17 end

```

รูปที่ ๕ คำสั่งฟังก์ชันการ Calculate laplacian

```

1 function [out] = function_update_periodic_boundary(cn,n,m)
2
3     %column
4 -     cn(:,1) = cn(:,m+1);
5 -     cn(:,m+2) = cn(:,2);
6     %row
7 -     cn(1,:) = cn(n+1,:);
8 -     cn(n+2,:) = cn(2,:);
9
10 -    out = cn;
11
12 -    end

```

รูปที่ ผ 6 คำสั่งฟังก์ชันการ Update periodic boundary