

การจำลองการเสีรूपโดยวิธีเฟสฟิลด์คริสตัล
SIMULATION OF DEFORMATION USING THE
PHASE FIELD CRYSTAL METHOD



ปริญญานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรวิศวกรรมศาสตรบัณฑิต
สาขาวิชาวิศวกรรมอุตสาหกรรม คณะวิศวกรรมศาสตร์
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
ปีการศึกษา 2557

การจำลองการเสียรูปโดยวิธีเฟสฟิลด์คริสตัล
SIMULATION OF DEFORMATION USING THE
PHASE FIELD CRYSTAL METHOD



ปริญญานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรวิศวกรรมศาสตรบัณฑิต
สาขาวิชาวิศวกรรมอุตสาหกรรม คณะวิศวกรรมศาสตร์
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

ปีการศึกษา 2557

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการวิจัยเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

SIMULATION OF DEFORMATION USING THE
PHASE FIELD CRYSTAL METHOD



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 2014

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

คณะวิศวกรรมศาสตร์
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
ใบรับรองปริญญาานิพนธ์

หัวข้อปริญญาานิพนธ์ การจำลองการเสียรูปโดยวิธีเฟสฟิลด์คริสตัล
SIMULATION OF DEFORMATION USING THE PHASE FIELD CRYSTAL
METHOD

นักศึกษา นายแทนพันธุ์ เมืองทอง รหัสประจำตัวนักศึกษา 54010525
 นายอิทธิพัทธ์ มาตย์สร้อย รหัสประจำตัวนักศึกษา 54011562

หลักสูตร วิศวกรรมศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาวิศวกรรมอุตสาหการ

อาจารย์ผู้ควบคุมปริญญาานิพนธ์


(ดร. นรินทร์ พิสุทธอานนท์)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Thesis Title	Simulation of Deformation Using the Phase Field Crystal Method
Student	Mr. Tanphan Mungsong Mr. Ittipat Martsoi
Degree	Bachelor of Engineering in Industrial Engineering King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang
Academic year	2014
Thesis Advisor	Dr. Nirand Pisutha-Arnond

ABSTRACT

The goal of this project is to study the phase field crystal model and to simulate deformation of materials. The project is divided into two phases. The first phase is a preliminary study where we simulate the diffusion equation in one-dimensional and two-dimensional the diffusion equations is similar to the equation of the phase field crystal model but with less complexity and therefore is suitable as case study. In solving the diffusion equation, we learn various numerical techniques such as discretization, finite difference method, Jacobi's method, and Fourier spectral method. The second phase involves investigating the phase field crystal model where we perform two studies. The first is the study of the phase stability where we observe difference crystal structures forming at different temperatures and densities. The second study is the study of the deformation process in crystalline solid. We perform deformation by changing the size of the computational domain with iteration time and observe microstructural changes during deformation. We observe atomic rearranging around grain boundary to accommodate the change in the area which is consistent with the fact that the grain boundary is the source and sink of dislocations. These dislocations are necessary to maintain crystal stability during geometrical changes

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

กิตติกรรมประกาศ

ปริญญานิพนธ์เรื่อง การจำลองการเสีรูบโดยใช้แบบจำลองแบบเฟสฟิลด์คริสตัล สามารถสำเร็จ
ลุล่วงไปด้วยดี กลุ่มผู้วิจัยขอกราบขอบพระคุณบุคคลทุกท่านที่มีส่วนเกี่ยวข้องส่งผลให้ปริญญานิพนธ์ฉบับ
นี้เสร็จสมบูรณ์

ดร.นิรันดร์ พิสุทธอาณนธ์ อาจารย์ที่ปรึกษาปริญญานิพนธ์ กลุ่มผู้วิจัยขอกราบขอบพระคุณเป็น
อย่างสูง สำหรับคำแนะนำ ความเอาใจใส่และทุกสิ่งทุกอย่าง และการช่วยเหลือในการแก้ไขปัญหาดัง
จนทำให้ปริญญานิพนธ์ฉบับนี้ออกมาสมบูรณ์

รศ.ดร.สกันธ์ คล่องบุญจิต กรรมการที่ปรึกษาปริญญานิพนธ์ กลุ่มผู้วิจัยขอกราบขอบพระคุณเป็น
อย่างสูง สำหรับคำแนะนำในการแก้ปัญหาทฤษฎีทางคณิตศาสตร์

ขอขอบพระคุณ บิดา มารดา และครู อาจารย์ ทุกท่านที่ให้การอบรมสั่งสอนและให้ความ
ช่วยเหลือต่างๆ อย่างดีมา โดยตลอดพร้อมทั้งเพื่อนๆ ทุกคนที่คอยให้กำลังใจเสมอมา จนทำให้ผู้จัดทำ
โครงการนี้สำเร็จมาจนถึงจุดนี้

แทนพันธุ เมืองของ
อิทธิพัทธ์ มาตย์สร้อย

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

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.....	1
บทที่ 2 ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง	
2.1 สมการเชิงอนุพันธ์.....	2
2.2 การหาค่าตอบของสมการเชิงอนุพันธ์สามัญและสมการอนุพันธ์เชิงย่อย.....	2
2.2.1 การรวมสัญลักษณ์.....	3
2.2.2 การอินทิเกรตเชิงตัวเลข.....	3
2.3 วิกฤตคณิต.....	4
2.4 การแพร่.....	5
2.5 วิธีจาโคบี.....	7
2.6 พูเรียร์ทรานฟอร์ม.....	10
2.6.1 วิธีฟูเรียร์สเปคทรัล.....	11
2.7 ทฤษฎีและแบบจำลองที่เกิดจากการคำนวณโดยคอมพิวเตอร์.....	12
2.7.1 Atomistic Models หรือ Microscopic Models.....	12
2.7.2 Continuum Models หรือ Macroscopic Models.....	12
2.8 แบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล.....	13
2.8.1 ฟังก์ชันพลังงานอิสระในแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล.....	13

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญ (ต่อ)

	หน้า
2.8.2 สมการวิวัฒนาการ (Evolution Equation).....	14
2.9 การเสีรูป (Deformation).....	17
2.9.1 การเสีรูปแบบอิลาสติก.....	17
2.9.2 การเสีรูปแบบพลาสติก.....	17
2.10 การเกิดและโตของเกรน (Grain and Grain Boundary).....	18
บทที่ 3 วิธีการดำเนินการ	
3.1 สมการการแพร่ในหนึ่งมิติ.....	19
3.1.1 เอกซ์พิตไทม์สเตปปิง (Explicit Time Stepping).....	19
3.1.2 อิมพิตไทม์สเตปปิง (Implicit time stepping).....	20
3.2 สมการการแพร่ในสองมิติ.....	21
3.2.1 การใช้วิธี เอกซ์พิตไทม์สเตปปิง (Explicit Time Stepping).....	21
3.2.2 อิมพิตไทม์สเตปปิง (Implicit Time Stepping).....	22
3.2.3 ฟูเรียร์ทรานฟอร์ม (Fourier Tranform).....	22
3.3 แบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล (Phase Field Crystal Model).....	27
3.3.1 ฟังก์ชันพลังงานอิสระ (Free Energy Function).....	27
3.4 จำลองสมการใน MATLAB.....	28
3.5 ทดลองเปลี่ยนตัวแปร.....	28
3.6 ทดลองใส่แรงในแนวแกน.....	29
3.7 สรุปผลและวิเคราะห์ผลที่ได้จากการทดลอง.....	29
บทที่ 4 ผลการดำเนินการ	
4.1 ผลที่ได้จากการจำลองการแข่งขัน.....	30
4.2 ผลที่ได้จากการจำลองการเสีรูป.....	33
4.2.1 ผลการจำลองการขยายวัสดุ.....	33
4.2.2 ผลการจำลองการบีบวัสดุ.....	36
4.2.3 ผลการจำลองการบีบวัสดุในแนวแกนที่ต่างกัน.....	39

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญ (ต่อ)

	หน้า
บทที่ 5 สรุปและวิเคราะห์ผลการดำเนินงาน	
5.1 วิเคราะห์ผลการดำเนินงาน.....	42
5.2 ข้อเสนอแนะและแนวทางการศึกษาต่อ.....	44
เอกสารอ้างอิง.....	45
ภาคผนวก	



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญตาราง

	หน้า
ตารางที่ 2.1 ข้อเปรียบเทียบระหว่างวิธีฟูเรียร์สเปกตรัลและวิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์.....	11
ตารางที่ 3.1 แสดงการใส่ค่าความเปลี่ยนแปลงทั้งสองตัวแปร.....	29



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญรูป

	หน้า
รูปที่ 2.1 การวิฤตค่า x ในหนึ่งมิติ.....	4
รูปที่ 2.2 การจำลองการแพร่อนุภาคของสสาร.....	5
รูปที่ 2.3 ภาพเคลื่อนไหวของแบบจำลองการแพร่ในแบบหนึ่งมิติ.....	6
รูปที่ 2.4 ภาพเคลื่อนไหวของแบบจำลองการแพร่ในแบบสองมิติ.....	6
รูปที่ 2.5 Atomistic Models.....	12
รูปที่ 2.6 Continuum models.....	13
รูปที่ 2.7 แผนภูมิเฟสตามเฟสฟิลด์คริสตัลโมเดล.....	15
รูปที่ 2.8 Triangular Phase.....	15
รูปที่ 2.9 Constant Phase.....	16
รูปที่ 2.10 Stripe Phase.....	16
รูปที่ 2.11 Triangular+Stripe Phase.....	16
รูปที่ 2.12 การเสียรูปในรูปร่างต่างๆ.....	18
รูปที่ 2.13 แสดงถึงการแข็งตัวและเกิดเกรนของวัสดุเมื่อเวลาผ่านไปจาก $a - e$	18
รูปที่ 3.1 ภาพเคลื่อนไหวของแบบจำลองการแพร่ในแบบหนึ่งมิติ.....	20
รูปที่ 3.2 ภาพเคลื่อนไหวของแบบจำลองการแพร่ในแบบ 2 มิติ.....	22
รูปที่ 3.3 กราฟของไซน์ฟังก์ชัน (Sine Function).....	23
รูปที่ 3.4 กราฟของไซน์ฟังก์ชัน (Sine Function) จำนวนเชิงซ้อน.....	24
รูปที่ 3.5 กราฟของไซน์ฟังก์ชัน (Sine Function) จำนวนเชิงซ้อน.....	24
รูปที่ 3.6 กราฟหลังจากเราทำวิธีฟูเรียร์สเปคทรัล (Fourier Spectral Method).....	25
รูปที่ 3.7 ผลจากการนำวิธีแก้ปัญหาลอยตัวและกับวิธีแก้ปัญหาลอยตัวเชิงวิเคราะห์.....	26
รูปที่ 4.1 Triangular Phase.....	31
รูปที่ 4.2 Constant Phase.....	32
รูปที่ 4.3 Stripe Phase.....	32
รูปที่ 4.4 Triangular+Stripe Phase.....	33
รูปที่ 4.5 การขยาย Triangular Phase ขณะเวลา 50,000.....	33
รูปที่ 4.6 การขยาย Triangular Phase ขณะเวลา 500,000.....	34
รูปที่ 4.7 การขยาย Triangular Phase ขณะเวลา 1,000,000.....	34
รูปที่ 4.8 การขยาย Triangular Phase ขณะเวลา 1,500,000.....	35

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญรูป (ต่อ)

หน้า

รูปที่ 4.9 การขยาย Triangular Phase ขณะเวลา 2,000,000.....	35
รูปที่ 4.10 การบีบ Triangular Phase ขณะเวลา 50,000.....	36
รูปที่ 4.11 การบีบ Triangular Phase ขณะเวลา 500,000.....	36
รูปที่ 4.12 การบีบ Triangular Phase ขณะเวลา 1,000,000.....	37
รูปที่ 4.13 การบีบ Triangular Phase ขณะเวลา 1,500,000.....	37
รูปที่ 4.14 การบีบ Triangular Phase ขณะเวลา 2,000,000.....	38
รูปที่ 4.15 การบีบ Triangular Phase ขณะเวลา 50,000.....	39
รูปที่ 4.16 การบีบ Triangular Phase ขณะเวลา 500,000.....	39
รูปที่ 4.17 การบีบ Triangular Phase ขณะเวลา 1,000,000.....	40
รูปที่ 4.18 การบีบ Triangular Phase ขณะเวลา 1,500,000.....	40
รูปที่ 4.19 การบีบ Triangular Phase ขณะเวลา 2,000,000.....	41

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 1

บทนำ

1.1 ที่มาและความสำคัญของโครงการ

ในปัจจุบันได้มีการพัฒนาเทคโนโลยีด้านวัสดุและการทดสอบวัสดุให้มีประสิทธิภาพที่สูงขึ้นเราสามารถใช้อุปกรณ์คอมพิวเตอร์ความเร็วสูงมาช่วยในการแก้สมการทางฟิสิกส์ที่ซับซ้อน ทำให้การใช้ทฤษฎีต่างๆเพื่อทำนายคุณสมบัติของวัสดุเป็นไปได้มากขึ้นจึงได้มีการนำเทคโนโลยีจำลองวัสดุโดยใช้ทฤษฎีมาทำนายสิ่งที่เกิดขึ้นกับวัสดุเพราะการใช้แบบจำลองมาใช้ทำนายนั้นจะช่วยให้ลดข้อจำกัดต่างๆได้เช่นการลดค่าใช้จ่าย ใช้เวลาที่น้อยลง ซึ่งแบบจำลองที่นำมาใช้ศึกษาเป็นทฤษฎีคือแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล แบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัลนี้เป็นแบบจำลองที่ผสมทฤษฎีแบบจำลองหลายๆแบบคือทั้งแบบจำลองอะตอมและแบบจำลองต่อเนื่องจึงมีข้อดีคือสามารถจำลองปรากฏการณ์ในช่วงเวลาที่นานกว่าแบบจำลองทางอะตอมมากโดยที่ไม่ใช้ทรัพยากรในการคำนวณมากจนเกินไป แต่ยังคงคำนึงถึงทฤษฎีทางฟิสิกส์ขั้นพื้นฐานทำให้ความถูกต้องของการทำนายมีมากกว่าแบบจำลองภาวะต่อเนื่อง ซึ่งการใช้แบบจำลองนี้จำลองการเสีรูบจะช่วยลดค่าใช้จ่ายในการทำวัสดุนั้นเสีรูบจริงๆ

1.2 วัตถุประสงค์ของโครงการ

1. เพื่อศึกษาแบบจำลอง Phase Field Crystal Method ในทางทฤษฎี
2. เพื่อศึกษากระบวนการทางตัวเลขที่เกี่ยวข้องกับแบบจำลอง Phase Field Crystal Method
3. เพื่อศึกษาและนำเทคนิคในการจำลองการเสีรูบแบบใหม่มาใช้ในการจำลองการเสีรูบ

1.3 ขอบเขตของโครงการ

1. การจำลองแบบจำลอง Phase Field Crystal จะเป็นการจำลองในสองมิติ
2. การเสีรูบที่ศึกษาจะเป็นการเสีรูบแบบเส้นตรง
3. ศึกษาว่าเทคนิคในการจำลองการเสีรูบแบบใหม่มีประสิทธิภาพทางการคำนวณและผลทางกายภาพแตกต่างจากเทคนิคเดิมอย่างไร

1.4 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1. สามารถใช้โปรแกรม MATLAB ได้
2. สามารถเรียนรู้การเสีรูบของวัสดุโดยใช้แบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล
3. สามารถเปลี่ยนรูปลสมการเพื่อนำไปใช้ในโปรแกรม MATLAB ได้

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 2

ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง

ปริญญาโทฉบับนี้เป็นการศึกษาและจำลองการเสีรูปของวัสดุโดยใช้โมเดลเฟสฟิลด์คริสตัลโดยทำการศึกษาจากทฤษฎีที่เกี่ยวข้องกับการจำลองวัสดุและวิเคราะห์การเติบโตของเกรนการเกิดอะตอมจนถึงลักษณะการเสีรูปของวัสดุโดยทฤษฎีที่เกี่ยวข้องนี้ได้นำเสนอเฉพาะที่นำมาใช้กับปริญญาโทเท่านั้นซึ่งมีดังต่อไปนี้

1. สมการเชิงอนุพันธ์
2. การหาคำตอบของสมการเชิงอนุพันธ์สามัญและสมการอนุพันธ์เชิงย่อย
3. วิกฤตคณิต
4. การแพร่
5. วิธีจาคอบี
6. ฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์ม
7. ทฤษฎีและแบบจำลอง
8. ทฤษฎีแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล
9. การเสีรูป
10. การเกิดและเติบโตของเกรน

2.1 สมการเชิงอนุพันธ์

สมการเชิงอนุพันธ์คือสมการซึ่งแสดงความสัมพันธ์ระหว่างฟังก์ชันของ ตัวแปรอิสระ ตัวแปรตาม และอนุพันธ์ของตัวแปรตามเทียบกับตัวแปรอิสระนั้นๆ สมการเชิงอนุพันธ์สามัญ (Ordinary Differential Equations) หมายถึงสมการอนุพันธ์ซึ่งมีตัวแปรอิสระเพียงตัวเดียวสมการเชิงอนุพันธ์ที่มีตัวแปรอิสระมากกว่าหนึ่งตัวเรียกว่า สมการเชิงอนุพันธ์ย่อย (Partial differential equations)

2.2 การหาคำตอบของสมการเชิงอนุพันธ์สามัญและสมการอนุพันธ์เชิงย่อย

การหาคำตอบของสมการเชิงอนุพันธ์สามัญและสมการอนุพันธ์เชิงย่อยมีขั้นตอนการทำดังนี้

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.2.1 การรวมสัญลักษณ์

ในแคลคูลัสการรวมสัญลักษณ์ที่เป็นวิธีการในการหาสูตรสำหรับปริมาณฟังก์ชันที่ไม่แน่นอนของฟังก์ชัน f ที่กำหนด (x) คือการหาอนุพันธ์ได้ฟังก์ชัน $F(x)$

2.2.2 การอินทิเกรตเชิงตัวเลข

ในการหาพื้นที่มูลฐานนั้นถ้ารู้ฟังก์ชันที่ปิดล้อมพื้นที่สามารถใช้การอินทิเกรตเพื่อหาค่าพื้นที่ที่ปิดล้อมนั้นได้แต่บางฟังก์ชันเราไม่สามารถหาค่าอินทิเกรตได้ต้องหาพหุนามที่ใช้ประมาณค่าเพื่อใช้พหุนามนั้นในการหาพื้นที่แทนซึ่งได้พื้นที่ที่ปิดล้อมโดยประมาณนอกจากนี้การเขียนโปรแกรมเพื่ออินทิเกรตฟังก์ชันใดๆ เป็นขั้นตอนที่ยากดังนั้นต้องคำนวณหาค่าอินทิเกรตเชิงตัวเลข

1. วิธีไฟไนต์เอลิเมนต์ (Finite Element Method)

วิธีไฟไนต์เอลิเมนต์ (Finite Element Method) คือเทคนิควิเคราะห์เชิงตัวเลขสำหรับการหาคำตอบโดยประมาณของสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยพร้อมกับสมการปริพันธ์ผลลัพธ์ที่ได้จากวิธีนี้มีพื้นฐานมาจากการกำจัดสมการเชิงอนุพันธ์อย่างสมบูรณ์หรือการปรับแก้สมการเชิงอนุพันธ์ให้กลายเป็นระบบโดยประมาณของสมการเชิงอนุพันธ์สามัญซึ่งเป็นปริพันธ์ทางคณิตศาสตร์ด้วยการใช้เทคนิคมาตรฐานทางคณิตศาสตร์

2. ระเบียบวิธีการทางไฟไนต์โวลุ่ม (Finite Volume Method)

เป็นวิธีการในการลดรูปของสมการอนุพันธ์ย่อยให้อยู่ในรูปของพีชคณิตเพื่อให้สามารถหาค่าอย่างง่ายการสร้างสมการมีลักษณะคล้ายกับระเบียบวิธีการทางไฟไนต์เอลิเมนต์ (Finite Element Method: FEM) หรือระเบียบวิธีการผลต่าง (Finite Difference Method: FDM) ไฟไนต์โวลุ่มจะอ้างอิงถึงพื้นที่ผิวที่อยู่รอบๆ จุดต่อ (Node point) การคำนวณเป็นการปริพันธ์ (Integral) สมการอนุพันธ์ที่ประกอบไปด้วยค่าเวกเตอร์ของสมการพื้นผิวแต่ละพื้นผิวความได้เปรียบของระเบียบวิธีการนี้คือสามารถใช้ได้ดีในแบบจำลองที่มีการแบ่งเอลิเมนต์ที่ไม่เป็นระเบียบ

3. วิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์ (Finite Difference Method)

เป็นวิธีการประมาณค่าของคำตอบจากสมการอนุพันธ์เชิงซ้อนโดยใช้สมการที่ผ่านการวิฤตซึ่งการวิฤตตัวแปรทางเวลาสามารถทำได้สองวิธีคือเอกซ์พิดิตไทม์สเตปปิง (Explicit Time Stepping) และอิมพิดิตไทม์สเตปปิง (Implicit Time Stepping) ซึ่งเอกซ์พิดิตไทม์สเตปปิงคือการหาคำตอบโดยใช้ข้อมูลของเวลาในอดีต ส่วนอิมพิดิตไทม์สเตปปิงคือการหาคำตอบโดยใช้ข้อมูลของเวลาในอดีตและปัจจุบันผลลัพธ์ที่ได้จากวิธี Finite Difference คือระบบสมการพีชคณิตที่ต้องแก้ไข ระบบสมการเหล่านี้สามารถเขียนให้อยู่ในรูป $Ax = b$ โดยที่ A และ b เป็นเมทริกซ์ค่าคงที่และ x เป็นเมทริกซ์ตัวแปร

ตัวอย่างสมการ Heat Transfer

$$\frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (2.1)$$

เมื่อแปลงเป็นรูปแบบ Explicit Time Stepping

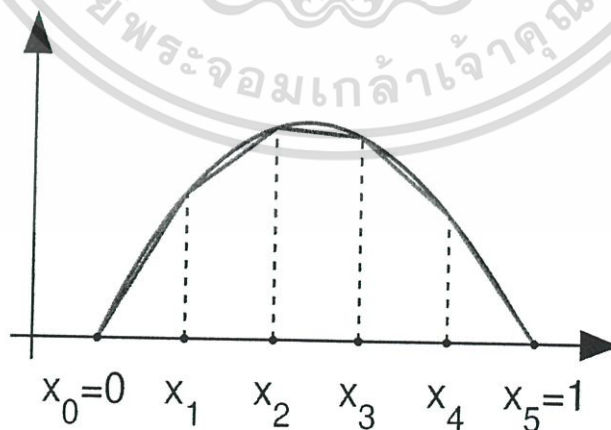
$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = k \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{\Delta x^2} \quad (2.2)$$

เมื่อแปลงเป็นรูปแบบ Implicit Time Stepping

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = k \frac{T_{i+1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} \quad (2.3)$$

2.3 วิกฤตคณิต (Discretization)

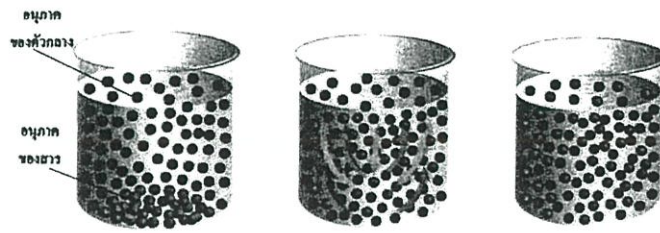
สมการการแพร่และเฟสฟิลด์คริสตัลเป็นสมการอนุพันธ์เชิงซ้อน (Partial Differential Equation) ทำให้คำตอบเขียนเป็นรูปแบบปิด (Closed Form) ไม่ได้เป็นส่วนใหญ่จึงต้องใช้หลักการคณิตศาสตร์เชิงตัวเลข (Numerical Method) ซึ่งทำให้ตัวแปรที่มีรูปแบบต่อเนื่อง (Continuous Variable) กลายเป็นตัวแปรที่เป็นช่วงๆ (Discretized Variable) และทำให้การอนุพันธ์ (Differential Operator) เปลี่ยนเป็นตัวดำเนินการทางพีชคณิต (Algebraic Operator) ดังนั้นการแก้สมการที่ได้ผ่านการวิกฤตแล้วจึงสามารถทำได้ด้วยโปรแกรมคอมพิวเตอร์



รูปที่ 2.1 การวิกฤตค่า x ในหนึ่งมิติ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.4 การแพร่ (Diffusion)



รูปที่ 2.2 การจำลองการแพร่อนุภาคของสสาร

สมการของการแพร่ (Diffusion Equation) แสดงถึงการกระจายตัวของอนุภาคของสสารจากบริเวณที่มีความเข้มข้นสูงกว่าไปยังบริเวณที่มีความเข้มข้นต่ำกว่าการแพร่จะทำให้เกิดการผสมของส่วนประกอบวัสดุ การเคลื่อนที่ของอะตอมก็จะยังคงเกิดถึงแม้ว่าสารจะผสมกันโดยสมบูรณ์หรือเข้าสู่ภาวะสมดุลแล้วโดยพื้นฐานแล้วคือการเคลื่อนที่ของโมเลกุลโดยที่สมการการแพร่คือ

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla^2 c \quad (2.4)$$

c = ความเข้มข้น (Concentration)

t = เวลา (Time)

สมการของการแพร่ในแบบหนึ่งมิติอยู่ในรูปของสมการดังนี้

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (2.5)$$

ในหนึ่งมิติค่า $c(x_i, t_j)$ ทำให้อยู่ในรูป c_i^j และ ∇^2 ทำให้อยู่ในรูป $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

จากรูปแบบต่อเนื่อง (Continuous) ต้องทำให้อยู่ในรูปแบบตัวเลข (Discretized) อยู่ในรูปของสมการดังนี้

$$c_i^{j+1} = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (c_{i+1}^j + c_{i-1}^j - 2c_i^j) + c_i^j \quad (2.6)$$

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

i = พื้นที่ในแกน x (Space of x-axis)

j = เวลา (Time)

สมการของการแพร่ในแบบ 2 มิติ อยู่ในรูปของสมการดังนี้

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \quad (2.7)$$

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

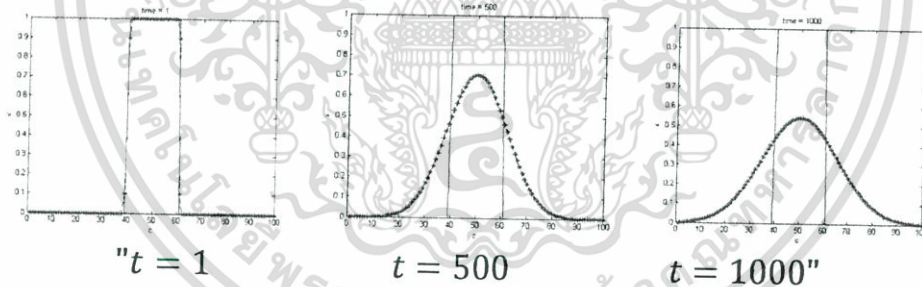
จากรูปแบบต่อเนื่อง (Continuous) ต้องทำให้อยู่ในรูปแบบตัวเลข (Discretized) อยู่ในรูปของสมการดังนี้

$$c_{i,j}^{k+1} = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (c_{i+1,j}^k + c_{i-1,j}^k + c_{i,j+1}^k + c_{i,j-1}^k - 4c_{i,j}^k) + c_{i,j}^k \quad (2.8)$$

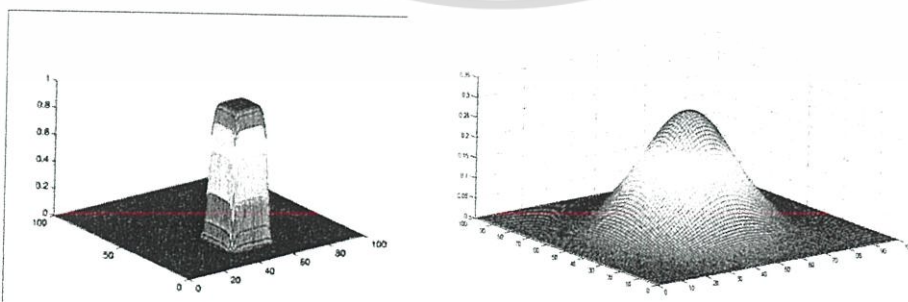
i = พื้นที่ในแกน x (Space of x-axis)

j = พื้นที่ในแกน y (Space of y-axis)

k = เวลา (Time)



รูปที่ 2.3 ภาพเคลื่อนไหวของแบบจำลองการแพร่ในแบบหนึ่งมิติ



" $t = 100$ "

" $t = 1000$ "

รูปที่ 2.4 ภาพเคลื่อนไหวของแบบจำลองการแพร่ในแบบสองมิติ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สมการที่นำไปเขียนโปรแกรมเพื่อแก้สมการของการแพร่และสามารถสร้างภาพเคลื่อนไหวของแบบจำลองการแพร่ในแบบหนึ่งมิติและสองมิติเมื่อได้รูปแบบกราฟแบบนี้แสดงว่าทำได้สำเร็จและถูกต้อง

2.5 วิธีจาโคบี (Jacobi's Method)

การหาคำตอบของสมการ $Ax = B$ ทำได้หลายวิธี ซึ่งวิธีที่ดีที่สุดคือ การกำจัดแบบเกาส์ (Gaussian Elimination) เพราะให้ค่าที่แม่นยำที่สุดแต่ใช้เวลานานเกินไปจึง ใช้วิธีจาโคบี ซึ่งใช้เวลาน้อยกว่า แต่ค่าที่ได้คือผลจากการประมาณค่า การหาค่า A^{-1} จากระบบสมการ $Ax = B$ โดยการวนซ้ำค่า x เพื่อหาคำตอบที่เหมาะสมที่สุด ซึ่งต้องทำให้เมตริกซ์ A อยู่ในรูปของ $A = D - L - U$ โดยที่

$$D = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & & \vdots \\ 0 & \dots & a_{nn} & \dots \end{bmatrix} \quad (2.9)$$

$$L = \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ -a_{n1} & \dots & -a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

$$U = \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \dots & -a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

จะได้สมการคือ

$$(D - L - U)x = B \quad (2.12)$$

และทำให้สมการอยู่ในรูป

$$Dx = (L + U)x + B \quad (2.13)$$

และหาค่า x โดย

$$x = D^{-1}(L + U)x + D^{-1}B \quad (2.14)$$

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

หาคำตอบของสมการใช้เทคนิค Jacobi Iterative

$$x^{(k)} = D^{-1}(L + U)x^{k-1} + D^{-1}B \quad k = 1, 2, 3, \dots, n \quad (2.15)$$

การหาค่า x ซึ่งเริ่มต้นจาก $x^{(0)}$ และสร้างลำดับเวกเตอร์ $\{x^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$

การใช้เทคนิค Jacobi Method นั้นนำมาใช้เพราะการเขียน Code MATLAB แบบ Real Space นั้นมีสองแบบคือ เอกซ์พิติตไทม์สเตปปิง (Explicit Time Stepping) และอิมพิติตไทม์สเตปปิง (Implicit Time Stepping) แบบ เอกซ์พิติตไทม์สเตปปิง (Explicit Time Stepping) นั้นง่ายที่จะหาค่า A^{-1} แต่มักให้ค่าที่ไม่ถูกต้องไม่เหมาะสมจะนำมาหาคำตอบจึงต้องใช้อิมพิติตไทม์สเตปปิง (Implicit Time Stepping) แต่จะได้เมตริกซ์ที่หาค่า A^{-1} ยากเพราะเมตริกซ์ที่ได้จะไม่ใช่เมตริกซ์แยงมุมจึงต้องใช้เทคนิค Jacobi Method มาใช้ในการหาคำตอบแต่สุดท้ายแล้วหากใช้เทคนิควิธีฟูเรียร์สเปกตรัล (Fourier Spectral Method) แล้วจะหาคำตอบง่ายกว่าการใช้ Real Space Case Study การใช้วิธีจาคอบีแก้ปัญหามสมการการแพร่จากสมการการแพร่ (Diffusion Equation)

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla^2 c \quad (2.16)$$

ทำการ Discretization

$$c_i^{n+1} - c_i^n = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (c_{i+1}^{n+1} + c_{i-1}^{n+1} - 2c_i^{n+1}) \quad (2.17)$$

และทำการย้ายข้างสมการ

$$c_i^{n+1} + \frac{2\Delta t}{(\Delta x)^2} c_i^{n+1} - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} c_{i+1}^{n+1} - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} c_{i-1}^{n+1} = c_i^n \quad (2.18)$$

ที่ $i = 1$ จะได้

$$\left(1 + \frac{2\Delta t}{(\Delta x)^2}\right) c_1^{n+1} - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} c_2^{n+1} - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} c_0^{n+1} = c_1^n \quad (2.19)$$

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

จากสมการ $Dx = (L + U)x + B$

$$\begin{aligned}
 & \begin{bmatrix} 1 + \frac{2\Delta t}{(\Delta x)^2} & & & & \\ & 1 + \frac{2\Delta t}{(\Delta x)^2} & & & \\ & & 1 + \frac{2\Delta t}{(\Delta x)^2} & & \\ & & & 1 + \frac{2\Delta t}{(\Delta x)^2} & \\ & & & & 1 + \frac{2\Delta t}{(\Delta x)^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0^{n+1} \\ c_1^{n+1} \\ c_2^{n+1} \\ \vdots \\ c_{m-1}^{n+1} \\ c_m^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & & & & \\ & -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & & & \\ & & \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & & \\ & & & -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & \\ & & & & \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & 0 \\ & & & & & -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & 0 \end{bmatrix} \\
 + & \begin{bmatrix} 0 & -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & & & \\ & \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & & & \\ & & -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & & \\ & & & \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & \\ & & & & -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & \\ & & & & & \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0^{n+1} \\ c_1^{n+1} \\ c_2^{n+1} \\ \vdots \\ c_{m-1}^{n+1} \\ c_m^{n+1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c_0^n \\ c_1^n \\ c_2^n \\ \vdots \\ c_{m-1}^n \\ c_m^n \end{bmatrix} \\
 \text{ฉะนั้นคำตอบของ } X \text{ คือ} & = D^{-1} \begin{bmatrix} 0 & \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & & & \\ \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & 0 & \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & & \\ & \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & 0 & \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & \\ & & -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & 0 & \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \\ & & & -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & 0 & \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \\ & & & & -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0^{n+1} \\ c_1^{n+1} \\ c_2^{n+1} \\ \vdots \\ c_{m-1}^{n+1} \\ c_m^{n+1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c_0^n \\ c_1^n \\ c_2^n \\ \vdots \\ c_{m-1}^n \\ c_m^n \end{bmatrix} D^{-1} \tag{2.24}
 \end{aligned}$$

2.6 ฟูเรียร์ทรานฟอร์ม (Fourier Transform)

ฟูเรียร์ทรานฟอร์มหมายถึงการแปลงเชิงปริพันธ์โดยเป็นการเขียนแทนฟังก์ชันใดๆในรูปผลบวกหรือปริพันธ์ของฐานที่เป็นฟังก์ชันรูปคลื่นไซน์หรือโคไซน์

2.6.1 วิธีสเปคตรัล (Spectral Methods)

การประมาณคำตอบจากสมการอนุพันธ์เชิงซ้อนโดยการแก้คำตอบให้อยู่ในรูปของการรวมกันของเบซิส (Basis) ซึ่งการใช้วิธีสเปคตรัลมาใช้กับวิธีอิมพลิตไทล์สเตปบิงทำให้การแก้สมการ $Ax=b$ ทำได้ง่ายจนไม่ต้องใช้วิธีจาคอบีอีก ตัวอย่างการแก้สมการอนุพันธ์เชิงซ้อนของสมการการแพร่โดยใช้วิธีสเปคตรัล

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (2.25)$$

ใช้ Fourier Basis คือ $\frac{d^n f(x)}{dx^n}$ แปลงเป็น Fourier Transform จะได้ $(ikx)^n f(k)$

โดยที่ $f(k)$ คือฟังก์ชันของ Fourier Transform ที่เปลี่ยนมาจาก $f(x)$ จะได้สมการ

$$\sum_{k=0}^N \Phi_k(x) \frac{da_k(t)}{dt} = \sum_{k=0}^N a_k(t) \frac{d^2 \Phi_k(x)}{dx^2} = \sum_{k=0}^N -ka_k(t) \Phi_k(x) \quad (2.26)$$

โดยที่ แทนค่า $\Phi_k = (ikx)$ จะได้สมการอนุพันธ์ตัวแปรเดียว

$$\frac{da_k(t)}{dt} = -ka_k(t) \quad (2.27)$$

การนำอนุพันธ์ตัวแปรเดียวไปคำนวณด้วยวิธีอิมพลิต (Implicit Methods) สามารถทำได้ง่ายกว่าเพราะดูเพียงแค่ตัวแปรเดียวในการคำนวณ

ตารางที่ 2.1 ข้อเปรียบเทียบระหว่างวิธีฟูเรียร์สเปคตรัลและวิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์

	Fourier Spectral Method	Finite Difference Method
การคำนวณหาพื้นที่	เป็นพื้นที่ส่วนกลับ	เป็นพื้นที่ทางกายภาพ
ความถูกต้อง	มักเป็น exponential	เป็นพหุนาม
ขอบเขตเงื่อนไข	ยากต่อการใช้	ใช้ได้ทั่วไป
การแก้ปัญหาอิมพลิต	ใช้งานได้ง่ายกว่า	ยากต่อการใช้แก้ปัญหา
ลักษณะ	เขียนได้ง่าย	ค่อนข้างยาว
การปรับตัว	ไม่สามารถทำได้	ปรับตัวง่าย

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อ 111 ศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.7 ทฤษฎีและแบบจำลอง

การศึกษาทฤษฎีและแบบจำลองในปัจจุบันนั้นใช้วิธี Computational Methods เป็นการใช้เทคโนโลยีคอมพิวเตอร์ขั้นสูงมาใช้ในการศึกษาวัสดุซึ่งสามารถลดเวลาการจำลองและข้อจำกัดต่างๆได้มากมายซึ่งหลักการ Computational Methods ที่ใช้ศึกษานั้นสามารถแบ่งหลักๆได้ 2 วิธีคือแบบ Atomistic Models และ Continuum Models ซึ่งมีข้อดีและข้อเสียต่างกัน

2.7.1 Atomistic Models หรือ Microscopic Models

เป็นการศึกษาแบบจำลองทางอะตอมซึ่งอาศัยทฤษฎีทางฟิสิกส์ขั้นพื้นฐาน โดยเป็นวิธีที่จะศึกษาการเปลี่ยนแปลงของอะตอมภายในระยะเวลาหนึ่งๆเป็นการจำลองลักษณะการเปลี่ยนแปลงของอะตอมที่มีความละเอียดสูงมากซึ่ง Atomistic Models มีจุดเด่นจากการให้ความละเอียดที่สูงมากและให้ความถูกต้องแม่นยำที่สูงมากแต่ข้อเสียของ Atomistic Models คือ การใช้ระยะเวลาในการคำนวณที่สูงเกินไปเพราะว่าโดยปกติอะตอมจะมีการเคลื่อนที่และเกิดอยู่ตลอดเวลา



รูปที่ 2.5 Atomistic Models

2.7.2 Continuum Models หรือ Macroscopic Models

เป็นการศึกษาการเปลี่ยนแปลงของวัสดุโดยการสังเกตปรากฏการณ์ต่างๆและคุณสมบัติที่เกิดขึ้นกับวัสดุในการทดลองดังนั้นจึงไม่มีข้อจำกัดทั้งทางด้านเวลาและขนาดหรือปริมาณอะตอมแต่เนื่องจากการไม่ใช้ทฤษฎีทางฟิสิกส์มากำหนดเป็นพื้นฐานจึงทำให้ความแม่นยำที่ได้ไม่สูงซึ่งข้อดีของทฤษฎีนี้คือการใช้เวลาคำนวณที่ไม่นานแต่ข้อเสียคือความแม่นยำต่ำซึ่งอาจไม่สามารถให้คำตอบที่ละเอียดได้



รูปที่ 2.6 Continuum models

จากการศึกษาทั้งสองโมเดลพบว่ามีข้อดีข้อเสียที่แตกต่างกันแต่เป็นข้อดีข้อเสียที่มีคุณลักษณะทดแทนกันฉะนั้นจึงเกิดโมเดลที่เรียกว่าเฟสฟิลด์คริสตัลโมเดลขึ้นซึ่งโมเดลนี้มีลักษณะเฉพาะคือนำข้อดีของโมเดลทั้งสองแบบข้างต้นมาประยุกต์ใช้ร่วมกัน

2.8 แบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล

แบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล (Phase Field Crystal) เป็นแบบจำลองที่สามารถใช้ในการศึกษาปรากฏการณ์ในวัสดุ (Material Phenomena) ได้เป็นอย่างดีเนื่องจากความสามารถจำลองปรากฏการณ์ในระดับอะตอมในช่วงสเกลเวลาที่มากกว่าแบบจำลองทางอะตอมซึ่งหลักสำคัญของแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัลคือสมการพลังงานซึ่งเป็นสมการที่นำไปใช้ในการคำนวณเพื่อหาการเปลี่ยนแปลงสภาพลิกของวัสดุในแผนภูมิเฟสแบบจำลองนี้มีข้อดีคือสามารถจำลองปรากฏการณ์ในช่วงเวลาที่นานกว่าแบบจำลองทางอะตอมมากโดยที่ไม่ใช้ทรัพยากรในการคำนวณมากเกินไปแต่ยังคงคำนึงถึงทฤษฎีทางฟิสิกส์ขั้นพื้นฐานทำให้ความถูกต้องของการทำนายมีมากกว่าแบบจำลองภาวะต่อเนื่อง

2.8.1 ฟังก์ชันพลังงานอิสระในแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล

ฟังก์ชันพลังงานอิสระมีสมการดังนี้

$$F = \int d\vec{r} \left(\frac{\phi}{2} [a\Delta T + \lambda(q_0^2 + \nabla^2)^2] \phi + u \frac{\phi^4}{4} \right) \quad (2.28)$$

F = ฟังก์ชันพลังงานอิสระ (Free Energy Functional)

ϕ = ความหนาแน่นของความน่าจะเป็นในการพบอะตอม (Atomic Probability Density)

λ, u = ค่าคงที่ (Constant)

ทำสมการฟังก์ชันพลังงานอิสระให้ไม่มีหน่วย (Non-Dimensionalization) โดยกำหนดให้

$$\vec{x} = \vec{r}q_0, \psi = \phi \sqrt{\frac{u}{\lambda q_0^4}}, r = \frac{a\Delta T}{\lambda q_0^4}, \tau = \Gamma \lambda q_0^6 t \quad (2.29)$$

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อ 13 ศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

นำค่าจากสมการ (2.29) แทนค่าในสมการ (2.28) ได้ดังนี้

$$F = \frac{F}{F_0} = \int d\vec{x} \left[\frac{\psi}{2} \omega(\nabla^2) \psi + \frac{\psi^4}{4} \right] \quad (2.30)$$

สมการฟังก์ชันพลังงานอิสระที่ไม่มีหน่วยอยู่ในรูปของสมการดังนี้

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla^2 (\omega(\nabla^2) \psi + \psi^3) \quad (2.31)$$

และนำ $\omega(\nabla^2)$ มาแทนค่าในสมการ

$$\omega(\nabla^2) = r + (1 + \nabla^2)^2 \quad (2.32)$$

จากนั้นนำสมการไปคำนวณและจำลองใน MATLAB

2.8.2 สมการวิวัฒนาการ (Evolution Equation)

เป็นกฎการอนุรักษ์พลังงานในระบบปิด โดยการสลายพลังงานนั้นตามหลักการที่พลังงานจะลดลงเมื่อเวลาผ่านไปและเกิดการเพิ่มขึ้นของเอนโทรปีของระบบตามกฎข้อที่ 2 ของเทอร์โมไดนามิกส์โดยสมการวิวัฒนาการอยู่ในรูปของสมการดังนี้

$$\frac{\partial \phi(r)}{\partial t} = \Gamma \nabla^2 \frac{\delta F(\phi(r))}{\delta \phi(r)} + \eta \quad (2.33)$$

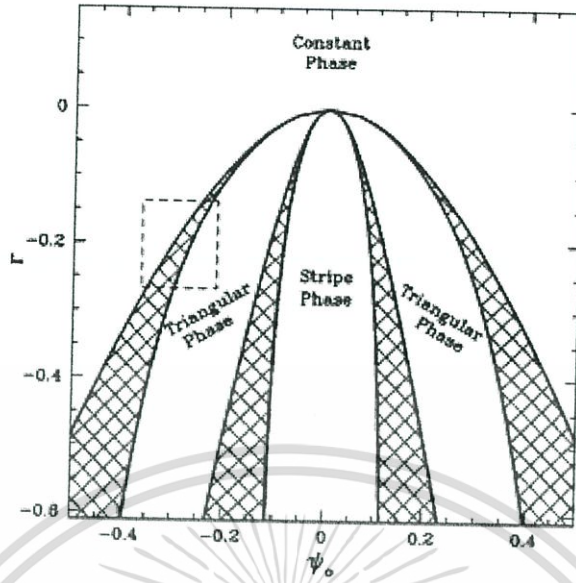
ϕ = ความเข้มข้น (Concentration)

t = เวลา (Time)

r = การเปลี่ยนเวลาของการจำลองระบบ

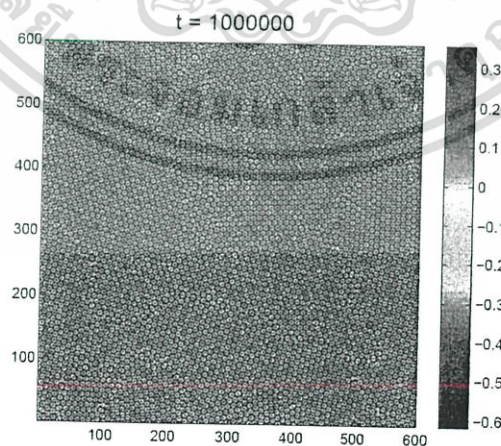
Γ = สัมประสิทธิ์การเคลื่อนที่ของอะตอม (Mobility Coefficient)

η = การสั่นของอะตอมโดยการสุ่ม (Noise)

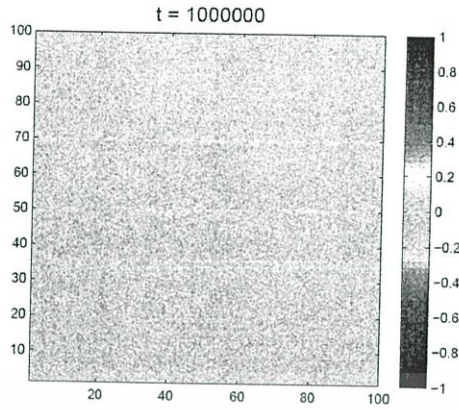


รูปที่ 2.7 แผนภูมิเฟสตามเฟสฟิลด์คริสตัลโมเดล

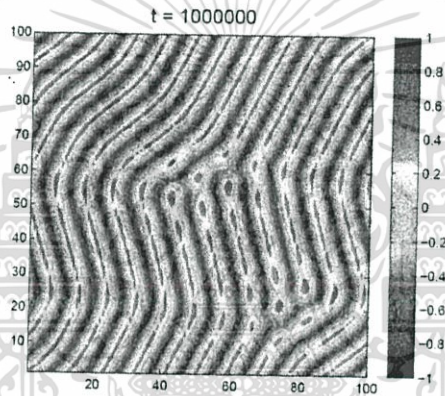
ฟังก์ชันพลังงานอิสระนั้นทำให้เกิดเฟสต่างๆในการจำลองสองมิติ Phase Diagram ได้แก่ ได้ 1.Constant Phase 2.Stripe Phase และ 3.Triangular Phase โดย Constant phase เป็นเฟสของเหลว Stripe Phase เป็นเฟสของแข็งที่เป็นเส้นและขีดในลักษณะ 2 มิติ ซึ่งไม่ตรงกับความเป็นจริงใน 3 มิติ แต่ Triangular Phase เป็นเฟสของแข็งโดยจุดที่ติดกันทุกจุดเป็น 3 เหลี่ยมเล็กๆประกอบกัน ซึ่ง Triangular Phase นั้นมีลักษณะที่คล้ายกับอะตอมมากที่สุด จึงเป็นเฟสที่พิจารณาในการใช้แบบจำลอง Phase-Field Crystal ในการจำลองการเสวยรูป



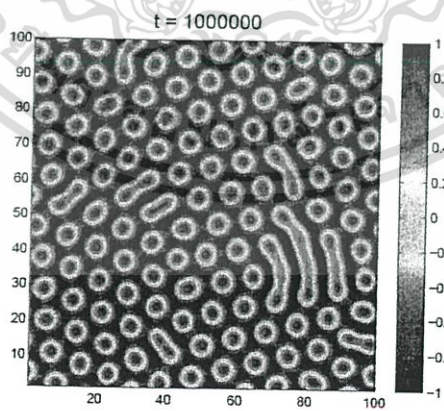
รูปที่ 2.8 Triangular Phase



รูปที่ 2.9 Constant Phase



รูปที่ 2.10 Stripe Phase



รูปที่ 2.11 Triangular+Stripe Phase

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.9 การเสียรูป (Deformation)

การเสียรูป (Deformation) หมายถึงระยะที่วัสดุเปลี่ยนขนาดเช่น การยืดตัว การหดตัว หรือเปลี่ยนแปลงรูปร่างของวัสดุไปจากเดิมเป็นผลมาจากการเคลื่อนที่ภายในเนื้อวัสดุเนื่องมาจากเกิดความเค้น เพราะการถูกแรงภายนอกกระทำหรืออาจเกิดจากการเปลี่ยนอุณหภูมิการวัดระยะการเปลี่ยนรูปเป็นการวัดระยะที่เปลี่ยนแปลงไปจากขนาดเริ่มต้นซึ่งการเสีयरูปนั้นมีสองรูปแบบคือการเสีयरูปแบบยืดหยุ่นหรืออิลาสติก และการเสีयरูปแบบถาวรหรือแบบพลาสติก

2.9.1 การเสีयरูปแบบอิลาสติก

การเสีयरูปแบบอิลาสติกเป็นการเปลี่ยนรูปเมื่อมีแรงกระทำแต่เมื่อปลดแรงกระทำอะตอมซึ่งเคลื่อนไหวเนื่องจากผลของความเค้นจะเคลื่อนกลับเข้าตำแหน่งเดิมทำให้วัสดุคงรูปร่างเดิมไว้ได้ตัวอย่างได้แก่ยางยืด สปริง ถ้าเราดึงมันแล้วปล่อยมันจะกลับไปมีขนาดเท่าเดิม

2.9.2 การเสีयरูปแบบพลาสติก

การเสีयरูปแบบพลาสติกเป็นการเปลี่ยนรูปที่ถึงแม้ว่าจะปลดแรงกระทำนั้นออกแล้ววัสดุยังคงรูปร่างตามที่ถูกเปลี่ยนไปนั้นโดยอะตอมที่เคลื่อนที่ไปแล้วจะไม่กลับไปตำแหน่งเดิมวัสดุทุกชนิดจะมีพฤติกรรมการเปลี่ยนรูปทั้งสองชนิดนี้ขึ้นอยู่กับแรงที่มากกระทำหรือความเค้นว่ามีมากน้อยเพียงใดหากไม่เกินพิกัดการคืนรูปแล้ววัสดุนั้นจะมีพฤติกรรมคืนรูปแบบอิลาสติกแต่ถ้าความเค้นเกินกว่าพิกัดการคืนรูปแล้ววัสดุจะเกิดการเปลี่ยนรูปแบบถาวรหรือแบบพลาสติกส่วนใหญ่แล้วการเสีयरูปแบบถาวร (Plastic Deformation) จะมีกลไกการเสีयरูปซึ่งมักจะเกิดจากการที่วัสดุได้รับแรงมากกระทำจนเกิดการเปลี่ยนแปลงชนิดแรงถึงแม้ว่าเราจะเอาแรงนั้นออกแล้วก็ตามมันก็ไม่สามารถจะกลับคืนสู่ในสภาพเดิมได้ซึ่งแบ่งเป็นสามแบบคือ แบบสลลิป (Slip Deformation) แบบทวินนิง (Twinning Deformation) และแบบดิสโลเคชั่น (Dislocation)

1. แบบสลลิป (Slip Deformation)

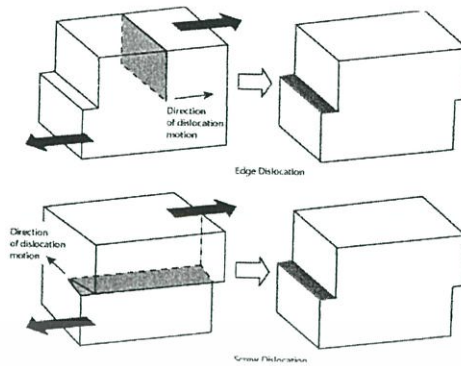
แบบสลลิป (Slip Deformation) คือการเลื่อนตัวหรือการเลื่อนผ่านกันระหว่างผลึกในแนวของอะตอม (Atom) ในระนาบ (Planes) ของผลึกโดยเป็นการเคลื่อนย้ายชนิดแบบถาวรโดยที่ถึงแม้ว่าจะไม่มีความเค้นใดๆ แต่ผลึกนั้นๆก็จะไม่สามารถเคลื่อนกลับมาให้อยู่ในสภาพดั้งเดิมได้อีกเลย

2. แบบทวินนิง (Twinning Deformation)

แบบทวินนิง (Twinning Deformation) หมายถึงขบวนการในการเปลี่ยนรูปอันเนื่องมาจากระยะหรือแนวของผลึกเกิดการถูกเฉือนให้แบ่งแยกออกเป็น 2 ส่วนที่มีลักษณะคล้ายกันหรือเหมือนกันโดยที่ทิศทางในการหักเหจะเป็นไปทั้งระนาบเลยทีเดียว

3. แบบดิสโลเคชั่น (Dislocation)

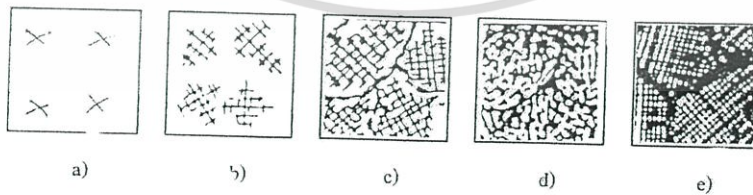
แบบดิสโลเคชั่น (Dislocation) คือขบวนการที่เกิดการเคลื่อนของวัสดุเมื่อเกิดมีแรงหรือได้รับแรงมาจากภายนอกเข้ามากระทำจนกระทั่งอะตอมเกิดอาการเลื่อนตัวขึ้นนั่นเอง



รูปที่ 2.12 การเสีรูปร่างในรูปแบบต่างๆ

2.10 การเกิดและโตของเกรน (Grain and Grain Boundary)

ในสภาวะที่วัสดุแข็งตัวผลึกแต่ละผลึกจะเริ่มแข็งตัวจากนิวเคลียสหรือจากจุดศูนย์กลางของผลึกก่อน นิวเคลียสคือผลึกเล็กๆที่ก่อตัวขึ้นเป็นผลึกแรกซึ่งการก่อตัวของนิวเคลียสนี้ อาจจะก่อตัวขึ้นหลายๆจุดพร้อมๆกันและจากนั้นผลึกจะโตขึ้นเรื่อยๆจากการจับตัวกันเพิ่มขึ้นของอะตอมที่เข้ารวมตัวกันตามรูปทรงของผลึกของโลหะนั้นๆการรวมตัวกันของอะตอมจะเกิดขึ้นอย่างรวดเร็วพร้อมๆกันกับการเย็นตัวของวัสดุซึ่งการจับยึดตัวของอะตอมต่อไปเรื่อยๆเช่นนี้เรียกว่าเดนไดรต์ (Dendrite) การเจริญเติบโตของเดนไดรต์ (Dendrite) จะแผ่ขยายออกไปเรื่อยๆจนกระทั่งวัสดุนั้นแข็งตัวหมดจึงจะหยุดการเจริญเติบโตเดนไดรต์ (Dendrite) ต่างๆที่เกิดขึ้นนั้นเป็นอิสระไม่ขึ้นต่อกันมันจะขยายตัวออกไปจนกระทั่งแขนงขยายตัวแผ่ออกไปชนกับแขนงของตัวข้างเคียงซึ่งหมายถึงการเจริญเติบโตของผลึกสิ้นสุดลงในช่วงนี้ของโลหะก็จะแข็งตัวหมดพอตีผลึกแต่ละผลึกจะมีขนาดไม่เท่ากันเนื่องจากการเติบโตของเดนไดรต์ (Dendrite) แต่ละตัวเป็นอิสระไม่ขึ้นต่อกันจากการที่ผลึกแต่ละผลึกไม่เท่ากันนี้เองทำให้มีลักษณะเป็นเส้นแบ่งเขตแดนของเกรนแต่ละเกรนซึ่งเรียกว่าขอบเกรน (Grain Boundary)



รูปที่ 2.13 แสดงถึงการแข็งตัวและเกิดเกรนของวัสดุเมื่อเวลาผ่านไปจาก a - e

บทที่ 3

วิธีการดำเนินงาน

ในส่วนวิธีการดำเนินงานนั้นเราเริ่มจากการใช้สมการจากทฤษฎีการแพร่เพราะมีความใกล้เคียงกับสมการเฟสฟิลด์คริสตัลโมเดลมาดำเนินการต่างๆดังนี้

3.1 สมการการแพร่ในหนึ่งมิติ

สมการการแพร่ในหนึ่งมิติ ซึ่งแบ่งเป็นสองรูปแบบคือ เอกซ์พlicit ไทม์สเตปปิง (Explicit Time Stepping) และ อิมพlicit ไทม์สเตปปิง (Implicit Time Stepping)

3.1.1 เอกซ์พlicit ไทม์สเตปปิง (Explicit Time Stepping)

มีขั้นตอนดังนี้ จากสมการการแพร่

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla^2 c \quad (3.1)$$

1. เริ่มต้นจากการวิฤตตัวแปรเวลา t และตัวแปรปริภูมิ X และ Y และประมาณค่า

$$C(x_i, t_n) = c_i^n \quad (3.2)$$

2. จากนั้นทำการวิฤตอนุพันธ์จะได้สมการที่ทำการวิฤตแล้วคือ

$$c_i^{n+1} = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (c_{i+1}^n + c_{i-1}^n - 2c_i^n) + c_i^n \quad (3.3)$$

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อ 19 ศึกษานี้เท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

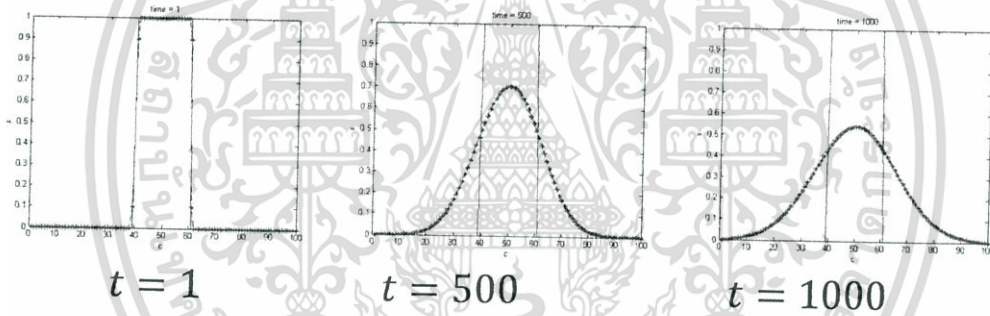
3. ทดลองหาคำตอบโดยใช้วิธีจาคอบี

จากคำตอบของ \mathcal{X} คือ

$$\begin{bmatrix} c_0^{n+1} \\ c_1^{n+1} \\ c_2^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ c_{m-1}^{n+1} \\ c_m^{n+1} \end{bmatrix} = D^{-1} \begin{bmatrix} 0 & -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & & & & & \\ \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & 0 & \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & & & & \\ & -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & 0 & \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & & & \\ & & \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & 0 & \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & & \\ & & & -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & 0 & \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & \\ & & & & \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & 0 & \\ & & & & & -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0^n \\ c_1^n \\ c_2^n \\ \vdots \\ \vdots \\ c_{m-1}^n \\ c_m^n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c_0^n \\ c_1^n \\ c_2^n \\ \vdots \\ \vdots \\ c_{m-1}^n \\ c_m^n \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

4. นำสมการที่ได้จำลองในโปรแกรม MATLAB เพื่อสังเกตผล

5. เมื่อจำลองจึงเห็นผลที่เกิดขึ้นมีดังนี้



รูปที่ 3.1 ภาพเคลื่อนไหวของแบบจำลองการแพร่ในแบบหนึ่งมิติ

3.1.2 อิมพิซิิตไทม์สเตปปิง (Implicit Time stepping)

หลังจากทดลองการจำลองการแพร่แบบ เอกซ์พิซิิตไทม์สเตปปิง (Explicit Time Stepping) จึงทดลองเปลี่ยนมาใช้แบบ อิมพิซิิตไทม์สเตปปิง (Implicit Time Stepping) ซึ่งมีขั้นตอนดังนี้

1. ทำการวิฤตตัวแปรทำแบบเดียวกับวิธีเอกซ์พิซิิตไทม์สเตปปิง (Explicit Time Stepping)
2. ทำการวิฤตอนุพันธ์ซึ่งได้สมการคล้ายกับเอกซ์พิซิิตไทม์สเตปปิง (Explicit time stepping) โดยค่า k ซึ่งเป็นตัวแปรเวลาจะมีการนำข้อมูลปัจจุบันมาใช้คำนวณ ซึ่งได้สมการดังนี้

$$c_i^{n+1} = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (c_{i+1}^{n+1} + c_{i-1}^{n+1} - 2c_i^{n+1}) + c_i^n \quad (3.5)$$

3. ใช้สมการแบบ อิมพิซิิตไทม์สเตปปิง (Implicit Time Stepping) จำลองในโปรแกรม MATLAB

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

4. ผลที่ได้คือกราฟคอนทัวร์ที่มีลักษณะเหมือนแบบเอกซ์พิซิดไทม์สเตปปิง (Explicit Time Stepping) แต่ใช้เวลาน้อยกว่าในการรอผลการจำลอง

3.2 สมการการแพร่ในสองมิติ

สมการการแพร่ในสองมิติ ซึ่งแบ่งเป็นสามรูปแบบคือ 1.เอกซ์พิซิดไทม์สเตปปิง (Explicit Time Stepping) 2.อิมพิซิดไทม์สเตปปิง (Implicit Time Stepping) และ 3.ฟูเรียร์ทรานฟอร์ม (Fourier Transform)

3.2.1 การใช้วิธี เอกซ์พิซิดไทม์สเตปปิง (Explicit Time Stepping)

1. ทำการวิฤตตัวแปรเหมือนสมการการแพร่หนึ่งมิติแต่ต่างกันโดยการเพิ่มตัวแปร j เพื่อเพิ่มมิติในสมการ

$$C(x_i, y_j, t_n) = c_{i,j}^n \quad (3.6)$$

2. การวิฤตอนุพันธ์ใช้วิธีเหมือนกับการแพร่หนึ่งมิติ

$$c_{i,j}^{n+1} = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (c_{i+1,j}^n + c_{i-1,j}^n + c_{i,j+1}^n + c_{i,j-1}^n - 4c_{i,j}^n) + c_{i,j}^n \quad (3.7)$$

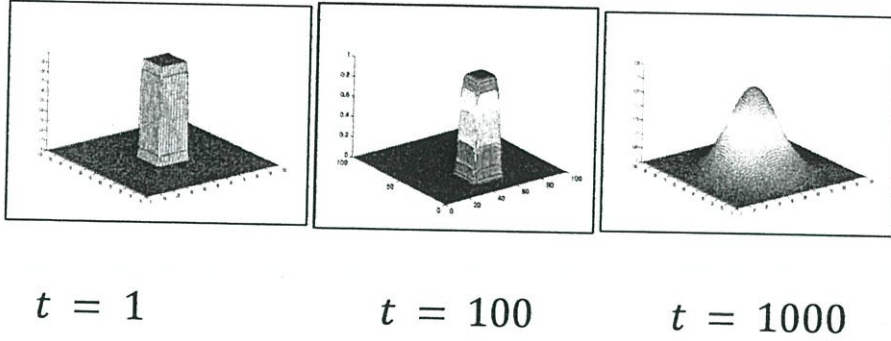
i = พื้นที่ในแกน x (Space of x-axis)

j = พื้นที่ในแกน y (Space of y-axis)

n = เวลา (Time)

3. นำสมการการแพร่สองมิติที่วิฤตแล้วมาจำลองใน MATLAB

4. ผลที่ได้จากการสังเกตที่เวลาต่างๆคือ



รูปที่ 3.2 ภาพเคลื่อนไหวของแบบจำลองการแพร่ในแบบ 2 มิติ

3.2.2 อิมพลิตไทม์สเตปปิง (Implicit Time Stepping)

1. วิธีอิมพลิตไทม์สเตปปิง (Implicit Time Stepping) ในสองมิติต่างจากเอกซ์พลิตไทม์สเตปปิง (Explicit Time Stepping) เพียงตัวแปรเวลาในการวิฤตอนุพันธ์ ซึ่งได้สมการคือ

$$c_{i,j}^{n+1} = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (c_{i+1,j}^{n+1} + c_{i-1,j}^{n+1} + c_{i,j+1}^{n+1} + c_{i,j-1}^{n+1} - 4c_{i,j}^{n+1}) + c_{i,j}^n \quad (3.8)$$

2. นำสมการที่วิฤตแล้วไปจำลองในโปรแกรม MATLAB
3. ผลที่ได้คือกราฟคอนทัวร์สองมิติที่ได้แสดงผลเหมือนวิธีเอกซ์พลิตไทม์สเตปปิง (Explicit Time Stepping) แต่ใช้เวลารอผลน้อยกว่า

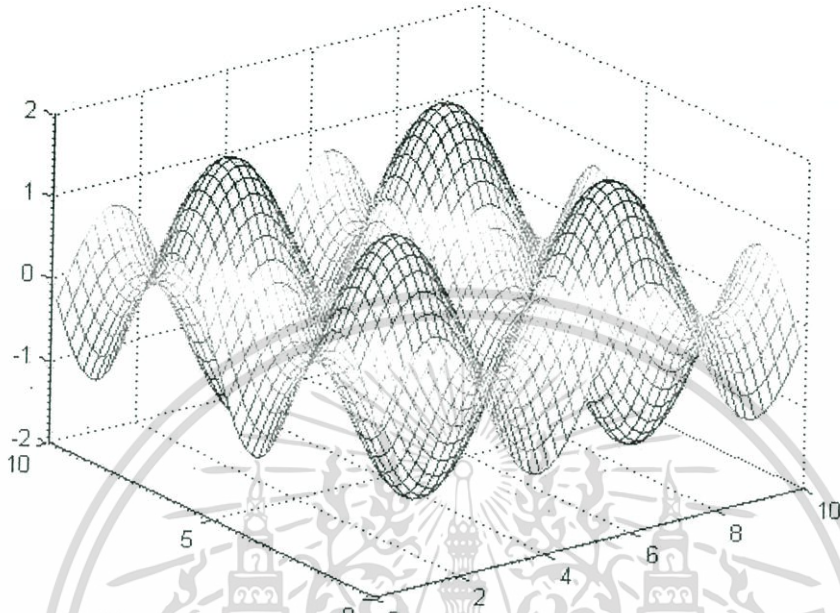
3.2.3 ฟูเรียร์ทรานฟอร์ม (Fourier Transform)

ในการแก้สมการอนุพันธ์เชิงย่อยนั้นนอกจากวิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์ยังมีอีกวิธีที่สามารถแก้สมการได้คือวิธีฟูเรียร์สเปกตรัล ซึ่งก่อนที่จะทำด้วยวิธีฟูเรียร์สเปกตรัล (Fourier Spectral Method) เราต้องทำการเช็คว่ เราสามารถทำการ ฟูเรียร์ทรานฟอร์ม (Fourier Transform) ได้ร้ปว่ด้วยการเช็คกับสมการดังกล่าวที่นำมาเช็ค

$$f(x,y) = \sin\left(\frac{2\pi fx}{L}\right) + \sin\left(\frac{2\pi fy}{L}\right) \quad (3.9)$$

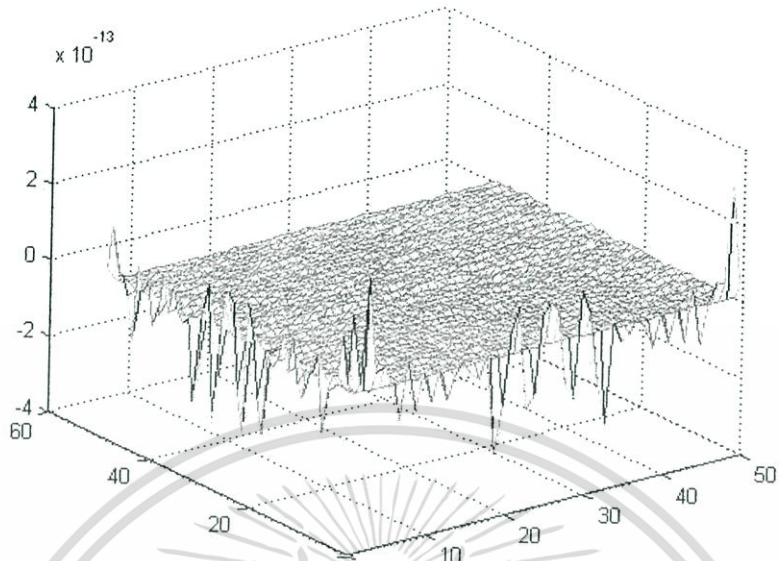
$$z = \nabla^2 f(x,y) \quad (3.10)$$

เมื่อเราทำการสร้างกราฟจะได้กราฟ ดังนี้

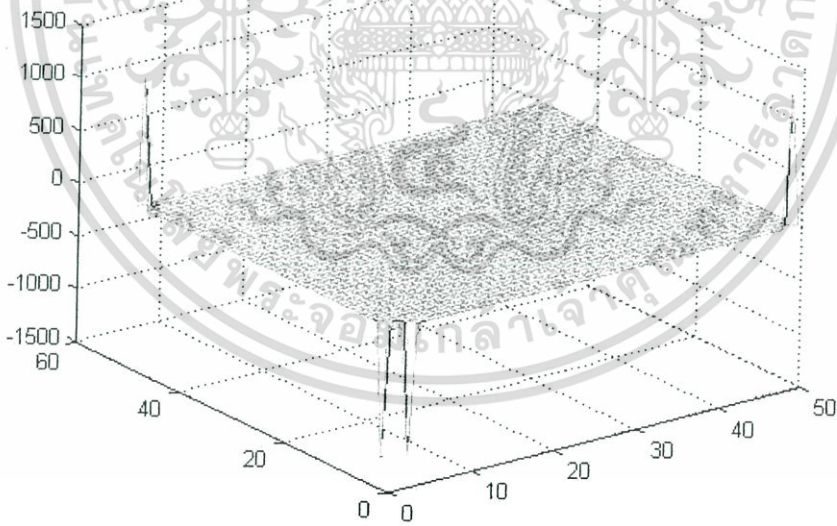


รูปที่ 3.3 กราฟของไซน์ฟังก์ชัน (Sin Function)

และเมื่อเราทำการ ฟูเรียร์ทรานฟอร์ม (Fourier Tranform) แล้วสร้างกราฟซึ่งต้องการทำฟูเรียร์ทรานฟอร์ม (Fourier Tranform) จะทำให้เราได้จำนวนเชิงซ้อนเพราะฉะนั้นเราจึงได้กราฟออกมาสองกราฟ



รูปที่ 3.4 กราฟของไซน์ฟังก์ชัน (Sin Function) จำนวนเชิงซ้อน



รูปที่ 3.5 กราฟของไซน์ฟังก์ชัน (Sin Function) จำนวนเชิงซ้อน

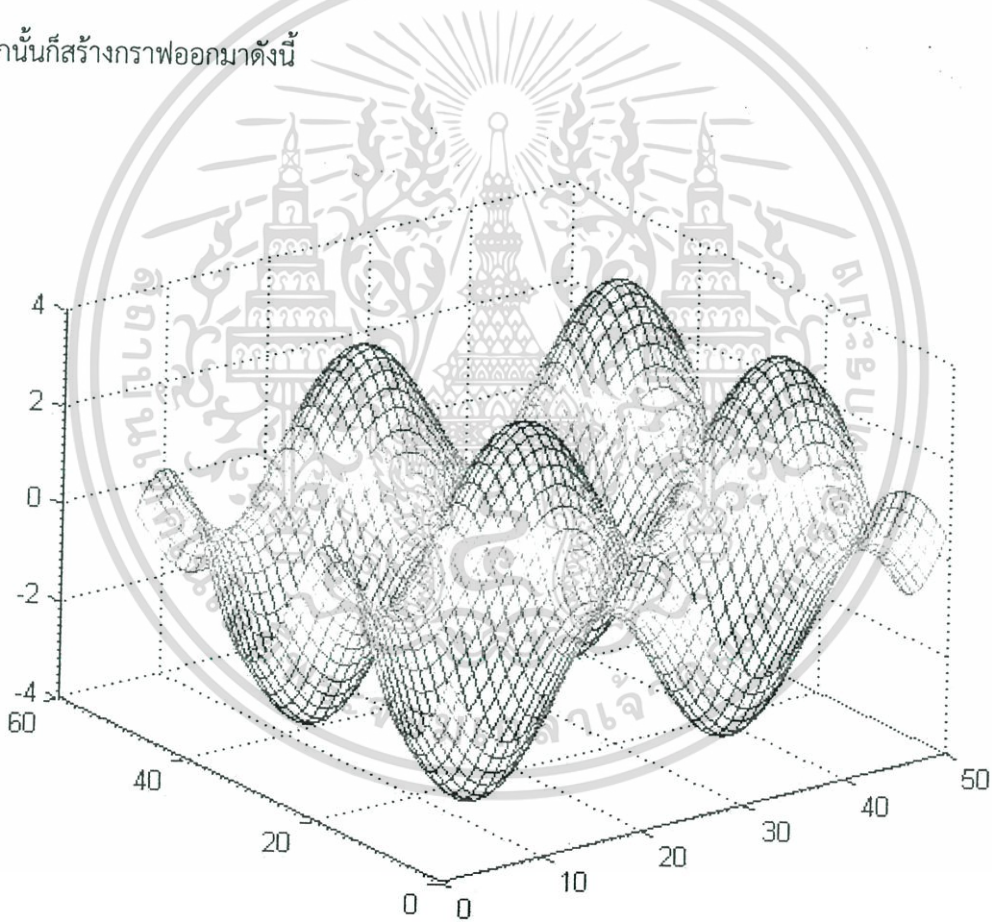
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อ 24 ศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ซึ่งจากกราฟจะได้กราฟ จริง (Real) และ จินตนาการ (Imaginary) ถ้าเราใช้โคไซน์ (cosin) กราฟจะสลับกันซึ่งจากกราฟบอกถึงค่าความถี่ได้ถูกต้องต่อมาเราจะทำการฟูเรียร์ทรานฟอร์มแบบย้อนกลับ (Inverse Fourier Tranform) และก่อนจะทำได้เราต้องกำหนดจุดพิกัดในแบบของฟูเรียร์ทรานฟอร์ม (Fourier Tranform) ตามทฤษฎีคือ

$$kx = \frac{2\pi}{L} \left(0, 1, 2, 3, 4, \dots, \frac{n}{2} - 1, -\frac{n}{2}, \dots, -4, -3, -2, -1 \right) \quad (3.11)$$

$$ky = \frac{2\pi}{L} \left(0, 1, 2, 3, 4, \dots, \frac{n}{2} - 1, -\frac{n}{2}, \dots, -4, -3, -2, -1 \right) \quad (3.12)$$

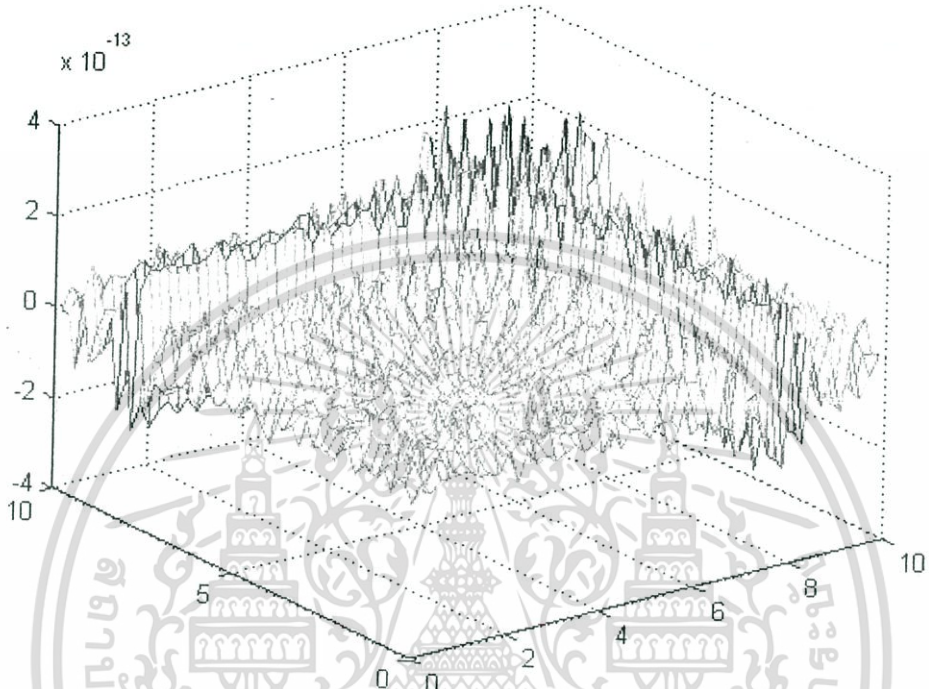
หลังจากนั้นก็สร้างกราฟออกมาดังนี้



รูปที่ 3.6 กราฟหลังจากเราทำวิธีฟูเรียร์สเปกตรัล (Fourier Spectral Method)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อ 25 ศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

หลังจากนั้นเราจะทำการเช็คคำตอบของวิธีฟูเรียร์สเปกตรัล (Fourier Spectral Method) ด้วยวิธีการนำวิธีแก้ปัญหาคเชิงตัวเลขลบกับวิธีแก้ปัญหาคเชิงวิเคราะห์ (Numerical Solution - Analytical Solution) แล้วก็สร้างกราฟออกมาเพื่อดูคำตอบดังนี้



รูปที่ 3.7 ผลจากการนำวิธีแก้ปัญหาคเชิงตัวเลขลบกับวิธีแก้ปัญหาคเชิงวิเคราะห์ (Numerical Solution - Analytical Solution)

จากกราฟแสดงให้เห็นว่าวิธีฟูเรียร์สเปกตรัล (Fourier Spectral Method) สามารถนำไปใช้กับสมการการแพร่ได้หลังจากเราเช็คเสร็จแล้ว

1. จากสมการการแพร่

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla^2 c \tag{3.13}$$

เปลี่ยนให้อยู่ในรูปของฟูเรียร์ทรานฟอร์มจะได้สมการคือ

$$\frac{\partial \hat{c}}{\partial t} = -(kx^2 + ky^2)\hat{c} \tag{3.14}$$

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อ 26 รัชศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2. จากนั้นทำการวิฤตสมการการแพร่ที่อยู่ในรูปฟูเรียร์ทรานฟอร์ม

$$\hat{c}^{n+1} = \frac{\hat{c}^n}{(1 + \Delta t(kx^2 + ky^2))} \quad (3.15)$$

3. นำสมการการแพร่ในรูปฟูเรียร์ทรานฟอร์มไปจำลองในโปรแกรม MATLAB จากนั้นสังเกตและวิเคราะห์ผลที่เกิดขึ้น

จากการนำไปใช้ทำให้เห็นว่าวิธีฟูเรียร์สเปกตรัล (Fourier Spectral Method) นั้นง่ายกว่าวิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์เพราะไม่ต้องสร้างลูปลึง 3 รอบและรูปแบบการเขียนสมการยังง่ายกว่า

3.3 แบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล (Phase Field Crystal Model)

แบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล (Phase Field Crystal Model) ประกอบด้วยสมการพลังงานอิสระ

3.3.1 ฟังก์ชันพลังงานอิสระ (Free Energy Function)

1. เริ่มศึกษาและทำแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัลโดยศึกษาจากสมการพลังงานอิสระ

$$F = \int d\vec{r} \left(\frac{\phi}{2} [a\Delta T + \lambda(q_0^2 + \nabla^2)^2] \phi + u \frac{\phi^4}{4} \right) \quad (3.16)$$

F = ฟังก์ชันพลังงานอิสระ (Free Energy Function)

ϕ = ความหนาแน่นของความน่าจะเป็นในการพบอะตอม (Atomic Probability Density)

λ, u = ค่าคงที่ (Constant)

2. สมการพลังงานอิสระที่นำไปจำลองในโปรแกรม MATLAB นั้นต้องทำให้สมการเป็นสมการฟังก์ชันพลังงานอิสระที่ไม่มีหน่วยดังสมการ

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla^2 (\omega(\nabla^2) \psi + \psi^3) \quad (3.17)$$

โดยที่ $\psi = \phi \sqrt{\frac{u}{\lambda q_0^4}}$ คือความน่าจะเป็นในการพบอะตอม

3. แทนค่า c แทนค่า ψ เพื่อง่ายต่อการนำไปเปลี่ยนให้อยู่ในรูปฟูเรียร์ทรานฟอร์มดังสมการ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อ 277 ศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla^2(\omega(\nabla^2)c + c^3) \quad (3.18)$$

4 ค่า $\omega(\nabla^2)$ ซึ่งมีค่าดังสมการ

$$\omega(\nabla^2) = r + (1 + \nabla^2)^2 \quad (3.19)$$

แทนค่า $\omega(\nabla^2)$ จะได้สมการดังนี้

$$\frac{\partial c}{\partial t} = r\nabla^2 c + \nabla^2 c + 2\nabla^4 c + \nabla^6 c + \nabla^2 c^3 \quad (3.20)$$

5. นำสมการที่ได้เปลี่ยนให้อยู่ในรูปแบบฟูเรียร์ทรานฟอร์มได้สมการดังนี้

$$\frac{\partial \hat{c}}{\partial t} = r(kx + ky)^2 \hat{c} + (kx + ky)^2 \hat{c} + 2(kx + ky)^4 \hat{c} + (kx + ky)^6 \hat{c} + (kx + ky)^2 \hat{c}^3 \quad (3.21)$$

6. ทำการวิฤตสมการที่อยู่ในรูปแบบฟูเรียร์ทรานฟอร์มได้สมการดังนี้

$$\hat{c}^{n+1} = \frac{-(ky^2 + kx^2)\hat{c}^3 + \Delta t \hat{c}^n}{(1 + \Delta t((ky^2 + kx^2)(r+1)) - 2(ky^2 + kx^2)^2 + (ky^2 + kx^2)^3)} \quad (3.22)$$

3.4 จำลองสมการในโปรแกรม MATLAB

นำสมการที่ได้จำลองในโปรแกรม MATLAB และสังเกตเฟสที่เกิดขึ้นตามแผนภูมิเฟส

3.5 ทดลองเปลี่ยนตัวแปรต่างๆ

ทดลองเปลี่ยนตัวแปรต่างๆเช่น อุณหภูมิ และค่าความหนาแน่นของความนำจะเป็นในการพบอะตอม และสังเกตความเปลี่ยนแปลงที่เกิดขึ้นตามแผนภูมิเฟส

	ค่าความน่าจะเป็นในการพบ อะตอม	อุณหภูมิ
ครั้งที่ 1 Stripe phase	0	-0.3
ครั้งที่ 2 Triangular phase	-0.25	-0.2
ครั้งที่ 3 Constant phase	-0.3	-0.1
ครั้งที่ 4 Triangular + Strip phase	-0.1	-0.2

ตารางที่ 3.1 แสดงการใส่ค่าความเปลี่ยนแปลงทั้งสองตัวแปร

3.6 ทดลองใส่แรงในแนวแกนต่างๆ

ทดลองใส่แรงในแนวแกน x และแกน y และค่า strain rate ดูความเปลี่ยนแปลงที่เกิดขึ้นกับวัสดุว่ามี การเสียรูปแตกต่างกันอย่างไรหากแรงที่ใส่ในสองแกนมีค่าต่าง ๆ กัน

3.7 สรุปผลและวิเคราะห์

สรุปผลและวิเคราะห์ผลที่ได้จากการทดลอง

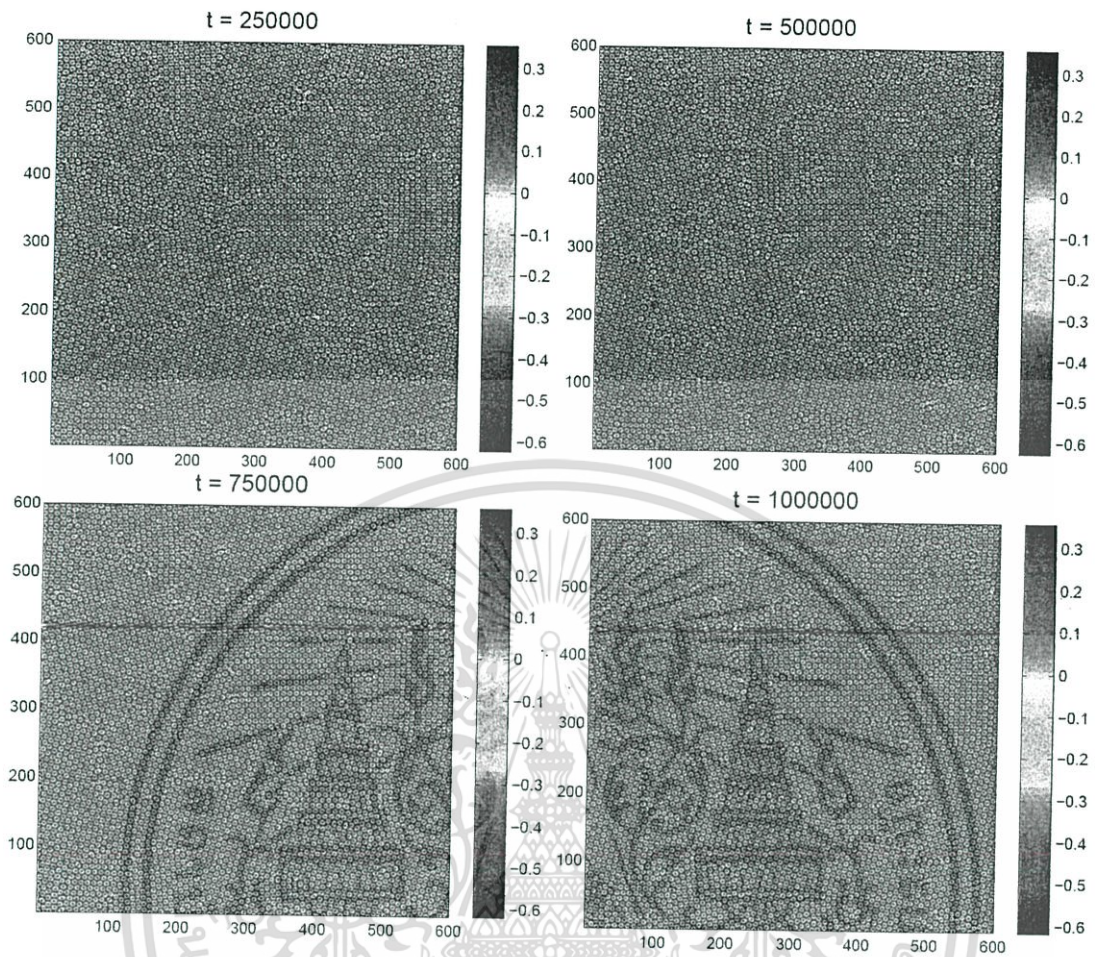
บทที่ 4

ผลการดำเนินงาน

4.1 ผลที่ได้จากการจำลองการแข่งขันตัว

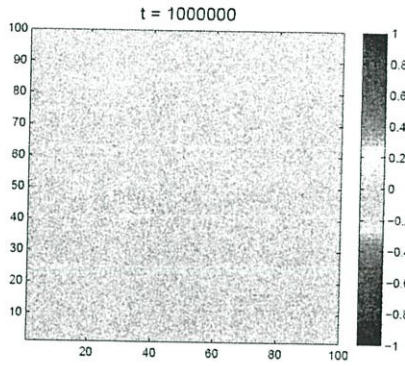
จากผลการดำเนินงานจะได้แบบจำลองการแข่งขันตัวของวัสดุแสดงถึงแผนภาพจำลองวัสดุจากของเหลวเปลี่ยนเป็นของแข็งแสดงถึงการเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นของอะตอมขณะที่เวลาต่างๆซึ่งแถบสีทางด้านขวามายถึงค่าที่ใช้แทนความน่าจะเป็นในการเจออะตอมซึ่งไม่มีหน่วยโดยที่สีแดงหมายถึงความน่าจะเป็นที่มีค่าสูงในการเจออะตอมและสีน้ำเงินหมายถึงความน่าจะเป็นที่มีค่าต่ำในการเจออะตอมโดยจำลองการแข่งขันตัวของโลหะขณะอุณหภูมิที่จุดเย็นยิ่งยวด-0.2และจำลองในเวลาต่างๆตั้งแต่ระยะเวลา 250,000 จนถึง 1,000,000





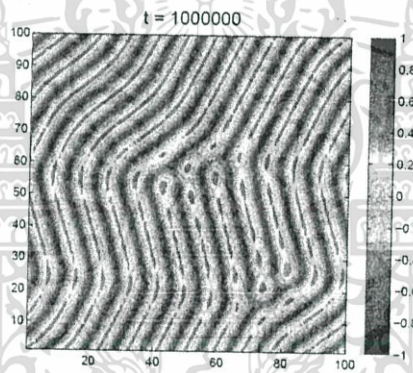
รูปที่ 4.1 Triangular Phase

จากภาพสองมิติสามารถบอกได้ว่าเมื่อเกรนมีขนาดโตขึ้นทำให้เส้นขอบเกรนโดยรวมลดลงและส่งผลให้พลังงานทั้งหมดลดลงสิ่งนี้เป็นแรงขับเคลื่อนให้เกิดการโตของเกรน การโตของเกรนเกิดขึ้นโดยไปกินพื้นที่ของเกรนที่มีขนาดเล็กกว่าหรืออาจจะเรียกได้ว่าเกรนเล็กเกิดการหดตัวจนหายไปนั่นเอง



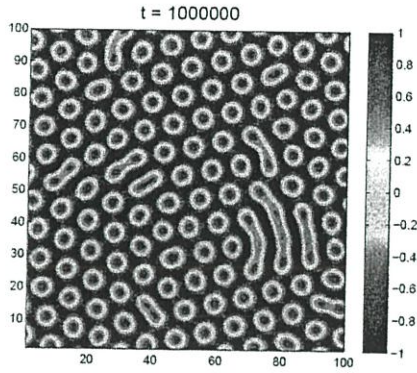
รูปที่ 4.2 Constant Phase

เป็นเฟสที่อยู่ในสภาพของเหลว ดังนั้นความน่าจะเป็นที่จะเจออะตอมจึงมีค่าเป็นลบ แสดงให้เห็นเป็นสีฟ้าทั้งหมด



รูปที่ 4.3 Stripe Phase

เป็นเฟสที่เราเพิ่มความหนาแน่นของวัสดุ เราจะได้เฟสดังรูปภาพ



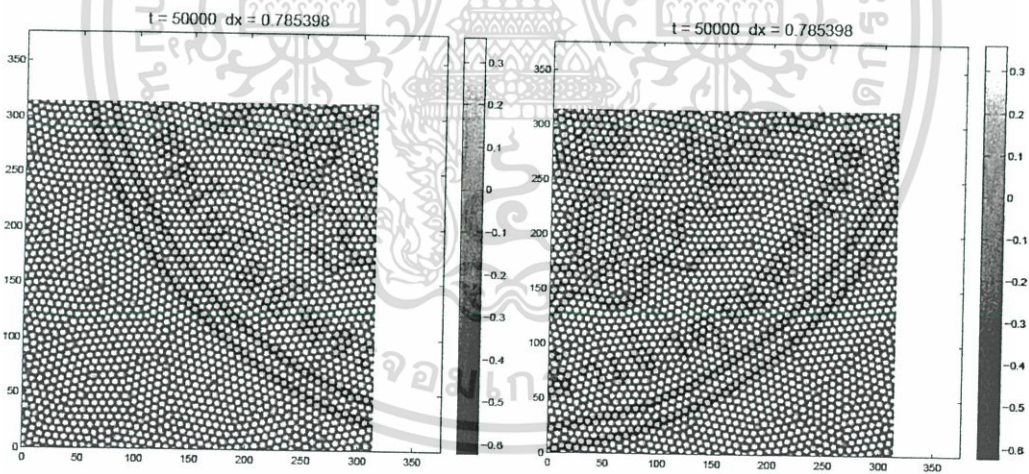
รูปที่ 4.4 Triangular+Stripe Phase

เป็นเฟสสองเฟสที่รวมกันจะมีส่วนคล้ายทั้ง 2 เฟสนั้นคือ Triangular Phase และ Stripe Phase

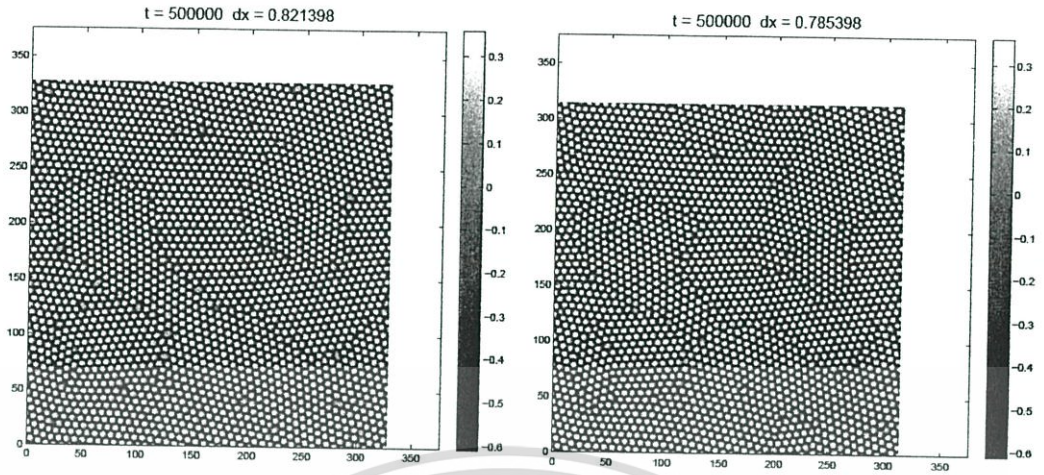
4.2 ผลที่ได้จากการจำลองการเสียรูป

หลังจากนั้นเราจะทำการใส่แรงแต่ละด้านซึ่งมีทั้งการบีบและการขยายเพื่อดูความน่าจะเป็นที่จะเจออะตอมที่มีการเปลี่ยนแปลงอย่างไร

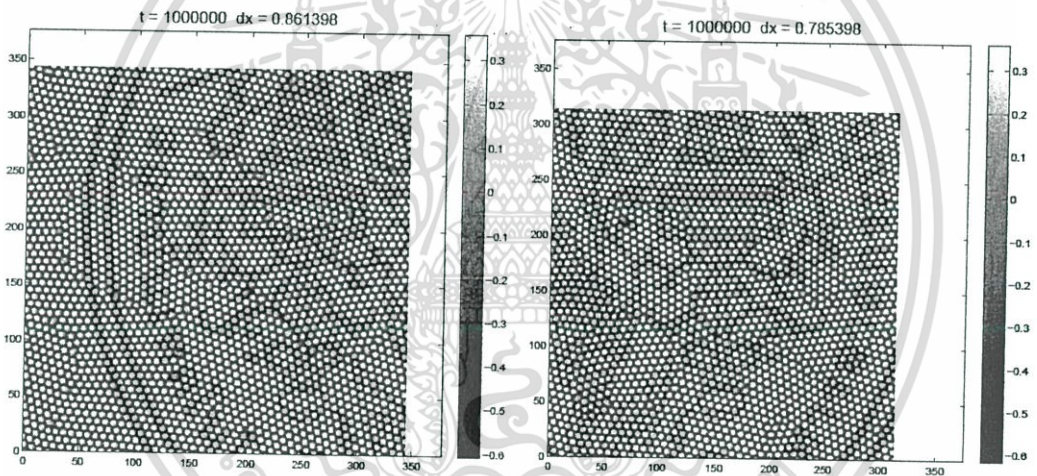
4.2.1 ผลการจำลองการขยายวัสดุ



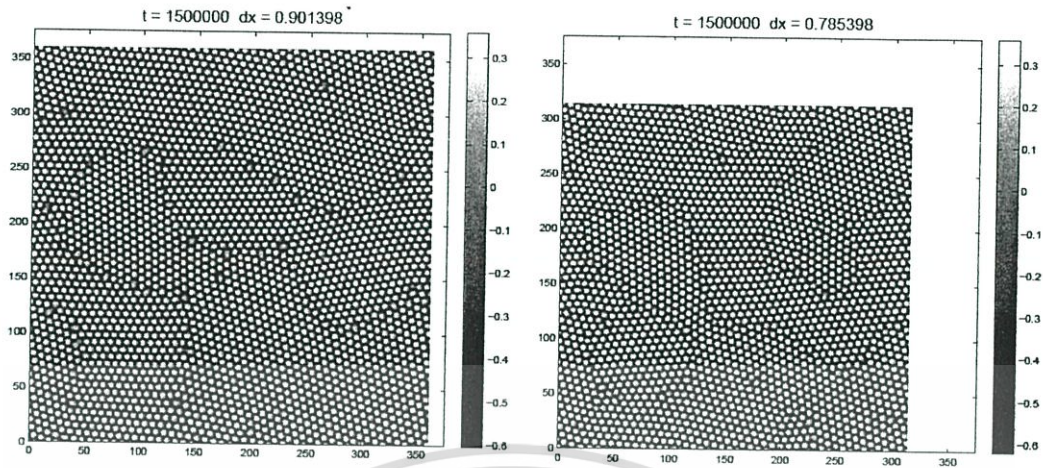
รูปที่ 4.5 การขยาย Triangular Phase ขณะเวลา 50,000



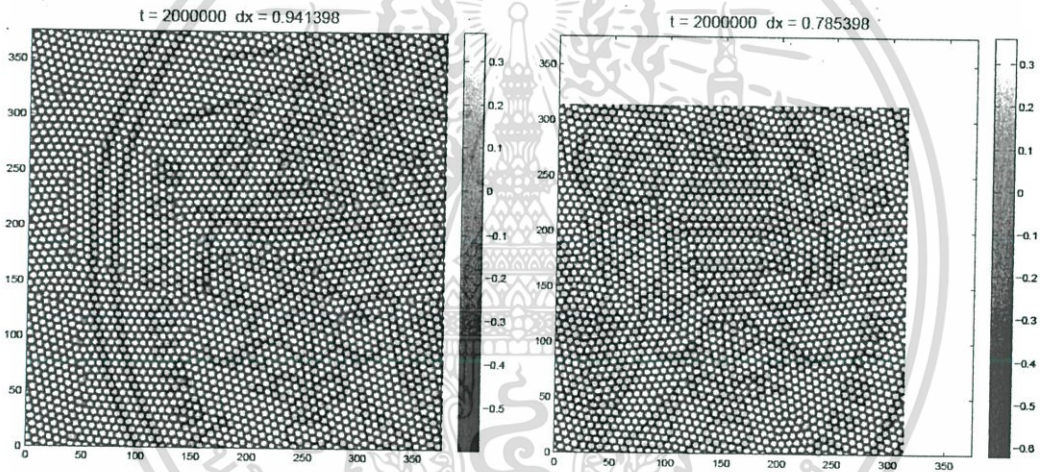
รูปที่ 4.6 การขยาย Triangular Phase ขณะเวลา 500,000



รูปที่ 4.7 การขยาย Triangular Phase ขณะเวลา 1,000,000



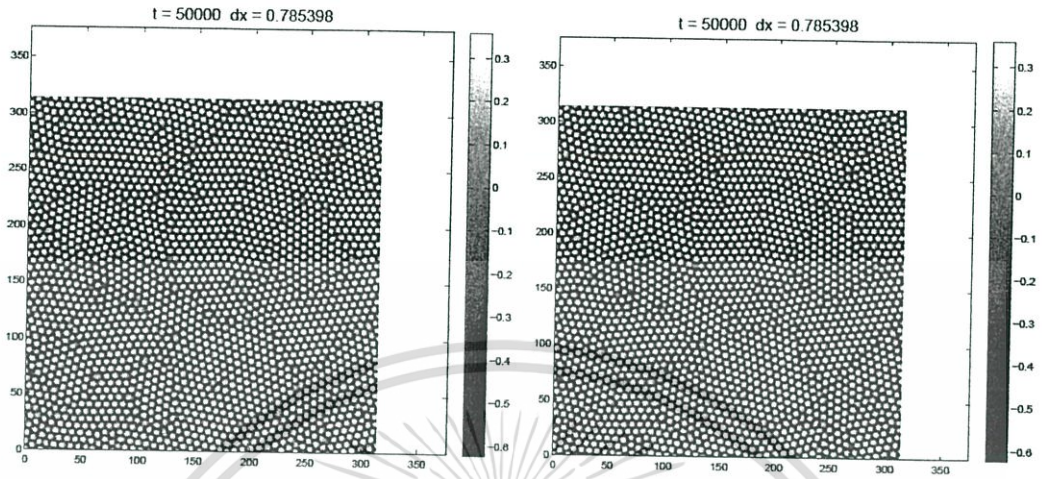
รูปที่ 4.8. การขยาย Triangular Phase ขณะเวลา 1,500,000



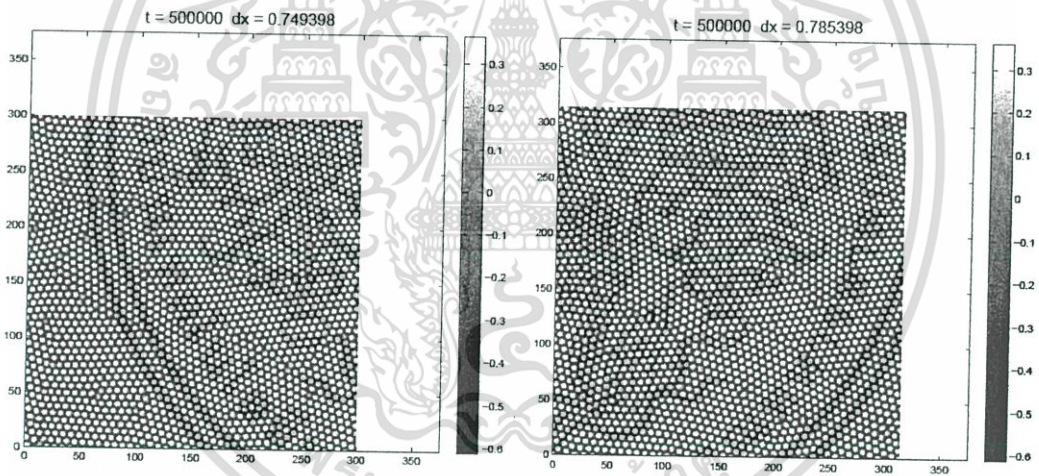
รูปที่ 4.9. การขยาย Triangular Phase ขณะเวลา 2,000,000

จากรูปทั้งหมดที่แสดงถึงการขยายตัวของวัสดุจะเห็นว่าขอบเกรนขยายตัวกว้างขึ้นหมายถึงพื้นที่ที่เพิ่มขึ้นด้วยนั่นหมายถึงอะตอมที่มากขึ้นด้วยเนื่องจากเรากำหนดค่าความหนาแน่นเป็นค่าคงที่ทำให้ระบบนี้เป็นระบบเปิดซึ่งหมายความว่าอะตอมสามารถไหลเข้ามาในระบบได้ตลอดเวลาเพื่อรักษาความหนาแน่นที่เรากำหนดไว้ทำให้ดูเหมือนความน่าจะเป็นที่จะเจออะตอมมากขึ้นนั่นเอง

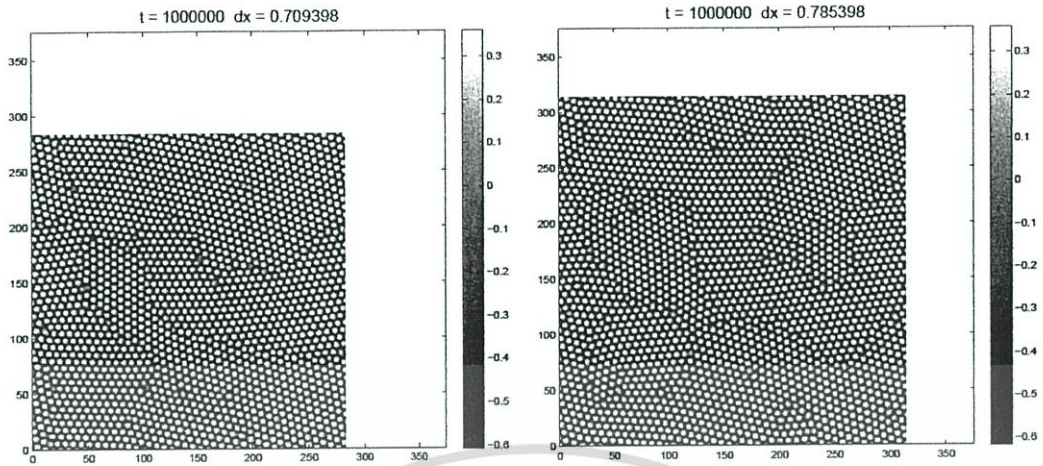
4.2.2 ผลการจำลองการบีบวัสดุ



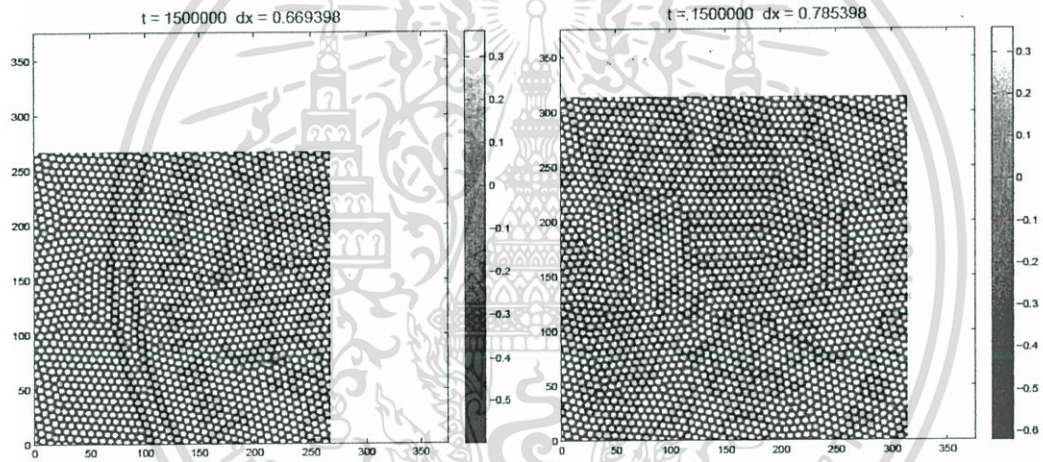
รูปที่ 4.10 การบีบ Triangular Phase ระยะเวลา 50,000



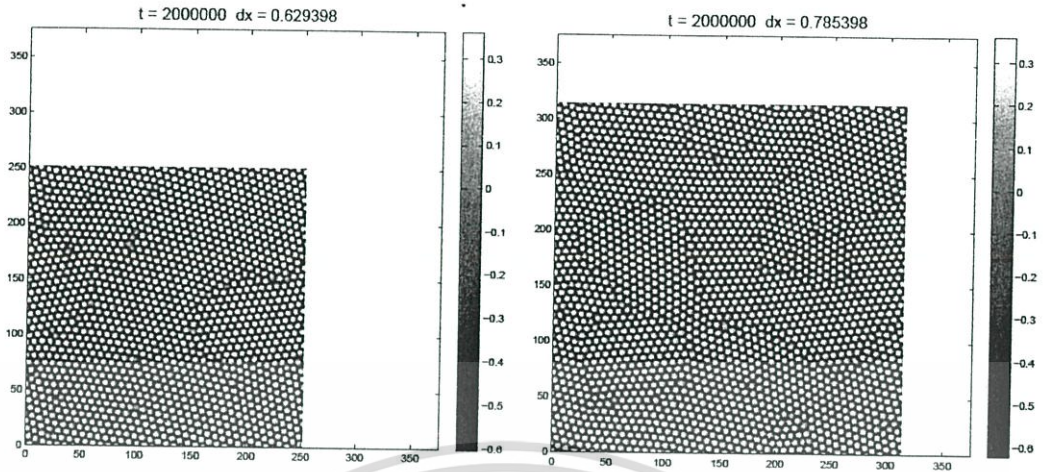
รูปที่ 4.11 การบีบ Triangular Phase ระยะเวลา 500,000



รูปที่ 4.12 การบีบ Triangular Phase ขณะเวลา 1,000,000



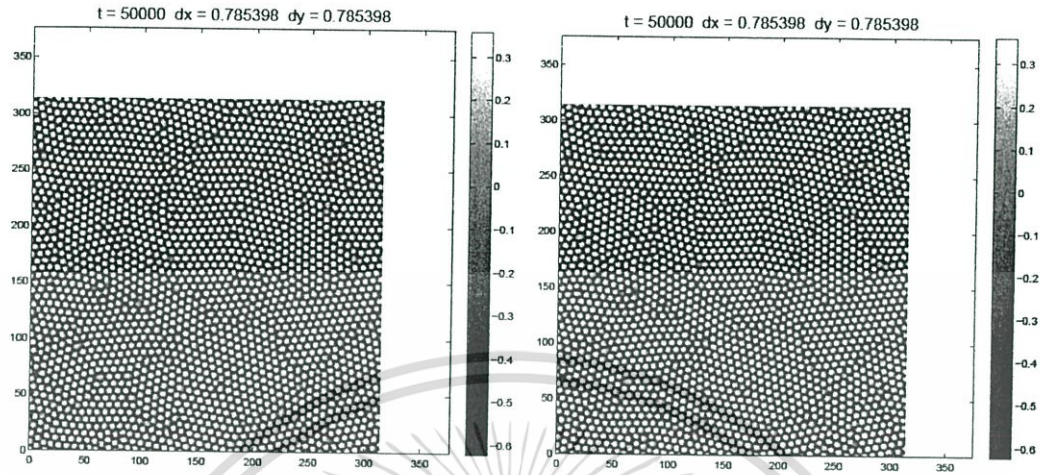
รูปที่ 4.13 การบีบ Triangular Phase ขณะเวลา 1,500,000



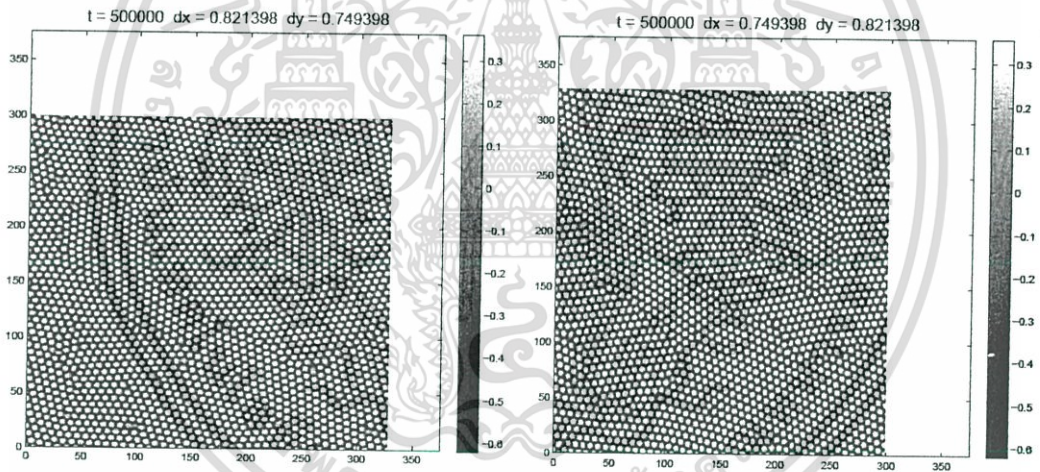
รูปที่ 4.14 การบีบ Triangular Phase ขณะเวลา 2,000,000

จากรูปทั้งหมดที่แสดงถึงการบีบตัวของวัสดุจะเห็นว่าขอบเกรนหดตัวแคบลงหมายถึงพื้นที่ที่ลดลงด้วยนั่นหมายถึงอะตอมที่น้อยลงด้วยเนื่องจากเรากำหนดค่าความหนาแน่นเป็นค่าคงที่ทำให้ระบบนี้เป็นระบบเปิดซึ่งหมายความว่าอะตอมสามารถไหลออกจากระบบได้ตลอดเวลาเพื่อรักษาความหนาแน่นที่เรากำหนดไว้ทำให้ดูเหมือนความหนาจะเป็นที่จะเจอะอะตอมลดลงนั่นเอง

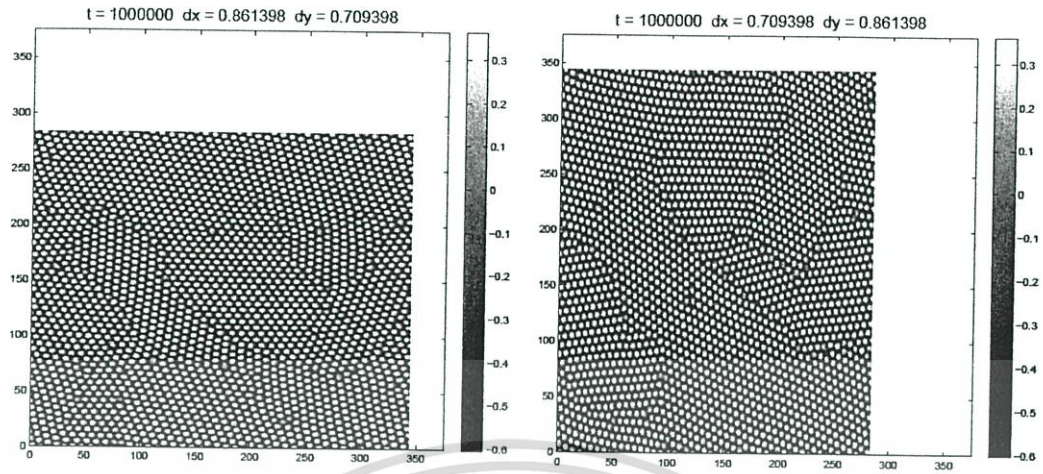
4.2.3 ผลการจำลองการบีบวัสดุในแนวแกนที่ต่างกัน



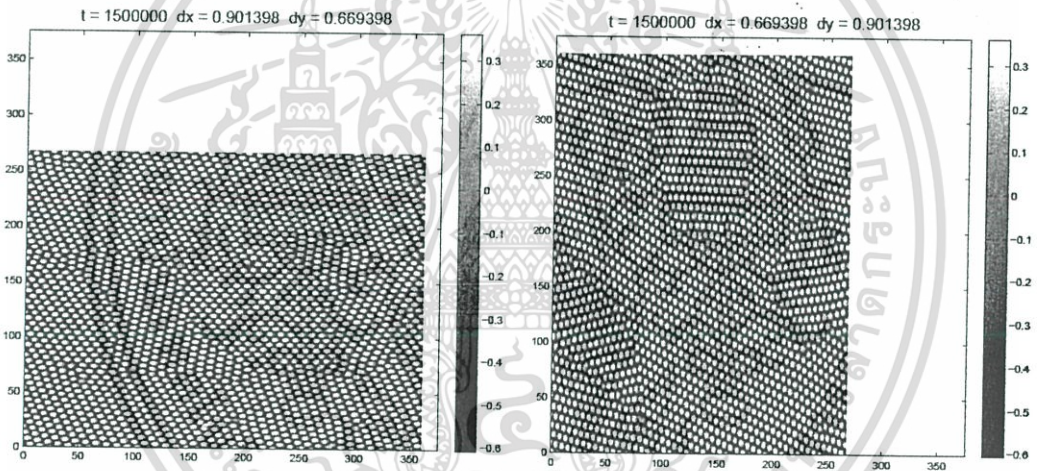
รูปที่ 4.15 การบีบ Triangular Phase ขณะเวลา 50,000



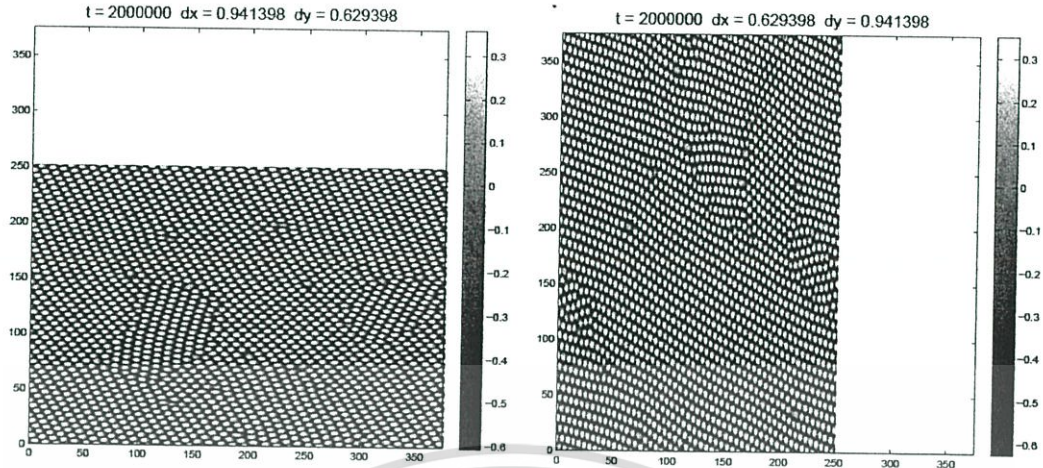
รูปที่ 4.16 การบีบ Triangular Phase ขณะเวลา 500,000



รูปที่ 4.17 การบีบ Triangular Phase ขณะเวลา 1,000,000



รูปที่ 4.18 การบีบ Triangular Phase ขณะเวลา 1,500,000



รูปที่ 4.19 การบีบ Triangular Phase ขณะเวลา 2,000,000

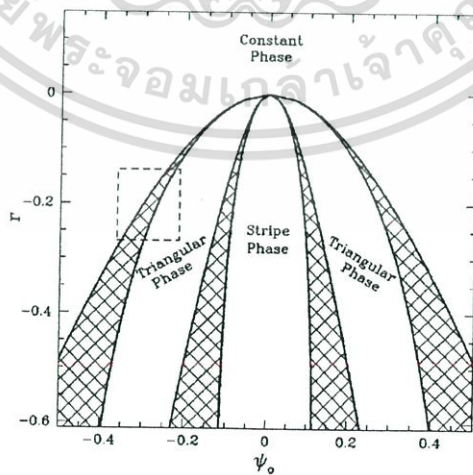
จากรูปทั้งหมดที่แสดงถึงการบีบและการขยายตัวของวัสดุในแกนที่ต่างกันจะเห็นว่าขอบเกรนของทั้งสองรูปเปลี่ยนไปอย่างชัดเจนซึ่งพื้นที่จะลดลงและขยายออกหมายถึงแกนหนึ่งขยายอีกแกนหนึ่งจะลดลงในทิศทางตรงข้ามของทั้งสองรูปนั้นหมายถึงอะตอมที่มีจำนวนเท่าเดิม เนื่องจากเรากำหนดค่าความหนาแน่นเป็นค่าคงที่ทำให้ระบบนี้เป็นระบบเปิดซึ่งหมายความว่าอะตอมสามารถไหลออกและไหลเข้ามาในระบบได้ตลอดเวลาเพื่อรักษาความหนาแน่นที่เรากำหนดไว้

บทที่ 5

สรุปและวิเคราะห์ผลการดำเนินงาน

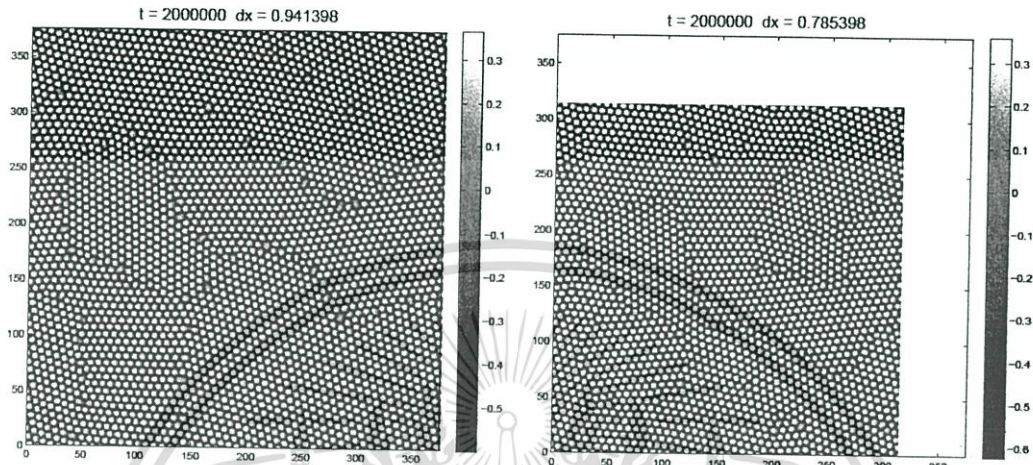
5.1 วิเคราะห์ผลการดำเนินงาน

ในการจำลองการแข่งขันตัวของโลหะที่เวลาต่างๆขณะอุณหภูมิต่างๆจากการสังเกตแบบจำลองการแข่งขันตัวของโลหะพบว่าการแข่งขันตัวของโลหะเกิดขึ้นขณะอุณหภูมิ $-0.1, -0.15, -0.2, -0.25, -0.3, -0.35$ และ -0.4 ในขณะที่อุณหภูมิ -0.05 จะไม่เกิดการการแข่งขันตัวของโลหะเนื่องจากอุณหภูมิที่สูงเกินไปส่งผลให้ไม่เกิดการการแข่งขันตัวของโลหะ เพราะการเกิดความเย็นยิ่งยวด (Undercool) นั้นไม่เพียงพอแต่หากอุณหภูมิมียุ่ต่ำลงมากขึ้นจะส่งผลอัตราการเปลี่ยนแปลงเฟสมีค่ามากขึ้นเพราะการเกิดความเย็นยิ่งยวดที่มากขึ้นจะทำให้หน้าที่เป็นแรงผลักดัน (Driving Force) ของระบบที่ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงเฟสได้มากขึ้นจากการดำเนินงานที่ผ่านมา โดยการใช้แบบจำลอง Phase-Field Crystal ในการจำลองการแข่งขันตัวของโลหะแสดงถึงการเปลี่ยนแปลงจากเฟสของเหลวกลายเป็นเฟสของแข็งพบว่าตัวแปรที่ทำให้การแข่งขันตัวของโลหะมีอัตราที่ไม่เท่ากันได้แก่ อุณหภูมิ ซึ่งมีผลต่อการเกิดความเย็นยิ่งยวด (Undercool) อัตราการเปลี่ยนแปลงเฟสขึ้นอยู่กับแรงผลักดันของระบบเพียงอย่างเดียวซึ่งหากทำให้การเกิดนิวเคลียสและการแพร่เป็นฟังก์ชันของอุณหภูมิ จะทำให้ผลที่ได้เปลี่ยนแปลงไปและเหมือนกับความเป็นจริงมากขึ้นจาก 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

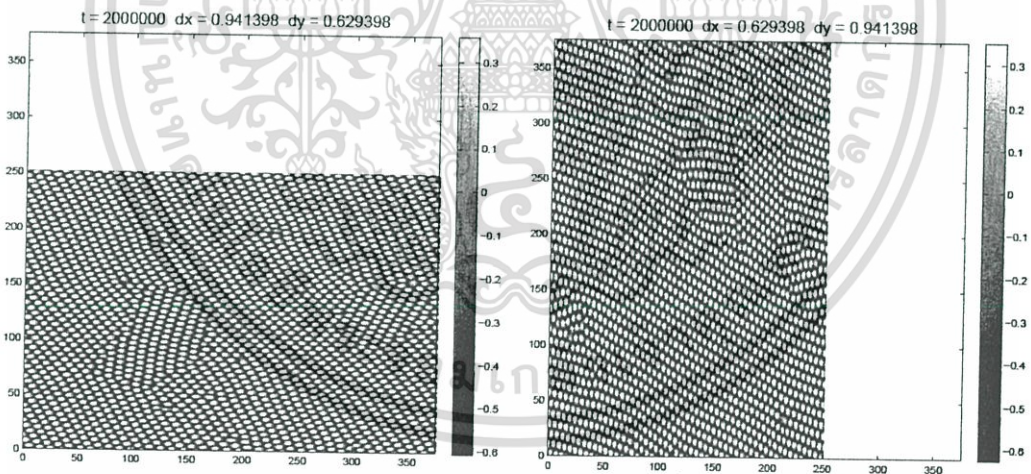


รูปที่ 5.1 Phase diagram

ซึ่งหลังจากการจำลองการแข็งตัวเสร็จเราก็จำลองการเสียรูปต่อโดยการใส่แรงเข้าไปในทิศทางที่แตกต่างกันซึ่งจากผลการทดลองทำให้เห็นได้ว่าเมื่อเราใส่แรงในทิศทางที่ต่างกันทำให้ขอบเกรนของแต่ละการทดลองเสียรูปในทิศทางที่ต่างกันซึ่งเห็นได้จากภาพดังนี้



รูปที่ 5.2 ภาพเทียบการเสียรูปแบบขยายกับไม่มีการเสียรูป



รูปที่ 5.3 เปรียบเทียบการเสียรูปของการใส่แรงในทิศทางที่ต่างกัน

จากภาพเราเห็นได้อย่างชัดเจนว่าเมื่อเราใส่แรงในทิศทางที่ต่างกันทำให้เกิดการเสียรูปที่ต่างกันและขอบเกรนเปลี่ยนไปในทิศทางที่ไม่เหมือนกันซึ่งผลการทดลองทั้งหมดทำในรูปแบบของระบบเปิดคือหมายความว่าอะตอมสามารถไหลออกและไหลเข้ามาในระบบได้ตลอดเวลาเพื่อรักษาความหนาแน่นที่เรากำหนดไว้

5.2 ข้อเสนอแนะและแนวทางในการศึกษาต่อ

1. ทำรูปแบบจากสองมิติเป็นสามมิติเพื่อเห็นรูปแบบของการเสี้ยวรูปที่ชัดเจนยิ่งขึ้น
2. ทำให้รูปแบบของการเสี้ยวรูปเป็นการเสี้ยวรูปในแบบของระบบปิดเพื่อผลที่ต่างออกไป



เอกสารอ้างอิง

- [1] Burden, R L and Faires, J D, 2011. Numerical Analysis., Brooks/Cole Publishing Company.
- [2] Provatas, N. et al., 2007. Using the Phase-Field Crystal Method in the Multi-Scale Modeling of Microstructure Evolution. n.p. : JOM.
- [3] Stewart, James, 2010 Calculus. Single Variable, 7th ed., Brooks/Cole Publishing Company.
- [4] Lovasz, L and Vesztergombi, K., 1999. Discrete Mathematics. Yale University.
- [5] Elder, K. and Grant, M., 2004. Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals. n.p. : The American Physical Society
- [6] Bracewell, R., 1999. The Fourier Transform and Its Applications, 3rd ed. New York: McGraw-Hill,
- [7] จีรพงศ์ กสิวิทย์อำนวย, 2553. กลศาสตร์การแตกหัก. กรุงเทพฯ: สำนักพิมพ์จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
- [8] ณัฐภัทร ทวีศรี, 2556. การใช้แบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัลในการจำลองการแข็งตัวของโลหะ. วิทยานิพนธ์วิศวกรรมศาสตรบัณฑิต สาขาวิศวกรรมอุตสาหการ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
- [9] ภาชิตา สมสงกุล, ศักดิ์สิทธิ์ สุขเกษม, และ ศิวกร โนรี, 2556. การศึกษาการแข็งตัวของขอบเกรนโดยใช้แบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล. วิทยานิพนธ์วิศวกรรมศาสตรบัณฑิต สาขาวิศวกรรมอุตสาหการ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
- [10] <http://www.vcharkarn.com/lesson/1043> สืบค้นวันที่ 3 เมษายน 2558
- [11] <https://www.ndeed.org/EducationResources/CommunityCollege/Materials/Structure/lineardefects.htm> สืบค้นวันที่ 3 พฤษภาคม 2558



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Solving Diffusion Equation using Explicit Time Stepping in One Dimension

```
clear  
clc
```

Input

```
D = 1;  
dx = 1;  
dt = 0.1;  
n = 100;  
totaltime = 100;  
m = totaltime/dt;  
cj=zeros(1,n);
```

Initial Density Profile

```
cj(40:60) = 1;  
cj_start=cj;  
cjm=cj_start;  
bound_left = cj(1);  
bound_right = cj(100);
```

Calculation and Plotting

```
for j = 1:m  
    for i = 2:n-1  
        cjp1(i) = (((D*dt)*(cj(i+1)+cj(i-1)-(2*cj(i)))/(dx*dx))+cj(i));  
    end  
    cjp1(1) = bound_left;  
    cjp1(n) = bound_right;  
    cj = cjp1;  
    figure(1)  
    plot(cj_start,'b');  
    plot(cj,'r--*');  
    title(['time = ', num2str(j*dt)])  
end
```

Published with MATLAB® R2013b

รูปที่ ผ 1 คำสั่งที่ใช้ในโปรแกรม MATLAB ของสมการการแพร่โดยวิธีแบบเอกซ์พลิตไทม์สเตปปิง

(Explicit Time Stepping) ใน 1 มิติ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Solving Diffusion Equation using Implicit Time Stepping in One Dimension

```
clear  
clc
```

Input

```
D = 1;  
dx = 1;  
dt = 0.1;  
n = 100;  
totaltime = 100  
m = totaltime/dt;  
cj=zeros(1,n);  
cjm=zeros(1,n);  
cjmp1=zeros(1,n);
```

Initial Density Profile

```
cj(40:60) = 1;  
cjm=cj_start;  
bound_left = cj(1);  
bound_right = cj(100);
```

Calculation and Plot

```
for j = 1:m
```

Self-Consistent Loop

```
tol = 0.000001;  
continue_loop = true;  
while continue_loop
```

รูปที่ ๒ คำสั่งที่ใช้ในโปรแกรม MATLAB ของสมการการแพร่โดยวิธีแบบอิมพลิตไทม์สเตปปิง

(Implicit Time Stepping) ใน 1 มิติ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Space Loop

```
for i = 2:n-1
    cjmp1(i)=((1/(1+((2*D*dt)/(dx*dx))))*(((D*dt)/(dx*dx))*(cjm(i+1)+cjm(i-1)))+cj(i));
end

value = norm(cjmp1-cjm);
if value <= tol
    continue_loop = false;
end
cjm = cjmp1;
end

cjm(1) = bound_left;
cjm(n) = bound_right;

cj = cjm;

figure(1)
plot(cj_start,'b');
plot(cj,'r--*');
title(['time = ', num2str(j*dt)])
end
```

Published with MATLAB® R2013b

รูปที่ ๓ คำสั่งที่ใช้ในโปรแกรม MATLAB ของสมการการแพร่โดยวิธีแบบอิมพลิตไทม์สเตปป์ง

(Implicit Time Stepping) ใน 1 มิติ (ต่อ)

Solving Diffusion Equation using Fourier Transform in Two Dimensions

```
clear  
clc
```

```
D = 1;  
dx = 1;  
dt = 0.1;  
n = 100;  
m = 1000;  
l = 10;  
c=zeros(n,n);  
xx=zeros(n,n);  
for i = 1:n  
    for j = 1:n  
        xx(i,j) = dx*(i-1);  
    end  
end  
yy=zeros(n,n);  
for i = 1:n  
    for j = 1:n  
        yy(i,j) = dx*(j-1);  
    end  
end
```

Initial Density Profile

```
c(40:60,40:60) = 1;  
cc= fft2(c);  
figure(1)  
mesh(real(cc))
```

รูปที่ ๘ 4 คำสั่งที่ใช้ในโปรแกรม MATLAB ของวิธีฟูเรียร์ทรานฟอร์ม (Fourier Transform) ใน 2 มิติ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Specifying the Fourier Coordinate

```
a=[0:1:n/2-1];
b=[(-n/2):1:-1];
kx=zeros(n,n);
for i = 1:n
    kx(i,:)=(((2*pi)/l)*[a b]);
end
ky=zeros(n,n);
for j = 1:n
    ky(:,j)=(((2*pi)/l)*[a b]);
end
```

Calculation and Plot

```
for i = 1:m
    ccp1 = (cc./(dt.*((kx.*kx)+(ky.*ky))+1));
    cc = ccp1;
    figure(2)
    Y = ifft2(ccp1);
    mesh(Y)
    zlim([0,1])
end
```

Published with MATLAB® R2013b

รูปที่ ผ 5 คำสั่งที่ใช้ในโปรแกรม MATLAB ของวิธีฟูเรียร์ทรานฟอร์ม (Fourier Tranform) ใน 2 มิติ(ต่อ)

Deformation using the Phase Field Crystal

```
clear
clc
close all
```

Input

```
D = 1;
dx_start = pi/4;
dy_start = pi/4;
dt = 0.01;
n = 400;
lx = dx_start*n;
ly = dy_start*n;
r = -0.2;
t_resume = 50000;
t_final = 2000000;
strain_rate_x = +8e-6;
strain_rate_y = +8e-6;
printgraph = 1000;
filename = [ 'out' num2str(t_resume) '.mat' ];
```

Initial Value of Grid Spacings

```
if (t_resume == 1)
    dx_start = pi/4;
    dy_start = pi/4;
else
    load(filename, 'dx', 'dy')
    dx_start = dx;
    dy_start = dy;
    t_resume = t_resume + 1;
end
```

รูปที่ ๘ 6 คำสั่งที่ใช้ในโปรแกรม MATLAB ของวิธีแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล (Phase Field Crystal) ใน 2

มิติ แบบใส่แรงบีบและขยาย (ต่อ)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Specification of Strain

```
total_it = (t_final-t_resume);  
dx_i = strain_rate_x*dt;  
dy_i = strain_rate_y*dt;
```

Axis Limit in the Plot

```
dx_end = dx_start+dx_i*total_it;  
dy_end = dy_start+dy_i*total_it;  
if strain_rate_x > 0  
    x_lim = dx_end*n - dx_end;  
else  
    x_lim = lx-dx_start;  
end  
if strain_rate_y > 0  
    y_lim = dy_end*n - dy_end;  
else  
    y_lim = (ly-dy_start);  
end
```

Initial Density Profile

```
c = zeros(n,n);  
if (t_resume == 1)  
    c = rand(n,n);  
    c = c-(sum(sum(c))/(n*n))-0.2;  
    sum(sum(c))/(n*n);  
else  
    load(filename,'c')  
end
```

รูปที่ ๗ คำสั่งที่ใช้ในโปรแกรม MATLAB ของวิธีแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล (Phase Field Crystal) ใน 2 มิติ แบบใส่แรงบีบและขยาย (ต่อ)

Specifying the Fourier Coordinate

```
a=[0:1:n/2-1];
b=[(-n/2):1:-1];
dx = dx_start;
dy = dy_start;
for tt = t_resume:t_final
    dx = dx+dx_i;
    dy = dy+dy_i;
    lx = dx*n;
    ly = dy*n;
    xx=zeros(n,n);
    yy=zeros(n,n);
    for i = 1:n
        for j = 1:n
            xx(i,j) = dx*(i-1);
            yy(i,j) = dy*(j-1);
        end
    end
    kx=zeros(n,n);
    for i = 1:n
        kx(i,:)=(((2*pi)/lx)*[a b]);
    end
    ky=zeros(n,n);
    for j = 1:n
        ky(:,j)=(((2*pi)/ly)*[a b]);
    end
    k2 = ((kx.*kx)+(ky.*ky));
    c3 = c.^3;
    c3_hat = fft2(c3);
    c_hat_n= fft2(c);
    c_hat_np1 = ((-k2.*c3_hat.*dt)+c_hat_n)./(dt.*(((r+1).*k2)-(2.*(k2.^2))+(k2.^3))+1);
    c = ifft2(c_hat_np1);
    if mod(tt,printgraph) == 0
        filename = [ 'out' num2str(tt) '.mat'];
        save(filename,'c','dx','dy','dx_i')
    end
end
```

Published with MATLAB® R2013b

รูปที่ ๘ คำสั่งที่ใช้ในโปรแกรม MATLAB ของวิธีแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล (Phase Field Crystal) ใน 2 มิติ แบบใส่แรงบีบและขยาย (ต่อ)

Phase Field Crystal in Two Dimensions

```
clear
clc
close all
```

Input

```
D = 1;
dx = pi/4;
dt = 0.01;
n = 400;
m = 2000000;
printgraph = 1000;
t_resume = 1752000;
l = dx*n;
r = -0.2;
filename = [ 'out' num2str(t_resume) '.mat' ];
c = zeros(n,n);
xx=zeros(n,n);
for i = 1:n
    for j = 1:n
        xx(i,j) = dx*(i-1);
    end
end
yy=zeros(n,n);
for i = 1:n
    for j = 1:n
        yy(i,j) = dx*(j-1);
    end
end
```

Initial Density Profile

```
if (t_resume == 1)
c = rand(n,n);
c = c-(sum(sum(c))/(n*n))-0.2;
sum(sum(c))/(n*n);
else
load(filename, 'c')
end
```

รูปที่ ๘ 9 คำสั่งที่ใช้ในโปรแกรม MATLAB ของวิธีแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล (Phase Field Crystal)

ใน 2 มิติ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Specifying the Fourier Coordinate

```
a=[0:1:n/2-1];
b=[(-n/2):1:-1];
kx=zeros(n,n);
for i = 1:n
    kx(i,:)=(((2*pi)/l)*[a b]);
end
ky=zeros(n,n);
for j = 1:n
    ky(:,j)=(((2*pi)/l)*[a b]);
end
k2 = ((kx.*kx)+(ky.*ky));
```

Calculation

```
for i = t_resume:m
    c3 = c.^3;
    c3_hat = fft2(c3);
    c_hat_n= fft2(c);
    c_hat_np1 = ((-k2.*c3_hat.*dt)+c_hat_n)./(dt.*(((r+1).*k2)-
(2.*(k2.^2))+(k2.^3))+1);
    c = ifft2(c_hat_np1);
    if mod(i,printgraph) == 0
        filename = [ 'out' num2str(i) '.mat'];
        save(filename,'c')
    end
end
```

Published with MATLAB R2013b

รูปที่ ๑๐ คำสั่งที่ใช้ในโปรแกรม MATLAB ของวิธีแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล (Phase Field Crystal)
ใน 2 มิติ(ต่อ)



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้