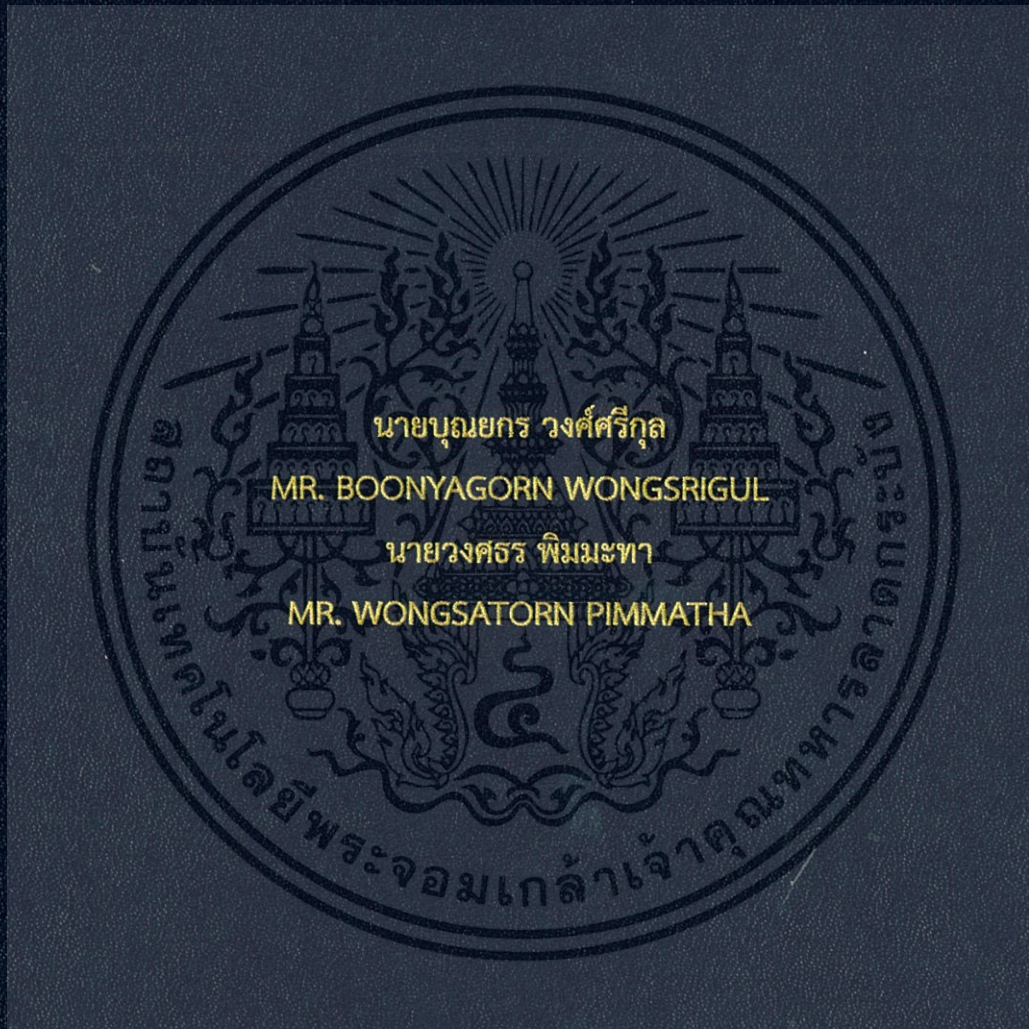


การศึกษาสมบัติไหลหนืดด้วยแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล
STUDY OF VISCOELASTIC PROPERTIES USING PHASE
FIELD CRYSTAL METHOD



ปริญญานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรวิศวกรรมศาสตรบัณฑิต
สาขาวิชาวิศวกรรมอุตสาหการ คณะวิศวกรรมศาสตร์
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
ปีการศึกษา 2559

การศึกษาสมบัติไหลหนืดด้วยแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล
STUDY OF VISCOELASTIC PROPERTIES USING PHASE
FIELD CRYSTAL METHOD



ปริญญานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรวิศวกรรมศาสตรบัณฑิต
สาขาวิชาวิศวกรรมอุตสาหการ คณะวิศวกรรมศาสตร์
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
ปีการศึกษา 2559

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

STUDY OF VISCOELASTIC PROPERTIES USING
PHASE FIELD CRYSTAL METHOD



MR. BOONYAGORN WONGSRIGUL

MR. WONGSATORN PIMMATHA

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 2016

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

คณะวิศวกรรมศาสตร์

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

ใบรับรองปริญญาานิพนธ์

หัวข้อปริญญาานิพนธ์ การศึกษาสมบัติไหลหนืดด้วยแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล
Study of Viscoelastic Properties Using the Phase Field Crystal Method

นักศึกษา นายบุญยกร วงศ์ศรีกุล รหัสประจำตัวนักศึกษา 56010697
นายวงศธร พิมมะทา รหัสประจำตัวนักศึกษา 56011042

หลักสูตร วิศวกรรมศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาวิศวกรรมอุตสาหการ

อาจารย์ผู้ควบคุมปริญญาานิพนธ์



(ดร. นිරันตร์ พิสุทธอานนท์)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Thesis	Study of viscoelastic properties using the Phase Field Crystal method	
Student	Mr. Boonyagorn	Wongsrigul
	Mr. Wongsatorn	Pimmatha
Degree	Bachelor of Engineering in Industrial Engineering King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang	
Academic year	2016	
Thesis Advisor	Dr. Nirand	Pisutha-Arnond

Abstract

The goal of this project is to study the phase field crystal model and to study viscoelastic behaviors from the model. The project is divided into three phases. The first phase is a preliminary study where we simulate the diffusion equation in one-dimensional and two-dimension. The diffusion equations is similar to the equation of the phase field crystal model but with less complexity and therefore is suitable as a 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 involves simulation 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. The last phase is the study of viscoelastic behavior from the PFC model. The viscoelastic behavior is determined by the amount of delayed response in terms of stress as a result from a sudden change in the strain. We observe that there exists such a delay in stress response which indicates that the PFC model is capable of modelling viscoelastic behavior in materials.

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

กิตติกรรมประกาศ

ปริญญาโท วิทยาศาสตรบัณฑิต สาขาเทคโนโลยีสารสนเทศสำเร็จ
ลุล่วงไปได้ด้วยดี คณะผู้จัดทำขอกราบขอบพระคุณบุคคลทุกท่านที่มีส่วนเกี่ยวข้องส่งผลให้ปริญญาโทฉบับนี้
เสร็จสมบูรณ์

ดร. นิรันดร์ พิสุทธอนันท์ อาจารย์ที่ปรึกษาปริญญาโท คณะผู้จัดทำขอกราบขอบพระคุณเป็นอย่างสูง
สำหรับการให้โอกาสในการศึกษาปริญญาโทฉบับนี้ รวมทั้งความรู้คำแนะนำ ความช่วยเหลือ
และความเอาใจใส่ในทุกๆด้านตลอดช่วงเวลาที่ผ่านมา

ขอกราบขอบพระคุณ คุณพ่อ คุณแม่ ครอบครัวอันเป็นที่รัก รวมถึงเพื่อนๆและพี่ๆ สำหรับการให้
การสนับสนุน ทั้งด้านความช่วยเหลือ และกำลังใจ ทำให้ปริญญาโทฉบับนี้สำเร็จลุล่วงไปได้ด้วยดี

ท้ายสุดปริญญาโทจะมีคุณค่าหรือมีคุณประโยชน์ก็ต่อเมื่อมีการศึกษาแล้วนำไปใช้ต่อยอด
ประโยชน์ที่พึงมีจากปริญญาโทฉบับนี้ ขอมอบแก่ผู้มีพระคุณทุกท่าน ทั้งที่กล่าวในนาม และได้กล่าว
นาม ซึ่งมีส่วนร่วมทำให้ปริญญาโทฉบับนี้เสร็จสมบูรณ์

นายบุญยกร วงศ์ศรีกุล

นายวงศ์ธร พิมมะทา

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญ

หน้า

บทคัดย่อภาษาไทย.....	ก
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ.....	ข
กิตติกรรมประกาศ.....	ง
สารบัญ.....	จ
สารบัญตาราง.....	ช
สารบัญรูป.....	ฉ

บทที่ 1 บทนำ

1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา.....	1
1.2 วัตถุประสงค์.....	1
1.3 ขอบเขตของปริญญานิพนธ์.....	1
1.4 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ.....	1

บทที่ 2 ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

2.1 สมการเชิงอนุพันธ์.....	2
2.1.1 สมการเชิงอนุพันธ์สามัญ.....	2
2.1.2 สมการเชิงอนุพันธ์ย่อย.....	3
2.1.3 ผลเฉลยของสมการเชิงอนุพันธ์.....	4
2.2 วิธีการหาผลเฉลยของวิธีสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย.....	6
2.2.1 ผลเฉลยแม่นยำตรง.....	6
2.2.2 ผลเฉลยเชิงคณนา.....	7
2.3 การแพร่.....	13
2.3.1 ปัจจัยที่มีผลต่อการแพร่.....	13
2.3.2 กฎของฟิค.....	14
2.3.3 สมการการแพร่.....	15
2.4 การแปลงฟูเรียร์.....	17

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญ (ต่อ)

	หน้า
2.4.1 การแปลงฟูเรียร์ต่อเนื่อง.....	17
2.4.2 การแปลงฟูเรียร์ไม่ต่อเนื่อง.....	17
2.5 การแก้ไขสมการการแพร่.....	18
2.5.1 การใช้ไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์ในการแก้สมการ.....	18
2.5.2 การใช้ฟูเรียร์สเปกตรัลในการแก้สมการ.....	19
2.6 แบบจำลองเฟสฟิลต์คริสตัล.....	20
2.7 สมบัติยืดหยุ่น.....	21
บทที่ 3 การศึกษาเบื้องต้น	
3.1 วิธีการดำเนินงาน.....	22
3.1.1 ทดลองหาความแตกต่างระหว่างเอกซ์พิจิตไทม์สเตปป์ และอิมพิจิตไทม์สเตปป์.....	23
3.1.2 ทดลองหาความแตกต่างระหว่างวิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์ และฟูเรียร์สเปกตรัล.....	24
3.2 ผลการดำเนินงาน.....	26
3.2.1 ผลที่ได้จากการทดลองที่ 1.....	26
3.2.2 ผลที่ได้จากการทดลองที่ 2.....	27
3.3 สรุปและวิเคราะห์ผลการดำเนินงาน.....	28
3.3.1 สรุปและวิเคราะห์ผลการทดลองที่ 1.....	28
3.3.2 สรุปและวิเคราะห์ผลการทดลองที่ 2.....	28
บทที่ 4 การศึกษาการเสี้ยวรูป	
4.1 วิธีการดำเนินงาน.....	29
4.1.1 การทดลองการจำลองสมการเฟสฟิลต์คริสตัล.....	30
4.1.2 การทดลองการรบกวนระบบด้วยวิธีต่างๆ.....	31
4.2 ผลการดำเนินงาน.....	32
4.2.1 ผลที่ได้จากการจำลองสมการเฟสฟิลต์คริสตัล.....	32

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญ (ต่อ)

	หน้า
4.2.2 ผลที่ได้จากการรบกวนระบบด้วยวิธีต่างๆ	34
4.3 สรุปและวิเคราะห์ผลที่ได้จากการจำลองสมการเฟสฟิลด์คริสตัล	38
4.3.1 สรุปและวิเคราะห์ผลที่ได้จากการจำลองสมการเฟสฟิลด์คริสตัล.....	38
4.3.2 สรุปและวิเคราะห์ผลที่ได้จากการรบกวนระบบด้วยวิธีต่างๆ	39
บทที่ 5 สมบัติการไหลหนืด	
5.1 การทดลองโดยการใส่ความเครียดเข้าไปในระบบเพื่อทดสอบ คุณสมบัติความไหลหนืดของวัสดุในแบบจำลอง	42
5.2 ผลการดำเนินงาน	43
5.3 สรุปและวิเคราะห์ผลการดำเนินงาน	44
บทที่ 6 สรุปและวิเคราะห์ผลการดำเนินงาน	45
เอกสารอ้างอิง	47
ภาคผนวก	ผ1

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญตาราง

	หน้า
ตารางที่ 2.1 ตารางเปรียบเทียบผลเฉลยแม่นยำตรงกับผลเฉลยเชิงคณนา.....	8
ตารางที่ 2.2 ข้อเปรียบเทียบระหว่างวิธีฟูเรียร์สเปกทรัลกับวิธีไฟไนต์ดิฟเฟอร์เรนซ์	12
ตารางที่ 2.3 สรุปการเปลี่ยนแปลงของการแปลงฟูเรียร์	17
ตารางที่ 4.1 แสดงการใส่ค่าความเปลี่ยนแปลงทั้งสองตัวแปร	41



สารบัญรูป

	หน้า
รูปที่ 2.1	แสดงถึงปัญหาค่าเริ่มต้น.....5
รูปที่ 2.2	แสดงถึงปัญหาค่าขอบ5
รูปที่ 2.3	ผลที่เกิดจากผลเฉลยแม่นยำตรงโดยใช้โปรแกรม.....6
รูปที่ 2.4	ผลที่เกิดจากผลเฉลยเชิงคณนาโดยใช้โปรแกรม.....7
รูปที่ 2.5	การประมาณค่าโดยตรงของอนุพันธ์.....9
รูปที่ 2.6	ภาพการคำนวณจากภาพโดยใช้ไฟไนต์อีเลเมนต์11
รูปที่ 2.7	แสดงภาพการแพร่แบบธรรมดา (จากมากไปน้อย)13
รูปที่ 2.8	แสดงอะตอมไหลจากความเข้มข้นมากไปน้อย.....14
รูปที่ 2.9	กราฟแสดงการเกิด Viscoelastic และ Elastic ของวัสดุเมื่อใส่ความเค้น.....21
รูปที่ 2.10	กราฟแสดงการเกิด Viscoelastic และ Elastic ของวัสดุเมื่อใส่ความเครียด.....21
รูปที่ 3.1	ภาพของแบบจำลองการแพร่ของการตั้งค่าเริ่มต้นของระบบ23
รูปที่ 3.2	ภาพของแบบจำลองการแพร่ของการตั้งค่าเริ่มต้นของระบบ25
รูปที่ 3.3	กราฟเปรียบเทียบระหว่างวิธีเอกซ์พิซิทีฟไทม์สเตปป์ิง และอิมพิซิทีฟไทม์สเตปป์ิง27
รูปที่ 3.4	กราฟเปรียบเทียบระหว่างวิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์ และฟูเรียร์สเปคทรัล27
รูปที่ 4.1	แสดงลักษณะของ Stripe Phase จากการจำลองในโปรแกรม Matlab32
รูปที่ 4.2	แสดงลักษณะของ Triangula Phase จากการจำลองในโปรแกรม Matlab33
รูปที่ 4.3	แสดงลักษณะของ Constant Phase จากการจำลองในโปรแกรม Matlab.....33
รูปที่ 4.4	แสดงลักษณะของระบบที่เปลี่ยนแปลงเมื่อทำการใส่ Strain เข้าไปในระบบ ในรูปแบบ Hydrostatic Expansion ที่เวลา 0.1 และเวลาที่ 10034
รูปที่ 4.5	แสดงลักษณะของระบบที่เปลี่ยนแปลงเมื่อทำการใส่ Strain เข้าไปในระบบ ในรูปแบบ Hydrostatic Compression ที่เวลา 0.1 และเวลาที่ 100.....35
รูปที่ 4.6	แสดงลักษณะของระบบที่เปลี่ยนแปลงเมื่อทำการใส่ Strain เข้าไปในระบบ ในรูปแบบ Uniaxial Tensile Deformation ที่เวลา 0.1 และเวลาที่ 100.....36
รูปที่ 4.7	แสดงลักษณะของระบบที่เปลี่ยนแปลงเมื่อทำการใส่ Strain เข้าไปในระบบ ในรูปแบบ Biaxial Deformation ที่เวลา 0.1 และเวลาที่ 100.....37
รูปที่ 4.8	Phase diagram ของเฟสฟิลด์คริสตัลโมเดล.....38

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญรูป(ต่อ)

	หน้า
รูปที่ 4.9	แสดงลักษณะของระบบที่เปลี่ยนแปลงเมื่อทำการใส่ Strain เข้าไปในระบบ ในรูปแบบ Hydrostatic expansion ที่เวลา 0.1 และเวลาที่ 100.....39
รูปที่ 4.10	แสดงลักษณะของระบบที่เปลี่ยนแปลงเมื่อการใส่ Strain เข้าไปในระบบ ในรูปแบบ Hydrostatic compression ที่เวลา 0.1 และเวลาที่ 10040
รูปที่ 4.11	แสดงลักษณะของระบบที่เปลี่ยนแปลงเมื่อการใส่ Strain เข้าไปในระบบ ในรูปแบบ Uniaxial tensile deformation ที่เวลา 0.1 และเวลาที่ 100.....40
รูปที่ 4.12	แสดงลักษณะของระบบที่เปลี่ยนแปลงเมื่อการใส่ Strain เข้าไปในระบบ ในรูปแบบ Biaxial deformation ที่เวลา 0.1 และเวลาที่ 10041
รูปที่ 5.1	แสดงพฤติกรรมของวัสดุที่มีคุณสมบัติ Viscoelasticity และช่วงสีแดงคือช่วงที่ทำการทดลองศึกษา42
รูปที่ 5.2	กราฟระหว่าง Stress และเวลา.....43

บทที่ 1

บทนำ

1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา

ความต้องการของอุตสาหกรรมที่ต้องใช้การควบคุมและออกแบบทางวัสดุที่ทันสมัย และความก้าวหน้าในประสิทธิภาพของคอมพิวเตอร์ในปัจจุบัน ทำให้การศึกษาที่เกี่ยวกับวัสดุในเชิงด้าน การคำนวณสามารถมีความเป็นไปได้มากยิ่งขึ้น

แบบจำลองหนึ่งที่มีศักยภาพคือเฟสฟิลด์คริสตัล เฟสฟิลด์คริสตัลเป็นแบบจำลองที่ผสมผสาน ระหว่างการใช้หลักการของแบบจำลองทางอะตอม และแบบจำลองต่อเนื่องซึ่งจะมีข้อดีคือสามารถจำลอง การทดลองได้ยาวนานกว่าแบบจำลองทางอะตอม รวมทั้งยังสามารถคำนวณความถูกต้องได้แม่นยำกว่า แบบจำลองต่อเนื่อง

1.2 วัตถุประสงค์

1. ทดสอบความสามารถในการสร้างเฟสที่เป็นผลึกของแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล
2. ทดสอบความสามารถในการทำนายการเสถียรของวัสดุในแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล
3. ทดสอบความสามารถในการจำลองคุณสมบัติการไหลหนืดของแบบจำลองเฟสฟิลด์ คริสตัล

1.3 ขอบเขตของปริณญาณิพนธ์

1. การจำลองจะอยู่ในรูปแบบสองมิติ
2. ใช้แบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัลต้นแบบ เพื่อความสะดวกในการคำนวณ
3. แบบจำลองจะไม่ได้ทำการปรับให้สอดคล้องกับวัสดุอันใดอันหนึ่ง ดังนั้นผลที่ได้จะเป็นผลเชิง คุณภาพ อย่างไรก็ตามผลที่ได้ น่าจะสอดคล้องกับโลหะที่มีโครงสร้างผลึก

1.4 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1. เข้าใจความสามารถในการทำนายผลการไหลหนืดของแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล
2. ผลที่ได้จะสามารถนำไปต่อยอดในการศึกษาเชิงปริมาณต่อไป
3. ช่วยพัฒนาแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัลให้สามารถนำไปใช้ในการออกแบบวัสดุได้จริง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 2

ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

ในบทที่ 2 นี้ จะกล่าวถึงสมการเชิงอนุพันธ์ วิธีการหาผลเฉลยของสมการอนุพันธ์ย่อย การแพร่ และการเปลี่ยนสมการการแพร่จากรูปแบบต่อเนื่องให้กลายเป็นแบบไม่ต่อเนื่องด้วยวิธีการทางคณิตศาสตร์ต่างๆ เพื่อให้สามารถนำสมการที่ได้ไปใช้ในส่วนถัดไปได้ และจะพูดถึงลักษณะและคุณสมบัติของเฟสพลาต คริสตัล รวมถึงคุณสมบัติของวัสดุที่เรียกว่าความไหลหนืด

2.1 สมการเชิงอนุพันธ์ (Difference equation)

สมการเชิงอนุพันธ์ คือสมการซึ่งแสดงความสัมพันธ์กันระหว่างฟังก์ชันของตัวแปรอิสระ ตัวแปรตาม และอนุพันธ์ของตัวแปรตามเทียบกับตัวแปรอิสระนั้นๆ ถ้าตัวแปรตามเป็นฟังก์ชันของตัวแปรอิสระเพียงตัวเดียวเท่านั้น อนุพันธ์ที่ปรากฏในสมการก็จะเป็นอนุพันธ์สามัญ เราเรียกว่าสมการเชิงอนุพันธ์สามัญ (Ordinary differential equation) ถ้าตัวแปรตามเป็นฟังก์ชันของตัวแปรอิสระมากกว่าหนึ่งตัว อนุพันธ์ที่ปรากฏในสมการเราจะเรียกอนุพันธ์นั้นว่าเป็นอนุพันธ์ย่อยเราเรียกว่า สมการเชิงอนุพันธ์ย่อย (Partial differential equation)

2.1.1 สมการเชิงอนุพันธ์สามัญ (Ordinary differential equation)

คืออนุพันธ์ประเภทตัวแปรตามเป็นฟังก์ชันของตัวแปรอิสระแค่เพียงตัวแปรเดียวเท่านั้น

บทนิยาม

เราเรียกอันดับของอนุพันธ์ที่สูงที่สุดซึ่งปรากฏอยู่ในสมการเชิงอนุพันธ์ว่า อันดับ (Order) ของสมการเชิงอนุพันธ์และเราเรียกเลขชี้กำลังของอนุพันธ์อันดับที่สูงที่สุดซึ่งปรากฏอยู่ในสมการเชิงอนุพันธ์ เมื่อจัดรูปแบบของสมการให้เลขชี้กำลังเป็นจำนวนเต็มบวกว่า ระดับชั้น (Degree)

ตัวอย่างสมการเชิงอนุพันธ์สามัญ (ODE) ดังสมการที่ 2.1 และ 2.2

$$\frac{dy}{dx} + x^2y^2 = \sin(x) \quad (2.1)$$

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 = y^2 \quad (2.2)$$

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.1.2 สมการเชิงอนุพันธ์ย่อย (Partial difference eqation)

คืออนุพันธ์ประเภทที่ตัวแปรตามเป็นฟังก์ชันของตัวแปรอิสระมากกว่าหนึ่งตัว

บทนิยาม

เราเรียกอันดับของอนุพันธ์ที่สูงที่สุดซึ่งปรากฏอยู่ในสมการเชิงอนุพันธ์ว่า อันดับ (Order) ของสมการเชิงอนุพันธ์และเราเรียกเลขชี้กำลังของอนุพันธ์อันดับที่สูงที่สุดซึ่งปรากฏอยู่ในสมการเชิงอนุพันธ์ เมื่อจัดรูปแบบของสมการให้เลขชี้กำลังเป็นจำนวนเต็มบวกว่า ระดับชั้น (Degree)

ตัวอย่างบทนิยามเชิงอนุพันธ์ ดังสมการที่ 2.3 และ 2.4

$$x^3 \frac{d^3 y}{dx^3} - \sin x \frac{d^2 y}{dx^2} + x \left(\frac{dy}{dx} \right)^4 = \frac{1}{x^2 + 1} \quad (2.3)$$

อันดับ 3 ระดับชั้น 1

$$x^2 \frac{d^2 y}{dx^2} + x \left(\frac{dy}{dx} \right)^{\frac{1}{3}} = x^3 y + \cos x \quad (2.4)$$

อันดับ 2 ระดับชั้น 3

ตัวอย่างสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย (PDE) ดังสมการที่ 2.5 และ 2.6

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 2u + x^3 - xy \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 2 \frac{\partial u}{\partial t} - u^2 \quad (2.6)$$

สมการเชิงอนุพันธ์ จะสามารถเป็น สมการเชิงเส้น (Linear equation) ได้ถ้ามีลักษณะดังนี้

1. ตัวแปรตามและอนุพันธ์ของตัวแปรตามมีเลขชี้กำลังเป็น 1
2. ไม่มีพจน์ในรูปผลคูณของตัวแปรตาม และอนุพันธ์ของตัวแปรตามปรากฏในสมการ
3. ไม่มีพจน์ในรูปฟังก์ชันของตัวแปรตาม หรืออนุพันธ์ของตัวแปรตามปรากฏในสมการ

2.1.3 ผลเฉลยของสมการเชิงอนุพันธ์

ผลเฉลยของสมการเชิงอนุพันธ์จะแบ่งได้เป็นสองแบบ

1. ถ้าเราสามารถแยกฟังก์ชัน $y(x)$ ออกจากตัวแปร x ได้ คิดแบบ y_{i+1} ไม่ขึ้นกับการหาค่า $F(x_{i+1}, y_{i+1})$ เช่น สามารถเขียนผลเฉลยในรูป $y(x) = x^2 + \sin(x)$ เรียก ผลเฉลยแบบชัดแจ้ง (Explicit)

2. ถ้าเราไม่สามารถที่จะแยกฟังก์ชัน $y(x)$ ออกจากตัวแปร x ได้ คิดแบบขึ้นกับ $F(x_{i+1}, y_{i+1})$ เช่น $\sin(yx) = e^{x^2y} + \ln(x)$ เรียก ผลเฉลยโดยปริยาย (Implicit)

2.1.3.1 ปัญหาค่าเริ่มต้นและปัญหาค่าขอบเขต

สำหรับปัญหาทางกายภาพเงื่อนไขที่ถูกกำหนดขึ้นเพื่อให้ได้ค่าของสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยที่มีผลเฉลยเฉพาะหรือผลเฉลยเดียว (Unique solution) ซึ่งส่วนใหญ่จะเป็นปัญหาค่าขอบ (Boundary value problem) และปัญหาค่าเริ่มต้น (Initial value problem) เงื่อนไขนั้นเกิดจากสถานะทางกายภาพของปัญหาที่ทำการหาค่า ถ้าจำนวนของเงื่อนไขมีเพียงพอในอันดับที่กำหนดไว้ จะทำให้ได้ค่าผลเฉลยเฉพาะหรือผลเฉลยเดียว (Unique solution) ซึ่งปัญหานี้จะรู้จักในชื่อ Well-posed (ไม่มีรูปแบบคณิตศาสตร์)

1. ปัญหาค่าเริ่มต้น (Initial value problem)

คือปัญหาที่ประกอบด้วยสมการเชิงอนุพันธ์สามัญอันดับ n $F(x, y, y', \dots, y^{(n)})$

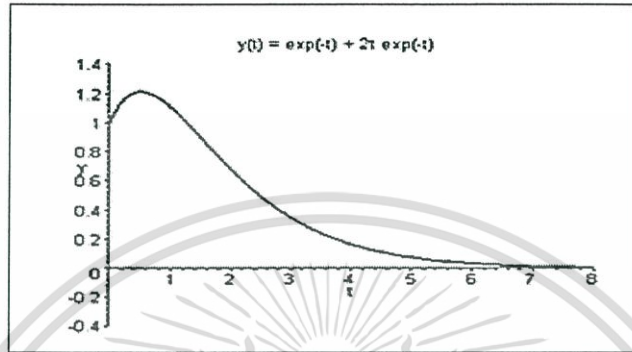
พร้อมด้วยเงื่อนไขเริ่มต้น (Initial conditions) n เงื่อนไข ที่จุด x_0 คือ

$$y(x_0) = d_0, y'(x_0) = d_1, \dots, y^{(n-1)}(x_0) = d_{n-1}$$
 เมื่อ d_0, d_1, \dots, d_{n-1} เป็นค่าคงที่ และเราสนใจที่จะหาผลเฉลย $y(x)$ เมื่อ $x \geq x_0$

ตัวอย่างสมการ

สมการปัญหาค่าเริ่มต้น (IVP)

การหาผลเฉลยของ สมการเชิงอนุพันธ์ $\frac{d^2y}{dx^2} + y = 0$ และเงื่อนไข
 $y(1) = 3$ และ $y'(1) = -4$



รูปที่ 2.1 แสดงถึงปัญหาค่าเริ่มต้น

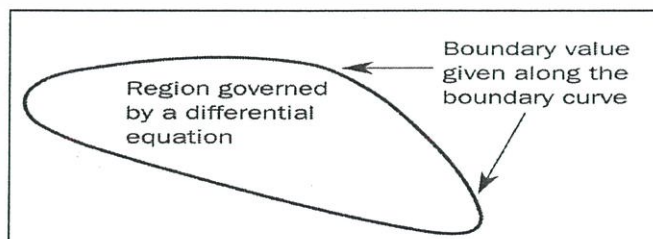
2.ปัญหาค่าขอบ (Boundary value problem)

คือปัญหาที่ประกอบด้วยสมการเชิงอนุพันธ์สามัญอันดับ n $F(x, y, y', \dots, y^{(n)}) = 0$ พร้อมด้วยเงื่อนไขขอบ (Boundary conditions) ที่กำหนดค่าของ y หรือค่าอนุพันธ์ของ y ณ จุดของตัวแปรอิสระ x มากกว่า 1 จุด

ตัวอย่างสมการ

สมการปัญหาค่าขอบ (BVP)

การหาผลเฉลยของ สมการเชิงอนุพันธ์ $\frac{d^2y}{dx^2} + y = 0$ และเงื่อนไข
 $y(0) = 1$ และ $y\left(\frac{\pi}{2}\right) = 5$



รูปที่ 2.2 แสดงถึงปัญหาค่าขอบ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

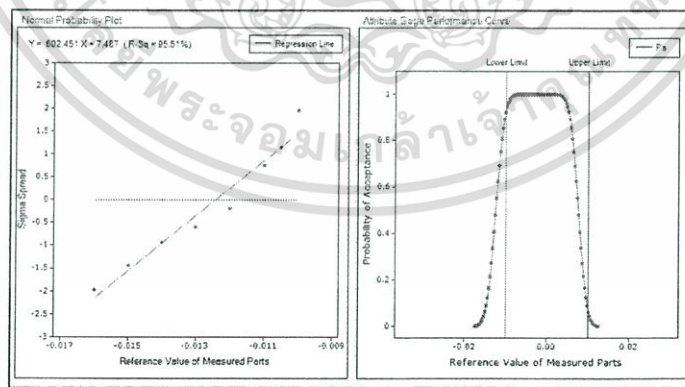
2.2 วิธีการหาผลเฉลยของวิธีสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย (Partial differential equation)

สามารถหาผลเฉลยได้ทั้งสองวิธี ผลเฉลยเชิงวิเคราะห์ (Analytic) และผลเฉลยเชิงตัวเลข (Numerical) เนื่องจากสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย นั้นมีความซับซ้อนในการใช้เทคนิคหาผลเฉลยเชิงวิเคราะห์ เช่นวิธีการแยกตัวแปร และการอินทิเกรต จะสามารถนำมาใช้ได้กับสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยอย่างง่ายเท่านั้น โดยเราจะมีวิธีการแก้ปัญหาสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย (PDE) 2 วิธีหลักๆคือ

2.2.1 ผลเฉลยแม่นยำ (Analytic method)

คือกระบวนการในการแก้ไขปัญหาที่เกี่ยวข้องกับวิทยาศาสตร์และการใช้กระบวนการที่เคยกระทำมาแล้วในการแก้ไขปัญหา การหาผลเฉลยลักษณะนี้มีข้อจำกัดมากมายและอาจจะไม่สามารถหาได้ในกรณีที่ฟังก์ชัน และ โดเมนมีความซับซ้อน โดยจะสามารถแบ่งวิธีการหาค่าได้เป็น 9 ขั้นตอนหลักๆดังนี้

1. กำหนดหัวข้อปัญหา
2. กำหนดวิธีการแก้ปัญหาที่เหมาะสม
3. มีการสร้างสมมติฐานในการทำกระบวนการ
4. ออกแบบการทดลองเพื่อทดสอบสมมติฐาน
5. ทำการทดลอง
6. ยอมรับ, ปฏิเสธ หรือแก้ไขสมมติฐาน
7. ทำซ้ำในข้อที่ 3,4,5 และ6 จนกว่าสมมติฐานจะได้รับการยอมรับ
8. ดำเนินการหาวิธีการแก้ไข
9. ทำการพัฒนากระบวนการให้ดียิ่งขึ้นอย่างต่อเนื่อง



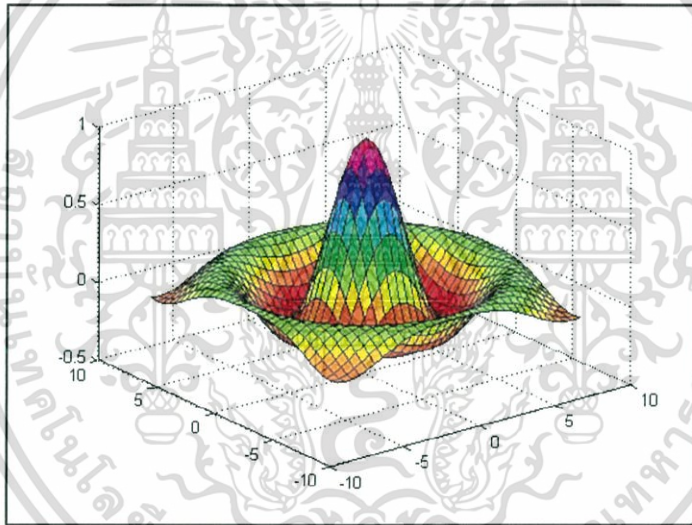
รูปที่ 2.3 ผลที่เกิดจากผลเฉลยแม่นยำโดยใช้โปรแกรม

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.2.2 ผลเฉลยเชิงคณนา (Numerical method)

คือกระบวนการแก้ไขปัญหาโดยใช้ตัวเลขในการประมาณค่าและนำไปเพื่อคำนวณผลลัพธ์โดยการเขียนจากโปรแกรมคอมพิวเตอร์ โดยสามารถหาค่าได้ไม่ว่าจะเป็น ฟังก์ชัน หรือโดเมนที่มีความซับซ้อน ถึงแม้จะเป็นเพียงการประมาณค่า แต่คอมพิวเตอร์ในปัจจุบันนั้นสามารถทำการประมาณค่าได้อย่างมีความแม่นยำสูง โดยจะสามารถแบ่งวิธีการแก้ปัญหาได้เป็น 4 ขั้นตอนหลักๆดังนี้

1. ทำการเปลี่ยนค่าของตัวแปรจากตัวแปรแบบต่อเนื่อง (Continuous value) ให้กลายเป็นตัวแปรแบบไม่ต่อเนื่อง (Discrete value)
2. ทำการเปลี่ยนกระบวนการแบบต่อเนื่อง (Differential operator) ให้กลายเป็นกระบวนการแบบไม่ต่อเนื่อง (Discrete operator)
3. เลือกกระบวนการระหว่าง Explicit time stepping หรือ Implicit time stepping
4. ทำการแทนค่าและค้นหาค่าที่ต้องการโดยการจัดรูปแบบสมการให้เหมาะสม



รูปที่ 2.4 ผลที่เกิดจากผลเฉลยเชิงคณนาโดยใช้โปรแกรม

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ผลเฉลยแม่นยำ (Analytic method)	ผลเฉลยเชิงคณนา (Numerical method)
ผลเฉลยจะมีความต่อเนื่อง เช่นผลเฉลยที่ค่าใดๆ ของตัวแปรอิสระจะสามารถหาค่าได้	ผลเฉลยจะหาได้เพียงที่ Grid point เท่านั้น ผลเฉลยที่อยู่ระหว่าง Grid point สามารถหาได้จากการประมาณค่า
ได้ผลเฉลยที่แม่นยำ	ผลเฉลยที่ได้เป็นค่าประมาณ ซึ่งค่า Error เชิงตัวเลขต้องควบคุมให้อยู่ในค่าที่เหมาะสม
สามารถมองปัญหาทางกายภาพได้ง่าย เช่น ความถี่และรูปร่างของการสั่น	จะมองเห็นปัญหาทางกายภาพได้ยากกว่าแบบผลเฉลยแม่นยำ (Analytic)
ไม่สามารถนำมาใช้กับรูปแบบปัญหาที่เกิดขึ้นในปัจจุบัน ที่มีความซับซ้อนมากขึ้นได้	สามารถใช้ได้กับปัญหาที่ยุ่ยาก เนื่องจากสามารถใช้เทคโนโลยีจากคอมพิวเตอร์มาช่วย คำนวณหาผลเฉลย

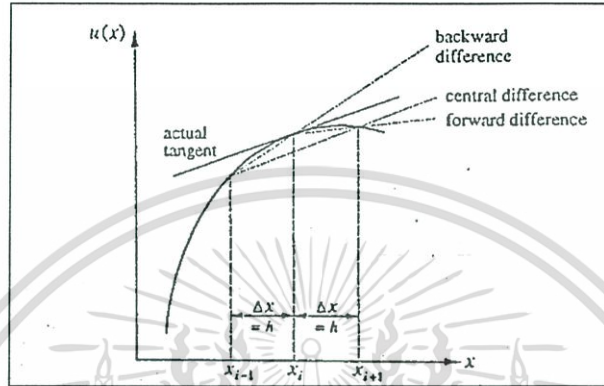
ตารางที่ 2.1 ตารางเปรียบเทียบผลเฉลยแม่นยำกับผลเฉลยเชิงคณนา



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.2.2.1 Finite difference

วิธีของ Finite difference เป็นวิธีแทนค่าของอนุพันธ์โดยการประมาณค่าโดยตรง ยกตัวอย่างเช่น ในการหาอนุพันธ์ย่อย ค่าเท่ากับ x คือการแปรผันของตัวแปรตาม ที่เทียบกับตัวแปรอิสระ x เท่านั้นที่เราจะนำมาพิจารณาและตัวแปรตัวอื่นๆทั้งหมดในอนุพันธ์จะกำหนดให้เป็นมีค่าคงที่



รูปที่ 2.5 การประมาณค่าโดยตรงของอนุพันธ์

พิจารณาฟังก์ชัน u ซึ่งจะขึ้นอยู่กับค่า x เพียงอย่างเดียว ดังที่แสดงในรูป 2.1 และ Finite difference แทนอนุพันธ์รวม (Total derivative) ของตัวแปร u จะได้ค่า Valid ของอนุพันธ์เราสามารถที่จะพิจารณาตัวอนุพันธ์รวมอันดับที่ 1 ณ จุด $x = x_i$ ซึ่งจะเป็นค่าความชันของเส้นโค้ง ณ จุด x_i ดังในรูป 2.1 โดยเราต้องการหาค่าของอนุพันธ์ที่ช่วง Forward difference และ Central difference ดังสมการที่ 2.6 และ 2.7

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{h} \quad (2.7)$$

(Two-point forward difference)

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_i = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} \quad (2.8)$$

(Three-point central difference)

เมื่อเราหาค่าทั้งสองนี้ได้เราจะสามารถหาค่า Central difference ได้ดังสมการที่ 2.9

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_i &= \frac{1}{\Delta x} \left\{ \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\Delta u}{\Delta x}\right)_{i+1} + \left(\frac{\Delta u}{\Delta x}\right)_i \right] - \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\Delta u}{\Delta x}\right)_i + \left(\frac{\Delta u}{\Delta x}\right)_{i+1} \right] \right\} \\ &= \frac{1}{\Delta x} \left[\left(\frac{\Delta u}{\Delta x}\right)_{i+\frac{1}{2}} + \left(\frac{\Delta u}{\Delta x}\right)_{i-\frac{1}{2}} \right] \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{h} \left[\frac{u_{i+1} + u_i}{h} - \frac{u_i + u_{i-1}}{h} \right]$$

$$= \frac{u_i + 2u_{i-1} + u_{i-2}}{h}$$

(2.9)

(Central difference)

ข้อดีของ Finite difference

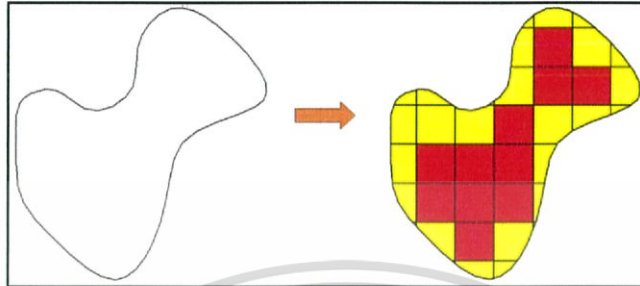
- ง่ายต่อการใช้งาน
- ใช้ในการแก้สมการ Elliptic, Parabolic, Hyperbolic
- เป็นวิธีการที่นิยมใช้ในการแก้ปัญหาแบบง่าย ๆ

ข้อเสียของ Finite difference

- ลำบากในการแก้ปัญหาที่มีความซับซ้อน
- ลำบากในการใช้หาค่าขอบ (Boundary conditions)

2.2.2.2 Finite element method

คือเทคนิคการหาคำตอบเชิงตัวเลข โดยจะทำการแบ่งชิ้นงานขนาดใหญ่ออกเป็นชิ้นงานเล็กๆ ที่มีรูปทรงเป็นเรขาคณิต (พวกสามเหลี่ยม สี่เหลี่ยม วงกลม ฯลฯ) ยกตัวอย่างเช่นภาพด้านล่าง



รูปที่ 2.6 ภาพการคำนวณจากภาพโดยใช้ไฟไนต์อีเลเมนต์

ถ้าเราต้องการหาพื้นที่ของรูปทรงใดๆ วิธีการที่ง่ายที่สุดคือการแบ่งชิ้นงานให้เป็นรูปสี่เหลี่ยมเล็กๆ เพื่อให้เราสามารถใช้สูตรในการหาพื้นที่ได้ แต่จากรูปสไลด์ที่ผ่านมาจะเห็นว่าสี่เหลี่ยมสีแดงคือสี่เหลี่ยมที่เต็มรูป ส่วนสี่เหลี่ยมคือสี่เหลี่ยมที่ไม่สมบูรณ์ ดังนั้นถ้าเราคำนวณพื้นที่สี่เหลี่ยมแล้วเอามารวมกันทั้งหมด ผลลัพธ์ที่ได้อาจจะมีความคลาดเคลื่อนจากของจริงไปบ้าง วิธีแก้ปัญหานี้ทำให้ขนาดของสี่เหลี่ยม แต่ละก้อนเล็กลง

สรุปคือวิธีการ Finite element คือการเปลี่ยนชิ้นงานรูปร่างใดๆ ให้กลายเป็นรูปทรงเรขาคณิต เพื่อให้เราสามารถใส่สูตรคำนวณที่มีอยู่ได้ ในการทำ Simulation เราเรียกการแบ่งชิ้นงานเป็นชิ้นเล็กๆว่า การแบ่ง Mesh

ข้อดีของ Finite element method

- ง่ายต่อการแก้ปัญหาแบบซับซ้อน
- ใช้ในวิชา mechanical structure , heat transfer , และอื่นๆ

ข้อเสียของ Finite element method

- ต้องมีความรู้ทางด้าน mathematical มากพอที่จะใช้วิธีการนี้ในการผลเฉลย

2.2.2.3 Fourier spectral method

การประมาณคำตอบของสมการอนุพันธ์เชิงซ้อนโดยการแก้คำตอบให้อยู่ในรูปแบบการรวมกันเป็นการประมาณคำตอบจากสมการอนุพันธ์เชิงซ้อนโดยการแก้คำตอบให้อยู่ในรูปแบบการรวมกันของเบซิส (Basis) การนำวิธี Spectral มาใช้งานกับวิธี Implicit time stepping ทำให้การแก้สมการ $Ax = b$ สามารถทำได้ง่ายจนไม่จำเป็นต้องใช้วิธีจาคอบีอีก

ข้อดีของ Fourier spectral method

- ง่ายต่อการใช้แก้ปัญหาแบบปกติ
- ใช้ในการแก้สมการ Linear elliptic ,Parabolic
- เป็นวิธีการที่นิยมใช้ในการแก้ปัญหา Implicit ได้ง่าย

ข้อเสียของ Fourier spectral method

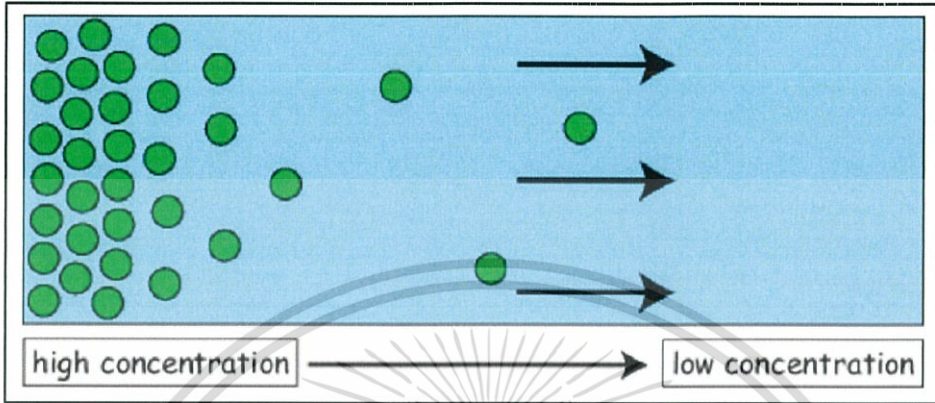
- ลำบากในการใช้งาน

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

ตารางที่ 2.2 ข้อเปรียบเทียบระหว่างวิธีฟูเรียร์สเปกตรัลและวิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์

2.3 การแพร่ (Diffusion)

คือการเคลื่อนที่ของอนุภาคจากบริเวณที่มีความหนาแน่นสูงไปยังบริเวณที่มีความหนาแน่นต่ำ โดยอาศัยพลังงานจลน์ของตัวสารเอง



รูปที่ 2.7 แสดงการแพร่แบบธรรมดา (จากมากไปน้อย)

2.3.1 ปัจจัยที่มีผลต่อการแพร่

1. สถานะของสาร โดยแก๊สมีพลังงานจลน์สูงสุดจึงมีอัตราการแพร่สูงสุด
2. สถานะของตัวกลางที่สารจะแพร่ผ่าน โดยตัวกลางที่เป็นแก๊สจะมีแรงต้านน้อยที่สุดจึงทำให้มีอัตราการแพร่สูงที่สุด
3. ขนาดของอนุภาคสาร โดยอนุภาคยิ่งเล็กยิ่งมีอัตราการแพร่สูง
4. ระยะทางที่สารจะแพร่ในหนึ่งหน่วยเวลา
5. อุณหภูมิโดยจะมีผลต่อการเพิ่มพลังงานจลน์ให้กับสารทำให้มีอัตราการแพร่เพิ่มสูงขึ้น
6. ความดันเมื่อความดันสูงจะขึ้นเพิ่มความหนาแน่นให้กับสาร ส่งผลให้มีอัตราการแพร่สูงขึ้น
7. ความแตกต่างของความเข้มข้นสารระหว่าง 2 บริเวณ

2.3.2 กฎของฟิค (Fick laws)

สามารถเขียนความสัมพันธ์เชิงคณิตศาสตร์ระหว่าง สัมประสิทธิ์การแพร่ (Concentration gradient) กับ Diffusion flux ได้ดังนี้

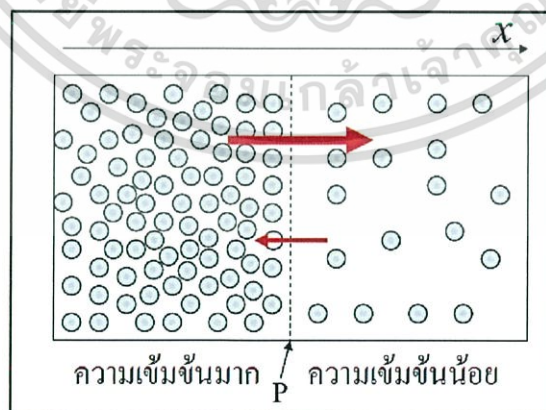
$$J = -D \frac{dC}{dx} \quad (2.10)$$

J = Diffusion flux
 D = Diffusion coefficient
 $\frac{dC}{dx}$ = Concentration gradient

โดยเครื่องหมายสมการมีค่าเป็นลบ แสดงว่าการแพร่นั้นอยู่ในทิศทางที่ความเข้มข้นมีค่าสูงไปความเข้มข้นที่มีค่าต่ำ

การใช้กฎของ Fick

อะตอมแพร่จากตำแหน่ง x_1 ไปยัง x_2 มีสมมติฐานว่าความเข้มข้นของอะตอมที่ตำแหน่ง x_1 และ x_2 เท่ากับ C_1 และ C_2 ตามลำดับ โดยที่ค่าของ $C_1 > C_2$ ความเข้มข้น ณ ตำแหน่งนั้นไม่มีการเปลี่ยนแปลงจะไม่มีเกิดการเกิดปฏิกิริยาระหว่างอะตอมตัวถูกละลายและตัวทำละลายอัตราการถ่ายเทอะตอม จากตำแหน่ง x_1 ไปยัง x_2 จะเป็นไปตามกฎของฟิค



รูปที่ 2.8 แสดงอะตอมไหลจากความเข้มข้นมากไปน้อย

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.3.3 สมการการแพร่ (Diffusion Equation)

นอกเหนือจากชนิดหรือแบบการแพร่และอุณหภูมิแล้วยังมีสิ่งอื่นที่มีผลต่อการกำหนดอัตราการแพร่ของสาร นั้นแบ่งได้เป็น

1. คุณสมบัติโดยเฉพาะทางฟิสิกส์ของสารเจือ เช่นขนาดของอะตอม เป็นต้น
2. คุณสมบัติของสภาพทั่วไปของแลททิซ
3. การเปลี่ยนแปลงการกระจายของสารเจือ
4. คุณสมบัติทั่วไปของสารกึ่งตัวนำนั้น ๆ

สำหรับการแก้สมการของปริปัญญานี้จะเน้นไปที่การใช้สมการการแพร่ในการช่วยในการแก้สมการเป็นหลัก สมการการแพร่ที่เป็นสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยสามารถเขียนได้เป็น สมการที่อธิบายการเปลี่ยนแปลงของความหนาแน่นของวัสดุต่างๆ ในระหว่างการเกิดการแพร่ค่า $C(x, t)$ คือค่าความหนาแน่นของ การแพร่ของวัสดุที่ตำแหน่ง $x = (x_1, x_2, x_3)$ และที่เวลา t D คือค่าคงที่ของการแพร่สะสมสำหรับความ หนาแน่นที่ตำแหน่ง x ดังสมการที่ 2.11

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla^2 c \quad (2.11)$$

c = ความเข้มข้น (Concentration)
 t = เวลา (Time)

สมการของการแพร่ในแบบหนึ่งมิติอยู่ในรูปแบบสมการดังสมการที่ 2.12

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (2.12)$$

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ในหนึ่งมิติค่าของ $c(x_i, t_j)$ ทำให้อยู่ในรูป c_i^j และ ∇^2 ทำให้อยู่ในรูป $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ จากรูปแบบต่อเนื่อง (Continuous) ต้องทำให้อยู่ในรูปแบบตัวเลข (Discretized) อยู่ในรูปของสมการดังสมการที่ 2.13

$$c_i^{j+1} = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (c_{i+1}^j + c_{i-1}^j - 2c_i^j) + c_i^j \quad (2.13)$$

i = พื้นที่ในแกน x (Space of x-axis)

j = เวลา (Time)

สมการของการแพร่ในแบบ 2 มิติ อยู่ในรูปของสมการดังสมการที่ 2.14

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \quad (2.14)$$

ในสองมิติ ค่า $c(x_i, y_j, t_k)$ เราจะแปลงให้ $c_{i,j}^k$ และ ∇^2 อยู่ในรูป $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ จากรูปแบบต่อเนื่อง (Continuous) ต้องทำให้อยู่ในรูปแบบตัวเลข (Discretized) อยู่ในรูปของสมการดังสมการที่ 2.15

$$c_{i,j}^{k+1} = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (c_{i+1,j}^k + c_{i-1,j}^k + c_{i,j+1}^k + c_{i,j-1}^k - 4c_{i,j}^k) + c_{i,j}^k \quad (2.15)$$

i = พื้นที่ในแกน x (Space of x-axis)

j = พื้นที่ในแกน y (Space of y-axis)

k = เวลา (Time)

2.4 การแปลงฟูรีเยร์ (Fourier transform)

การแปลงฟูรีเยร์หมายถึงการแปลงเชิงปริพันธ์โดยเป็นการเขียนแทนฟังก์ชันใดๆในรูปของผลบวกหรือปริพันธ์ของฐานที่เป็นฟังก์ชันรูปคลื่นไซน์หรือโคไซน์

เงื่อนไขในการหา Fourier transform

สัญญาณที่จะหา Fourier transform จะเป็นได้ทั้งสัญญาณเชิงคาบ (periodic signal) และสัญญาณที่ไม่เป็นเชิงคาบ (non-periodic signal) ยกเว้นสัญญาณที่เข้าสู่นันต์ (ทั้งค่าบวกและลบ) จะไม่สามารถหาค่า Fourier transform เช่น $f(t) = e^{at}$, $f(t) = t^2$

2.4.1 การแปลงฟูรีเยร์ต่อเนื่อง

เป็นการเขียนแทน ฟังก์ชัน $f(t)$ ที่สามารถหาปริพันธ์ของกำลังสองได้ ด้วยผลบวกของฟังก์ชัน เอกซ์โปเนนเชียลเชิงซ้อน ซึ่งมี ความถี่เชิงมุม ω และ ขนาด (หรือ แอมพลิจูด) เป็นจำนวนเชิงซ้อน $F(\omega)$ รูปสมการจะเป็นอย่างสมการที่ 2.16

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-j\omega t} dt \quad (2.16)$$

2.4.2 การแปลงฟูรีเยร์ไม่ต่อเนื่อง

สำหรับการคำนวณด้วยเครื่องคอมพิวเตอร์ ค่าสัญญาณในทั้งสองโดเมนจำเป็นต้องเป็นค่าทางโปรแกรม Matlab $x[n]$ บนโดเมนไม่ต่อเนื่อง แทนที่จะเป็นโดเมนต่อเนื่องในช่วงจำกัดหรือเป็นคาบในกรณีนี้เราจะใช้ การแปลงฟูรีเยร์ไม่ต่อเนื่อง (Discrete Fourier transform) ซึ่งจะแทนด้วย $X[k]$ ด้วยผลบวกฟังก์ชันคาบ ดังสมการที่ 2.17

$$x[n] = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} X[k]e^{2\pi ink/N} \quad (2.17)$$

การแปลง	เวลา	ความถี่
การแปลงฟูรีเยร์ต่อเนื่อง	ต่อเนื่อง , ไม่เป็นคาบ	ต่อเนื่อง , ไม่เป็นคาบ
การแปลงฟูรีเยร์เวลาไม่ต่อเนื่อง	ไม่ต่อเนื่อง , ไม่เป็นคาบ	ต่อเนื่อง , เป็นคาบ
การแปลงฟูรีเยร์ไม่ต่อเนื่อง	ไม่ต่อเนื่อง , เป็นคาบ	ไม่ต่อเนื่อง , เป็นคาบ

ตารางที่ 2.3 สรุปการแปลงของการแปลงฟูรีเยร์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.5 การแก้ไขสมการการแพร่

2.5.1 การใช้ไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์ในการแก้สมการ

เบื้องต้นสมการของเราเป็นแบบ Continuous

1. สมการการแพร่
$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = \frac{D \partial^2 c}{\partial x^2}$$

2. เราทำการหาอนุพันธ์ของสมการจากข้อที่ 1 ให้เป็น
$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

3. เมื่อทำการหาอนุพันธ์ของสมการให้เป็นดังในสมการด้านบนแล้ว ใช้วิธี Finite difference เพื่อแปลงสมการเป็น Discrete operator จะได้สมการเป็น

$$\frac{c^{j+1} - c^j}{\Delta t}, \quad \frac{c_{i+1}^{j*} + c_{i-1}^{j*} - 2c_i^{j*}}{\Delta x^2}$$

4. เมื่อเราทำการ Discrete operator จนได้สมการดังข้อ 3 แล้ว เรายังจะนำค่า j^* ไปใช้ใน Matlab โดยค่า

$$j^* \rightarrow j + 1 \quad \text{จะเป็น Implicit time stepping}$$

$$j^* \rightarrow j \quad \text{จะเป็น Explicit time stepping}$$

5. เมื่อนำค่า Implicit time stepping กับ Explicit time stepping ไปเปรียบเทียบใน Matlab จะทำให้เรา ทราบว่าค่าของ Implicit time stepping มีความเสถียรมากกว่า

2.5.2 การใช้ฟูรีเยร์สเปคตรัลในการแก้สมการ
เบื้องต้นสมการของเราจะเป็น Continuous

1. สมการการแพร่
$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = \frac{D \partial^2 c}{\partial x^2}$$

2. Fourier transform ในการแปลงค่าก่อนทำการหาอนุพันธ์ของสมการโดยใช้สมการ Fourier transform คือ

$$\hat{u}(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} u(x) dx$$

↓

$$FT \left(\frac{df(x)}{dx} \right) = ik \hat{f}(k)$$

3. เมื่อนำ Fourier transform ไปใช้จะได้สมการเป็น

$$\frac{\partial \hat{c}(k,t)}{\partial t} = -Dk^2 \hat{c}(k,t)$$

4. เมื่อได้สมการดังข้อ 3 แล้วทำการหาอนุพันธ์ของสมการจะได้สมการ $\frac{\partial \hat{c}}{\partial t}$

5. เมื่อได้สมการดังข้อ 4 แล้วเราจะใช้วิธีการ Finite difference ในการแปลงสมการให้อยู่ในรูป

ของ Discrete Operator จะได้สมการเป็น $\frac{\hat{c}^{j+1} - \hat{c}^j}{\Delta t}, \hat{c}^{j*}$

6. เมื่อเราทำการ Discrete operator จนได้สมการดังข้อ 3 แล้ว เราก็นำค่า j^* ไปใช้ใน Matlab โดยค่า $j^* \rightarrow j + 1$ จะเป็น Implicit time stepping

7. เมื่อนำค่า Implicit time stepping ของ Finite difference กับ Implicit time stepping ของ Fourier transform ไปเปรียบเทียบใน Matlab จะทำให้เรา ทราบว่าค่าของ Implicit time stepping ของ Fourier transform มีความเสถียรมากกว่า Finite difference

2.6 แบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล (Phase Field Crystal method)

ในอดีตที่ผ่านมาเป็นเรื่องที่ยากมากที่เราจะเข้าใจกระบวนการเสียรูปแบบยืดหยุ่น การเสียรูปแบบถาวร และอันตรกิริยาของขอบเกรน เพราะเราไม่สามารถเข้าใจปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นในระดับนาโนสเกลได้ แต่เราเข้าใจปรากฏการณ์ในระดับมหภาคมากกว่า จึงได้มีการพัฒนาวิธีการที่จะสามารถเข้าใจปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้น ซึ่งนั่นคือ แบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล (Phase Field Crystal method) เพื่อที่จะสามารถเข้าใจปรากฏการณ์ต่างๆ ทั้งเวลาการสั้นของอะตอมที่ต่างกันจนถึงกระบวนการแพร่ โดยในช่วงแรกก่อนที่จะมีแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล(Phase Field Crystal method) ได้มีแบบจำลองเฟสฟิลด์ (Phase Field method) เกิดขึ้นก่อน โดยแบบจำลองเฟสฟิลด์จะเป็นการสร้างสนามข้อมูล เพื่ออธิบายโครงสร้างทางจุลภาค เช่น สิ่งเจือปน, ความเป็นระเบียบของโครงสร้างผลึก, การปรับทิศทาง เป็นต้น แต่แบบจำลองเฟสฟิลด์นั้นมีข้อจำกัดคือ ไม่สามารถทราบได้ว่า ตัวอะตอมนั้นอยู่ตรงส่วนไหน จึงได้มีการพัฒนาเป็นแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัลเพื่อตอบปัญหาที่ต้องการได้ ซึ่งช่วยลดความยุ่งยากและเวลาในการใช้งานทำให้สามารถติดตามผลของการเสียรูปแบบยืดหยุ่น การเสียรูปแบบถาวร ที่เกิดขึ้นในระบบเวลาที่ปรากฏการณ์ได้ โดยที่เราไม่ต้องนำเวลาไปผูกติดกับการสั้นของอะตอม เพราะการที่เราใช้เวลาไปผูกกับอะตอมจะทำให้เราใช้การจำลองที่นานและเสียงบประมาณมาก

สมการก่อนที่จะเป็น Phase Field Crystal จะเป็นสมการ Free energy ดังสมการที่ 2.18

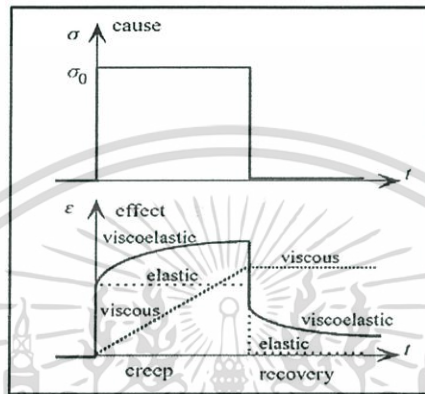
$$F = \frac{F}{F_0} = \int d\vec{x} \left[\frac{\varphi}{2} \omega (\nabla^2) \varphi + \frac{\varphi^4}{4} \right] \quad (2.18)$$

สมการของ Phase Field Crystal ดังสมการที่ 2.19

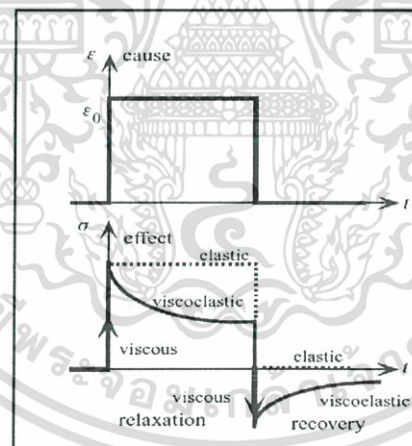
$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \nabla^2 (\omega (\nabla^2) \varphi + \varphi^3) + \tau \quad (2.19)$$

2.7 สมบัติยืดหยุ่น (Viscoelastic)

สมบัติยืดหยุ่น คือ พฤติกรรมการตอบสนองต่อความเค้นที่กระทำของวัสดุ เช่น พลาสติก ยาง เป็นต้น ซึ่งพฤติกรรมดังกล่าวจะแสดงสมบัติของแข็งที่ยืดหยุ่น (Elastic) และของเหลวหนืด (Viscous) โดยที่สมบัติทางด้านการเปลี่ยนแปลงรูปร่างดังกล่าวนี้ขึ้นอยู่กับเวลา อุณหภูมิ (Temperature) ความเค้น (Stress) และอัตราความเครียด (Strain rate)



รูปที่ 2.9 กราฟแสดงการเกิด Viscoelastic และ Elastic ของวัสดุเมื่อใส่ความเค้น



รูปที่ 2.10 กราฟแสดงการเกิด Viscoelastic และ Elastic ของวัสดุเมื่อใส่ความเครียด

จากรูปที่ 2.10 วัสดุ Elastic เมื่อวัสดุได้รับความเครียดคงที่ วัสดุจะมีแรงต่อต้านแบบคงที่ตามความเครียดที่ได้รับ และเมื่อไม่ได้รับความเครียดวัสดุจะกลับคืนสู่สภาพสมดุลอย่างรวดเร็ว สำหรับวัสดุที่มีสมบัติยืดหยุ่น เมื่อวัสดุได้รับความเครียดคงที่ วัสดุจะมีแรงต่อต้านช่วงแรกมากแล้วจึงค่อยๆ ลดแรงต่อต้านลงเรื่อยๆ และเมื่อไม่ได้รับความเครียดวัสดุจะยังคงมีความเครียดหลงเหลืออยู่จึงใช้เวลาในการคืนตัวอย่างช้าๆ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 3

การศึกษาเบื้องต้น

จากการที่ปริญญาโทฉบับนี้เป็นการศึกษาเกี่ยวกับวัสดุโดยเริ่มด้วยการศึกษาเบื้องต้นเกี่ยวกับสมการการแพร่ใน 1 มิติ และ 2 มิติ เนื่องจากสมการการแพร่นั้นมีความคล้ายคลึงกันกับสมการเพสพิลด์คริสตัลแต่มีความยุ่งยากในการศึกษาน้อยกว่า เราจึงเลือกที่จะศึกษาสมการการแพร่ โดยมีหัวข้อการศึกษาดังนี้

3.1 วิธีการดำเนินงาน

3.1.1 การทดลองที่ 1: ทดลองหาความแตกต่างระหว่างเอกซ์พิติตไทม์สเตปปิง (Explicit time stepping) และอิมพิติตไทม์สเตปปิง (Implicit time stepping)

3.1.2 การทดลองที่ 2: ทดลองหาความแตกต่างระหว่างวิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์ (Finite difference) และฟูเรียร์สเปคทรัล (Fourier Spectral Method)

3.2 ผลการดำเนินงาน

3.2.1 ผลที่ได้จากการทดลองที่ 1

3.2.2 ผลที่ได้จากการทดลองที่ 2

3.3 สรุปและวิเคราะห์ผลการดำเนินงาน

3.3.1 สรุปและวิเคราะห์ผลการทดลองที่ 1

3.3.2 สรุปและวิเคราะห์ผลการทดลองที่ 2

3.1 วิธีการดำเนินงาน

เราจะทำการทดลองหาความแตกต่างของความคลาดเคลื่อนของผลลัพธ์ของเอกซ์พิติตไทม์สเตปปิง (Explicit time stepping) และอิมพิติตไทม์สเตปปิง (Implicit time stepping) รวมถึงหาความแตกต่างของความคลาดเคลื่อนของวิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์ (Finite difference) และฟูเรียร์สเปคทรัล (Fourier Spectral Method)

3.1.1 ทดลองหาความแตกต่างระหว่างเอกซ์พิตไทม์สเตปปิง (Explicit time stepping) และอิมพิซิตไทม์สเตปปิง (Implicit time stepping)

เราจะทำการทดลองเกี่ยวกับสมการการแพร่ เราจะทำการทดลองเกี่ยวกับความเสถียรของวิธีทั้งสอง ว่าวิธีใดมีความเสถียรมากกว่า และเหมาะที่จะนำมาใช้งานมากกว่า โดยเปรียบเทียบค่า Error ที่เกิดขึ้นกันในวิธี Finite difference

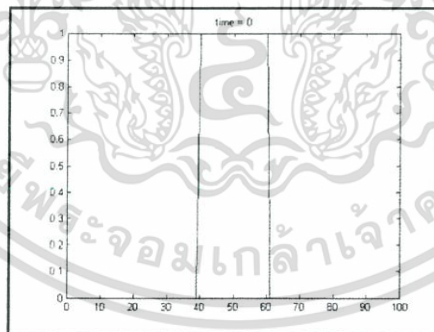
3.1.1.1 การกำหนดตั้งค่าเกี่ยวกับการทดลอง

ส่วนที่ 1 : สมการที่ได้จากการ Discretization ทั้งสองสมการ

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

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

ส่วนที่ 2 : ตั้งค่าเริ่มต้นของระบบให้ Concentration profile ในส่วนที่ $x=40$ ถึง $x=60$ ให้มีค่า = 1



รูปที่ 3.1 ภาพของแบบจำลองการแพร่ของการตั้งค่าเริ่มต้นของระบบ

ส่วนที่ 3 : ตั้งค่าตัวแปรดังนี้

$$D \text{ (ค่าคงที่)} = 1$$

$$L \text{ (คาบ)} = 100$$

$$\text{Time (เวลา)} = 10$$

$$n \text{ (จำนวนช่อง)} = 100$$

ส่วนที่ 4 : กำหนดค่า dt ไว้ 5 จำนวน เพื่อที่จะนำไปเปรียบเทียบกับ dt อ่างอิง

$$dt \text{ ที่กำหนดไว้เพื่อเปรียบเทียบ} = 10^0 \ 10^{-1} \ 10^{-2} \ 10^{-3} \ 10^{-4}$$

$$dt \text{ ที่กำหนดไว้เป็น } dt \text{ อ่างอิง} = 10^{-5}$$

3.1.1.2 วิธีการทำการทดลอง

1. ทำการหาระบบเมื่อเวลาผ่านไป $\text{time} = 10$
2. ใช้ dt อ่างอิง ในการเป็นระบบเริ่มต้นของการทดลอง
3. เราจะทำการเปรียบเทียบความเปลี่ยนแปลงของระบบในระบบที่ทำการเปลี่ยนค่า dt ตามที่ได้กำหนดไว้กับระบบที่ใช้ค่า dt อ่างอิง เพื่อทำการดูว่าความแตกต่างของระบบของทั้งสองวิธีเมื่อเทียบกับระบบที่ใช้ dt อ่างอิงนั้น เป็นอย่างไร
4. จากการประมวลผลใน MATLAB จะทำให้เราสามารถเห็นกราฟเปรียบเทียบระหว่างวิธี Explicit time stepping และ Implicit time stepping

3.1.2 ทดลองหาความแตกต่างระหว่างวิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์ (Finite difference) และฟูรีเยร์สเปคทรัล (Fourier Spectral Method)

เราจะทำการทดลองเกี่ยวกับสมการการแพร่ เราจะทำการทดลองเกี่ยวกับความเสถียรของวิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์ (Finite difference) และฟูรีเยร์สเปคทรัล (Fourier Spectral Method) โดยใช้วิธีอิมพลิตไทม์สเตปปิง (Implicit time stepping) และดูว่าวิธีใดมีความเสถียรมากกว่า และเหมาะที่จะนำมาใช้งานมากกว่า โดยเปรียบเทียบค่า Error ที่เกิดขึ้นใน 2 วิธี

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

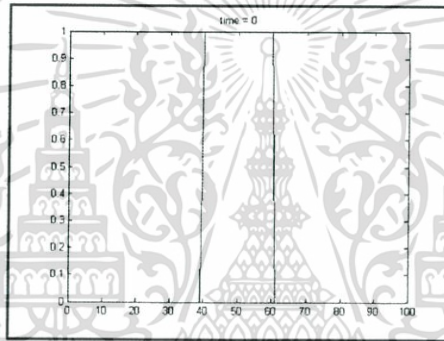
3.1.2.1 การกำหนดตั้งค่าเกี่ยวกับการทดลอง

ส่วนที่ 1 : สมการที่ได้จากการ Discretization ทั้งสองสมการ

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

$$\hat{c}_i^{j+1} = \frac{\hat{c}_i^j}{1 + (dt)(k)^2} \quad (\text{Implicit of FSM})$$

ส่วนที่ 2 : ตั้งค่าเริ่มต้นของระบบให้ Concentration profile ในส่วนที่ $x=40$ ถึง $x=60$ ให้มีค่า =1



รูปที่ 3.2 ภาพของแบบจำลองการแพร่ของการตั้งค่าเริ่มต้นของระบบ

ส่วนที่ 3 : ตั้งค่าตัวแปรดังนี้

$$D \text{ (ค่าคงที่)} = 1$$

$$L \text{ (คาบ)} = 100$$

$$\text{Time (เวลา)} = 10$$

$$dt \text{ (การเปลี่ยนแปลงของเวลา)} = 0.001$$

ส่วนที่ 4 : กำหนดค่า n ไว้ 5 จำนวน เพื่อที่จะนำไปเปรียบเทียบกับ n อ่างอิง

$$n \text{ ที่กำหนดไว้เพื่อเปรียบเทียบ} = 100 \ 200 \ 400 \ 800 \ 1600$$

$$n \text{ ที่กำหนดไว้เป็น } n \text{ อ่างอิง} = 3200$$

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อ 25 ศึกษเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

3.1.2.2 วิธีการทำการทดลอง

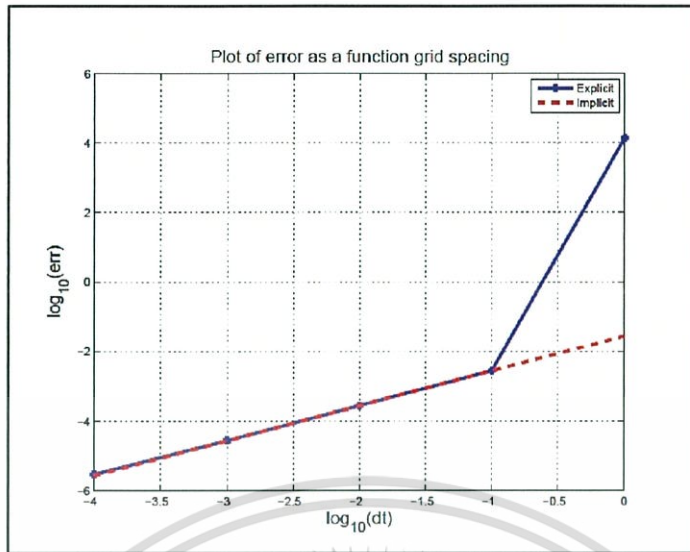
1. ทำการหาระบบเมื่อเวลาผ่านไป $\text{time} = 50$
2. ใช้ n อ้างอิง ในการเป็นระบบเริ่มต้นของการทดลอง
3. เราจะทำการเปรียบเทียบความเปลี่ยนแปลงของระบบในระบบที่ทำการเปลี่ยนค่า n ตามที่ได้กำหนดไว้กับระบบที่ใช้ค่า n อ้างอิง เพื่อทำการดูว่าความแตกต่างของระบบของทั้งสองวิธีเมื่อเทียบกับระบบที่ใช้ n อ้างอิงนั้น เป็นอย่างไร
4. จากการประมวลผลใน MATLAB จะทำให้เราสามารถเห็นกราฟเปรียบเทียบระหว่างวิธี ฟูไนต์ดิฟเฟอเรนซ์ (Finite difference) และฟูเรียร์สเปกตรัล (Fourier Spectral Method)

3.2 ผลการดำเนินงาน

ในส่วนนี้จะเป็นการแสดงผลการดำเนินงานของการทดลองที่ 1 และการทดลองที่ 2 ของบทการศึกษาเบื้องต้น ดังนี้

3.2.1 ผลที่ได้จากการทดลองที่ 1

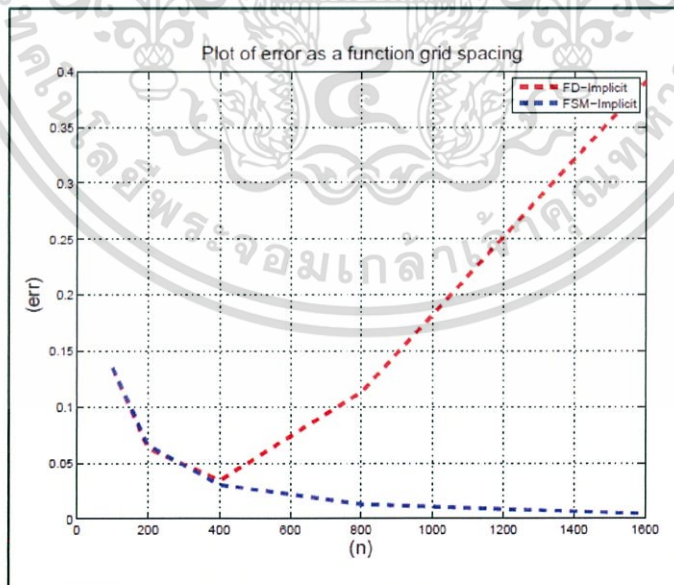
ผลที่ได้จากการทดลองหาความแตกต่างระหว่างเอกซ์พิติตไทม์สเตปปิง (Explicit time stepping) และอิมพิติตไทม์สเตปปิง (Implicit time stepping) โดยการจำลองในโปรแกรม MATLAB จะได้กราฟเปรียบเทียบค่า Error ระหว่างเอกซ์พิติตไทม์สเตปปิง (Explicit time stepping) และอิมพิติตไทม์สเตปปิง (Implicit time stepping) ดังนี้



รูปที่ 3.3 กราฟเปรียบเทียบระหว่างวิธี Explicit time stepping และ Implicit time stepping

3.2.2 ผลที่ได้จากการทดลองที่ 2

ผลที่ได้จากการทดลองหาความแตกต่างระหว่างวิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์ (Finite difference) และฟูเรียร์สเปกตรัล (Fourier Spectral Method) โดยการจำลองในโปรแกรม MATLAB จะได้กราฟเปรียบเทียบค่า Error ระหว่างวิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์ (Finite difference) และฟูเรียร์สเปกตรัล (Fourier Spectral Method) ดังนี้



รูปที่ 3.4 กราฟเปรียบเทียบระหว่างวิธี ไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์ (Finite difference) และฟูเรียร์สเปกตรัล (Fourier Spectral Method)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

3.3 สรุปและวิเคราะห์ผลการดำเนินงาน

ในส่วนนี้จะเป็นการสรุปและวิเคราะห์ผลการดำเนินงานของการทดลองที่ 1 และการทดลองที่ 2 เพื่อดูว่าในแต่ละวิธีนั้น วิธีใดที่มีความเหมาะสมที่สุดในการที่จะนำไปประยุกต์ใช้ในการดำเนินงานในลำดับต่อไป

3.3.1 สรุปและวิเคราะห์ผลการทดลองที่ 1

จากกราฟในรูปที่ 3.3 จะทำให้เราทราบว่า เมื่อทำการเพิ่มค่า dt ไปเรื่อยๆ Error ที่เกิดขึ้นในทั้งวิธีเอกซ์พิติตไทม์สเตปปิง (Explicit time stepping) และอิมพิติตไทม์สเตปปิง (Implicit time stepping) นั้นจะมีค่าเพิ่มมากขึ้นเรื่อยๆเช่นกัน กล่าวคือเมื่อทำการลดขนาดขั้นตอนลง จะส่งผลให้เกิด Error ที่เพิ่มขึ้นอย่างต่อเนื่องและจะส่งผลให้ผลลัพธ์ที่ได้นั้นมีความแม่นยำที่น้อยลงเรื่อยๆเช่นกัน

เมื่อเราทำการดูที่ dt เท่ากับ 0.1 จะสามารถสังเกตได้ว่า Error ของวิธีเอกซ์พิติตไทม์สเตปปิง (Explicit time stepping) นั้นจะมีค่ามากขึ้นอย่างรวดเร็ว และเราจะเรียกสิ่งที่เกิดขึ้นว่า การเกิดขึ้นของความคลาดเคลื่อนของตัวเลขอย่างฉับพลัน (Explosive numerical instability) ในทางกลับกันนั้น Error ของวิธีอิมพิติตไทม์สเตปปิง (Implicit time stepping) เองก็มีค่ามากขึ้นเรื่อยๆเมื่อทำการลดขนาดขั้นตอนลงเช่นกัน แต่ไม่ได้มีความเร็วในการเกิดขึ้นของ Error เท่ากับวิธีเอกซ์พิติตไทม์สเตปปิง (Explicit time stepping)

3.3.2 สรุปและวิเคราะห์ผลการทดลองที่ 2

จากกราฟในรูปที่ 3.4 จะทำให้เราทราบว่า เมื่อทำการเพิ่มค่า n นั้นจะทำให้ Error มีค่าลดลงเรื่อยๆจนกระทั่งที่ตำแหน่ง n เท่ากับ 400 จะพบว่า Error ของวิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์ (Finite difference) จะมีการเพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็ว ในทางตรงกันข้าม Error ของวิธีฟูเรียสเปกตรัล (Fourier Spectral Method) นั้นจะลดลงอย่างช้าๆในขณะที่ n มากกว่า 400 และจะประพุดิตัวเพื่อปรับเข้าสู่สมดุลในค่า n ที่มากขึ้นเรื่อยๆ

จากการทดลองที่ 1 และการทดลองที่ 2 จะทำให้เราสามารถเลือกวิธีที่จะนำไปใช้ในขั้นตอนต่อไปได้นั้นคือวิธีอิมพิติตไทม์สเตปปิงของฟูเรียสเปกตรัล (Implicit time stepping of Fourier Spectral Method) เนื่องจากเป็นวิธีที่มีความเสถียรที่จะใช้ในการคำนวณในขั้นตอนต่อไปมากที่สุด

บทที่ 4

การศึกษาการเสี้ยวรูป

ในบทที่ 3 นั้นได้ทำการทดสอบวิธีการในการจำลองวัสดุ ในบทนี้เราจะทำการจำลองวัสดุด้วยวิธีการในบทที่ 3 ซึ่งก็คือวิธีอิมพิซิิตไทม์สเตปปิงของฟูเรียสเปคตรัล (Implicit time stepping of Fourier Spectral Method) และจะทำการจำลองในแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล และทำการศึกษาระบบของแบบจำลอง โดยมีหัวข้อในการศึกษาดังนี้

4.1 วิธีการดำเนินงาน

4.1.1 การทดลองการจำลองสมการเฟสฟิลด์คริสตัล

4.1.2 การทดลองการรบกวนระบบด้วยวิธีการต่างๆ

4.2 ผลการดำเนินงาน

4.2.1 ผลที่ได้จากการจำลองสมการเฟสฟิลด์คริสตัล

4.2.2 ผลที่ได้จากการรบกวนระบบด้วยวิธีต่างๆ

4.3 สรุปและวิเคราะห์ผลการดำเนินงาน

4.2.1 สรุปและวิเคราะห์ผลที่ได้จากการจำลองสมการเฟสฟิลด์คริสตัล

4.2.2 สรุปและวิเคราะห์ผลที่ได้จากการรบกวนระบบด้วยวิธีต่างๆ

4.1 วิธีการดำเนินงาน

จากการที่ได้ทำการจำลองสมการเฟสฟิลด์คริสตัลโดยการเปลี่ยนตัวแปรค่าความน่าจะเป็นในการพบอะตอมและค่าอุณหภูมิ เพื่อเปรียบเทียบระหว่างระบบในแบบจำลองจากการจำลองสมการในโปรแกรม MATLAB กับระบบในแบบจำลองจากทฤษฎีจริง ว่ามีความเหมือนหรือแตกต่างกันอย่างไร

4.1.1 การทดลองการจำลองสมการเพสฟิลด์คริสตัล

4.1.1.1 การกำหนดตั้งค่าเกี่ยวกับการทดลอง

โดยสมการพลังงานอิสระที่นำไปจำลองในโปรแกรม MATLAB นั้นต้องทำให้สมการเป็นสมการฟังก์ชันพลังงานอิสระที่ไม่มีหน่วยดังสมการ

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla^2 (\omega (\nabla^2) \psi + \psi^3) \quad (3.30)$$

โดยที่ ψ คือความน่าจะเป็นในการพบอะตอม

ค่า $\omega (\nabla^2)$ ตามทฤษฎีมีค่าดังสมการ

$$\omega (\nabla^2) = r + (1 + \nabla^2)^2 \quad (3.31)$$

นำค่าที่ได้ไปแทนในสมการเพสฟิลด์คริสตัลหลักจะได้ดังนี้

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = r \nabla^2 \psi + \nabla^2 \psi + 2 \nabla^4 \psi + \nabla^6 \psi + \nabla^2 \psi^3 \quad (3.32)$$

นำสมการที่ได้เปลี่ยนให้อยู่ในรูปแบบฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มในมิติพื้นที่ (x, y)

$$\frac{\partial \hat{c}}{\partial t} = -(1+r)|k|\hat{c} - |k|^2 F.T.(c^3) + 2|k|^4 \hat{c} - |k|^6 \hat{c} \quad (3.33)$$

ทำการเปลี่ยนรูปแบบสมการจากแบบ Partial differential ให้กลายเป็นรูปแบบ Discrete equation

$$\frac{\hat{c}_{i,j}^{n+1} - \hat{c}_{i,j}^n}{\Delta t} = -(1+r)|k|^2 \hat{c}_{i,j}^{n+1} - |k|^2 F.T.(c_{i,j}^{3,n}) + 2|k|^4 \hat{c}_{i,j}^{n+1} - |k|^6 \hat{c}_{i,j}^{n+1} \quad (3.34)$$

4.1.1.2 จำลองสมการในโปรแกรม Matlab

นำสมการที่ได้จำลองในโปรแกรม Matlab และสังเกตความเปลี่ยนแปลงของเฟส

4.1.1.3 ทดลองเปลี่ยนตัวแปรต่างๆ

ทดลองเปลี่ยนตัวแปรความน่าจะเป็นในการพบอะตอมและอุณหภูมิเพื่อดูความเปลี่ยนแปลงในเฟสต่างๆ ตามตารางที่ 3.1

	ค่าความน่าจะเป็นในการพบอะตอม	อุณหภูมิ
ครั้งที่ 1 Stripe phase	0.1	-0.25
ครั้งที่ 2 Triangular phase	-0.285	-0.25
ครั้งที่ 3 Constant phase	0.1	0.1

ตารางที่ 4.1 แสดงการใส่ค่าความเปลี่ยนแปลงทั้งสองตัวแปร

4.1.2 การทดลองการรบกวนระบบด้วยวิธีต่างๆ

การทดลองจะทำการรบกวนระบบเฟสฟิล์มคริสตัลโมเดลโดยการใส่ Strain เข้าไปรบกวนระบบ เพื่อที่จะศึกษาความเปลี่ยนแปลงของระบบ โดยจะตั้งค่าตัวแปรให้เฟสฟิล์มคริสตัลนั้นอยู่ในเฟส Triangular เนื่องจากเฟส Triangular นั้นเป็นเฟสที่มีลักษณะใกล้เคียงกับวัสดุจริงมากที่สุด และจะทำการรบกวนระบบด้วยวิธีการ 4 วิธี ดังนี้

4.1.2.1 Hydrostatic expansion

จะเป็นการใส่ค่า Strain เข้าไปในระบบโดยทั้งแกน X และแกน Y โดยเราจะกำหนดค่าให้ ค่า Strain $X > 0$ และค่า Strain $Y > 0$

4.1.2.2 Hydrostatic compression

จะเป็นการใส่ค่า Strain เข้าไปในระบบโดยทั้งแกน X และแกน Y โดยเราจะกำหนดค่าให้ ค่า Strain $X < 0$ และค่า Strain $Y < 0$

4.1.2.3 Uniaxial tensile deformation

จะเป็นการใส่ค่า Strain เข้าไปในระบบโดยเราจะทำการใส่ค่าเพียงแค่แกน y เท่านั้น โดยเราจะกำหนดค่าให้ ค่า Strain $X = 0$ และค่า Strain $Y > 0$

4.1.2.4 Biaxial deformation

จะเป็นการใส่ค่า Strain เข้าไปในระบบโดยทั้งแกน x และแกน y โดยเราจะกำหนดค่าให้ ค่า Strain $X < 0$ และค่า Strain $Y > 0$

4.2 ผลการดำเนินงาน

ในส่วนนี้จะเป็นการแสดงผลการดำเนินงานของการทดลองที่ 4.1.1 และการทดลองที่ 4.1.2 ดังนี้

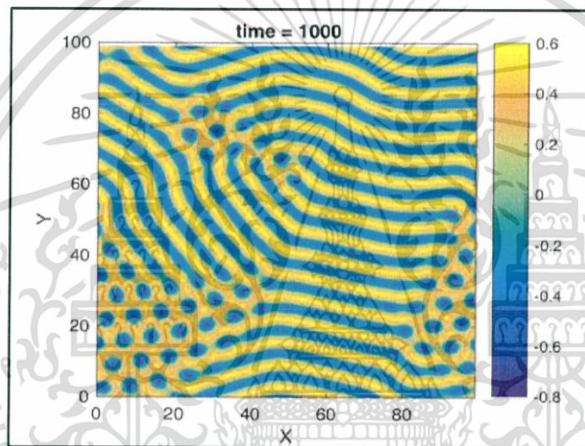
4.2.1 ผลที่ได้จากการจำลองสมการเฟสฟิลด์คริสตัล

4.2.1.1 Stripe phase

เราทำการจำลอง Stripe phase โดยการตั้งค่าตัวแปรดังนี้

- ค่าความน่าจะเป็นในการพบอะตอม = 0.1
- อุณหภูมิ = -0.25

จากการจำลองสมการในโปรแกรม MATLAB จะพบลักษณะเฟสเป็นดังนี้



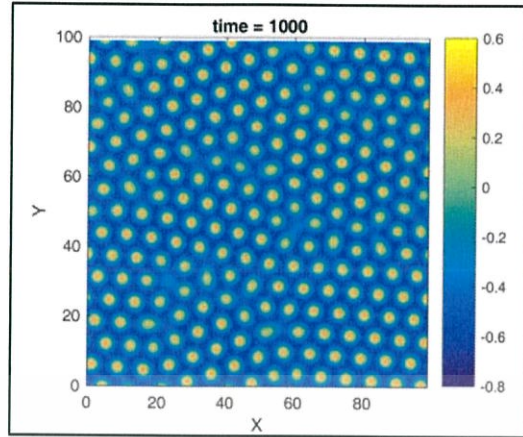
รูปที่ 4.1 แสดงลักษณะของ Stripe phase จากการจำลองในโปรแกรม MATLAB

4.2.1.2 Triangular phase

เราทำการจำลอง Triangular phase โดยการตั้งค่าตัวแปรดังนี้

- ค่าความน่าจะเป็นในการพบอะตอม = -0.285
- อุณหภูมิ = -0.25

จากการจำลองสมการในโปรแกรม MATLAB จะพบลักษณะเฟสเป็นดังนี้



รูปที่ 4.2 แสดงลักษณะของ Triangular phase จากการจำลองในโปรแกรม MATLAB

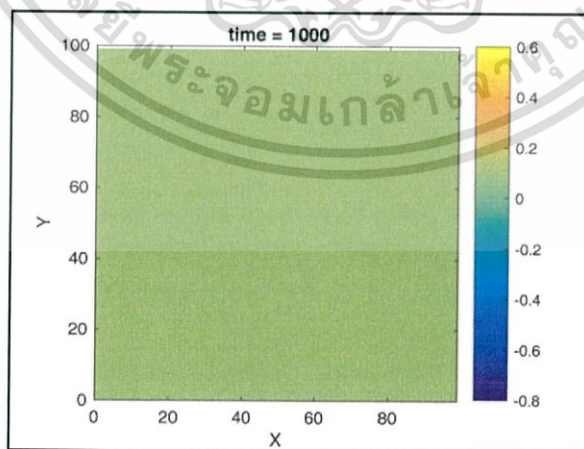
จะพบว่า Triangular phase นั้น มีการจัดตัวของอะตอมใกล้เคียงกับวัสดุจริงมาก และเราจะนำเฟสนี้ไปใช้ในการศึกษาคุณสมบัติความไหลหนืดของวัสดุต่อไป

4.2.1.3 Constant phase

เราทำการจำลอง Constant phase โดยการตั้งค่าตัวแปรดังนี้

- ค่าความน่าจะเป็นในการพบอะตอม = 0.1
- อุณหภูมิ = 0.1

จากการจำลองสมการในโปรแกรม MATLAB จะพบลักษณะเฟสเป็นดังนี้

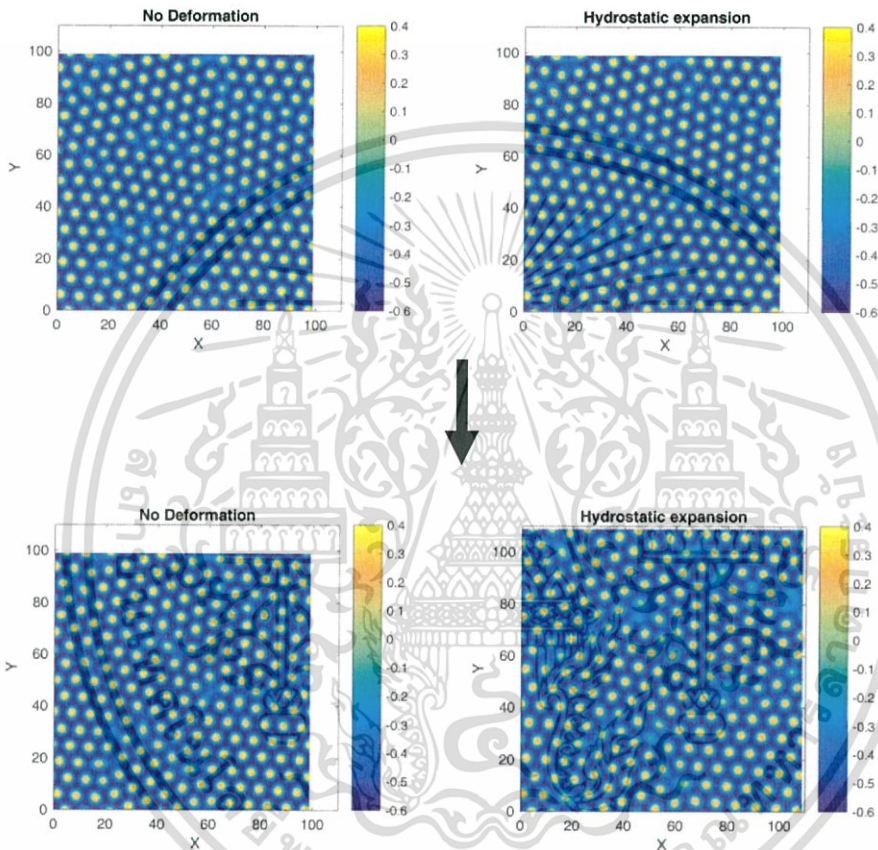


รูปที่ 4.3 แสดงลักษณะของ Constant phase จากการจำลองในโปรแกรม MATLAB

4.2.2 ผลที่ได้จากการรบกวนระบบด้วยวิธีการต่างๆ

4.2.2.1 Hydrostatic expansion

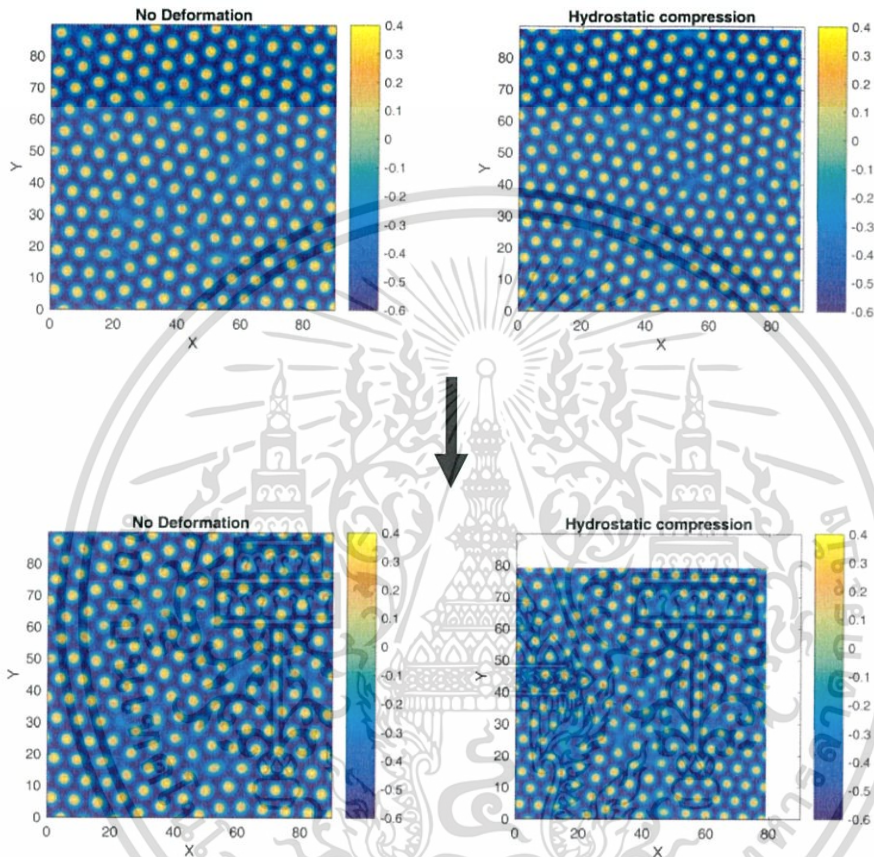
เป็นการใส่ Strain เข้าไปในระบบโดยจะทำให้ระบบขยายออกทั้งในทิศทางแกน x และแกน y (Strain $X > 0$, Strain $Y > 0$) ทำให้เราสามารถเห็นการเปลี่ยนแปลงของระบบได้ดังนี้



รูปที่ 4.4 แสดงลักษณะของระบบที่เปลี่ยนแปลงเมื่อทำการใส่ Strain เข้าไปในระบบในรูปแบบ Hydrostatic expansion โดยเปรียบเทียบที่เวลา 0.1 และที่เวลา 100

4.2.2.2 Hydrostatic compression

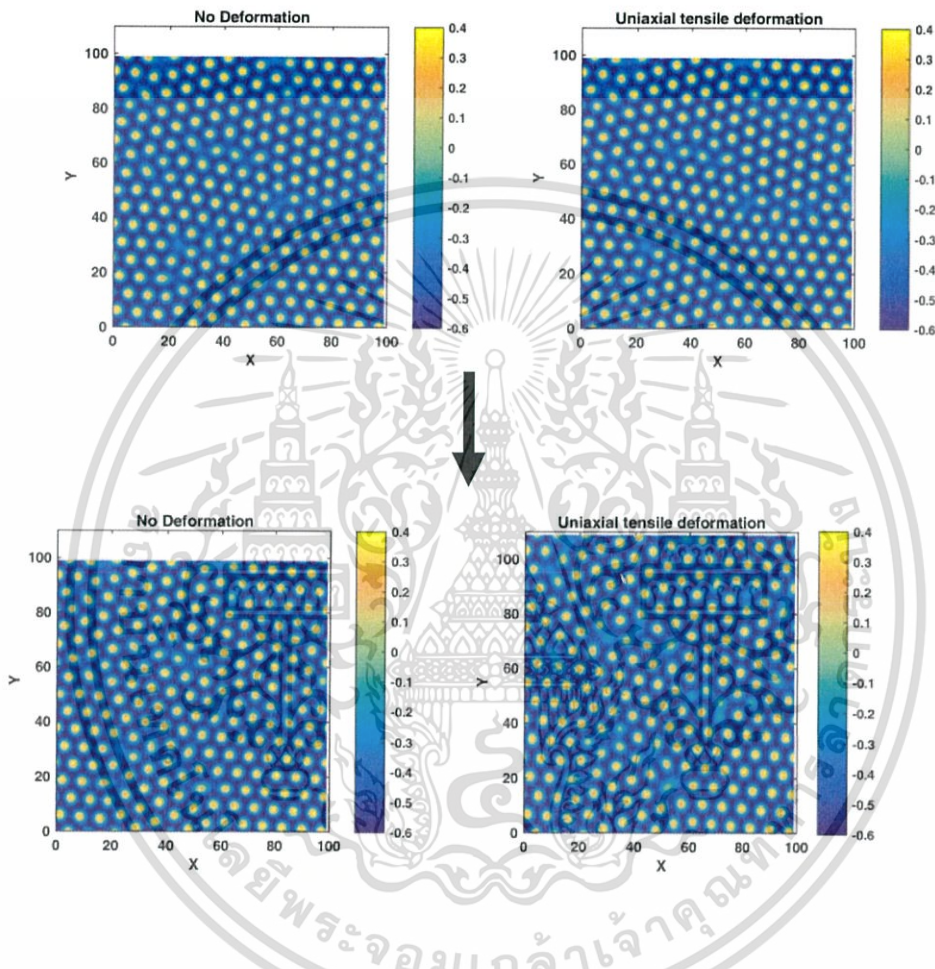
เป็นการใส่ Strain เข้าไปในระบบโดยจะทำให้ระบบถูกบีบอัดเข้าทั้งในทิศทางแกน X และแกน y (Strain $X < 0$, Strain $Y < 0$) ทำให้เราสามารถเห็นการเปลี่ยนแปลงของระบบได้ดังนี้



รูปที่ 4.5 แสดงลักษณะของระบบที่เปลี่ยนแปลงเมื่อทำการใส่ Strain เข้าไปในระบบในรูปแบบ Hydrostatic compression โดยเปรียบเทียบที่เวลา 0.1 และที่เวลา 100

4.2.2.3 Uniaxial tensile deformation

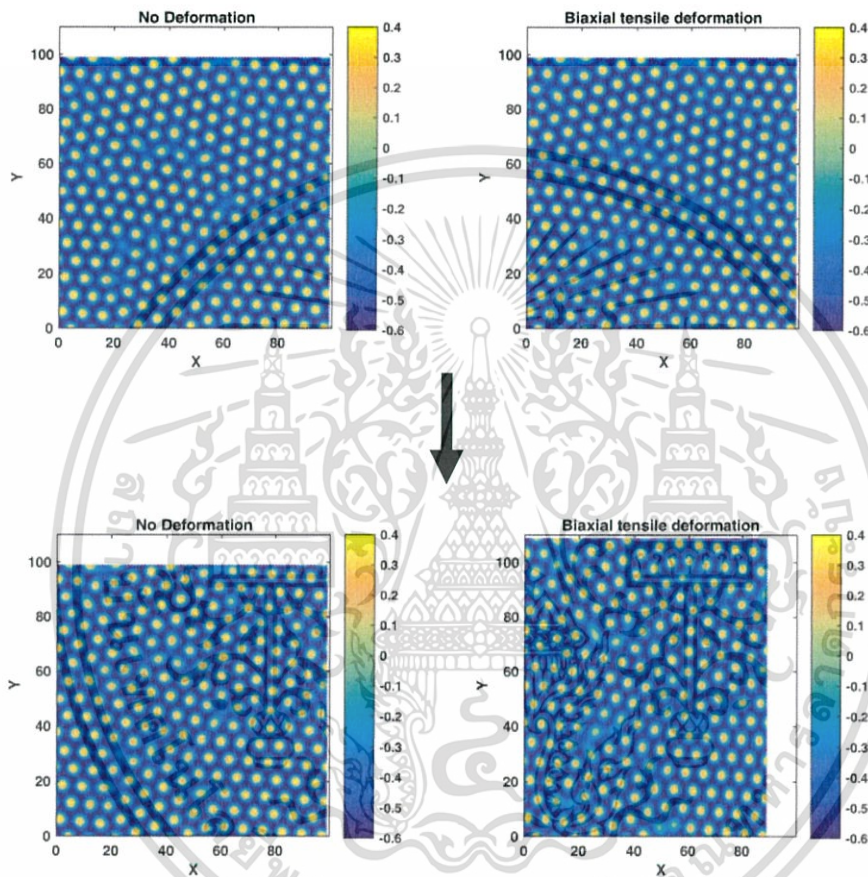
เป็นการใส่ Strain เข้าไปในระบบโดยจะทำให้ระบบขยายออกในทิศทางแนวแกน y เท่านั้น (Strain $X = 0$, Strain $Y > 0$) ทำให้เราสามารถเห็นการเปลี่ยนแปลงของระบบได้ดังนี้



รูปที่ 4.6 แสดงลักษณะของระบบที่เปลี่ยนแปลงเมื่อทำการใส่ Strain เข้าไปในระบบในรูปแบบ Uniaxial tensile deformation โดยเปรียบเทียบที่เวลา 0.1 และที่เวลา 100

4.2.2.4 Biaxial deformation

เป็นการใส่ Strain เข้าไปในระบบโดยจะทำให้ระบบถูกบีบอัดในแนวแกน X และขยายออกในทิศทางแนวแกน y (Strain $X < 0$, Strain $Y > 0$) ทำให้เราสามารถเห็นการเปลี่ยนแปลงของระบบได้ดังนี้

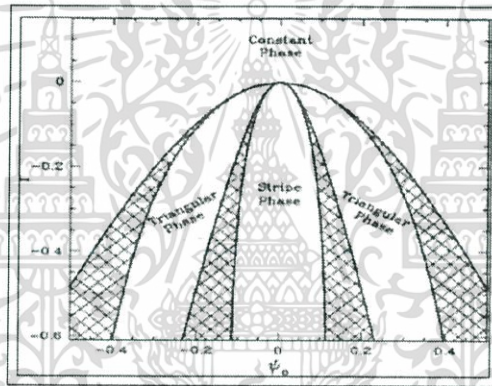


รูปที่ 4.7 แสดงลักษณะของระบบที่เปลี่ยนแปลงเมื่อทำการใส่ Strain เข้าไปในระบบในรูปแบบ Biaxial deformation โดยเปรียบเทียบที่เวลา 0.1 และที่เวลา 100

4.3 สรุปและวิเคราะห์ผลการดำเนินงาน

4.3.1 สรุปและวิเคราะห์ผลที่ได้จากการจำลองสมการเฟสฟิลต์คริสตัล

จากการที่เราได้ทำการทดลองเปลี่ยนแปลงค่าตัวแปรที่ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงเฟสของเฟสฟิลต์คริสตัลโมเดล ทำให้เราทราบว่า เมื่อเราทำการเปลี่ยนตัวแปรอุณหภูมิและตัวแปรความน่าจะเป็นในการพบอะตอม จะทำให้เราทราบว่าทั้งสองตัวแปรนี้ต่างก็เป็นตัวแปรที่มีผลต่อการเปลี่ยนแปลงเฟสของเฟสฟิลต์คริสตัลโมเดล เนื่องจากเมื่อเราทำการเปลี่ยนค่าให้ตัวแปรเหล่านี้ตามการทดลอง เฟสของเฟสฟิลต์คริสตัลโมเดลก็เปลี่ยนแปลงตามไปด้วย ซึ่งก็เป็นไปตามทฤษฎีของ Phase diagram ของเฟสฟิลต์คริสตัลโมเดลดังรูปที่ 4.8



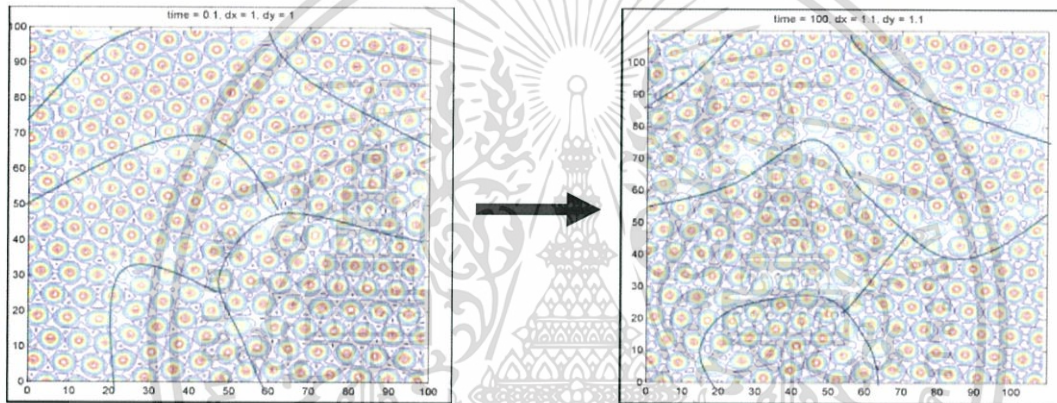
รูปที่ 4.8 Phase diagram ของเฟสฟิลต์คริสตัลโมเดล

4.3.2 สรุปและวิเคราะห์ผลที่ได้จากการรบกวนระบบด้วยวิธีต่างๆ

จากการที่เรารบกวนระบบด้วยการใส่ Strain ใน 4 รูปแบบ ซึ่งจะทำให้ได้ผลลัพธ์ในแต่ละรูปแบบ ดังนี้

4.3.2.1 Hydrostatic expansion

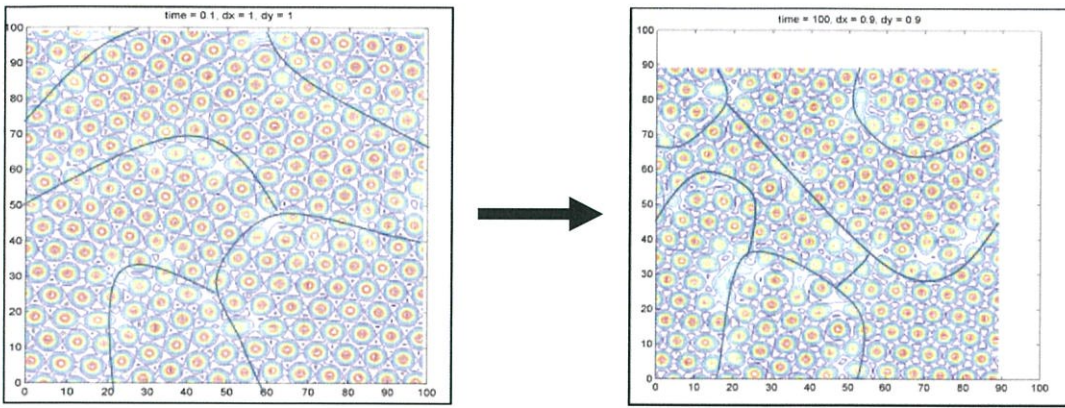
จากรูปที่ 4.9 จะพบว่าเมื่อทำการรบกวนระบบด้วยวิธี Hydrostatic expansion นั้น จะทำให้ระบบที่เวลา 100 เกิด Dislocation เพื่อที่จะปรับตัวกับ Strain ที่ใส่เข้าไปในระบบ ซึ่งทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงของขอบเกรนและเกิดการเปลี่ยนแปลงทางจุลภาคขึ้นกับระบบ



รูปที่ 4.9 แสดงลักษณะของระบบที่เปลี่ยนแปลงเมื่อทำการใส่ Strain เข้าไปในระบบในรูปแบบ Hydrostatic expansion โดยเปรียบเทียบที่เวลา 0.1 และที่เวลา 100

4.2.2.2 Hydrostatic compression

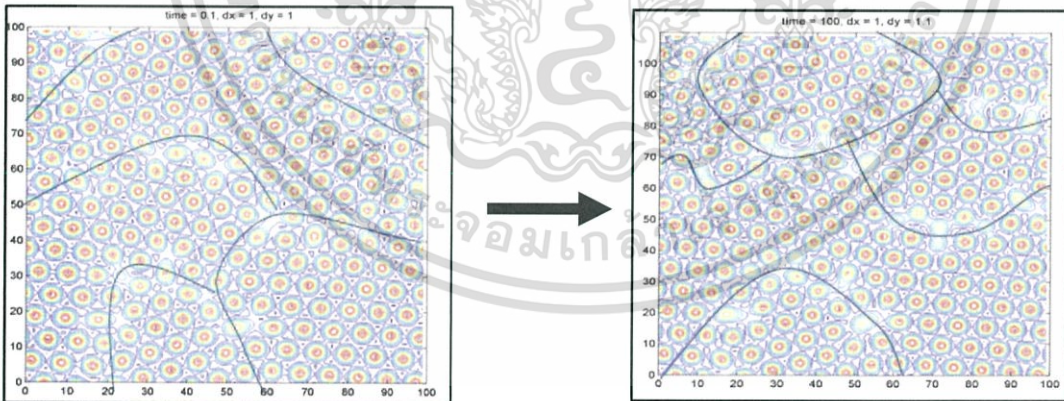
จากรูปที่ 4.10 จะพบว่าเมื่อทำการรบกวนระบบด้วยวิธี Hydrostatic compression นั้น จะทำให้ระบบที่เวลา 100 เกิด Dislocation เพื่อที่จะปรับตัวกับ Strain ที่ใส่เข้าไปในระบบ และเกิดการบีบอัดของขอบเกรนเนื่องจากวิธีนี้เป็นวิธีที่เราทำการบีบอัดระบบทั้งแนวแกน x และแกน y ซึ่งทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงของขอบเกรนและเกิดการเปลี่ยนแปลงทางจุลภาคขึ้นกับระบบ



รูปที่ 4.10 แสดงลักษณะของระบบที่เปลี่ยนแปลงเมื่อทำการใส่ Strain เข้าไปในระบบในรูปแบบ Hydrostatic compression โดยเปรียบเทียบที่เวลา 0.1 และที่เวลา 100

4.3.2.3 Uniaxial tensile deformation

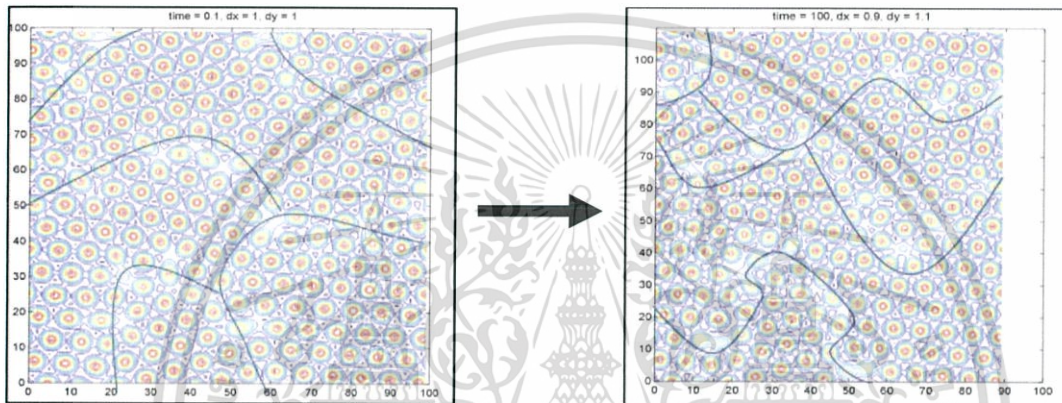
จากรูปที่ 4.11 จะพบว่าเมื่อทำการรบกวนระบบด้วยวิธี Uniaxial tensile deformation นั้น จะทำให้ระบบที่เวลา 100 เกิด Dislocation เพื่อที่จะปรับตัวกับ Strain ที่ใส่เข้าไปในระบบและทำให้ระบบเกิดการบิดในทิศทางเฉพาะ ซึ่งทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงของขอบเกรนและเกิดการเปลี่ยนแปลงทางจุลภาคขึ้นกับระบบ



รูปที่ 4.11 แสดงลักษณะของระบบที่เปลี่ยนแปลงเมื่อทำการใส่ Strain เข้าไปในระบบในรูปแบบ Uniaxial tensile deformation โดยเปรียบเทียบที่เวลา 0.1 และที่เวลา 100

4.3.2.4 Biaxial deformation

จากรูปที่ 4.12 จะพบว่าเมื่อทำการรบกวนระบบด้วยวิธี Biaxial deformation นั้น จะทำให้ระบบที่เวลา 100 เกิด Dislocation เพื่อที่จะปรับตัวกับ Strain ที่ใส่เข้าไปในระบบและจะพบว่าขอบเกรนนั้นมีทิศทางหดตัวเข้าทางแกน x อย่างเห็นได้ชัด ซึ่งเกิดจากการที่เราทำการใส่ Strain ให้เกิดการบีบอัดในแนวแกน x และจะทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงของขอบเกรนและเกิดการเปลี่ยนแปลงทางจุลภาคขึ้นกับระบบ



รูปที่ 4.12 แสดงลักษณะของระบบที่เปลี่ยนแปลงเมื่อทำการใส่ Strain เข้าไปในระบบในรูปแบบ Biaxial deformation โดยเปรียบเทียบที่เวลา 0.1 และที่เวลา 100

บทที่ 5

สมบัติการไหลหนืด

จากการที่ได้ทำการทดลองเปลี่ยนค่าตัวแปรต่างๆเพื่อให้ระบบเกิดการเปลี่ยนแปลงและจากการที่ได้ทำการรบกวนระบบโดยการใส่ Strain ในรูปแบบต่างๆ ต่อไปจะทำการทดสอบคุณสมบัติการไหลหนืดด้วยการจำลองในโมเดลเฟสฟิลต์คริสตัลเพื่อพิสูจน์ว่าเฟสฟิลต์คริสตัลนั้นสามารถใช้เป็นโมเดลในการจำลองคุณสมบัติของวัสดุได้จริง โดยมีหัวข้อในการศึกษาดังนี้

5.1 วิธีการดำเนินงาน

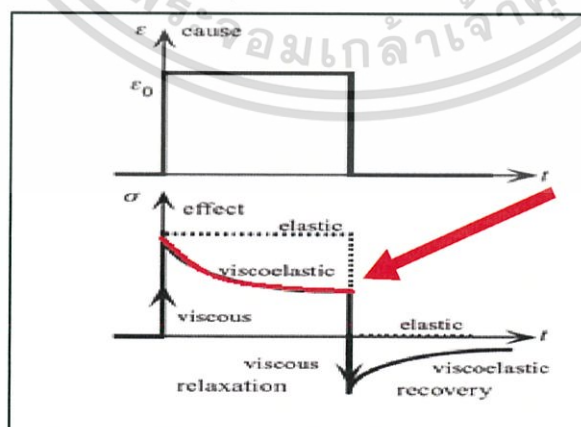
5.1.1 การทดลองโดยการใส่ความเครียดเข้าไปในระบบเพื่อทดสอบคุณสมบัติความไหลหนืดของวัสดุในแบบจำลอง

5.2 ผลการดำเนินงาน

5.3 สรุปและวิเคราะห์ผลการดำเนินงาน

5.1 การทดลองโดยการใส่ความเครียดเข้าไปในระบบเพื่อทดสอบคุณสมบัติความไหลหนืดของวัสดุในแบบจำลอง

ทำการทดสอบวัสดุให้เป็นไปตามทฤษฎีของวัสดุที่มีความเป็น Viscoelasticity ดังรูปที่ 5.1 ซึ่งเมื่อวัสดุได้รับ Strain เข้าไปในปริมาณหนึ่งซึ่งเป็นปริมาณคงที่ จะทำให้วัสดุเกิดการออกแรงต้าน ซึ่งก็คือ Stress แต่จะเป็นแรงต้านที่ลดน้อยลงเรื่อยๆจนถึงค่าคงที่หนึ่ง



รูปที่ 5.1 แสดงพฤติกรรมของวัสดุที่มีคุณสมบัติ Viscoelasticity และช่วงสีแดงคือช่วงที่ทำการทดลอง

ศึกษา

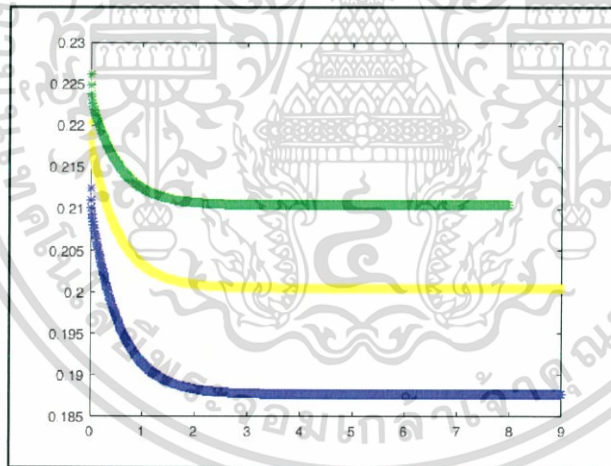
ทำการทดลองโดยการใส่ค่า Strain เข้าไปในระบบเพื่อทดสอบว่าวัสดุในแบบจำลองเฟสฟิลด์ คริสตัลโมเดลและวัสดุจริงจะมีความแตกต่างในพฤติกรรมคุณสมบัติ Viscoelasticity หรือไม่ โดยจะทำการเปรียบเทียบด้วยการใส่ค่า Strain ที่แตกต่างกันดังนี้

- Strain_1 = 0.01 (สีน้ำเงิน)
- Strain_2 = 0.03 (สีเหลือง)
- Strain_3 = 0.05 (สีเขียว)

และจากนั้นจะทำการวาดกราฟระหว่าง Stress และ time ออกมาเพื่อเปรียบเทียบกับกราฟตามทฤษฎี

5.2 ผลการดำเนินงาน

จากการที่เราได้ทำการใส่ความเครียดเป็นค่าคงที่เข้าไปในระบบเพื่อทดสอบคุณสมบัติความไหลหนืดของวัสดุในแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล จากนั้นได้ทำการจำลองสมการในโปรแกรม MATLAB เพื่อทำการวาดกราฟเปรียบเทียบค่าความเค้นที่เกิดขึ้นเมื่อเวลาผ่านไป ซึ่งเป็นผลจากการที่ใส่ความเครียดเข้าไปในระบบด้วยค่าที่แตกต่างกัน จะทำให้ได้กราฟตามรูปที่ 5.2



รูปที่ 5.2 กราฟระหว่าง Stress และเวลา (time = 10)

5.3 สรุปและวิเคราะห์ผลการดำเนินงาน

เราได้ทำการทดลองคุณสมบัติ Viscoelasticity ของวัสดุในแบบจำลองเฟสฟิลต์คริสตัลเพื่อที่จะทำการเปรียบเทียบว่าวัสดุในแบบจำลองเฟสฟิลต์คริสตัลนั้น มีพฤติกรรมเช่นเดียวกับวัสดุจริงตามทฤษฎีหรือไม่ และได้แสดงผลลัพธ์ตามรูปที่ 5.2 สามารถสรุปผลได้ดังนี้

เส้นสีน้ำเงินคือเส้นที่ใส่ Strain = 0.01

สีเหลืองคือเส้นที่ใส่ Strain = 0.03

สีเขียวคือเส้นที่ใส่ Strain = 0.05

จากผลการทดลองจะทำให้เราทราบว่า เมื่อทำการรบกวนระบบด้วยการใส่ความเครียดเข้าไปในระบบ ระบบจะมีการใช้แรงต้านค่าหนึ่ง ซึ่งก็คือความเค้นและแรงต้านเหล่านั้นจะมีการลดลงเรื่อยๆ จนไปถึงค่าคงที่ค่าหนึ่ง โดยไม่ว่าเราจะใส่ ความเครียดไปด้วยค่าใดก็ตาม ระบบก็จะมีพฤติกรรมในช่วงการผ่อนของคุณสมบัติยืดหยุ่น เช่นเดียวกันทุกค่า ต่างกันเพียงค่า ความเค้นที่คงที่เมื่อเข้าสู่จุดสมดุลเท่านั้น ซึ่งก็เป็นสิ่งที่ควรเกิดขึ้น เนื่องจากการที่ได้ทำการใส่ความเครียด ในค่าที่แตกต่างกัน

บทที่ 6

สรุปและวิเคราะห์ผลการดำเนินงาน

จากการที่ได้ทำการทดลองในบทที่ 3 (การศึกษาเบื้องต้น) บทที่ 4 (การศึกษาการเสีรูป) และบทที่ 5 (สมบัติการไหลหนืด) สามารถสรุปและวิเคราะห์ผลการดำเนินงานได้ดังนี้

จากการศึกษาเบื้องต้นนั้น จะทำการศึกษาศมการการแพร่ซึ่งมีความคล้ายคลึงกับสมการเฟสฟิลต์คริสตัล แต่มีความยุ่งยากในการศึกษาน้อยกว่า จึงเลือกสมการการแพร่มาเป็นสมการที่ใช้ในการศึกษาเบื้องต้น และจากการทดลองเปรียบเทียบวิธีการที่มีความเสถียรในการใช้งานที่สุด ทำให้ทราบว่า วิธีอิมพิซิิตไทม์สเตปปิงของฟูเรียสเปคตรัล(Implicit time stepping of Fourier Spectral Method) เป็นวิธีที่มีความเสถียรในการใช้งาน เกิด Error ที่น้อย เหมาะแก่การนำไปศึกษาในขั้นตอนต่อไปมากที่สุด

ในส่วนที่สอง จะทำการศึกษาการเสีรูปของแบบจำลองเฟสฟิลต์คริสตัลโดยการใช้ความเครียดเข้าไปรบกวนระบบ เพื่อทำการดูว่าระบบนั้นสามารถประพฤติตัวในแบบจำลองได้เหมือนกับการเกิดในวัสดุจริงตามทฤษฎีได้หรือไม่ ซึ่งผลลัพธ์ที่ออกมาทำให้พบว่า เมื่อทำการรบกวนระบบด้วยวิธีต่าง ๆ นั้น จะทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงของขอบเกรนและเกิดการเปลี่ยนแปลงทางจุลภาคขึ้นกับระบบ ซึ่งทำให้ทราบว่า โมเดลเฟสฟิลต์คริสตัลนั้นสามารถประพฤติตัวได้เหมือนกับวัสดุจริงตามทฤษฎี และจะนำโมเดลเฟสฟิลต์คริสตัลนี้ไปใช้ในการศึกษาขั้นตอนต่อไปได้

ในส่วนสุดท้ายนั้น จะทำการศึกษาสมบัติการไหลหนืดในแบบจำลองเฟสฟิลต์คริสตัล โดยเราได้ทำการใส่ความเครียดเข้าไปในระบบด้วยค่าคงที่ต่างๆ เพื่อที่จะทดสอบคุณสมบัติความไหลหนืด และผลที่ได้จะพบว่า เมื่อทำการรบกวนระบบด้วยการใส่ความเครียดเข้าไปในระบบ ระบบจะมีการใช้แรงต้านค่าหนึ่ง ซึ่งก็คือความเค้นและแรงต้านเหล่านั้นจะมีการลดลงเรื่อยๆ จนไปถึงค่าคงที่ค่าหนึ่ง โดยไม่ว่าเราจะใส่ความเครียดไปด้วยค่าใดก็ตาม ระบบก็จะมีพฤติกรรมในช่วงการผ่อน ของคุณสมบัติยืดหยุ่น เช่นเดียวกันทุกค่า ซึ่งทำให้เราทราบว่า แบบจำลองเฟสฟิลต์คริสตัลของเราสามารถใช้ในการจำลองคุณสมบัติความไหลหนืดของวัสดุได้จริง

ดังนั้นสามารถสรุปได้ว่า วัสดุในแบบจำลองเฟสฟิล์มคริสตัลนั้น เมื่อนำมาทดสอบคุณสมบัติความไหลหนืด จะทำให้พบพฤติกรรมแบบเดียวกันกับวัสดุจริงตามทฤษฎี ดังนั้นเราจะสามารถบรรลุวัตถุประสงค์ทั้งสามข้อที่ตั้งไว้ได้ นั่นคือการทดสอบความสามารถในการสร้างเฟสที่เป็นผลึกของแบบจำลองเฟสฟิล์มคริสตัล การทดสอบความสามารถในการทำนายการเสถียรของวัสดุในแบบจำลองเฟสฟิล์มคริสตัล และการทดสอบความสามารถในการจำลองคุณสมบัติการไหลหนืดของแบบจำลองเฟสฟิล์มคริสตัล



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

เอกสารอ้างอิง

- [1] N. Provatas, J.A. Dantzig, B. Athreya, P. Chan, P. Stefanovic, N. Goldenfeld, and K.R. Elder, Using the Phase-Field Crystal Method in the Multi-Scale Modeling of Microstructure Evolution, 2007
- [2] K.R. Elder and M. Grant, Modeling Elastic and Plastic Deformations in Nonequilibrium Processing Using Phase Field Crystal, 2004
- [3] Roderic Lakes, Viscoelastic Materials, Cambridge University Press, 2009
- [4] K.R. Elder, N. Provatas, J. Berry, P. Stefanovic and M. Grant, Phase-field crystal modeling and classical density functional theory of freezing
- [5] จีราพร บวรสิทธิชัย, เรณู วัฒนแก้วเพชร, ศิริลักษณ์ ศรีบุระเดช, (2542). “โปรแกรมผลต่างสี่บเนื่องสำหรับสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย”



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Solving Diffusion Equation using Explicit Time Stepping in One Dimension

```
clc; close all; clear;
```

Input

```
D=1;  
dt=1e-4;  
dx=1;  
n=100;  
time=10;  
m=time/dt;  
cj=zeros(1,n);
```

Initial Density Profile

```
cj(40:60) = 1;  
cj_start=cj;  
left = cj(1);  
right = cj(n);
```

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)= left;  
    cjp1(n) = right;  
    cj=cjp1;  
    figure(1)  
    plot(cj_start,'b');  
    plot(cj,'r-');  
    title(['time = ', num2str(' '*dt)]);  
end
```

Published with MATLAB® R2013b

รูปที่ ๘ 1 คำสั่งที่ใช้ในโปรแกรม MATLAB ของสมการการแพร่โดยวิธีแบบเอกซ์พลิตไทม์สเตปปิง (Explicit Time Stepping) ใน 1 มิติ

Solving Diffusion Equation using Implicit Time Stepping in One Dimension

```
clc; close all; clear;
```

Input

```
D=1;  
dt=0.1;  
dx=1;  
n=100;  
time=1;  
m=time/dt;  
cj=zeros(1,n);  
cjm=zeros(1,n);  
cjmp1=zeros(1,n);  
tol=1e-10;
```

```
cj(40:60)=1;  
cj_start=cj;  
left=cj(1);  
right=cj(n);
```

```
for j=1:m  
    error = 1;  
    while error>tol  
        for i = 2:n-1  
            cjmp1(i)=left;  
            cjmp1(n)=right;  
            cj=cjmp1;  
            cjm(1)=left;  
            cjm(n)=right;  
            cj=cjm;  
            figure(1);  
            plot(cj_start,'b'); hold on  
            plot(cj,'r-*'); hold off  
            title(['time = ',num2str(j*dt)]);  
        end  
    end
```

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

Published with MATLAB® R2013b

รูปที่ ๒ คำสั่งที่ใช้ในโปรแกรม MATLAB ของสมการการแพร่โดยวิธีแบบอิมพลิตไทม์สเตปปิง

(Implicit Time Stepping) ใน 1 มิติ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Solving Diffusion Equation using Fourier Transform in Two Dimensions

```
clc; close all; clear;
```

Input

```
D=1;  
dt=0.1;  
nx=100;  
ny=100;  
Lx=100;  
Ly=100;  
time=200;
```

Array and Value Initialization

```
ch1=zeros(nx,ny);  
kx=zeros(nx,ny);  
ky=zeros(nx,ny);  
xx=zeros(nx,ny);  
yy=zeros(nx,ny);  
dx=Lx/nx;  
dy=Ly/ny;  
x=0:dx:Lx-dx;  
y=0:dy:Ly-dy;  
m=time/dt;  
for i = 1:nx  
    for j = 1:ny  
        xx(i,j) = x(i);  
        yy(i,j) = y(j);  
    end  
end  
  
for i = 1:nx  
    x_coor = x(i);  
    for j=1:ny  
        y_coor = y(j);  
        if (x_coor > 40 && x_coor < 60) && (y_coor > 40 && y_coor < 60)  
            ch1(i,j) = 1;  
        end  
    end  
end  
ch_start=ch1;  
kx=2*pi/Lx*[0:1:nx/2-1 -nx/2:1:-1];  
ky=2*pi/Ly*[0:1:ny/2-1 -ny/2:1:-1];  
for i = 1:nx  
    for j = 1:ny  
        kx(i,j) = kx(i);  
        ky(i,j) = ky(j);  
    end  
end  
k2=kx.^2 + ky.^2;
```

Initial condition

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

```
ch2=fftn(ch1);
```

Calcula ๘ 4 and Plot

```
for i = 1:m;  
    ch3=ch2./(1+(dt.*k2));  
    ch2=ch3;  
    if mod(i,100) == 0  
        ch1 = ifftn(ch3);  
        figure(1);  
        mesh(real(ch1));  
        title(['time = ',num2str(i*dt)]);  
        zlim([0 1.2])  
        pause(0.1);  
    end  
end
```

Published with MATLAB® R2013b

รูปที่ ๘ 3 คำสั่งที่ใช้ในโปรแกรม MATLAB ของวิธีฟูเรียร์ทรานฟอร์ม (Fourier Transform) ใน 2 มิติ



Deformation using the Phase Field Crystal

```
clc; close all; clear;
```

Input

```
dx=pi/4;  
dy=pi/4;  
nx=100;  
ny=100;  
dt=0.001;  
r=-1/4;  
Lx=100;  
Ly=100;  
psi_bar=-0.285;  
time=1000;  
it_save=10;  
it_print=100;  
strain_x=0.01;  
strain_y=0.01;
```

Array and Value Initialization

```
x = 0:dx:Lx-dx;  
y = 0:dy:Ly-dy;  
psi = zeros(nx,ny);  
kx = zeros(nx,ny);  
ky = zeros(nx,ny);  
xx = zeros(nx,ny);  
yy = zeros(nx,ny);  
dx=Lx/nx;  
dy=Ly/ny;  
m=time/dt;  
if abs(floor(m)-m)>0  
    error('dt is not correct.')end  
for i = 1:nx  
    for j = 1:ny  
        xx(i,j) = x(i);  
        yy(i,j) = y(j);  
    end  
end  
end
```

Deformation Section

```
dx_array = zeros(m+1,1);  
dy_array = zeros(m+1,1);  
Lx_array = zeros(m+1,1);  
Ly_array = zeros(m+1,1);  
dx_array(1) = dx;  
dy_array(1) = dy;  
Lx_array(1) = Lx;  
Ly_array(1) = Ly;  
for i = 2:m+1  
    dx_new = strain_x*dt+dx;
```

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

```

dy_new = strain_y*dt+dy;
dx_array(i) = dx_new;
dy_array(i) = dy_new;
Lx_array(i)=dx_new*nx;
Ly_array(i)=dy_new*ny;
dx = dx_new;
dy = dy_new;
end

```

Initial condition

```

temp = rand(nx,ny);
psi = temp-sum(sum(temp))/nx/ny + psi_bar;
kx=2*pi/Lx*[0:1:nx/2-1 -nx/2:1:-1];
ky=2*pi/Ly*[0:1:ny/2-1 -ny/2:1:-1];
for i = 1:nx
    for j = 1:ny
        kx(i,j) = kx(i);
        ky(i,j) = ky(j);
    end
end
k2=kx.^2 + ky.^2;
psi_hat=fftn(psi);

```

Calculation and Plot

```

data_index = 1;
for i = 1:m;
    dx = dx_array(i);
    dy = dy_array(i);
    Lx = Lx_array(i);
    Ly = Ly_array(i);
    kx=2*pi/Lx*[0:1:nx/2-1 -nx/2:1:-1];
    ky=2*pi/Ly*[0:1:ny/2-1 -ny/2:1:-1];
    for ii = 1:nx
        for jj = 1:ny
            kx(ii,jj) = kx(ii);
            ky(ii,jj) = ky(jj);
        end
    end
    k2=kx.^2 + ky.^2;
    psi = ifftn(psi_hat);
    psi_3 = psi.^3;
    psi_hat_3 = fftn(psi_3);
    psi_hat_new = (psi_hat-k2.*psi_hat_3*dt)/...
        ((1+dt.*(1+r).*k2)-(2.*dt.*k2.^2)+(dt.*k2.^3));
    psi_hat = psi_hat_new;
    psi = ifftn(psi_hat);
    if mod(i,it_print) == 0
        fprintf('iteration = %i \n',i)
        figure(1);
        grid on;
        x = 0:dx:Lx-dx;
        y = 0:dy:Ly-dy;

```



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
 ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

```

for ii = 1:nx
    for jj = 1:ny
        xx(ii,jj) = x(ii);
        yy(ii,jj) = y(jj);
    end
end
contour(xx,yy,real(psi))
axis equal
xlim([0 max(Lx_array)])
ylim([0 max(Ly_array)])
title(['time = ',num2str(i*dt),', dx = ', num2str(dx), ', dy = ' num2str(dy)];
zlim([0 1.2])
file_image = ['PFC' num2str(i) '.png'];
print(file_image,'-dpng','-r300)
pause(0.1)

```

```

end
if mod(i,it_save) == 0
    Data(data_index).psi = psi;
    Data(data_index).i = i;
    data_index = data_index + 1;
end
end

```

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

มิติ แบบใส่แรงบีบและขยาย

Phase Field Crystal in Two Dimensions

Input

```

clc; close all; clear;

```

```

dx = pi/4;
dy = pi/4;
nx = 100;
ny=100;
dt=0.005;
r=-1/4;
Lx=100;
Ly=100;
psi_bar=-0.285;
time=1000;
it_save = 10;
it_print = 100;

```

Array and Value Initialization

```

x = 0:dx:Lx-dx;
y = 0:dy:Ly-dy;
psi = zeros(nx,ny);
kx = zeros(nx,ny);
ky = zeros(nx,ny);

```

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

```

xx = zeros(nx,ny);
yy = zeros(nx,ny);
dx=Lx/nx;
dy=Ly/ny;
m=time/dt;
for i = 1:nx
    for j = 1:ny
        xx(i,j) = x(i);
        yy(i,j) = y(j);
    end
end
end

```

Initial Condition

```

temp = rand(nx,ny);
psi = temp-sum(sum(temp))/nx/ny + psi_bar;
kx=2*pi/Lx*[0:1:nx/2-1 -nx/2:1:-1];
ky=2*pi/Ly*[0:1:ny/2-1 -ny/2:1:-1];
for i = 1:nx
    for j = 1:ny
        kxx(i,j) = kx(i);
        kyy(i,j) = ky(j);
    end
end
k2=kxx.^2 + kyy.^2;
psi_hat=fft2n(psi);

```

Calculation and Plot

```

data_index = 1;
for i = 1:m;
    psi = ifftn(psi_hat);
    psi_3 = psi.^3;
    psi_hat_3 = fftn(psi_3);
    psi_hat_new = (psi_hat-k2.*psi_hat_3.*dt)/...
        ((1+dt.*(1+r).*k2)-(2.*dt.*k2.^2)+(dt.*k2.^3));
    psi_hat = psi_hat_new;
    psi = ifftn(psi_hat);
    if mod(i,it_print) == 0
        figure(1);
        grid on;
        imagesc(real(psi));
        contour(real(psi))
        axis equal
        title(['time = ',num2str(i*dt)]);
    end
end

```

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

```

zlim([0 1.2])
pause(0.1);
end
if mod(i,it_save) == 0
    Data(data_index),psi = psi;
    Data(data_index),i = i;
    data_index = data_index + 1;
end
end

```

ผ 9

Published with MATLAB® R2013b

รูปที่ ผ 5 คำสั่งที่ใช้ในโปรแกรม MATLAB ของวิธีแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล (Phase Field Crystal) ใน

2 มิติ



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
 ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา หรือต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Testing Viscoelasticity in Phase Field Crystal

```
clc; close all; clear;
```

Input

```
strain_x = 0;  
strain_y = 0;  
it_save = 10;  
A = 4;  
q = 1;  
unit_x = 1;  
unit_y = 1;  
Lx=2*pi/q * unit_x;  
Ly=2*pi*sqrt(3)/q * unit_y;  
nx=16 * unit_x;  
ny=16 * unit_y;  
time=100;  
dt_equil=0.01;  
r=-1;  
psi_bar=-0.285;
```

```
dx=Lx/nx;  
dy=Ly/ny;  
x = 0:dx:Lx-dx;  
y = 0:dy:Ly-dy;  
for i = 1:nx  
    for j = 1:ny  
        xx(i,j) = x(i);  
        yy(i,j) = y(j);  
    end  
end  
psi = psi_bar + A*(cos(q*xx).*cos(q*yy/sqrt(3)) + 1/2*cos(2*q*yy/sqrt(3)));
```

Initial condition

Precalculation

```
kx=2*pi/Lx*[0:1:nx/2-1 -nx/2:1:-1];  
ky=2*pi/Ly*[0:1:ny/2-1 -ny/2:1:-1];  
for i = 1:nx  
    for j = 1:ny  
        kx(i,j) = kx(i);  
        ky(i,j) = ky(j);  
    end  
end  
k2=kx.^2 + ky.^2;  
psi_hat=fft2(psi);
```

Relaxation (Prepare equilibrium psi)

```
continue_loop = true;  
loop_index = 1;  
fprintf('Relaxation Loop - Equilibrium \n');fprintf(' \n')  
dt = dt_equil;  
while continue_loop
```

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

```

psi_old = psi;
psi_3 = psi.^3;
psi_hat_3 = fftn(psi_3);
psi_hat_new = (psi_hat-k2.*psi_hat_3*dt)/...
    ((1+dt.*(1+r).*k2)-(2.*dt.*k2.^2)+(dt.*k2.^3));
psi_hat = psi_hat_new;
psi = ifftn(psi_hat);

if mod(loop_index,1000) == 0
    norm_psi = norm(psi_old-psi);
    if norm(psi_old-psi) < 1e-12
        continue_loop = false;
    end
    fprintf('iteration = %0i, norm = %0e \n',loop_index,norm_psi)
end
loop_index = loop_index + 1;
end
fprintf(' \n');fprintf(' \n');fprintf(' \n');fprintf(' \n')

dx_new = dx*(1+strain_x);
dy_new = dy*(1+strain_y);
Lx_new=dx_new*nx;
Ly_new=dy_new*ny;
x = 0:dx_new:Lx_new-dx_new;
y = 0:dy_new:Ly_new-dy_new;
ln.Lx_new = Lx_new;
ln.Ly_new = Ly_new;
ln.dx_new = dx_new;
ln.dy_new = dy_new;
for i = 1:nx
    for j = 1:ny
        xx(i,j) = x(i);
        yy(i,j) = y(j);
    end
end
end
kx=2*pi/Lx_new*[0:1:nx/2-1 -nx/2:1:-1];
ky=2*pi/Ly_new*[0:1:ny/2-1 -ny/2:1:-1];
for i = 1:nx
    for j = 1:ny
        kx(i,j) = kx(i);
        ky(i,j) = ky(j);
    end
end
end
k2=kx.^2 + ky.^2;

```

Strain Add

Relaxation loop

```

fprintf('Relaxation Loop - Strained'); fprintf(' \n');fprintf(' \n');
di = 1;
continue_loop = true;
P = 1e100;
dt = dt_strain;
while continue_loop

```

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
 ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

```

time = (di-1)*dt;
P_old = P;
psi = ifftn(psi_hat);
psi_3 = psi.^3;
psi_hat_3 = fftn(psi_3);
psi_hat_new = (psi_hat-k2.*psi_hat_3.*dt)/...
    ((1+dt.*(1+r).*k2)-(2.*dt.*k2.^2)+(dt.*k2.^3));
psi_hat = psi_hat_new;
psi = ifftn(psi_hat);
[f,mu] = calculate_f_mu(psi_hat,k2,r);
Pt = -f+mu*psi_bar;
P = integration_2D(x,y,Pt);
intf=integration_2D(x,y,f)/Lx/Ly;
Data(di).intf=intf;
Data(di).time=i*dt;
Data(di).P = P;
Data(di).time = time;
Data(di).di = di;
di = di + 1;
if mod(di,100) == 0
    norm_P = norm(P-P_old);
    if norm_P < 1e-10
        continue_loop = false;
    end
    fprintf('iteration = %6i, norm_P = %6e \n',di,norm_P)
end
end

```

Published with MATLAB® R2013b

รูปที่ ผ 6 คำสั่งที่ใช้ในโปรแกรม MATLAB ของการทดสอบคุณสมบัติการไหลหนืดในแบบจำลองเฟสฟิลต์คริสตัล (Phase Field Crystal)