

На правах рукописи

Стародумов Илья Олегович

**Математическое моделирование структурно-фазовых
превращений модифицированным методом кристаллического
фазового поля**

Специальность 05.13.18 – математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Екатеринбург — 2019

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор
Александров Дмитрий Валерьевич

Официальные оппоненты: **Васин Михаил Геннадьевич**,
доктор физико-математических наук,
ФГБУН Институт физики высоких давлений
им. Л. Ф. Верещагина РАН (г. Троицк),
ведущий научный сотрудник Теоретического отдела

Голод Валерий Михайлович,
кандидат технических наук, доцент,
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» (г. Санкт-Петербург),
доцент кафедры «Металлургические и литейные технологии»

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Удмуртский государственный университет», г. Ижевск

Защита состоится 15 мая 2019 г. в 13:00 часов на заседании диссертационного совета Д 212.285.25 на базе ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по адресу: 620000, г. Екатеринбург, пр. Ленина, 51, зал заседаний диссертационных советов, комн. 248.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», по адресу: <http://lib.urfu.ru/mod/data/view.php?id=51&rid=288947>.

Автореферат разослан «__» _____ 2019 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета
Д 212.285.25,
доктор физико-математических наук,
профессор

В.Г. Пименов

Общая характеристика работы

Актуальность темы и степень её разработанности. В диссертации исследован современный подход к моделированию образования и роста кристаллической структуры веществ – метод кристаллического фазового поля в модифицированной (гиперболической) постановке (МКФП).

Традиционный метод кристаллического фазового поля в параболической постановке (КФП) основан на подходе, предложенном К.Элдером в 2002 году¹. Этот подход, как альтернативный существовавшим, учитывает периодическую атомную структуру за счет моделирования атомной плотности в кристаллической фазе, периодически изменяющейся в пространстве. Из-за периодического характера атомного поля плотности в модели КФП, естественно, возникают упругие эффекты, множественные ориентации кристалла, а также, зарождение и миграция дислокаций. Основным преимуществом метода КФП перед стандартным атомистическим моделированием (например, молекулярной динамикой) является возможность моделирования эволюции структуры на продолжительных отрезках времени при относительно небольшом использовании компьютерных ресурсов и относительно малых затратах физического времени расчета. КФП-модель применяется для связи атомистического дискретного моделирования (на основе методов молекулярной динамики, Монте-Карло и теории функционала плотности) и традиционного ФП-метода (метода фазового поля). Традиционный ФП-метод описывает фазовый переход с монотонно изменяющимся фазовым полем. КФП-модель описывает фазовый переход с периодически изменяющимся фазовым полем, определяемым локально усредненной по времени атомной плотностью, учитывающей периодичность кристаллической решетки. Любое нарушение решетки или появление дефектов увеличивает свободную энергию системы и непрерывно изменяет распределение атомной плотности, что дает возможность моделировать дефекты в кристаллах и упругие искажения решетки. КФП-модель была предложена для моделирования физических процессов и явлений, включающих процессы на масштабе атомных длин (упругость, пластичность, дислокационное перемещение и т.д.) и на временах диффузии эволюции структур и дефектов². С физической точки зрения КФП-модель основана на теории Ландау-Бразовского фазового превращения в периодическую структуру и анализе функционала свободной энергии Свифта-Хоэнберга³. Последний сформулирован для описания конвекции Рэлея-Бенара. Модель КФП может быть, также, получена из других моделей, таких как теория функционала

¹*Elder K. R., Katakowski M., Haataja M., Grant M. Modeling Elasticity in Crystal Growth // Physical Review Letters. 2002. Vol. 88. P. 245701.*

²*Provatas N., Elder K. Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering / ed. by Wiley-VCH. Wiley-VCH, 2010. P. 312.*

³*Бразовский С. Фазовый переход изотропной системы в неоднородное состояние // ЖЭТФ. 1975. Т. 68, № 1. С. 175–185; Swift J., Hohenberg P. C. Hydrodynamic fluctuations at the convective instability // Phys. Rev. A. 1977. Vol. 15, issue 1. P. 319–328; Cross M. C., Hohenberg P. C. Pattern formation outside of equilibrium // Rev. Mod. Phys. 1993. Vol. 65, issue 3. P. 851–1112.*

плотности⁴ и теория функции атомной плотности⁵. Поэтому КФП-модель может быть рассмотрена как модель Свифта-Хоэнберга с консервативным параметром порядка, которая применяется для описания переходов жидкость-кристалл, отвердевания коллоидов, плавления, перемещения дислокаций и вязких явлений, формирования стекла, эпитаксиального роста, подплавления межфазовых границ, поверхностной перестройки и зеренно-граничных эффектов. Структурирование кристаллических поверхностных слоев с учетом упругих эффектов, также, описывается с помощью КФП-модели, что на микро- и мезо- масштабах хорошо подходит для континуального описания кристаллов льда.

В работах⁶ была представлена модификация подхода К. Элдера, в котором уравнение кристаллического фазового поля рассматривается уже не в параболической, а в гиперболической форме. Такая модифицированная, или гиперболическая КФП-модель учитывает медленные и быстроменяющиеся переменные, инерционный вклад в изменение скорости атомной плотности в динамике кристаллической решетки, и, таким образом, позволяет моделировать медленные (локально-равновесные) и высокоскоростные (локально неравновесные) фазовые переходы из метастабильных и неустойчивых состояний.

Модифицированная КФП-модель (МКФП) описывается дифференциальным уравнением в частных производных 6-го порядка по пространству и 2-го порядка по времени. Аналитические методы решения применимы к уравнениям моделей МКФП только для специальных случаев, например, в динамике – для режима движения фронта кристаллической плотности в виде бегущей с постоянной скоростью волны⁷. В связи с этим возникает необходимость использования численных алгоритмов, вычислительных схем и анализа численных решений. В литературе приводятся исследования, которые показывают, что для решения уравнения МКФП-модели применим подход⁸, основанный на обобщенном

⁴Ramakrishnan T. V., Yussouff M. First-principles order-parameter theory of freezing // Phys. Rev. B. 1979. Vol. 19, issue 5. P. 2775–2794; Evans R. The nature of the liquid-vapour interface and other topics in the statistical mechanics of non-uniform, classical fluids // Advances in Physics. 1979. Vol. 28, no. 2. P. 143–200; Singh Y. Density-functional theory of freezing and properties of the ordered phase // Physics Reports. 1991. Vol. 207, no. 6. P. 351–444.

⁵Jin Y. M., Khachatryan A. G. Atomic density function theory and modeling of microstructure evolution at the atomic scale // Journal of Applied Physics. 2006. Vol. 100, no. 1. P. 013519.

⁶Galenko P., Danilov D., Lebedev V. Phase-field-crystal and Swift-Hohenberg equations with fast dynamics // Physical Review E. 2009. Vol. 79, no. 5. P. 051110; Galenko P., Elder K. Marginal stability analysis of the phase field crystal model in one spatial dimension // Physical Review B. 2011. Vol. 83, no. 6. P. 064113.

⁷Galenko P., Sanches F. I., Elder K. Traveling wave profiles for a crystalline front invading liquid states: Analytical and numerical solutions // Physica D: Nonlinear Phenomena. 2015. Vol. 308. P. 1–10.

⁸Galenko P. K., Gomez H., Kropotin N. V., Elder K. R. Unconditionally stable method and numerical solution of the hyperbolic phase-field crystal equation // Phys. Rev. E. 2013. Vol. 88, issue 1. P. 013310; Gomez H., Nogueira X. An unconditionally energy-stable method for the phase field crystal equation // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2012. Vol. 249. P. 52–61.

методе Галеркина и на теории изогеометрического анализа⁹. Решая этим методом МКФП-уравнение, чего ранее в полной мере еще не делалось, становится возможным смоделировать различные стабильные и метастабильные кристаллические структуры для различных условий их формирования.

Таким образом, разработка численного метода и основанного на нем эффективного программного комплекса, позволяющего моделировать динамику кристаллических структур методом МКФП, является актуальной задачей. Численное моделирование методом кристаллического фазового поля представляет ряд проблем, таких, например, как дискретизация нелинейных дифференциальных операторов высокого порядка и аппроксимация границ раздела фаз, которые перемещаются по вычислительной области. Численное решение уравнения кристаллического фазового поля (КФП) в трехмерной постановке было подробно рассмотрено в исследованиях¹⁰, однако, в силу вычислительной сложности задачи, алгоритм применялся только для вычислительных доменов минимального размера и для простейшей динамики. Модифицированное уравнение кристаллического фазового поля (МКФП) в недавних работах¹¹ исследовалось только методами математического анализа на существование аттракторов и устойчивость решения. В работе¹² было представлено численное решение задачи МКФП для двумерного случая.

Целью данной работы является разработка эффективного безусловно устойчивого алгоритма численного решения уравнений кристаллического фазового поля в модифицированной постановке. На базе разработанного алгоритма создан и исследован программный комплекс, позволяющий осуществлять операции пре- и постпроцессинга, а также, производить непосредственное решение задачи на высокопроизводительных параллельных вычислителях.

К целям настоящей диссертации, также, относятся: решение тестовых задач для верификации разработанных методов и программ; демонстрация эффективности имплементации в программном комплексе технологии параллельных вычислений.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие **задачи**:

⁹Cottrell J. A., Hughes T. J., Bazilevs Y. Isogeometric analysis: toward integration of CAD and FEA. John Wiley & Sons, 2009.

¹⁰Jaatinen A., Ala-Nissila T. Extended phase diagram of the three-dimensional phase field crystal model // Journal of Physics: Condensed Matter. 2010. Vol. 22, no. 20. P. 205402; Jaatinen A. Modeling materials with phase field crystal models. 2010.

¹¹Wang C., Wise S. M. Global smooth solutions of the three-dimensional modified phase field crystal equation // Methods and Applications of Analysis. 2010. Vol. 17, no. 2. P. 191–212; Grasselli M., Wu H. Well-posedness and long-time behavior for the modified phase-field crystal equation // Mathematical Models and Methods in Applied Sciences. 2014. Vol. 24, no. 14. P. 2743–2783; Grasselli M., Wu H. Robust exponential attractors for the modified phase-field crystal equation // Discrete & Continuous Dynamical Systems - A. 2015. Vol. 35. P. 2539–2564.

¹²Galenko P. K., Gomez H., Kropotin N. V., Elder K. R. Unconditionally stable method and numerical solution of the hyperbolic phase-field crystal equation // Phys. Rev. E. 2013. Vol. 88, issue 1. P. 013310.

- 1) Исследовать современную модификацию метода кристаллического фазового поля (МКФП) в гиперболической форме, позволяющую описывать структурно-фазовые трансформации вещества при сильном переохлаждении и с учетом метастабильных состояний;
- 2) Исследовать численный алгоритм решения уравнений МКФП с использованием теории изогометрического анализа;
- 3) Реализовать вышеуказанный алгоритм в программном комплексе, позволяющем производить моделирование динамики структурно-фазовых превращений с использованием высокопроизводительных параллельных вычислителей;
- 4) Протестировать вычислительный алгоритм и программный комплекс, оценить их эффективность и область применимости.

Научная новизна:

- 1) Реализован алгоритм численного решения модифицированного уравнения кристаллического фазового поля (МКФП) в трехмерной постановке с использованием теории изогометрического анализа;
- 2) Разработан программный комплекс, позволяющий моделировать структурно-фазовые превращения методом МКФП в том числе на высокопроизводительных вычислительных кластерах. Исследована эффективность проведения расчетов с использованием указанного программного комплекса;
- 3) С помощью указанного программного комплекса методом МКФП получены трехмерные расчеты кристаллических структур, проведено их сопоставление с описанными в литературе результатами аналитических исследований.

Теоретическая и практическая значимость Результаты исследований, представленные в настоящей диссертации, имеют большое практическое значение как для дальнейших научных исследований, так и для некоторых производственных задач. С использованием разработанного программного комплекса могут быть проведены численные эксперименты по образованию кристаллических решеток из метастабильной жидкости, численные эксперименты по динамике отбора параметра решетки. Результаты решения этих задач позволят оценить метод кристаллического фазового поля в модифицированной постановке (МКФП) при решении динамических задач образования кристаллических структур из метастабильного или неустойчивого состояния, что является актуальной научной задачей современного материаловедения. Диссертационные разработки важны для моделирования новых материалов и их последующего синтеза из метастабильного и неравновесного состояний с целью их использования в науках о материалах, биофизике, медицинской физике и других прикладных науках. Кроме этого, программный комплекс, разработанный в рамках обсуждаемых исследований, может являться основой для решения прикладных задач в металлургическом производстве. Среди них определение условий технологического процесса для получения металлических отливок с

заданными свойствами, прогнозирование дефектов кристаллической структуры при литье, оценка качества специальных покрытий и многие другие. Повышение эффективности производства за счет системного использования численного моделирования технологических процессов и последующей оптимизации может существенно повысить рентабельность предприятия, улучшить качество продукции и способствовать освоению ее новых видов.

Методология и методы исследования. В основе работы лежит теория изометрического анализа, которая позволяет разрабатывать алгоритмы численного решения для нелинейных дифференциальных систем высокого порядка. Разработка алгоритма решения уравнений кристаллического фазового поля в модифицированной форме велась в рамках неявного конечно-элементного метода Галеркина.

Программный комплекс написан с использованием языков программирования C, C++, Python. Решатель программного комплекса использует компоненты библиотек PETSc и PetIGA, что позволило использовать технологию MPI для организации параллельных расчетов на многопроцессорных вычислителях. Постпроцессор программного комплекса использует инструменты библиотеки VTK для обработки результатов расчетов и их дальнейшей визуализации.

Основные положения, выносимые на защиту:

- 1) Разработан безусловно устойчивый численный алгоритм решения трехмерных уравнений кристаллического фазового поля в модифицированной форме.
- 2) Разработан программный комплекс, реализующий вышеуказанный алгоритм и позволяющий проводить численное моделирование динамики кристаллической структуры во время структурно-фазовых превращений с использованием высокопроизводительных параллельных вычислителей.
- 3) Проведены тестовые расчеты, которые позволяют верифицировать численный алгоритм и программный комплекс для решения задач методом кристаллического фазового поля в модифицированной форме.

Достоверность. Достоверность представленных в диссертации разработок обеспечивается приводимыми строгими математическими преобразованиями, доказательствами и сопоставлением результатов вычислительных экспериментов с результатами исследований ведущих научных групп.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на следующих международных конференциях: 5th European Conference on Crystal Growth (ECCG5) (Болонья, Италия, 09.09.2015 – 11.09.2015); 1st Ural Workshop on Parallel, Distributed, and Cloud Computing for Young Scientists (Екатеринбург, Россия, 17.11.2015 – 17.11.2015);

Национальный Суперкомпьютерный Форум (НСКФ - 2015) (Переславль - Залесский, Россия, 24.11.2015 – 27.11.2015);

Всероссийская конференция с международным участием «Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии» (КРИС - 2016) (Ижевск, Россия,

06.04.2016 – 09.04.2016);

5th International Eurasian Conference on Mathematical Sciences and Applications (IECMSA - 2016) (Белград, Сербия, 16.08.2016 – 19.08.2016);

Third International Conference on Analysis and Applied Mathematics (ICAAM 2016) (Алматы, Казахстан, 07.09.2016–10.09.2016);

Национальный Суперкомпьютерный Форум (НСКФ - 2016) (Переславль - Залесский, Россия, 29.11.2016 – 02.12.2016);

Structural and phase transformations in materials: theory, computer modelling and experiment (SPTM - 2017) (Екатеринбург, Россия, 23.03.2017 – 27.03.2017);

13th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2017) (Салоники, Греция, 21.04.2017 – 25.04.2017);

International Conference on Modern Trends in Manufacturing Technologies and Equipment 2017 (ICMTME 2017) (Севастополь, Россия, 11.09.2017 – 15.09.2017);

Национальный Суперкомпьютерный Форум (НСКФ - 2017) (Переславль - Залесский, Россия, 28.11.2017 – 01.12.2017);

6th European Conference on Crystal Growth (ECCG6) (Варна, Болгария, 16.09.2018 – 20.09.2018);

Личный вклад. Диссертация является работой, выполненной автором самостоятельно. В диссертации обобщаются результаты исследований автора, как личных, так и выполненных в сотрудничестве. Автор принимал участие в постановке задачи кристаллического фазового поля в модифицированной форме (МКФП) для дальнейших численных расчетов. Во время научной командировки в университет г. А Корунья (Испания) автор использовал задел научной группы профессора Гомеза и разработал алгоритм численного решения для уравнений МКФП, основанный на неявном конечно-элементном подходе и теории изогео-метрического анализа. В дальнейшем автором была разработана программная реализация этого алгоритма, послужившая основой программного комплекса. Далее автором самостоятельно была проведена серия вычислительных экспериментов на высокопроизводительных вычислительных кластерах, сделан анализ полученных результатов и соответствующие выводы. Изыскания автора диссертационной работы поддержаны советом по грантам Президента Российской Федерации и автору назначена стипендия Президента РФ по направлению "Стратегические информационные технологии, включая вопросы создания суперкомпьютеров и разработки программного обеспечения" (СП-80.2018.5).

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в печатных изданиях, 9 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК. По результатам работы получено 1 свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. По теме диссертации издана 1 монография.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения. Полный объем диссертации **106** страниц текста, включая **21** рисунок и 1 таблицу. Список литературы содержит **169** наименований.

Содержание работы

Во **введении** представлены принципы моделирования структурно-фазовых превращений в веществе методом кристаллического фазового поля; обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы; приводится обзор научной литературы по изучаемой проблеме, формулируется цель, ставятся задачи работы, излагается научная новизна и практическая значимость представляемой работы.

Первая глава посвящена исследованию модифицированной модели кристаллического фазового поля. В главе рассмотрена проблема моделирования структурно-фазовых превращений при кристаллизации вещества на атомистическом пространственном уровне. Отмечено, что, как правило, все традиционные атомистические подходы сталкиваются с проблемой чрезвычайно высокой вычислительной сложности постановок, в которых задача решалась бы на диффузионных масштабах времени. Для решения такой проблемы в начале 2000-х годов была предложена модель кристаллического фазового поля (КФП или PFC в англоязычном варианте). Однако, стандартная модель КФП имеет существенные ограничения (учитывает только малые степени свободы системы), что не позволяет успешно использовать ее для моделирования кристаллизации вдали от положения термодинамического равновесия, а также, при значительном переохлаждении. С физической точки зрения это означает, например, существенные ограничения при исследовании динамики периодической структуры в зоне неустойчивости Экхауза (Рисунок 1).

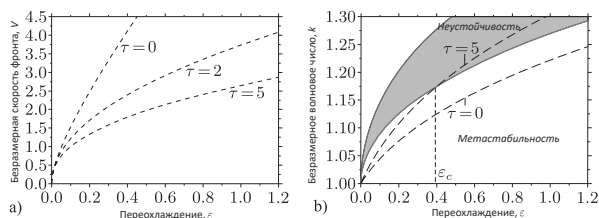


Рис. 1 — Количественные прогнозы модели PFC: а) скорость фронта V и б) волновое число k на фронте; Оценка предельной устойчивости делается для параболической модели (КФП) с $\tau = 0$ и гиперболической модели (МКФП) с $\tau = 2$ и $\tau = 5$. Затемненная область на рисунке (b) соответствует области неустойчивости по Экхаузу.

В настоящей работе основное внимание уделяется моделированию быстро движущихся границ раздела фаз, описание которых достигается объединением методов быстрых фазовых преобразований и методологии КФП. Действительно, быстрая фронтальная динамика протекает, когда движущая сила, как разность свободной энергии между (мета)устойчивым периодическим твердым телом и первоначально неустойчивой фазой очень велика, что происходит, когда структурные трансформации инициируются при температуре, существенно ниже

равновесной температуры фазового перехода. Эти условия приводят к быстрому структурно-фазовому переходу, когда скорость фронта сравнима со скоростью атомной диффузии или скоростью локальной структурной релаксации. Феноменологически быстрые фазовые переходы описываются с использованием ядер памяти. Предположим, что эволюция исследуемой системы характеризуется параметром порядка $\phi(\vec{r}, t)$ с радиус-вектором \vec{r} точки в объемной системе и временем t . Необходимо описать все этапы перехода от неустойчивого к метастабильному или стабильному фазовому состоянию на феноменологическом уровне, включая как микроскопические периоды времени (сравнимые с временем процессов взаимодействия отдельных атомов), так и макроскопическое время (сравнимое с временем процессов эволюции всей системы). Это можно сделать, используя взаимосвязь между движущей силой $\delta\mathcal{F}/\delta\phi$ (заданной изменением свободной энергии $\mathcal{F}(\phi)$ по параметру порядка ϕ и эволюцией параметра порядка). Для консервативной динамики фазового перехода при постоянном нормальном давлении (с сохраняющимся параметром порядка) можно определить динамическое уравнение структурно-фазового перехода через функцию памяти системы, соответствующее локальной экспоненциальной релаксации:

$$\frac{\partial\phi_c}{\partial t} = \nabla \cdot \int_{-\infty}^t M(t-t^*) \nabla \left(\frac{\delta\mathcal{F}(t^*, \vec{r}^*)}{\delta\phi} \right) dt^* \cdot, \quad (1)$$

где $M(t-t^*) = \tau_R^{-1} M(0) e^{[-(t-t^*)/\tau_R]}$ - функция памяти, которая имеет смысл корреляции между динамикой системы в последний момент времени t^* и текущей динамикой в момент времени t , а τ_R - характерное время релаксации при переходе от инерционного к диффузионному динамическому режиму. Эта величина характеризует время, необходимое для достижения диссипативной динамики без учета инерции. Константа $M(0)$ выражает мобильность для момента времени $t = t^*$.

Уравнение (1) можно записать так:

$$\tau_R \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot \left[M(0) \nabla \left(\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\phi} \right) \right]. \quad (2)$$

Используя функционал свободной энергии в форме Бразовского

$$\mathfrak{F}(\phi) = \int d\vec{r} \left\{ \frac{\lambda}{2} \phi (q_0^2 + \nabla^2)^2 \phi - a \Delta B_0 \frac{\phi^2}{2} + v \frac{\phi^4}{4} \right\}, v > 0, \quad (3)$$

подставляя его в уравнение динамики (2) и преобразовывая параметры можно выписать уравнение кристаллического фазового поля со слагаемым в левой части, отвечающим за инерцию системы и позволяющим корректно описать локальную релаксацию вдали от положения термодинамического равновесия или при глубоком переохлаждении. В уравнении (3) \vec{r} - вектор объема системы, $a > 0$ - параметр периодичности системы, q_0 - модуль волнового вектора, дающий минимум \mathfrak{F} (волновое число), и λ - системные параметры, $\Delta B_0 \propto -\varepsilon \propto T/T_c - 1 -$

контролирующий параметр, задающий движущую силу кристаллизации (перехождение), T_c – критическая температура, T – фактическая температура. При $\Delta B_0 > 0$ соответствующее гомогенной структуре распределение ϕ становится неустойчивым к формированию периодической структуры для некоторых значений волнового вектора \vec{q} . Используя замену переменных

$$\tilde{t} = tM(0)\lambda q_0^6, \quad \tilde{\nabla} = q_0 \nabla, \quad \tilde{\phi} = \phi \sqrt{\frac{v}{\lambda q_0^4}}, \quad (4)$$

а также

$$\tau = \tau_R M(0)\lambda q_0^6, \quad \varepsilon = \frac{a\Delta B_0}{\lambda q_0^4}, \quad (5)$$

опустив ”тильду” полученное уравнение может быть в итоге представлено в виде:

$$\tau \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^2 \left\{ \left[-\varepsilon + (1 + \nabla^2)^2 \right] \phi + \phi^3 \right\}. \quad (6)$$

Уравнение (6) является модифицированным уравнением кристаллического фазового поля (в гиперболической форме) или уравнением МКФП. Такое уравнение описывает одновременно и волновой, и диффузионный режимы для кристаллического фазового поля ϕ .

Вторая глава посвящена исследованию вычислительного метода, именуемого в литературе изогометрический анализ (Isogeometric analysis в англоязычной литературе), а также – построению на базе изогометрического анализа алгоритма решения уравнения кристаллического фазового поля в модифицированной постановке (МКФП). Метод изогометрического анализа является сравнительно новым конечно-элементным методом, обобщающим традиционный подход метода Галеркина за счет возможности использования принципов NURBS-геометрии (геометрии, описываемой неравномерными рациональными B -сплайнами) на уровне пространств базисных функций. Фундаментальные исследования этого метода были мотивированы повсеместным переходом инженерного проектирования на САПР, где промышленным стандартом, де-факто, являлась геометрия в формализме NURBS. Сложные геометрические формы и повышенные требования к гладкости объектов, зачастую, не могли в полной мере быть описаны в формализме традиционных методов конечных элементов, что затрудняло моделирование и вычислительный анализ. В 2000-х годах была представлена теория изогометрического анализа, которая показала не только преимущества при работе с САПР, но и возможности решения дифференциальных уравнений высокого порядка более эффективно и точно. В главе представлены основные этапы построения вычислительного пространства методом изогометрического анализа от вычислительной сетки до отдельного конечного элемента. Приводятся принципы построения базиса на основе NURBS-функций. Эти основы позволяют модифицировать конечно-элементный

метод Галеркина и применить его для решения уравнения МКФП. В качестве базисных функций метода конечных элементов используются NURBS-функции вида:

$$R_i^p(\xi) = \frac{N_{i,p}(\xi)w_i}{W(\xi)}, \quad (7)$$

где $W(\xi)$ определяется уравнением вида

$$W(\xi) = \sum_{i=1}^n N_{i,p}(\xi)w_i. \quad (8)$$

В уравнении (8) w_i – вес соответствующего узла, а $N_{i,p}(\xi)$ – стандартный B -сплайн базис, задаваемый в соответствии с формулой Кокс – де Бора:

$$N_{i,0}(\xi) = \begin{cases} 1 & \text{если } \xi_i \leq \xi < \xi_{i+1} \\ 0 & \text{для всех остальных } \xi \end{cases} \quad (9)$$

$$N_{i,p}(\xi) = \frac{\xi - \xi_i}{\xi_{i+p} - \xi_i} N_{i,p-1}(\xi) + \frac{\xi_{i+p+1} - \xi}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+1}} N_{i+1,p-1}(\xi), \quad p > 0. \quad (10)$$

В уравнениях (9),(10) $\xi_i \in R^1$ – i -й узел сетки конечных элементов, i –индекс узла, $i = 1, 2, \dots, n + p + 1$, p –порядок полинома.

В диссертации показано, что в таком базисе могут быть построены уравнения поверхностей и трехмерных тел. Также, показано, что производные базисных NURBS-функций тоже являются NURBS-функциями и составляют, в свою очередь, базис, через который можно определить производные вычисляемых функций. Более того, показано важное свойство NURBS кривых, поверхностей и тел степени p , которое следует непосредственно из свойств их базисных функций: они имеют непрерывные " $p - 1$ "-е производные при отсутствии повторяющихся узлов. В общем случае можно утверждать, что кривая, поверхность или тело будет иметь по крайней мере столько непрерывных производных в окрестности любого узла конечного элемента, сколько таких производных имеют базисные функции (в совокупности) в окрестности этого узла. При этом базисные NURBS-функции изогометрического анализа могут обеспечивать любую глобальную гладкость аппроксимации. Рассмотрим постановку задачи численного решения уравнения кристаллического фазового поля в модифицированной (гиперболической) постановке. Дифференциальное уравнение МКФП может быть сформулировано следующим образом:

$$\tau \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^2 \mu. \quad (11)$$

Химический потенциал μ задается следующим образом:

$$\mu(\phi) = \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi} = \phi^3 + \alpha \phi^2 + (1 - \varepsilon)\phi + 2\nabla^2 \phi + \nabla^4 \phi, \quad (12)$$

где функционал свободной энергии в одномодовом приближении описывается так:

$$\mathcal{F}[\phi, \nabla\phi, \nabla^2\phi] = \int_{\Omega} \left[f(\phi) - |\nabla\phi|^2 + \frac{1}{2}(\nabla^2\phi)^2 \right] d\Omega. \quad (13)$$

Однородная часть свободной энергии задается уравнением:

$$f(\phi) = \frac{1-\epsilon}{2}\phi^2 + \frac{\alpha}{3}\phi^3 + \frac{1}{4}\phi^4. \quad (14)$$

В уравнениях (11) – (14) $\Omega \in R^3$ обозначает пространство произвольного открытого гексаэдрального домена, τ – время релаксации потока $J = -\nabla\mu$ до его стационарного состояния, $\epsilon = (T_c - T)/T_c$ – переохлаждение; T и T_c – температура и критическая температура, соответственно, α – коэффициент, определяющий меру метастабильности системы и величину энергетического барьера между гомогенной и кристаллической фазами. Рассмотрим далее решение следующей задачи: для заданной области Ω , временного интервала $]0, T[$ и $\phi_0 : \Omega \rightarrow R$ найти функцию $\phi : \Omega \times [0, T] \rightarrow R$, удовлетворяющую уравнениям:

$$\begin{cases} \tau \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^2 \mu & \text{на } \Omega \times]0, T[, \\ \phi(\mathbf{x}, 0) = \phi_0(\mathbf{x}) & \text{на } \Omega, \end{cases} \quad (15)$$

а также – периодическим граничным условиям во всех направлениях. Рассмотрим постановку задачи (15) в слабой форме. Для этого определим функциональное пространство тестовых $\mathcal{X} = \mathcal{V}(\Omega)$, и весовых функций $\mathcal{Y} = \mathcal{V}(\Omega)$. Тогда, умножив обе части уравнения на некоторую пробную функцию w и проинтегрировав уравнение по Ω с учетом граничных условий, можно сформулировать вариационную задачу, эквивалентную (15): найти $\phi \in \mathcal{X}$ такую, что $\forall w \in \mathcal{Y}$,

$$B(w, \phi) = F(w), \quad (16)$$

где

$$\begin{aligned} B(w, \phi) &= \int_{\Omega} w \left(\tau \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) d\Omega + \int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla \phi F''(\phi) d\Omega - \\ &- \int_{\Omega} 2\nabla^2 w \nabla^2 \phi d\Omega + \int_{\Omega} \nabla (\nabla^2 w) \cdot \nabla (\nabla^2 \phi) d\Omega \end{aligned} \quad (17)$$

и

$$F(w) = 0. \quad (18)$$

Уравнение (17) накладывает необходимое условие $\mathcal{V} = \mathcal{H}^3$, где \mathcal{H}^3 – пространство Соболева квадратично интегрируемых функций с квадратично интегрируемыми первой, второй и третьей производными.

Для пространственной дискретизации задачи определим конечно-размерные аппроксимации пространств тестовых и весовых функций \mathcal{X}_h и \mathcal{Y}_h такие, что $\mathcal{X}_h \subset \mathcal{X}$ и $\mathcal{Y}_h \subset \mathcal{Y}$. Тогда в терминах конечных элементов вариационную задачу (16) можно записать так: найти функцию $\phi_h \in \mathcal{X}_h$ такую, что $\forall w_h \in \mathcal{Y}_h$

$$B(w_h, \phi_h) = F(w_h), \quad (19)$$

где

$$\phi_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{A \in I} \phi_A(t) N_A(\mathbf{x}), \quad w_h(\mathbf{x}) = \sum_{A \in I} w_A N_A(\mathbf{x}). \quad (20)$$

В уравнениях (20) функции N_A – базисные функции, заданные на Ω , а I – глобальный индекс параметрического пространства. Для того, чтобы дискретные функциональные пространства \mathcal{X}_h и \mathcal{Y}_h являлись пространствами Соболева \mathcal{H}^3 , необходимо, чтобы базисные функции N_A были, как минимум, C^2 -непрерывными. Для интегрирования по времени в вычислительном алгоритме использован обобщенный α -метод, который является обобщением метода Ньюмарка в форме «предиктор-корректор». Ранние исследования обобщенного α -метода, представленные в литературе¹³, показали, что он позволяет добиваться безусловной устойчивости и высокого порядка точности.

Третья глава посвящена вычислению кристаллических структур модифицированным методом кристаллического фазового поля. Возможность проведения таких вычислений обеспечивается разработанным в рамках диссертации численным конечно-элементным методом, использующим изогометрический анализ для пространственной аппроксимации и обеспечивающим безусловную устойчивость.

Первая задача, рассматриваемая в главе, исследует сходимость решения уравнения МКФП к структурам, описываемым аналитически и представленным на параметрической структурной диаграмме ”средняя атомная плотность — переохлаждение”. В качестве референтной диаграммы была выбрана диаграмма из работы¹⁴ для случая одномодового представления свободной энергии. Такая диаграмма предсказывает области образования равновесных структур типа: гомогенная (жидкая) фаза, объемно-центрированная кубическая ОЦК-структура (ВСС в англоязычной литературе), а также структуры ”стержни”(rods в англоязычной литературе) и ”полосы”(stripes в англоязычной литературе). Кроме того, на диаграмме представлены области равновесного сосуществования структур разных типов. Для каждого характерного участка структурной диаграммы была выбрана пара параметров ”средняя атомная плотность”и ”переохлаждение”. Для этих параметров были проведены вычисления равновесной стационарной

¹³Erlicher S., Bonaventura L., Bursi O. S. The analysis of the generalized-alpha method for non-linear dynamic problems // Computational Mechanics. 2002. Vol. 28, no. 2. P. 83–104.

¹⁴Jaatinen A., Ala-Nissila T. Extended phase diagram of the three-dimensional phase field crystal model // Journal of Physics: Condensed Matter. 2010. Vol. 22, no. 20. P. 205402.

структуры. Полученные результаты совпали с данными равновесной структурной диаграммы, что позволяет судить о справедливости модели МКФП и о корректной сходимости используемого вычислительного метода.

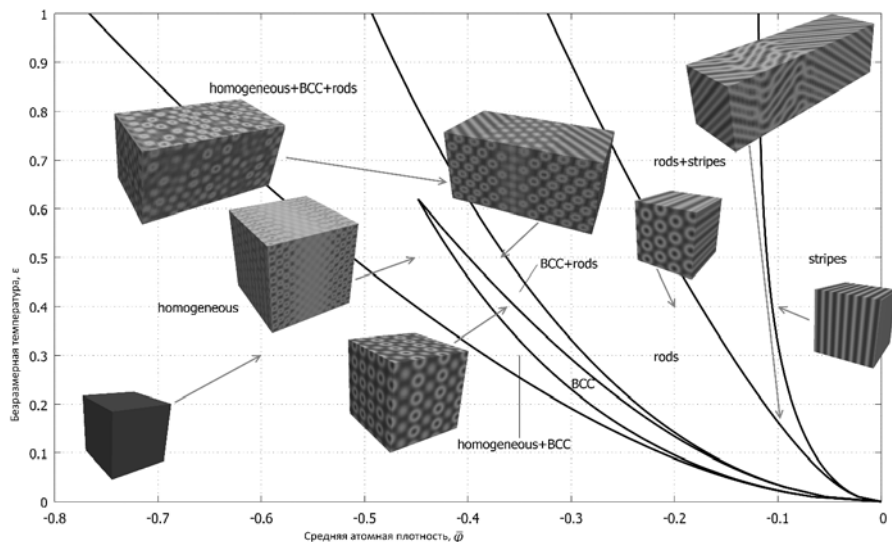


Рис. 2 — Рассчитанные структуры, сопоставленные со структурной диаграммой «безразмерное переохлаждение - относительная атомная плотность».

Вторая рассматриваемая задача заключалась в исследовании формирования нерегулярных структур при варьировании размера вычислительного домена и вида начального возмущения системы (начальных условий). Для этого были проведены вычислительные эксперименты, которые показали, что минимизация функционала свободной энергии может приводить не только к состояниям, соответствующим его глобальному минимуму, но и к локальным метастабильным структурам. Увеличение размеров вычислительного домена ведет за собой увеличение числа возможных распределений в нем атомной плотности ϕ для каждого момента времени. Предположительно увеличивается и вероятность попадания системы в метастабильную область. Различные виды начальных условий, также, существенно влияют на вероятность образования метастабильных структур, что подтверждается вычислительными экспериментами. Эти выводы могут служить обоснованием для учета в модели МКФП дополнительного аддитивного компонента, отвечающего за стохастические колебания поля атомной плотности. Такие колебания способны выводить систему из метастабильных состояний и позволят ей достаточно быстро релаксировать до достижения глобального равновесия. Это позволит адаптировать модель МКФП к внешним термодинамическим шумам и точнее описывать динамику кристаллизации

в натуральных экспериментах. Некоторые детали исследования стохастического аддитивного компонента модели МКФП приводятся в монографии автора диссертации.

Наконец, третья задача, представленная в главе, посвящена исследованию пространственной аппроксимации нестационарного решения уравнения МКФП. Показано, что для качественной аппроксимации периодической структуры, описываемой решением уравнения МКФП, необходимо учитывать периодические колебания поля атомной плотности как в равновесной части структуры, так и на фронте кристаллизации. Даже небольшие колебания поля атомной плотно-

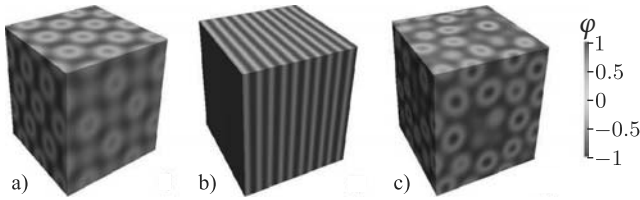


Рис. 3 — Установившиеся структуры для различных видов начальных условий: (а)-Линейное начальное распределение, (б)-Плоский фронт, (с)-Точечное начальное распределение.

сти на границе раздела жидкой и кристаллической фазы имеют существенное значение с физической точки зрения и, как следствие, влияют на качество получаемого решения. Поэтому вычислительная сетка из конечных элементов должна с необходимым качеством аппроксимировать поле атомной плотности, в том числе колебания параметра решетки или расстояния между локальными пиками атомной плотности как на границе раздела жидкой и кристаллической фазы, так и внутри области с равновесной структурой. Серия вычислительных экспериментов позволила подтвердить гипотезу о том, что размер конечного элемента и, следовательно, шаг дискретизации должен быть выбран с учетом параметра решетки моделируемой структуры.

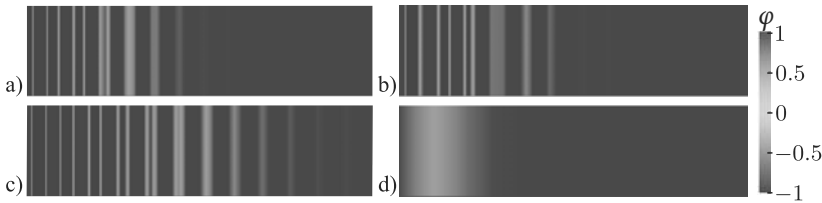


Рис. 4 — Процесс кристаллизации на момент времени 100 для различных линейных размеров конечного элемента: а) $\Delta x = 2$, б) $\Delta x = 5$, с) $\Delta x = 6$ и д) $\Delta x = 10$.

Четвертая глава

В главе рассмотрен зарегистрированный программный комплекс "PFC_Simulator", разработанный для моделирования процессов кристаллизации модифицированным методом кристаллического фазового поля (МКФП). Рассмотренный программный комплекс состоит из четырех основных модулей: препроцессора, основного вычислительного модуля, постпроцессора и модуля для дополнительных расчетов (рисунок 5). Работа с модулями осуществляется через интерфейс командной строки и посредством набора *bash – shell* скриптов.

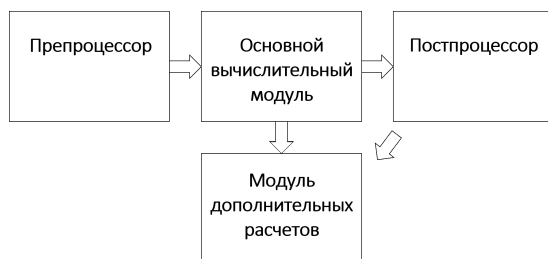


Рис. 5 — Схематичное представление структуры программного комплекса "PFC_Simulator"

Программный комплекс позволяет формулировать задачу в рамках модели МКФП, инициализировать вычислительные компоненты изогометрического анализа, проводить непосредственно вычисления, сохранять результаты расчетов и обрабатывать их для последующего анализа. Программный комплекс написан на языках программирования C и C++, реализация программного комплекса базируется на алгоритмических библиотеках PETSc и PetIGA. Средства постпроцессинга и дополнительные модули, также, используют программы на языке Python. Компиляция всех компонентов программного комплекса производится с помощью свободно распространяемых компиляторов. Программный комплекс может быть запущен на компьютерах с процессорами архитектуры x86 с распространенными версиями операционных систем Windows и Linux, имеется возможность производить расчеты в параллельном режиме на высокопроизводительных вычислителях (суперкомпьютерах) за счет использования технологии MPI. Все рассмотренные в диссертации расчеты проводились с использованием комплекса "PFC_Simulator". Разработанный программный комплекс был исследован на эффективность выполнения расчетов в параллельном режиме на многопроцессорном вычислительном кластере. Для оценки эффективности вычислительной программы была разработана серия экспериментальных задач. Были проведены 2 типа экспериментов с использованием гомогенной вычислительной установки: расчеты на одном вычислительном узле с изменением количества задействованных процессорных ядер и расчеты на разном количестве

полностью задействованных вычислительных узлов. Конфигурация оборудования была оптимизирована таким образом, чтобы минимизировать погрешность при измерении характеристик вычислительного процесса. Конфигурация вычислителя включала в себя 5 вычислительных узлов, соединенных сетью Infiniband QDR со скоростью 40 ГБ / с. Каждый вычислительный узел, состоит из двух 14-ядерных процессоров Intel E5-2697 v3 и 64 ГБ оперативной памяти DDR4. Все вычислительные узлы работали под управлением ОС SLES 11.3. Никаких дополнительных оптимизаций не производилось. Во всех экспериментах программа решала задачу для 1 шага по времени. Результаты исследования приведены на рисунке 6 и рисунке 7.

Результаты демонстрируют уменьшение необходимого времени как при увели-

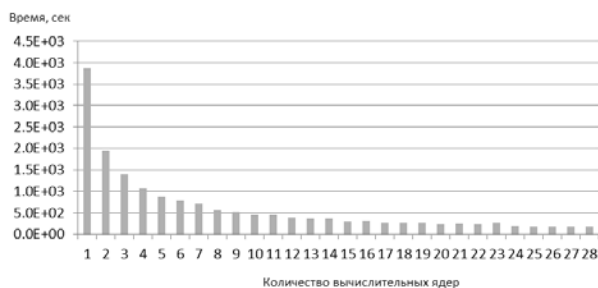


Рис. 6 — Расчетное время решения фиксированной задачи PFC на одном шаге по времени. Используются вычислительные ядра одного узла

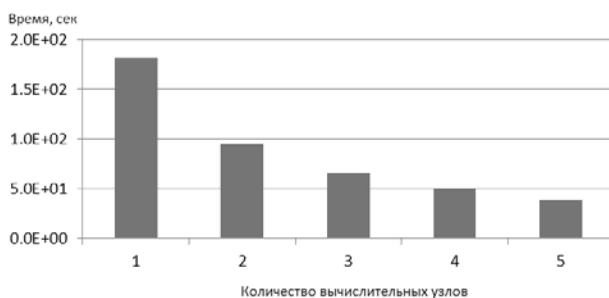


Рис. 7 — Расчетное время решения фиксированной задачи МКФП на одном шаге по времени. Используются все вычислительные ядра переменного количества узлов.

чения задействованных процессорных ядер одного узла, так и при увеличении

количества самих узлов. Кривая изменения затраченного времени в зависимости от объема вычислительных мощностей монотонна и убывает с увеличением мощности вычислительной установки. Учитывая высокую вычислительную сложность решаемой задачи, такие показатели позволяют считать, что вычислительный комплекс демонстрирует высокую эффективность при расчетах на многопроцессорном вычислительном кластере.

В **заключении** приведены основные результаты работы, которые заключаются в следующем:

- 1) Была исследована модель кристаллического фазового поля в модифицированной (гиперболической) форме (модель МКФП). МКФП является расширением базовой модели кристаллического фазового поля (КФП), позволяющей описывать структурно-фазовые превращения типа жидкость-кристалл на атомных пространственных масштабах и диффузионном масштабе времени в условиях сильного переохлаждения и высокоскоростной динамики кристаллизации. МКФП модель описывается дифференциальным уравнением в частных производных гиперболического типа шестого порядка по пространству и второго порядка по времени. Для решения такого уравнения сформулирован безусловно устойчивый неявный конечно-элементный вычислительный алгоритм, в основе которого лежат принципы изогометрического анализа для пространственной дискретизации и обобщенный α -метод для интегрирования по времени. Разработанный алгоритм обладает возможностями глобальной C^2 -непрерывной пространственной аппроксимации решения.
- 2) Разработан программный комплекс, реализующий вышеуказанный вычислительный алгоритм и позволяющий проводить численное моделирование динамики кристаллической структуры во время структурно-фазовых превращений с использованием высокопроизводительных параллельных вычислителей. Программный комплекс реализован с использованием свободно распространяемых алгоритмических библиотек PETSc и PetIGA. В программном комплексе содержатся: модули подготовки расчетной задачи (препроцессор), вычислительный модуль (реализация конечно-элементного вычислительного метода), модуль обработки результатов (постпроцессинг) и модуль дополнительных расчетов. Программный комплекс протестирован на многопроцессорном вычислителе, результаты исследования распараллеливания вычислений позволяют говорить о высоких показателях эффективности расчетов на высокопроизводительных кластерных системах. Программный комплекс зарегистрирован в Федеральной службе по интеллектуальной собственности (№2018617793) под наименованием Phase Field Crystal Simulator (PFC _ Simulator).
- 3) С помощью разработанного программного комплекса PFC _ Simulator проведены тестовые расчеты некоторых задач. На примере расчетов

трехмерных равновесных кристаллических структур была подтверждена справедливость модели МКФП для случая структурно-фазовых переходов вблизи положения равновесия. Результаты этих расчетов были сопоставлены со статической структурной диаграммой, полученной аналитически. Сопоставление показало высокий уровень соответствия аналитических выводов и результатов вычислительных экспериментов. Помимо этого, были проведены расчеты нерегулярных искаженных структурных образований, которые получались при варьировании ряда вычислительных параметров. Нашла свое подтверждение гипотеза о том, что данные нерегулярные образования являются метастабильной формой кристалла, образуемого по причине достижения локального минимума функционала свободной энергии системы. Показано, что вероятность появления подобных метастабильных структур может возрастать с увеличением размера вычислительной области. Таким образом, при исследовании сложных случаев кристаллизации может возникнуть необходимость внести в динамическое уравнение модели МКФП дополнительный стохастический терм, отвечающий за вибрацию поля атомной плотности. Такая модификация позволила бы преодолевать те области метастабильных состояний, которые не проявляются в натурных экспериментах из-за естественных термодинамических колебаний в структуре вещества. Наконец, последняя серия вычислительных экспериментов позволила оценить влияние характерного размера конечного элемента на качество аппроксимации решения. Показано, что существует критический размер конечного элемента, связанный с параметром решетки моделируемой системы. Моделирование кристаллизации с чрезмерно крупными конечными элементами приводит к резкой потере качества численного решения, что может повлечь за собой некорректный анализ результатов и ложные выводы.

Новизна результатов состоит в следующих положениях:

- 1) В диссертации представлен современный подход изометрического анализа для модификации конечно-элементного метода Галеркина. Использование этого метода для решения уравнения МКФП является новым и ранее представлено не было.
- 2) На базе разработанного вычислительного алгоритма создан новый программный комплекс, позволяющий производить расчеты как на персональном компьютере, так и на суперкомпьютерных кластерах с широким спектром используемых архитектур и системного программного обеспечения.
- 3) Проведены численные расчеты и серии вычислительных экспериментов, не представленные ранее в литературе. Эти исследования позволили сформулировать и подтвердить новые теоретические гипотезы, а также сделать выводы об области применимости модели МКФП.

Диссертационная работа имеет перспективы дальнейших исследований. Модель кристаллического фазового поля в модифицированной форме – сравнительно новая теория для описания структурно-фазовых переходов на атомном уровне. В литературе представлены единичные проекты, направленные на численные расчеты этим методом. В основном эти расчеты выполняются в двумерной постановке и оставляют открытыми перспективы моделирования сложной динамики кристаллизации из-за нерешенных вопросов градиентной устойчивости и качества пространственной аппроксимации. Также, во многих публикациях открытым остается вопрос возможности высокопроизводительных вычислений, что представляется неизбежной необходимостью при решении комплексных трехмерных задач. Дальнейшее развитие программного комплекса PFC_Simulator позволило бы проводить (по-видимому, ресурсоемкие) вычисления для решения трехмерных задач методом МКФП в комплексных, неординарных постановках. Такowymi, например, могут быть задачи об образовании дефектов в расчетных областях повышенной размерности, задачи о динамике фронта кристаллизации, динамике образования поликристаллических и метастабильных структур. Также, программный комплекс может быть дополнен модификациями модели МКФП, учитывающими, например, стохастические колебания атомной плотности, или позволяющими моделировать бинарные соединения. Интерес представляет и дальнейшее изучение концепции изогеометрического анализа для построения конечно-элементных методов. Например, открытым остается вопрос решения задачи МКФП этим методом в постановке с непериодическими граничными условиями в сферической расчетной области. Кроме того, актуальным является повышение производительности работы программного кода, реализующего вычислительный алгоритм. Для этого перспективным может стать исследование возможностей проприетарных компиляторов и аппаратных систем на основе архитектуры графических ускорителей.

Публикации автора по теме диссертации

Статьи, опубликованные в рецензируемых научных журналах и изданиях, определенных ВАК

1. *Starodumov I. O., Galenko P., Kropotin N., Alexandrov D. V.* Об аппроксимации периодического решения уравнения кристаллического фазового поля при расчетах методом конечных элементов // Программные системы: теория и приложения. — 2018. — Т. 4, № 39. — 265—278. (0.3 п.л./0.2 п.л.)
2. *Starodumov I., Alexandrov D., Pavlyuk E.* Influence of initial seed distribution on the pattern formation of the phase field crystals // AIP Conference Proceedings. — 2018. — Vol. 1997. — 020065. (Scopus, WoS) (0.3 п.л./0.2 п.л.)
3. *Starodumov I., Galenko P., Kropotin N., Alexandrov D.* Influence of initial seed distribution on the pattern formation of the phase field crystals // AIP Conference Proceedings. — 2017. — Vol. 1906. — 200006. (Scopus, WoS) (0.6 п.л./0.3 п.л.)

4. *Starodumov I., Ankudinov V., Galenko P.* Simulation of crystalline pattern formation by the MPFC method // MATEC Web of Conferences. — 2017. — Vol. 129. — 02035. (Scopus, WoS) (0.2 п.л./0.1 п.л.)
5. *Starodumov I., Galenko P., Alexandrov D., Kropotin N.* Influence of computational domain size on the pattern formation of the phase field crystals // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. — 2017. — Vol. 192, no. 1. — 012008. (Scopus, WoS) (0.3 п.л./0.2 п.л.)
6. *Starodumov I., Kropotin N.* Features in simulation of crystal growth using the hyperbolic PFC equation and the dependence of the numerical solution on the parameters of the computational grid // AIP Conference Proceedings. — 2016. — Vol. 1759. — 020136. (Scopus, WoS) (0.3 п.л./0.2 п.л.)
7. *Bueno J., Starodumov I., Gomez H., Galenko P., Alexandrov D.* Three dimensional structures predicted by the modified phase field crystal equation // Computational Materials Science. — 2016. — Vol. 111. — 310—312. (Scopus, WoS) (0.2 п.л./0.1 п.л.)
8. *Starodumov I., Pavlyuk E., Abramov S., Klyuev L., Galenko P., Alexandrov D.* The effectiveness of parallelizing an algorithm of the PFC equation solution using PetIGA library // Vestnik Udmurtskogo Universiteta. Matematika. Mekhanika. Komp'yuternye Nauki. — 2016. — Vol. 26, no. 3. — 445—450. (Scopus) (0.3 п.л./0.2 п.л.)
9. *Starodumov I., Pavlyuk E., Klyuev L., Kovalenko M., Medyankin A.* Analysis of the efficiency PETSc and PETIGA libraries in solving the problem of crystal growth // CEUR Workshop Proceedings. — 2015. — Vol. 1513. — 109—122. (Scopus) (0.3 п.л./0.25 п.л.)

Другие публикации

10. *Александров Д. В., Стародумов И. О., Павлюк Е. В., Иванов А. А.* Образование дефектных и метастабильных структур при моделировании фазовых переходов методом кристаллического фазового поля // Расплавы. — 2018. — Т. 2. — 247—256. (1.4 п.л./0.7 п.л.)

Свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ

11. *Стародумов И. О., Александров Д. В., Павлюк Е. В.* Phase Field Crystal Simulator (PFC_Simulator). — 2018. — Свидетельство 2018617793 от 02.07.2018.

Монографии

12. *Galenko P., Ankudinov V., Starodumov I.* Phase-Field Crystals: Fast Interface Dynamics. Vol. 51. — Walter de Gruyter GmbH & Co KG, 2018. (8 п.л./2 п.л.)