Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого
Президента России Б.Н. Ельцина»

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

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

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

Екатеринбург — 2019

Оглавление

Стр.

Введение 4

Глава 1. Моделирование методом кристаллического фазового поля . . . 14

1.1 Литературный обзор 14

1.2 Модифицированная модель кристаллического фазового поля 20

1.2.1 Моделирование быстрой динамики фазовых превращений . 23

1.2.2 Модифицированная модель кристаллического фазового поля в гиперболической постановке (МКФП) 28

1.3 Выводы 32

Глава 2. Вычислительный алгоритм решения модифицированного уравнения кристаллического фазового поля методом изогеометрического анализа 34

2.1 Метод изогеометрического анализа 34

2.1.1 Базисные функции для изогеометрического анализа 37

2.2 Алгоритм численного решения модифицированного уравнения кристаллического фазового поля 46

2.3 Выводы 53

Глава 3. Численные расчеты методом МКФП и анализ результатов моделирования 55

3.1 Получение кристаллических структур, предсказанных диаграммой состояний 56

Стр.

3.2 Получение искаженных кристаллических образований варьированием вычислительных параметров 60

3.3 Исследование зависимости качества пространственной аппроксимации от размеров конечного элемента 67

3.4 Выводы 71

Глава 4. Программный комплекс для моделирования модифицированным методом кристаллического фазового поля (МКФП) 75

4.1 Структура программного комплекса 75

4.1.1 Модуль препроцессор 76

4.1.2 Основной вычислительный модуль 78

4.1.3 Модуль постпроцессор 79

4.1.4 Модуль дополнительных расчетов 79

4.2 Исследование эффективности программного комплекса при вычислениях на многопроцессорных ЭВМ 80

4.3 Выводы 82

Заключение 84

4.4 Основные результаты 84

4.5 Перспективы дальнейших исследований 87

Список литературы 89

Введение

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 году [1]. 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 динамики) 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, определяемое локально усредненной по времени атомной плотностью, учитывающей периодичность кристаллической решетки. Любое нарушение решетки или появление дефектов увеличивает свободную энергию

системы и континуально изменяет распределение атомной плотности, что дает возможность моделировать параметры порядка в кристаллах, дефекты 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 дефектов [2]. С физической точки зрения КФП-модель основана на теории Ландау-Бразовского фазового превращения в периодическую структуру и анализе функционала свободной энергии Свифта-Хоэнберга [3—5]. Последний сформулирован для описания конвекции Рэлея-Бенара. Модель КФП может быть, также, получена из других моделей, таких как теория функционала плотности [6—8] и теория функции атомной плотности [9]. Поэтому КФП-модель может быть рассмотрена как модель Свифта-Хоэнберга с консервативным параметром порядка, которая применяется для описания переходов жидкость-кристалл [10], отвердевания коллоидов [11], плавления [12], перемещения дислокаций и вязких явлений [13], формирования стекла [12], эпитаксиального роста [14], подплавления межфазовых границ [15], поверхностной перестройки [16] и зеренно-граничных эффектов [17]. Структурирование кристаллических поверхностных слоев с учетом упругих эффектов, также, описывается с помощью КФП-модели [18; 19], что на микро- и мезомасштабах хорошо подходит для континуального описания кристаллов льда. Учитывая вышесказанное, модель кристаллического фазового поля обеспечивает расчеты релаксации свободной энергии кристаллической структуры на значительно больших временных интервалах, чем метод молекулярной динамики (МД), именно благодаря своей континуальности.

В работах [19; 20] 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 волны [21]. 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 подход [22; 23], основанный на концепции обобщенного метода Галеркина и теории изогеометрического анализа [24], активно развиваемой учеными из США (Prof. Hughes, The University of Texas at Austin) и Европы (Prof. Gomez, University of A Coruna, Galicia, Spain). 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 динамических интерфейсов, которые перемещаются по вычислительной области. Некоторые результаты исследований по этой теме приводятся в [25—30]. Исследования показывают, что важной задачей в численном моделировании методом кристаллического фазового поля (КФП) является разработка алгоритмов, которые обеспечивают корректность работы численного метода независимо от величины временной дискретизации. Такие методы принято считать безусловно устойчивыми, градиентно устойчивыми или термодинамически согласованными в контексте задачи. Термодинамически согласованные методы ранее изучались в задачах о твердых телах [31—34] и механики жидкости и газа [35—39], но в контексте уравнений фазового поля такие методы до сих пор недостаточно распространены (существенные работы по этой теме включают [40—47]). Численное решение уравнения кристаллического фазового поля (КФП) в трехмерной постановке было подробно рассмотрено в исследованиях [48; 49], 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 работах [50—52] исследовалось только методами математического анализа на существование аттракторов и устойчивость решения. В работе [22] 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**:

1) Исследовать наиболее 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 изогеометрического 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 изогеометрического 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 изогеометрического 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 парадигмы неявных конечно-элементных методов 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 изогеометрического 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 [53—62], 9 из которых соответствуют рекомендациям ВАК . По результатам работы получено 1 свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ [63]. По теме диссертации издана 1 монография [64].

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, четырёх глав и заключения. Полный объём диссертации составляет 106 страниц, включая 21 рисунок и 1 таблицу. Список литературы содержит 169 наименований.

Глава 1. Моделирование методом кристаллического фазового поля

1.1 Литературный обзор

Процессы кристаллизации вещества во время фазового перехода из жидкого в твердое состояние изучаются очень давно, однако, многие детали этих процессов по-прежнему остаются плохо исследованными. В то же время эта тема является крайне актуальной и перспективной (одним из малоизученных перспективных направлений, например, является описание процесса высокоскоростного затвердевания [65]). С точки зрения производственных технологий изучение кристаллизации представляет интерес, как минимум, по двум причинам. Во-первых, параметры процесса сильно влияют на микроструктуру образующегося материала. Поэтому подробное изучение процессов затвердевания сможет позволить производить материалы с улучшенными свойствами, оптимизировать сам процесс производства и увеличить его экономическую эффективность. Во-вторых, фундаментальные знания о процессе кристаллизации, могут быть использованы в производстве новых видов наноструктур, в том числе с применением принципиально новых промышленных технологий.

Первые математические описания затвердевания относятся к 1831 году, когда французские ученые Габриэль Ламэ и Бенуат Клапейрон описали временную зависимость толщины образующейся ледяной корки на поверхности жидкости. Позже, примерно в 1890 году, аналогичное уравнение движения для границы между фазами было сформулировано словенским физиком Ю. Стефаном для изучения образования льда в арктических и антарктических морях [66]. После работ Ю. Стефана класс математических проблем, которые рассматривают

движущийся резкий интерфейс между двумя фазами, получил известность как задачи Стефана. В задачах Стефана твердая и жидкая фазы рассматриваются как непрерывные вещества с интерфейсом, разделяющим две фазы. Прогресс в математическом описании и решении задач Стефана продолжался в течение всего 20-го века [66; 67].

В середине 1980-х годов был представлен еще один континуальный подход к моделированию кристаллизации вещества, известный как модель фазового поля (ФП). Метод был во многом основан на результатах исследований Джона Хилларда и Джона Кана границы между твердой и жидкой фазой вещества [68]. Самое глубокое различие между моделями ФП и моделью Стефана заключается в том, что в моделях ФП вместо явного отслеживания твердых и жидких фаз, а также, интерфейса между ними, исследуется поле параметров непрерывного порядка. Это поле имеет постоянные значения в объеме твердой и жидкой фаз и плавный переход между двумя значениями на границе между фазами. Благодаря плавному, а не резкому интерфейсу между твердой и жидкой фазами, модели ФП также известны как модели затвердевания с диффузионным интерфейсом. Важнейшее преимущество ФП моделей над традиционными подходами заключается в том, что ФП метод позволяет описывать более сложные шаблоны затвердевания, поскольку нет необходимости явно отслеживать положение интерфейса. Подробный анализ применимости ФП методов приводится в работах [2; 69].

Параллельно с начала 20-го века механизмы кристаллизации подробно исследовались в рамках атомистической парадигмы. В 1910 году первая теория, объясняющая механизм плавления, была предложена Ф. Линдеманном, который использовал явление вибрации атомов в кристалле для объяснения фазового перехода плавления. Линдеман предложил простой критерий, согласно которому

плавление твердого тела происходит тогда, когда амплитуда колебаний решетки достигает величины порядка 10% расстояния между ближайшими соседними атомами [70]. В последующих исследованиях этот критерий, теперь известный как правило плавления Линдеманна, оказался хорошо согласованным с экспериментами для многих простых твердых тел [71]. Позже, в 1969 году, Ж. Хансен и Л. Верле, используя компьютерное моделирование для исследования системы Ленарда-Джонса, обнаружили, что замерзание жидкости происходит, когда высота первого пика в безразмерном структурном коэффициенте жидкости достигает значения 2.85 [72]. В последующих исследованиях было получено обобщение этого эмпирического критерия и показано, что замораживание простых жидкостей происходит, когда структурный коэффициент достигает значения 2.9 ± 0.1. В настоящее время это эмпирическое правило известно как критерий кристаллизации Хансена-Верле [8].

Первой классической теорией кристаллизации, которая могла бы объяснить вышеупомянутые эмпирические правила, является классическая теория функционала плотности (ТФП), предложенная Т. Рамакришнаном и М. Юсуфом в 1979 году [6]. Теория использует структурный фактор жидкости, как входной параметр, на основе которого предсказывается периодический профиль плотности твердой фазы, а затем определяется, сосуществует ли это твердое вещество с жидкостью. В исследованиях аргона и натрия было показано, что, в рамках ТФП, структурный коэффициент, необходимый для сосуществования твердой и жидкой фазы вещества, согласован количественно с правилом плавления Хансена-Верле. Кроме того, предсказанные профили плотности твердого вещества хорошо согласуются с критерием плавления Линдемана. Позже теория функционала плотности была расширена и применена для изучения широкого спектра явлений, включая замораживание различных жидкостей, определение границы

между твердой и жидкой фазой вещества, исследование нуклеации, бинарных смесей и более сложных материалов [8]. По сегодняшний день эта теория развивается, совершенствуется и эффективно применяется на практике [73].

В настоящее время процессы на мезоскопическом пространственном масштабе, такие, как деформация и микроструктурная эволюция, традиционно исследуются с использованием моделей фазового поля совместно с моделями упругости, дислокаций или полей концентраций [74; 75]. Фазово-полевые модели оперируют значением параметра порядка, который характеризует каждую из фаз вещества и определяет области существования этих фаз. Но при моделировании с использованием классического фазово-полевого метода детали микроструктуры вещества и её дефектов, проявляющиеся на атомном пространственном масштабе, неизбежно смазываются. Как правило, такие мелкомасштабные детали структурно-фазовых изменений моделируются с помощью методов молекулярной динамики (МД), которые, однако, в свою очередь, имеют ограничение по временному масштабу задачи (порядка 10^{-9} секунд) и по количеству моделируемых атомов [76]. Как следствие, методами молекулярной динамики возможно решить только ограниченное число задач, удовлетворяющих этим условиям [77; 78]. В то же время, в научной литературе показано, что на наноуровне имеют место и более медленные структурные процессы (с временем эволюции порядка $10^{-5} - 10^{-3}$ секунд), которые представляют неменьший научный интерес [79]. Решить задачи в рамках вышеописанных проблем позволяет метод кристаллического фазового поля.

Модель кристаллического фазового поля (КФП), являющаяся основной темой настоящей работы, была представлена К. Элдером в 2002 году [1]. Модель КФП была представлена как расширение фазово-полевых моделей для изучения явлений, происходящих на небольших пространственных масштабах. Наиболее

заметным отличием модели КФП является то, что в этой модели поле параметра порядка, которое, при фазово-полевом подходе, является постоянным в объеме твердого тела в фазово-полевом подходе, заменяется полем, которое проявляет периодическую кристаллическую структуру твердой фазы [1; 80]. Модель кристаллического фазового поля основана на анализе свободной энергии в форме Бразовского [3]. Эта форма свободной энергии позволяет описывать переход в периодическое состояние и математически идентична форме, необходимой для построения теории слабой кристаллизации (ТСК) [81; 82]. Обе эти теории описывают переход первого рода из-за наличия кубического члена в плотности свободной энергии. Появление модели КФП способствовало быстрому прогрессу в понимании микроскопических явлений, связанных с затвердеванием, и многих других процессов, поскольку модель позволила исследовать явления, происходящие на атомистической длине и на диффузионных временных масштабах. Это особенно важно потому, что комбинация таких пространственно-временных масштабов до сих пор остается недоступной для моделирования методами молекулярной динамики с использованием современных компьютеров. Модель КФП уже зарекомендовала себя с положительной стороны при моделировании различных явлений, включая упругую и пластическую деформацию материалов [18; 80; 83], динамику дислокаций [84], рост кристаллов [11], статические и динамические свойства материалов [16; 85—87], процесса формирования стекол [12].

Помимо возможности на практике моделировать процессы на атомистических пространственных и диффузионных временных масштабах за счет объединения подходов атомистической и континуальной парадигмы кристаллизации, модель КФП играет важную роль в обобщении и распространении фазово-полевой теории кристаллизации на разные пространственно-временные мастшабы. В работах [88—93] показано, что модель КФП замыкает цепочку

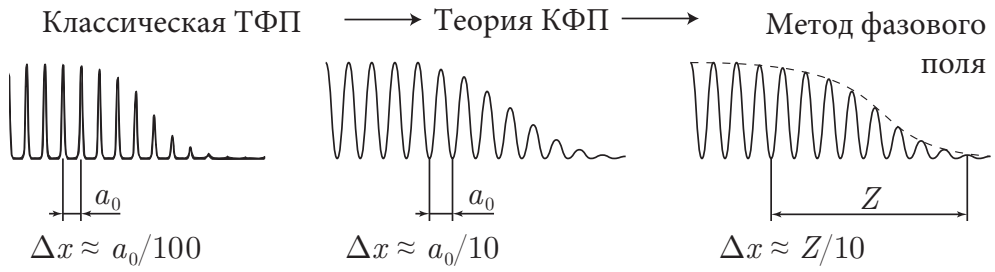

Рисунок 1.1 — Переход от атомистического уровня моделей ТФП и КФП к концепции амплитудной огибающей метода фазового поля.

теоретических обоснований процесса кристаллизации и позволяет установить связь между классической теорией функционала плотности и фазово-полевыми методами (концептуально представлено на рисунке 1.1). За счет отсутствия быстрых степеней свободы моделирование формирования микроструктур методом КФП существенно превосходит в скорости моделирование на основе методов функционала плотности и молекулярной динамики [12; 94]. Однако, эта же особенность обосновывает возможные различия результатов моделирования с использованием модели КФП с медленной динамикой (игнорирующей быстрые степени свободы) и обобщений, учитывающих также другие степени свободы с быстрой динамикой. В работе [95] показано, что медленная динамика структурно-фазовых изменений может наблюдаться, как правило, либо вблизи точек локального термодинамического равновесия системы, либо, с некоторыми оговорками, в случаях, когда характерный масштаб времени моделируемых явлений превосходит длительность переходного режима или периода интенсивных вынужденных колебаний [96—98]. В остальных случаях при моделировании эволюции микроструктуры вдали положений термодинамического равновесия динамика процессов является, как правило, быстрой. Обобщением метода кристаллического фазового поля, которое, за счет введения в уравнение динамики

второй производной по времени, позволяет описывать быстрые процессы структурно-фазовых трансформаций в течение достаточно длительных интервалов времени, является его модифицированная постановка (МКФП) [18].

1.2 Модифицированная модель кристаллического фазового поля

Большая часть современных методов моделирования структуры и свойств материалов сосредоточена на описании процессов, происходящих на конкретных пространственных масштабах: от дискретных атомистических подходов до методов сплошной среды при описании гидродинамики и тепломассопереноса. Эти методы охватывают несколько дисциплин, включая физические, химические, математические и материаловедение. Тем не менее, такие подходы обычно сталкиваются с общей проблемой: как одновременно учитывать детализацию микроскопических особенностей изучаемых процессов и при этом иметь возможность решать задачи на значительных временных интервалах и в постановках, характерных для натурных экспериментов? Конкретным примером могут быть задачи об упругой и пластической деформации во время образования наноструктуры или обработки сплавов. Для понимания таких деформаций требуется подробная информация о кристаллических микроструктурах, в то время как соответствующий результат структурных, механических, электромагнитных или транспортных свойств, обычно, включает мезоскопические или более крупные пространственные масштабы на диффузионных масштабах времени. Решение такой проблемы можно найти в модели кристаллического фазового

поля (КФП) [2; 99] вместе со связанными методами, включающими микроскопические структурные детали в теорию мезоскопического континуума, что делает их экспериментально релевантными.

Исходя из первоначальной параболической формы, модель КФП позволяет моделировать процессы на диффузионных временных масштабах, которые могут быть на несколько порядков больше, чем временные масштабы процессов, описываемых методами молекулярной динамики (см. [99]). Параболическая модель КФП опирается на гипотезу локального термодинамического равновесия и имитирует медленные изменения интерфейса. Для многих классов материалов, таких как неньютоновские жидкости, вязкоупругие тела, быстро затвердевающие сплавы и системы и, в более общем плане, системы с памятью, гипотеза локального равновесия не применяется [100—102]. Эта гипотеза также не применима для быстрых фазовых переходов и для переходных периодов из неустойчивого состояния в метаустойчивое состояние [103; 104]. Поэтому, широкий класс материалов и процессов не может быть описан на основе гипотезы локального равновесия, что преодолевается введением быстрых независимых термодинамических переменных, таких как термодинамические потоки [105], градиентного потока, как скорости изменения фазового поля [104] или некоторых специальных внутренних переменных [106; 107]. В настоящей работе основное внимание уделяется моделированию быстро движущихся интерфейсов, 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 [65]. 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, которые в простейшем случае их экспоненциальной релаксации обеспечивают систему гиперболических уравнений в частных производных для динамики границы раздела и переноса материи [103; 104]. В этом смысле, главным образом в диссертации, анализируется гиперболическая модель [108] или модифицированная [2] КФП-модель, которая включает в себя самые быстрые степени свободы в форме инерции, а также, самую медленную диссипативную динамику, приводящую к описанию как быстрых, так и медленных интерфейсов.

В качестве фундаментального обоснования модифицированной модели МКФП можно использовать метод "огрубления" [64; 109] (coarse-graining procedure в англоязычной литературе) – процедуру для перехода от микроскопического уровня анализа к мезоскопическому описанию. Процедура "огрубления" состоит из разделения системы на мезоскопические пространственные ячейки и определения кинетических уравнений для эволюции атомных конфигураций в каждой ячейке.

Эволюция многих систем и преобразования между различными фазовыми состояниями определяются движущей силой, полученной из "огрубленного" функционала свободной энергии типа Гинзбурга-Ландау. Например, в работе [110] представлен полный вывод "огрубленной" модели фазового поля для осаждения и разделения фаз. Выводы в этой работе приводят к мезоскопическому нелинейному уравнению Фоккера-Планка, в конечном итоге эквивалентному уравнению Кана-Хиллиарда с шумом и с определенными выражениями для

подвижностей и моментов шума. Описание быстрых фазовых переходов часто требует гиперболических динамических уравнений с учетом небольшого, но неисчезающего времени релаксации, связанного с локальной внутренней термализацией системы [48; 87; 104; 108]. Это расширяет возможности обычных параболических динамических уравнений, которые справедливы в пределе пренебрежимо малого времени релаксации, то есть, когда переходы между "огрубленными"состояниями достаточно медленные, так что их характерное время эволюции намного больше, чем время микроскопической релаксации. Особое внимание обращается на необходимость рассматривать процессы не только в конкретный момент, но и на интервалах времени для описания установления локального теплового равновесия. В этом случае возникают так называемые немарковские эффекты.

1.2.1 Моделирование быстрой динамики фазовых превращений

Медленную динамику фазовых превращений можно наблюдать в системах, состояние которых лишь слегка отличается от своего термодинамического равновесия [108]. Такие системы очень чувствительны к изменению параметра порядка во времени и к воздействию движущей силы фазового перехода [111]. Быстрая динамика релаксационных процессов наблюдается, прежде всего, в системах, далеких от состояния термодинамического равновесия. Изучая быстро меняющиеся динамические системы, следует учитывать сопутствующие им переходные явления (например, затухание релаксационных процессов в области локального равновесия). В сильно неравновесных системах переходные явления могут также влиять на способ релаксации в стационарные состояния [108].

Предположим, что эволюция исследуемой системы характеризуется параметром порядка $\varphi(\vec{r}, t)$ 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 взаимную связь между движущей силой $\delta\mathscr{F}/\delta\varphi$ (заданной изменением свободной энергии $\mathscr{F}(\varphi)$ по параметру порядка φ и эволюцией параметра порядка [104]. Для консервативной динамики фазового перехода при постоянном нормальном давлении (с сохраняющимся параметром порядка) можно определить поток:

$$\vec{J}_\varphi = -\int_{-\infty}^{t} M(t-t^*)\nabla\left(\frac{\delta\mathscr{F}(t^*,\vec{r})}{\delta\varphi_c}\right)dt^*, \tag{1.1}$$

где $M(t-t^*)$ - функция памяти, которая имеет смысл корреляции между динамикой системы в последний момент времени t^* и текущей динамикой в момент времени t. Вместе с уравнением баланса $\partial\varphi_c/\partial t = -\nabla\cdot\vec{J}_\varphi$ уравнение (1.1) дает следующее уравнение как для медленной, так и для быстрой динамики:

$$\frac{\partial\varphi_c}{\partial t} = \nabla\cdot\int_{-\infty}^{t} M(t-t^*)\nabla\left(\frac{\delta\mathscr{F}(t^*,\vec{r})}{\delta\varphi_c}\right)dt^*. \tag{1.2}$$

Уравнение (1.2) дает объяснение эволюции параметра порядка: настоящее распределение φ зависит от эволюции градиента потока $\vec{J}_\varphi$, т.е. скорости изменения $\partial\varphi/\partial t$ в собственном прошлом. Поэтому, как следует из (1.2), конкретная динамика системы определяется функцией памяти $M(t-t^*)$.

В таблице 1 представлены некоторые простые виды функции памяти, которые приводят к различным типам динамики структурно-фазовых переходов. Подробный анализ уравнений динамики для различных видов функции памяти приводятся в статьях [19; 95] и в монографии [64].

Таблица 1 — Некоторые функции памяти для описания динамики фазовых трансформаций

Тип динамики трансформации	Вид функции памяти $M(t-t^*)$
Диссипативная (диффузионная)	$M^{(1)}(0)\delta(t-t^*)$
Волновая (кинематическая)	$\equiv Const$
Локальная экспоненциальная релаксация	$\tau_R^{-1}M^{(2)}(0)e^{[-(t-t^*)/\tau_R]}$
Диссипативная с локальной экспоненциальной релаксацией	$M^{(1)}(0)\delta(t-t^*)+\tau_R^{-1}M^{(2)}(0)e^{[-(t-t^*)/\tau_R]}$

В случае функции памяти вида $M(t-t^*)=M^{(1)}(0)\delta(t-t^*)$, где $M^{(1)}(0)$ – константа в момент $t=t^*$, и $\delta(t-t^*)$ – дельта-функция Дирака. Подставляя данную функцию памяти в уравнение (1.2), получим следующее уравнение:

$$\frac{\partial\varphi_c}{\partial t}=\nabla\cdot\left[M^{(1)}(0)\nabla\left(\frac{\delta\mathscr{F}}{\delta\varphi_c}\right)\right]. \tag{1.3}$$

Уравнение (1.3) при условии консервативности параметра порядка является дифференциальным уравнением параболического типа, описывающим диссипативный режим динамики структурно-фазового превращения. Особенностью данного случая является бесконечная скорость распространения φ_c в пределах фазы, что является следствием мгновенной локальной релаксации системы. Такая релаксация определяется $\delta(t-t^*)$, входящей в функцию памяти $M(t-t^*)$. Для быстрой динамики фазовых переходов, когда можно определить характерную скорость распространения возмущений, это приводит к гипотезе о

мгновенной реакции на возмущение в произвольно удаленной точке. Как показано в [111—113], такая модель может использоваться для описания процессов вблизи положения термодинамического равновесия. Т. е. – в контексте кристаллизации, для процессов в условиях малого переохлаждения. Таким образом, уравнение (1.3) описывает медленную динамику фазовых трансформаций вблизи термодинамического равновесия системы.

В случае функции памяти $M(t-t^*) \equiv const$ уравнение (1.2) при условии консервативного параметра порядка принимает вид:

$$\frac{\partial^2 \varphi_c}{\partial t^2} = \nabla \cdot \left[M(0) \nabla \left(\frac{\delta \mathscr{F}}{\delta \varphi_c} \right) \right], \tag{1.4}$$

где константа $M(0)$ выражает мобильность для момента времени $t = t^*$. Уравнение (1.4) описывает колебательную динамику без диссипации. В зависимости от вида свободной энергии системы $\mathscr{F}$ уравнение (1.4) будет либо предсказывать диссипативную динамику, либо описывать незатухающий колебательный процесс. В ряде случаев описываемая колебательная динамика никогда не сводится к диссипативной, благодаря ее собственному незатухающему характеру. Тогда система будет колебаться вокруг положения равновесия бесконечно долго, благодаря постоянной собственной памяти. В ситуации, когда тепловые степени свободы имеют существенное влияние на динамику моделируемой системы, уравнение динамики (1.4) необходимо дополнить членом, пропорциональным $d\varphi_c/dt$.

Динамика локальной экспоненциальной релаксации типа Максвелла описываться с помощью функции памяти $M(t-t^*) = \tau_R^{-1} M^{(2)}(0) e^{[-(t-t^*)/\tau_R]}$. Здесь τ_R- характерное время релаксации при переходе от инерционного к диффузионному динамическому режиму. Эта величина характеризует время, необходимое для достижения диссипативной динамики, описываемой уравнением (1.3) без учета

инерции. Подставляя максвелловскую функцию памяти в уравнение (1.2), получаем следующее уравнение динамики для сохраняющегося параметра порядка:

$$\tau_R \frac{\partial^2 \varphi_c}{\partial t^2} + \frac{\partial \varphi_c}{\partial t} = \nabla \cdot \left[M^{(2)}(0) \nabla \left(\frac{\delta \mathscr{F}}{\delta \varphi_c} \right) \right]. \tag{1.5}$$

Это уравнение ранее было выведено исходя из функционала энтропии теории фазового поля для случая быстрых фазовых переходов [104]: было обосновано, что $M^{(2)}(0) > 0$, а необходимое условие устойчивости $\delta^2 \mathscr{F} > 0$ приводит к ограничению $\tau_R > 0$. Динамика, определяемая уравнением (1.5), является основанием для модели кристаллического фазового поля в гиперболической форме [2]. Эта модель также может быть получена напрямую из теории функционала плотности [114] или с помощью введения скобок Пуассона [115]. Таким образом, уравнение (1.5) описывает динамику промежуточного типа – между диссипативной (1.3) и волновой (1.4).

Функция памяти смешанного типа (тип Джеффриса) может быть задан следующим образом: $M(t - t^*) = M^{(1)}(0)\delta(t - t^*) + \tau_R^{-1} M^{(2)}(0) e^{[-(t-t^*)/\tau_R]}$.

Такой тип функции памяти описывает одновременно и динамику мгновенной релаксации системы (за счет диссипативной части $M^{(1)}(0)\delta(t - t^*)$), и динамику экспоненциальной релаксации (за счет члена $\tau_R^{-1} M^{(2)}(0) e^{[-(t-t^*)/\tau_R]}$) [101]. Имея ввиду уравнение (1.2), для сохраняемого параметра порядка справделиво уравнение динамики:

$$\tau_R \frac{\partial^2 \varphi_c}{\partial t^2} + \frac{\partial \varphi_c}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ \left[M^{(1)}(0) + M^{(2)}(0) \right] \nabla \left(\frac{\delta \mathscr{F}}{\delta \varphi_c} \right) \right.$$
$$\left. + \tau_R M^{(1)}(0) \frac{\partial}{\partial t} \nabla \left(\frac{\delta \mathscr{F}}{\delta \varphi_c} \right) \right\}. \tag{1.6}$$

Также, как и уравнение (1.5), уравнение (1.6) содержит инерционный член $\tau_R \partial^2 \varphi / \partial t^2$ и может быть охарактеризовано как дифференциальное уравнение гиперболического типа.

В уравнении (1.6) временная нелокальность определяется членом $\partial^2\varphi/\partial t^2$, а пространственная нелокальность – членом $\partial\nabla(\delta\mathscr{F}/\delta\varphi_c)/\partial t$. При $\tau_R \to 0$ уравнение (1.6) трансформируется в уравнение диссипативной динамики (1.3).

Для некоторых случаев динамики, описываемой уравнением (1.6), в работах [116; 117] были подробно изучены устойчивость и бифуркации стационарных состояний. Также, уравнение (1.6) было выведено из теории скобок Пуассона [115] (аналогично уравнению кристаллического фазового поля).

1.2.2 Модифицированная модель кристаллического фазового поля в гиперболической постановке (МКФП)

Модель кристаллического фазового поля (КФП) описывает структуру кристаллической решетки через определение непрерывного поля атомной плотности и относится к классу моделей, описывающих периодические системы [1; 118]. С этой точки зрения модель КФП является подходом для описания процессов на микроскопическом уровне. Модель КФП основана на формализме свободной энергии Бразовского [**brazovskii1975**], который, также, можно рассматривать как форму модели образования кристаллических структур [119; 120] Свифта--Хоэнберга (Swift-Hohenberg: SH) в твердой фазе. Модель КФП обеспечивает эффективное моделирование перехода жидкость-твердое тело [1], диффузионных дефектов [121] и стеклообразования [12].

Модификация модели КФП подразумевает расширение области её применимости за счет возможности описывать произвольную быструю динамику. На самом деле, как указывалось в [12], модели типа КФП позволяют существенно

ускорить вычисления формирования микроструктуры по сравнению с моделированием через теорию функционала плотности и молекулярно-динамическим (MD) моделированием. Высокоскоростное моделирование методом КФП, как уже пояснялось, возможно, благодаря отсутствию в этом методе быстрых степеней свободы, в сравнении, например, с методами молекулярной динамики [122]. Следовательно, можно говорить о традиционном методе КФП, применимом для описания медленной динамики (который игнорирует быстрые степени свободы) и об его модификации, которая охватывает, также, степени свободы, необходимые для описания быстрой динамики.

Рассмотрим простейшую форму функционала свободной энергии $\mathfrak{F}$ Свифта--Хоэнберга (SH):

$$\mathfrak{F}(\varphi) = \int d\vec{r} \left\{ \frac{\lambda}{2}\varphi\left(q_0^2 + \nabla^2\right)^2 \varphi - a\Delta B_0 \frac{\varphi^2}{2} + \nu\frac{\varphi^4}{4} \right\}, \nu > 0. \tag{1.7}$$

В модели SH этот функционал минимизируется по периодической пространственной структуре параметра порядка $\varphi(\vec{r})$.

Здесь $\vec{r}$ – 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 (переохлаждение), T_c – критическая температура, T – фактическая температура. При $\Delta_0 > 0$ соответствующее гомогенной структуре распределение φ становится неустойчивым к формированию периодической структуры для некоторых значений волнового вектора $\vec{q}$.

Модель КФП реализует минимизацию функционала (1.7) для систем с сохраняющимся параметром порядка, таких как поле атомной плотности [1]. Особенность функционала свободной энергии в форме Бразовского наиболее ярко проявляется в задачах упругости. Поэтому функционал (1.7) обычно используется для моделирования упругости при росте кристаллов [1; 118], для описания

переходов “полосы-пузырьки” в моделях Изинга [123], а также – периодических кристаллических и сополимерных цепей [124; 125].

Рассмотрим следующую замену переменных в уравнениях (1.5) и (1.7) динамики фазового перехода "гиперболического" типа для сохраняющегося параметра порядка φ:

$$\tilde{t} = tM^{(2)}(0)\lambda q_0^6, \qquad \tilde{\nabla} = q_0\nabla, \qquad \tilde{\varphi} = \varphi\sqrt{\frac{\nu}{\lambda q_0^4}}, \tag{1.8}$$

а также

$$\tau = \tau_R M^{(2)}(0)\lambda q_0^6, \qquad \varepsilon = \frac{a\Delta B_0}{\lambda q_0^4}. \tag{1.9}$$

Подставим новые безразмерные переменные в (1.5) и (1.7), одновременно опустив "тильду":

$$\tau\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} + \frac{\partial\varphi}{\partial t} = \nabla^2\left\{\left[-\varepsilon + \left(1+\nabla^2\right)^2\right]\varphi + \varphi^3\right\}. \tag{1.10}$$

Уравнение (1.10) 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.

Величина τ (характерное время релаксации) определяет интервал времени, за который поток $\vec{J}_\varphi$ (1.1) трансформируется до вида, используемого в стандартной ("параболической") модели КФП [1]. Величина τ, также, позволяет учитывать потерю инерции системой при переходной динамике. Для ряда простых случаев фазовых переходов можно определить $\tau = 0$ и, тем самым, пренебречь слагаемым $\tau\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}$. Однако, в ряде случаев это слагаемое вносит существенный вклад в описание динамики процессов, например, при моделировании динамики интерфесов φ или при исследовании осциляций в ходе структурных перестроений. Кроме того, используя методологию моделирования дендритного

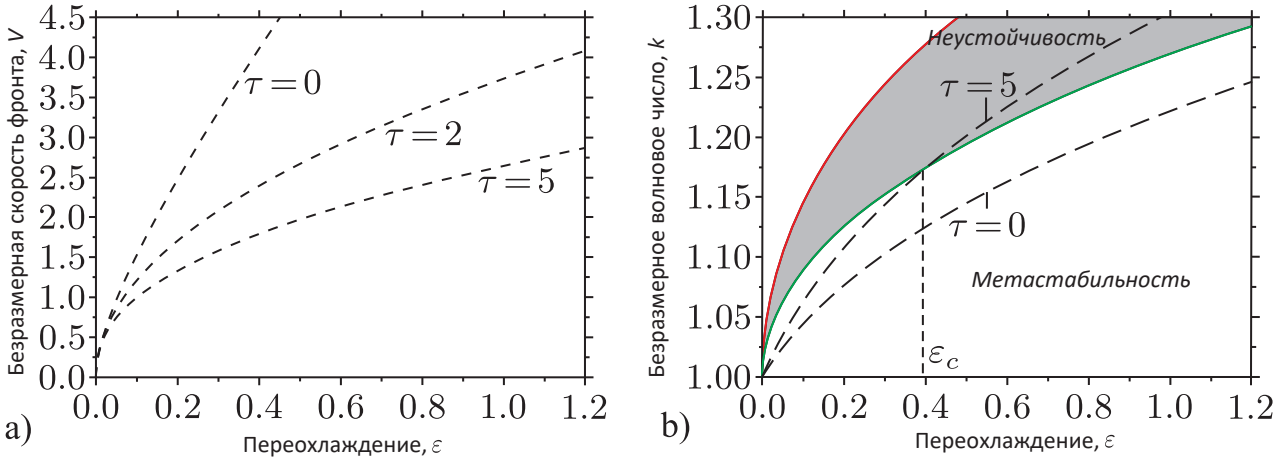

Рисунок 1.2 — Количественные прогнозы модели PFC: a) скорость фронта V и b) волновое число k на фронте; Оценка предельной устойчивости делается для параболической модели (КФП) с $\tau = 0$ и гиперболической модели (МКФП) с $\tau = 2$ и $\tau = 5$. Затемненная область на рисунке (b) соответствует области неустойчивости по Экхаузу.

роста при глубоких переохлаждениях [126; 127], уравнение (1.10) можно использовать для описания бездиффузного режима структурно-фазовых переходов в условиях большой движущей силы.

Принципиальное преимущество модели МКФП перед традиционной параболической КФП-моделью также находит отражение, например, при исследовании неустойчивости отобранной периодической структуры, называемой неустойчивостью Экхауза [128]. На рисунке 1.2 представлены результаты исследований из работы [20] показывающие, что для больших значений τ фронт кристаллизации может характеризоваться волновыми числами, соответствующими неустойчивым структурным состояниям. Такая динамика приводит к фазовому превращению, происходящему с некоторой интенсивностью в зависимости от того, насколько k находится выше границы Экхауза. В то же время, при оценке волнового числа классическим методом КФП с $\tau = 0$ (т.е. без второй производной по времени), положение неустойчивости оказывается недостижимым. Это означает,

что модель КФП описывает отбор волнового числа только для метастабильной периодической решетки, в то время как ее модификация МКФП может описывать и неустойчивую по Экхаузу динамику структур, возникающую при закритических переохлаждениях$>\varepsilon_c$.

1.3 Выводы

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.

В главе приводится описание понятий медленной и быстрой динамики кристаллизации, характерной для вышеуказанных задач. С определением динамического уравнения структурно-фазового перехода через функцию памяти системы, становится возможным рассмотреть различные типы функции памяти,

приводящие к динамике различного вида: диссипативной, волновой, локальной экспоненциальной релаксации и смешанной. Вводя функционал свободной энергии в форме Бразовского и подставляя его в уравнение динамики с памятью третьего типа, получено уравнение кристаллического фазового поля с дополнительным слагаемым в левой части, отвечающим за инерцию системы и позволяющим корректно описать локальную релаксацию вдали от положения термодинамического равновесия и при глубоком переохлаждении.

Глава 2. Вычислительный алгоритм решения модифицированного уравнения кристаллического фазового поля методом изогеометрического анализа

2.1 Метод изогеометрического анализа

Изогеометрический анализ возник как технология математического моделирования, объединяющая собой вычислительные методы и подходы САПР (систем автоматизированного проектирования). Активное внедрение САПР в инженерных бюро породило нетривиальную проблему: для аналитических/численных исследований создаваемые конструкторами САПР-объекты необходимо транслировать в объекты с подходящей геометрической структурой. В крупных инженерных проектах на подобные трансляции уходит до 80 % времени. Как правило, анализ индустриальных разработок производится путем численного решения дифференциальных уравнений и проведения компьютерных симуляций. Распространенным инструментарием для таких расчетов в инженерных программных пакетах является формализм метода конечных элементов (КЭ). При этом принято считать, что наиболее трудозатратный этап исследований методом КЭ – это построение расчетной сетки. Однако, как показали исследования, более 30% времени требуется для декомпозиции конструкторской геометрии моделируемых систем в геометрию, пригодную для генерации расчетной сетки и обеспечивающую должную точность вычислений. В публикациях представлено достаточное количество примеров парадоксов, связанных с погрешностями этапа декомпозиции исходной геометрии системы в геометрию конечных элементов (например, [129]). На основании этого, была сформулирована задача по модификации вычислительной геометрии методов КЭ для наиболее быстрой и точной

трансляции в нее геометрии САПР. Для решения такой задачи было создание универсальной геометрии, которая была бы основана на геометрических принципах САПР, и при этом позволяла бы производить численный анализ. Соответствующая теория была опубликована в 2005 году [130—135] и получила название изогеометрического анализа.

Реализация идей, заложенных в концепции изогеометрического анализа, возможна с использованием различных видов вычислительной геометрии. Наиболее распространенный тип изогеометрического анализа базируется на теории B-сплайнов и, в более общем случае – неоднородных рациональных B-сплайнов (NURBS: Non-Uniform Rational B-Splines). Этот выбор был продиктован широким распространением именно формализма NURBS в конструкторских программных системах [136—140]. Фактически технология NURBS сегодня является промышленным стандартом. Однако, известны работы, в которых парадигма изогеометрического анализа развивается на базе иных принципов определения геометрии, например, через T-сплайны [141; 142], S-поверхности (S-patches) [143], A-поверхности (A-patches) [144], поверхности Куна (Coons patches) [145] и др.

Решение уравнений в частных производных методом конечных элементов состоит из вариационной формулировки, а также пробных и весовых функциональных пространств, определяемых их соответствующими базисными функциями. Эти базисные функции, в свою очередь, определяются конечными элементами, локальными представлениями пространств. Конечные элементы представляют собой непересекающееся разложение исследуемого пространства на примитивные области (треугольники, гексагоны, тетраэдры и т.п.). В простейших методах КЭ пробная и весовая функции практически совпадают: их конструкция определяется одними и теми же элементами. Таким образом, одним

из способов модифицировать метод конечных элементов является улучшение представления конечных элементов.

В традиционных КЭ-методах элементы определяются через интерполяционные полиномы. Часто в роли таких полиномов выступают многочлены Лагранжа или Эрмита [146]. Наиболее простыми и до сих пор распространенными видами конечных элементов являются C^0 – непрерывные треугольные и тетраэдральные элементы. Идея изогеометрии заключается в использовании элементов, которые в общем виде могут быть изогнутыми и достаточно гладкими в физическом пространстве. При этом топологически такие элементы могут являться аналогами треугольников, тетраэдров и любых других традиционных элементов, а задаваемое изогеометрией пространство будет поддерживать все афинные преобразования.

В NURBS-геометрии, в отличии от геометрии традиционных КЭ методов, базисные функции, обычно, не являются интерполяционными. Определим понятия опорной (контрольной) сетки и физической сетки.

Опорная сетка определяется опорными узлами и линейно интерполирует их: в двух измерениях такая сетка состоит из билинейных четырехугольных элементов, а в трех измерениях – из трехлинейных шестигранников. Опорная сетка не соответствует фактической геометрии, но является, как бы, ее каркасом. Опорными (управляющими) переменными являются степени свободы, которые расположены в узлах опорной сетки.

Физическая сетка является декомпозицией фактической геометрии. Есть два понятия элементов в физической сетке: патч и межузловой интервал. Патч можно рассматривать как макроэлемент или поддомен. Большинство задач, в том числе рассматриваемая в настоящей диссертации, могут быть смоделированы с

помощью одного патча. Каждый патч имеет два представления: в параметрическом и в физическом пространстве. В двумерных топологиях патч представляет собой прямоугольник в параметрическом представлении. В трех измерениях–это кубоид.

Каждый патч можно разложить на открытые области, ограниченные узлами (межузловые интервалы). Узлы – это точки, линии и поверхности в одномерной, двухмерной и трехмерной топологиях соответственно. Такие области определяют конечные элементы, в которых базисные функции гладкие (т.е. C^{∞}). Вблизи узлов базисные функции будут C^{p-m}, где p–степень многочлена, а m-кратность рассматриваемого узла. Внутри патча также задается параметрическое пространство, которое однозначно определяет каждый узел и различает узлы, имеющие кратность больше единицы.

2.1.1 Базисные функции для изогеометрического анализа

В отличие от классических методов конечных элементов, параметрическое пространство сплайнов в изогеометрическом анализе является локальным для патчей целиком, а не для, собственно, конечных элементов. То есть пространство параметров в методах КЭ отображается в один элемент физического пространства, и таким образом каждый элемент имеет свое собственное отображение. Сплайн-отображение преобразует патч из нескольких элементов в пространстве параметров в физическое пространство, как показано на рисунке 2.2. Каждый элемент в физическом пространстве является изображением соответствующего элемента пространства параметров, но само отображение является глобальным

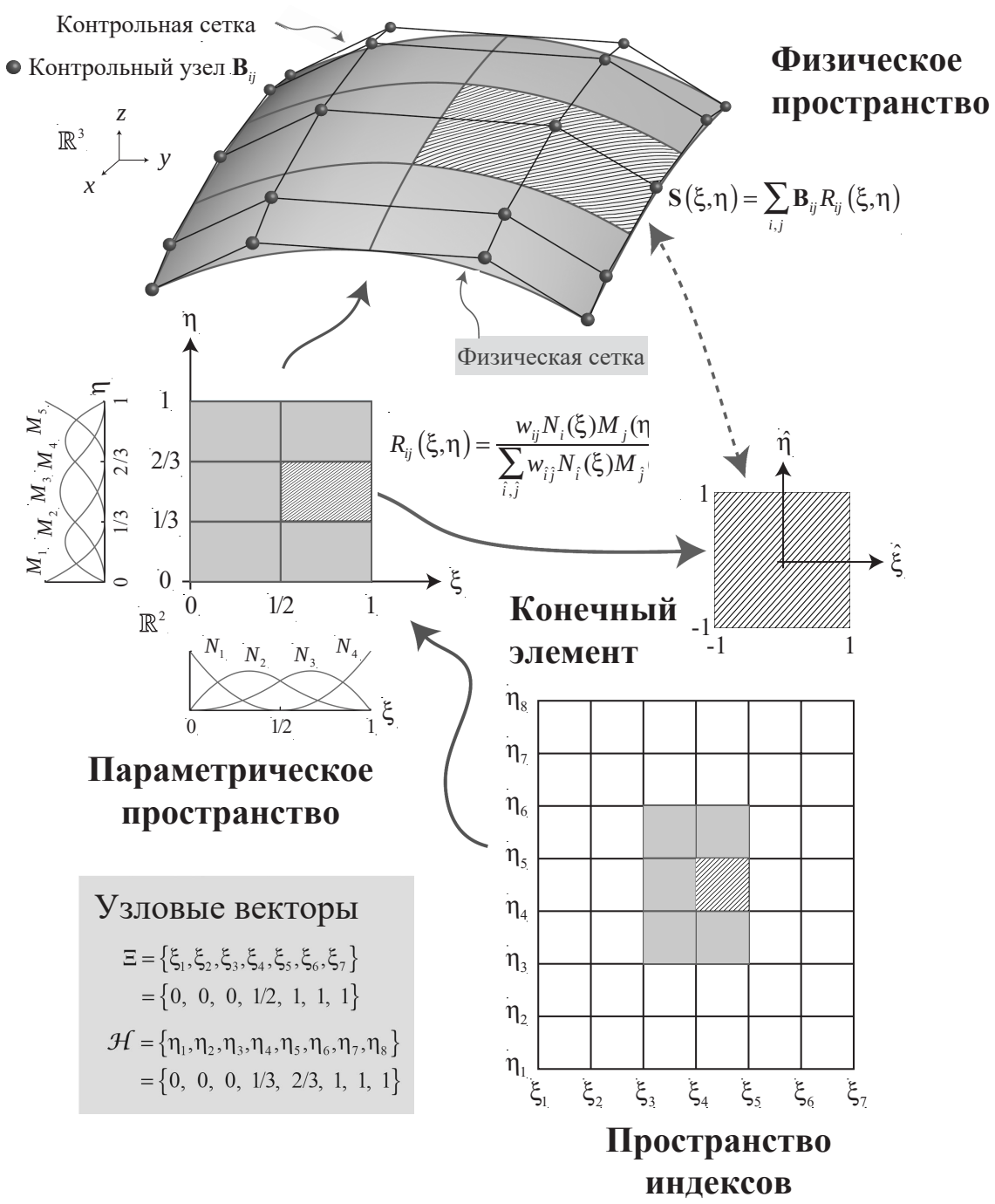

Рисунок 2.1 — Схема переходов от пространства конечного элемента через параметрическое пространство к физическому, связанному с опорными точками. Используются открытые векторы узлов и квадратичные C^1-непрерывные базисные функции. Также изображены C^1-квадратичные ($p = 2$) базисные функции, определяемые векторами узлов. Базисные функции умножаются на контрольные точки и суммируются для построения физической геометрии объектов, в данном случае некоторой поверхности в R^3.

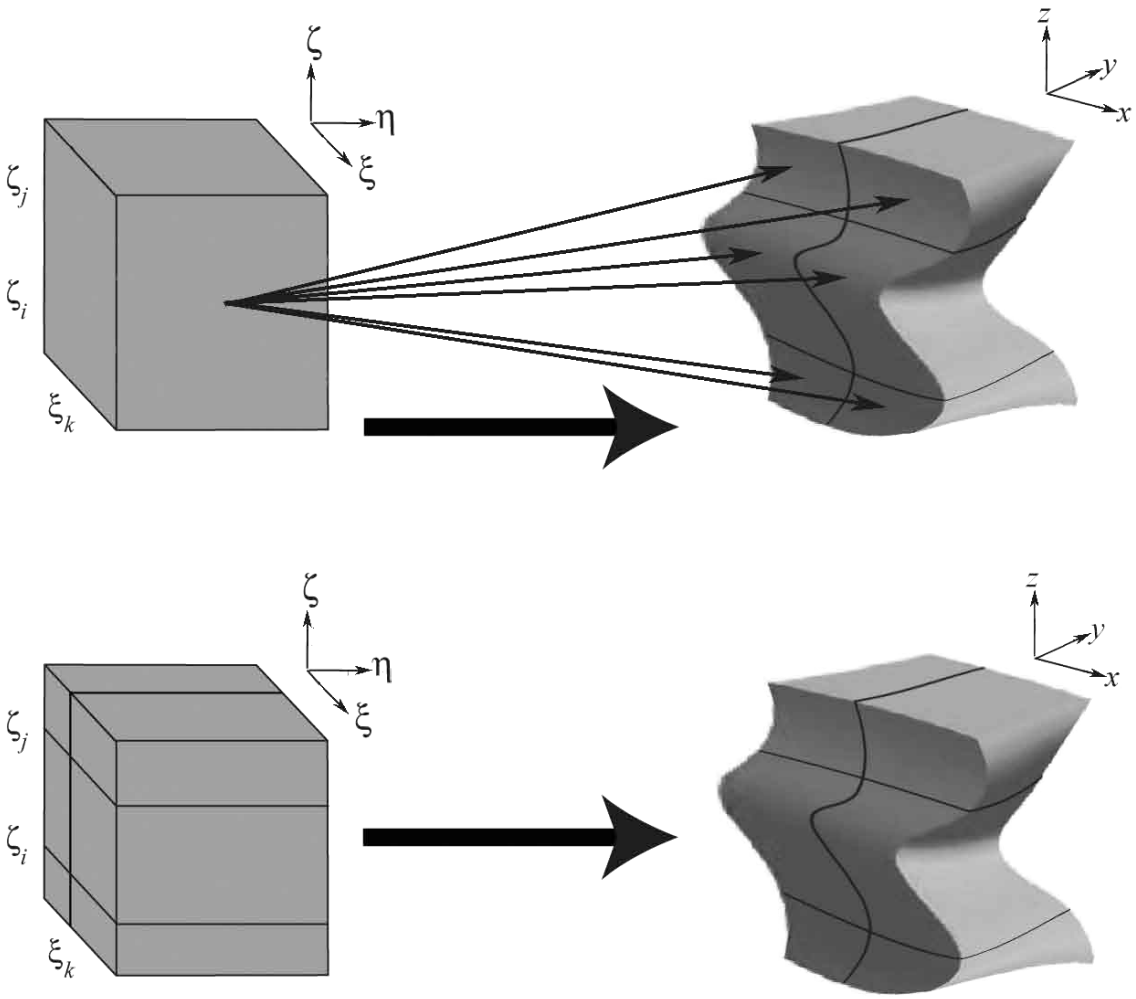

Рисунок 2.2 — Схема отображения элементов параметрического пространства в физическое пространство. Верхний рисунок иллюстрирует локальность отображения элементов характерного для классических КЭ методов. Нижний рисунок показывает, что отображение применяется для патча целиком. Внутренние узлы делят патч на элементы. Отображение переносит патч целиком из пространства параметров в физическое пространство.

для всего патча, а не для самих элементов. Патчи играют роль субдоменов, в которых типы элементов и модели материалов предполагаются однородными. Многие простые домены могут быть представлены одним патчем.

Определим понятие вектора узла для изогеометрического анализа. Вектор узла в одном измерении представляет собой неубывающий набор координат в

пространстве параметров, записанный $\Xi = \left\{\xi_1, \xi_2, ..., \xi_{n+p+1}\right\}$, где $\xi_i \in R^1$ – i-й узел, i–индекс узла, $i = 1, 2, ..., n + p + 1$, p–порядок полинома, а n – количество базисных функций, используемых для построения кривой сплайна. Узлы разбивают пространство параметров на элементы. Границы элементов в физическом пространстве – это просто сплайновое отображение межузловых отрезков.

Векторы узлов являются однородными, если узлы равномерно расположены в пространстве параметров. Если узлы расположены неравномерно, вектор узлов неоднороден. Значения узлов могут повторяться, то есть несколько узлов могут принимать одно и то же значение. Кратность значений узлов определяют свойства базиса (в том числе его гладкость). Вектор узла считается открытым, если его первое и последнее значение узла появляются $p+1$ раз. Такие открытые векторы узлов являются стандартом в САПР и векторной графике. В одномерном случае базисные функции, сформированные из открытых векторов узлов, интерполяционны на концах интервала пространства параметров $\left[\xi_1, \xi_{n+p+1}\right]$ и в угловых узлах пространства для многомерных пространств. Однако, во внутренних узлах базисные функции остаются неинтерполяционными. Этот факт является отличительной чертой базиса изогеметрического анализа в сравнении с базисом традиционных КЭ методов, у которых базисные функции в узлах, как правило, являются интерполяционными.

В упрощенном случае в роли базисных функций могут выступать B-сплайны. Для заданного вектора Ξ можно определить следующий набор базисных B-сплайнов $\left\{N_{i,p}\right\}_{i=1}^{n}$ в соответствии с формулой Кокс – де Бора [147; 148]:

$$N_{i,0}(\xi) = \begin{cases} 1 & \text{если } \xi_i \leqslant \xi < \xi_{i+1} \\ 0 & \text{для всех остальных } \xi \end{cases}, \tag{2.1}$$

$$N_{i,p}(\xi) = \frac{\xi - \xi_i}{\xi_{i+p} - \xi_i} N_{i,p-1}(\xi) + \frac{\xi_{i+p+1} - \xi}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+1}} N_{i+1,p-1}(\xi)\,, p > 0. \tag{2.2}$$

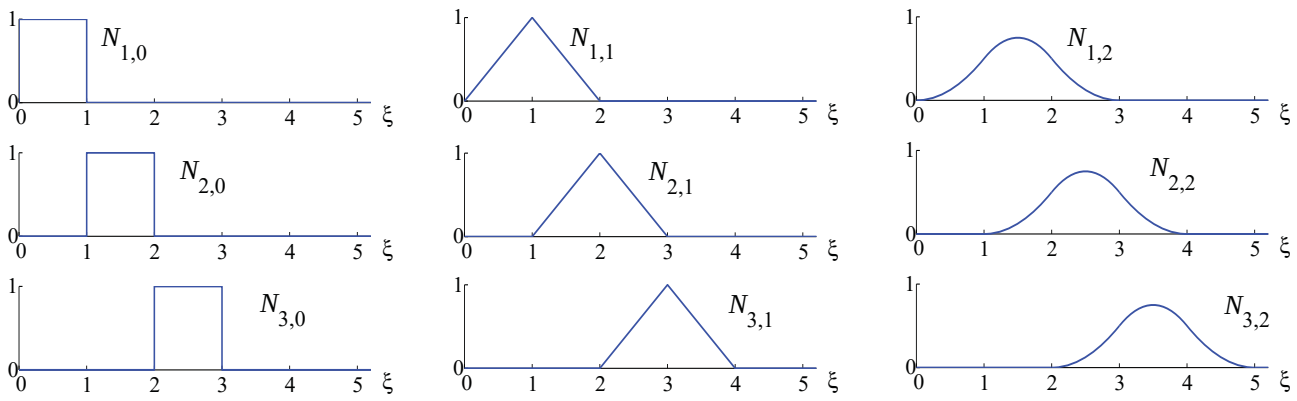

Рисунок 2.3 — Базисные B-сплайн функции порядка 0, 1, 2 для равномерного вектора узлов $\Xi = \{0,1,2,3,4\ldots\}$.

Некоторые примеры базисных функций (2.1),(2.2) для равномерного вектора узлов представлены на Рисунке 2.3.

Эффективные алгоритмы определения базисных функций для произвольных пространств параметров представлены в работе [136].

Опорная сетка с узлами B из пространства R^d и вектор узлов $\Xi = \left\{\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_{n+p+1}\right\}$ позволяют выбрать n базисных функций $N_i(\xi)$ и формализовать любую кривую физического пространства следующим образом:

$$C_i(\xi) = \sum_{i=1}^{n} N_{i,p}(\xi) B_i. \tag{2.3}$$

Имея два вектора узлов $\Xi^1 = \left\{\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_{n+p+1}\right\}$ и $\Xi^2 = \left\{\nu_1, \nu_2, \ldots, \nu_{m+q+1}\right\}$ возможно построить сплайн поверхность в физическом пространстве:

$$S_{i,j}(\xi,\nu) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} N_{i,p}(\xi) M_{j,q}(\nu) B_{i,j}, \tag{2.4}$$

где $N_{i,p}(\xi)$ и $M_{j,q}(\nu)$ являются базисными функциями по каждой из параметрических осей порядка p и q соответственно. Если задан, также, третий вектор узлов

$\Xi^3 = \{\mu_1, \mu_2, ..., \mu_{k+r+1}\}$, то, по аналогии со сплайн-кривыми и сплайн-поверхностями можно, построить сплайн-тело:

$$V_{i,j,k}(\xi,\nu,\mu) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{l} N_{i,p}(\xi)M_{j,q}(\nu)L_{k,r}(\mu)B_{i,j,k}. \tag{2.5}$$

Производные базисных B-сплайн функций удобнее всего записать через рекурентные выражения, получаемые дифференцированием уравнений (2.1) и (2.2). Рассмотрим одномерный случай базисных функций порядка p с вектором узлов $\Xi = \left\{\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_{n+p+1}\right\}$. Производную i-й базисной функции можно определить так:

$$\frac{dN_{i,p}(\xi)}{d\xi} = \frac{p \cdot N_{i,p-1}(\xi)}{\xi_{i+p} - \xi_i} - \frac{p \cdot N_{i+1,p-1}(\xi)}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+1}}. \tag{2.6}$$

В общем случае для производной k-го порядка уравнение (2.6) примет следующий вид:

$$\frac{d^k N_{i,p}(\xi)}{d^k\xi} = \frac{d^{k-1}N_{i,p-1}(\xi)}{d^{k-1}\xi} \cdot \frac{p}{\xi_{i+p} - \xi_i} - \frac{d^{k-1}N_{i+1,p-1}(\xi)}{d^{k-1}\xi} \cdot \frac{p}{\xi_{i+p+1} - \xi_i + 1}. \tag{2.7}$$

Последовательно подставляя (2.6) в (2.7) для каждой операции дифференцирования получаем выражение:

$$\begin{cases} \dfrac{d^k N_{i,p}(\xi)}{d^k\xi} = \dfrac{p!}{(p-k)!}\sum_{j=0}^{k}\alpha_{k,j}N_{i+j,p-k}(\xi) & \\ \alpha_{0,0} = 1, & \\ \alpha_{k,0} = \dfrac{\alpha_{k-1,0}}{\xi_{i+p-k+1} - \xi_i} & k \geqslant 1, \\ \alpha_{k,j} = \dfrac{\alpha_{k-1,j} - \alpha_{k-1,j-1}}{\xi_{i+p+j-k+1} - \xi_{i+j}} & j \in [1,2\ldots k-1], \\ \alpha_{k,k} = \dfrac{-\alpha_{k-1,k-1}}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+k}}. & \end{cases} \tag{2.8}$$

Таким образом, производные базисных B-сплайн функций также являются B-сплайнами и составляют, в свою очередь, базис, через который можно определить производные функций $C(\xi), S(\xi,\nu), B(\xi,\nu,\mu)$ из уравнений (2.3),(2.4),(2.5). Важное свойство B-сплайновых кривых, поверхностей и тел степени p следует непосредственно из свойств их базисных функций [136; 140]:они имеют непрерывные "$p-1$"-е производные при отсутствии повторяющихся узлов или контрольных точек. 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.

Рассмотрим более общий случай сплайн-базиса, основанного на неоднородных рациональных B-сплайнах или NURBS. С геометрической точки зрения NURBS можно определить как проекцию обычного B-сплайна из пространства R^{d+1} в пространство R^d [138]. В случае, если B-сплайн кривая $C^w(\xi)$ определена на опорных узлах (узлах опорной сетки) $B_i^w \in R^{d+1}$, каждый из которых содержит d компонент и дополнительно компоненту w_i, называемую весом данного опорного узла, можно определить NURBS (ξ) с опорными узлами $B_i \in R^d$ при помощи следующего преобразования:

$$\begin{cases} (B_i)_j = \dfrac{(B_i^w)_j}{w_i} \quad j = 1 \dots d, \\ w_i = (B_i^w)_{d+1}, \end{cases} \tag{2.9}$$

где $(B_i)_j$ – j-й компонент узла B_i, а w_i – соответствующий вес этого узла из пространства R. В рамках изогеометрического анализа удобнее считать, что для любого i: $w_i \geqslant 0$. Это связано с тем, что в геометрии САПР весовые значения,

как правило, неотрицательные. Для того, чтобы распространить преобразование (2.9) на все точки кривой в физическом пространстве, определим весовую функцию:

$$W(\xi) = \sum_{i=1}^{n} N_{i,p}(\xi) w_i, \tag{2.10}$$

где $N_{i,p}(\xi)$ – стандартный B-сплайн базис вида (2.1), (2.2). Таким образом, исходя из (2.9) и (2.10) NURBS-кривая может быть определена следующим образом:

$$C(\xi)_j = \frac{C^w(\xi)_j}{W(\xi)}, \ j = 1 \dots d. \tag{2.11}$$

Поскольку $C^w(\xi)$ и $W(\xi)$ являются, по определению, кусочно-полиномиальными функциями, то и $C(\xi)$ является кусочно-полиномиальной функцией того же порядка, что и базисные B-сплайн функции $N_{i,p}$. Поэтому, под порядком NURBS--кривой подразумевается порядок B-сплайн функции, на которой основан этот NURBS.

Таким образом, по аналогии с B-сплайн базисными функциями (2.1), (2.2) можно опредилить NURBS базис следующим образом:

$$R_i^p(\xi) = \frac{N_{i,p}(\xi) w_i}{W(\xi)}, \tag{2.12}$$

где $W(\xi)$ определяется уравнением вида (2.10), а следовательно, $R_{i,p}(\xi)$ является кусочно-рациональной функцией.

Учитывая (2.9), (2.11), (2.12) кривую можно определить в терминах опорной сетки так:

$$C(\xi)_j = \sum_{i=1}^{n} R_i^p(\xi) B_i. \tag{2.13}$$

Повторяя рассуждения для вывода уравнений (2.4), (2.5) для случая B-сплайн базиса, можно получить следующие уравнения для поверхности (2.14) и тела (2.15) в физическом пространстве и для случая базиса из NURBS функций:

$$\begin{cases} S_{i,j}(\xi,\nu) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} R_{i,j}^{p,q}(\xi,\nu)B_{i,j} \\ \\ R_{i,j}^{p,q}(\xi,\nu) = \dfrac{N_{i,p}(\xi)M_{j,q}(\nu)w_{i,j}}{\sum_{\hat{i}=1}^{n}\sum_{\hat{j}=1}^{m} N_{\hat{i},p}(\xi)M_{\hat{j},q}(\nu)w_{\hat{i},\hat{j}}}, \end{cases} \tag{2.14}$$

где $\sum_{\hat{i}=1}^{n}\sum_{\hat{j}=1}^{m} N_{\hat{i},p}(\xi)M_{\hat{j},q}(\nu)w_{\hat{i},\hat{j}}$ по аналогии с (2.10) определяет весовую функцию $W(\xi,\nu)$.

$$\begin{cases} V_{i,j,k}(\xi,\nu,\mu) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{l} R_{i,j,k}^{p,q,r}B_{i,j,k} \\ \\ R_{i,j,k}^{p,q,r} = \dfrac{N_{i,p}(\xi)M_{j,q}(\nu)L_{k,r}(\mu)w_{i,j,k}}{\sum_{\hat{i}=1}^{n}\sum_{\hat{j}=1}^{m}\sum_{\hat{k}=1}^{l} N_{\hat{i},p}(\xi)M_{\hat{j},q}(\nu)L_{\hat{k},r}(\nu)w_{\hat{i},\hat{j},\hat{k}}}, \end{cases} \tag{2.15}$$

где $\sum_{\hat{i}=1}^{n}\sum_{\hat{j}=1}^{m}\sum_{\hat{k}=1}^{l} N_{\hat{i},p}(\xi)M_{\hat{j},q}(\nu)L_{\hat{k},r}(\nu)w_{\hat{i},\hat{j},\hat{k}}$ вновь, по аналогии с (2.10), определяет весовую функцию $W(\xi,\nu,\mu)$.

Базисы $R_i^p(\xi)$,$R_{i,j}^{p,q}R_{i,j,k}^{p,q,r}$ обладают теми же свойствами, что и B-сплайн базисы. Свойство непрерывности следует из определения векторов узлов для NURBS функций. Также, напрямую, из определения следует неотрицательность базисных NURBS функций.

2.2 Алгоритм численного решения модифицированного уравнения кристаллического фазового поля

Математические модели, использующие дифференциальные операторы высокого порядка, как правило, с трудом поддаются анализу методом конечных элементов. Вариационные формулировки таких задач включают в себя производные второго и более высоких порядков, что требует использования, как минимум, C^1-непрерывного базиса для всей расчетной области. Сложность построения универсальных базисных функций, удовлетворяющих необходимым критериям гладкости, привела к тому, что для изучения дифференциальных уравнений в частных производных высокого порядка стали использоваться методы конечных разностей, спектральных методов и другие подходы, которые, хотя и обеспечивают решение задач, но имеют существенные ограничения по сравнению с методами конечных элементов. Как видно из разделов 2.1, 2.1.1, изогеометрический анализ на основе NURBS- кривых в качестве базисных функций является точным, геометрически гибким и надежным методом аппроксимации высшего порядка. При этом базисные функции изогеометрического анализа могут обеспечивать любую глобальную гладкость аппроксимации. Таким образом, изогеометрический анализ – подходящая технология для изучения уравнений, включающих дифференциальные операторы высшего порядка [149]. Отталкиваясь от изогеометрического анализа можно сформулировать обощение как для классического метода конечных элементов, так и для более современных методов, в основе которых, тем не менее, зачастую лежат принципы метода Галеркина [150]. В настоящей работе будет исследован метод изогеометрического анализа в формализме метода конечных элементов Галеркина.

Рассмотрим уравнение кристаллического фазового поля в модифицированной (гиперболической) постановке. Как было показано в главе 1, уравнение МКФП описывает динамику поля атомной плотности φ и является дифференциальным уравнением в частных производных шестого порядка по пространству и второго порядка по времени:

$$\tau\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}+\frac{\partial\varphi}{\partial t}=\nabla^2\mu. \tag{2.16}$$

Химический потенциал μ задается следующим образом:

$$\mu(\varphi)=\frac{\delta\mathscr{F}}{\delta\varphi}=\varphi^3+\alpha\varphi^2+(1-\varepsilon)\varphi+2\nabla^2\varphi+\nabla^4\varphi, \tag{2.17}$$

где функционал свободной энергии в одномодовом приближении описывается так:

$$\mathscr{F}[\varphi,\nabla\varphi,\nabla^2\varphi]=\int_\Omega\left[f(\varphi)-|\nabla\varphi|^2+\frac{1}{2}(\nabla^2\varphi)^2\right]\mathrm{d}\Omega. \tag{2.18}$$

Гомогенная часть свободной энергии задается уравнением:

$$f(\varphi)=\frac{1-\varepsilon}{2}\varphi^2+\frac{\alpha}{3}\varphi^3+\frac{1}{4}\varphi^4. \tag{2.19}$$

В уравнениях (2.16) – (2.19) $\Omega\in R^3$ обозначает пространство произвольного открытого домена, τ – время релаксации потока $J=-\nabla\mu$ до его стационарного состояния, $\varepsilon=(T_c-T)/T_c$ – 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. Подробное описание основ модели кристаллического фазового поля можно найти в главе 1 и в работах [18; 20; 22; 46; 64; 83; 151—153].

Рассмотрим далее решение слудущей задачи: для заданной области Ω, временного интервала $]0,T[$ и $\varphi_0:\Omega\to R$ найти функцию $\varphi:\Omega\times[0,T]\to R$, удовлетворяющую уравнениям:

$$\begin{cases} \tau\dfrac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} + \dfrac{\partial\varphi}{\partial t} = \nabla^2\mu \quad \text{на } \Omega\times]0,T], \\ \\ \varphi(\mathbf{x},0) = \varphi_0(\mathbf{x}) \qquad \text{на } \Omega, \end{cases} \tag{2.20}$$

а также – периодическим граничным условиям во всех направлениях. Периодические граничные условия представляют собой специальный набор условий на границах расчетной области, которые, как правило, используются для вычисления величин большой (в предельном случае бесконечной) системы с моделированием ее небольшой части. Такой тип граничных условий часто используется при моделировании периодических систем. Периодические граничные условия позволяют ограничиться в рамках диссертации рассмотрением относительно простых расчетных областей гексаэдрального типа, например, для трехмерного случая $\Omega = (0,L_x) \times (0,L_y) \times (0,L_z)$ (рисунок 2.4).

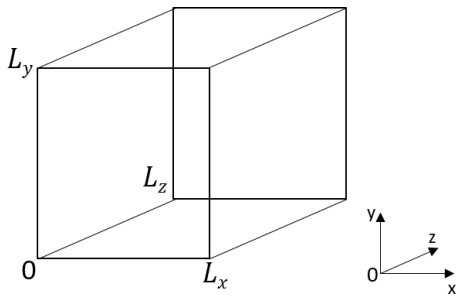

Рисунок 2.4 — Расчетный домен $\Omega = (0,L_x) \times (0,L_y) \times (0,L_z)$.

Рассмотрим постановку задачи 2.20 в слабой форме. Для этого определим функциональное пространство тестовых $\mathscr{X} = \mathscr{V}(\Omega)$, и весовых функций $\mathscr{Y} = \mathscr{V}(\Omega)$. Тогда, умножив обе части уравнения на некоторую пробную функцию w и проинтегрировав уравнение по Ω с учетом граничных условий, можно сформулировать вариационную задачу, эквивалентную (2.20): найти $\varphi \in \mathscr{X}$ такую, что $\forall w \in \mathscr{Y}$,

$$B(w,\varphi) = F(w), \tag{2.21}$$

где

$$B(w,\varphi) = \int_\Omega w\left(\tau\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} + \frac{\partial\varphi}{\partial t}\right)d\Omega + \int_\Omega \nabla w\cdot\nabla\varphi F''(\varphi)d\Omega -$$
$$-\int_\Omega 2\nabla^2 w\nabla^2\varphi d\Omega + \int_\Omega \nabla\left(\nabla^2 w\right)\cdot\nabla\left(\nabla^2\varphi\right)d\Omega \tag{2.22}$$

и

$$F(w) = 0. \tag{2.23}$$

Уравнение (2.22) накладывает необходимое условие $\mathscr{V} = \mathscr{H}^3$, где $\mathscr{H}^3$ – 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 $\mathscr{X}_h$ и $\mathscr{Y}_h$ такие, что $\mathscr{X}_h \subset \mathscr{X}$ и $\mathscr{Y}_h \subset \mathscr{Y}$. Тогда в терминах конечных элементов вариационную задачу (2.21) можно записать так: найти функцию $\varphi_h \in \mathscr{X}_h$ такую, что $\forall w_h \in \mathscr{Y}_h$

$$B(w_h,\varphi_h) = F(w_h), \tag{2.24}$$

где

$$\varphi_h(\mathbf{x},t) = \sum_{A\in I}\varphi_A(t)N_A(\mathbf{x}), \quad w_h(\mathbf{x}) = \sum_{A\in I} w_A N_A(\mathbf{x}). \tag{2.25}$$

В уравнениях (2.25) функции N_A – базисные функции, заданные на Ω, а I – глобальный индекс параметрического пространства. Для того, чтобы дискретные функциональные пространства $\mathscr{X}_h$ и $\mathscr{Y}_h$ являлись пространствами Соболева $\mathscr{H}^3$, необходимо, чтобы базисные функции N_A были, как минимум, C^2-непрерывными.

Для интегрирования по времени будем использовать подход, предложенный в [154] для обобщенного α-метода. Ранее этот метод был успешно применен для решения уравнений структурной динамики, турбулентных потоков и исследований фазово-полевым методом [155—157].

Пусть опорные вектора $\mathbf{U}$, $\dot{\mathbf{U}}$, $\ddot{\mathbf{U}}$ задают степени свободы функции φ , её первой и второй производной по времени соответственно. Определим вектор невязки:

$$\mathbf{R} = \{R_A\}, \tag{2.26}$$

здесь A – множество глобальных индексов параметрического пространтва. Компоненты вектора невязки определяются так:

$$R_A = B(N_A, \varphi_h) - F(N_A). \tag{2.27}$$

Пошаговая схема может быть определена следующим образом: для момента времени t_n имеем дискретную аппроксимацию опорных векторов, соответственно, $\mathbf{U}_n$, $\dot{\mathbf{U}}_n$, $\ddot{\mathbf{U}}_n$ и некоторый шаг по времени $\Delta t = t_{n+1} - t_n$. Необходимо найти вектора $\mathbf{U}_{n+1}$, $\dot{\mathbf{U}}_{n+1}$, $\ddot{\mathbf{U}}_{n+1}$ такие, что

$$\mathbf{R}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \dot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_f}, \ddot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_m}) = 0, \tag{2.28}$$

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{U}}_{n+1} = \dot{\mathbf{U}}_n + \Delta t((1-\gamma)\ddot{\mathbf{U}}_n + \gamma\ddot{\mathbf{U}}_{n+1}), \\ \mathbf{U}_{n+1} = \mathbf{U}_n + \Delta t\dot{\mathbf{U}}_n + \dfrac{\Delta t^2}{2}\left((1-2\beta)\ddot{\mathbf{U}}_n + 2\beta\ddot{\mathbf{U}}_{n+1}\right), \end{cases} \tag{2.29}$$

где

$$\begin{cases} \mathbf{U}_{n+\alpha_f} = \mathbf{U}_n + \alpha_f\left(\mathbf{U}_{n+1} - \mathbf{U}_n\right), \\ \dot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_m} = \dot{\mathbf{U}}_n + \alpha_m\left(\dot{\mathbf{U}}_{n+1} - \dot{\mathbf{U}}_n\right), \end{cases} \tag{2.30}$$

Параметры α_f, α_m, γ и β выбираются таким образом, чтобы обеспечивать сходимость и устойчивость алгоритма. В работе Jansen, Whiting and Hulbert [158] показано, что второй порядок сходимости достигается при

$$\gamma = \frac{1}{2} + \alpha_m - \alpha_f \qquad \text{и} \qquad \beta = \frac{1}{4}(1 - \alpha_f + \alpha_m)^2, \tag{2.31}$$

В то же время, безусловная устойчивость метода обеспечивается при

$$\alpha_m \geqslant \alpha_f \geqslant \frac{1}{2} \tag{2.32}$$

Система нелинейных алгебраических уравнений (2.28) может быть решена методом Ньютона-Рафсона совместно с алгоритмом "предиктор-корректор" следующим образом:

Этап "предиктор": Используется алгоритм предиктора с постоянной скоростью:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{U}}_{n+1}^{(0)} = \dot{\mathbf{U}}_n, \\ \ddot{\mathbf{U}}_{n+1}^{(0)} = \dfrac{\gamma-1}{\gamma}\ddot{\mathbf{U}}_n, \\ \mathbf{U}_{n+1}^{(0)} = \mathbf{U}_n + \Delta t\dot{\mathbf{U}}_n + \dfrac{\Delta t^2}{2}\left((1-2\beta)\ddot{\mathbf{U}}_n + 2\beta\ddot{\mathbf{U}}_{n+1}^{(0)}\right). \end{cases} \tag{2.33}$$

В приведенных выше уравнениях и в дальнейшем индекс с круглыми скобками – это индекс итерации.

Этап "корректор": Для $i = 1,2,\ldots,i_{max}$ или до достижения сходимости повторяются шаги:

1. Оценка решения на α-уровнях

$$\begin{cases} \mathbf{U}_{n+\alpha_f}^{(i)} = \mathbf{U}_n + \alpha_f\left(\mathbf{U}_{n+1}^{(i-1)} - \mathbf{U}_n\right), \\ \dot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_f}^{(i)} = \dot{\mathbf{U}}_n + \alpha_f\left(\dot{\mathbf{U}}_{n+1}^{(i-1)} - \dot{\mathbf{U}}_n\right), \\ \ddot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_m}^{(i)} = \ddot{\mathbf{U}}_n + \alpha_m\left(\ddot{\mathbf{U}}_{n+1}^{(i-1)} - \ddot{\mathbf{U}}_n\right). \end{cases} \tag{2.34}$$

2. Использование решения на α-уровнях для сборки матрицы невязки и касательной матрицы жесткости:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{R}_{(i)}}{\mathrm{d}\ddot{\mathbf{U}}_{n+1}}\Delta\ddot{\mathbf{U}}_{n+1}^{(i)} = -\mathbf{R}_{(i)}, \tag{2.35}$$

где

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{R}}{\mathrm{d}\ddot{\mathbf{U}}_{n+1}} = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \ddot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_m}} \frac{\partial \ddot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_m}}{\partial \ddot{\mathbf{U}}_{n+1}} + \\ + \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \dot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_f}} \frac{\partial \dot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_f}}{\partial \dot{\mathbf{U}}_{n+1}} \frac{\partial \dot{\mathbf{U}}_{n+1}}{\partial \ddot{\mathbf{U}}_{n+1}} + \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{U}_{n+\alpha_f}} \frac{\partial \mathbf{U}_{n+\alpha_f}}{\partial \mathbf{U}_{n+1}} \frac{\partial \mathbf{U}_{n+1}}{\partial \ddot{\mathbf{U}}_{n+1}} = \\ = \alpha_m \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \ddot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_m}} + \alpha_f \gamma \Delta t \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \dot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_f}} + \alpha_f \beta \Delta t^2 \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{U}_{n+\alpha_f}}. \tag{2.36}$$

Итерационный индекс (i) в уравнении (2.36) был опущен для упрощения записи. Полученная система линейных алгебраических уравнений может быть решена стандартным алгоритмом GMRES [159].

3. Используя $\Delta\ddot{\mathbf{U}}^{(i)}_{n+1}$ проводится коррекция на итерациях:

$$\begin{cases} \ddot{\mathbf{U}}^{(i)}_{n+1} = \ddot{\mathbf{U}}^{(i-1)}_{n+1} + \Delta\ddot{\mathbf{U}}^{(i)}_{n+1} \\ \dot{\mathbf{U}}^{(i)}_{n+1} = \dot{\mathbf{U}}^{(i-1)}_{n+1} + \gamma\Delta t \Delta\ddot{\mathbf{U}}^{(i)}_{n+1} \\ \mathbf{U}^{(i)}_{n+1} = \mathbf{U}^{(i-1)}_{n+1} + \beta\Delta t^2 \Delta\ddot{\mathbf{U}}^{(i)}_{n+1} \end{cases} \tag{2.37}$$

Таким образом завершается нелинейная итерация. Нелинейный итерационный алгоритм должен исполняться до тех пор, пока норма невязки (2.26) не окажется меньше заданной точности ε. В представленных в настоящей работе расчетах мы используем $\varepsilon = 10^{-8}$. Для обеспечения устойчивости значения $\alpha_m = 1$ и $\alpha_f = \dfrac{2}{3}$ были выбраны с учетом исследований в работах [135; 155].

2.3 Выводы

Глава посвящена формализму вычислительного метода, именуемого в литературе изогеометрический анализ (Isogeometric analysis в англоязычной литературе), а также – построению на базе изогеометрического анализа алгоритма решения уравнения кристаллического фазового поля в модифицированной постановке (МКФП). Метод изогеометрического анализа является сравнительно новым конечно-элементным методом, обобщающим традиционный подход метода Галеркина за счет использования принципов NURBS-геометрии на уровне пространств базисных функций. Фундаментальные исследования этого метода были мотивированы повсеместным переходом инженерного проектирования на САПР, где индустриальным стандартом, де-факто, являлась геометрия в формализме NURBS. Сложные геометрические формы и повышенные требования к гладкости объектов, зачастую, не могли в полной мере быть описанны в формализме традиционных методов конечных элементов, что затрудняло моделирование и вычислительный анализ. В 2000-х годах была представлена теория изогеометрического 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 метода изогеометрического анализа от вычислительной сетки до отдельного конечного элемента. Приводятся принципы базиса на основе NURBS--функций. Эти основы позволяют модифицировать конечно-элементный метод Галеркина и применить его для решения уравнения МКФП. За счет использования функционального пространства NURBS-функций появляется возможность

использовать глобально C^2-непрерывный базис, необходимый для решения уравнения МКФП в слабой форме и глобально C^2-непрерывной аппроксимации. В качестве граничных условий выбраны периодические (циклические) условия, что является распространенным подходом при решении задач поиска периодических функций кристалла. 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 в работе [160] показали, что он позволяет добиваться безусловной устойчивости и высокого порядка точности.

Глава 3. Численные расчеты методом МКФП и анализ результатов моделирования

Кристаллические материалы используются во многих инженерных приложениях. На практике большинство кристаллов имеют наноскопические образования, и контроль или, по крайней мере, прогнозирование образования и развития таких дефектов является серьезной проблемой. Точное моделирование динамики кристаллов требует разрешения в атомном пространственном масштабе. Уравнение кристаллического фазового поля (КФП) – континуальная модель, которая активно развивается в последние годы, показала многообещающие результаты в этом отношении [1; 80; 161]. В модели КФП кристалл определяется через непрерывное фазовое поле, которое описывает пространственное распределение плотности атомов. Фазово-полевая переменная допускает два качественно различных решения: постоянное решение, представляющее жидкую фазу, и периодическое решение, представляющее твердую фазу. Локальные экстремумы периодического решения лежат на почти идеальной решетке, имитируя атомную решетку кристалла. Как уже было отмечено в главе 1, модель КФП имеет важное преимущество перед многими атомистическими моделями в том, что характерное время моделирования определяется масштабом времени диффузионных процессов, а не колебаниями атомов. Это позволяет исследовать относительно длительные процессы по сравнению с атомистическими моделями. В [161] описывается широкий спектр практических применений модели КФП. В главе 1, также, представлена модификация модели КФП, в которой учитывается упругая релаксация. Такая модифицированная модель КФП (МКФП) позволяет описывать кристаллизацию вдали от состояния термодинамического равновесия, динамику быстрых структурно-фазовых переходов, образование метастабильных структур.

В главе 2 представлен численный алгоритм решения уравнения МКФП, основанный на конечно-элементном методе Галеркина. Для построения конечного элемента в этом методе используется современная теория изогеометрического анализа, позволяющая определить конечные элементы через пространства глобально гладких базисных функций вида NURBS. На базе этого алгоритма был разработан программный комплекс, позволяющий решать задачу МКФП с использованием технологии параллельных вычислений на суперкомпьютере. Далее будут представлены некоторые расчеты, позволяющие оценить сходимость предлагаемого вычислительного алгоритма, а также проанализировать некоторые особенности моделирования с помощью МКФП модели.

3.1 Получение кристаллических структур, предсказанных диаграммой состояний

Определение равновесных структур и их областей сосуществования относительно параметров "средняя атомная плотность"и "движущая сила трансформации"является важным видом исследований методом фазового поля [22; 162]. С помощью таких диаграмм определяются условия существования кристаллических структур в стабильном или метастабильном состоянии. Диаграммы состояний могут быть построены для трансформаций трехмерных кристаллических структур из термодинамически неустойчивого состояния с помощью формализма функционала атомной плотности, амплитудного разложения и правила рычагов Максвелла [22; 80]. В литературе представлены структурные диаграммы, полученные для случаев одномодового и двухмодового представлений функционала атомной плотности, а также использующие различное

определение управляющих параметров [2; 48; 163—166]. В настоящей работе с применением представленного в главе 2 численного алгоритма, производится минимизация функционала свободной энергии в одномодовом приближении (2.18). Таким образом, становится возможным вычислить распределение атомной плотности $\varphi(x)$, определяющее одно из типовых структурно-фазовых состояний: гомогенная (жидкая) фаза, объемно-центрированная кубическая структура – ОЦК (BCC в анлгоязычной литературе), а также структуры "стержни"(rods в анлгоязычной литературе) и "полосы"(stripes в анлгоязычной литературе). В качестве референтной диаграммы будет использована диаграмма, полученная в работах [48; 49] и использующая в качестве координат безразмерные управляющие параметры: "переохлаждение" и "средняя атомная плотность". "Переохлаждение" играет роль движущей силы трансформации, а средняя атомная плотность является сохраняющимся параметром порядка.

Рассматривается прямоугольный расчетный домен Ω. В указанном домене строится равномерная структурированная прямоугольная конечно-элементная сетка, включающая в себя C^2-непрерывные конечные элементы в формализме изогеометрического анализа (рисунок 3.1). В качестве периодических базисных функций были выбраны кубические B-сплайн функции.

Задача МКФП решается в постановке (2.20) со следующими условиями:

$$\varphi_{t=0}(x,y,z) = \bar{\varphi} + 0.2\frac{(x-0.5L_x)\bar{\varphi}}{L_x}, \alpha = 0, \tau = 0.1, \tag{3.1}$$

где $\bar{\varphi}$ – средняя атомная плотность вещества в домене Ω, а L_x – длина домена Ω вдоль оси X.

Для следующих точек диаграммы состояний из работы [48] были произведены вычисления в домене размера 25×25×25 безразмерных единиц и с 32^3

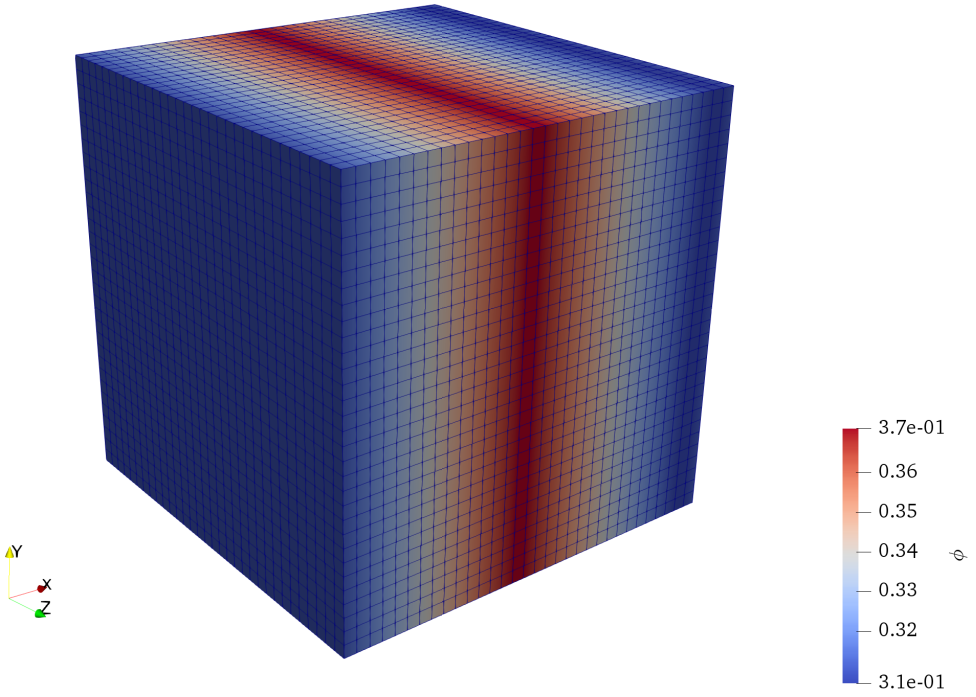

Рисунок 3.1 — Расчетный домен Ω размером 25x25x25 с 32^3C^2 непрерывными конечными элементами в нем. Распределение атомной плотности φ соответствует начальному условию расчетной задачи 3.1.

конечными элементами до установления стационарного решения φ:

1) $\varepsilon = 0.3, \bar{\varphi} = -0.6$, соответствует жидкой (гомогенной) фазе;

2) $\varepsilon = 0.4, \bar{\varphi} = -0.3$, соответствует структуре ОЦК (BCC);

3) $\varepsilon = 0.4, \bar{\varphi} = -0.2$, соответствует структуре "стержни"(rods);

4) $\varepsilon = 0.4, \bar{\varphi} = -0.1$, соответствует структуре "полосы"(stripes).

Дополнительно была поставлена задача вычислить характерные образования для областей сосуществования разных кристаллических структур в различных доменах. Вычисление стационарных решений φ производилось для точек диаграммы состояний из работы [48]:

1) $\varepsilon = 0.5, \bar{\varphi} = -0.45$, соответствует состоянию сосуществования жидкой фазы и структуры ОЦК (BCC).

2) $\varepsilon = 0.65, \bar{\varphi} = -0.43$, соответствует состоянию сосуществования жидкой фазы,

структуры ОЦК (BCC) и структуры "стержни"(rods);

3) $\varepsilon = 0.5, \bar{\varphi} = -0.369$, соответствует состоянию сосуществования структуры ОЦК (BCC) и структуры "стержни"(rods);

4) $\varepsilon = 0.17, \bar{\varphi} = -0.1$, соответствует состоянию сосуществования структуры "стержни"(rods) и структуры "полосы"(stripes);

Как показано на рисунке 3.2, структуры, полученные в ходе вышеописанных вычислительных экспериментов, соответствуют состояниям, предсказанным аналитическими методами.

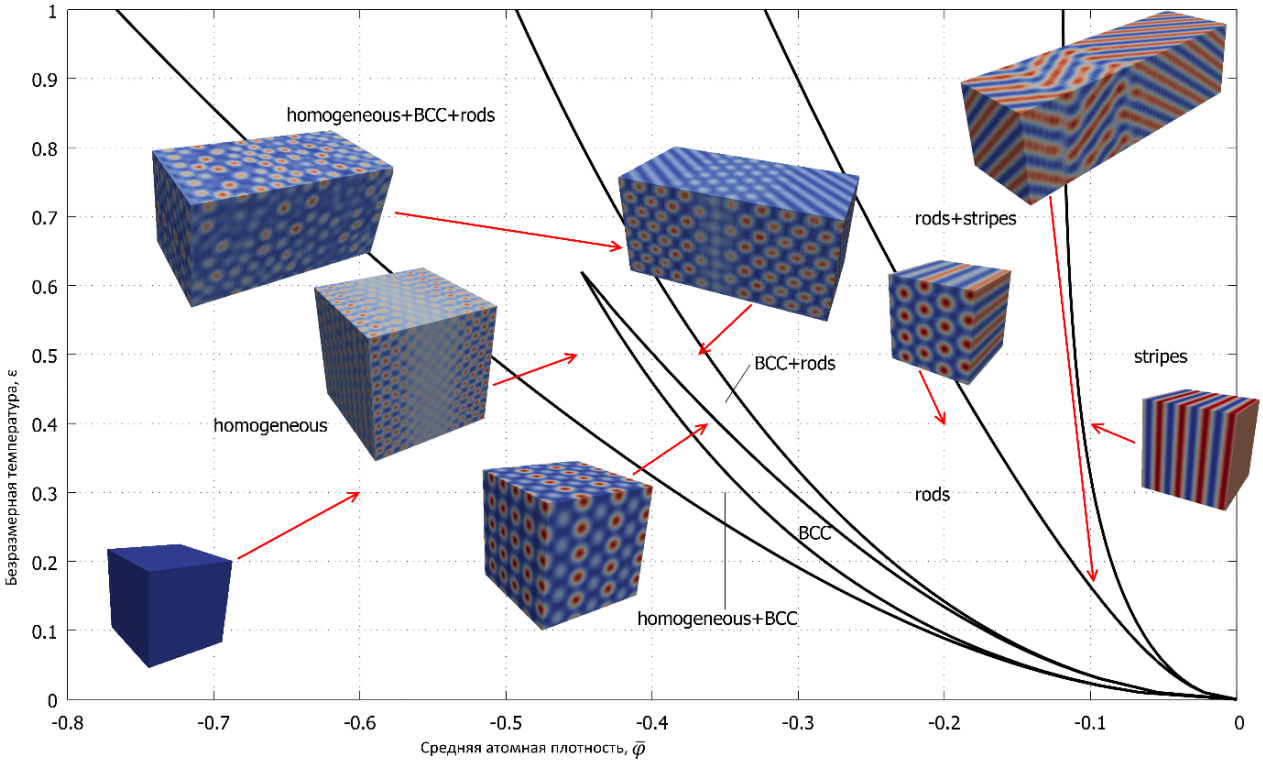

Рисунок 3.2 — Рассчитанные структуры, сопоставленные со структурной диаграммой «безразмерное переохлаждение - относительная атомная плотность».

Области сосуществования и существования структур отмечены на диаграмме 3.2 следующим образом: гомогоенная структура [homogeneous], объемно-центрированная кубическая (ОЦК-структура) [BCC], стержневая [rods], полосчатая структура [stripes]. В верхней левой области при $\varepsilon > 0.6$, $\varphi < 0.4$ представлена

область сосуществования трех структур в которой пересекаются и совпадают друг с другом области сосуществования структур ОЦК + "стержни гомогенная + ОЦК и гомогенная + "стержни". Таким образом, можно заключить, что исследуемый вычислительный алгоритм корректно сходится, что подтверждает теоретические выводы о безусловной устойчивости используемого алгоритма и высоком качестве аппроксимации.

3.2 Получение искаженных кристаллических образований варьированием вычислительных параметров

Из-за сложности динамической системы, описанной моделью МКФП, невозможно заранее предсказать динамику изменений во время моделирования. Аналитическими методами можно только установить условия формирования некоторых стабильных кристаллических структур. К тому же, во время моделирования могут быть получены более сложные искаженные решения (в том числе непериодические). Для комплексного анализа результатов динамического моделирования МКФП необходимо понимать характер и механизмы появления искаженных структурных образований в ходе вычислений. Рассмотрим некоторые случаи, приводящие к образованию таких искаженных стационарных кристаллических структур, представленные ранее в работах [56; 57]. Моделирование будет основано на постановке задачи МКФП 2.20, $\alpha = 0, \tau = 0.1$. Первый случай связан с использованием различных видов начального распределения $\varphi_{t=0}(x,y,z)$. Используется вычислительный домен Ω и сетка конечных элементов, аналогичная представленным на рисунке 3.1. Для исследования были выбраны 3 вида начального распределения атомной плотности φ внутри домена

Ω (представлены на рисунке 3.3. Во всех случаях средняя атомная плотность $\bar{\varphi} = -0.34$ и переохлаждение $\varepsilon = 0.4$.):

1) Линейное начальное распределение (аналитически описано в 3.1);
2) Плоский фронт, аналитически определяемый следующим образом:

$$\begin{cases} \varphi_{t=0}(x,y,z) = \bar{\varphi}, \forall x \neq x^0, \\ \varphi_{t=0}(x,y,z) = \bar{\varphi} + 1e{-}5, x = x^0, \end{cases} \tag{3.2}$$

где x^0 – некоторое значение $0 < x^0 < L_x$;

3) Точечное начальное возмущение, описываемое следующим образом:

$$\begin{cases} \varphi_{t=0}(x,y,z) = \bar{\varphi}, \forall \left\{x,y,z : x \neq x^0, y \neq y^0, z \neq z^0\right\}, \\ \varphi_{t=0}(x,y,z) = \bar{\varphi} + 1e{-}5, \left\{x = x^0, y = y^0, z = z^0\right\}, \end{cases} \tag{3.3}$$

где $x^0 = L_x/2, y^0 = L_y/2, z^0 = L_z/2$. L_y, L_z – длины домена Ω вдоль осей Y и Z соответственно.

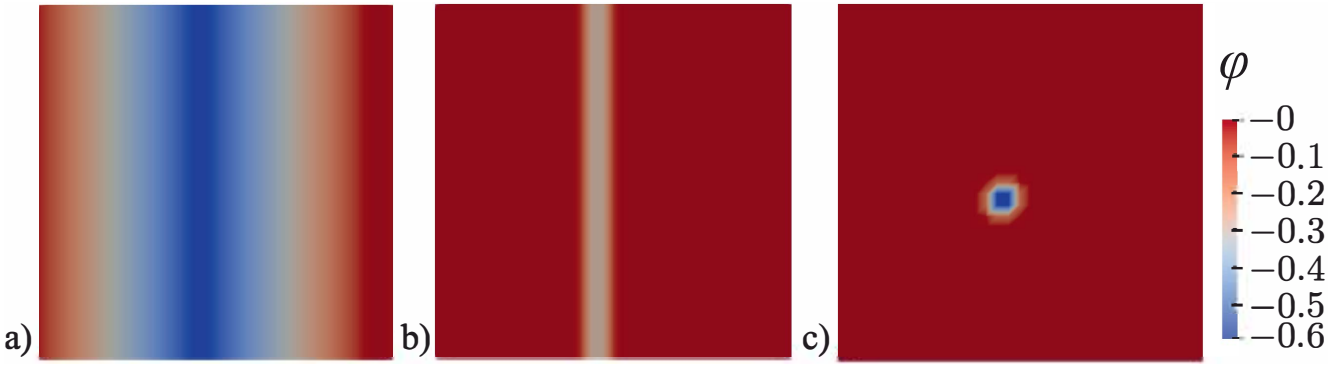

Рисунок 3.3 — Сечение вычислительного домена Ω вдоль оси X и различные виды начального распределения атомной плотности φ: (a)-Линейное, (b)-Плоский фронт, (c)-Точечное.

Вычисление стационарных кристаллических образований выполнялись для средней атомной плотности $\bar{\varphi} = -0.34$ и переохлаждения $\varepsilon = 0.4$. В соответствии с диаграммой состояний [48], представленной, также, на рисунке 3.2, эти параметры приводят к структуре ОЦК. Результаты вычислений для всех трех типов начальных условий представлены на рисунке 3.4.

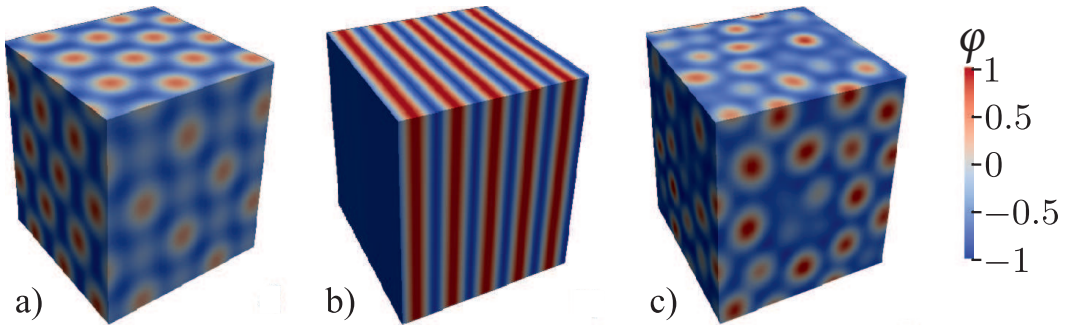

Рисунок 3.4 — Установившиеся структуры для различных видов начальных условий: (a)-Линейное начальное распределение, (b)-Плоский фронт, (c)-Точечное начальное распределение.

Можно заметить, что, несмотря на одинаковые параметры системы, определяющие структуру, конечные стационарные кристаллические образования качественно различаются в зависимости от вида начального распределения атомной плотности. В случае плоского фронта можно наблюдать кристаллическую структуру типа "полосы" появление которой не соответствует аналитическим выводам и диаграмме 3.2. Для начального условия точечного вида стационарное решение представляет собой и вовсе непериодическое образование. Только начальное условие линейного вида позволяет получить предсказанное решение вида ОЦК. Данные наблюдения говорят о существенной роли выбора начальных условий при решении задач методом МКФП. Результаты позволяют выдвинуть гипотезу о том, что в отсутствие параметрического шума начальные условия влияют на энтропию системы и склонность к образованию метастабильных структур. Опыт вычислений показывает, что линейный тип начального распределения приводит к быстрейшему переходу системы в отрелаксированное состояние. Однако, если есть задача инициализировать четкую границу фронта кристаллизации, необходимо использовать начальные условия точечного или плоского типа, которые часто приводят к образованию метастабильных или нерегулярных образований, и как следствие, к неожиданным и даже некорректным выводам. Эту

проблему можно решить в будущем, если учесть колебания поля атомной плотности в модели МКФП.

Другой случай, приводящий к образованию искаженных структур, заключается в варьировании размера расчетного домена Ω. Вновь будем рассматривать задачу МКФП в постановке (2.20), $\alpha = 0, \tau = 0.1$. В качестве начальных условий выберем (3.1), а структурные параметры зададим $\bar{\varphi} = -0.34$ и переохлаждения $\varepsilon = 0.4$. Как уже отмечалось, согласно диаграмме состояний (3.2) эти параметры соответствуют стационарной кристаллической структуре ОЦК. Расчеты проводились для кубических доменов Ω следующих размеров: 1) $25 \times 25 \times 25$; 2) $31 \times 31 \times 31$; 3) $32 \times 32 \times 32$; 4) $39 \times 39 \times 39$; 5) $45 \times 45 \times 45$. Вычислительная сетка строилась по аналогии с 3.1, где размеры конечного элемента не превосходили 0.78, что, согласно [59], обеспечивает достаточную пространственную аппроксимацию решения. Далее для этих расчетных доменов представлены вычисленные стационарные структурные образования.

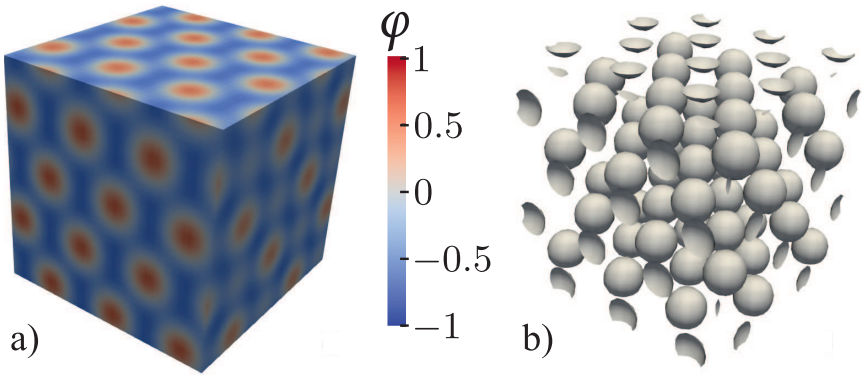

Рисунок 3.5 — Стационарное решение задачи МКФП в кубическом домене Ω 1) $25 \times 25 \times 25$ для $t \geqslant 1000$. На левом изображении представлено распределение φ на поверхности домена Ω, на правом изображении представлена изоповерхность $\bar{\varphi} = -0.34$ внутри домена Ω.

На рисунке 3.5 видно, что в наименьшем домене 1) сложившаяся структура имеет вид ОЦК. В тоже время, на рисунке 3.6 установившаяся структура

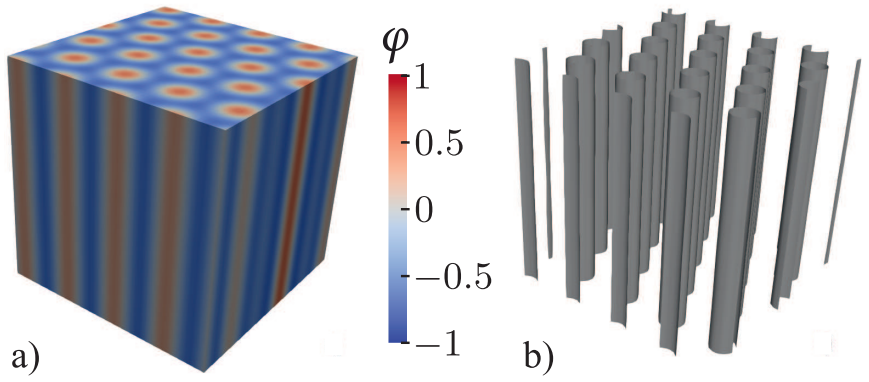

Рисунок 3.6 — Стационарное решение задачи МКФП в кубическом домене Ω 2) $31 \times 31 \times 31$ для $t \geqslant 1000$. На левом изображении представлено распределение φ на поверхности домена Ω, на правом изображении представлена изоповерхность $\bar{\varphi} = -0.34$ внутри домена Ω.

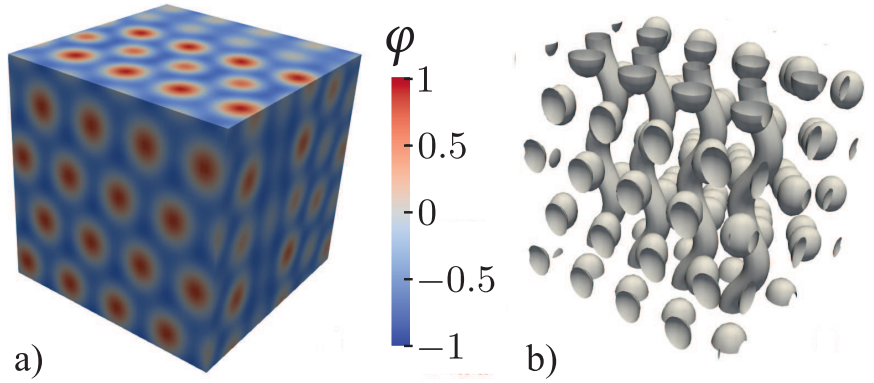

Рисунок 3.7 — Стационарное решение задачи МКФП в кубическом домене Ω 3) $32 \times 32 \times 32$ для $t \geqslant 1000$. На левом изображении представлено распределение φ на поверхности домена Ω, на правом изображении представлена изоповерхность $\bar{\varphi} = -0.34$ внутри домена Ω

в домене 2) представлена искривленными стержнями, что не является устойчивым типом кристаллических структур. На рисунке 3.7 показано, что даже небольшие изменения размеров расчетного домена 3) по сравнению с доменом 2) приводят к установлению некоторой смешанной структуры вместо искривленных стержней в предыдущем случае. На следующем рисунке 3.8 в домене 4) можно вновь наблюдать сформировавшуюся структуру ОЦК. Однако, дальнешее увеличение размеров домена до случая домена 5) вновь приводит к

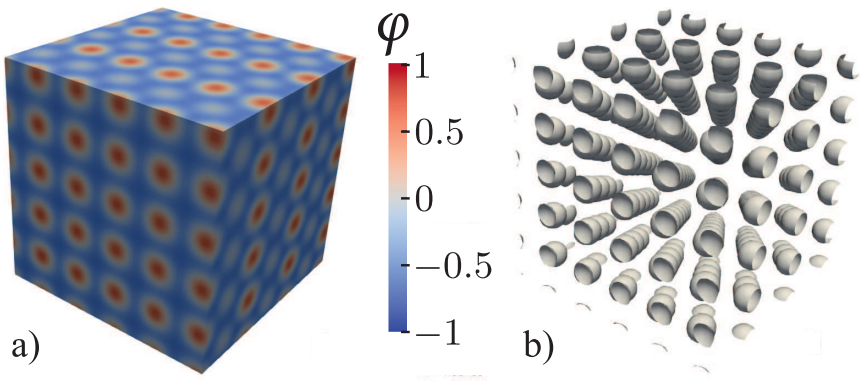

Рисунок 3.8 — Стационарное решение задачи МКФП в кубическом домене Ω 4) $39 \times 39 \times 39$ для $t \geqslant 1000$. На левом изображении представлено распределение φ на поверхности домена Ω, на правом изображении представлена изоповерхность $\bar{\varphi} = -0.34$ внутри домена Ω

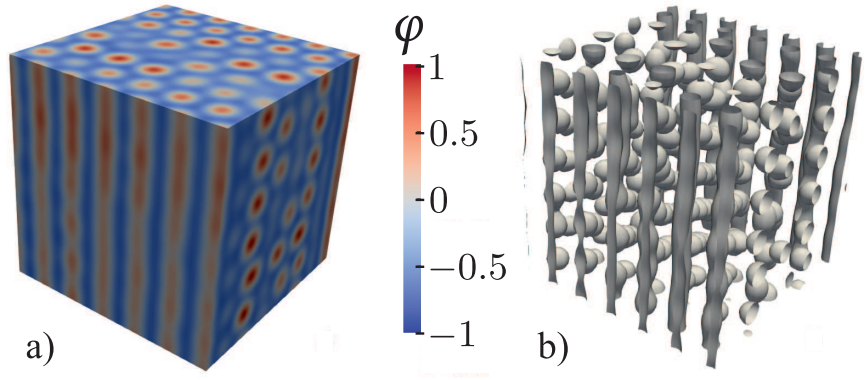

Рисунок 3.9 — Стационарное решение задачи МКФП в кубическом домене Ω 5) $45 \times 45 \times 45$ для $t \geqslant 1000$. На левом изображении представлено распределение φ на поверхности домена Ω, на правом изображении представлена изоповерхность $\bar{\varphi} = -0.34$ внутри домена Ω

образованию смешанной кристаллической структуры (рисунок 3.9). Результаты на рисунках 3.5 – 3.9 демонстрируют сильную зависимость итоговой стационарной структуры от размеров расчетной области Ω. В случаях, представленных на рисунках 3.5, 3.8, результат согласуется с ожидаемой структурой ОЦК. Для всех других расчетов результат не может быть классифицирован как известная устойчивая кристаллическая структура и, вероятно, является представлением некоторой метастабильной формы. Причиной непостоянства решения может

быть особенность метода МКФП. Она заключается в том, что изменения в кристаллической структуре происходят за счет минимизации функционала свободной энергии и, как следствие, возможно появление локальных минимумов этого функционала. Локальные минимумы функционала свободной энергии могут соответствовать локально стабильным или метастабильным состояниям кристаллической структуры. С увеличением размера вычислительной области число возможных распределений в ней атомной плотности φ для каждого момента времени значительно увеличивается. Можно предположить, что увеличивается и вероятность попадания системы в метастабильную область. Это, однако, не исключает возможности получения абсолютно стабильного кристаллообразования, но склонность кристаллической системы к установлению метастабильных нерегулярных структур тем выше, чем больше размер вычислительного домена. В работе [64] была исследована простейшая модификация МКФП модели с аддитивным стохастическим членом в правой части уравнения динамики. Этот член описывал случайные некоррелированные осциляции поля атомной плотности во времени. Было установлено, что при определенной величине амплитуды колебаний атомной плотности кристаллическая структура быстро релаксирует до равновесной формы, соответствующей глобальному минимуму функционала свободной энергии и предсказанной диаграммой состояний. Метастабильные образования в таком случае не формируются или являются нестационарными. Таким образом, включение в модель МКФП подходящего стохастического аддитивного члена, описывающего колебания поля атомной плотности, может решить проблему чувствительности установившегося решения к вариации вычислительных параметров: размера домена Ω и вида начальных условий.

3.3 Исследование зависимости качества пространственной аппроксимации от размеров конечного элемента

Периодические кристаллические структуры, описываемые моделью МКФП, определяются через состояние поля непрерывной величины атомной плотности φ. Поле является однородным в жидкой фазе и периодическим в кристаллической фазе. Таким образом, локальные пики атомной плотности позволяют судить о расположении атомов в исследуемой области. Исходя из этого, размер конечного элемента должен быть достаточным, чтобы аппроксимировать с необходимым качеством поле атомной плотности, в том числе колебания параметра решетки или расстояния между локальными пиками атомной плотности на границе раздела жидкой и кристаллической фазы λ_f, а также, в установившейся кристаллической структуре λ (рисунок 3.10). Величина амплитуды колебаний может быть пренебрежимо малой с чисто вычислительной точки зрения, но, тем не менее, иметь существенное значение с точки зрения физики исследуемого процесса. С точки зрения изогеометрического анализа, при неизменных базисных функциях улучшение пространственной аппроксимации возможно за счет сгущения расчетной сетки, т.е. уменьшения размеров конечного элемента. Подробно эта процедура рассмотрена в книге [24]. С другой стороны, использование густой вычислительной сетки значительно повышает расход вычислительных ресурсов. Этот факт становится особенно весомым при решении задач, исследующих динамику границы раздела фаз во время кристаллизации, поскольку в этих задачах возникает естественная необходимость рассматривать большие вычислительные домены. В итоге, с одной стороны, наш домен должен быть достаточно большим, чтобы обеспечить исследование динамики границы раздела фаз, а с другой стороны, размер конечного элемента должен быть достаточно мал, чтобы учитывать

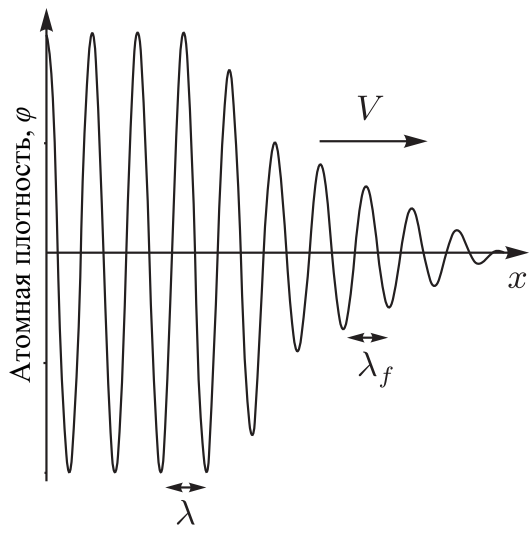

Рисунок 3.10 — Движущийся в направлении V фронт кристаллизации, описываемый моделью МКФП. λ – параметр решетки в равновесной области, λ_f – параметр решетки в зоне раздела жидкой и кристаллической фазы.

атомистический масштаб моделирования и улавливать малые колебания фазовой переменной φ. В противном случае, даже используя правильные начальные и граничные условия, можно получить некорректные "грубые"решения. Стационарное решение и динамика системы не должны быть предопределены размером конечного элемента и его базисными функциями.

Далее вычислительными экспериментами будет показано, что выбор размера конечных элементов должен опираться на параметр решетки исследуемой структуры. Задача МКФП решалась в постановке (2.20). Задача решалась со структурными параметрами средней атомной плотности $\bar{\varphi} = -0.34$ и переохлаждения $\varepsilon = 0.4$ в первом сценарии и $\bar{\varphi} = -0.13$ и переохлаждения $\varepsilon = 0.1$ – во втором. В первом сценарии рассматривалось начальное распределение φ в виде плоского фронта, который порождал плоскую границу раздела фаз, смещающуюся вдоль оси X расчетного домена Ω. Во втором сценарии рассматривался фронт кристаллизации, порожденный точечным начальным возмущением в центре расчетного домена. Первый сценарий моделировался для расчетного домена

с размерами $150 \times 30 \times 30$. Второй сценарий моделировался для расчетного домена с размерами $30 \times 30 \times 30$. Моделирование производилось на протяжении 100 временных шагов $\Delta t = 1$. В обоих сценариях использовалась равномерная прямоугольная сетка, подобная представленной на рисунке 3.1. Линейный размер прямоугольных конечных элементов выбирался различным с учетом безразмерного параметра решетки расчитываемой струтуры $\lambda = 5 \div 6$. В случае первого сценария фронт кристаллизации распространяется вдоль координатных осей домена Ω и, следовательно, вдоль граней кубических конечных элементов. Таким образом, критический линейный размер δx конечного элемента вдоль осей для корректной аппроксимации решения должен не превосходить параметр решетки λ. Следовательно, критический размер шага дискретизации должен находиться между 5 и 6. Учитывая это предположение, были проведены вычислительные эксперименты на сетках из конечных элементов различных размеров:a) $\Delta x = 2$, b) $\Delta x = 5$, c) $\Delta x = 6$, d) $\Delta x = 10$. Результаты расчетов на один и тот же момент времени 100 представлены на рисунке 3.11:

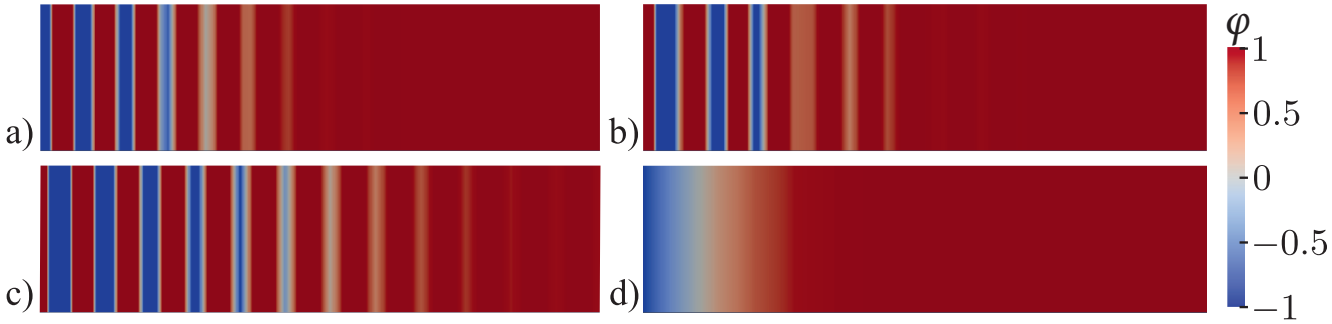

Рисунок 3.11 — Процесс кристаллизации на момент времени 100 для различных линейных размеров конечного элемента: a)$\Delta x = 2$, b)$\Delta x = 5$, c)$\Delta x = 6$ и d)$\Delta x = 10$.

На рисунке 3.11 видно, что результаты a) и b) очень схожи, в то время как результат c) свидетельствует о значительно большей скорости движения фронта

кристаллизации в домене, а результат d) и вовсе не демонстрирует установление периодической структуры в домене (характерные пики атомной плотности не прослеживаются). Измерения скорости фронта подтвердили наблюдения: для случая a) и b) скорость $\tilde{V} = 0.45$, в то же время для случая c) $\tilde{V} = 0.72$, что значительно больше. Эти результаты свидетельствуют о значительном ухудшении качества аппроксимации при увеличении линейного размера конечного элемента больше 5, что согласуется с первоначальными предположениями.

В случае второго сценария вычислительного эксперимента фронт кристаллизации должен распространяться во всех направлениях от центра домена Ω (точки начального возмущения). Таким образом, любой линейный размер конечного элемента (в том числе любая диагональ) должен не превосходить параметр решетки λ. Следовательно, критический шаг пространственной дискретизации должен быть между 3 и 4. Исходя из этого, были проведены вычислительные эксперименты с кубическими конечными элементами различных размеров:a) $\Delta x = 2$, b) $\Delta x = 3$, c) $\Delta x = 4$, d) $\Delta x = 6$. На рисунке 3.12 представлены результаты на момент времени 100:

На рисунке 3.12 можно наблюдать, что результаты a) и b), как и в случае сценария 1, весьма схожи. Однако, решение c) демонстрирует значительное изменение амплитуды распределения атомной плотности. Решение d) и вовсе не позволяет обнаружить периодическую кристаллическую структуру. Для решения a) и решения b) скорость фронта кристаллизации $\tilde{V} = 0.03$, но в решении d) скорость значительно больше: $\tilde{V} = 0.13$. Таким образом, аппроксимация решения значительно ухудшается при увеличении шага пространственной дискретизации на величину больше 3, что снова согласуется с изначальными теоретическими предположениями.

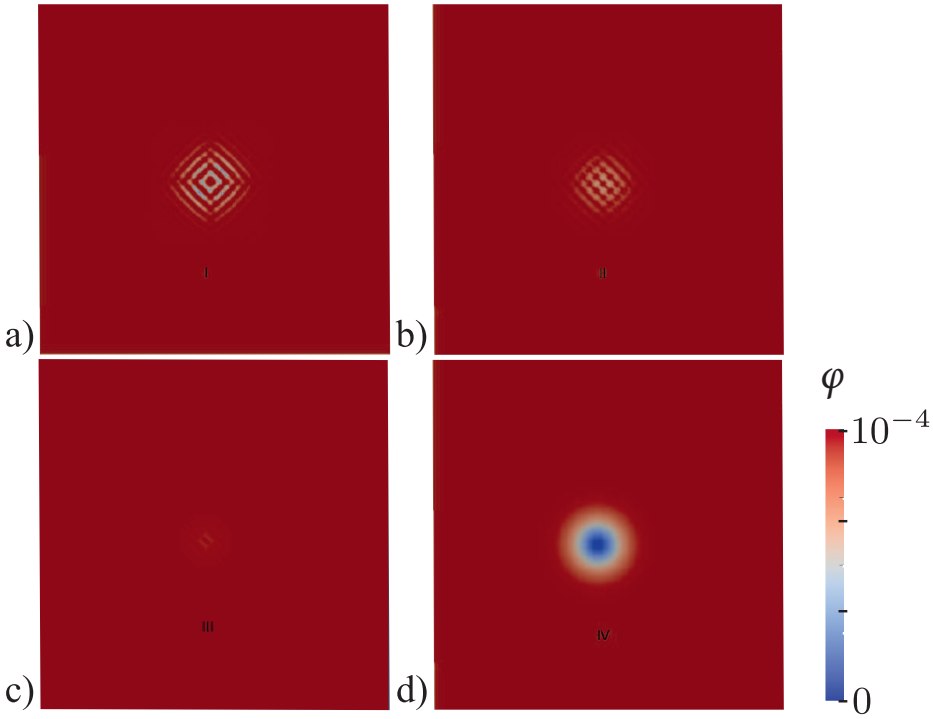

Рисунок 3.12 — Процесс кристаллизации на момент времени 100 для различных линейных размеров конечного элемента: a)$\Delta x = 2$, b)$\Delta x = 3$, c)$\Delta x = 4$, d)$\Delta x = 6$.

3.4 Выводы

В главе рассматриваются вычисления кристаллических структур модифицированным методом кристаллического фазового поля, подробное описание которого представлено в главе 1. Возможность проведения таких вычислений обеспечивается разработанным в главе 2 численным конечно-элементным методом, использующим изогеометрический анализ для пространственной аппроксимации и обеспечивающим безусловную устойчивость и второй порядок сходимости по времени.

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 работы [48] для случая одномодового представления свободной эенергии. Такая диаграмма предсказывает области образования равновесных структур типа: гомогенная (жидкая) фаза, объемно-центрированная кубическая ОЦК-структура (BCC в анлгоязычной литературе), а также структуры "стержни"(rods в анлгоязычной литературе) и "полосы"(stripes в анлгоязычной 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 структуры. Полученные результаты совпали с данными структурной диаграммы, что позволяет судить о справедливости модели МКФП и о корректной сходимости используемого вычислительного метода.

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 натурных экспериментах. Некоторые детали исследования стохастического аддитивного компонента модели МКФП приводятся в монографии автора диссертации [64].

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 плотности 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.

Глава 4. Программный комплекс для моделирования модифицированным методом кристаллического фазового поля (МКФП)

Для проведения компьютерных расчетов с помощью описанного в главе 2 вычислительного алгоритма было разработано специальное программное обеспечение, объединяющее в себе несколько основных программных модулей. В данной главе будет концептуально описана структура программного комплекса, представлены методы и подходы, которые использовались для непосредственной программной реализации, а также будут приведены результаты исследований об эффективности работы программного комплекса на высокопроизводительных вычислителях (суперкомпьютерах).

4.1 Структура программного комплекса

На рисунке 4.1 представлена общая структура программного комлекса, разработанного в рамках диссертационных исследований и реализующего представленные в главе 2 вычислительные алгоритмы решения уравнения модифицированного кристаллического фазового поля. Программный комплекс зарегистрирован под названием "PFC_Simulator" (свидетельство государственной регистрации программы для ЭВМ номер RU 2018617793). Тип реализующей ЭВМ: персональные компьютеры, кластеры (процессоры x86/64, графические процессоры CUDA). Язык программирования: C,C++, Python. ОС: Windows 95/98 и выше, Linux 3.2 и выше. Программный комплекс состоит из четырех основых модулей: препроцессора, основного вычислительного модуля, постпроцессора и модуля для дополнительных расчетов.

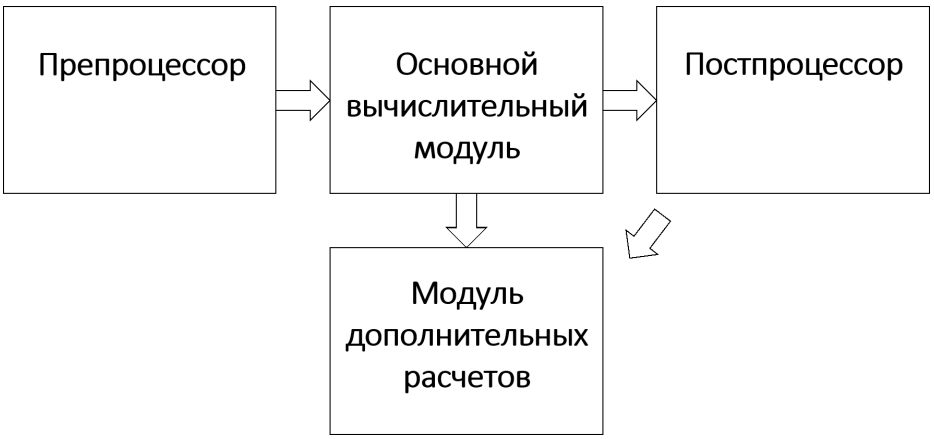

Рисунок 4.1 — Схематичное представление структуры программного комплекса "PFC_Simulator"

4.1.1 Модуль препроцессор

Препроцессор отвечает за постановку расчетной задачи в формализме модели МКФП с конкретными условиями и параметрами. Постановка задачи включает в себя определение расчетного домена Ω в формализме NURBS функций, определение узлов контрольной, физической сетки и параметрического пространства (см. глава 2). Ниже приводится список параметров и свойств, определяемых препроцессором:

1) Средняя величина атомной плотности вещества $\bar{\varphi}$ в расчетной области Ω в начальный момент времени t_0;
2) Переохлаждение вещества ε в расчетной области в начальный момент времени;
3) Размеры L_x,L_y,L_z расчетного домена Ω;
4) Величина параметра τ, отвечающего за скорость релаксации структуры вещества;
5) Параметры вид начального возмущения системы;

6) Параметры расчетной сетки N_x,N_y,N_z (шаги дискретизации) для заданного домена;
7) Величина шага по времени Δt вычислительного процесса;
8) Предельная длительность t_max моделируемого процесса;
9) Предельное количество шагов $Duration$ по времени для выполнения вычислений;
10) Компьютерное время $TimeRestart$, принимаемое за начальный момент вычислений; (используется в случае перезапуска расчета с некоторого момента времени)
11) Шаг по времени $StepRestart$, принимаемый за начальный момент вычислений (используется в случае перезапуска расчета с некоторого шага по времени);
12) Параметры для сохранения промежуточных данных вычислений ($FreqResults$,$FreqRestarts$).

Модуль реализован набором $bash$-скриптов и исполняется посредством запуска оболочки bash-shell. После окончательной детерминации постановки конкретной расчетной задачи модуль компилирует полученный программный код и сохраняет бинарный исполнительный файл. Для компиляции модуль может использовать свободно распространяемые компиляторы MinGW, GNU и коммерческие Cygwin и Intel. Для компиляции в режиме параллельных вычислений могут использоваться наиболее популярные реализации MPI: MPICH, Open MPI, Intel MPI. Запуск и работа модуля осуществляется через интерфейс командной строки и стандартными командами $bash - shell$. Таким образом, данный модуль является кроссплатформенным, может генерировать исполнительный код для вычислителей различной архитектуры и может быть легко расширен за счет включения в него дополнительного набора $bash$-скриптов.

4.1.2 Основной вычислительный модуль

Основной вычислительный модуль представляет собой программный код на языке C и C++. Модуль использует инструментарий свободно распространяемых алгоритмических библиотек PETSc [167; 168] и PetIGA [169]. На базе этого инструментария реализуется численный алгоритм решения уравнения модифицированного кристаллического фазового поля (МКФП), описанный в главе 2.

Вычислительный модуль работает в связке с препроцессором и выполняет численное решение поставленной препроцессором задачи (в последовательном, либо параллельном режиме). Управление работой вычислительного модуля осуществляется через командную строку с помощью команд $bash-shell$ и специальных $bash$-скриптов. Реализованы следующие опции запуска вычислительного модуля:

1) Количество параллельных потоков для выполнения вычислений;
2) Частота вывода промежуточных результатов расчета во время работы программы;;
3) Использование данных предыдущих вычислений для запуска расчета с некоторого промежуточного момента времени
4) Вывод технической информации о ходе расчетов.

Отметим, что вычислительный модуль написан на распространенных языках программирования C/C++ и использует только открытые алгоритмические программные библиотеки. Поэтому работа этого модуля возможна на вычислителях с практически любой современной операционной системой и процессорами архитектуры x86, т. е. модуль является кроссплатформенным и не требует установки дополнительного коммерческого программного обеспечения.

4.1.3 Модуль постпроцессор

Данный модуль предназначен для обработки массива данных, передаваемых вычислительным модулем, и визуализации результатов расчетов в различной форме. Модуль использует инструментарий IGAKIT, представленный в алгоритмической библиотеке PetIGA. IGAKIT обеспечивает механизм доступа к бинарным файлам, содержащим данные результатов расчета. Используя специальный программный код, написанный на языке Python, производится конвертация результатов вычислений в файлы формата VTK. Данный формат является частью открытой кроссплатформенной программной системы для трёхмерного моделирования, обработки изображений и прикладной визуализации. Полученные файлы могут быть открыты в различных графических визуализаторах, например, в свободно распространяемом визуализаторе ParaView. Управление модулем осуществляется через командную строку с помощью команд $bash - shell$ и соответствующих скриптов. Следует отметить, что, как и в предыдущих модулях, модуль постпроцессора не использует коммерческие, закрытые или узкоспециализированные методы и программные компоненты. Это, также, делает модуль кроссплатформенным и не ограниченным проприетарными лицензиями.

4.1.4 Модуль дополнительных расчетов

Данный модуль служит расширению возможности основного вычислительного модуля при решении задач, требующих проведения дополнительных

расчетов или обработки информации о расчетах. На данный момент модуль содержит:

1) Средства для расчета параметров микроструктуры вещества во время структурно-фазовых перестроений: волнового числа, параметра решетки и скорости движения фронта структурно-фазового перехода. Эти средства представляют собой специальные программы, написанные на языке Python и C++, которые используют данные расчетов структурно--фазовых трансформаций, обрабатывают их и генерируют бинарный файл отчета;
2) Средства анализа использования вычислительных ресурсов и накопления статистики работы вычислительного модуля. Данные средства используют доступные в библиотеке PETSc инструменты профайлинга и могут применяться, например, для определения производительности выполнения расчетов с использованием различной конфигурации вычислительного сервера и его системных настроек.

Данный модуль может быть расширен за счет дополнительных программ, написанных на любых удобных языках программирования, поскольку интерфейс взаимодействия с вычислительным модулем и постпроцессором основан на передаче данных в бинарных файлах.

4.2 Исследование эффективности программного комплекса при вычислениях на многопроцессорных ЭВМ

Разработанный программный комплекс был исследован на эффективность выполнения расчетов в параллельном режиме на многопроцессорном

вычислительном кластере. Для исследования использовался подход, с помощью которого была доказана высокая эффективность алгоритмов, реализованных в библиотеке PETSc. 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 4.2 и рисунке 4.3.

Результаты демонстрируют уменьшение необходимого времени как при увели-

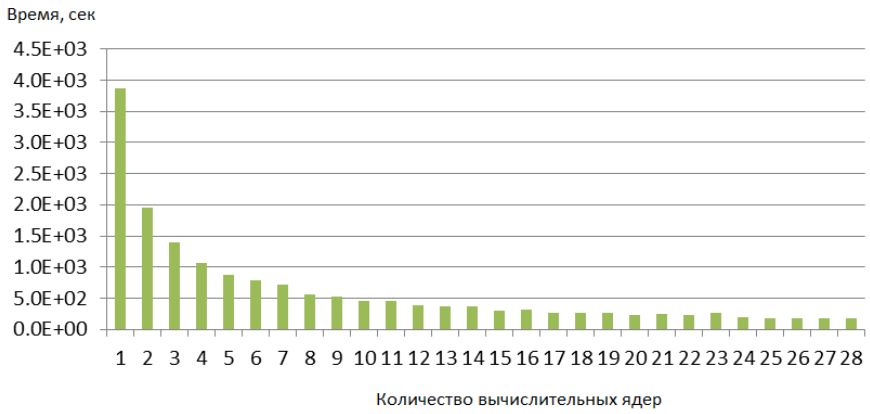

Рисунок 4.2 — Расчетное время решения фиксированной задачи PFC на одном шаге по времени. Используются вычислительные ядра одного узла

Рисунок 4.3 — Расчетное время решения фиксированной задачи МКФП на одном шаге по времени. Используются все вычислительные ядра переменного количества узлов.

чении 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.

4.3 Выводы

В главе рассмотрен программный комплекс "PFC_Simulator" , разработанный для моделирования процессов кристаллизации модифицированным методом кристаллического фазового поля (МКФП). Программный комплекс прошел процедуру государственной регистрации программы для ЭВМ, и ему присвоен регистрационный номер RU 2018617793. Рассмотренный программный комплекс

состоит из четырех связанных модулей, работа с которыми осуществляется через интерфейс командной строки и посредством набора $bash-shell$ скриптов. Программный комплекс позволяет формулировать задачу в рамках модели МКФП, инициализировать вычислительные компоненты изогеометрического 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" .

Заключение

4.4 Основные результаты

Результаты исследований диссертации:

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 изогеометрического 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 распространямых 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 с аналитической структурной диаграммой. 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 изогеометрического 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.

Результаты представленных в диссертации исследований отражены в ряде публикаций: 8 публикаций в журналах из баз Scopus и/или Web of Science, 1 публикация в журналах из списка ВАК по специальности, 1 публикация в иных изданиях. Результаты диссертационных исследований нашли свое отражение в изданной монографии, посвященной моделированию быстрой динамики кристаллизации.

4.5 Перспективы дальнейших исследований

Модель кристаллического фазового поля в модифицированной (гиперболической) 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. Таковыми, 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.

Автор выражает благодарность П.К. Галенко, В.Е. Анкудинову и Н.В. Кропотину за многочисленные неоценимые дисскуссии, советы и комментарии.

Список литературы

1. Modeling Elasticity in Crystal Growth / K. R. Elder [et al.] // 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.
4. *Swift J.*, *Hohenberg P. C.* Hydrodynamic fluctuations at the convective instability // Phys. Rev. A. — 1977. — Vol. 15, issue 1. — P. 319—328.
5. *Cross M. C.*, *Hohenberg P. C.* Pattern formation outside of equilibrium // Rev. Mod. Phys. — 1993. — Vol. 65, issue 3. — P. 851—1112.
6. *Ramakrishnan T. V.*, *Yussouff M.* First-principles order-parameter theory of freezing // Phys. Rev. B. — 1979. — Vol. 19, issue 5. — P. 2775—2794.
7. *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.
8. *Singh Y.* Density-functional theory of freezing and properties of the ordered phase // Physics Reports. — 1991. — Vol. 207, no. 6. — P. 351—444.
9. *Jin Y. M.*, *Khachaturyan 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.

10. Polymorphism, crystal nucleation and growth in the phase-field crystal model in 2D and 3D / G. I. Tth [et al.] // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2010. — Vol. 22, no. 36. — P. 364101.

11. Derivation of the phase-field-crystal model for colloidal solidification / S. van Teeffelen [et al.] // Physical Review E. — 2009. — Vol. 79, issue 5. — P. 051404.

12. *Berry J.*, *Elder K. R.*, *Grant M.* Melting at dislocations and grain boundaries: A phase field crystal study // Physical Review B. — 2008. — Vol. 77, no. 22. — P. 224114.

13. Plasticity and dislocation dynamics in a phase field crystal model / P. Y. Chan [et al.] // Physical review letters. — 2010. — Vol. 105, no. 1. — P. 015502.

14. *Huang Z.-F.*, *Elder K. R.* Mesoscopic and Microscopic Modeling of Island Formation in Strained Film Epitaxy // Phys. Rev. Lett. — 2008. — Vol. 101, issue 15. — P. 158701.

15. *Wu K.-A.*, *Voorhees P. W.* Stress-induced morphological instabilities at the nanoscale examined using the phase field crystal approach // Physical Review B. — 2009. — Vol. 80, no. 12. — P. 125408.

16. Nonlinear driven response of a phase-field crystal in a periodic pinning potential / C. V. Achim [et al.] // Physical Review E. — 2009. — Vol. 79, no. 1. — P. 011606.

17. Thermodynamics of bcc metals in phase-field-crystal models / A. Jaatinen [et al.] // Physical Review E. — 2009. — Vol. 80, no. 3. — P. 031602.

18. *Stefanovic P.*, *Haataja M.*, *Provatas N.* Phase-field crystals with elastic interactions // Physical Review Letters. — 2006. — Vol. 96, no. 22. — P. 225504.

19. *Galenko 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.

20. *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.

21. *Galenko 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.

22. Unconditionally stable method and numerical solution of the hyperbolic phase--field crystal equation / P. K. Galenko [et al.] // Phys. Rev. E. — 2013. — Vol. 88, issue 1. — P. 013310.

23. *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.

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

25. *Cheng M.*, *Warren J. A.* An efficient algorithm for solving the phase field crystal model // Journal of Computational Physics. — 2008. — Vol. 227, no. 12. — P. 6241—6248.

26. *Hirouchi T.*, *Takaki T.*, *Tomita Y.* Development of numerical scheme for phase field crystal deformation simulation // Computational Materials Science. — 2009. — Vol. 44, no. 4. — P. 1192—1197.

27. *Hirouchi T., Takaki T., Tomita Y.* Effects of temperature and grain size on phase-field-crystal deformation simulation // International Journal of Mechanical Sciences. — 2010. — Vol. 52, no. 2. — P. 309—319.

28. Stable and efficient finite-difference nonlinear-multigrid schemes for the phase field crystal equation / Z. Hu [et al.] // Journal of Computational Physics. — 2009. — Vol. 228, no. 15. — P. 5323—5339.

29. Advanced operator splitting-based semi-implicit spectral method to solve the binary phase-field crystal equations with variable coefficients / G. Tegze [et al.] // Journal of Computational Physics. — 2009. — Vol. 228, no. 5. — P. 1612—1623.

30. *Wise S. M., Wang C., Lowengrub J. S.* An energy-stable and convergent finite-difference scheme for the phase field crystal equation // SIAM Journal on Numerical Analysis. — 2009. — Vol. 47, no. 3. — P. 2269—2288.

31. *Armero F., Zambrana-Rojas C.* Volume-preserving energy–momentum schemes for isochoric multiplicative plasticity // Computer methods in applied mechanics and engineering. — 2007. — Vol. 196, no. 41—44. — P. 4130—4159.

32. *Meng X., Laursen T.* Energy consistent algorithms for dynamic finite deformation plasticity // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 2002. — Vol. 191, no. 15/16. — P. 1639—1675.

33. *Romero I.* Algorithms for coupled problems that preserve symmetries and the laws of thermodynamics: Part I: Monolithic integrators and their application to finite strain thermoelasticity // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 2010. — Vol. 199, no. 25—28. — P. 1841—1858.

34. *Romero I.* Algorithms for coupled problems that preserve symmetries and the laws of thermodynamics: Part II: Fractional step methods // Computer Methods

in Applied Mechanics and Engineering. — 2010. — Vol. 199, no. 33—36. — P. 2235—2248.

35. *Harten A.* On the symmetric form of systems of conservation laws with entropy // Journal of computational physics. — 1983. — Vol. 49. — P. 151—164.

36. *He L.-p.*, *Liu Y.* A class of stable spectral methods for the Cahn–Hilliard equation // Journal of Computational Physics. — 2009. — Vol. 228, no. 14. — P. 5101—5110.

37. *Hughes T. J.*, *Franca L.*, *Mallet M.* A new finite element formulation for computational fluid dynamics: I. Symmetric forms of the compressible Euler and Navier-Stokes equations and the second law of thermodynamics // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 1986. — Vol. 54, no. 2. — P. 223—234.

38. *Shakib F.*, *Hughes T. J.*, *Johan Z.* A new finite element formulation for computational fluid dynamics: X. The compressible Euler and Navier-Stokes equations // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 1991. — Vol. 89, no. 1—3. — P. 141—219.

39. *Tadmor E.* Skew-selfadjoint form for systems of conservation laws // Journal of Mathematical Analysis and Applications. — 1984. — Vol. 103, no. 2. — P. 428—442.

40. *Du Q.*, *Nicolaides R. A.* Numerical analysis of a continuum model of phase transition // SIAM Journal on Numerical Analysis. — 1991. — Vol. 28, no. 5. — P. 1310—1322.

41. *Elliott C. M.* The Cahn-Hilliard model for the kinetics of phase separation // Mathematical models for phase change problems. — Springer, 1989. — P. 35—73.

42. *Eyre D. J.* An unconditionally stable one-step scheme for gradient systems. — 1998.

43. *Furihata D.* A stable and conservative finite difference scheme for the Cahn-Hilliard equation // Numerische Mathematik. — 2001. — Vol. 87, no. 4. — P. 675—699.

44. *Gomez H.*, *Hughes T. J.* Provably unconditionally stable, second-order time-accurate, mixed variational methods for phase-field models // Journal of Computational Physics. — 2011. — Vol. 230, no. 13. — P. 5310—5327.

45. *Wang C.*, *Wang X.*, *Wise S. M.* Unconditionally stable schemes for equations of thin film epitaxy // Discrete Contin. Dyn. Syst. — 2010. — Vol. 28, no. 1. — P. 405—423.

46. *Wang C.*, *Wise S. M.* An energy stable and convergent finite-difference scheme for the modified phase field crystal equation // SIAM Journal on Numerical Analysis. — 2011. — Vol. 49, no. 3. — P. 945—969.

47. *Wise S.* Unconditionally stable finite difference, nonlinear multigrid simulation of the Cahn-Hilliard-Hele-Shaw system of equations // Journal of Scientific Computing. — 2010. — Vol. 44, no. 1. — P. 38—68.

48. *Jaatinen 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.

49. *Jaatinen A.* Modeling materials with phase field crystal models. — 2010.

50. *Wang 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.

51. *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.

52. *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.

53. Об аппроксимации периодического решения уравнения кристаллического фазового поля при расчетах методом конечных элементов / И. О. Стародумов [и др.] // Программные системы: теория и приложения. — 2018. — Т. 4, № 39. — С. 265—278.

54. *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. — P. 020065.

55. Образование дефектных и метастабильных структур при моделировании фазовых переходов методом кристаллического фазового поля / Д. В. Александров [и др.] // Расплавы. — 2018. — Т. 2. — С. 247—256.

56. Influence of computational domain size on the pattern formation of the phase field crystals / I. Starodumov [et al.] // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. — 2017. — Vol. 192, no. 1. — P. 012008.

57. Influence of initial seed distribution on the pattern formation of the phase field crystals / I. Starodumov [et al.] // AIP Conference Proceedings. — 2017. — Vol. 1906. — P. 200006.

58. *Starodumov I.*, *Ankudinov V.*, *Galenko P.* Simulation of crystalline pattern formation by the MPFC method // MATEC Web of Conferences. — 2017. — Vol. 129. — P. 02035.

59. *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. — P. 020136.

60. The effectiveness of parallelizing an algorithm of the PFC equation solution using PetIGA library / I. Starodumov [et al.] // Vestnik Udmurtskogo Universiteta. Matematika. Mekhanika. Komp'yuternye Nauki. — 2016. — Vol. 26, no. 3. — P. 445—450.

61. Three dimensional structures predicted by the modified phase field crystal equation / J. Bueno [et al.] // Computational Materials Science. — 2016. — Vol. 111. — P. 310—312.

62. Analysis of the efficiency PETSc and PETIGA libraries in solving the problem of crystal growth / I. Starodumov [et al.]. — 2015.

63. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ в Федеральной службе по интеллектуальной собственности RU 2018617793. Phase Field Crystal Simulator (PFC_ Simulator) / Стародумов И.О., Александров Д.В., Павлюк Е.В.; правообладатель ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина»; заявл. 14.05.2018; опубл. 02.07.2018.

64. *Galenko P., Ankudinov V., Starodumov I.* Phase-Field Crystals: Fast Interface Dynamics. Vol. 51. — Walter de Gruyter GmbH & Co KG, 2018.

65. *Herlach D. M., Galenko P. K., Holland-Moritz D.* Metastable solids from undercooled melts. — Elsevier, 2007. — P. 432.

66. *Рубинштейн Л.* Проблема Стефана. — Рига : Звайгзне, 1967. — 457 с.

67. *Meirmanov A. M.* The Stefan Problem. Vol. 3. — Walter de Gruyter, 1992.

68. *Hilliard J., Cahn J.* On the nature of the interface between a solid metal and its melt // Acta Metallurgica. — 1958. — Vol. 6, no. 12. — P. 772—774.

69. *Steinbach I.* Phase-field models in materials science // Modelling and simulation in materials science and engineering. — 2009. — Vol. 17, no. 7. — P. 073001.

70. *Lindemann F. A.* The calculation of molecular vibration frequencies // Phys. z. — 1910. — Vol. 11. — P. 609.

71. *Grimvall G., Sjödin S.* Correlation of properties of materials to Debye and melting temperatures // Physica Scripta. — 1974. — Vol. 10, no. 6. — P. 340.

72. *Hansen J.-P., Verlet L.* Phase transitions of the Lennard-Jones system // Physical Review. — 1969. — Vol. 184, no. 1. — P. 151.

73. Dimensional crossover and the freezing transition in density functional theory / Y. Rosenfeld [et al.] // Journal of Physics: Condensed Matter. — 1996. — Vol. 8, no. 40. — P. L577.

74. *Haataja M., Léonard F.* Influence of mobile dislocations on phase separation in binary alloys // Physical Review B. — 2004. — Vol. 69, no. 8. — P. 081201.

75. *Hu S., Chen L.* A phase-field model for evolving microstructures with strong elastic inhomogeneity // Acta materialia. — 2001. — Vol. 49, no. 11. — P. 1879—1890.

76. *Van Swygenhoven H.* Footprints of plastic deformation in nanocrystalline metals // Materials Science and Engineering: A. — 2008. — Vol. 483. — P. 33—39.

77. Deformation mechanism crossover and mechanical behaviour in nanocrystalline materials / V. Yamakov [et al.] // Philosophical Magazine Letters. — 2003. — Vol. 83, no. 6. — P. 385—393.

78. *Schiøtz J., Jacobsen K. W.* A maximum in the strength of nanocrystalline copper // Science. — 2003. — Vol. 301, no. 5638. — P. 1357—1359.

79. Toward a quantitative understanding of mechanical behavior of nanocrystalline metals / M. Dao [et al.] // Acta Materialia. — 2007. — Vol. 55, no. 12. — P. 4041—4065.

80. *Elder K.*, *Grant M.* Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals // Physical Review E. — 2004. — Vol. 70, no. 5. — P. 051605.

81. Функционал атомной плотности и диаграмма структур в модели кристаллического фазового поля / В. Анкудинов [и др.] // ЖЭТФ. — 2016. — Т. 149, № 2. — С. 343—356.

82. *Kats E.*, *Lebedev V.*, *Muratov A.* Weak crystallization theory // Physics reports. — 1993. — Vol. 228, no. 1/2. — P. 1—91.

83. *Stefanovic P.*, *Haataja M.*, *Provatas N.* Phase field crystal study of deformation and plasticity in nanocrystalline materials // Physical Review E. — 2009. — Vol. 80, no. 4. — P. 046107.

84. *Berry J.*, *Grant M.*, *Elder K.* Diffusive atomistic dynamics of edge dislocations in two dimensions // Physical Review E. — 2006. — Vol. 73, no. 3. — P. 031609.

85. Phase diagram and commensurate-incommensurate transitions in the phase field crystal model with an external pinning potential / C. Achim [et al.] // Physical Review E. — 2006. — Vol. 74, no. 2. — P. 021104.

86. Phase diagram of pinned lattices in the phase field crystal model / C. Achim [et al.] // Journal of Physics: Conference Series. Vol. 100. — IOP Publishing. 2008. — P. 072001.

87. Dynamical transitions and sliding friction of the phase-field-crystal model with pinning / J. Ramos [et al.] // Physical Review E. — 2010. — Vol. 81, no. 1. — P. 011121.

88. *Goldenfeld N.*, *Athreya B. P.*, *Dantzig J. A.* Renormalization group approach to multiscale simulation of polycrystalline materials using the phase field crystal model // Physical Review E. — 2005. — Vol. 72, no. 2. — P. 020601.

89. *Elder K.*, *Huang Z.-F.*, *Provatas N.* Amplitude expansion of the binary phase-field--crystal model // Physical Review E. — 2010. — Vol. 81, no. 1. — P. 011602.

90. *Athreya B. P.*, *Goldenfeld N.*, *Dantzig J. A.* Renormalization-group theory for the phase-field crystal equation // Physical Review E. — 2006. — Vol. 74, no. 1. — P. 011601.

91. Density-amplitude formulation of the phase-field crystal model for two-phase coexistence in two and three dimensions / D.-H. Yeon [et al.] // Philosophical Magazine. — 2010. — Vol. 90, no. 1—4. — P. 237—263.

92. *Spatschek R.*, *Karma A.* Amplitude equations for polycrystalline materials with interaction between composition and stress // Physical Review B. — 2010. — Vol. 81, no. 21. — P. 214201.

93. *Huang Z.-F.*, *Elder K.*, *Provatas N.* Phase-field-crystal dynamics for binary systems: Derivation from dynamical density functional theory, amplitude equation formalism, and applications to alloy heterostructures // Physical Review E. — 2010. — Vol. 82, no. 2. — P. 021605.

94. *Tupper P.*, *Grant M.* Phase field crystals as a coarse-graining in time of molecular dynamics // EPL (Europhysics Letters). — 2008. — Vol. 81, no. 4. — P. 40007.

95. *Галенко П. К.*, *Данилов Д. А.*, *Лебедев В. Г.* Быстрая динамика в моделях кристаллического фазового поля и Свифта-Хоэнберга // Вестник Удмуртского университета. Серия Физика и химия. — 2009. — № 4—1. — С. 12—37.

96. *Мандельштам Л.*, *Леонтович М.* К теории поглощения звука в жидкостях // ЖЭТФ. — 1937. — Т. 7, № 3. — С. 438.

97. Wavelength selection in systems far from equilibrium / L. Kramer [et al.] // Physical Review Letters. — 1982. — Vol. 49, no. 26. — P. 1891.

98. *Van Saarloos W.* Front propagation into unstable states // Physics reports. — 2003. — Vol. 386, no. 2—6. — P. 29—222.

99. Phase-field crystal modeling and classical density functional theory of freezing / K. R. Elder [et al.] // Physical Review B. — 2007. — Vol. 75, no. 6. — P. 064107.

100. *Müller I.*, *Ruggeri T.* Extended Thermodynamics. Vol. 37. — Springer US, 1993. — P. 230.

101. *Joseph D. D.*, *Preziosi L.* Heat waves // Reviews of Modern Physics. — 1989. — Vol. 61, no. 1. — P. 41—73.

102. *Nettleton R. E.* Relaxation Theory of Thermal Conduction in Liquids // Physics of Fluids. — 1960. — Vol. 3, no. 2. — P. 216.

103. *Galenko P.* Phase-field model with relaxation of the diffusion flux in nonequilibrium solidification of a binary system // Physics Letters, Section A. — 2001. — Vol. 287, no. 3/4. — P. 190—197.

104. *Galenko P.*, *Jou D.* Diffuse-interface model for rapid phase transformations in nonequilibrium systems // Physical Review E. — 2005. — Vol. 71, no. 4. — P. 046125-1-13.

105. *Jou D.*, *Casas-Vázquez J.*, *Lebon G.* Extended irreversible thermodynamics. — Dordrecht : Springer Netherlands, 2010. — P. 483.

106. On the selection of the state space in nonequilibrium thermodynamics / R. Luzzi [et al.] // Physica A. — 1998. — Vol. 248, no. 1/2. — P. 111—137.

107. *Lebon G.*, *Jou D.*, *Casas-Vazquez J.* An extension of the local equilibrium hypothesis // Journal of Physics A: Mathematical and General. — 1980. — Vol. 13, no. 1. — P. 275—290.

108. *Galenko P.*, *Danilov D.*, *Lebedev V.* Phase-field-crystal and Swift-Hohenberg equations with fast dynamics // Physical Review E. — 2009. — Vol. 79, no. 5. — P. 51110.

109. *Jou D.*, *Galenko P.* Coarse graining for the phase-field model of fast phase transitions // Physical Review E. — 2013. — Vol. 88, no. 4. — P. 042151.

110. *Bronchart Q.*, *Le Bouar Y.*, *Finel A.* New coarse-grained derivation of a phase field model for precipitation // Physical review letters. — 2008. — Vol. 100, no. 1. — P. 015702.

111. *Mandel'shtam L.*, *Leontovich M.* Attenuation of Sound in Liquids // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 1937. — Vol. 7, no. 3. — P. 438—449.

112. *Lifshits E. M.*, *Pitaevskii L. P.* Physical kinetics. — Elsevier, 2008. — P. 452.

113. *Patashinskii A. Z.*, *L. P. V.* Fluctuation Theory of Phase Transitions. — Wiley-Blackwell, 1979. — P. 321.

114. *Archer A.* Dynamical density functional theory for molecular and colloidal fluids: A microscopic approach to fluid mechanics // Journal of Chemical Physics. — 2009. — Vol. 130. — P. 014509-1-8.

115. *Majaniemi S.*, *Grant M.* Dissipative phenomena and acoustic phonons in isothermal crystals: A density-functional theory study // Physical Review B. — 2007. — Vol. 75, no. 5. — P. 054301.

116. Bifurcation With Memory. / W. Olmstead [et al.] // SIAM Journal on Applied Mathematics. — 1986. — Vol. 46, no. 2. — P. 171—188.

117. *Duffy B.*, *Freitas P.*, *Grinfeld M.* Memory driven instability in a diffusion process // SIAM Journal on Mathematical Analysis. — 2002. — Vol. 33, no. 5. — P. 1090—1106.

118. *Goldenfeld N.*, *Athreya B. P.*, *Dantzig J. A.* Renormalization group approach to multiscale simulation of polycrystalline materials using the phase field crystal model // Physical Review E. — 2005. — Vol. 72, no. 2.

119. *Cross M. C.*, *Hohenberg P. C.* Pattern formation outside of equilibrium // Reviews of Modern Physics. — 1993. — Vol. 65. — P. 851.

120. *Swift J.*, *Hohenberg P. C.* Hydrodynamic fluctuations at the convective instability // Physical Review A. — 1977. — Vol. 15, no. 1. — P. 319—328.

121. *Berry J.*, *Grant M.*, *Elder K. R.* Diffusive atomistic dynamics of edge dislocations in two dimensions // Physical Review E. — 2006. — Vol. 73, no. 3. — P. 031609.

122. *Tupper P. F.*, *Grant M.* Phase field crystals as a coarse-graining in time of molecular dynamics // Europhysics Letters. — 2008. — Vol. 81, no. 4. — P. 40007.

123. *Garel T.*, *Doniach S.* Phase transitions with spontaneous modulation-the dipolar Ising ferromagnet // Physical Review B. — 1982. — Vol. 26, no. 1. — P. 325—329.

124. *Sagui C.*, *Desai R. C.* Late-stage kinetics of systems with competing interactions quenched into the hexagonal phase // Physical Review E. — 1995. — Vol. 52, no. 3. — P. 2807—2821.

125. *Potemkin I. I.*, *Panyukov S. V.* Microphase separation in correlated random copolymer- Mean-field theory and fluctuation corrections // Physical Review E. — 1998. — Vol. 57, no. 6. — P. 6902—6912.

126. *Galenko P. K.*, *Danilov D. A.* Local nonequilibrium effect on rapid dendritic growth in a binary alloy melt // Physics Letters, Section A. — 1997. — Vol. 235, no. 3. — P. 271—280.

127. *Galenko P. K.*, *Danilov D. A.* Model for free dendritic alloy growth under interfacial and bulk phase nonequilibrium conditions // Journal of Crystal Growth. — 1999. — Vol. 197, no. 4. — P. 992—1002.

128. *Eckhaus W.* Studies in non-linear stability theory. — Springer, Berlin, 1965. — P. 117.

129. *Birkhoff G.*, *Lynch R.* // Numerical Solution of Elliptic Problems. — 1984.

130. *Hughes T.*, *Cottrell J.*, *Bazilevs Y.* Isogeometric analysis: CAD, finite elements, NURBS, exact geometry and mesh refinement // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 2005. — Vol. 194, no. 39—41. — P. 4135—4195.

131. Isogeometric analysis: Approximation, stability and error estimates for h-refined meshes / Y. Bazilevs [et al.] // Mathematical Models and Methods in Applied Sciences. — 2006. — Vol. 16, no. 7. — P. 1031—1090.

132. Isogeometric fluid-structure interaction analysis with applications to arterial blood flow / Y. Bazilevs [et al.] // Computational Mechanics. — 2006. — Vol. 38, no. 4/5. — P. 310—322.

133. Isogeometric analysis of structural vibrations / J. Cottrell [et al.] // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 2006. — Vol. 195, no. 41—43. — P. 5257—5296.

134. *Cottrell J.*, *Hughes T.*, *Reali A.* Studies of refinement and continuity in isogeometric structural analysis // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 2007. — Vol. 196, no. 41—44. — P. 4160—4183.

135. Isogeometric analysis of the Cahn-Hilliard phase-field model / H. Gómez [et al.] // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 2008. — Vol. 197, no. 49/50. — P. 4333—4352.

136. *Piegl L.*, *Tiller W.* The Nurbs Book (Monograph in Visual Communications). — Springer-Verlag New York, 1997.

137. *Farin G.* Curves and Surfaces for CAGD. — Morgan Kaufmann, 1993.

138. *Farin G.* NURBS Curves and Surfaces: From Projective Geometry to Practical Use. — AK Peters Ltd., 1995.

139. *Cohen E.*, *Riesenfeld R.*, *Elber G.* // Geometric Modeling with Splines: An Introduction. — 2001.

140. *Rogers D.* // An Introduction to NURBS with Historical Perspective. — 2001.

141. T-splines and T-NURCCs / T. Sederberg [et al.] // ACM Transactions on Graphics. — 2003. — Vol. 22, no. 3. — P. 477—484.

142. T-spline simplification and local refinement / T. Sederberg [et al.] // ACM SIGGRAPH 2004 Papers, SIGGRAPH 2004. — 2004. — P. 276—283.

143. *Loop C.*, *DeRose T.* A Multisided Generalization of Bézier Surfaces // ACM Transactions on Graphics (TOG). — 1989. — Vol. 8, no. 3. — P. 204—234.

144. *Bajaj C.*, *Chen J.*, *Xu G.* Modeling with Cubic A-Patches // ACM Transactions on Graphics (TOG). — 1995. — Vol. 14, no. 2. — P. 103—133.

145. *Provatidis C.* Integration-free Coons macroelements for the solution of 2D Poisson problems // International Journal for Numerical Methods in Engineering. — 2009. — Vol. 77, no. 4. — P. 536—557.

146. *Hughes T.* // The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis. — 2000.

147. *Cox M.* The numerical evaluation of B-splines // IMA Journal of Applied Mathematics. — 1971. — No. 10. — P. 134—149.

148. *Boor C. de*. On calculating with B-splines // Journal of Approximation Theory. — 1972. — Vol. 6, no. 1. — P. 50—62.

149. A fully "locking-free" isogeometric approach for plane linear elasticity problems: A stream function formulation / F. Auricchio [et al.] // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 2007. — Vol. 197, no. 1—4. — P. 160—172.

150. *Флетчер К.* Численные методы на основе метода Галеркина: Пер. с англ. — Мир, 1988. — 352 с.

151. *Анкудинов В. Е.* Теплоперенос и формирование кристаллической микроструктуры в металлических порошках на основе Fe и Al при селективном лазерном плавлении: дис. ... канд. физ.-мат. наук : 01.04.07. — Ижевск, 2017. — 157 с.

152. *Galenko P. K.*, *Danilov D. A.*, *Lebedev V. G.* Phase-field-crystal and Swift-Hohenberg equations with fast dynamics // Physical Review E. — 2009. — Vol. 79, no. 5. — P. 051110.

153. Energy Stable and Efficient Finite-difference Nonlinear Multigrid Schemes for the Modified Phase Field Crystal Equation / A. Baskaran [et al.] // J. Comput. Phys. — 2013. — Vol. 250. — P. 270—292.

154. *Chung J.*, *Hulbert G.* A time integration algorithm for structural dynamics with improved numerical dissipation: The generalized-α method // Journal of Applied Mechanics, Transactions ASME. — 1993. — Vol. 60, no. 2. — P. 371—375.

155. *Bazilevs Y.*, *Hughes T.* Weak imposition of Dirichlet boundary conditions in fluid mechanics // Computers and Fluids. — 2007. — Vol. 36, no. 1. — P. 12—26.

156. Isogeometric Analysis of the isothermal Navier-Stokes-Korteweg equations / H. Gomez [et al.] // Comput. Methods Appl. Mech. and Eng. — 2010. — Vol. 199, no. 25—28. — P. 1828—1840.

157. Interaction of complex fluids and solids: theory, algorithms and application to phase-change-driven implosion / J. Bueno [et al.] // Computational Mechanics. — 2015. — Vol. 55, no. 6. — P. 1105—1118.

158. *Jansen K.*, *Whiting C.*, *Hulbert G.* A generalized-alpha method for integrating the filtered Navier-Stokes equations with a stabilized Finite Element Method // Comput. Methods Appl. Mech. and Eng. — 2000. — Vol. 190, no. 3/4. — P. 305—319.

159. *Saad Y.*, *Schultz M.* GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems // SIAM J. Sci. Stat. Comput. — 1986. — Vol. 7, no. 3. — P. 856—869.

160. *Erlicher 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.

161. Using the phase-field crystal method in the multi-scale modeling of microstructure evolution / N. Provatas [et al.] // Jom. — 2007. — Vol. 59, no. 7. — P. 83—90.

162. Atomic Density Functional and Diagram of Structures in the Phase Field Crystal Model / V. E. Ankudinov [et al.] // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2016. — Vol. 122, no. 2. — P. 298—309.

163. *Asadi E.*, *Asle Zaeem M.* A modified two-mode phase-field crystal model applied to face-centered cubic and body-centered cubic orderings // Computational Materials Science. — 2015. — Vol. 105. — P. 110—113.

164. *Wu K.-A.*, *Adland A.*, *Karma A.* Phase-field-crystal model for fcc ordering // Physical Review E. — 2010. — Vol. 81, no. 6. — P. 061601.

165. *Asadi E.*, *Asle Zaeem M.* Quantifying a two-mode phase-field crystal model for BCC metals at melting point // Computational Materials Science. — 2015. — Vol. 105. — P. 101—109.

166. *Emdadi A.*, *Zaeem M. A.*, *Asadi E.* Revisiting phase diagrams of two-mode phase--field crystal models // Computational materials science. — 2016. — Vol. 123. — P. 137—147.

167. PETSc Users Manual : tech. rep. / S. Balay [et al.] ; Argonne National Laboratory. — 2018. — ANL-95/11 - Revision 3.10.

168. Efficient Management of Parallelism in Object Oriented Numerical Software Libraries / S. Balay [et al.] // Modern Software Tools in Scientific Computing / ed. by E. Arge, A. M. Bruaset, H. P. Langtangen. — Birkhäuser Press, 1997. — P. 163—202.

169. PetIGA: A framework for high-performance isogeometric analysis / L. Dalcin [et al.] // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 2016. — Vol. 308. — P. 151—181.