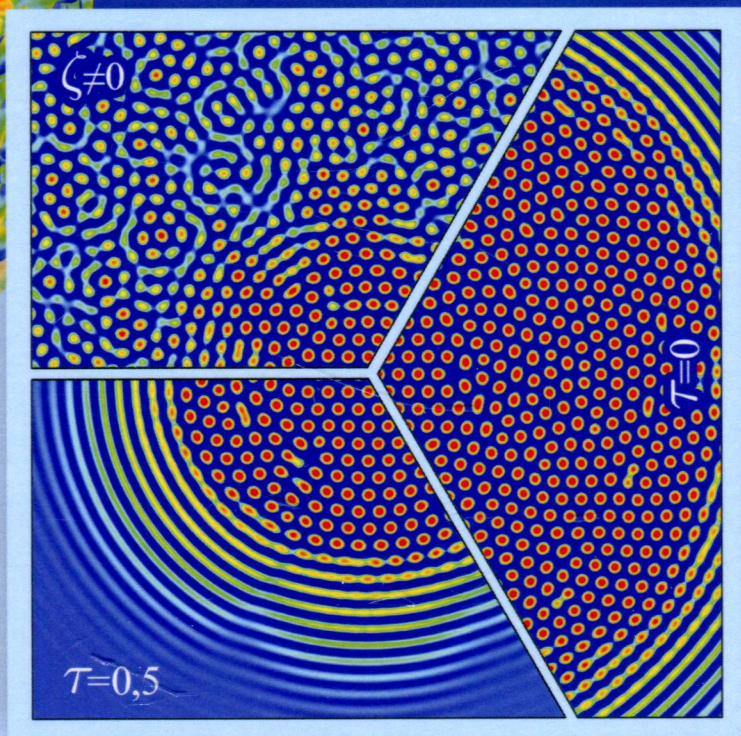


П. К. Галенко, В. Е. Анкудинов,
И. О. Стародумов

ВЫСОКОСКОРОСТНАЯ ДИНАМИКА В МЕТОДЕ ФАЗОВОГО ПОЛЯ: МИКРОСКОПИКА



П. К. Галенко, В. Е. Анкудинов,
И. О. Стародумов

ВЫСОКОСКОРОСТНАЯ ДИНАМИКА В МЕТОДЕ ФАЗОВОГО ПОЛЯ: МИКРОСКОПИКА



Москва ♦ Ижевск

2021

УДК 536.425
ББК 22.375.1
Г155



Издание осуществлено при финансовой поддержке
Российского фонда фундаментальных исследований
по проекту № 21-12-00006, не подлежит продаже

Галенко П. К., Анкудинов В. Е., Стародумов И. О.

Г155 **Высокоскоростная динамика в методе фазового поля: микро-
скопика.** — М.–Ижевск : Институт компьютерных исследований,
2021. — х, 240 с.

ISBN 978-5-4344-0939-1

В монографии представлена модель кристаллического фазового поля, разработанная для описания быстрых фазовых переходов из жидкого состояния в твердое. Основываясь на пространственно-временном осреднении уравнения неравновесной динамики с памятью дан анализ быстро движущихся фронтов при переходах из метастабильных и неустойчивых состояний в стабильные или метастабильные. В качестве примера для описания быстрых переходов рассматривается гиперболическая модель кристаллического фазового поля, учитывающая волновой характер фазовых превращений. Идеи и формализм, сформулированные в книге, применимы для описания широкого класса структурно-фазовых превращений в материалах, находящихся в экстремальных условиях (например, при быстром охлаждении, лазерном отжиге, в глубоко переохлажденных и интенсивно облучаемых пучками высокой энергии образцах). Книга будет полезна студентам, аспирантам и ученым, работающим с многомасштабными задачами в области физики материалов и прикладной математики.

ББК 22.375.1
УДК 536.425

ISBN 978-5-4344-0939-1

© П. К. Галенко, В. Е. Анкудинов,
И. О. Стародумов, 2021
© АНО «Ижевский институт ком-
пьютерных исследований», 2021

Оглавление

Введение	v
ГЛАВА 1. Теория	1
1.1. Краткий исторический обзор	1
1.2. Пространственно-временное осреднение	2
1.2.1. Кинетические уравнения	4
1.2.2. Динамика осредненной концентрации	8
1.3. Высокоскоростная динамика	14
1.3.1. Описание быстрых переходов	14
1.3.2. Неустойчивость Экхауса	23
1.4. Бегущие волны	40
1.4.1. Аналитическое решение	40
1.4.2. Треугольная структура	50
1.4.3. Кубические структуры	52
ГЛАВА 2. Моделирование	57
2.1. Формы свободной энергии модели КФП	57
2.2. Равновесные структурные диаграммы	64
2.2.1. Двухмерные структуры	66
2.2.2. Трехмерные структуры	70
2.3. Численные решения	79
2.3.1. Двухмерные структуры	80
2.3.2. Трехмерные структуры	83
2.4. Сравнение численных решений для различных форм свободной энергии	85
2.4.1. ОЦК-кристалл	87
2.5. Рост плоского фронта	91
2.5.1. Скорости фронтов	92
2.5.2. Ретикулярная плотность граней	95
2.5.3. Формирование разупорядоченной структуры	96
2.6. Метастабильные структуры и шум	97

2.6.1. Искаженные структуры	97
2.6.2. Цветной шум	104
2.6.3. Численные решения стохастического уравнения	109
2.6.4. Влияние шума на эволюцию метастабильной структуры	110
2.6.5. Структурный фактор в модели КФП	112
ГЛАВА 3. Дополнительные материалы	114
3.1. Теория функционала плотности	114
3.1.1. Динамическая теория	119
3.1.2. Вывод модели КФП	120
3.1.3. Стабильный кристалл в модели КФП	123
3.1.4. Параметры свободной энергии	126
3.2. Вторичные неустойчивости	129
3.2.1. Классификация вторичных неустойчивостей	129
3.2.2. Распространенные типы неустойчивостей	131
3.3. Слабая кристаллизация и фазовое поле	135
3.3.1. Общность моделей	135
3.3.2. Отличия ТСК и КФП-модели	136
3.3.3. Роль флуктуаций	137
3.3.4. Двухмерное плавление	139
3.4. Метастабильные структуры	141
3.4.1. Анализ маргинальной устойчивости	141
3.5. Эффект шума	159
3.6. Устойчивость численной схемы	161
3.6.1. Теорема Эйра	161
3.6.2. Безусловно устойчивые алгоритмы	167
3.7. Лагранжевы конечные элементы	179
3.7.1. Вариационная формулировка	180
3.7.2. Дискретизация численной схемы	183
3.8. Изогометрический анализ	188
3.9. Влияние расчетных параметров на численные решения	191
Заключение	196
Сокращения и определения	200
Глоссарий	205
Литература	219