Градиентно-устойчивый алгоритм для динамики фазового поля при моделировании направленного затвердевания в Si-As

В. Г. Лебедев^{1,2}, А. А. Обухов², В. П. Бовин¹, В. И. Ладьянов²

¹ Удмуртский государственный университет, Россия, 426034, Ижевск, ул. Университетская, 1

² Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Россия, 426067, Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34

Аннотация. Рассмотрены проблемы численного моделирования термодинамически согласованной модели динамики параметра порядка для фазовых превращений первого рода в рамках фазово-полевого подхода. Модель основана на расширенной необратимой термодинамике, использующей для описания состояния системы потенциалы Гиббса реальных систем. Численные алгоритмы для моделирования уравнений фазового поля как для локально-равновесных, так и локально-неравновесных моделей релаксационной динамики получены из условия градиентной устойчивости. Выполненные оценки позволяют построить градиентно-устойчивый алгоритм для моделирования уравнений фазового поля в реальных термодинамических системах. В работе проведён анализ градиентно-устойчивых численных схем на устойчивость по малым отклонениям для уравнений фазового поля в Фурье-приближении. Выполненные численные расчеты для раствора Si-As демонстрируют устойчивость полученного алгоритма как при увеличении шага по времени на несколько порядков, так и при росте движущих сил из-за сильного переохлаждения системы.

Ключевые слова: быстрые процессы затвердевания, локально-неравновесная модель фазового поля, потенциалы Гиббса, градиентно-устойчивые алгоритмы, численное моделирование.

✉ Владимир Лебедев, e-mail: lvlg@udsu.ru

Gradient-Stable Algorithm for the Dynamics of the Phase Field at Modeling of Directional Solidification in Si-As

Vladimir G. Lebedev^{1,2}, Alexander A. Obukhov², Vladimir P. Bovin¹, Vladimir I. Ladyanov²

¹ Udmurt State University (Universitetskaya Str., 1, Izhevsk, 426034, Izhevsk, Russian Federation)

² Udmurt Federal Research Center UB RAS (T. Baramzina Str., 34, Izhevsk, 426067, Russian Federation)

Summary. The main provisions of the phase field method for concentrated solutions and problems of numerical simulation of obtained thermodynamically consistent equations have been considered briefly in the paper. The phase field is an order parameter for phase transformations of the first kind and takes certain values in the phase areas, and phase field quickly changes inside the diffuse interface. The model is based on the extended irreversible thermodynamics, which uses Gibbs potentials of real systems to describe state of the system. The complete statement of the problem includes directly the equation of the phase field and the diffusion equations in each of phases. The purpose of this study is construction of the numerical algorithm that allows to effectively simulate processes of the phase boundary movement. For the sake of simplicity at the first stage, the problem of the phase field modeling is separated from the diffusion tasks and takes into account only the driving force for interface migration, which is a large thermodynamic potential calculated with a constant distribution of concentrations. Numerical algorithms for modeling phase field equations for both locally equilibrium and locally-nonequilibrium models of relaxation dynamics are derived from the gradient stability condition, which guarantees decrease of free energy of the system during relaxation. The fulfilled estimates of eigenvalues of the Hessian matrix in the lattice space allow to construct a gradient-stable algorithm for modeling the time evolution of the phase field equation in real thermodynamic systems, despite existence of differences in the approximation of Gibbs energies of different materials. The paper analyzes gradient-stable numerical schemes for stability over small deviations for phase field equations under Fourier approximation. The numerical calculations performed for the Si-As solution demonstrate stability of the obtained algorithm both with an increase in the time step by several orders of magnitude, and with an increase in driving forces due to the severe undercooling of the system.

Keywords: fast solidification processes, locally non-equilibrium phase-field model, Gibbs potentials, gradient-stable algorithms, numerical modeling.

✉ Vladimir Lebedev, e-mail: lvlg@udsu.ru

ВВЕДЕНИЕ

Численное моделирование [1, 2] уравнений критической динамики для фазовых превращений в растворах является важным инструментом исследования процессов структурообразования реальных систем [3]. Одной из особенностей фазово-полевых моделей критической динамики является их нелинейность, необходимая для описания физической неустойчивости, связанной с зарождением и развитием микроструктур. Другая особенность – отсутствие локального равновесия, что приводит к сингулярному возмущению классических уравнений структурообразования в виде появления второй производной по времени с малым коэффициентом. Стандартные вычислительные алгоритмы для таких задач, как правило, неустойчивы [4], или в лучшем случае неэффективны [5]. К еще одной особенности можно отнести достаточно широкое разнообразие потенциалов Гиббса [6] для различных систем, несмотря на которое должно выполняться условие устойчивости численных алгоритмов.

Градиентно-устойчивые методы [5, 7, 8], гарантирующие монотонное понижение свободной энергии при моделировании процессов структурообразования с произвольным шагом по времени, представляют собой важное исключение среди других алгоритмов и получили в последнее время достаточно широкое распространение [9 – 12]. Обобщение градиентно-устойчивых методов на случай задач с отсутствием локального равновесия выполнено в работах [13, 14]. Появление термодинамически согласованных подходов для описания фазовых превращений в растворах [15 – 19] и повсеместное использование потенциалов Гиббса реальных систем [6, 20] приводит к необходимости дополнительных исследований, позволяющим соотнести ограничения, накладываемые градиентной устойчивостью, с устойчивостью по фон Нейману.

Целью данной работы является построение градиентно-устойчивого численного алгоритма для локально-неравновесной динамики фазового поля в рамках термодинамически согласованной модели затвердевания [19] и его анализ на устойчивость по фон Нейману.

УРАВНЕНИЯ ФАЗОВОГО ПОЛЯ ДЛЯ ЗАТВЕРДЕВАНИЯ БИНАРНОГО РАСТВОРА

Объектом исследования в данной работе являются численные алгоритмы для моделирования уравнения Аллена-Кана [21], описывающего процесс быстрой кристаллизации бинарного раствора в рамках идеологии фазового поля [1, 2]. Бинарный раствор – система, состоящая из растворителя и некоторого количества примеси с мольной концентрацией x при постоянной температуре T (по объему системы) и постоянном давлении P . Рассмотрим сосуществование двух различных термодинамически равновесных фаз α ($\alpha = L, S$), ассоциированных с жидкой (L) и твердой (S) фазами. Мольные концентрации примеси в каждой из фаз обозначим как x^α . Пренебрегая внутренними напряжениями и, соответственно, давлением в системе, для описания термодинамически равновесных состояний используем обобщение объемной плотности фазовых потенциалов Гиббса $G^\alpha(x^\alpha, T)$ [22]:

$$G_{eq} = \sum_{\alpha} p^{\alpha}(\varphi) G^{\alpha}(x^{\alpha}, T) + Wg(\varphi). \quad (1)$$

Предполагается, что температура T задана значительно ниже ликвидуса при заданной концентрации, так что твердая фаза при данной температуре устойчива, а жидкая – метастабильна. Начальное состояние соответствует сосуществованию жидкой и твердой фаз с границей, заданной фазовым полем.

Модельные функции

$$g(\varphi) = \varphi^2(1 - \varphi)^2, \quad p(\varphi) = \varphi^2(3 - 2\varphi), \quad (2)$$

позволяют описывать термодинамические характеристики многофазных систем с помощью переменной фазового поля φ , являющейся параметром порядка фазового превращения.

В общем случае, для каждой фазы α вводится свой параметр порядка – фазовое поле φ_α , такое, что $\sum \varphi_\alpha = 1$. Параметр порядка φ_α принимает значение 1 в фазе α , и значение 0 в остальных фазах. Для двухфазной системы достаточно одного поля $\varphi_1 = \varphi$ и дуальной переменной $\varphi_2 = 1 - \varphi$. Функция $Wg(\varphi)$ определяет потенциальный барьер между состояниями, выбор функции $p(\varphi)$ связан с требованием монотонности на интервале $[0, 1]$ и граничными условиями $p'(0) = 0$ и $p'(1) = 0$, необходимыми для устойчивости термодинамических фаз [22].

Уравнения критической динамики термодинамических переменных и фазового поля могут быть получены [23] из условия убывания интегральной энергии Гиббса локально-равновесной системы вида (1). В рамках модели фазового поля для определённости примем, что жидкой фазе (L) соответствует $\varphi = 0$, а твёрдая (S) фаза опеределается условием $\varphi = 1$. Считая для простоты, что концентрации фаз являются постоянными, остановимся более конкретно на уравнении Аллена-Кана для фазового поля, которое имеет вид:

$$\tau_\varphi \ddot{\varphi} + \dot{\varphi} = M_\varphi (\varepsilon^2 \nabla^2 \varphi - Wg'(\varphi) - \Delta\Omega p'(\varphi)), \quad (3)$$

где градиентное слагаемое описывает эффекты межфазной поверхности [24]. Величина $\Delta\Omega$ (разность больших термодинамических потенциалов фаз) определена как:

$$\Delta\Omega = G^S(x^S) - G^L(x^L) - \Delta x \sum_\alpha \mu^\alpha \theta^\alpha(\dot{p}^\alpha), \quad (4)$$

где τ_φ – время релаксации скорости изменения фазового поля, $M_\varphi > 0$ – коэффициент мобильности фазового поля (кинетический коэффициент роста фазы), $\theta^\alpha(\dot{p}^\alpha)$ – функции Хэвисайда, которые равны единице при положительном значении аргумента и нулю в остальных случаях. В соотношениях (3) – (4) использованы следующие обозначения:

$$p'^\alpha(\varphi) \equiv \frac{\partial p^\alpha(\varphi)}{\partial \varphi}, \quad g'(\varphi) \equiv \frac{\partial g(\varphi)}{\partial \varphi}, \quad \dot{\varphi} \equiv \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad \dot{x}^\alpha(\varphi) \equiv \frac{\partial x^\alpha}{\partial t}.$$

Уравнение (3) должно быть дополнено граничными условиями, которые также определяются из условия убывания интегральной энергии Гиббса локально-равновесной системы вида (1). Наиболее естественными условиями для фазового поля являются однородные условия Неймана (однородные граничные условия второго рода), поскольку они не навязывают системе дополнительного (кроме действия термодинамических движущих сил) поведения.

Используя стационарное одномерное решение уравнения (3) вида

$$\varphi_0 = \frac{1}{2}(1 - \tanh(x/2\delta)), \quad (5)$$

где δ – полуширина диффузной границы, выразим неизвестные параметры в уравнении (3) с помощью соотношений [22]:

$$\varepsilon^2 = 3\sigma\delta, \quad W = \frac{6}{\sigma\delta}, \quad (6)$$

где σ – коэффициент поверхностного натяжения.

Для перехода к безразмерным переменным в уравнении (3), сделаем замену $z \rightarrow z\delta$ и $t \rightarrow t\delta^2/\nu$, выразив мобильность фазового поля через параметр ν [25, 26]:

$$M_\varphi = \frac{\nu}{12\sigma\delta}. \quad (7)$$

В этом случае уравнение для фазового поля в одномерном случае будет иметь вид

$$\bar{\tau}_\varphi \ddot{\varphi} + \dot{\varphi} = \varphi'' - \frac{1}{2} g'(\varphi) - \Delta\bar{\Omega} p'(\varphi), \quad (8)$$

в котором $\Delta\bar{\Omega} = \Delta\Omega\delta/12\sigma$ выступает в роли безразмерной движущей силы фазового перехода. Предполагая использование градиентно-устойчивых алгоритмов [11, 12] для моделирования динамики межфазной границы, запишем уравнение (8) для фазового поля в одномерном случае как:

$$\begin{cases} \dot{\varphi} = \rho, \\ \tau_{\varphi}\dot{\rho} + \rho = \varphi'' - \Phi_{\varphi}, \end{cases} \quad (9)$$

где введены обозначения

$$\Phi_{\varphi} = \frac{1}{2}g' + \Delta\bar{\Omega}p', \quad (10)$$

$\varphi'' = \partial^2\varphi/\partial z^2$, и $\bar{\tau}_{\varphi} = \tau_{\varphi}\nu/\delta^2$ – безразмерное время релаксации фазового поля. Отметим, что функция Φ_{φ} в уравнении (10) является однородной частью уравнения, хотя выглядит, как вклад источника. Эта функция, из-за нелинейности, как раз и является проблемой при численном моделировании.

ТЕОРЕМА ЭЙРА О ГРАДИЕНТНОЙ УСТОЙЧИВОСТИ

Рассмотрим произвольную, дважды дифференцируемую функцию $f(\vec{x})$ в евклидовом пространстве $E^{(n)}$. Для $f(\vec{x})$ можно показать (см. приложение в работе [14]), что:

$$\begin{cases} f(\vec{x} + \vec{y}) \geq \sum_i y_i \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)_x + \frac{1}{2} \lambda_{\min} |\vec{y}|^2, \\ \sum_i y_i \left[\left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)_{\vec{x}+\vec{y}} - \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)_{\vec{x}} \right] \leq \lambda_{\max} |\vec{y}|^2, \end{cases} \quad (11)$$

где $\lambda_{\max}$, $\lambda_{\min}$ – значения, ограничивающие спектр собственных значений матрицы вторых производных $M_{ij} = \partial^2 f(x)/\partial x_i \partial x_j$.

Переносим эти соотношения на функциональное пространство сеточных функций $\vec{s}$, где компоненты s_j определяют значения функции $\vec{s}$ в j -м узле сетки, и полагая, что вектора $\vec{x}$, $\vec{y}$ определены как:

$$\vec{x} = \vec{s}(t + \Delta t), \quad \vec{y} = \vec{s}(t) - \vec{s}(t + \Delta t),$$

из (11) находим, что соответствующий функционал $F[\vec{s}]$, понимаемый как интеграл (сумма) по области определения, будет удовлетворять условию

$$F[\vec{s}(t + \Delta t)] \leq F[\vec{s}(t)] \quad (12)$$

Эйр показал [7, 8], что разделение энергетического функционала на две части:

$$F[\vec{s}] = F_C[\vec{s}] + F_E[\vec{s}],$$

где $F_C[\vec{s}]$ – сжимающая (contractive), а $F_E[\vec{s}]$ – растягивающая (expansive) часть полной энергии Гиббса, приводит к теореме (Эйра), согласно которой, при условии

$$\lambda_{\max}^E \leq \frac{1}{2} \lambda_{\min},$$

где $\lambda_{\max}^E$ – максимальное собственное значение гессиана $H_{ij}^E = \partial^2 F_E / \partial s_i \partial s_j$ растягивающей части, а $\lambda_{\min}$ – минимальное собственное значение гессиана для полного функционала свободной энергии $H_{ij} = \partial^2 F / \partial s_i \partial s_j$, аппроксимация релаксационных уравнений

критической динамики для несохраняющегося параметра порядка $\vec{s}(t)$, к которым относится фазовое поле,

$$\dot{\vec{s}} = -\frac{\delta F[\vec{s}]}{\delta \vec{s}} \quad (13)$$

в виде

$$\vec{s}|_{t+\Delta t} + \Delta t \frac{\delta F_C[\vec{s}]}{\delta \vec{s}} \Big|_{t+\Delta t} = \vec{s}|_t - \Delta t \frac{\delta F_E[\vec{s}]}{\delta \vec{s}} \Big|_t \quad (14)$$

гарантирует невозрастание полной энергии Гиббса (12).

Под сжимающей частью функционала свободной энергии $F_C[\vec{s}]$ понимается выпуклая часть функционала $F[\vec{s}]$. Последнее означает, что ее гессиан неотрицательно определен ($H_{ij}^C \geq 0$). Соответственно, растягивающая часть свободной энергии $F_E[\vec{s}]$ определим как вклад с неположительным гессианом ($H_{ij}^E \leq 0$). Собственные значения λ_C матрицы гессиана для выпуклой функции $F_C[\vec{s}]$ строго неотрицательны, а собственные значения λ_E матрицы для вогнутой функции $F_E[\vec{s}]$ строго неположительны для любых возможных конфигураций поля.

УСЛОВИЕ ЭЙРА ДЛЯ РЕАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Задача (9) отличается от уравнений Эйра (13) в двух аспектах:

- В локально-неравновесных моделях появляется сингулярное возмущение локально-равновесных уравнений (14). Обобщение градиентной устойчивости на локально-неравновесный случай было выполнено в работах [13, 14].

- Рассмотренные в работах [13, 14] примеры носят модельный характер и предполагают постоянство коэффициентов уравнений, в отличие от уравнения (8). Рассмотрим эти отличия более подробно.

Как показано в [13, 14], разностная схема для локально-неравновесной динамики несохраняющегося параметра порядка (9) (фазового поля) с шагом Δt по времени может быть записана в виде отображения с n -го момента времени на $(n+1)$:

$$\begin{aligned} \varphi^{(n+1)} + \frac{\Delta t^2}{\Delta t + 2\tau_\varphi} \left(\frac{\delta F_C[\varphi]}{\delta \varphi} \right)^{(n+1)} &= \\ = \varphi^{(n)} - \frac{\Delta t^2}{\Delta t + 2\tau_\varphi} \left(\frac{\delta F_E[\varphi]}{\delta \varphi} \right)^{(n)} + \frac{2\Delta t \tau_\varphi}{\Delta t + 2\tau_\varphi} \rho^{(n)}, & \\ \rho^{(n+1)} = -\rho^{(n)} + \frac{2}{\Delta t} (\varphi^{(n+1)} - \varphi^{(n)}), & \end{aligned} \quad (15)$$

где свободная энергия $F[\varphi]$ в нашем случае может быть представлена как

$$F[\varphi] = \int \left(\frac{1}{2} (\nabla \varphi)^2 + \frac{1}{2} g(\varphi) + p(\varphi) \Delta \Omega \right) dV = F_C[\varphi] + F_E[\varphi] \quad (16)$$

Представленная свободная энергия должна быть разложена на сжимающую $F_C[\varphi]$ и растягивающую части $F_E[\varphi]$ в соответствии с идеологией работ [7, 8]. Выберем

$$F_E[\varphi] = \sum_k a_k F_k[\varphi], \quad F_C[\varphi] = \sum_k (1 - a_k) F_k[\varphi], \quad (17)$$

где вклады $F_k[\varphi]$ выбраны в виде:

$$\begin{aligned} F_1[\varphi] &= \frac{1}{2} \int (\nabla \varphi)^2 dV, & F_2[\varphi] &= \frac{1}{2} \int (1 + 6\Delta \Omega) \varphi^2 dV, \\ F_3[\varphi] &= -\int (1 + 2\Delta \Omega) \varphi^3 dV, & F_4[\varphi] &= \frac{1}{2} \int \varphi^4 dV. \end{aligned}$$

Тогда оператор гессиана свободной энергии (17) определен второй вариацией по фазовому полю и равен:

$$\hat{H} = \sum_k \frac{\delta^2}{\delta \varphi^2} F_k[\varphi] = -\nabla^2 + (1 + 6\Delta\Omega) - 6(1 + 2\Delta\Omega)\varphi + 6\varphi^2. \quad (18)$$

Поскольку собственное значение оператора Лапласа ∇^2 , с учетом однородных условий Неймана на границе, равно $-\mu^2$, нетрудно получить оценку собственных значений оператора $\hat{H}$:

$$\lambda(\hat{H}) = \mu^2 + (1 + 6\Delta\Omega) - 6(1 + 2\Delta\Omega)\varphi + 6\varphi^2. \quad (19)$$

Эта оценка достигает минимума при значениях $\mu = 0$ и $\varphi_0 = \frac{1}{2} + \Delta\Omega$. Предполагая, что безразмерная движущая сила $|\Delta\Omega| \ll 1$, имеем:

$$\lambda_{\min}(\hat{H}) = (1 + 6\Delta\Omega) - \frac{3}{4}(1 + 2\Delta\Omega)^2. \quad (20)$$

В целях простоты, выберем $a_3 = 1$, $a_4 = 1$, что позволяет вычислять нелинейные вклады в растягивающую часть свободной энергии (19) явным образом. Тогда оценка максимального собственного значения гессиана для растягивающей части свободной энергии дает

$$\lambda_{\max}(\hat{H}_E) = a_1\mu_{\max}^2 + a_2(1 + 6\Delta\Omega) - 6(1 + 2\Delta\Omega)\varphi + 6\varphi^2. \quad (21)$$

Для процесса затвердевания движущая сила отрицательна: $\Delta\Omega < 0$, поэтому квадратичное выражение $\varphi^2 - (1 + 2\Delta\Omega)\varphi$ будет максимально при $\varphi = 1$, что в итоге дает

$$\lambda_{\max}(\hat{H}_E) = a_1\mu_{\max}^2 + a_2(1 + 6\Delta\Omega) - 12\Delta\Omega. \quad (22)$$

Условие градиентной устойчивости требует

$$\lambda_{\max}(\hat{H}_E) \leq \frac{1}{2} \lambda_{\min}(\hat{H}) \quad (23)$$

или

$$a_1\mu_{\max}^2 + a_2(1 + 6\Delta\Omega) \leq 12\Delta\Omega - 3\Delta\Omega^2 - \frac{1}{4}. \quad (24)$$

Максимальное собственное значение на d -мерной разностной сетке с характерным пространственным шагом Δz можно оценить как

$$\mu_{\max}^2 \approx \frac{\pi^2 d}{\Delta z^2} \gg 1, \quad (25)$$

что позволяет, выбрав $a_1 = -1$ получить ограничение на a_2 :

$$a_2(1 + 6\Delta\Omega) \leq \frac{\pi^2 d}{\Delta z^2} + 12\Delta\Omega - 3\Delta\Omega^2 - \frac{1}{4}. \quad (26)$$

Поскольку правую часть (26), за счет соответствующего выбора Δz , можно считать заведомо положительной, приравняем параметр a_2 нулю, что переводит вклад F_2 в неявную (сжимающую) часть схемы (18). Явно выписывая соотношения, в итоге получаем численный алгоритм нахождения $\varphi^{(n+1)}$:

$$\begin{aligned}
& \varphi^{(n+1)} + \frac{\Delta t^2}{\Delta t + 2\tau_\varphi} \left(2\nabla^2 \varphi - (1 + 6\Delta\Omega)\varphi \right)^{(n+1)} = \\
& = \varphi^{(n)} - \frac{\Delta t^2}{\Delta t + 2\tau_\varphi} \left(\nabla^2 \varphi - 3(1 + 2\Delta\Omega)\varphi^2 + 2\varphi^3 \right)^{(n)} + \frac{2\Delta t\tau_\varphi}{\Delta t + 2\tau_\varphi} \rho^{(n)}, \\
& \rho^{(n+1)} = -\rho^{(n)} + \frac{2}{\Delta t} \left(\varphi^{(n+1)} - \varphi^{(n)} \right).
\end{aligned} \tag{27}$$

Отметим, что хотя вычислительный алгоритм (18) имеет первый порядок точности по времени, дальнейшее повышение точности алгоритма по времени не имеет особого смысла из-за нелинейности задачи, которая сама по себе ограничивает шаг по времени.

СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ЧИСЛЕННЫХ СХЕМ

Градиентная устойчивочть не гарантирует устойчивости по малым отклонениям. Поэтому рассмотрим этот вопрос более подробно. Для анализа устойчивости полученных отображений по времени рассмотрим отображение малых отклонений от точного решения. Для этого будем полагать, что фазовое поле и концентрации в каждый момент $t^{(n)}$ представимы в виде точного решения (обозначенного индексом "0") и малого отклонения от него, которое представим в виде Фурье-компоненты:

$$\varphi^{(n)} = \varphi_0^{(n)} + A_1^{(n)} \exp(iqz), \quad \rho^{(n)} = \rho_0^{(n)} + A_2^{(n)} \exp(iqz), \tag{28}$$

где q – волновой вектор возмущения.

Для амплитуд Фурье – компонент отклонений фазового поля от точного решения имеем

$$\begin{aligned}
& A_1^{(n+1)} \left[1 + \frac{\Delta t^2}{\Delta t + 2\tau_\varphi} (2q^2 + 1 + 6\Delta\Omega) \right] = \\
& = A_1^{(n)} \left[1 + \frac{\Delta t^2}{\Delta t + 2\tau_\varphi} (q^2 + 6(1 + 2\Delta\Omega)\varphi_0^{(n)} - 6(\varphi_0^{(n)})^2) \right] + \frac{2\Delta t\tau_\varphi}{\Delta t + 2\tau_\varphi} A_2^{(n)}, \\
& A_2^{(n+1)} = -A_2^{(n)} + \frac{2}{\Delta t} (A_1^{(n+1)} - A_1^{(n)}).
\end{aligned} \tag{29}$$

Собственные значения отображения (29) приведены на рис. 1.

На рис. 1 (слева), видно, что длинноволновая часть собственного значения Λ_+ для отображения (29) по величине несколько превосходит единицу, что формально соответствует неустойчивости численного расчета. Однако, физически, эта неустойчивость является неотъемлемой частью уравнения фазового поля, которое описывает переход из термодинамически метастабильного состояния в устойчивое состояние под действием движущей силы $\Delta\Omega$. Поэтому при численном расчете нужно ожидать малых флуктуаций в области чистых фаз и устойчивое решение на границе между ними. Второе собственное значение Λ_- (рис. 1, справа) всегда остается по модулю меньше единицы.

Общий вывод по последнему разделу, очевидно состоит в том, требование устойчивости по фон Нейману для малых отклонений от точного решения не дает адекватной проверки устойчивости численных алгоритмов, связанных с процессами возникновения структур. По сути, можно говорить, что построение таких алгоритмов должно быть основано на теореме Эйра и "a posteriori" проверяться на вычислительном эксперименте.

Рис. 1. Зависимость собственных значений Λ_+ (слева) и Λ_- (справа) для отображения (29) в зависимости от значения фазового поля φ_0 и волнового числа q

Fig. 1. Dependence of the eigenvalues Λ_+ (left) and Λ_- (right) for the mapping (29) depending on the value of the phase field and the wave number q

ЧИСЛЕННАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Для численного моделирования динамики фазового поля по алгоритму (27) рассмотрим одномерную постановку задачи, описывающую движение диффузной границы между фазами при затвердевании бинарного раствора на бесконечном интервале. Для простоты будем полагать, что концентрации примеси в фазах постоянны и не меняются со временем. Поэтому распределения концентраций примеси в фазах переохлажденного раствора считаем однородным $x_0^L = C_0$ и $x_0^S = C_1$. Значение C_0 выбирается произвольно (при расчете полагалось $C_0 = 0.1$), а концентрация примеси в твердой фазе C_1 определялась из условия равновесия на поверхности ликвидуса раствора при заданном C_0 .

В качестве начального условия для фазового поля используем стационарное решение (5). Материальные параметры модели взяты из работы [27] и приведены в таблице.

Таблица – Параметры моделирования для расплава Si-As
Table – Simulation parameters for Si-As melt

Параметр Parameter	Величина The quantity	Значение Meaning
Молярный объем Molar volume	ν_m	$1.2 \cdot 10^{-5}$ м ³ /моль [m ³ /mol]
Поверхностное натяжение Surface tension	σ	0.477 Дж/м ² [J/m ²]
Мобильность φ Mobility φ	M_φ	8.777 м ³ /(Дж·с) [m ³ /(J·s)]
Кинетический коэффициент для φ Kinetic coefficient for φ	ν	$1.22 \cdot 10^{-8}$ м ² /с [m ² /s]
Ширина диффузной границы Diffuse border width	δ	$1.875 \cdot 10^{-9}$ м [m]
Газовая постоянная Gas constant	R	8.314 Дж/(моль·К) [J/(mol·K)]
Время релаксации для $\dot{\varphi}$ Relaxation time for $\dot{\varphi}$	τ_φ	10^{-11} с [s]

Для перехода к расчетам на конечном интервале, чтобы избежать искажений решения вблизи границы, правая граница области, к которой со временем приближается фронт кристаллизации, должна смещаться с течением времени. В силу однородности системы, при численном решении задачи удобнее сделать обратную операцию: решение транслируется в направлении, противоположном направлению движения фронта, когда фронт приближается к правой границе на определенное расстояние. Используемые граничные условия для задачи на конечном интервале имеют вид:

$$\varphi|_{z=0} = 1, \quad \left. \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right|_{z=L} = 0. \quad (30)$$

Для расчета методом конечных разностей использовалась пространственная область размером 100δ разбиваемая на $N=1000$ интервалов (пространственных шагов). Данное разбиение выбрано как оптимальное по точности и затратам времени, что определялось из численных экспериментов с различными разбиениями.

Поскольку нам не удалось найти исследований устойчивости для алгоритмов моделирования фазового поля в литературе, для сравнения используем аналитическое исследование устойчивости явной разностной схемы для уравнения локально-неравновесной диффузии, проводившееся в работе [28], где было получено достаточное условие устойчивости в виде $\Delta t \leq q\Delta x^2 / 8$, где $\delta^2 / D_L / \tau_D \approx 9.77$, D_L и τ_D – коэффициент диффузии и диффузионное время релаксации в жидкости. В результате полученное в [28] ограничение может быть представлено в виде $\Delta t \leq 1.22\Delta x^2$.

По недавней работе [29], где для моделирования полной изотермической задачи с перераспределением примеси и напряжениями на решетке $100 \times 100 \times 100$ понадобилось около 1170 часов, можно утверждать, что оценка $\Delta t \approx \Delta x^2$ для устойчивости явных схем останется адекватной оценкой. Поэтому для сравнения на рис. 2 показаны профили фазового поля при $\Delta t = 10\Delta x^2$ и $\Delta t = 10^7\Delta x^2$. Визуально графики практически идентичны, хотя численное сравнение показывает слабые отличия в нижней половине фронта. Графики равновесных потенциалов Гиббса и химпотенциалов для Si-As [27] приведены на рис. 3 при $T = 1330$ К.

Рис. 2. Профили фазового поля при различных шагах по времени при переохлаждении от температуры равновесия при данном составе на величину $\Delta T = 100$ К

Fig. 2. Phase field profiles at different time steps under undercooling from the equilibrium temperature at a given composition by $\Delta T = 100$ К

Рис. 3. Потенциалы Гиббса и химпотенциалы фаз при $\Delta T = 1330$ К
Fig. 3. Gibbs potentials and chemical potentials of phases at $\Delta T = 1330$ К

На рис. 4 показана зависимость скорости движения фронта от переохлаждения (показано, как меняется скорость межфазной границы в зависимости от понижения температуры на величину ΔT по отношению к температуре равновесия при заданных концентрациях раствора). Зависимость представлена в двойном логарифмическом масштабе. Она показывает слабую нелинейность от переохлаждения, вида $v = \Delta T^{1.045}$, связанную с нелинейностью потенциалов Гиббса. Соответствующая гладкая зависимость демонстрирует, что устойчивость выполняется даже при достаточно больших движущих силах.

Рис. 4. Зависимость скорости движения фазовой границы при различных переохлаждениях (концентрации фаз фиксированы)

Fig. 4. Dependence of the phase interface velocity at various undercoolings (concentrations of the phases are fixed)

ОБСУЖДЕНИЕ И ВЫВОДЫ

В работе рассмотрен вопрос построения градиентно-устойчивых схем для нелинейного уравнения фазового поля, описывающего диссипативную динамику движения границы раздела между твердой и жидкой фазами на основе равновесных потенциалов Гиббса. Для вывода численного алгоритма использована теорема Эйра, определяющая разбиение операторов уравнения на явную и неявную части в соответствии с их собственными значениями. В рассмотренной постановке (моделирование динамики фазового поля при постоянных концентрациях) задача о движении фронта оторвана от проблемы перераспределения примеси на межфазной границе, что было сделано с целью упрощения. Исследование численных алгоритмов для транспорта примеси на фоне заданного движения фронта, а также их совместной динамики является объектом дальнейших исследований.

Исследование устойчивости полученного алгоритма для численного решения уравнения фазового поля по малым отклонениям показывает наличие слабой неустойчивости при малых значениях волнового вектора. Последнее связано с явлением самоорганизации движущейся границы и не проявляется в виде неустойчивости расчетов при численном моделировании направленного процесса затвердевания Si-As, демонстрирующим устойчивость расчетов в широком диапазоне значений выбранного шага по времени. Представленный алгоритм может быть использован при разработке программных комплексов по прогнозированию микроструктуры материалов в неравновесных условиях.

Исследование выполнено при частичной финансовой поддержке РФФИ и Правительства Удмуртской Республики в рамках научного проекта № 18-42-180002.

The study was carried out with partial financial support from the Russian Foundation for Basic Research and the Government of the Udmurt Republic within the framework of scientific project No. 18-42-180002.

Авторы благодарят А.В. Обухова за ряд ценных замечаний по численному моделированию.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Singer-Loginova I., Singer H. M. The phase field technique for modeling multiphase materials // Reports on Progress in Physics, 2008, vol. 71, iss. 10, 106501. <http://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/71/10/106501>
2. Emmerich H. Advances of and by phase-field modelling in condensed-matter physics // Advances in Physics, 2008, vol. 57, iss. 1, pp. 1-87. <https://doi.org/10.1080/00018730701822522>
3. Херлах Д., Галенко П., Холланд-Мориц Д. Метастабильные материалы из переохлажденных расплавов / пер. с англ. Н. В. Худойкиной, под ред. П. К. Галенко М.-Ижевск: НИЦ "РХД", ИКИ, 2010. 496 с.
4. Rogers T. M., Elder K. R., Desai R. C. Numerical study of the late stages of spinodal decomposition // Physical Review B, 1988, vol. 37, iss. 16, pp. 9638-9649. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.9638>
5. Vollmayer-Lee B. P., Rutenberg A. D. Fast and accurate coarsening simulation with an unconditionally stable time step // Physical Review E, 2003, vol. 68, iss. 6, 066703. <https://doi.org/10.1103/physreve.68.066703>
6. Computational Phase Diagram Database (CPDDB). URL: <http://cpddb.nims.go.jp/cpddb/periodic.htm> (дата обращения: 25.03.2021).
7. Eyre D. J. An Unconditionally Stable One-Step Scheme for Gradient Systems, preprint. Published 1997. <https://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.38.313&rep=rep1&type=pdf>
8. Eyre D. J. Unconditionally gradient stable time marching in the Cahn-Hilliard equation // MRS Online Proceedings Library, 1998, vol. 529, pp. 39-46. <https://doi.org/10.1557/PROC-529-39>
9. Cheng M., Warren J. A. Controlling the accuracy of unconditionally stable algorithms in the Cahn-Hilliard equation // Physical Review E, 2007, vol. 75, iss. 1, 017702. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.75.017702>
10. Cheng M., Warren J. A. An efficient algorithm for solving the phase field crystal model // Journal of Computational Physics, 2008, vol. 227, iss. 12, pp. 6241-6248. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2008.03.012>
11. Cheng M., Cottenier S., Emmerich H. Thermodynamic consistency and fast dynamics in phase field crystal modeling // Materials Science, 6 Aug 2009, 4 p. <https://arxiv.org/abs/0807.3579>
12. Choi J. W., Lee H. G., Jeong D., Kim J. An unconditionally gradient stable numerical method for solving the Allen-Cahn equation // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 2009, vol. 388, iss. 9, pp. 1791-1803. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2009.01.026>
13. Lebedev V., Sysoeva A., Galenko P. Unconditionally gradient-stable computational schemes in problems of fast phase transitions // Physical Review E, 2011, vol. 83, iss. 2, 026705. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.83.026705>
14. Галенко П. К., Лебедев В. Г., Сысоева А. А. Градиентная устойчивость численных алгоритмов в локально-неравновесных задачах критической динамики // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2011. Т. 51, № 6. С. 1148-1165.
15. Steinbach I., Zhang L., Plapp M. Phase-field model with finite interface dissipation // Acta Materialia, 2012, vol. 60, iss. 6-7, pp. 2689-2701. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.01.035>
16. Wang H., Galenko P. K., Zhang X., Kuang W., Liu F., Herlach D. M. Phase-field modeling of an abrupt disappearance of solute drag in rapid solidification // Acta Materialia, 2015, vol. 90, pp. 282-291. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2015.02.021>
17. Wang H., Kuang W., Zhang X., Liu F. A hyperbolic phase-field model for rapid solidification of a binary alloy // Journal of Materials Science, 2015, vol. 50, pp. 1277-1286. <https://doi.org/10.1007/s10853-014-8686-1>
18. Zhang X., Wang H., Kuang W., Zhang J.. Application of the thermodynamic extremal principle to phase-field modeling of non-equilibrium solidification in multi-component alloys // Acta Materialia, 2017, vol. 128, pp. 258-269. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.02.026>
19. Лебедев В. Г., Галенко П. К. Высокоскоростное затвердевание и плавление концентрированных растворов и конструкция параллельных Хиллерта // Расплавы. 2016, № 5. С. 422-433. <https://doi.org/10.1134/S0036029516080097>
20. The Microstructure Evolution Simulation Software. URL: <http://web.micress.de/> (дата обращения: 10.03.2021).
21. Allen S. M., Cahn J. W. A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening // Acta Metallurgica, 1979, vol. 27, iss. 6, pp. 1085-1095. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(79\)90196-2](https://doi.org/10.1016/0001-6160(79)90196-2)

22. Kessler D. Sharp interface limits of a thermodynamically consistent solutal phase field model // *Journal of Crystal Growth*, 2001, vol. 224, iss. 1-2, pp. 175-186. [https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(01\)00814-4](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(01)00814-4)
23. Galenko P., Jou D. Diffuse-interface model for rapid phase transformations in nonequilibrium systems // *Physical Review E*, 2005, vol. 71, iss. 4, 046125. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.71.046125>
24. Cahn J. W., Hilliard J. E. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy // *The Journal of Chemical Physics*, 1958, vol. 28, iss. 2, 258. <https://doi.org/10.1063/1.1744102>
25. Lebedev V. G., Abramova E. V., Danilov D. A., Galenko P. K. Phase-field modeling of solute trapping: comparative analysis of parabolic and hyperbolic models // *International Journal of Materials Research*, 2010, vol. 101, iss. 4, pp. 473-479. <https://doi.org/10.3139/146.110297>
26. Galenko P. K., Abramova E. V., Jou D., Danilov D. A., Lebedev V. G., Herlach D. M. Solute trapping in rapid solidification of a binary dilute system: A phase-field study // *Physical Review E*, 2011, vol. 84, iss. 4, 041143. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.84.041143>
27. Li S., Zhang J., Wu P. A comparative study on migration of a planar interface during solidification of non-dilute alloys // *Journal of Crystal Growth*, 2010, vol. 312, iss. 7, pp. 982-988. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2009.12.070>
28. Galenko P. K., Krivilyov M. D. Model for isothermal pattern formation of growing crystals in undercooled binary alloys // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2000, vol. 8, pp. 67-79. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/8/1/306>
29. Böttger B., Apel M., Budnitski M., Eiken J., Laschet G., Zhou B. Calphad coupled phase-field model with mechano-chemical contributions and its application to rafting of γ' in CMSX-4 // *Computational Materials Science*, 2020, vol. 184, 109909. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109909>

REFERENCES

1. Singer-Loginova I., Singer H. M. The phase field technique for modeling multiphase materials. *Reports on Progress in Physics*, 2008, vol. 71, iss. 10, 106501. <http://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/71/10/106501>
2. Emmerich H. Advances of and by phase-field modelling in condensed-matter physics. *Advances in Physics*, 2008, vol. 57, iss. 1, pp. 1-87. <https://doi.org/10.1080/00018730701822522>
3. Herlach D., Galenko P., Holland-Moritz D. *Metastable solids from undercooled Melts*. Amsterdam: Elsevier, 2007; 432 p.
4. Rogers T. M., Elder K. R., Desai R. C. Numerical study of the late stages of spinodal decomposition. *Physical Review B*, 1988, vol. 37, iss. 16, pp. 9638-9649. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.9638>
5. Vollmayer-Lee B. P., Rutenberg A. D. Fast and accurate coarsening simulation with an unconditionally stable time step. *Physical Review E*, 2003, vol. 68, iss. 6, 066703. <https://doi.org/10.1103/physreve.68.066703>
6. *Computational Phase Diagram Database (CPDDB)*. URL: <http://cpddb.nims.go.jp/cpddb/periodic.htm> (accessed March 25, 2021).
7. Eyre D. J. *An Unconditionally Stable One-Step Scheme for Gradient Systems*, preprint. Published 1997. <https://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.38.313&rep=rep1&type=pdf>
8. Eyre D. J. Unconditionally gradient stable time marching in the Cahn-Hilliard equation. *MRS Online Proceedings Library*, 1998, vol. 529, pp. 39-46. <https://doi.org/10.1557/PROC-529-39>
9. Cheng M., Warren J. A. Controlling the accuracy of unconditionally stable algorithms in the Cahn-Hilliard equation. *Physical Review E*, 2007, vol. 75, iss. 1, 017702. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.75.017702>
10. Cheng M., Warren J. A. An efficient algorithm for solving the phase field crystal model. *Journal of Computational Physics*, 2008, vol. 227, iss. 12, pp. 6241-6248. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2008.03.012>
11. Cheng M., Cottenier S., Emmerich H. Thermodynamic consistency and fast dynamics in phase field crystal modeling. *Materials Science*, 6 Aug 2009, 4 p. <https://arxiv.org/abs/0807.3579>
12. Choi J. W., Lee H. G., Jeong D., Kim J. An unconditionally gradient stable numerical method for solving the Allen-Cahn equation. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2009, vol. 388, iss. 9, pp. 1791-1803. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2009.01.026>
13. Lebedev V., Sysoeva A., Galenko P. Unconditionally gradient-stable computational schemes in problems of fast phase transitions. *Physical Review E*, 2011, vol. 83, iss. 2, 026705. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.83.026705>
14. Galenko P. K., Lebedev V. G., Sysoeva A. A. Gradient stability of numerical algorithms in local nonequilibrium problems of critical dynamics. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2011, vol. 51, no. 6, pp. 1074-1090. <https://doi.org/10.1134/S0965542511060078> (In Russian).
15. Steinbach I., Zhang L., Plapp M. Phase-field model with finite interface dissipation. *Acta Materialia*, 2012, vol. 60, iss. 6-7, pp. 2689-2701. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.01.035>
16. Wang H. F., Galenko P. K., Zhang X., Kuang W. W., Liu F., Herlach D. M. Phase-field modeling of an abrupt disappearance of solute drag in rapid solidification. *Acta Materialia*, 2015, vol. 90, pp. 282-291. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2015.02.021>
17. Wang H. F., Kuang W. W., Xiao Z., Liu F. A hyperbolic phase-field model for rapid solidification of a binary alloy. *Journal of Materials Science*, 2015, vol. 50, pp. 1277-1286. <https://doi.org/10.1007/s10853-014-8686-1>

18. Zhang X., Wang H., Kuang W., Zhang J.. Application of the thermodynamic extremal principle to phase-field modeling of non-equilibrium solidification in multi-component alloys. *Acta Materialia*, 2017, vol. 128, pp. 258-269. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.02.026>
19. Lebedev V. G., Galenko P. K. High-rate solidification and melting of concentrated solutions and the Hillert parallel construction. *Russian Metallurgy (Metally)*, 2016, vol. 8, pp. 785-792. (In Russian). <https://doi.org/10.1134/S0036029516080097>
20. *The Microstructure Evolution Simulation Software*. URL: <http://web.micress.de/> (accessed March 10, 2021).
21. Allen S. M., Cahn J. W. A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening. *Acta Metallurgica*, 1979, vol. 27, iss. 6, pp. 1085-1095. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(79\)90196-2](https://doi.org/10.1016/0001-6160(79)90196-2)
22. Kessler D. Sharp interface limits of a thermodynamically consistent solutal phase field model. *Journal of Crystal Growth*, 2001, vol. 224, iss. 1-2, pp. 175-186. [https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(01\)00814-4](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(01)00814-4)
23. Galenko P., Jou D. Diffuse-interface model for rapid phase transformations in nonequilibrium systems. *Physical Review E*, 2005, vol. 71, iss. 4, 046125. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.71.046125>
24. Cahn J. W., Hilliard J. E. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy. *The Journal of Chemical Physics*, 1958, vol. 28, iss. 2, 258. <https://doi.org/10.1063/1.1744102>
25. Lebedev V. G., Abramova E. V., Danilov D. A., Galenko P. K. Phase-field modeling of solute trapping: comparative analysis of parabolic and hyperbolic models. *International Journal of Materials Research*, 2010, vol. 101, iss. 4, pp. 473-479. <https://doi.org/10.3139/146.110297>
26. Galenko P. K., Abramova E. V., Jou D., Danilov D. A., Lebedev V. G., Herlach D. M. Solute trapping in rapid solidification of a binary dilute system: A phase-field study. *Physical Review E*, 2011, vol. 84, iss. 4, 041143. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.84.041143>
27. Li S., Zhang J., Wu P. A comparative study on migration of a planar interface during solidification of non-dilute alloys. *Journal of Crystal Growth*, 2010, vol. 312, iss. 7, pp. 982-988. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2009.12.070>
28. Galenko P. K., Krivilyov M. D. Model for isothermal pattern formation of growing crystals in undercooled binary alloys. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2000, vol. 8, pp. 67-79. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/8/1/306>
29. Böttger B., Apel M., Budnitzki M., Eiken J., Laschet G., Zhou B. Calphad coupled phase-field model with mechano-chemical contributions and its application to rafting of γ' in CMSX-4. *Computational Materials Science*, 2020, vol. 184, 109909. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109909>

Поступила 27.07.2021; принята к опубликованию 23.09.2021
Received 27 July 2021; accepted 23 September 2021

Лебедев Владимир Геннадьевич, кандидат физико-математических наук, заведующий кафедрой теоретической физики ИМИТИФ УдГУ, старший научный сотрудник НЦ МФМ УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Российская Федерация, e-mail: lvlg@udsu.ru

Vladimir G. Lebedev, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Head of the Department of Theoretical Physics, IMITIF Udmurt State University, Senior Researcher, Scientific Center of the MPM, Udmurt Federal Research Center UB RAS, Izhevsk, Russian Federation, e-mail: lvlg@udsu.ru

Обухов Александр Андреевич, младший научный сотрудник НЦ МФМ УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Российская Федерация

Alexander A. Obukhov, Junior Researcher, Scientific Center of the MPM, Udmurt Federal Research Center UB RAS, Izhevsk, Russian Federation

Бовин Владимир Павлович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики ИМИТИФ УдГУ, Ижевск, Российская Федерация

Vladimir P. Bovin, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor of the Department of Theoretical Physics, IMITIF Udmurt State University, Izhevsk, Russian Federation

Ладьянов Владимир Иванович, доктор физико-математических наук, руководитель Научного центра МФМ УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Российская Федерация

Vladimir I. Ladyanov, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Head of the Scientific Center of the MPM Udmurt Federal Research Center UB RAS, Izhevsk, Russian Federation