ISSN 2079-3316 ПРОГРАММНЫЕ СИСТЕМЫ: ТЕОРИЯ И ПРИЛОЖЕНИЯ т. 9, № 4(39), с. 265-278

55K 22.193 ГРНТИ 27.41.23, УДК 519.6

И. О. Стародумов, П. К. Галенко, Н. В. Кропотин, Д. В. Александров

Об аппроксимации периодического решения уравнения кристаллического фазового поля при расчетах методом конечных элементов

Аннотация. В работе рассматривается математическая модель кристаллического фазового поля (КФП), описывающая эволюцию микроструктуры вещества во время процесса кристаллизации. Такая модель представлена нелинейным дифференциальным уравнением шестого порядка по пространству и второго по времени, для решения которого в последние годы были разработаны конечно-элементные алгоритмы, гарантирующие безусловную устойчивость и второй порядок сходимости. Однако, в силу периодического характера решения задачи КФП, точность аппроксимации решения может существенно меняться при изменении параметров дискретизации расчитываемой системы.

Принимая во внимание высокую вычислительную сложность задачи КФП в трехмерной постановке, актуальным практическим вопросом становится определение критериев дискретизации. В настоящей статье исследуется влияние размеров конечного элемента на аппроксимацию решения задачи КФП для случаев плоского и сферического фронта кристаллизации. Показано, что превышение определенных размеров конечного элемента приводит к существенным качественным и количественным изменениям численного решения и, как следствие, резкому снижению точности аппроксимации.

Ключевые слова и фразы: метод кристаллического фазового поля, численные расчеты, конечные элементы, аппроксимация.

Введение

Модель кристаллического фазового поля (КФП) [1] была изначально предложена для объединения теории, описывающей физические процессы, происходящие на атомных пространственных масштабах и

Работа выполнена в рамках проекта РНФ 16-11-10095.

⁽c) И. О. Стародумов⁽¹⁾ П. К. Галенко⁽²⁾ Н. В. Кропотин⁽³⁾ Д. В. Александров⁽⁴⁾ 2018

С Уральский федеральный университет^(1, 2, 4), 2018

 ⁽с) Уральский федеральный университет^(1,2,4) 2018
 (с) АО НПО "МКМ"⁽³⁾ 2018
 (с) Программные системы: теория и приложения (дизайн), 2018

^{10.25209/2079-3316-2018-9-4-265-278}

диффузионных масштабах времени. Модель КФП основана на понятии функционала свободной энергии в форме Свифта-Хоэнберга [2] и описывает поле величины атомной плотности, которое имеет периодическое распределение в случае твердой фазы вещества и константы в случае жидкой фазы. Модель КФП часто определяют как консервативную версию модели Свифта-Хоэнберга и используют для моделирования динамики кристаллических паттернов в ходе фазового перехода типа жидкость-твердое тело [3,4], коллоидного затвердевания [5], динамики дислокаций и пластичности [6,7], стеклования [8], эпитаксиального роста [9, 10], поверхностных перестроений [11]. Условия значительного переохлаждения (разницы изначальной свободной энергии системы и свободной энергии, соответствующей состоянию химического равновесия сложившейся кристаллической структуры) приводят к тому, что скорость распространения фронта структурных трансформаций в веществе становится соизмеримой со скоростью атомной диффузии. Это может приводить к образованию как метастабильных фаз, так и областей сосуществования нескольких фаз, не находящихся в состоянии химического равновесия.

Изначально модель КФП была сформулирована в параболической форме [6,9], которая была применима только для случаев локальных структурных трансформаций при малых переохлаждениях. Позже уравнение КФП было модернизировано за счет учета инерционной компоненты [12–17]. Такая модификация позволила описывать как медленную, так и быструю динамику структурного перехода, обусловленного значительной движущей силой (переохлаждением). Модифицированное уравнение КФП можно сформулировать с использованием функционала свободной энергии к некоторой области Ω в следующей форме:

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

Химический потенциал зададим следующим образом:

(2)
$$\mu(\phi) = \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi} = \frac{df}{d\phi} + 2\nabla^2 \phi + \nabla^4 \phi,$$

где ϕ имеет значение параметра порядка системы. Плотность свободной энергии системы $f(\phi)$ отвечает за гомогенную часть энергии и в рассматриваемой модели задается в форме Ландау:

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

Здесь, $\epsilon = (T_c - T)/T_c$ безразмерная девиация температуры Tот критической температуры структурного перехода T_c , и α мера метастабильности. В итоге модифицированное уравнение КФП, описывающее непрерывное консервативное поле атомной плотности $\phi(x,t)$ можно записать так:

(4)
$$\tau \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^2 \mu,$$

где t — время, τ — характеристика времени релаксации атомных колебаний к стационарному состоянию. С учетом химического потенциала (2) и принимая во внимание уравнения (1) и (3), модель КФП (4) представляет собой дифференциальное уравнение в частных производных шестого порядка по пространству и второго порядка по времени. Решение такого уравнения- нетривиальная задача и требует подготовки специальных алгоритмов [16].

Ранее авторами был разработан неявный конечно-элементный алгоритм решения уравнения КФП, пространственная дискретизация в котором основана на теории изогеометрического анализа (IGA) [18,19]. Этот метод использует C^2 непрерывные базисные функции для построения приближенного решения исходной задачи. Интегрирование по времени в данном случае производится с использованием обобщенного α метода [20].

Подробное описание этого алгоритма приводится в работах [21–24]. С его помощью были получены результаты численных экспериментов, обсуждаемых в настоящей работе далее. Однако, выводы могут быть применимы и для других конечно-элементных алгоритмов, применяемых для решения задачи КФП.

1. Аппроксимация и параметр решетки

Задача КФП может быть решена аналитически только для частных постановок [25]. В общем случае решение такой задачи возможно лишь приближенно с помощью численных методов. Метод конечных элементов предполагает приближенное решение задачи КФП на ограниченном наборе подобластей (конечных элементов) с заданными на них базисными функциями. Улучшение аппроксимации решения исходного уравнения достигается уменьшением размеров конечных элементов (или проще говоря, сгущением расчетной сетки).

Однако, чрезмерно большое количество конечных элементов может приводить к неприемлемой вычислительной сложности задачи. В случае задачи КФП этот аспект особенно актуален, т.к. даже для 20^3 конечных



Рисунок 1. Фронт периодической кристаллической структуры, описываемой моделью КФП

элементов проведение расчетов существующими программами требует использования многопроцессорных ЭВМ для уменьшения расчетного времени. Таким образом, определение оптимальных размеров конечного элемента, способного обеспечить как приемлемую аппроксимацию, так и экономию вычислительных ресурсов, является важной практической проблемой.

Решением задачи КФП является периодическая структура (кристаллическая решетка определенной конфигурации). В модели КФП такое решение определяется через параметр ϕ , который имеет значение усредненного по времени поля атомной плотности, однородное в жидкой фазе и периодическое в кристаллической фазе. На рисунке 1 схематично представлен характерный для задачи КФП фронт процесса кристаллизации, распространяющегося вдоль оси X в направлении V.

Локальные пики атомной плотности дают нам информацию о расположении атомов, поэтому расстояние между узлами расчетной сетки должно быть достаточным, чтобы аппроксимирующая функция внутри конечного элемента качественно не искажала такие пики. Исходя из этого, следует учитывать даже небольшие вариации параметра решетки или расстояния между локальными пиками атомной плотности как на интерфейсе фронта кристаллизации (λ_f), так и в установившемся кристаллическом паттерне (λ).

Кроме того, при переходе интерфейса в однородную фазу перед интерфейсом возникают небольшие возмущения. С чисто вычислительной точки зрения такие возмущения могут иметь незначительную амплитуду, однако с физической точки зрения даже незначительные колебания атомной плотности имеют фундаментальное значение на процессы кристаллического роста, а потому аппроксимирующая функция конечного элемента должна описывать эти пики с должным качеством. В противном случае даже при корректных начальных и граничных условиях общее численное решение задачи КФП рискует оказаться абсолютно неверным как количественно, так и качественно.

2. Вычислительные эксперименты

Опираясь на предыдущие рассуждения, были проведены вычислительные эксперименты. Целью экспериментов было показать существенность влияния размера конечного элемента на качество аппроксимации решения задачи КФП. Для это было подготовлено два сценария. В первом случае моделировалось распространение плоского фронта кристаллизации вдоль вычислительного домена. Во втором случае распространение фронта кристаллизации велось из точки в центре вычислительного домена. Все вычисления были подготовлены для параметров модели $\phi = -0.13$ (где ϕ является средним значением ϕ во всем вычислительном домене) и $\epsilon = 0.1$. Размеры вычислительного домена были заданы $150 \times 30 \times 30$ в безразмерных единицах модели КФП.

Для всех симуляций использовалась регулярная ортогональная сетка. Шаг симуляции по времени был задан равным 0.5 с. Интервал, на котором проводились вычисления, был выбран равным 50 секунд или 100 временных шагов. Для экспериментов изменялись размеры конечных элементов в домене (ячеек расчетной сетки). Размер расчетной сетки выбирался исходя из параметра кристаллической решетки моделируемой структуры, а именно, ОЦК структуры альфа-железа. Для этой структуры известный параметр решетки приблизительно равен 5.4.

Все вычислительные эксперименты проводились на суперкомпьютере «Уран» Института математики и механики УрО РАН: использовалось 100 вычислительных ядер с общей памятью 10GB. Для компиляции и запуска программного обеспечения для моделирования методом КФП [21] использовались: операционная система CentOS, компилятор GNU C, реализация MPI MVAPICH2, алгоритмические библиотеки PETSc и PETIGA актуальных на момент подготовки публикации версий.

2.1. Первый эксперимент

Исходя из рассуждений о значении качественной аппроксимации пиков атомной плотности на фронте кристаллизации, для случая плоского фронта определяющим параметром конечного элемента должен быть его линейный размер вдоль направления движения фронта.



270 И. О. Стародумов, П. К. Галенко, Н. В. Кропотин, Д. В. Александров

Рисунок 2. Кристаллизация в момент времени 50 секунд для размеров конечного элемента: 2 (I), 5 (II), 6 (III), 10 (IV)

В соответствии с моделируемой задачей, критическим значением этого размера должна быть величина от 5 до 6 безразмерных единиц. На рисунке 2 показаны результаты расчетов задачи распространения плоского фронта кристаллизации вдоль оси X в момент времени 50 секунд и для разных размеров конечных элементов: 2,5,6,10.

На рисунке 2 можно заметить, что результаты для случаев I и II количественно и качественно весьма близки, в то же время в случае III фронт кристаллизации продвинулся значительно правее. Результаты для случая IV и вовсе не содержат четких пиков, соответствующих узлам кристаллической структуры. Оценка скоростей фронта кристаллизации во время моделирования показала, что для случаев I и II скорость фронта была равной 0.45 ед/с. В случае III скорость фронта значительно больше — 0.72 ед/с. Таким образом, как и предполагалось ранее, при увеличении размеров конечного элемента сверх значения 5 результаты моделирования существенно ухудшаются вплоть до абсолютно неверных.

2.2. Второй эксперимент

Во втором эксперименте рассматривается задача распространения фронта кристаллизации из точечного источника внутри расчетного домена. В этом случае фронт будет распространяться уже не вдоль одной оси, а по всем направлениям от источника возмущения атомной плотности. Таким образом, каждый линейный размер конечного



Рисунок 3. Кристаллизация от точечного источника в момент времени 50 секунд для размеров конечного элемента: 2 (I), 3 (II), 4 (III), 6 (IV)

элемента должен удовлетворять критерию параметра кристаллической решетки. Следовательно, можно ожидать уменьшения критического размера конечного элемента для обеспечения необходимого качества аппроксимации. Для рассматриваемой задачи ОЦК структуры альфа железа критический линейный размер конечного элемента должен находиться между значениями 3 и 4 (исходя из необходимости аппроксимировать структуру с параметром решетки 5.4 в любом направлении).

На рисунке 3 представлены результаты расчетов для второго эксперимента. Можно заметить, что результаты схожи с результатами первого эксперимента. А именно, для случаев I и II результаты расчетов оказываются количественно и качественно близкими. В то же время, в случае III периодическая структура приобретает качественные отличия. В случае IV результаты не соответствуют периодической структуре вовсе и фронт кристаллизации в этом случае отсутствует. Скорость фронта для случаев I и II составляет 0.03 ед/с, для случая III уже 0.13 ед/с. Таким образом мы вновь наблюдаем существенное резкое ухудшение аппроксимации решения задачи КФП при увеличении

272 И. О. Стародумов, П. К. Галенко, Н. В. Кропотин, Д. В. Александров

размеров конечного элемента сверх критического значения, связанного с параметром решетки моделируемой структуры.

3. Выводы

В статье исследуется зависимость аппроксимации периодического решения задачи кристаллического фазового поля (КФП) от параметров дискретизации при использовании метода конечных элементов. Приводятся обоснования необходимости тщательной аппроксимации экстремумов поля атомной плотности как в области установившейся структуры, так и в зоне фронта кристаллизации. В ходе рассуждений обосновывается критический размер конечного элемента, сверх которого аппроксимация решения может существенно снизиться не только количественно, но и качественно, приводя к абсолютно неверным результатам и их интерпретациям. Такой критический размер должен быть связан с параметром кристаллической решетки моделируемой структуры.

Для проверки предлагаемых теоретических рассуждений были проведены расчеты двух экспериментальных задач на разных расчетных сетках. Эксперименты показали, что действительно качество решения резко ухудшается при выборе размеров конечных элементов больше, чем ранее предсказанный критический размер. Данные результаты являются важным руководством при численном моделировании методом КФП, но и другими методами, подразумевающими получение периодического решения. Важно отметить, что конкретные критические значения размеров конечного элемента могут зависеть от многих факторов (особенности моделируемой динамики, граничные и начальные условия, форма и размеры вычислительного домена и др.), и анализ, подобный описанному в статье, должен проводиться для каждой решаемой задачи.

Список литературы

- K. R. Elder, M. Katakowski, M. Haataja, M. Grant. "Modeling elasticity in crystal growth", *Phys. Rev. Lett.*, 88:24 (2002), pp. 245701. ⁽¹⁾ ↑₂₆₅
- [2] P. K. Galenko, D. A. Danilov, V. G. Lebedev. "Phase-field-crystal and Swift-Hohenberg equations with fast dynamics", *Phys. Rev. E*, **79** (2009), 051110. ⁶0↑₂₆₆
- [3] G. Tegze, L. Gránásy, G. I. Tóth, F. Podmaniczky, A. Jaatinen, T. Ala-Nissila, T. Pusztai. "Diffusion-controlled anisotropic growth of stable and metastable crystal polymorphs in the phase-field crystal model", *Phys. Rev. Lett.*, 103:3 (2009), 035702. ⁶C↑₂₆₆

- [4] G. I. Tóth, G. Tegze, T. Pusztai, G. Tóth, L. Gránásy. "Polymorphism, crystal nucleation and growth in the phase-field crystal model in 2d and 3d", *Journal of Physics: Condensed Matter*, 22:36 (2010), 364101. Co 1266
- [5] S. van Teeffelen, R. Backofen, A. Voigt, H. Löwen. "Derivation of the phase-field-crystal model for colloidal solidification", *Phys. Rev. E*, **79**:5 (2009), 051404. [€]C↑₂₆₆
- [6] J. Berry, M. Grant, K. R. Elder. "Diffusive atomistic dynamics of edge dislocations in two dimensions", Phys. Rev. E, 73:3 (2006), 031609. Correct April 1266
- [7] P. Y. Chan, G. Tsekenis, J. Dantzig, K. A. Dahmen, N. Goldenfeld. "Plasticity and dislocation dynamics in a phase field crystal model", *Phys. Rev. Lett.*, 105:1 (2010), 015502. ⁶
- [8] J. Berry, K. R. Elder, M. Grant. "Melting at dislocations and grain boundaries: A phase field crystal study", Phys. Rev. B, 77 (2008), pp. 224114. Oct. 266
- K. R. Elder, M. Grant. "Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals", *Phys. Rev. E*, 70 (2004), 051605. ⁶○↑₂₆₆
- [10] Zh.-F. Huang, K. R. Elder. "Morphological instability, evolution, and scaling in strained epitaxial films: An amplitude-equation analysis of the phase-field-crystal model", *Phys. Rev. B*, 81:16 (2010), pp. 165421. Co⁺₂₆₆
- [11] C. V. Achim, M. Karttunen, K. R. Elder, E. Granato, T. Ala-Nissila, S. C. Ying. "Phase diagram and commensurate-incommensurate transitions in the phase field crystal model with an external pinning potential", *Phys. Rev. E*, **74**:2 (2006), 021104. €: ↑₂₆₆
- [12] P. Stefanovic, M. Haataja, N. Provatas. "Phase-field crystals with elastic interactions", Phys. Rev. Lett., 96:22 (2006), pp. 225504. ¹€[↑]₂₆₆
- P. Stefanovic, M. Haataja, N. Provatas. "Phase field crystal study of deformation and plasticity in nanocrystalline materials", *Phys. Rev. E*, 80:4 (2009), 046107.
- P. K. Galenko, D. A. Danilov, V. G. Lebedev. "Phase-field-crystal and Swift-Hohenberg equations with fast dynamics", *Phys. Rev. E*, **79**:5 (2009), 051110. C 1/266
- [15] P. K. Galenko, K. R. Elder. "Marginal stability analysis of the phase field crystal model in one spatial dimension", *Phys. Rev. B*, 83:6 (2011), 064113.
 ⁶¹↑₂₆₆
- [16] P. K. Galenko, H. Gomez, N. V. Kropotin, K. R. Elder. "Unconditionally stable method and numerical solution of the hyperbolic phase-field crystal equation", *Phys. Rev. E*, **88** (2013), 013310. $\textcircled{0}_{\uparrow_{266,267}}$
- [17] I. Starodumov, V. Ankudinov, P. Galenko. "Simulation of crystalline pattern formation by the MFPC method", MATEC Web of Conferences, vol. 129, 2017. C 1₂₆₆
- [18] J. A. Cottrell, Th. J. R. Hughes, Yu. Bazilevs. Isogeometric analysis: toward integration of cad and fea, John Wiley & Sons, 2009. ↑₂₆₇

- 274 И. О. Стародумов, П. К. Галенко, Н. В. Кропотин, Д. В. Александров
- Th. J. R. Hughes, J. A. Cottrell, Yu. Bazilevs. "Isogeometric analysis: Cad, finite elements, nurbs, exact geometry and mesh refinement", Computer methods in applied mechanics and engineering, 194:39-41 (2005), pp. 4135–4195. C ↑₂₆₇
- [20] J. Chung, G. M. Hulbert. "A time integration algorithm for structural dynamics with improved numerical dissipation: The generalized-α method", J. Appl. Mech., 60 (1993), pp. 371–375. C ↑₂₆₇
- [21] J. Bueno, I. Starodumov, H. Gomez, P. Galenko, D. Alexandrov. "Three dimensional structures predicted by the modified phase field crystal equation", *Computational Materials Science*, **111** (2016), pp. 310–312. ⁶€[↑]_{267,269}
- [22] И. О. Стародумов, Е. В. Павлюк, С. М. Абрамов, Л. В. Клюев, П. К. Галенко, Д. В. Александров. «Эффективность распараллеливания алгоритма решения уравнения PFC с использованием библиотеки PetIGA», Вестн. Удмуртск. ун-та. Матем. Мех. Компьют. науки, 26:3 (2016), с. 445–450. № 1267
- [23] I. Starodumov, E. Pavlyuk, L. Klyuev, M. Kovalenko, A. Medyankin. "Analysis of the efficiency PETSc and PETIGA libraries in solving the problem of crystal growth", Ceur-WS Proceedings, vol. 1513, 2015, pp. 109–122. (R) ↑₂₆₇
- [24] Д. В. Александров, И. О. Стародумов, Е. В. Павлюк, А. А. Иванов. «Образование дефектных и метастабильных структур при моделировании фазовых переходов методом кристаллического фазового поля», *Расплавы*, 2018, №2, с. 247–256. ↑₂₆₇
- [25] P.K. Galenko, F.I. Sanches, K.R. Elder. "Traveling wave profiles for a crystalline front invading liquid states: Analytical and numerical solutions", *Physica D: Nonlinear Phenomena*, **308** (2015), pp. 1–10. 60 ↑₂₆₇

Поступила в редакцию	24.10.2018
Переработана	29.10.2018
Опубликована	05.12.2018

Рекомендовал к публикации

Программный

комитет Седьмого национального суперкомпьютерного форума $HCK\Phi extsf{-2018}$

Пример ссылки на эту публикацию:

И. О. Стародумов, П. К. Галенко, Н. В. Кропотин, Д. В. Александров. «Об аппроксимации периодического решения уравнения кристаллического фазового поля при расчетах методом конечных элементов». *Программные* системы: теория и приложения, 2018, **9**:4(39), с. 265–278.

www.http://psta.psiras.ru/read/psta2018_4_265-278.pdf

 $^{60 \}quad 10.25209/2079-3316-2018-9-4-265-278$

Аппроксимация решения уравнения КФП

Об авторах:









Илья Олегович Стародумов

младший научный сотрудник лаборатории многомасштабного математического моделирования УрФУ, г. Екатеринбург.

0000-0001-6397-488X e-mail: ilva.starodumov@urfu.ru

Петр Константинович Галенко

д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник лаборатории многомасштабного математического моделирования УрФУ, г. Екатеринбург.

> 0000-0002-7069-1754 e-mail: p.k.galenko@urfu.ru

Николай Валентинович Кропотин

к.ф.-м.н., научный сотрудник АО НПО "МКМ", г. Ижевск, Россия.

0000-0001-8124-8558 e-mail: nikokrop@yandex.ru

Дмитрий Валерьевич Александров

д.ф.-м.н., профессор, руководитель лаборатории многомасштабного математического моделирования УрФУ, профессор кафедры теоретической и математической физики ИЕНиМ УрФУ, г. Екатеринбург.



0000-0002-6628-745X e-mail: dmitri.alexandrov@urfu.ru 276 Ilya Starodumov, Peter Galenko, Nikolai Kropotin, Dmitri Alexandrov

CSCSTI 27.41.23, UDC 519.6

Ilya Starodumov, Peter Galenko, Nikolai Kropotin, Dmitri Alexandrov. On approximation of a periodic solution of the phase field crystal equation in simulations by the finite elements method.

ABSTRACT. The paper presents a mathematical model of the phase field crystal (PFC), describing the evolution of the microstructure of matter during the crystallization process. Such a model is expressed by a nonlinear particle differential equation of the sixth order in space and the second in time, for the solution of which in recent years finite element computational algorithms have been developed and guarantee unconditional stability and second order of convergence. However, due to the periodic nature of the solution of the PFC problem, the accuracy of the approximation of a numerical solution can vary significantly with a change in the discretization parameters of the simulated system.

Taking into account the high computational complexity of the PFC problem in the three-dimensional formulation, the determination of the discretization criteria becomes an urgent practical issue. In this article, we study the influence of finite element sizes on the approximation of the solution of the PFC problem for cases of a flat and spherical crystallization front. It is shown that the excess of certain dimensions of the final element leads to significant qualitative changes in the numerical solution and, as a consequence, to a sharp decrease in the accuracy of the approximation. (In Russian).

 $Key\ words\ and\ phrases:$ crystal phase field method, numerical calculations, finite elements, approximation.

2010 Mathematics Subject Classification: 35Q35,35Q68,68N30

The Russian Scientific Foundation project 16-11-10095.

[©] I. Starodumov⁽¹⁾, P. Galenko⁽²⁾, N. Kropotin⁽³⁾, D. Alexandrov⁽⁴⁾, 2018

C URAL FEDERAL UNIVERSITY^(1, 2, 4), 2018

[©] MKM Ltd.⁽³⁾, 2018

[©] Program Systems: Theory and Applications (design), 2018

^{10.25209/2079-3316-2018-9-4-265-278}

References

- K. R. Elder, M. Katakowski, M. Haataja, M. Grant. "Modeling elasticity in crystal growth", Phys. Rev. Lett., 88:24 (2002), pp. 245701. €↑↑265
- P.K. Galenko, D.A. Danilov, V.G. Lebedev. "Phase-field-crystal and Swift-Hohenberg equations with fast dynamics", *Phys. Rev. E*, **79** (2009), 051110.
 ¹/₂₆₆
- [3] G. Tegze, L. Gránásy, G. I. Tóth, F. Podmaniczky, A. Jaatinen, T. Ala-Nissila, T. Pusztai. "Diffusion-controlled anisotropic growth of stable and metastable crystal polymorphs in the phase-field crystal model", *Phys. Rev. Lett.*, **103**:3 (2009), 035702. C[↑]₂₆₆
- [4] G. I. Tóth, G. Tegze, T. Pusztai, G. Tóth, L. Gránásy. "Polymorphism, crystal nucleation and growth in the phase-field crystal model in 2d and 3d", Journal of Physics: Condensed Matter, 22:36 (2010), 364101. €)↑₂₆₆
- [5] S. van Teeffelen, R. Backofen, A. Voigt, H. Löwen. "Derivation of the phase-field-crystal model for colloidal solidification", *Phys. Rev. E*, **79**:5 (2009), 051404.
 ¹/₂₆₆
- [6] J. Berry, M. Grant, K. R. Elder. "Diffusive atomistic dynamics of edge dislocations in two dimensions", Phys. Rev. E, 73:3 (2006), 031609. Chapter 40:266
- [7] P. Y. Chan, G. Tsekenis, J. Dantzig, K. A. Dahmen, N. Goldenfeld. "Plasticity and dislocation dynamics in a phase field crystal model", *Phys. Rev. Lett.*, **105**:1 (2010), 015502. ^(C)↑₂₆₆
- [8] J. Berry, K. R. Elder, M. Grant. "Melting at dislocations and grain boundaries: A phase field crystal study", Phys. Rev. B, 77 (2008), pp. 224114. Co⁺₂₆₆
- [9] K. R. Elder, M. Grant. "Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals", *Phys. Rev. E*, **70** (2004), 051605. ⁶⁰↑₂₆₆
- [10] Zh.-F. Huang, K. R. Elder. "Morphological instability, evolution, and scaling in strained epitaxial films: An amplitude-equation analysis of the phase-field-crystal model", *Phys. Rev. B*, 81:16 (2010), pp. 165421. € ↑₂₆₆
- [11] C. V. Achim, M. Karttunen, K. R. Elder, E. Granato, T. Ala-Nissila, S. C. Ying. "Phase diagram and commensurate-incommensurate transitions in the phase field crystal model with an external pinning potential", *Phys. Rev. E*, **74**:2 (2006), 021104. ^[C]₂₆₆
- [12] P. Stefanovic, M. Haataja, N. Provatas. "Phase-field crystals with elastic interactions", *Phys. Rev. Lett.*, **96**:22 (2006), pp. 225504. ⁶[↑]₂₆₆
- [13] P. Stefanovic, M. Haataja, N. Provatas. "Phase field crystal study of deformation and plasticity in nanocrystalline materials", *Phys. Rev. E*, 80:4 (2009), 046107.
- P. K. Galenko, D. A. Danilov, V. G. Lebedev. "Phase-field-crystal and Swift-Hohenberg equations with fast dynamics", *Phys. Rev. E*, **79**:5 (2009), 051110.

 ¹₂₆₆
- [15] P. K. Galenko, K. R. Elder. "Marginal stability analysis of the phase field crystal model in one spatial dimension", *Phys. Rev. B*, 83:6 (2011), 064113. ⁶C↑₂₆₆
- [16] P. K. Galenko, H. Gomez, N. V. Kropotin, K. R. Elder. "Unconditionally stable method and numerical solution of the hyperbolic phase-field crystal equation", *Phys. Rev. E*, 88 (2013), 013310. 6 12466,267
- [17] I. Starodumov, V. Ankudinov, P. Galenko. "Simulation of crystalline pattern

formation by the MFPC method", MATEC Web of Conferences, vol. **129**, 2017. $\bigcirc \uparrow_{266}$

- [18] J. A. Cottrell, Th. J. R. Hughes, Yu. Bazilevs. Isogeometric analysis: toward integration of cad and fea, John Wiley & Sons, 2009.[↑]₂₆₇
- [19] Th. J. R. Hughes, J. A. Cottrell, Yu. Bazilevs. "Isogeometric analysis: Cad, finite elements, nurbs, exact geometry and mesh refinement", *Computer methods in* applied mechanics and engineering, **194**:39-41 (2005), pp. 4135–4195. Capture 100 (2007) (200
- [20] J. Chung, G. M. Hulbert. "A time integration algorithm for structural dynamics with improved numerical dissipation: The generalized-α method", J. Appl. Mech., 60 (1993), pp. 371–375. 6 ↑₂₆₇
- [21] J. Bueno, I. Starodumov, H. Gomez, P. Galenko, D. Alexandrov. "Three dimensional structures predicted by the modified phase field crystal equation", *Computational Materials Science*, **111** (2016), pp. 310–312. C⁺_{107,269}
- [22] I. Starodumov, E. Pavlyuk, S. Abramov, L. Klyuev, P. Galenko, D. Alexandrov. "The effectiveness of parallelizing an algorithm of the PFC equation solution using PetIGA library", Bulletin of Udmurt University. Mathematics, Mechanics, 26:3 (2016), pp. 445–450 (in Russian). ⁽¹⁾₂₆₇
- [23] I. Starodumov, E. Pavlyuk, L. Klyuev, M. Kovalenko, A. Medyankin. "Analysis of the efficiency PETSc and PETIGA libraries in solving the problem of crystal growth", Ceur-WS Proceedings, vol. 1513, 2015, pp. 109–122. @https://parcella.org/12.109/122.
- [24] D. V. Alexandrov, I. O. Starodumov, E. V. Pavlyuk, A. A. Ivanov. "Formation of defective and metastable structures when simulating the phase transitions by the phase field crystal method", *Rasplavy*, 2018, no.2, pp. 247–256 (in Russian).↑₂₆₇
- [25] P.K. Galenko, F.I. Sanches, K.R. Elder. "Traveling wave profiles for a crystalline front invading liquid states: Analytical and numerical solutions", *Physica D: Nonlinear Phenomena*, **308** (2015), pp. 1–10. C1²₂₆₇

Sample citation of this publication:

Ilya Starodumov, Peter Galenko, Nikolai Kropotin, Dmitri Alexandrov. "On approximation of a periodic solution of the phase field crystal equation in simulations by the finite elements method". *Program Systems: Theory and Applications*, 2018, **9**:4(39), pp. 265–278. (*In Russian*).

60 10.25209/2079-3316-2018-9-4-265-278

Inttp://psta.psiras.ru/read/psta2018_4_265-278.pdf