

М. С. Орлова, А. И. Горунов

ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ АЛЛЕНА-КАНА

Ключевые слова: математическое моделирование, метод фазового поля, уравнение Аллена-Кана, метод конечных разностей, разностные схемы, порядок сходимости.

В данной работе приведено исследование порядка сходимости и вычислительной эффективности различных разностных схем для численного решения одномерного уравнения Аллена-Кана, используемого в методе фазового поля для моделирования диффузионной границы раздела фаз. Уравнение Аллена-Кана учитывает действие энергии градиента и потенциала двойной ямы при фазовом переходе со стабильными состояниями фаз, равными 0 и 1. Начальное условие для фазового поля имитирует ступенчатый профиль раздела фаз без области перехода. Для решения уравнения используется метод конечных разностей с применением таких разностных схем, как явная, неявная, полунявная, классическая схема Кранка-Николсона и стабилизированная схема Кранка-Николсона. Для решения уравнений применялись методы прогонки и Ньютона. При численном решении поставленной задачи наблюдается формирование диффузионной границы раздела фаз со сглаживанием начального профиля фазового поля. Определены практические порядки сходимости по времени и по пространству для каждой схемы, совпадающие с теоретическими порядками аппроксимации. Максимальные значения L_1 -нормы ошибки составили порядка 10^{-5} по времени и 10^{-4} по пространству для самых крупных сеток. Наилучшее сочетание сходимости, точности и быстродействия продемонстрировала стабилизированная схема Кранка-Николсона. Исследовано влияние стабилизирующего параметра на точность решения по стабилизированной схеме Кранка-Николсона. Наибольшее соответствие эталонному решению было получено при значениях стабилизирующего параметра, находящихся в диапазоне от 0,5 до 1. Полученные результаты позволяют обоснованно проводить выбор разностной схемы для решения задач фазового поля с учетом требований к точности и вычислительным ресурсам, в частности, при моделировании быстротекущих процессов кристаллизации.

M. S. Orlova, A. I. Gorunov

INVESTIGATION OF DIFFERENCE SCHEMES FOR NUMERICAL SOLUTION OF THE ONE-DIMENSIONAL ALLEN-CAHN EQUATION

Keywords: mathematical modeling, phase field method, Allen-Cahn equation, finite difference method, difference schemes, order of convergence.

This paper presents a study of the convergence order and computational efficiency of various difference schemes for the numerical solution of the one-dimensional Allen-Cahn equation used in the phase field method for modeling the diffusive interface. The Allen-Cahn equation takes into account the effect of the gradient energy and the double well potential during a phase transition with stable phase states of 0 and 1. The initial condition for the phase field simulates a stepwise phase separation profile without a transition region. To solve the equation, the finite difference method is used using such difference schemes as explicit, implicit, semi-implicit, classical Crank-Nicholson scheme and the stabilized Crank-Nicholson scheme. The run-through method and Newton's method were used to solve the equations. With the numerical solution of the problem, the formation of a diffusion interface is observed with smoothing of the initial phase field profile. The practical convergence orders in time and space for each scheme are determined, which coincide with the theoretical approximation orders. The maximum values of the L_1 error rate were about 10^{-5} in time and 10^{-4} in space for the largest grids. The best combination of convergence, accuracy, and performance was demonstrated by the stabilized Crank-Nicholson scheme. The effect of the stabilizing parameter on the accuracy of the solution according to the stabilized Crank-Nicholson scheme is investigated. The highest compliance with the reference solution was obtained with the values of the stabilizing parameter in the range from 0,5 to 1. The results obtained make it possible to reasonably select a difference scheme for solving phase field problems, taking into account the requirements for accuracy and computing resources, in particular, when modeling fast-flowing crystallization processes.

Введение

Уравнение Аллена-Кана или зависящее от времени уравнение Гинзбурга-Ландау является основой метода фазового поля. Метод фазового поля, в отличие от других методов моделирования структурных и фазовых изменений, основывается на необратимой термодинамике, а не на вероятностном подходе, и поэтому имеет большой потенциал для моделирования широкого спектра физических и технологических процессов.

Основным применением метода фазового поля является моделирование процессов кристаллизации и эволюции микроструктуры для различных

материалов: металлов и их сплавов, керамик и полимеров. С помощью уравнения Аллена-Кана можно моделировать нуклеацию и рост как зерен [1,2], так и дендритов [3,4]. Благодаря возможности учета различных физических составляющих процесса кристаллизации метод фазового поля может применяться для моделирования кристаллизации металлов при высоких скоростях охлаждения и больших температурных градиентах, например, при лазерном воздействии. Метод фазового поля позволяет учитывать такие особенности формирования микроструктуры при действии концентрированных источников энергии,

как эпитаксиальный рост зерен [5-7], конкурентный рост зерен [8,9] и влияние анизотропии на рост кристаллов [10]. С помощью уравнения Аллена-Кана может быть описана эволюция микроструктуры материала под действием внешних сил различной природы, например, механических нагрузок [11,12], магнитных [13,14], электрических [15] и температурных полей [16,17].

Уравнение Аллена-Кана совместно с уравнением Кана-Хилларда используется для моделирования процесса спекания и сплавления частиц [18-20], а также для моделирования структуры различных пористых сред [21,22] и для прогнозирования развития дефектов в материале [23,24]. Помимо этого, метод фазового поля может применяться при моделировании процессов, связанных с действием магнитных или электрических полей на материал, например, явления электрического пробоя [25].

Постановка задачи

Уравнение Аллена-Кана, описывающее изменение фазового поля во времени и пространстве, имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -M_\varphi \frac{\delta F}{\delta \varphi}, \quad (1)$$

где φ – параметр порядка или фазовая переменная, M_φ – коэффициент подвижности межфазной границы, F – свободная энергия Гиббса.

Функциональная производная свободной энергии Гиббса представляет собой комбинацию частных производных плотностей энергий различной природы. Основные составляющие свободной энергии Гиббса – химическая энергия, механическая энергия, энергия градиента и потенциал двойной ямы [26]. В данной работе рассмотрено применение метода фазового поля для моделирования формирования диффузионной границы раздела фаз. В такой постановке задачи основной вклад в изменение фазового поля вносят энергия градиента и потенциал двойной ямы, а функциональная производная свободной энергии Гиббса имеет следующий вид:

$$\frac{\delta F}{\delta \varphi} = \frac{\partial f_{dw}}{\partial \varphi} - \nabla \cdot \frac{\partial f_{grad}}{\partial (\nabla \varphi)}, \quad (2)$$

где f_{dw} – потенциал двойной ямы, f_{grad} – плотность энергии градиента.

Потенциал двойной ямы необходим для моделирования энергетического барьера, возникающего при фазовом переходе, и может быть представлен как:

$$f_{dw} = Wq(\varphi), \quad (3)$$

где W – высота энергетического барьера, $q(\varphi)$ – функция двойной ямы. Если стабильные состояния фаз обозначаются как 0 и 1, то функция двойной ямы может иметь следующий вид [10]:

$$q(\varphi) = \varphi^2(1 - \varphi)^2. \quad (4)$$

Состояния 0 и 1 являются стабильными состояниями, середина межфазной границы – наиболее нестабильное состояние для системы. Таким образом моделируется энергетический барьер, который необходимо преодолеть для перехода от одного состояния к другому.

Плотность энергии градиента описывает плотность свободной энергии, возникающей из-за формирования диффузных областей на границе раздела фаз, и может быть описана как [27]:

$$f_{grad} = \frac{a^2}{2} |\nabla \varphi|^2, \quad (5)$$

где a – коэффициент градиента энергии.

В таком случае уравнение Аллена-Кана принимает следующий вид:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = M_\varphi (a^2 \nabla^2 \varphi - 2W\varphi(1 - \varphi)(1 - 2\varphi)). \quad (6)$$

Для упрощения задачи численного решения уравнения (6) значения коэффициента подвижности межфазной границы M_φ и высоты энергетического барьера W приняты равными 1. Тогда вид уравнения (6) для одномерной задачи можно привести к виду неоднородного дифференциального уравнения параболического типа:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + f(\varphi), \quad (7)$$

где $f(\varphi) = -2\varphi(1 - \varphi)(1 - 2\varphi)$.

Полученное уравнение (7) дополняется начальными и граничными условиями:

$$\begin{aligned} \varphi(x, 0) &= \varphi_0(x) = \begin{cases} 1, & x \in [0, L/2) \\ 0, & x \in [L/2, L] \end{cases} \\ \varphi(0, t) &= 1 \\ \varphi(L, t) &= 0, \quad t \in [0, T] \end{aligned} \quad (8)$$

где L – размер расчетной области, T – конечное время.

Начальные условия моделируют ступенчатую границу раздела двух фаз: в левой части расчетной области задана фаза 1, в правой – фаза 0. Граничные условия Дирихле заданы для поддержания существования стабильных фаз на границах расчетной области.

Разностные схемы для численного решения

Для численного решения уравнения Аллена-Кана был выбран метод конечных разностей, предполагающий создание сетки по времени и пространству для замены операторов дифференцирования разностными аналогами. В зависимости от того, какие именно значения по пространственно-временной сетке будут использоваться для расчета, выделяют различные типы разностных схем. Наиболее распространенными из них являются явная и неявная схемы, а также схема Кранка-Николсона.

В явной разностной схеме значение со следующего временного слоя используется только при описании разностного аналога первой производной по времени. Для уравнения (7) явная разностная схема с центральной разностью второго порядка будет иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\varphi_j^{n+1} - \varphi_j^n}{\tau} &= a^2 \frac{\varphi_{j+1}^n - 2\varphi_j^n + \varphi_{j-1}^n}{h^2} + f(\varphi_j^n) + \\ &+ O(\tau) + O(h^2), \end{aligned} \quad (9)$$

где φ_j^n – значение фазовой переменной в j -ой точке пространственной сетки на n -ом временном слое, τ – шаг по времени, h – шаг по пространственной сетке. Недостатком явной разностной схемы является

наличие ограничения по шагу по времени для сохранения устойчивости.

В неявной разностной схеме значение с текущего временного слоя используется только при описании разностного аналога первой производной по времени, во всех других составляющих используются значения со следующего слоя:

$$\frac{\varphi_j^{n+1} - \varphi_j^n}{\tau} = a^2 \frac{\varphi_{j+1}^{n+1} - 2\varphi_j^{n+1} + \varphi_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(\varphi_j^{n+1}) + O(\tau) + O(h^2). \quad (10)$$

В схеме Кранка-Николсона используются значения как с текущего временного слоя, так и со следующего, что повышает порядок аппроксимации по времени. Для рассматриваемого уравнения Аллена-Кана схема Кранка-Николсона будет иметь следующий вид:

$$\frac{\varphi_j^{n+1} - \varphi_j^n}{\tau} = \frac{a^2}{2} \frac{\varphi_{j+1}^{n+1} - 2\varphi_j^{n+1} + \varphi_{j-1}^{n+1}}{h^2} + \frac{a^2}{2} \frac{\varphi_{j+1}^n - 2\varphi_j^n + \varphi_{j-1}^n}{h^2} + \frac{f(\varphi_j^{n+1}) + f(\varphi_j^n)}{2} + O(\tau^2) + O(h^2). \quad (11)$$

Существуют также различные вариации стандартных разностных схем, например, полунеявная схема (IMEX) [28] или стабилизированная схема Кранка-Николсона [29]. В полунеявной разностной схеме в отличие от стандартной неявной схемы для вычисления нелинейного источника $f(\varphi)$ используются значения с текущего временного слоя, что позволяет уйти от необходимости введения дополнительных итерационных циклов:

$$\frac{\varphi_j^{n+1} - \varphi_j^n}{\tau} = a^2 \frac{\varphi_{j+1}^{n+1} - 2\varphi_j^{n+1} + \varphi_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(\varphi_j^n) + O(\tau) + O(h^2). \quad (12)$$

В стабилизированной схеме Кранка-Николсона в отличие от стандартной схемы для сеточного представления нелинейного источника $f(\varphi)$ используются значения с текущего временного слоя и вводится стабилизирующее слагаемое. Таким образом стабилизированная схема Кранка-Николсона становится линеаризованной, то есть нахождение значения фазового пол на верхнем временном слое возможно без применения итерационных методов. Для уравнения (7) стабилизированная схема Кранка-Николсона будет иметь следующий вид:

$$\frac{\varphi_j^{n+1} - \varphi_j^n}{\tau} = \frac{a^2}{2} \frac{\varphi_{j+1}^{n+1} - 2\varphi_j^{n+1} + \varphi_{j-1}^{n+1}}{h^2} + \frac{a^2}{2} \frac{\varphi_{j+1}^n - 2\varphi_j^n + \varphi_{j-1}^n}{h^2} + f(\varphi_j^n) - S(\varphi_j^{n+1} - \varphi_j^n) + O(\tau^2) + O(h^2), \quad (13)$$

где S – стабилизирующий параметр.

Проведение численных расчетов

Для исследования порядка сходимости разностных схем проводится сравнение точности полученных решений при различных шагах по времени и по пространственной сетке. Для численного решения уравнения Аллена-Кана по всем разностным схемам, кроме явной, использовался

метод прогонки. В связи с наличием нелинейного источника в уравнении для неявной схемы и схемы Кранка-Николсона был дополнительно использован метод Ньютона. Итерационный процесс решения завершался при уменьшении ошибки до значения 10^{-10} или меньше. Ошибка вычислялась по норме Чебышева.

Размер расчетной области L выбран равным $5 \cdot 10^{-2}$ м, квадрат коэффициента градиента энергии $a^2 = 10^{-2}$ Дж/м, конечное время расчета $T = 10^{-3}$ с. Стабилизирующий параметр S для стабилизированной схемы Кранка-Николсона должен быть неотрицательным числом [30] и в данной работе выбран равным 0,5. Для каждой разностной схемы было проведено 9 расчетов с различными значениями параметров τ и h , которые представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Параметры численных экспериментов

Table 1 – Parameters of numerical experiments

№	Шаг по времени τ , с	Шаг по пространственной сетке h , м
1	$125 \cdot 10^{-11}$	$125 \cdot 10^{-6}$
2	$125 \cdot 10^{-11}$	$25 \cdot 10^{-5}$
3	$125 \cdot 10^{-11}$	$5 \cdot 10^{-4}$
4	$125 \cdot 10^{-11}$	10^{-3}
5	$125 \cdot 10^{-11}$	$2 \cdot 10^{-3}$
6	$25 \cdot 10^{-10}$	$125 \cdot 10^{-6}$
7	$5 \cdot 10^{-9}$	$125 \cdot 10^{-6}$
8	10^{-8}	$125 \cdot 10^{-6}$
9	$2 \cdot 10^{-8}$	$125 \cdot 10^{-6}$

В качестве эталонного решения взято решение, полученное при использовании дискретизации по явной разностной схеме с малыми шагами по времени и по пространственной сетке ($\tau = 10^{-12}$ с, $h = 5 \cdot 10^{-5}$ м), так как нахождение аналитического решения уравнения (7) из-за наличия нелинейного источника затруднительно. Для исследования порядка сходимости фиксировался шаг по пространственной сетке (расчеты №1,6-9), а для исследования порядка по пространству – шаг по времени (расчеты №1-5)

На рис. 1 продемонстрировано формирование диффузионной границы раздела фаз в процессе численного решения одномерного уравнения Аллена-Кана с приведенными выше параметрами: в начальный момент времени фазовое поле имеет ступенчатый профиль, в конечный момент времени – сглаженный.

Для определения порядка сходимости полученных конечно-разностных схем построена графическая зависимость возникающей ошибки численного решения относительно эталонного от шага по времени и от шага по пространственной сетке. Тангенс угла наклона прямой, построенной по полученным данным, определяет практический порядок сходимости разностной схемы [31]. Для нахождения тангенса угла наклона по имеющимся значениям был найден аппроксимирующий полином

первой степени. Тангенс угла наклона прямой равен угловому коэффициенту, то есть старшему коэффициенту полинома.

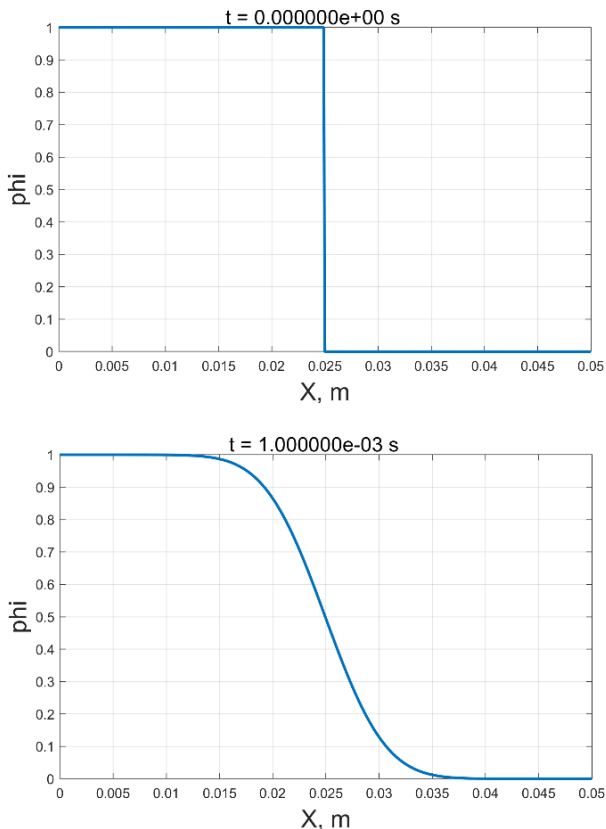


Рис. 1 – Результат расчета изменения фазового поля

Fig. 1 – The result of calculating the phase field change

На рис. 2 представлена графическая зависимость логарифма ошибки численного решения от логарифма шага по времени для рассмотренных ранее разностных схем. Ошибка численного решения определялась по L_1 норме, так как она более чувствительна к большим отклонениям. Для удобства визуального определения порядка сходимости на графике также выведены прямые с угловыми коэффициентами, равными 1 (Slope = 1) и 2 (Slope = 2).

Явная, неявная и полуневная схемы имеют порядок сходимости по времени, близкий к 1, что совпадает с порядком аппроксимации по времени для данных разностных схем. Для классической и стабилизированной схем Кранка-Николсона порядок сходимости по времени приблизительно равен 2, что также совпадает с порядком аппроксимации по времени для данных схем. Максимальные значения L_1 нормы ошибок вычислений для самой крупной сетки имеют порядок 10^{-5} .

На рис. 3 представлена графическая зависимость логарифма ошибки численного решения от логарифма шага по пространственной сетке. Все рассмотренные разностные схемы имеют порядок сходимости по пространству, близкий к 2, что совпадает с порядком аппроксимации по пространству для данных разностных схем.

Максимальные значения L_1 нормы ошибок вычислений имеют порядок 10^{-4} для наибольшего значения шага по пространственной сетке.

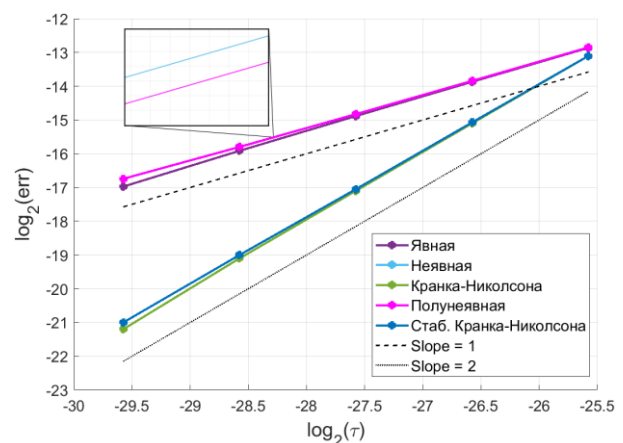


Рис. 2 – График зависимости логарифма ошибки от логарифма шага по времени

Fig. 2 – Graph of the dependence of the error logarithm on the time step logarithm

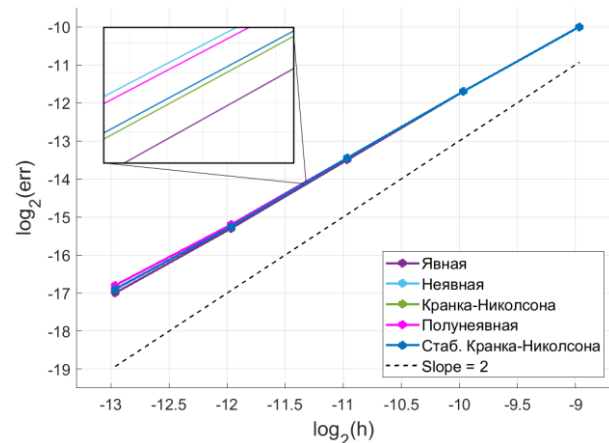


Рис. 3 – График зависимости логарифма ошибки от логарифма шага по пространственной сетке

Fig. 3 – Graph of the dependence of the error logarithm on the step on the spatial grid logarithm

Также для рассмотренных разностных схем в таблице 2 приведено время выполнения расчета для трех численных экспериментов в секундах. Высокая скорость проведения расчета по явной схеме объясняется отсутствием необходимости в дополнительных вычислениях (метод прогонки, метод Ньютона), однако данный метод имеет существенный недостаток в виде наличия ограничения по максимальному значению шага по времени. Высокой вычислительной эффективностью обладают полуневная схема и стабилизированная схема Кранка-Николсона. Вторая имеет преимущество в виде второго порядка аппроксимации по времени.

Так как стабилизированная схема Кранка-Николсона показала себя наиболее эффективной, проведено исследование влияния стабилизирующего параметра S на точность решения. Расчет №1 дополнительно проведен при значениях стабилизирующего параметра, варьирующихся от 0

до 2 с шагом 0,5. На рис. 4 продемонстрировано сравнение полученных решений. Наибольшую точность стабилизированная схема Кранка-Николсона показывает при значениях стабилизирующего параметра, лежащих в диапазоне от 0,5 до 1.

Таблица 2 – Время выполнения расчетов для разностных схем

Table 2 – Calculation time for difference schemes

Разностная схема	Расчет №1, с	Расчет №5, с	Расчет №9, с
Явная	1,2635	0,1452	0,0923
Неявная	12,5957	2,8084	0,8369
Кранка-Николсона	15,3777	2,9904	0,9951
Полунеявная	3,4486	0,4139	0,2529
Стабилизированная Кранка Николсона	3,8224	0,4494	0,2821

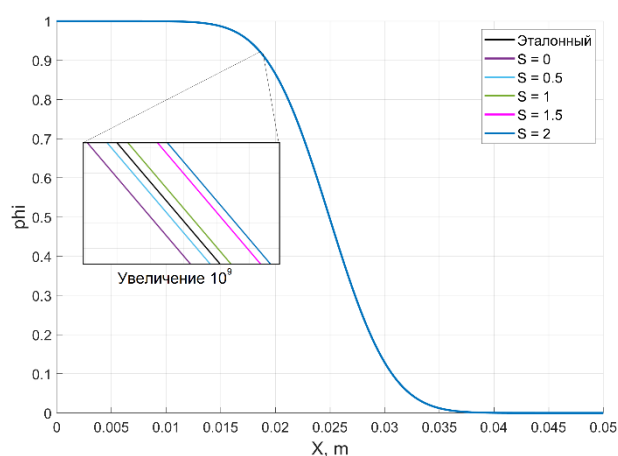


Рис. 4 – Влияние стабилизирующего параметра на точность решения для стабилизированной схемы Кранка-Николсона

Fig. 4 – Influence of the stabilizing parameter on the accuracy of the solution for the stabilized Crank-Nicholson scheme

Закключение

В работе продемонстрировано применение различных разностных схем для численного решения одномерного уравнения Аллена-Кана для моделирования процесса формирования диффузионной границы раздела фаз. По полученным в ходе численной реализации результатам вычислений получены порядки сходимости по времени и по пространству, совпадающие с порядками аппроксимации, для каждой разностной схемы. По результатам численных экспериментов наиболее оптимальным можно считать использование для решения стабилизированной схемы Кранка-Николсона, так как данная схема демонстрирует второй порядок сходимости по времени при приемлемых вычислительных затратах, сопоставимых с использованием полунеявной схемой. Последнее объясняется отсутствием необходимости во введении дополнительного итерационного цикла для разрешения проблемы наличия нелинейного источника, так как в данном

случае его влияние описывается, в том числе, через введение стабилизирующего слагаемого. Стабилизирующий параметр напрямую влияет на точность решения. Наиболее близкое к эталонному распределение фазового поля может быть получено при значениях стабилизирующего параметра от 0,5 до 1.

Литература

1. S. Muhammad, Y. Li, I. Muhammad, S. Peng, Z. Zhang, *Braz. J. Phys.*, **56**, 144 (2026). DOI: 10.1007/s13538-026-02067-x.
2. I.T. Tandogan, M. Budnitski, S. Sandfeld, *J. Mech. Phys. Solids*, **206**, 106325 (2026). DOI: 10.1016/j.jmps.2025.106325.
3. D. Turret, A. Karma, *Acta Mater.*, **61**, 17, 6474-6491 (2013). DOI: 10.1016/j.actamat.2013.07.026.
4. J. Pei, W. Chen, W. Zhang, H. Hou, Y. Zhao, *J. Mater. Res. Technol.*, **27**, 5615-5628 (2023). DOI: 10.1016/j.jmrt.2023.11.012.
5. X.X. Yao, X. Gao, Z. Zhang, *J. Mater. Res. Technol.*, **20**, 934-949 (2022). DOI: 10.1016/j.jmrt.2022.07.101.
6. Y. Takahashi, S. Sakane, T. Takaki, *Comput. Mater. Sci.*, **261**, 114265 (2026). DOI: 10.1016/j.commatsci.2025.114265.
7. H. Xiang, J. Chen, *Mater. Today Commun.*, **47**, 113206 (2025). DOI: 10.1016/j.mtcomm.2025.113206.
8. A.F. Chadwick, P.W. Voorhees, *Acta Mater.*, **211**, 116862 (2021). DOI: 10.1016/j.actamat.2021.116862.
9. A.F. Chadwick, J.G.S. Macias, A. Samaei, G.J. Wagner, M.V. Upadhyay, P.W. Voorhees, *Acta Mater.*, **282**, 120482 (2025). DOI: 10.1016/j.actamat.2024.120482.
10. T. Takaki, *ISIJ Int.*, **54**, 2, 437-444 (2014). DOI: 10.2355/isijinternational.54.437.
11. Y. Song, M. Wang, J. Bai, J. Jin, P. Yang, Y. Zong, G. Qin, *Trans. Nonferr. Met. Soc. China.*, **34**, 4, 1110-1122 (2024). DOI: 10.1016/S1003-6326(23)66457-X.
12. R. Liu, K. Li, G. Zhou, W. Tang, Y. Shen, D. Tang, D. Li, *Trans. Nonferr. Met. Soc. China.*, **32**, 12, 3873-3886 (2022). DOI: 10.1016/S1003-6326(22)66064-3.
13. S. Liang, C. Wei, H. Jiang, X.-P. Zhang, *JOM* (2026). DOI: 10.1007/s11837-026-08207-7.
14. Y. Rezaei, M. Jafari, M. Jamshidian, *Comput. Mater. Sci.*, **200**, 110786 (2021). DOI: 10.1016/j.commatsci.2021.110786.
15. S. Liang, A. Kunwar, C. Wei, C. Ke, *Scr. Mater.*, **203**, 114071 (2021). DOI: 10.1016/j.scriptamat.2021.114071.
16. M.S. Orlova, A.I. Gorunov, *Lett. Mater.*, **14**, 1, 79-84 (2024). DOI: 10.48612/letters/2024-1-79-84.
17. O. Abramova, D. Nugmanov, D. Schneider, A. Prahs, T. Mittnacht, J. Ivanisenko, B. Baretzky, B. Nestler, *Comput. Mater. Sci.*, **248**, 113553 (2025). DOI: 10.1016/j.commatsci.2024.113553.
18. D. Choudhuri, L. Blake, *J. Mater. Sci.*, **56**, 7474-7493 (2021). DOI: 10.1007/s10853-021-05802-8.
19. D.I. Prokhorov, Y.V. Bazaikin, V.V. Lisitsa, *Numeric. Methods and Program.*, **23**, 2, 75-94 (2022). DOI: 10.26089/NumMet.v23r206.
20. Д.И. Прохоров, Я.В. Базайкин, В.В. Лисица, *Интерэкспо Гео-Сибирь*, **2**, 2, 202-208 (2022). DOI: 10.33764/2618-981X-2022-2-2-202-208.
21. Н.А. Семенов, Т.Г. Еленина, Е.Б. Савенков, *Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша*, **86**, 1-24 (2024). DOI: 10.20948/prepr-2024-86.
22. Д.И. Прохоров, Я.В. Базайкин, В.В. Лисица, *Интерэкспо Гео-Сибирь*, **2**, 3, 262-269 (2023). DOI: 10.33764/2618-981X-2023-2-3-262-269.

23. D. Wick, T. Wick, R.J. Hellmig, H.-J. Christ, *Comput. Mater. Sci.*, **109**, 367-379 (2015). DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.07.034.
24. L. Greco, J. Kiendl, M. Negri, A. Patton, A. Reali, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, **449**, 118513 (2026). DOI: 10.1016/j.cma.2025.118513.
25. E.V. Zipunova, A.A. Kuleshov, E.B. Savenkov, *Appl. Industr. Math.*, **18**, 3, 612-630 (2024). DOI: 10.1134/S1990478924030207.
26. S.B. Bulent, *Programming Phase-Field Modeling*, Springer International Publishing, 2018, P. 3-5. DOI: 10.1007/978-3-319-41196-5.
27. C. Roberts, J. Marian, *J. Mater. Res. Technol.*, **28**, 3641-3654 (2024). DOI: 10.1016/j.jmrt.2023.12.222.
28. X. Liu, Z.W. Yang, Y.M. Zeng, *CAMWA*, **144**, 264-273 (2023). DOI: 10.1016/j.camwa.2023.06.018.
29. N. Jiang, M. Kubacki, W. Layton, M. Moraiti, H. Tran, *J. Comput. Appl. Math.*, **281**, 263-276 (2015). DOI: 10.1016/j.cam.2014.09.026.
30. D. Hou, H. Liu, L. Ju, *CAMWA*, **191**, 86-104 (2025). DOI: 10.1016/j.camwa.2025.04.021.
31. G.V. Krivovichev, R.V. Pukhachenko, *Numeric. Methods and Program.*, **27**, 2, 119-134 (2026). DOI: 10.26089/NumMet.v27r209.
12. R. Liu, K. Li, G. Zhou, W. Tang, Y. Shen, D. Tang, D. Li, *Trans. Nonferr. Met. Soc. China.*, **32**, 12, 3873-3886 (2022). DOI: 10.1016/S1003-6326(22)66064-3.
13. S. Liang, C. Wei, H. Jiang, X.-P. Zhang, *JOM* (2026). DOI: 10.1007/s11837-026-08207-7.
14. Y. Rezaei, M. Jafari, M. Jamshidian, *Comput. Mater. Sci.*, **200**, 110786 (2021). DOI: 10.1016/j.commatsci.2021.110786.
15. S. Liang, A. Kunwar, C. Wei, C. Ke, *Scr. Mater.*, **203**, 114071 (2021). DOI: 10.1016/j.scriptamat.2021.114071.
16. M.S. Orlova, A.I. Gorunov, *Lett. Mater.*, **14**, 1, 79-84 (2024). DOI: 10.48612/letters/2024-1-79-84.
17. O. Abramova, D. Nugmanov, D. Schneider, A. Prahs, T. Mitnacht, J. Ivanisenko, B. Baretzky, B. Nestler, *Comput. Mater. Sci.*, **248**, 113553 (2025). DOI: 10.1016/j.commatsci.2024.113553.
18. D. Choudhuri, L. Blake, *J. Mater. Sci.*, **56**, 7474-7493 (2021). DOI: 10.1007/s10853-021-05802-8.
19. D.I. Prokhorov, Y.V. Bazaikin, V.V. Lisitsa, *Numeric. Methods and Program.*, **23**, 2, 75-94 (2022). DOI: 10.26089/NumMet.v23r206.
20. D.I. Prokhorov, Y.V. Bazaikin, V.V. Lisitsa, *Interexpo Geo-Sibir*, **2**, 2, 202-208 (2022). DOI: 10.33764/2618-981X-2022-2-2-202-208.
21. N.A. Semenenko, T.G. Elenino, E.B. Savenkov, M.V. Keldysh *Preprint IPM*, **86**, 1-24 (2024). DOI: 10.20948/prepr-2024-86.
22. D.I. Prokhorov, Y.V. Bazaikin, V.V. Lisitsa, *Interexpo Geo-Sibir*, **2**, 3, 262-269 (2023). DOI: 10.33764/2618-981X-2023-2-3-262-269.
23. D. Wick, T. Wick, R.J. Hellmig, H.-J. Christ, *Comput. Mater. Sci.*, **109**, 367-379 (2015). DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.07.034.
24. L. Greco, J. Kiendl, M. Negri, A. Patton, A. Reali, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, **449**, 118513 (2026). DOI: 10.1016/j.cma.2025.118513.
25. E.V. Zipunova, A.A. Kuleshov, E.B. Savenkov, *Appl. Industr. Math.*, **18**, 3, 612-630 (2024). DOI: 10.1134/S1990478924030207.
26. S.B. Bulent, *Programming Phase-Field Modeling*, Springer International Publishing, 2018, P. 3-5. DOI: 10.1007/978-3-319-41196-5.
27. C. Roberts, J. Marian, *J. Mater. Res. Technol.*, **28**, 3641-3654 (2024). DOI: 10.1016/j.jmrt.2023.12.222.
28. X. Liu, Z.W. Yang, Y.M. Zeng, *CAMWA*, **144**, 264-273 (2023). DOI: 10.1016/j.camwa.2023.06.018.
29. N. Jiang, M. Kubacki, W. Layton, M. Moraiti, H. Tran, *J. Comput. Appl. Math.*, **281**, 263-276 (2015). DOI: 10.1016/j.cam.2014.09.026.
30. D. Hou, H. Liu, L. Ju, *CAMWA*, **191**, 86-104 (2025). DOI: 10.1016/j.camwa.2025.04.021.
31. G.V. Krivovichev, R.V. Pukhachenko, *Numeric. Methods and Program.*, **27**, 2, 119-134 (2026). DOI: 10.26089/NumMet.v27r209.

References

1. S. Muhammad, Y. Li, I. Muhammad, S. Peng, Z. Zhang, *Braz. J. Phys.*, **56**, 144 (2026). DOI: 10.1007/s13538-026-02067-x.
2. I.T. Tandogan, M. Budnitski, S. Sandfeld, J. Mech. Phys. Solids, **206**, 106325 (2026). DOI: 10.1016/j.jmps.2025.106325.
3. D. Tourret, A. Karma, *Acta Mater.*, **61**, 17, 6474-6491 (2013). DOI: 10.1016/j.actamat.2013.07.026.
4. J. Pei, W. Chen, W. Zhang, H. Hou, Y. Zhao, *J. Mater. Res. Technol.*, **27**, 5615-5628 (2023). DOI: 10.1016/j.jmrt.2023.11.012.
5. X.X. Yao, X. Gao, Z. Zhang, *J. Mater. Res. Technol.*, **20**, 934-949 (2022). DOI: 10.1016/j.jmrt.2022.07.101.
6. Y. Takahashi, S. Sakane, T. Takaki, *Comput. Mater. Sci.*, **261**, 114265 (2026). DOI: 10.1016/j.commatsci.2025.114265.
7. H. Xiang, J. Chen, *Mater. Today Commun.*, **47**, 113206 (2025). DOI: 10.1016/j.mtcomm.2025.113206.
8. A.F. Chadwick, P.W. Voorhees, *Acta Mater.*, **211**, 116862 (2021). DOI: 10.1016/j.actamat.2021.116862.
9. A.F. Chadwick, J.G.S. Macias, A. Samaei, G.J. Wagner, M.V. Upadhyay, P.W. Voorhees, *Acta Mater.*, **282**, 120482 (2025). DOI: 10.1016/j.actamat.2024.120482.
10. T. Takaki, *ISIJ Int.*, **54**, 2, 437-444 (2014). DOI: 10.2355/isijinternational.54.437.
11. Y. Song, M. Wang, J. Bai, J. Jin, P. Yang, Y. Zong, G. Qin, *Trans. Nonferr. Met. Soc. China.*, **34**, 4, 1110-1122 (2024). DOI: 10.1016/S1003-6326(23)66457-X.

©М. С. Орлова – аспирант кафедры Лазерных и аддитивных технологий (ЛАТ), Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева (КНИТУ-КАИ), Казань, Россия, MSOrlova@kai.ru; А. И. Горунов – д.т.н., профессор кафедры ЛАТ, КНИТУ-КАИ, AIGorunov@kai.ru.

© М. S. Orlova – PhD-student, Department of Laser and additive technologies (LAT), Kazan National Research Technical University named after A.N. Tupolev (KNRTU-KAI), Kazan, Russia, MSOrlova@kai.ru; A. I. Gorunov – Doctor of Sciences (Technical Sci.), Professor of the LAT department, KNRTU-KAI, AIGorunov@kai.ru.

Дата поступления рукописи в редакцию – 06.05.26.

Дата принятия рукописи в печать – 31.05.26.