0.1. *Воробьева В.П., Зеленая А.Э., Луцык В.И., Ламуева М.В., Парфенова М.Д., Зырянов А.М.* **Аппроксимация гиперповерхностей фазовых диаграмм состояния тройных и четверных систем в программе "Конструктор ФД"**

Разработка методов компьютерного моделирования фазовых диаграмм и сопутствующего программного обеспечения позволяет получить 3D-модели для тройных систем с различным топологическим строением.

Компьютерные модели фазовых диаграмм дают возможность воспроизводить пространственную модель всей диаграммы и ее отдельных элементов, например, поверхностей или фазовых областей; рассматривать произвольные горизонтальные и вертикальные сечения; рассчитывать пути кристаллизации; проводить анализ микроструктуры.

При выборе математического аппарата описания границ фазовых областей отдается предпочтение тем моделям, при которых на основе минимального количества исходных экспериментальных данных можно воспроизвести конструкцию фазовых диаграмм любой сложности. Наибольшие возможности дает кинематический метод задания поверхностей, так как он позволяет моделировать границы фазовых областей любой сложности, включая поверхности с экстремальными точками, с разрывами гладкости, складками и вырезами на поверхностях.

Что касается построения гиперповерхностей на T-x-y-z диаграммах, то ее кинематическое описание интерполяционным полиномом Лагранжа принимает вид:

$$F(p,q,r) = \Pi_{m+1}(r) \sum_{j=0}^{m} \frac{\prod_{k+1}(q) \sum\limits_{i=0}^{k} \dfrac{A_j(p)}{(q-q_i)\prod'_{k+1}(q_i)}}{(r-r_j)\prod'_{m+1}(r_j)},$$

где

$$\Pi_{m+1}(r) = (r-r_0)(r-r_1)\cdots(r-r_m),$$

$$\Pi'_{m+1}(r) = \sum_{j=0}^{m}(r-r_0)\cdots(r-r_{j-1})(r-r_{j+1})\cdots(r-r_m),$$

$$\Pi_{k+1}(q) = (q-q_0)(q-q_1)\cdots(q-q_k),$$

$$\Pi'_{k+1}(q) = \sum_{j=0}^{k}(q-q_0)\cdots(q-q_{j-1})(q-q_{j+1})\cdots(q-q_k),$$

$$r_0 = 0 < r_1 < \cdots < r_{m-1} < r_m = 1,$$

$$q_0 = 0 < q_1 < \cdots < q_{m-1} < q_m = 1.$$

Если при конструировании поверхности кинематическим способом требуется задать на одном и том же множестве базовых точек два семейства кривых и если $n+1$ кривых ${}_i$ $(i = \overline{0,n})$ считать направляющими, то им должно соответствовать семейство m+1 кривых порядка n–образующих ${}_j$ (j=$\overline{0,m}$), проходящих через базовые точки. Объединение двух семейств кривых дает параметрическое описание гиперповерхности в четырехмерном пространстве. Одно из семейств кривых рассматривается как направляющие, кривые второго становятся образующими, то есть линиями, перемещение которых задается направляющими. Если образующие – прямые, то есть n=1 или m=1, тогда поверхность является линейчатой. При n=m=1 поверхность превращается в плоскость.

Таким образом, гиперповерхность задается по n+1 направляющим $H_i(p)$, проходящим через m точек. Направляющие (s-1)-поверхности (линии при s=3, поверхности при r=4 и т.д.) задаются в виде многочленов m-ой степени. Для параметрического описания образующих используется параметр q (0≤ q≤ 1), и порядок многочлена, задающего образующую, равен n: при n=1 образующей является отрезок, концы которого сканируют направляющие и формируют линейчатую гиперповерхность.

Исследование выполнено в соответствии с госзаданием ФГБУН ИФМ СО РАН на 2021-2023 гг. (проект № 0270-2021-0002)и частично поддержано проектом РФФИ 19-38-90035.