PFC特点：原子尺度+扩散时间

根据《2021.3.20.贝塞尔PFC梳理》中，点直相关函数的多组分系统自由能表达式为：

其中即不同种类的物质，因而 表示不同种类物质之间的相互作用。我们主要研究单组分的系统，因而直相关函数通常为，虽然涉及个变量，但由于通常取的形式,故事实上独立变量为个，因而对于维空间，其傅里叶展开为：

将上式代入中得到：

最常见的是二维空间的两点直相关单组分系统：

其中表示逆傅里叶变换。可见，只有确定了的具体形式，才能写出自由能的表达式。

由于要模拟晶体结构，晶体在傅里叶空间具有不同的峰，因而可以从“峰”出发，构造：

不难验证，这个多项式在处取极值，也就是所谓的“峰”，对于两点直相关函数而言，将峰的个数称为模。在实空间表示为：

再将自由能中动能项展开到四阶：

从而根据最常用的形式是两点直相关单组分的形式：

并对方程做标度化，进而将转化为，且转化为，进而得到：

有时候也写作. 由于，当中为常数，因而在后续求导运算中不做贡献，因而之后默认利用来代替.

对于泛函导数，利用公式：

并利用守恒的动力学方程：

得到：

在傅里叶空间为：

上式利用到：

采用傅里叶半隐式算法，即非线性项为隐格式，继续离散化为：

其中两点直相关函数取到三模，即,从而有：

故迭代方程可写为：