

Адаптация шага по времени в модели типа диффузной границы, содержащей уравнение Аллена–Кана

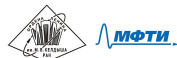
Пономарев А. С.^{1,2}, Савенков Е. Б.², Зипунова Е. В.²

¹МФТИ (НИУ)

²ИПМ им. М. В. Келдыша РАН

67-я Всероссийская научная конференция МФТИ

31.03.2025



- 1 Введение
- 2 Постановка задачи
- 3 Методы адаптации
- 4 Вычислительный эксперимент
- 5 Заключение



Электрический пробой

Явление резкого возрастания тока в диэлектрике при приложении электрического напряжения выше критического.

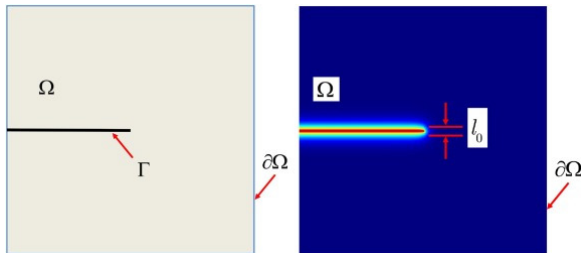
- Рассматриваем твердый диэлектрик
- Деградация диэлектрических свойств материала
- Процесс развивается в ограниченной зоне – канале пробоя
- Сложная физическая природа



Модель типа диффузной границы

Вещество находится в разных фазах. Состояние вещества описывается гладкой функцией $\phi(x, t)$ – фазовым полем.

- $\phi = 1$ – неповрежденная среда
- $\phi = 0$ – полностью разрушенная среда
- Зона $\phi \in (0, 1)$ – диффузная граница
- На разрушение среды тратится энергия



- 1 Введение
- 2 Постановка задачи
- 3 Методы адаптации
- 4 Вычислительный эксперимент
- 5 Заключение



Уравнения динамики системы

- Уравнение электрического потенциала Φ :

$$\operatorname{div}(\epsilon[\phi]\nabla\Phi) = 0$$

- Уравнение фазового поля ϕ (типа Аллена–Кана):

$$\frac{1}{m}\frac{\partial\phi}{\partial t} = \frac{1}{2}\epsilon'(\phi)(\nabla\Phi, \nabla\Phi) + \frac{\Gamma}{l^2}f'(\phi) + \frac{1}{2}\Gamma\Delta\phi$$

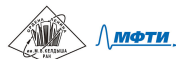
- Плотность свободной энергии

Подробнее: [1], [2]

$$\pi = -\frac{1}{2}\epsilon[\phi](\nabla\Phi, \nabla\Phi) + \Gamma\frac{1-f(\phi)}{l^2} + \frac{\Gamma}{4}(\nabla\phi, \nabla\phi)$$

$$f(\phi) = 4\phi^3 - 3\phi^4$$

$$\epsilon(x, t) = \frac{\epsilon_0(x)}{f(\phi(x, t)) + \delta}$$



Уравнения динамики системы

- Уравнение электрического потенциала Φ :

$$\operatorname{div}(\epsilon[\phi]\nabla\Phi) = 0$$

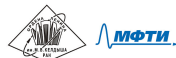
- Уравнение фазового поля ϕ (типа Аллена–Кана):

$$\frac{1}{m} \frac{\partial \phi}{\partial t} = -F'(\phi; |\nabla\Phi|) + \frac{1}{2}\Gamma\Delta\phi$$

- Плотность свободной энергии

$$\pi = F(\phi; |\nabla\Phi|) + \frac{\Gamma}{4}(\nabla\phi, \nabla\phi)$$

- m, Γ – параметры модели, константы



$$\frac{1}{m} \frac{\partial \phi}{\partial t} = -F'(\phi; |\nabla \Phi|) + \frac{1}{2} \Gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$$

- $|\nabla \Phi|$ – параметр

Разностная задача

$$\frac{1}{m} \frac{\phi_i^{j+1} - \phi_i^j}{\tau} = \frac{1}{2} K_\phi^2 \epsilon'(\phi_i^j) + \frac{\Gamma}{l^2} f'(\phi_i^j) + \frac{\Gamma}{2} \frac{\phi_{i+1}^j - 2\phi_i^j + \phi_{i-1}^j}{h^2}$$

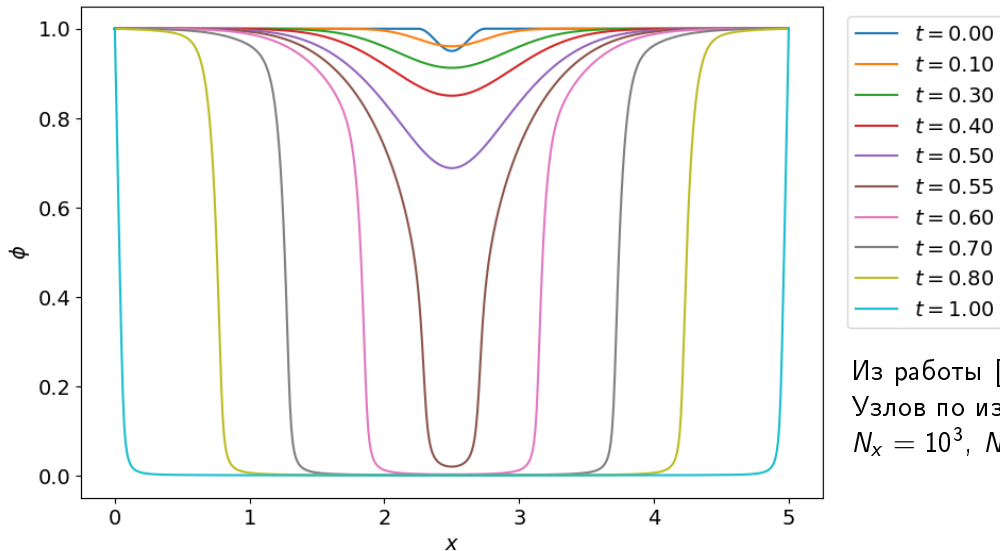
$$\phi_i^0 = \phi_0(ih); \quad \phi_0^j = \phi_l(j\tau); \quad \phi_n^j = \phi_r(j\tau)$$

Сетка регулярная; τ – шаг по времени, h – шаг по пространству.

Явная разностная схема первого порядка по времени, второго – по пространству.



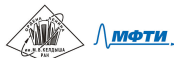
Типичное решение



Из работы [1].

Узлов по измерениям:

$$N_x = 10^3, N_t = 10^5$$



Цель работы

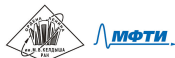
- Типичное поведение модели: долгий период медленных изменений, затем стремительное развитие пробоя.

Цель работы

Исследовать несколько подходов к адаптации расчетного шага по времени.



- 1 Введение
- 2 Постановка задачи
- 3 Методы адаптации**
- 4 Вычислительный эксперимент
- 5 Заключение



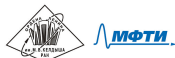
Общий вид схемы с адаптивным шагом

- Вводится переменный шаг τ^k :

$$\phi_j^{k+1} = \phi_j^k + m\tau^k \left(-F'(\phi_j^k) + \frac{\Gamma}{2} \frac{\phi_{j+1}^k - 2\phi_j^k + \phi_{j-1}^k}{h^2} \right)$$

- Значение τ^k ограничено заранее выбранными τ_{min} и τ_{max} :

$$\tau^k = \max \left[\tau_{min}, \min(\tau_{max}, \tilde{\tau}^k) \right]$$



Методы адаптации

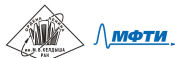
- По фазовому полю:

$$\tilde{\tau}_1^k = \frac{tol_1}{\left\| \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} \right]_h \right\|_C}$$

- По полной энергии:

$$\tilde{\tau}_2^k = \frac{tol_2}{\left\| \left[\frac{d\Pi}{dt} \right]_h \right\|}$$

Предложены в статьях [3] и [4].



Методы адаптации

- Условие устойчивости схемы [1]:

$$\tau \leq \frac{1}{4m} \min \left(\frac{\delta^{5/3}}{|\nabla \Phi|^2 \epsilon_0}, \frac{h^2}{\Gamma} \right)$$

- Неравенство с первым аргументом \min можно переписать в виде

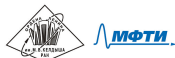
$$m\tau \max_{\phi \in [0,1]} |F''(\phi)| \leq 1$$

Адаптация по устойчивости

$$\tilde{\tau}_3^k = \frac{tol_3}{m \cdot \max_{j=0}^N G(\phi_j^k)},$$

где $G(\phi)$ мажорирует $|F''(\phi)|$

- 1 Введение
- 2 Постановка задачи
- 3 Методы адаптации
- 4 Вычислительный эксперимент**
- 5 Заключение



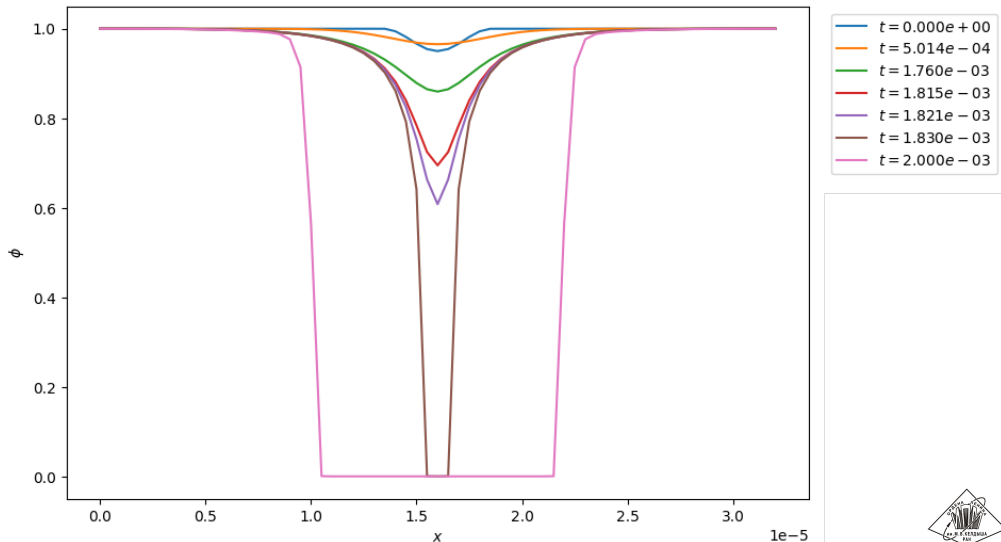
Параметры модели

- Параметры, отражающие реальный физический эксперимент:

Название	Переменная	Значение
электрическое напряжение	$ \nabla\Phi $	$5.625 \cdot 10^6$ В/м
энергия роста канала	Γ	$8.118 \cdot 10^{-10}$ Дж/м
диэлектрическая проницаемость	ϵ_0	$2.301 \cdot 10^{-11}$ Кл ² /(Дж · м)
подвижность	m	12 м ³ /(Дж · с)
толщина границы	l	$1.5 \cdot 10^{-6}$ м
регуляризующий параметр	δ	10^{-3}
размер образца	L	$3.2 \cdot 10^{-5}$ м
продолжительность	T	$2 \cdot 10^{-3}$ с
шаг по пространству	h	$5 \cdot 10^{-7}$ м
минимальный шаг по времени	τ_{min}	10^{-10} с
максимальный шаг по времени	τ_{max}	$\leq 6.42 \cdot 10^{-6}$ с



Поведение системы



Результаты расчетов

Тип адаптации	Ускорение (раз)	Отклонение по ϕ	Запаздывание
по фазовому полю	800	$3.64 \cdot 10^{-4}$	0.3%
по энергии	107	$5.38 \cdot 10^{-4}$	0.36%
по устойчивости	1474	$1.54 \cdot 10^{-2}$	0.71%
по фазовому полю	101	$1.23 \cdot 10^{-5}$	0.004%
по энергии	101	$3.27 \cdot 10^{-4}$	0.19%
по устойчивости	100	$2.23 \cdot 10^{-2}$	0.0046%

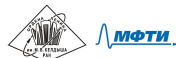


- 1 Введение
- 2 Постановка задачи
- 3 Методы адаптации
- 4 Вычислительный эксперимент
- 5 Заключение

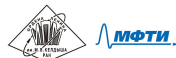


Основные результаты работы.

- Исследовано три метода адаптации расчетного шага по времени
- Проведены вычислительные эксперименты
- Рассмотренные методы универсальны для моделей типа диффузной границы с уравнением Аллена–Кана



- [1] А. С. Пономарев, Е. В. Зипунова и Е. Б. Савенков. “Устойчивость стационарных решений в модели развития канала электрического пробоя типа «диффузной границы»”. 2024.
- [2] Е. В. Зипунова и Е. Б. Савенков. “О моделях диффузной границы для описания динамики объектов высшей коразмерности”. *Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша* (2020).
- [3] Y. Li, Y. Choi и J. Kim. “Computationally efficient adaptive time step method for the Cahn–Hilliard equation”. *Computers & Mathematics with Applications* (2017).
- [4] Zh. Zhang и Zh. Qiao. “An Adaptive Time-Stepping Strategy for the Cahn-Hilliard Equation”. *Communications in Computational Physics* (2012).



Спасибо за внимание!

