

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ОРДЕНА ЛЕНИНА
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М. В. КЕЛДЫША

А. С. Пономарев, Е. В. Зипунова, Е. Б. Савенков

**Адаптация шага по времени
в модели типа «диффузной границы»
на основе уравнения Аллена–Кана**

Москва, 2025

A. С. Пономарев, Е. В. Зипунова, Е. Б. Савенков, Адаптация шага по времени в модели типа «диффузной границы» на основе уравнения Аллена–Кана

Аннотация

В работе исследованы три различных подхода к адаптации шага по времени в модели развития канала электрического пробоя типа диффузной границы, включающей уравнение типа Аллена–Кана. Один из подходов предложен авторами настоящей работы, дано его теоретическое обоснование. Для всех трех алгоритмов адаптации проведены численные эксперименты; выявлен наиболее эффективный из них.

Исследованные методы адаптации универсальны – они могут использоваться и в других моделях типа диффузной границы, основанных на уравнении Аллена–Кана.

Ключевые слова: модель типа диффузной границы, уравнение Аллена–Кана, адаптация шага по времени

A. S. Ponomarev, E. V. Zipunova, E. B. Savenkov, Time step adaptation in a diffuse interface model based on Allen–Cahn equation

Abstract

The subject of the present paper is a diffuse interface model describing the development of electrical breakdown channel. The model includes Allen–Cahn equation. Three different adaptive time-stepping methods for the model are investigated. Among the methods there is a new one, proposed by the authors, with its theoretical base given. Computational experiments are performed for all the three adaptation algorithms; the most effective of them is exposed.

The analysed adaptation methods can also be applied in other diffuse interface models based on Allen–Cahn equation – in this regard, the methods are universal.

Key words and phrases: diffuse interface model, Allen–Cahn equation, adaptive time-stepping method

1 Введение

Модели типа диффузной границы в настоящее время составляют целый класс подходов для решения прикладных задач гидродинамики [1–3], механики деформируемого тела и теории трещин [4], материаловедения [5], солидификации и теории фазовых переходов [6–8], описания кристаллических структур [9–11]. Предметом исследования авторов является модель подобного класса, предложенная в статье [12], описывающая развитие канала электрического пробоя в твердом диэлектрике. Ее подробное описание и анализ можно найти в работах [13–15].

Вещество в моделируемой системе находится в нескольких различных состояниях – фазах, – причем вещество в одной и той же фазе образует некоторые однородные области. В соответствии с методом диффузной границы распределение фаз вещества описывается гладкой функцией $\phi(\mathbf{x}, t)$, называемой фазовым полем. В областях однородности каждой из фаз функция ϕ близка к определенной константе; в переходной зоне (внутри «диффузной границы») – меняется пусть и быстро, но непрерывно. Характерная толщина граничной зоны определяется параметрами модели.

Исследуемая модель состоит из двух дифференциальных уравнений в частных производных; основной интерес в настоящей работе представляет второе из них – уравнение динамики фазового поля ϕ типа Аллена–Кана.

Для системы типично следующее поведение: развитие канала пробоя происходит стремительно, но ему предшествует долгий период крайне медленных изменений в системе. Такое различие временных масштабов событий вызывает проблемы при моделировании – использование регулярной по времени расчетной сетки в методе конечных разностей видится нерациональным.

Цель настоящей работы – исследовать различные методы адаптации расчетного шага по времени для описанной модели. К отбираемым подходам авторы предъявили два основных требования: во-первых, подход должен быть не слишком сложен с точки зрения программной реализации, во-вторых, не требовать значительного объема дополнительных вычислений.

В результате было исследовано три различных подхода к адаптации: первый предложен в статье [16], второй – в статье [17], третий – авторами настоящей работы.

В работе приведено краткое описание исследуемой математической модели и используемая разностная схема. Далее проведен теоретический анализ методов адаптации шага по времени, предложенных в статьях [16] и [17], учитывая определенную их общность. Затем авторами предложен третий метод адаптации, объяснены детали его реализации, дано их математическое обоснование. Наконец, описаны проведенные вычислительные эксперименты, представлены их результаты и сравнение методов адаптации между собой.

2 Математическая модель

Приведем краткое описание исследуемой математической модели. Подробное описание физического смысла уравнений и параметров модели можно найти в работе [15].

Рассматривается ограниченная область пространства $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. Распределение фаз вещества в ней задается гладкой функцией $\phi(\mathbf{x}, t)$, $\phi : \Omega \times \times [0, +\infty)_t \rightarrow [0, 1]$, – фазовым полем; вещество может находиться в одной из двух фаз: $\phi \approx 1$ – «неповрежденное», $\phi \approx 0$ – «полностью разрушенное» (то есть относящееся к каналу пробоя), – а также в промежуточных состояниях в области диффузной границы: $\mathbf{x} \in \Omega$, $0 + \varepsilon \leq \phi(\mathbf{x}) \leq 1 - \varepsilon$, $\varepsilon > 0$ мало.

Диэлектрическая проницаемость среды ϵ задается следующей формулой:

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

Здесь $\epsilon_0(\mathbf{x})$ – диэлектрическая проницаемость неповрежденной среды, $f(\phi) = 4\phi^3 - 3\phi^4$ – интерполирующая функция, $0 < \delta \ll 1$ – регуляризующий параметр. Запись $\epsilon[\phi]$ означает функциональную зависимость ϵ от ϕ .

Помимо фазового поля ϕ , состояние системы описывает функция $\Phi(\mathbf{x}, t)$, $\Phi : \Omega \times [0, +\infty)_t \rightarrow \mathbb{R}$, – потенциал электрического поля.

Постулируется следующее выражение для свободной энергии Π системы:

$$\begin{aligned} \Pi &= \int_{\Omega} \pi d\mathbf{x}, \\ \pi &= -\frac{1}{2}\epsilon[\phi] \cdot \|\nabla \Phi\|^2 + \Gamma \frac{1 - f(\phi)}{l^2} + \frac{\Gamma}{4}\|\nabla \phi\|^2. \end{aligned}$$

Здесь $\Gamma > 0$, $l > 0$ – числовые параметры модели, константы; $\|\cdot\|$ обозначает евклидову норму в \mathbb{R}^3 .

Принимается, что динамика системы описывается следующими двумя уравнениями:

$$\begin{cases} \frac{\delta \Pi}{\delta \Phi} = 0; \\ \frac{1}{m} \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\delta \Pi}{\delta \phi}. \end{cases}$$

Здесь константа $m > 0$ – числовой параметр модели, называемый подвижностью. Говоря нестрого, согласно первому уравнению электрический потенциал Φ распределяется так, чтобы свободная энергия была минимальной при заданном распределении фазового поля ϕ ; согласно второму – фазовое поле ϕ

с определенной скоростью эволюционирует так, чтобы свободная энергия была минимальной при заданном распределении электрического потенциала Φ .

Отыскав явно вариационные производные в двух уравнениях выше, получим следующую систему уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \operatorname{div}(\epsilon[\phi]\nabla\Phi) = 0; \end{array} \right. \quad (1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{m}\frac{\partial\phi}{\partial t} = \frac{1}{2}\epsilon'(\phi)\|\nabla\Phi\|^2 + \frac{\Gamma}{l^2}f'(\phi) + \frac{1}{2}\Gamma\Delta\phi. \end{array} \right. \quad (2)$$

Здесь $(\cdot)' \equiv (\cdot)'_\phi$. Система состоит из двух уравнений относительно скалярных полей ϕ и Φ и описывает их совместную эволюцию.

Уравнение (2) имеет вид

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

где

$$F(\phi; \|\nabla\Phi\|) = -\frac{1}{2}\epsilon[\phi] \cdot \|\nabla\Phi\|^2 + \Gamma\frac{1-f(\phi)}{l^2} \quad (3)$$

есть определенная нелинейная функция от ϕ , которая к тому же зависит от $\|\nabla\Phi\|$ как от параметра. Таким образом, перед нами нелинейное уравнение типа Аллена–Кана [18].

Из вывода модели очевидна следующая запись формулы для плотности свободной энергии:

$$\pi = F(\phi; \|\nabla\Phi\|) + \frac{\Gamma}{4}\|\nabla\phi\|^2. \quad (4)$$

В рассматриваемой задаче функция F имеет различное поведение в зависимости от значения $\|\nabla\Phi\|$, как было показано в работе [15]. Возможны три случая в соответствии со значением параметра

$$\xi = \frac{\|\nabla\Phi\|^2 l^2 \epsilon_0}{2\Gamma},$$

а именно:

- «слабое напряжение», $\xi < \delta^2$: $F(\phi)$ монотонно убывает;
- «среднее напряжение», $\delta^2 < \xi < (1 + \delta)^2$: $F(\phi)$ унимодальна, убывание сменяется возрастанием;
- «сильное напряжение», $\xi > (1 + \delta)^2$: $F(\phi)$ монотонно возрастает.

Наибольший интерес для практики моделирования представляет случай «сильного напряжения», так как именно тогда канал пробоя развивается из сколь угодно малых возмущений неповрежденной среды.

3 Разностная схема

3.1 Упрощающие допущения

Для описанной модели будем использовать разностную схему из работы [15], где предварительно делается ряд допущений, упрощающих задачу. Кратко перечислим их.

Система (1), (2) рассматривается в замкнутой области $\bar{\Omega} = [0, W]_x \times [0, H]_y \times I_z$, где $W, H > 0$, I – некоторый отрезок. Пусть $\epsilon_0(\mathbf{x}) = \epsilon_0(x)$, а также задано начальное условие $\phi(\mathbf{x}, 0) = \phi_0(x)$, то есть диэлектрическая проницаемость неповрежденной среды и начальное распределение фаз зависят только от x . На $\partial\Omega$ считаем заданным следующее граничное условие на ϕ : $\phi|_{x=0} = \phi_l(t)$, $\phi|_{x=W} = \phi_r(t)$, а также $\partial\phi/\partial\mathbf{n} = 0$ на «гранях» области $\bar{\Omega}$, перпендикулярных осям y и z ; следующее граничное условие на Φ : $\Phi|_{y=0} = \Phi^-$, $\Phi|_{y=H} = \Phi^+$, где $\Phi^-, \Phi^+ \in \mathbb{R}$, $\Phi^+ \geq \Phi^-$, а также $\partial\Phi/\partial\mathbf{n} = 0$ на «гранях» $\bar{\Omega}$, перпендикулярных осям x и z .

Учитывая описанные краевые условия, решение системы уравнений (1), (2) ищется в виде $\phi(\mathbf{x}, t) = \phi(x, t)$, $\Phi(\mathbf{x}, t) = \Phi(y, t)$. Решение $\Phi(\mathbf{x}, t) = \Phi^- + (y/H)(\Phi^+ - \Phi^-)$ известно аналитически, и система, таким образом, сводится к единственному уравнению

$$\frac{1}{m} \frac{\partial \phi}{\partial t} = -F'(\phi, \|\nabla \Phi\|) + \frac{1}{2} \Gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (5)$$

на функцию $\phi(x, t)$ в области $[0, W]_x \times [0, +\infty)_t$, с начальным условием

$$\phi(x, 0) = \phi_0(x) \quad (6)$$

и граничным условием

$$\phi(0, t) = \phi_l(t), \quad \phi(W, t) = \phi_r(t). \quad (7)$$

Здесь $\|\nabla \Phi\| = (\Phi^+ - \Phi^-)/H$ – константа. В дальнейшем именно $\|\nabla \Phi\|$ будет считаться параметром модели, конкретные значения Φ^+ и Φ^- при этом неважны.

Так как в рассматриваемой постановке задачи $\|\nabla \Phi\|$ – константа, то вместо $F(\phi; \|\nabla \Phi\|)$ будем писать $F(\phi)$.

Для простоты анализа везде далее ϵ_0 считается константой.

3.2 Разностная схема

Для аппроксимации дифференциальной задачи (5), (6), (7) в работе [15] предложено разностное уравнение

$$\frac{1}{m} \frac{\phi_j^{k+1} - \phi_j^k}{\tau} = \frac{1}{2} K_\phi^2 \epsilon'(\phi_j^k) + \frac{\Gamma}{l^2} f'(\phi_j^k) + \frac{\Gamma \phi_{j+1}^k - 2\phi_j^k + \phi_{j-1}^k}{2h^2} \quad (8)$$

и используется разностная схема

$$\phi_j^{k+1} = \phi_j^k + m\tau \left(-F'(\phi_j^k) + \frac{\Gamma \phi_{j+1}^k - 2\phi_j^k + \phi_{j-1}^k}{2h^2} \right), \quad j = \overline{1, M-1}, \quad k \in \mathbb{N}_0; \quad (9)$$

$$\phi_j^0 = \phi_0(jh); \quad \phi_0^k = \phi_l(k\tau); \quad \phi_M^k = \phi_r(k\tau). \quad (10)$$

Схема четырехточечная, явная, на регулярной сетке с временным шагом τ и пространственным шагом h , с числом узлов пространственной сетки $M = W/h \in \mathbb{N}$. Координаты узлов сетки – $(jh, k\tau)$, $j = \overline{0, M}$, $k \in \mathbb{N}_0 = \mathbb{N} \cup \{0\}$. ϕ_j^k есть значение сеточной функции ϕ в узле $(jh, k\tau)$.

3.3 Схема с адаптивным шагом по времени

При работе с моделью возникает следующая проблема. Характерным поведением системы является резкое, стремительное образование канала пробоя, которому предшествует длительный период очень слабых и медленных изменений в системе. Шаг расчетной сетки по времени должен быть достаточно мал для адекватного моделирования быстрых процессов в системе (косвенно это выражается, например, условием устойчивости схемы, представленном в работе [15]); однако настолько сильное разрешение по времени оказывается избыточным в период медленной эволюции системы. Таким образом, использование регулярной по времени сетки видится нерациональным.

При переходе между временными слоями k и $k+1$ будем использовать переменный шаг по времени τ^k . Уравнение (9) приобретает вид

$$\phi_j^{k+1} = \phi_j^k + m\tau^k \left(-F'(\phi_j^k) + \frac{\Gamma \phi_{j+1}^k - 2\phi_j^k + \phi_{j-1}^k}{2h^2} \right). \quad (11)$$

Далее будет рассмотрено несколько подходов к вычислению τ^k . Общая формула его расчета

$$\tau^k = \max \left[\tau_{\min}, \min(\tau_{\max}, \tilde{\tau}^k) \right], \quad (12)$$

то есть величина $\tilde{\tau}^k$ (рассчитываемая по своей формуле для каждого подхода) ограничивается снизу и сверху заранее выбранными значениями τ_{\min} и τ_{\max} соответственно. Последние выбираются эмпирически, исходя из критериев устойчивости, точности и скорости расчета.

4 Адаптации по фазовому полю и по энергии

4.1 Формулировка методов

Рассмотрим первые два подхода к адаптации шага по времени, предложенные в статьях [16] и [17] соответственно. Введем их вместе из-за определенной общности:

$$\tilde{\tau}_1^k = \frac{\text{tol}_1}{\|[\partial\phi/\partial t]_h\|_C}, \quad (13)$$

$$\tilde{\tau}_2^k = \frac{\text{tol}_2}{|[d\Pi/dt]_h|}. \quad (14)$$

Числовые константы tol_1 и tol_2 подбираются эмпирически. Здесь и далее символами $[\cdot]_h$ и $[\cdot]^k_j$ обозначаются сеточные функции, а именно разностные производные и приращения (j, k – индексы на сетке, целые либо полуцелые).

В формуле (13) в качестве $[\partial\phi/\partial t]_h$ удобно использовать

$$\left[\frac{\partial\phi}{\partial t} \right]_j^{k+1/2} = \frac{\phi_j^{k+1} - \phi_j^k}{\tau}$$

из левой части разностного уравнения (8). Дополнительные вычисления не потребуются, так как в расчете уже используется значение его правой части. Если такой подход неприменим (например, из-за проблем с синхронизацией параллельных вычислений), то можно использовать производную $[\partial\phi/\partial t]^{k-1/2}$, сохраненную с предыдущего временного слоя.

В формуле (14) в знаменателе модуль разностной производной полной энергии $\Pi(t)$. В силу вывода уравнений (1), (2) динамики системы, в адекватном расчете $[d\Pi/dt]_h$ либо отрицательна, либо крайне мала по модулю (сеточный эффект колебания системы вблизи минимума Π).

Плотность энергии π вычисляется из уравнения (4), для чего необходима разностная производная $[\partial\phi/\partial x]_h$. Предлагается использовать следующие формулы:

$$\pi_j^k = F(\phi_j^k) + \frac{\Gamma}{4} \left(\left[\frac{\partial\phi}{\partial x} \right]_j^k \right)^2, \quad \left[\frac{\partial\phi}{\partial x} \right]_j^k = \begin{cases} \frac{\phi_1^k - \phi_0^k}{h} & \text{при } j = 0; \\ \frac{\phi_{j+1}^k - \phi_{j-1}^k}{2h} & \text{при } j = \overline{1, M-1}; \\ \frac{\phi_M^k - \phi_{M-1}^k}{h} & \text{при } j = M; \end{cases}$$

$$\Pi^k = \frac{h\pi_0^k + h\pi_M^k}{2} + \sum_{j=1}^{M-1} h\pi_j^k = h \cdot \left(\frac{\pi_0^k + \pi_M^k}{2} + \sum_{j=1}^{M-1} \pi_j^k \right).$$

В формуле (14) будем использовать разностную производную энергии с предыдущего временного слоя

$$\left[\frac{d\Pi}{dt} \right]^{k-1/2} = \frac{\Pi^k - \Pi^{k-1}}{\tau^{k-1}},$$

положив $\tau_0 = \tau_{\min}$.

Использование формулы (13) для расчета $\tilde{\tau}^k$ будем условно называть адаптацией по фазовому полю, формулы (14) – адаптацией по энергии.

4.2 Связь с нормированием приращения фазового поля

Общность описанных двух подходов и, возможно, ключ к их интуитивному пониманию заключается в следующем. Для адаптации по фазовому полю рассмотрим норму приращения $\phi^{k+1} - \phi^k$:

$$\|\phi^{k+1} - \phi^k\|_C = \tilde{\tau}_1^k \cdot \left\| \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} \right]^{k+1/2} \right\|_C = \text{tol}_1 \left\| \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} \right]^{k+1/2} \right\|_C^{-1} \cdot \left\| \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} \right]^{k+1/2} \right\|_C = \text{tol}_1.$$

Выходит нормирование приращения фазового поля (с оговоркой на ограничения через τ_{\min} и τ_{\max}).

В случае адаптации по энергии можно провести похожее рассуждение. Из вывода уравнения (2) верно следующее равенство:

$$\frac{d\Pi}{dt} = -\frac{1}{m} \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 d\mathbf{x},$$

что для сеточных функций дает

$$\left\| \left[\frac{d\Pi}{dt} \right]_h \right\| \approx \frac{1}{m} \left\| \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} \right]_h \right\|_2^2.$$

Здесь $\|\cdot\|_2$ обозначена сеточная L_2 -норма. Таким образом, при адаптации по энергии

$$\begin{aligned} \|\phi^{k+1} - \phi^k\|_2 &= \tilde{\tau}_2^k \cdot \left\| \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} \right]^{k+1/2} \right\|_2 \approx \text{tol}_2 \cdot m \left\| \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} \right]^{k-1/2} \right\|_2^{-2} \cdot \left\| \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} \right]^{k+1/2} \right\|_2 \approx \\ &\approx \text{tol}_2 \cdot m \cdot \left\| \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} \right]_h \right\|_2^{-1}. \end{aligned}$$

Авторы не стали отклоняться от предложенного в работе [17] метода адаптации, однако из проделанных рассуждений получается, что из модуля производной энергии в формуле (14) логичнее было бы извлечь квадратный корень, чтобы выполнялось $\|[\Delta\phi]_h\|_2 \approx \text{tol}_2 \cdot \sqrt{m}$.

5 Адаптация по устойчивости

5.1 Идея подхода

В работе [15] предложено следующее условие устойчивости разностной схемы (9), (10):

$$\tau \leq \frac{1}{4m} \min \left(\frac{\delta^{5/3}}{|\nabla \Phi|^2 \epsilon_0}, \frac{h^2}{\Gamma} \right). \quad (15)$$

Это неравенство получено применением для уравнения (8) спектрального признака устойчивости. Строго говоря, спектральный признак не дает достаточных условий устойчивости для нелинейных задач, однако на практике ее можно ожидать.

Неравенство (15) с первым аргументом минимума эквивалентно соотношению

$$m\tau \max_{\phi \in [0,1]} |F''(\phi)| \leq C, \quad (16)$$

где $C \approx 1.1/2$ – константа, выбранная, во-первых, для создания «запаса» в оценке, во-вторых, для удобства формульной записи. Существенно, что $C \leq 1$.

Основная идея подхода к адаптации, предлагаемого авторами в этом разделе, заключается в том, чтобы в неравенстве (16) заменить формальный максимум по $\phi \in [0, 1]$ на максимум по значениям сеточной функции ϕ_j^k на текущем временном слое и, естественно, взять наибольшее возможное τ . Таким образом получается следующая формула адаптивного шага по времени:

$$\tilde{\tau}_3^k = \frac{\text{tol}_3}{m \cdot \max_{j=0}^M |F''(\phi_j^k)|}. \quad (17)$$

Этот метод будем условно называть адаптацией по устойчивости.

Идея описанного подхода подразумевает, что для корректной работы схемы должно быть достаточно $\text{tol}_3 = 1$, позволяя отказаться от подбора константы. При большей желаемой точности расчета можно провести подбор $\text{tol}_3 < 1$.

Однако формула (17) в чистом виде имеет критический недостаток из-за вида функции $F''(\phi)$ и нуждается в доработке, которая будет проделана в следующем подразделе.

5.2 Детали реализации метода

Будем считать, что значения параметров модели относятся к случаю, представляющему наибольший практический интерес, – случаю «сильного

напряжения» (см. [15]). Функция $F(\phi)$, заданная формулой (3), строго возрастает, имея на интервале $(0, 1)$ положительную производную. Так как на $(0, 1)$ выполнено $f' > 0$, $\epsilon' < 0$, то $(\Gamma/l^2) \cdot |f'| < (|\nabla\Phi|^2/2) \cdot |\epsilon'|$. Более того, вблизи точки 0 и вовсе верно $\epsilon \approx \epsilon_0/\delta$, $\delta \ll 1$. Исходя из этих соображений, можно полуэмпирически заключить, что поведение функции $F(\phi)$ определяется главным образом поведением функции $\epsilon(\phi)$.

В работе [15] проводится анализ функции $\epsilon(\phi)$ вблизи точки $\phi = 0$. Далее будет приведено определенное обобщение предыдущих результатов, полезное для глубокого понимания вопроса.

Приведем формулы для производных функций $f(\phi)$ и $\epsilon(\phi)$:

$$f(\phi) = 4\phi^3 - 3\phi^4, \quad f'(\phi) = 12\phi^2 - 12\phi^3, \quad f''(\phi) = 24\phi - 36\phi^2, \\ \epsilon'(\phi) = \epsilon'_f \cdot f' = \frac{-\epsilon_0 f'(\phi)}{(f(\phi) + \delta)^2}, \quad (18)$$

$$\epsilon''(\phi) = \epsilon''_{ff} \cdot (f')^2 + \epsilon'_f \cdot f'' = \epsilon_0 \frac{2(f'(\phi))^2 - f''(\phi)(f(\phi) + \delta)}{(f(\phi) + \delta)^3}. \quad (19)$$

Рассмотрим замену переменной $\phi = z\delta^{1/3}$, $\phi \in [0, 1]$, $z \in [0, \delta^{-1/3}]$. Домножим на δ функцию $\epsilon(\phi)$, определяемую выражением (2). Получим

$$\frac{\delta \cdot \epsilon(z\delta^{1/3})}{\epsilon_0} = \frac{1}{4z^3 - 3z^4\delta^{1/3} + 1}.$$

Таким образом, в результате двух преобразований получена функция, имеющая очевидный поточечный предел $1/(1 + 4z^3)$ при $\delta \rightarrow +0$.

Производные $\delta \cdot \epsilon$ порядка k по z и по ϕ легко выражаются друг через друга:

$$\frac{d^k}{dz^k} \left[\delta \cdot \epsilon(z\delta^{1/3}) \right] = \delta^{1+k/3} \cdot \epsilon^{(k)}(z\delta^{1/3}),$$

где $\epsilon^{(k)}$ обозначена $d^k \epsilon / d\phi^k$.

Очевидное утверждение о поточечной сходимости $\delta \cdot \epsilon(z\delta^{1/3})/\epsilon_0$ может быть значительно усилено.

Утверждение 1. Пусть $C > 0$ произвольное. На отрезке $[0, C]_z$ для любого порядка k имеет место равномерная сходимость производных

$$\frac{d^k}{dz^k} \left[\frac{\delta \cdot \epsilon(z\delta^{1/3})}{\epsilon_0} \right] \Rightarrow \frac{d^k}{dz^k} \left[\frac{1}{1 + 4z^3} \right]$$

при $\delta \rightarrow +0$.

Доказательство. Обозначим исследуемую функцию $g(z) = \delta \cdot \epsilon(z\delta^{1/3})/\epsilon_0$.

Зафиксируем δ . Представим $g(z)$ на отрезке $[0, \delta^{-1/3}]$ в виде функционального ряда следующим образом:

$$g(z) = \frac{1}{1+4z^3} \cdot \frac{1}{1 - \frac{3z^4\delta^{1/3}}{1+4z^3}} = \frac{1}{1+4z^3} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{3z^4}{1+4z^3} \right)^n \delta^{n/3}.$$

Ряд сходится равномерно по z . Действительно,

$$\frac{3z^4}{1+4z^3}\delta^{1/3} = \frac{3z^3}{1+4z^3} \cdot z\delta^{1/3} = \frac{3}{4+1/z^3} \cdot z\delta^{1/3} \leq \frac{3}{4} \cdot 1 = \frac{3}{4},$$

то есть рассматриваемый ряд из положительных членов мажорируется геометрической прогрессией с основанием $3/4$.

Обозначим

$$S_j(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+j)!}{n!} \left(\frac{3z^4}{1+4z^3} \right)^n \delta^{n/3}.$$

В этих обозначениях $g(z) = S_0(z)/(1+4z^3)$.

Все функциональные ряды S_j также сходятся на $[0, \delta^{-1/3}]$ равномерно по z , так как мажорируются сходящимися рядами

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_j(n) \cdot \left(\frac{3}{4} \right)^n,$$

где $P_j(n)$ – положительный при $n \in \mathbb{N}_0$ многочлен степени j .

Рассмотрим ряд из производных членов ряда S_0 :

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{1}{1+4z^3} \cdot \left(\frac{3z^4}{1+4z^3} \right)^n \delta^{n/3} \right]'_z &= \\ &= \left(\frac{1}{1+4z^3} \right)'_z S_0(z) + \frac{1}{1+4z^3} \left(\frac{3z^4}{1+4z^3} \right)'_z \delta^{1/3} \cdot S_1(z). \end{aligned}$$

Указанный ряд выражается в виде суммы равномерно сходящихся S_j , домноженных на $\delta^{j/3}$ и ограниченные функции, следовательно, сходится на $[0, \delta^{-1/3}]$ равномерно. Так как и сам S_0 , и ряд из его производных равномерно сходятся, то S_0 можно продифференцировать почленно, то есть

$$\frac{dS_0}{dz} = \left(\frac{1}{1+4z^3} \right)'_z S_0(z) + \frac{1}{1+4z^3} \left(\frac{3z^4}{1+4z^3} \right)'_z \delta^{1/3} \cdot S_1(z).$$

Проводя аналогичное рассуждение для производных всех порядков k ряда S_0 , по индукции заключаем, что $d^k S_0/dz^k$ есть сумма $S_j \delta^{j/3}$, домноженных на ограниченные функции. То же верно и для $g(z)$, выражющейся через S_0 .

Теперь рассмотрим отрезок $[0, C]$ и $\delta \rightarrow +0$. Легко видеть, что на $[0, C]$ $S_j(z) \rightarrow (n+j)!/n!$ равномерно по z , в частности, $S_0(z) \rightarrow 1$. Тогда, очевидным образом, $g(z) \Rightarrow 1/(1+4z^3)$. Помимо этого, так как любая производная $g(z)$ представляется в виде суммы $S_j \delta^{j/3}$, домноженных на ограниченные функции, то верно

$$\frac{d^k g(z)}{dz^k} \Rightarrow \frac{d^k}{dz^k} \left[\frac{1}{1+4z^3} \right]$$

на $[0, C]$ равномерно по z при $\delta \rightarrow +0$. \square

Замечание 1. В утверждении 1, как можно заключить из его доказательства, равномерная по z сходимость имеет асимптотику $\mathcal{O}_{C,k}(\delta^{1/3})$.

Утверждение 1 позволяет записать приближенные представления

$$\epsilon^{(k)}(\phi) \approx \epsilon_0 \delta^{-1-k/3} \cdot \frac{d^k}{dz^k} \left[\frac{1}{1+4z^3} \right] \Big|_{z=\delta^{-1/3}\phi}.$$

Доказанная для всех производных равномерная сходимость влечет для этих приближений в том числе сходимость нулей функций, интервалов знакопостоянства и экстремумов, а также интервалов выпуклости-вогнутости. Отсюда становится совершенно ясным описанное в работе [15] убывание корней ϵ'' с порядком $\delta^{1/3}$ и порядок $\delta^{-5/3}$ модулей экстремумов ϵ'' .

Функция $\epsilon(\phi)$ на отрезке $[0, 1]$ монотонно убывает; ее производная унимодальна: при увеличении ϕ сначала убывает от значения 0, затем возрастает до значения 0; вторая производная имеет три промежутка роста: убывает, затем возрастает, затем убывает. ϵ'' вблизи 0 меняется очень быстро, достигает больших по модулю значений и всецело определяет поведение F'' . $\epsilon''(\phi)$ имеет ноль $\phi_0 \sim 0.5 \cdot \delta^{1/3}$, а также локальный минимум и локальный максимум в точках

$$\phi_{\mp} \sim \frac{1}{\sqrt[3]{32 \mp 12\sqrt{6}}} \cdot \delta^{1/3}$$

соответственно.

По перечисленным выше причинам функция $F''(\phi)$ в формуле (17) крайне неудобна: вблизи 0 она достигает больших по модулю значений и к тому же имеет ноль, так что при взятии модуля в зоне больших значений возникает резкий «провал» до 0. Чтобы решить проблему, мажорируем $|F''(\phi)|$ гладкой

функцией, не имеющей такого недостатка.

$$\begin{aligned} \frac{\delta^{5/3}\epsilon''(\delta^{1/3}z)}{\epsilon_0} &= \frac{24(z^2 - \delta^{1/3}z^3) - (24z - 36\delta^{1/3}z^2)(4z^3 - 3\delta^{1/3}z^4 + 1)}{(4z^3 - 3\delta^{1/3}z^4 + 1)^3} = \\ &= \frac{12z(16z^3 - 30\delta^{1/3}z^4 + 15\delta^{2/3}z^5 + 3z\delta^{1/3} - 2)}{(4z^3 - 3\delta^{1/3}z^4 + 1)^3}. \end{aligned}$$

Поведение функции вблизи 0 определяется слагаемым $-2 \cdot 12z$. Поменяем его знак и получим функцию

$$\begin{aligned} \tilde{G}(z) &= \frac{12t(16z^3 - 30\delta^{1/3}z^4 + 15\delta^{2/3}z^5 + 3z\delta^{1/3} + 2)}{(4z^3 - 3\delta^{1/3}z^4 + 1)^3}; \\ G(\phi) &= \frac{|\nabla\Phi|^2\epsilon_0}{2}\delta^{-5/3}\tilde{G}(\delta^{-1/3}\phi) = |\nabla\Phi|^2\epsilon_0\frac{6\phi(16\phi^3 - 30\phi^4 + 15\phi^5 + 3\delta\phi + 2\delta)}{(4\phi^3 - 3\phi^4 + \delta)^3}. \end{aligned} \quad (20)$$

$G(\phi) \geq 0$ на $[0, 1]$. Имеем $G(x) = |G(x)| \geq |F''(\phi)|$.

Исправим формулу (17) в методе адаптации по устойчивости, заменив $F(\phi)$ на мажорирующую ее $G(\phi)$, определяемую формулой (20):

$$\tilde{\tau}_3^k = \frac{\text{tol}_3}{m \cdot \max_{j=0}^M G(\phi_j^k)}. \quad (21)$$

6 Вычислительный эксперимент

6.1 Параметры модели, краевые условия

Была создана программа, реализующая в рамках разностной схемы (10), (11), (12) перечисленные ранее алгоритмы адаптации временного шага: по фазовому полю (13), по энергии (14) и по устойчивости (21).

Будем использовать параметры модели, отражающие реальный физический эксперимент: см. табл. 1. Часть параметров ($|\nabla\Phi|$, ϵ_0) являются полноценными физическими величинами, часть (Γ , t) могут быть подобраны для согласования модели с результатами эксперимента. Чертой отделены параметры, которые либо происходят из связанных с диффузной границей допущений (l , δ), либо описывают расчетную сетку.

При подстановке значений параметров в условие (15) устойчивости разностной схемы получаем $\tau \leq \min(2.86 \cdot 10^{-10}, 6.42 \cdot 10^{-6})$ с. Неравенство с первым аргументом минимума является ограничением, происходящим из свойств

Таблица 1. Параметры модели в расчете

Название	Параметр	Значение
Электрическое напряжение	$ \nabla\Phi $	$5.625 \cdot 10^6$ В/м
Энергия роста ед. длины 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)
Характерная толщина границы	l	$1.5 \cdot 10^{-6}$ м
Регуляризующий параметр	δ	10^{-3}
Размер образца	W	$3.2 \cdot 10^{-5}$ м
Продолжительность опыта	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}	$\leqslant 6.42 \cdot 10^{-6}$ с

функции $F(\phi)$ (см. формулу (16)). Оно может быть ослаблено в зависимости от значений ϕ_j^k на текущем временном слое. Неравенство со вторым аргументом носит безусловный характер. Поэтому качестве τ_{\max} взято значение $6.42 \cdot 10^{-6}$ с; $\tau_{\min} = 10^{-10}$ с удовлетворяет обоим неравенствам и может рассматриваться как шаг по времени до введения адаптации.

Число узлов сетки по пространству $N_x \equiv M = W/h = 64$, по времени – $T/\tau_{\max} \leqslant N_t \leqslant T/\tau_{\min}$, а именно $312 \leqslant N_t \leqslant 2 \cdot 10^7$.

Зададим следующие краевые условия:

$$\phi(0, t) = \phi(W, t) = 1, \quad \phi(x, 0) = \phi_0(x), \quad (22)$$

$$\phi_0(x) = \begin{cases} 1 - 0.025 \cdot \left(1 + \cos \left[\frac{\pi}{0.08} \left(\frac{x}{W} - \frac{1}{2} \right) \right] \right) & \text{при } \frac{x}{W} \in [0.42, 0.58]; \\ 1 & \text{иначе.} \end{cases}$$

Функция $\phi_0(x)$ отлична от 1 в небольшой области вокруг $x = W/2$, где «прогибается» как один период синусоиды, достигая минимума $\phi = 0.95$.

6.2 Структура сетки с переменным шагом по времени

В настоящем подразделе описана техническая особенность расчетной сетки, внедренная авторами при создании программы. Это техническое решение лишь одно из возможных, и его понимание не является необходимым для восприятия решаемой задачи в целом.

Итак, на каждом временном слое номер k используется своя величина шага τ^k . Таким образом, расчетная сетка теряет регулярность по времени, и сравнение разных решений по сеточной норме становится нетривиальной

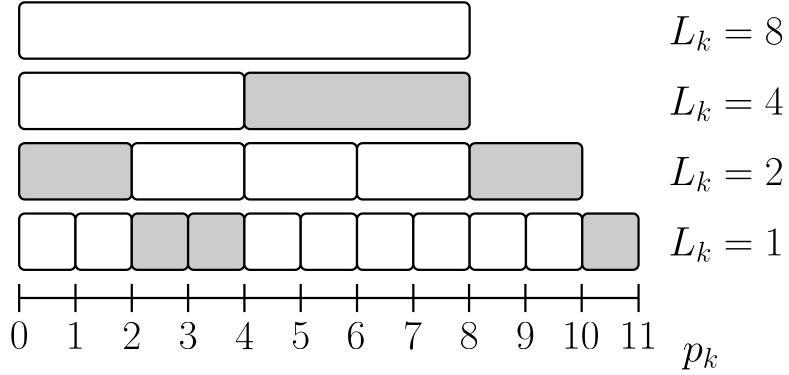


Рис. 1. Все возможные интервалы допустимых разбиений для $N = 11$; пример допустимого разбиения выделен цветом

задачей. Введем у нерегулярной сетки определенную структуру, в которой сконцентрируем всю сложность вопроса, избегая при этом использования сеточной интерполяции для результатов расчетов.

Пусть $N = N_{t,\max} = T/\tau_{\min} \in \mathbb{N}$, то есть временной промежуток $[0, T]$ разбит $N+1$ узлом на N равных отрезков длиной τ_{\min} каждый. Над этим разбиением введем структуру «типа дерева отрезков» (см., например, [19, подраздел 1.2.3.1]). Говоря формально, будем считать допустимыми лишь разбиения вида $D = (0, p_1\tau_{\min}, p_2\tau_{\min}, \dots, p_{n-1}\tau_{\min}, N\tau_{\min})$, где $p_k \in \mathbb{N}_0$, $k = \overline{0, n}$, p_k строго возрастают, $p_0 = 0$, $p_n = N$; $L_k = p_{k+1} - p_k = 2^{s_k}$, $s_k \in \mathbb{N}_0$, и к тому же $p_k : L_k$ (делится нацело). Все возможные интервалы допустимых разбиений образуют подобие двоичного дерева, схематично изображенного на рис. 1.

Описанная структура замечательна тем, что если из любых двух допустимых разбиений D_1 и D_2 выбрать по интервалу, то либо эти интервалы не пересекаются, либо совпадают, либо один строго вложен в другой. Следовательно, любые два соседних узла объемлющего разбиения $D = D_1 \cap D_2$ (пересечение в смысле множеств) соседствуют также в D_1 или в D_2 – в таком смысле D оптимально.

При адаптации шага по времени в разностной схеме (10), (11), (12) на слое k будем использовать не рассчитываемое τ^k напрямую, а максимальное $\tau'^k = 2^s \tau_{\min} \leq \tau^k$, $s \in \mathbb{N}_0$, к тому же допустимое описанным разбиением «типа дерева отрезков» временного промежутка T на N отрезков, а именно:

$$\begin{aligned} p_0 &= 0, \quad p_{k+1} = p_k + 2^{s_k} \leq N, \quad s_k \in \mathbb{N}_0; \\ \tau'^k &= 2^{s_k} \cdot \tau_{\min} \leq \tau^k, \quad p_k : 2^{s_k}; \\ s_k &\rightarrow \max. \end{aligned}$$

Для сравнения по равномерной норме $\|\cdot\|_{C,h}$ двух сеточных решений ϕ_1 и ϕ_2 на разбиениях D_1 и D_2 соответственно ограничим их оба на объемлющем разбиении $D = D_1 \cap D_2$.

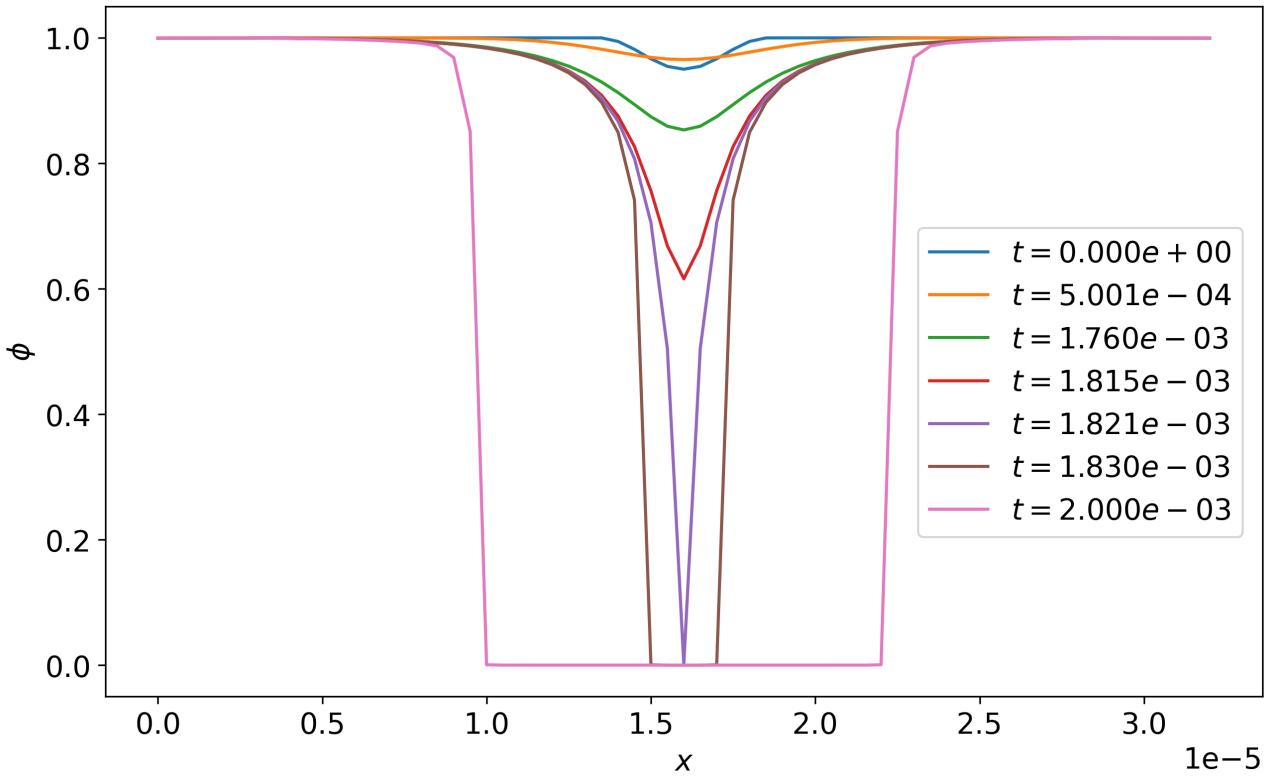


Рис. 2. Решение задачи (расчет без адаптации)

6.3 Результаты расчетов

На рис. 2 изображен результат расчета с параметрами из табл. 1 и краевыми условиями (22) для разностной схемы (9), (10) с постоянным шагом по времени $\tau = \tau_{\min}$. Видно, как из малого начального возмущения фазового поля ϕ постепенно растет канал электрического пробоя. В момент времени $t \approx 1.82 \cdot 10^{-3}$ в точке $x = W/2$ фазовое поле ϕ становится мало отличимо от 0 – происходит «пробой насквозь». Обратим внимание, что значение фазового поля упало от $\phi \approx 0.6$ до $\phi \approx 0$ менее чем за время 10^{-5} , то есть 0.5% от всей продолжительности эксперимента. Далее канал пробоя растет в толщину примерно с постоянной скоростью.

Теперь проведем расчеты с той же конфигурацией системы, но используя схему (10), (11), (12) с переменным шагом по времени для каждого из трех методов адаптации: по фазовому полю (13), по энергии (14), по устойчивости (21).

При слишком больших константах tol_1 , tol_2 , tol_3 разностная схема закономерно теряет устойчивость и результаты расчетов оказываются неадекватны. В таких случаях либо значения ϕ_j^k уходят на бесконечность, либо на графиках явно прослеживаются нефизичные колебания по узлам сетки.

Для первых двух методов адаптации были опытным путем подобраны минимальные значения констант, при которых описанный вычислительный

эксперимент завершается успешно: $\text{tol}_1 = 5 \cdot 10^{-4}$, $\text{tol}_2 = 2 \cdot 10^{-7}$. Адаптация по устойчивости дает адекватный расчет сразу, при $\text{tol}_3 = 1$, что соответствует идеи метода.

Провести сравнение решений по стандартной сеточной равномерной норме $\|\cdot\|_{C,h}$ не удается. При введении адаптивного временного шага решение разностной задачи начинает «отставать» от исходного – так проявляет себя ошибка аппроксимации по времени. Так как канал пробоя развивается стремительно, то даже небольшое «отставание» приводит к тому, что норма разности решений становится порядка 1 и не несет значимой информации (примеры значений в табл. 2, 3).

Для сравнения решений будем использовать следующую величину:

$$\begin{aligned}\rho(\phi, \psi) &= \max_{k=0}^n \rho(\phi, \psi; k), \\ \rho(\phi, \psi; k) &= \min_{s=0}^n \|\phi^k - \psi^s\|_{C,x} = \min_{s=0}^n \max_{j=0}^M |\phi_j^k - \psi_j^s|.\end{aligned}$$

Здесь $n \leq N \equiv N_t$ – число временных слоев сетки с учетом адаптации. Формула означает, что каждому моменту времени $t_{1,k}$ первого расчета сопоставляется момент времени $t_{2,s}$ второго расчета, в который второе сеточное решение ψ_j^s наиболее близко к первому ϕ_j^k по пространственной равномерной норме.

В описанном выше смысле «отставание» ϕ_j^k от ψ_j^s есть

$$\begin{aligned}\zeta(\phi, \psi) &= \max_{k=0}^n \zeta(\phi, \psi; k), \\ \zeta(\phi, \psi; k) &= t_{1,k} - t_2 \left(\operatorname{argmin}_{s=0}^n \|\phi^k - \psi^s\|_{C,x} \right).\end{aligned}$$

В формуле выше $t_2(s) \equiv t_{2,s}$ – нижний индекс для удобства вынесен в аргумент функции.

Относительным отставанием будем называть величину $\zeta(\phi, \psi)/T$, где T – длительность эксперимента.

На рис. 3 и 4 показаны графики отклонения $\rho(\phi, \psi; k)$ и отставания $\zeta(\phi, \psi; k)$ в зависимости от t_k для расчетов с максимальным наблюдаемым ускорением для каждого из трех методов адаптации. Ускорением считается кратное уменьшение числа временных шагов после введения адаптивного шага; ϕ обозначает расчет с адаптацией, ψ – исходный, эталонный, расчет. При построении графика $\rho(\phi, \psi; k)$ был применен фильтр оконного минимума для избавления от сеточных артефактов, связанных, по-видимому, с используемым экономичным сохранением результатов расчетов. Такой прием уместен, поскольку порядок ошибки решения куда более важен, чем ее точное значение.

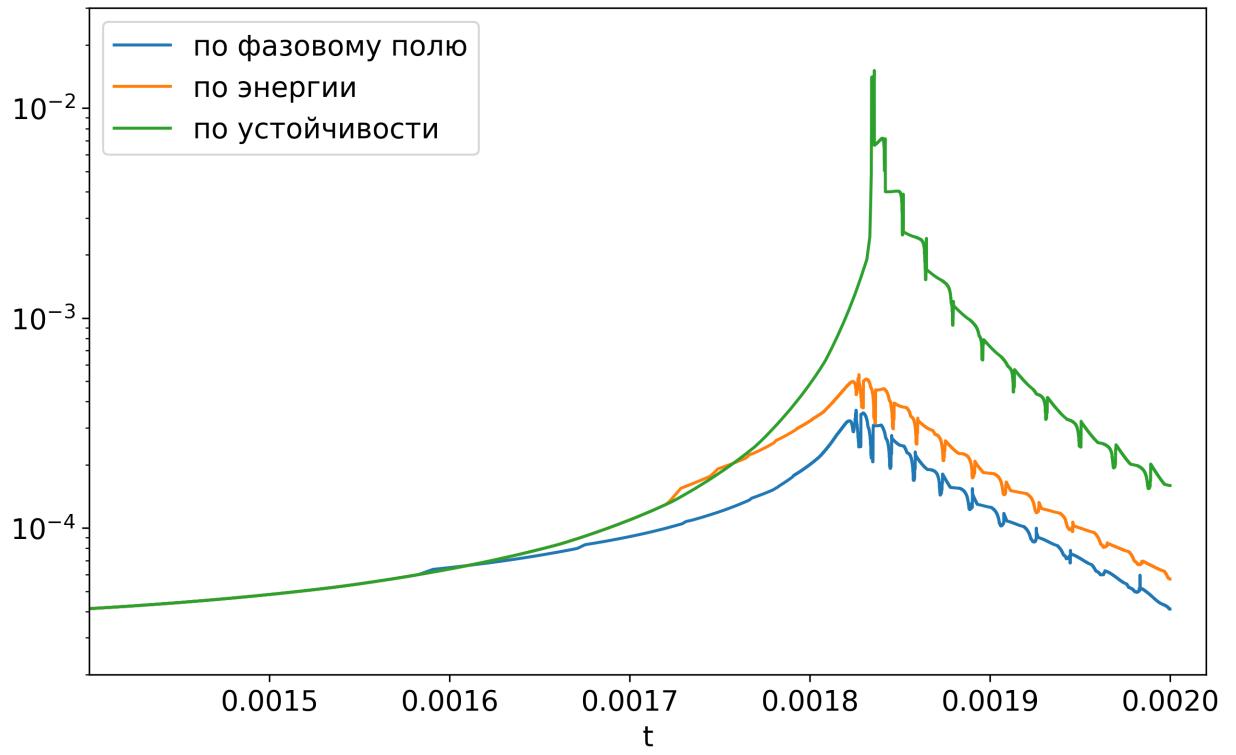


Рис. 3. Отклонение $\rho(\phi, \psi; k)$ решения с адаптацией от исходного решения

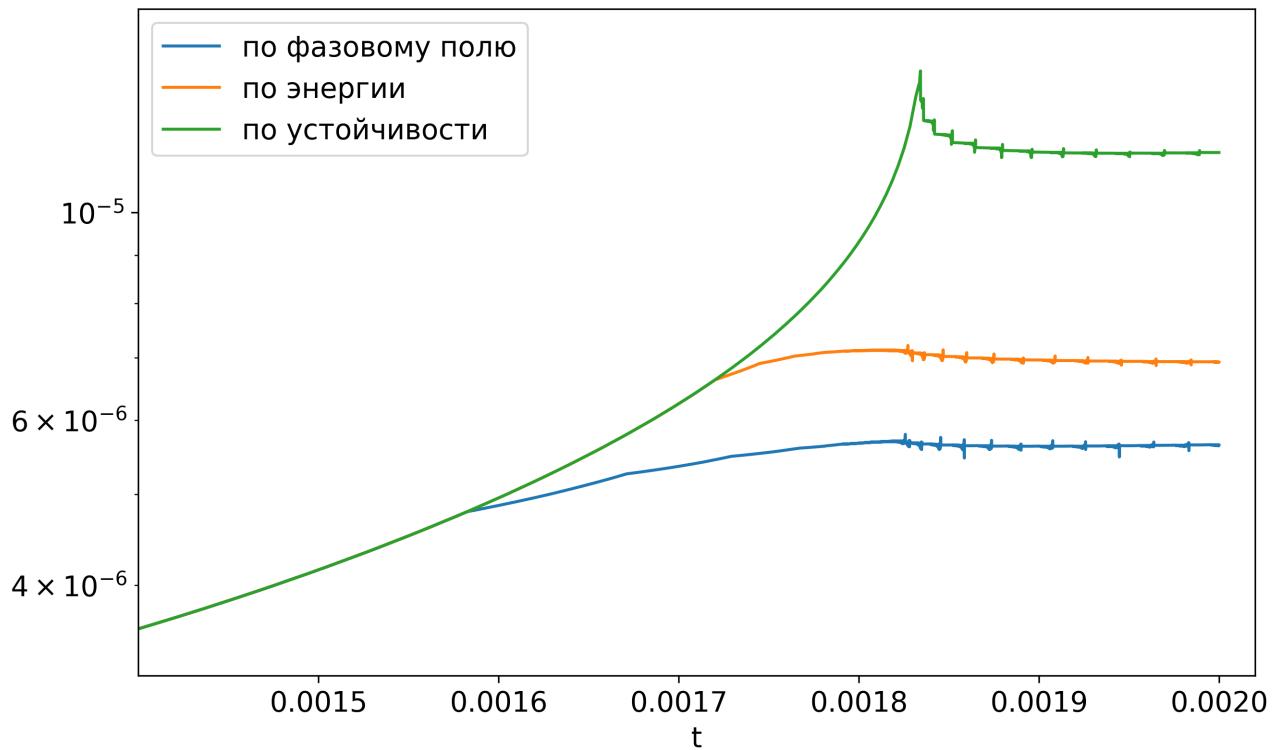


Рис. 4. Отставание $\zeta(\phi, \psi; k)$ решения с адаптацией от исходного решения

Таблица 2. Результаты расчетов с максимальным ускорением

Тип адаптации	Ускорение (раз)	$\ \phi - \psi\ _{C,h}$	$\rho(\phi, \psi)$	$\zeta(\phi, \psi)/T$
по фазовому полю	800	0.65	$3.64 \cdot 10^{-4}$	0.29%
по энергии	107	0.68	$5.38 \cdot 10^{-4}$	0.36%
по устойчивости	1474	0.77	$1.51 \cdot 10^{-2}$	0.71%

Таблица 3. Результаты расчетов с ускорением примерно в 100 раз

Тип адаптации	Ускорение (раз)	$\ \phi - \psi\ _{C,h}$	$\rho(\phi, \psi)$	$\zeta(\phi, \psi)/T$
по фазовому полю	101	0.21	$1.23 \cdot 10^{-5}$	0.0043%
по энергии	101	0.60	$3.25 \cdot 10^{-4}$	0.19%
по устойчивости	100	0.24	$2.23 \cdot 10^{-5}$	0.0049%

В табл. 2 перечислены значения $\rho(\phi, \psi)$ и $\zeta(\phi, \psi)/T$ для указанных выше расчетов. При вычислении максимума в формуле отклонения использовались значения $\rho(\phi, \psi; k)$ с упомянутым оконным фильтром. Указаны также результаты неудачного сравнения решений по равномерной сеточной норме.

В табл. 3 перечислены те же характеристики, но для расчетов с ускорением примерно в 100 раз.

Согласно проведенному сравнению, лучше всех себя показал первый метод (он же самый простой) – адаптация временного шага по фазовому полю. Она показывает высокое ускорение и наименьшую ошибку решения. Адаптации по энергии обе эти характеристики хуже. Адаптация по устойчивости уступает первой в точности, однако имеет определенные особые преимущества: наибольшее пиковое ускорение и возможность использования без подбора коэффициента tol_3 (пусть и при низкой точности решения).

7 Заключение

В работе исследованы три различных метода адаптации расчетного шага по времени для модели развития канала электрического пробоя. Методы условно названы адаптацией по фазовому полю, по энергии и по устойчивости. Последний предложен авторами настоящей работы на основе условия устойчивости разностной схемы, полученного в одной из предыдущих работ авторов по теме.

По результатам численного эксперимента лучше всех себя показывает первый метод, который к тому же выделяется своей простотой. При этом адаптация по устойчивости имеет некоторые преимущества, которые могут быть полезны при определенных требованиях к расчету.

Стоит отметить, что перечисленные методы адаптации шага по времени

(особенно первые два) универсальны для моделей типа диффузной границы с уравнением Аллена–Кана и могут быть в дальнейшем применены при решении различных задач подобного класса.

Список литературы

1. *Lamorgese A. G., Molin D., Mauri R.* Phase Field Approach to Multiphase Flow Modeling // Milan Journal of Mathematics. — 2011. — Dec. — Vol. 79, no. 2. — P. 597–642. — DOI: [10.1007/s00032-011-0171-6](https://doi.org/10.1007/s00032-011-0171-6).
2. *Kim J.* Phase-Field Models for Multi-Component Fluid Flows // Communications in Computational Physics. — 2012. — Vol. 12, no. 3. — P. 613–661. — DOI: [10.4208/cicp.301110.040811a](https://doi.org/10.4208/cicp.301110.040811a).
3. *Xu Z., Meakin P., Tartakovsky A. M.* Diffuse-interface model for smoothed particle hydrodynamics // Physical Review E. — 2009. — Mar. — Vol. 79, no. 3. — DOI: [10.1103/physreve.79.036702](https://doi.org/10.1103/physreve.79.036702).
4. *Ambati M., Gerasimov T., De Lorenzis L.* A review on phase-field models of brittle fracture and a new fast hybrid formulation // Computational Mechanics. — 2014. — Dec. — Vol. 55. — DOI: [10.1007/s00466-014-1109-y](https://doi.org/10.1007/s00466-014-1109-y).
5. *Provatas N., Elder K.* Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering. — 10/2010. — DOI: [10.1002/9783527631520](https://doi.org/10.1002/9783527631520).
6. Phase-Field Simulation of Solidification / W. Boettinger [et al.] // Annual Review of Materials Research. — 2002. — Aug. — Vol. 32. — P. 163–194. — DOI: [10.1146/annurev.matsci.32.101901.155803](https://doi.org/10.1146/annurev.matsci.32.101901.155803).
7. Simulations of Phase-field Models for Crystal Growth and Phase Separation / A. Cartalade [et al.] // Procedia Materials Science. — 2014. — Dec. — Vol. 7. — P. 72–78. — DOI: [10.1016/j.mspro.2014.10.010](https://doi.org/10.1016/j.mspro.2014.10.010).
8. Phase-Field Modeling of Polycrystalline Solidification: From Needle Crystals to Spherulites – A Review / L. Gránásy [et al.] // Metallurgical and Materials Transactions A. — 2014. — Apr. — Vol. 45. — P. 1694–1719. — DOI: [10.1007/s11661-013-1988-0](https://doi.org/10.1007/s11661-013-1988-0).
9. Phase-field-crystal models for condensed matter dynamics on atomic length and diffusive time scales: an overview / H. Emmerich [et al.] // Advances in Physics. — 2012. — July. — Vol. 61. — P. 665–743. — DOI: [10.1080/00018732.2012.737555](https://doi.org/10.1080/00018732.2012.737555).
10. *Asadi E., Asle Zaeem M.* A Review of Quantitative Phase-Field Crystal Modeling of Solid–Liquid Structures // JOM. — 2014. — Dec. — Vol. 67. — DOI: [10.1007/s11837-014-1232-4](https://doi.org/10.1007/s11837-014-1232-4).
11. Using the phase-field crystal method in the multi-scale modeling of microstructure evolution / N. Provatas [et al.] // JOM. — 2007. — July. — Vol. 59, no. 7. — P. 83–90. — DOI: [10.1007/s11837-007-0095-3](https://doi.org/10.1007/s11837-007-0095-3).

12. Pitike K. C., Hong W. Phase-field model for dielectric breakdown in solids // Journal of Applied Physics. — 2014. — Jan. — Vol. 115, no. 4. — P. 044101. — DOI: 10.1063/1.4862929.
13. Зипунова Е. В., Савенков Е. Б. О моделях диффузной границы для описания динамики объектов высшей коразмерности // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. — Москва, 2020. — № 122. — С. 1—34. — DOI: <https://doi.org/10.20948/prepr-2020-122>.
14. Зипунова Е. В., Савенков Е. Б. Феноменологический вывод термомеханической модели развития канала электрического пробоя типа «диффузной границы» // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. — Москва, 2022. — № 31. — С. 1—36. — DOI: <https://doi.org/10.20948/prepr-2022-31>.
15. Пономарев А. С., Зипунова Е. В., Савенков Е. Б. Устойчивость стационарных решений в модели развития канала электрического пробоя типа «диффузной границы» // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. — Москва, 2024. — № 73. — С. 1—32. — DOI: <https://doi.org/10.20948/prepr-2024-73>.
16. Li Y., Choi Y., Kim J. Computationally efficient adaptive time step method for the Cahn–Hilliard equation // Computers & Mathematics with Applications. — 2017. — Vol. 73, no. 8. — P. 1855–1864. — DOI: <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2017.02.021>.
17. Zhang, Zh., Qiao, Zh. An Adaptive Time-Stepping Strategy for the Cahn–Hilliard Equation // Communications in Computational Physics. — 2012. — Vol. 11, no. 4. — P. 1261–1278. — DOI: 10.4208/cicp.300810.140411s.
18. Allen S. M., Cahn J. W. A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening // Acta Metallurgica. — 1979. — Vol. 27, no. 6. — P. 1085–1095. — DOI: [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(79\)90196-2](https://doi.org/10.1016/0001-6160(79)90196-2).
19. Preparata F. P., Shamos M. I. Computational geometry: an introduction. — Springer Science & Business Media, 2012.

Содержание

1 Введение	3
2 Математическая модель	4
3 Разностная схема	6
3.1 Упрощающие допущения	6
3.2 Разностная схема	6
3.3 Схема с адаптивным шагом по времени	7
4 Адаптации по фазовому полю и по энергии	8
4.1 Формулировка методов	8
4.2 Связь с нормированием приращения фазового поля	9
5 Адаптация по устойчивости	10
5.1 Идея подхода	10
5.2 Детали реализации метода	10
6 Вычислительный эксперимент	14
6.1 Параметры модели, краевые условия	14
6.2 Структура сетки с переменным шагом по времени	15
6.3 Результаты расчетов	17
7 Заключение	20
Список литературы	22