

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

А. С. Пономарев¹, Е. В. Зипунова¹, А. А. Кулешов¹, Е. Б. Савенков¹

¹ИПМ им. М. В. Келдыша РАН

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

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

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

Time step adaptation in a diffuse interface model based on Allen–Cahn equation

A. S. Ponomarev¹, E. V. Zipunova¹, A. A. Kuleshov¹, E. B. Savenkov¹

¹Keldysh Institute of Applied Mathematics

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 под-
ходов для решения прикладных задач гидродинамики [1–3], механики деформируемого
тела и теории трещин [4], материаловедения [5], солидификации и теории фазовых пе-
реходов [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. Ха-
рактерная толщина граничной зоны определяется параметрами модели.

Исследуемая модель состоит из двух дифференциальных уравнений в частных про-
изводных; 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 предъявляли 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, описан проведенный вычислительный эксперимент, представлены его 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 $\phi(\mathbf{x}, t)$, $\phi : \Omega \times [0, +\infty)_t \rightarrow [0, 1]$, – 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:

$$\operatorname{div}(\epsilon[\phi] \nabla \Phi) = 0; \quad (1)$$

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

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 «границах» 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 «границах» $\bar{\Omega}$, 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

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

и используется разностная схема

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

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

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

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

то есть величина $\tilde{\tau}^k$ (расчитываемая 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, в большинстве случаев – разностные производные (j, k – индексы на сетке, целые либо полуцелые).

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

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

из левой части разностного уравнения (8). Дополнительные вычисления не потребуются, так как в расчете уже используется значение правой части уравнения (8). 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 находится 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 заключается в следующем. Для адаптации по фазовому полю рассмотрим норму приращения $\phi^{k+1} - \phi^k$:

$$\|\phi^{k+1} - \phi^k\|_C = \tau_1^k \cdot \left\| \left[\frac{\partial\phi}{\partial t} \right]^{k+1/2} \right\|_C = \text{tol}_1 \left\| \left[\frac{\partial\phi}{\partial t} \right]^{k+1/2} \right\|_C^{-1} \cdot \left\| \left[\frac{\partial\phi}{\partial t} \right]^{k+1/2} \right\|_C = \text{tol}_1.$$

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:

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

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:

$$\|[\psi]_h\|_2 = \sqrt{h \sum_{j=0}^M (\psi_j)^2}.$$

Таким образом, при адаптации по энергии

$$\begin{aligned} \|\phi^{k+1} - \phi^k\|_2 &= \tau_2^k \cdot \left\| \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} \right]^{k+1/2} \right\|_2 \approx \text{tol}_2 \cdot m \left\| \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} \right]^{k-1/2} \right\|_2^{-2} \cdot \left\| \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} \right]^{k+1/2} \right\|_2 \approx \\ &\approx \text{tol}_2 \cdot m \cdot \left\| \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} \right]_h \right\|_2^{-1}. \end{aligned}$$

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 $\|\phi^{k+1} - \phi^k\|_2 \approx \text{tol}_2 \cdot \sqrt{m}$.

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 $\epsilon \sim \epsilon_0/\delta$, $\delta \ll 1$. 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 $\epsilon(\phi)$, заданной выражением (2), вблизи точки $\phi = 0$. Далее будет приведено определенное обобщение предыдущих результатов, полезное для глубокого понимания вопроса.

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

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

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

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

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

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_j :

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{(n+j)!}{n!} \left(\frac{3z^4}{1+4z^3} \right)^n \delta^{n/3} \right]'_z = \left(\frac{3z^4}{1+4z^3} \right)'_z \delta^{1/3} \cdot S_{j+1}(z).$$

Полученный ряд есть S_{j+1} , домноженный на $\delta^{j/3}$ и ограниченную функцию, следовательно, он сходится на $[0, \delta^{-1/3}]$ равномерно. Так как и сам S_j , и ряд из его непрерывных производных равномерно сходятся, то S_j можно продифференцировать почленно, то есть

$$\frac{dS_j}{dz} = \left(\frac{3z^4}{1+4z^3} \right)'_z \delta^{1/3} \cdot S_{j+1}(z).$$

Как говорилось ранее, $g(z) = S_0(z)/(1+4z^3)$. Дифференцируя, получаем

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

По индукции заключаем, что $d^k g/dz^k$ есть сумма $S_j \delta^{j/3}$, $j = \overline{0, k}$, домноженных на ограниченные функции.

Теперь рассмотрим отрезок $[0, C]$ и $\delta \rightarrow +0$. Легко видеть, что на $[0, C]$ $S_j(z) \rightarrow \rightarrow (n+j)!/n!$ 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 $\delta \rightarrow +0$.

□

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

Неформально смысл утверждения 1 состоит в справедливости приближенных представлений

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

Доказанная для всех производных $\delta \cdot \epsilon(z\delta^{1/3})$ на $[0, C]_z$ равномерная сходимость влечет в том числе сходимость нулей функций, интервалов знакопостоянства и точек экстремумов, а также интервалов выпуклости-вогнутости. Из вида функции $1/(1+4z^3)$ следует, что при достаточно большом C и $\delta \rightarrow +0$ на отрезке $[0, C\delta^{1/3}]_\phi$ функция $\epsilon(\phi)$ монотонно убывает, $\epsilon'(\phi)$ вначале убывает, затем возрастает; $\epsilon''(\phi)$ имеет три промежутка роста (начиная с убывания), два экстремума и корень. Отсюда становится совершенно ясным полученный в работе [15] порядок $\delta^{1/3}$ корней и точек экстремума ϵ'' и порядок $\delta^{-5/3}$ модулей экстремумов ϵ'' .

$\epsilon''(\phi)$ 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. Поэтому функция F'' в формуле (17) крайне неудобна из-за слагаемого $\epsilon'' \cdot \|\nabla\Phi\|^2/2$: вблизи 0 оно 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 $|\epsilon''(\phi)|$ 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

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

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

Наконец, используя $G(\phi)$, заданную выражением (20), получим оценку

$$|F''(\phi)| \leq \frac{\|\nabla\Phi\|^2}{2} G(\phi) + \frac{\Gamma}{l^2} \sup_{\phi \in [0, 1]} |f''(\phi)| = \frac{\|\nabla\Phi\|^2}{2} G(\phi) + \frac{12\Gamma}{l^2}$$

и заменим ею $|F''(\phi)|$ в формуле (17) метода адаптации по устойчивости:

$$\tilde{\tau}_3^k = \text{tol}_3 \cdot \left[m \cdot \max_{j=0}^M \left(\frac{\|\nabla\Phi\|^2}{2} G(\phi_j^k) + \frac{12\Gamma}{l^2} \right) \right]^{-1}. \quad (21)$$

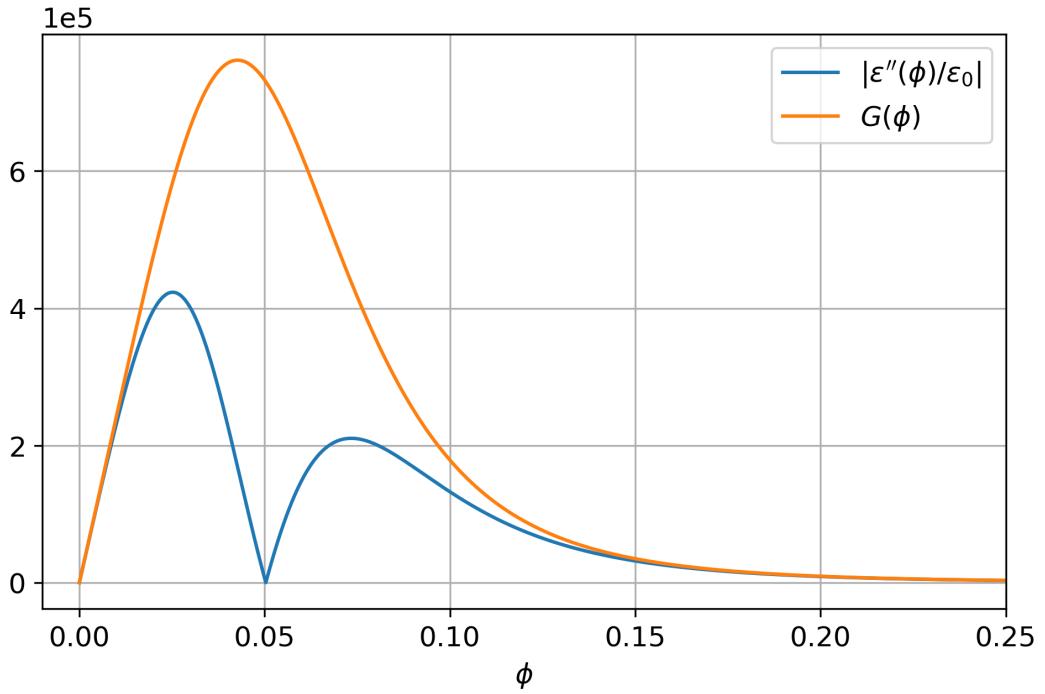


Рис. 1. Гладкая оценка сверху для $|\epsilon''(\phi)|$, $\delta = 10^{-3}$

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	$12 \text{ м}^3/(\text{Дж} \cdot \text{с})$
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

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 , m) могут быть подобраны для согласования модели с результатами эксперимента. Четвёртой 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 $\tau \leqslant \min(2.86 \cdot 10^{-10}, 6.42 \cdot 10^{-6})$ с. Неравенство с первым аргументом минимума является ограничением, происходящим из свойств функции $F(\phi)$ (см. форму-

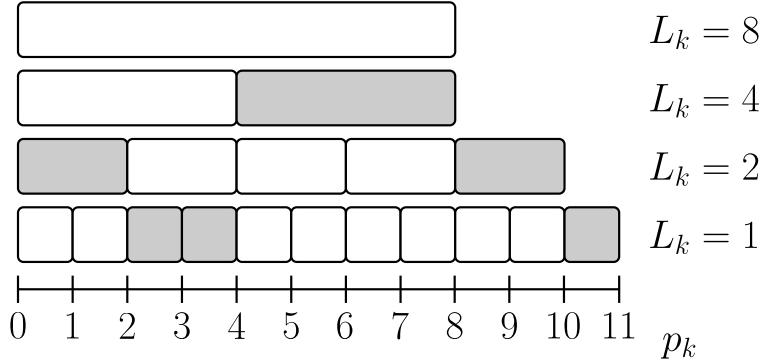


Рис. 2. Все возможные интервалы допустимых разбиений для $N = 11$; пример допустимого разбиения выделен цветом

лу (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 – $T/\tau_{\max} \leq N_t \leq T/\tau_{\min}$, а именно $312 \leq N_t \leq 2 \cdot 10^7$.

Зададим следующие краевые условия:

$$\begin{aligned} \phi(0, t) &= \phi(W, t) = 1, \quad \phi(x, 0) = \phi_0(x), \\ \phi_0(x) &= \begin{cases} 1 - 0.025 \cdot \left(1 + \cos \left[\frac{\pi}{0.08} \left(\frac{x}{W} - \frac{1}{2} \right) \right] \right) & \text{при } \frac{x}{W} \in [0.42, 0.58]; \\ 1 \text{ иначе.} \end{cases} \end{aligned} \quad (22)$$

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 задачей. Введем у нерегулярной сетки определенную структуру, в которой сконцентрируем всю сложность вопроса, избегая при этом использования сеточной интерполяции для анализа 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. 2.

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

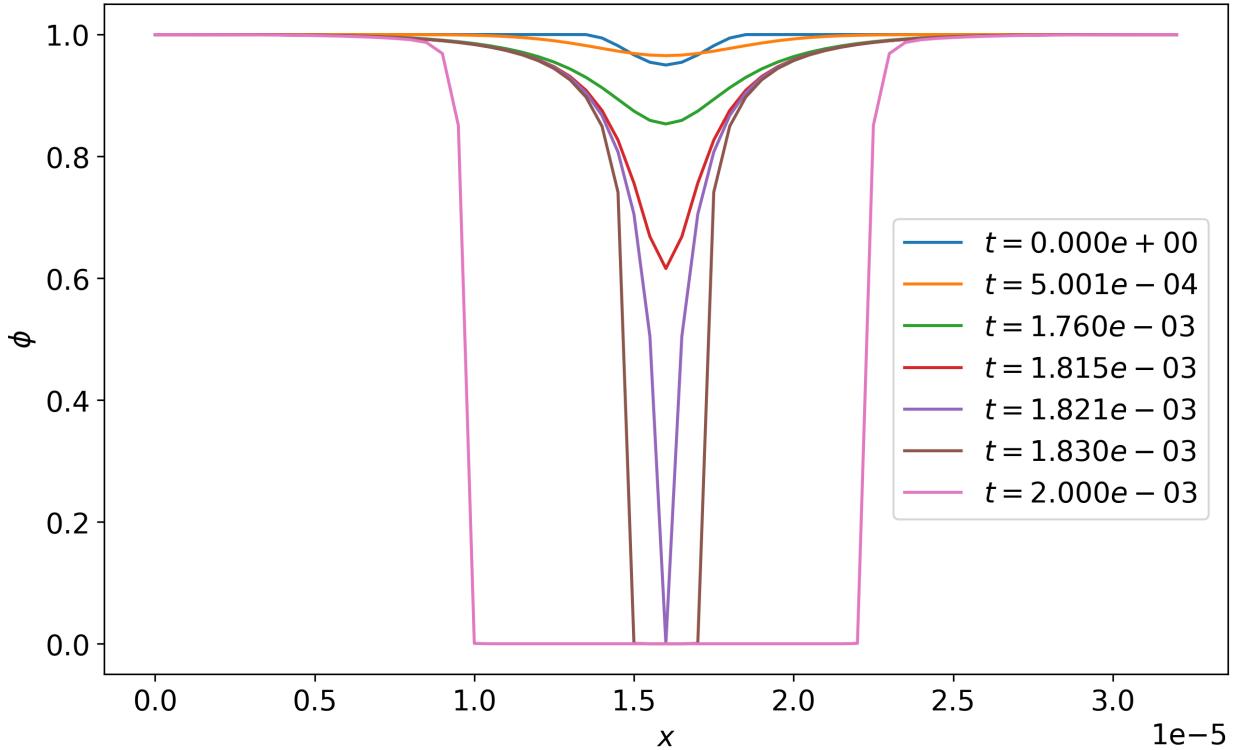


Рис. 3. Решение задачи (расчет без адаптации)

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 выражении (11) разностной схемы (10), (11), (12) на слое k будем использовать 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 $D = D_1 \cap D_2$.

6.3 Результаты расчетов

На рис. 3 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.

При исходном наборе параметров разностная задача имеет некоторый «запас» численной устойчивости, поэтому удается провести расчеты с постоянным шагом по врем-

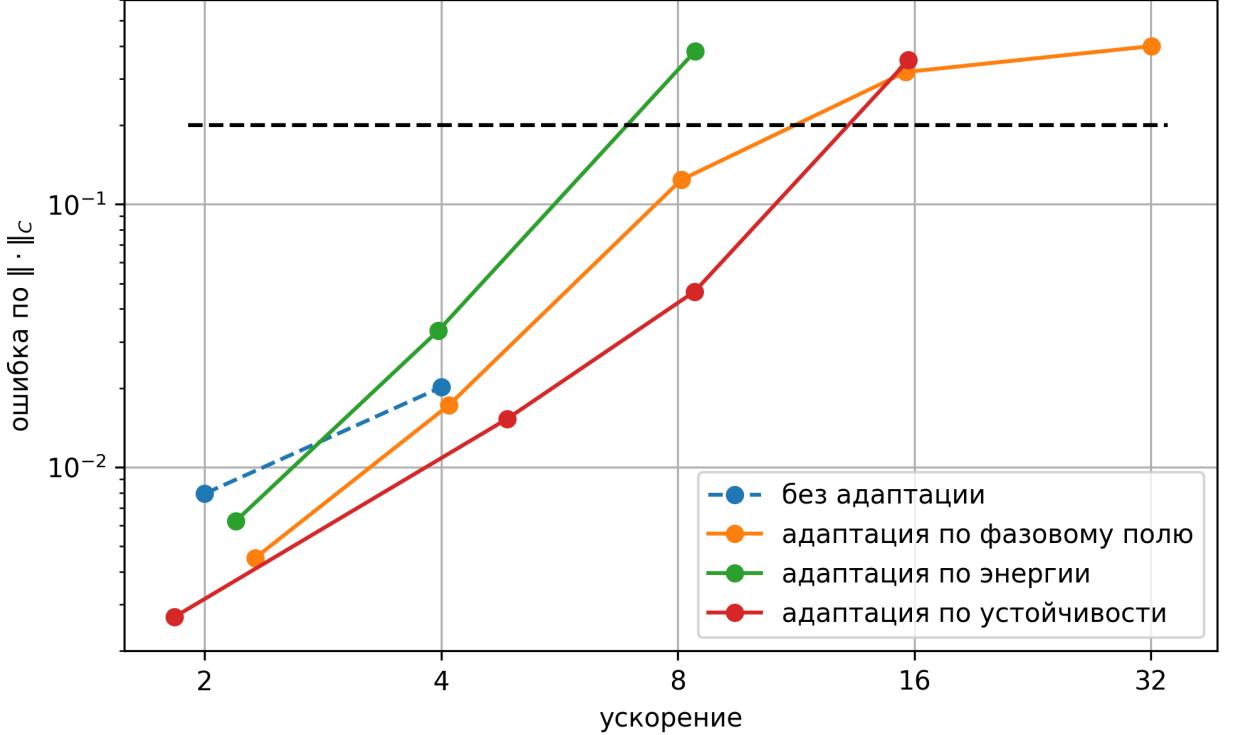


Рис. 4. Ошибка расчета при ускорении за счет шага по времени

мени $\tau = 2\tau_{\min}, 4\tau_{\min}$; дальнейшее увеличение шага без адаптации оказывается невозможным: устойчивость теряется, и значения ϕ_j^k покидают отрезок $[0, 1]$.

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). Будем подбирать константы tol_i таким образом, чтобы добиваться ускорения примерно в 2^s раз, $s \in \mathbb{N}$, для удобства сравнения с обычным увеличением шага в 2 раза. Под ускорением понимается отношение числа T/τ_{\min} временных слоев в исходном расчете к их числу N в расчете с адаптацией.

Будем сравнивать результаты ϕ_j^k расчетов с исходным расчетом ($\tau = \tau_{\min}$) по равномерной сеточной норме $\|\cdot\|_C$:

$$\left\| \phi_j^k - \tilde{\phi}_j^k \right\|_C = \max_{j,k} \left| \phi_j^k - \tilde{\phi}_j^k \right|.$$

Результаты сравнения для трех методов адаптации и для простого увеличения шага по времени изображены на рис. 4. Даже при двукратном ускорении ошибка расчета оказывается весьма существенной: порядка 10^{-2} при $\phi \in [0, 1]$. Однако в типичном решении задачи в большей части расчетной области Ω фазовое поле ϕ близко к 0 или к 1 и лишь в небольшой зоне на границе канала пробоя принимает промежуточные значения; поэтому будем считать верными решения с ошибкой вплоть до порядка 10^{-1} – положим, до 0.2 (верхняя пунктирная линия на графике). Расчет с адаптацией по энергии не превышает этого порога при ускорении до 4 раз, с адаптацией по фазовому полю и по устойчивости – при ускорении до 8 раз.

Обратим внимание, что самый крупный шаг по времени, возникавший в расчетах на рис. 4 при наибольшем ускорении, был $\tau^k = 2^{13} \cdot \tau_{\min} = 8192 \cdot 10^{-10} \approx 8.2 \cdot 10^{-7}$, не достигая ограничения $\tau_{\max} = 6.42 \cdot 10^{-6}$.

Зададим теперь $\tau_{\max} = 10^{-8}$, чтобы ограничение максимального шага стало существенным – результат оказывается намного лучше (рис. 5). Методы адаптации по фазо-

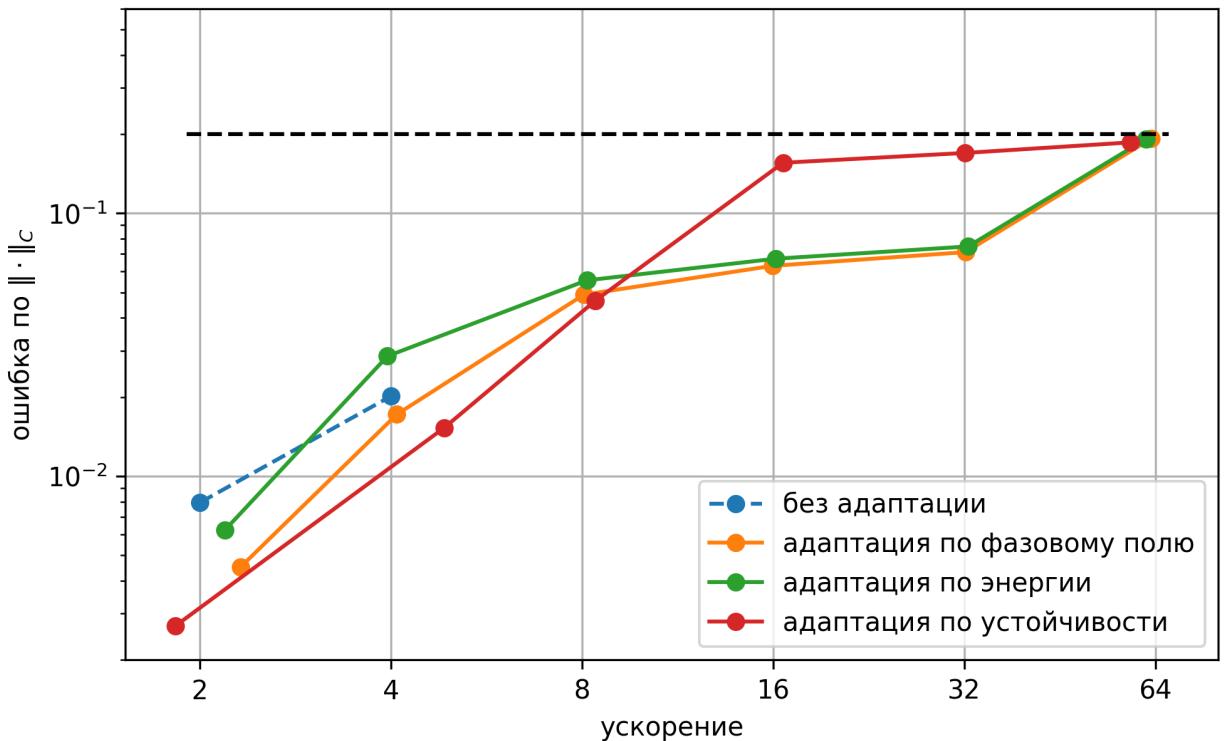


Рис. 5. Ошибка расчета при ускорении, τ_{\max} уменьшен

вому полю и по энергии позволяют уверенно ускорить расчет в 32 раза; все три метода при ошибке около 0.2 дают пиковое ускорение почти в 64 раза.

Хотя все три метода адаптации значительно улучшили показатели при уменьшении τ_{\min} , что важно для их практического применения, стоит отметить, что это свидетельствует о некоторой их неоптимальности. На взгляд авторов, в идеале укрупнение шага за счет адаптации должно происходить так, чтобы ошибка решения росла «равномерно» на всем протяжении расчета. В таком случае специальное уменьшение τ_{\max} было бы не нужно.

В ходе вычислительного эксперимента (рис. 4, 5) лучше всех себя показал первый метод адаптации (он же самый простой) – по фазовому полю. Адаптация по устойчивости несколько превосходит его в точности при малых величинах ускорения.

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 вычислительного эксперимента лучше всех себя показывает первый метод, который к тому же выделяется своей простотой.

Стоит отметить, что перечисленные методы адаптации шага по времени (особенно первые два) универсальны для моделей типа диффузной границы на основе уравнения 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.
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.
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.
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.
5. *Provatas N., Elder K.* Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering. — 10/2010. — DOI: 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.
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.
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.
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.
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.
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.
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](https://doi.org/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	1
2 Математическая модель	2
3 Разностная схема	4
3.1 Упрощающие допущения	4
3.2 Разностная схема	4
3.3 Схема с адаптивным шагом по времени	5
4 Адаптации по фазовому полю и по энергии	5
4.1 Формулировка методов	5
4.2 Связь с нормированием приращения фазового поля	6
5 Адаптация по устойчивости	7
5.1 Идея подхода	7
5.2 Детали реализации метода	8
6 Вычислительный эксперимент	11
6.1 Параметры модели, краевые условия	11
6.2 Структура сетки с переменным шагом по времени	12
6.3 Результаты расчетов	13
7 Заключение	15
Список литературы	16