

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»,  
содержащей уравнение Аллена–Кана**

Москва, 2025

*А. С. Пономарев, Е. В. Зипунова, Е. Б. Савенков*, Адаптация шага по времени в модели типа «диффузной границы», содержащей уравнение Аллена–Кана

### **Аннотация**

В работе исследованы три различных подхода к адаптации шага по времени в модели развития канала электрического пробоя типа диффузной границы. 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 алгоритмы адаптации универсальны – они могут использоваться и в других моделях типа диффузной границы с уравнением 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 including an Allen–Cahn equation

### **Abstract**

[...Annotaceaya rabotea na angliyskom...]

**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  $\phi$  близка к определенной константе; в переходной зоне (на «диффузной границе») – 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 представляет второе из них – уравнение динамики фазового поля  $\phi$  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 подходы к 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.

[...Что было проделано и где описано...]

## 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  $\phi : \Omega \times [0, +\infty)_t \rightarrow [0, 1]$ ,  $\phi(\mathbf{x}, t)$  – 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 зоне диффузной границы.

Диэлектрическая проницаемость среды  $\epsilon$  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  $\epsilon$  от  $\phi$ .

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

Постулируется следующее выражение для свободной энергии системы  $\Pi$ :

$$\Pi = \int_{\Omega} \pi d\mathbf{x},$$

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

Здесь  $\Gamma > 0$ ,  $l > 0$  – числовые параметры модели, константы.

Постулируются два уравнения, определяющие динамику системы:

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

Здесь константа  $m > 0$  – числовой параметр модели, называемый подвижностью. Говоря нестрого, согласно первому уравнению электрический потенциал  $\Phi$  распределяется так, чтобы свободная энергия была минимальной; согласно второму – фазовое поле  $\phi$  с определенной скоростью стремится к тому, чтобы свободная энергия была минимальной.

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

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\epsilon[\phi]\nabla\Phi) = 0; & (1) \\ \frac{1}{m} \frac{\partial\phi}{\partial t} = \frac{1}{2}\epsilon'(\phi)(\nabla\Phi, \nabla\Phi) + \frac{\Gamma}{l^2}f'(\phi) + \frac{1}{2}\Gamma\Delta\phi. & (2) \end{cases}$$

Здесь  $(\cdot)' \equiv (\cdot)'_\phi$ . Система состоит из двух уравнений: на  $\phi$  и  $\Phi$  соответственно; система связная.

Уравнение (2) имеет вид

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

где

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

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

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

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

В классической постановке Аллена–Кана  $F$  – двухъямный потенциал. В рассматриваемой задаче  $F$  меняет поведение в зависимости от значения  $|\nabla \Phi|$ , как было показано в работе [15]. Возможны три случая в зависимости от величины

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

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 краевые условия

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  $\phi$ :  $\phi|_{x=0} = \phi_l(t)$ ,  $\phi|_{x=W} = \phi_r(t)$ , а также  $\partial\phi/\partial\mathbf{n} = 0$  на «гранях» области  $\bar{\Omega}$ , перпендикулярных осям  $y$  и  $z$ ; следующее граничное условие на  $\Phi$ :  $\Phi|_{y=0} = \Phi^-$ ,  $\Phi|_{y=H} = \Phi^+$ , 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  $\Phi^+$  и  $\Phi^-$  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  $\epsilon_0$  считается константой.

## 3.2 Разностная схема

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

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

и используется разностная схема

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

$$j = \overline{1, N-1}, \quad k \in \mathbb{N}_0;$$

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

Схема четырехточечная явная, на регулярной сетке с временным шагом  $\tau$  и пространственным шагом  $h$ .  $N = W/h$  – целое число.  $(jh, k\tau)$  – узлы сетки,  $j = \overline{0, N}$ ,  $k \in \mathbb{N}_0$ .  $\phi_j^k$  – значение сеточной функции  $\phi$  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 пробоа, 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 медленных процессов. Таким образом, использование регулярной по времени сетки видится нерациональным.

Будем использовать переменный шаг по времени  $\tau^k$ . Уравнение (9) приобретает вид

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

Далее будет рассмотрено несколько подходов к вычислению  $\tau^k$ . Общий вид его расчета

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

то есть величина  $\tilde{\tau}^k$  (рассчитываемая по своей формуле для каждого подхода) ограничивается снизу и сверху заранее выбранными значениями  $\tau_{min}$  и  $\tau_{max}$  соответственно.

## 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

их общности:

$$\tilde{\tau}_1^k = \frac{tol_1}{\left\| \left[ \frac{\partial \phi}{\partial t} \right]_h \right\|_C}, \quad (13)$$

$$\tilde{\tau}_2^k = \frac{tol_2}{\left| \left[ \frac{d\Pi}{dt} \right]_h \right|}. \quad (14)$$

Здесь  $tol_1$  и  $tol_2$  – некоторые числовые константы, подбираемые на практике; символом  $[\cdot]_h$  обозначены разностные производные.

В формуле (13) в качестве  $[\partial\phi/\partial t]_h$  удобно использовать  $[\partial\phi/\partial t]^{k+1/2}$  из левой части разностного уравнения (8). В этом случае

$$\left\| \left[ \frac{\partial \phi}{\partial t} \right]_h^{k+1/2} \right\|_C = \max_{j=0}^N \left| \left[ \frac{\partial \phi}{\partial t} \right]_j^{k+1/2} \right|.$$

Если сделать этого не удастся (например, из-за проблем с синхронизацией параллельных вычислений), то можно использовать  $[\partial\phi/\partial t]^{k-1/2}$ , сохраненную с предыдущего шага.

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

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

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

$$\Pi^k = \frac{h\pi_0^k + h\pi_N^k}{2} + \sum_{j=1}^{N-1} h\pi_j^k.$$

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

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



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  $[d\phi]_h$ :

$$\|[d\phi]_h^{k+1/2}\|_C = \tilde{\tau}_1^k \cdot \left\| \left[ \frac{\partial \phi}{\partial t} \right]_h^{k+1/2} \right\|_C = \frac{tol_1}{\left\| \left[ \frac{\partial \phi}{\partial t} \right]_h^{k+1/2} \right\|_C} \cdot \left\| \left[ \frac{\partial \phi}{\partial t} \right]_h^{k+1/2} \right\|_C = tol_1.$$

Выходит нормирование приращения! (С оговоркой на ограничения  $\tau_{min}$  и  $\tau_{max}$ .)

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

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

Таким образом, при адаптации по энергии

$$\|[d\phi]_h\|_2 = \tilde{\tau}_2^k \cdot \left\| \left[ \frac{\partial \phi}{\partial t} \right]_h^{k+1/2} \right\|_2 \approx \frac{tol_2}{\frac{1}{m} \left\| \left[ \frac{\partial \phi}{\partial t} \right]_h^{k-1/2} \right\|_2^2} \cdot \left\| \left[ \frac{\partial \phi}{\partial t} \right]_h^{k+1/2} \right\|_2 \approx \frac{tol_2 \cdot m}{\left\| \left[ \frac{\partial \phi}{\partial t} \right]_h \right\|_2}.$$

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  $\|[d\phi]_h\|_2 \approx tol_2 \cdot \sqrt{m}$ .

## 5 Адаптация по устойчивости

### 5.1 Идея подхода

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

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

Неравенство с первым аргументом минимума эквивалентно соотношению

$$m\tau \max_{\phi \in [0,1]} |F''(\phi)| \leq C, \quad (15)$$

где  $1 \geq C \approx 1.1/2$  – константа, выбранная, во-первых, для создания «запаса» в оценке, во-вторых, для удобства формульной записи. Неравенство это, в свою очередь, получено применением для схемы спектрального признака устойчивости. Строго говоря, спектральный признак не дает достаточных условий устойчивости для нелинейных задач, однако на практике ее следует ожидать.

Основная идея подхода к адаптации, предлагаемого авторами в этом разделе, заключается в том, чтобы в неравенстве (15) заменить формальный максимум по  $\phi \in [0, 1]$  на максимум по значениям сеточной функции  $\phi_j^k$  и, естественно, взять наибольшее возможное  $\tau$ . Таким образом получается следующая формула адаптивного шага по времени:

$$\tilde{\tau}_3^k = \frac{tol_3}{m \cdot \max_{j=0}^N |F''(\phi_j^k)|}. \quad (16)$$

Этот метод будем условно называть методом адаптации по устойчивости.

Идея описанного подхода подразумевает, что для корректной работы схемы должно быть достаточно  $tol_3 = 1$ , позволяя отказаться от подбора значения. При большей желаемой точности расчета можно провести подбор  $tol_3 < 1$ .

Однако формула (16) в чистом виде имеет критический недостаток из-за вида функции  $F''(\phi)$  и нуждается в доработке, которая будет проделана в следующем подразделе.

### 5.2 Доработка метода

Будем считать, что конфигурация модели относится к случаю, представляющему наибольший практический интерес, – случаю «сильного напряжения» (см. [15]). Функция  $F(\phi)$ , заданная формулой (3), имеет на интервале

$(0, 1)$  положительную производную, а значит, строго возрастает. Так как на  $(0, 1)$  выполнено  $f' > 0$ ,  $\epsilon' < 0$ , то  $|f'| < |\epsilon'|$ . Более того, вблизи точки 0 верно  $\epsilon \approx \epsilon_0/\delta$ ,  $\delta \ll 1$ , то есть  $\epsilon(\phi)$  вместе со своими производными много больше  $f(\phi)$  с ее производными. Исходя из этого, 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 старых результатов, не слишком сложное, но полезное для глубокого понимания вопроса.

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

$$f(\phi) = 4\phi^3 - 3\phi^4, \quad f'(\phi) = 12\phi^2 - 12\phi^3, \quad f''(\phi) = 24\phi - 36\phi^2,$$

откуда

$$\epsilon'(\phi) = \epsilon'_f \cdot f' = \frac{-\epsilon_0 f'(\phi)}{(f(\phi) + \delta)^2}, \quad (17)$$

$$\epsilon''(\phi) = \epsilon''_{ff} \cdot (f')^2 + \epsilon'_f \cdot f'' = \epsilon_0 \frac{2(f'(\phi))^2 - f''(\phi)(f(\phi) + \delta)}{(f(\phi) + \delta)^3}. \quad (18)$$

Рассмотрим замену переменной  $\phi = \delta^{1/3}z$ ,  $z \in [0, \delta^{-1/3}]$ .

**Утверждение 1.**

$$\begin{aligned} \frac{\delta \epsilon(\delta^{1/3}z)}{\epsilon_0} &\rightarrow \frac{1}{4z^3 + 1} = g(z), & \delta^{4/3} \frac{\epsilon'(\delta^{1/3}z)}{\epsilon_0} &\rightarrow \frac{-12z^2}{(4z^3 + 1)^2} = g'(z), \\ \frac{\delta^{5/3} \epsilon''(\delta^{1/3}z)}{\epsilon_0} &\rightarrow \frac{24z(8z^3 - 1)}{(4z^3 + 1)^3} = g''(z) \end{aligned}$$

поточечно на луче  $[0, +\infty)_z$  при  $\delta \rightarrow +0$ .

**Утверждение 2.** В утверждении 1 сходимость на отрезке  $[0, \delta^{-1/3}]_z$  с подвижной правой границей равномерная, с порядком  $\mathcal{O}(\delta^{1/3})$ . [... Так ли это? ...]

Утверждения 1 и 2 позволяют записать приближенные представления  $\epsilon(\phi) \approx \delta^{-1}g(\delta^{-1/3}\phi)$ ,  $\epsilon'(\phi) \approx \delta^{-4/3}g'(\delta^{-1/3}\phi)$ ,  $\epsilon''(\phi) \approx \delta^{-5/3}g(\delta^{-1/3}\phi)$ . Отсюда становится совершенно ясным описанное в работе [15] убывание корней  $\epsilon''$  с порядком  $\delta^{1/3}$  и порядок  $\delta^{-5/3}$  модулей экстремумов  $\epsilon''$ .

Функция  $\epsilon(\phi)$  на отрезке  $[0, 1]$  монотонно убывает; ее производная унимодальна: вначале убывает от 0, затем возрастает до 0; вторая производная имеет три промежутка роста: убывает, затем возрастает, затем убывает.  $\epsilon''$  вблизи 0 меняется очень быстро, достигает больших по модулю значений и

всего 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

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

соответственно, что следует из равномерной сходимости  $\epsilon'' \Rightarrow g''$ .

По перечисленным выше причинам функция  $F''(\phi)$  в формуле (16) 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.

$$\begin{aligned} \frac{\delta^{5/3}\epsilon''(\delta^{1/3}t)}{\epsilon_0} &= \frac{24(t^2 - \delta^{1/3}t^3) - (24t - 36\delta^{1/3}t^2)(4t^3 - 3\delta^{1/3}t^4 + 1)}{(4t^3 - 3\delta^{1/3}t^4 + 1)^3} = \\ &= \frac{12t(16t^3 - 30\delta^{1/3}t^4 + 15\delta^{2/3}t^5 + 3t\delta^{1/3} - 2)}{(4t^3 - 3\delta^{1/3}t^4 + 1)^3}. \end{aligned}$$

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

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

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

Исправим формулу (16) в методе адаптации по устойчивости:

$$\tilde{\tau}_3^k = \frac{tol_3}{m \cdot \max_{j=0}^N G(\phi_j^k)}. \quad (19)$$

## 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 (19).

Будем использовать параметры модели, отражающие реальный физический эксперимент: см. табл. 1. Часть параметров ( $|\nabla\Phi|$ ,  $\epsilon_0$ ) являются полноценными физическими величинами, часть ( $\Gamma$ ,  $m$ ) могут быть подобраны для

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	$\Gamma$	$8.118 \cdot 10^{-10}$ Дж/м
диэлектрическая проницаемость	$\epsilon_0$	$2.301 \cdot 10^{-11}$ Кл <sup>2</sup> /(Дж · м)
подвижность	$m$	$12$ м <sup>3</sup> /(Дж · с)
характерная толщина границы	$l$	$1.5 \cdot 10^{-6}$ м
регуляризующий параметр	$\delta$	$10^{-3}$
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	$\tau_{min}$	$10^{-10}$ с
максимальный шаг по времени	$\tau_{max}$	$\leq 6.42 \cdot 10^{-6}$ с

согласования модели с результатами эксперимента. Чертой отделены параметры, которые либо происходят из связанных с диффузной границей допущений ( $l$ ,  $\delta$ ), либо описывают расчетную сетку.

Заметим, что, таким образом, число узлов сетки по пространству  $N_x = 64$ , по времени –  $312 \leq N_t \leq 2 \cdot 10^7$ .

Зададим следующие краевые условия:

$$\begin{aligned} \phi(0, t) = \phi(W, t) = 1, \quad \phi(x, 0) = \phi_0(x), \\ \phi_0(x) = \begin{cases} 1 - 0.025 \cdot \left( 1 + \cos \left[ \frac{\pi}{0.08} \left( \frac{x}{W} - \frac{1}{2} \right) \right] \right) & \text{при } \frac{x}{W} \in [0.42, 0.58]; \\ 1 & \text{иначе.} \end{cases} \end{aligned} \quad (20)$$

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

## 6.2 Структура сетки с переменным шагом по времени

Итак, на каждой итерации по времени используется своя величина шага  $\tau_k$ . 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 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  $\tau_{min}$  каждый. Над этим разбиением введем структуру «типа дерева отрезков». Говоря формально,

будем считать допустимыми лишь разбиения вида  $D = (0, p_1\tau_{min}, p_2\tau_{min}, \dots, p_{m-1}\tau_{min}, N\tau_{min})$ , где  $p_k \in \mathbb{N}_0$ ,  $k = \overline{0, m}$ ,  $p_k$  строго возрастают,  $L_k = p_k - p_{k-1} = 2^{s_k}$ ,  $s_k \in \mathbb{N}_0$ , и к тому же  $p_{k-1} : L_k$ .

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 ключе  $D$  оптимально.

При адаптации шага по времени в разностной схеме (10), (11), (12) на итерации  $k$  будем использовать не рассчитываемое  $\tau_k$  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:

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

Для сравнения по равномерной норме  $\|\cdot\|_{C,h}$  двух сеточных решений  $\phi_1$  и  $\phi_2$  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. 1 изображен результат расчета с параметрами из табл. 1 и крайними условиями (20) без адаптации шага по времени. Видно, как из малого начального возмущения фазового поля  $\phi$  постепенно растет канал электрического пробоя. В момент времени  $t \approx 1.82 \cdot 10^{-3}$  в точке  $x = W/2$  фазовое поле  $\phi$  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 всего времени эксперимента. Далее канал пробоя растет в толщину примерно с постоянной скоростью.

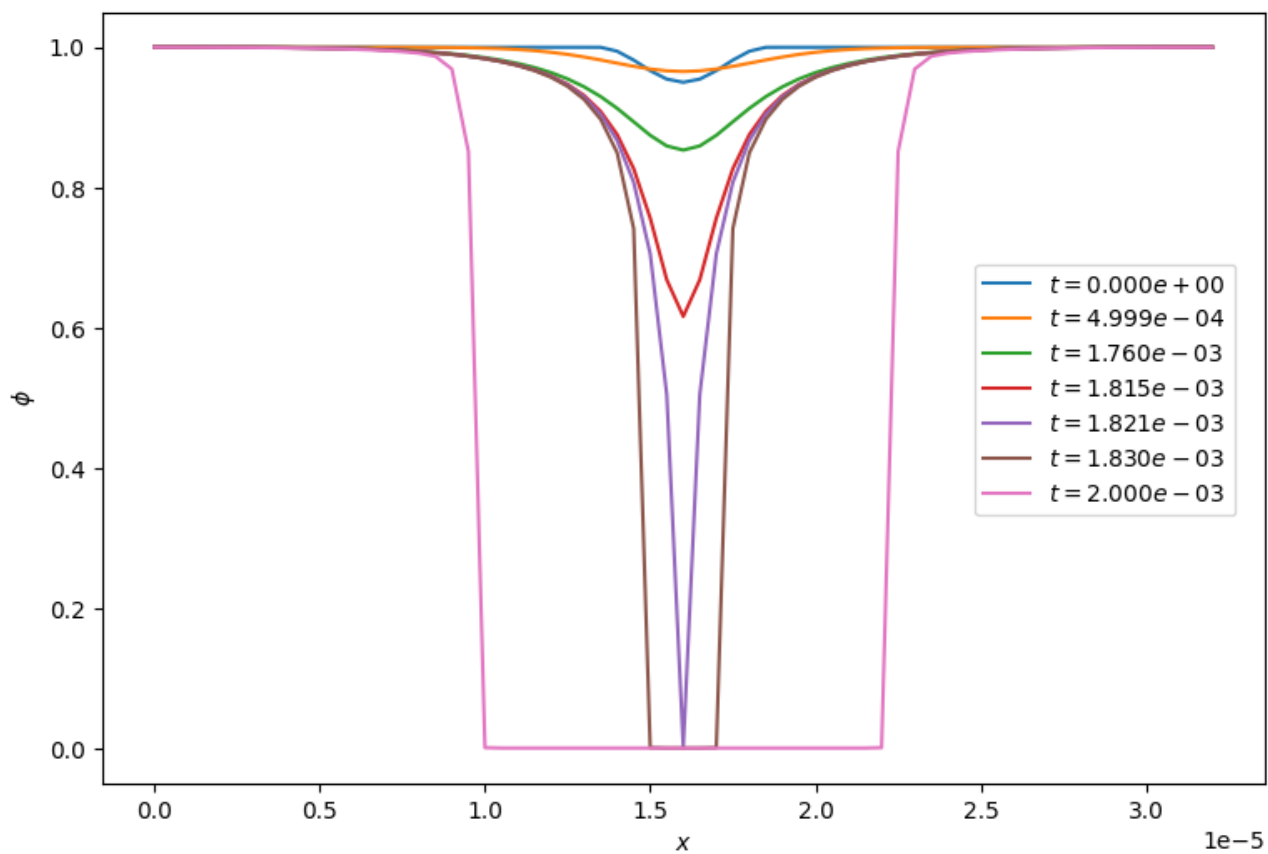


Рис. 1. Решение задачи (расчет без адаптации)

## Список литературы

1. *Lamorgese A. G., Molin D., Mauri R.* Phase Field Approach to Multiphase Flow Modeling // Milan Journal of Mathematics. — 2011. — Дек. — Т. 79, № 2. — С. 597—642. — DOI: 10.1007/s00032-011-0171-6. — URL: <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. — Т. 12, № 3. — С. 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. — Март. — Т. 79, № 3. — DOI: 10.1103/physreve.79.036702. — URL: <http://dx.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. — Дек. — Т. 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 [и др.] // Annual Review of Materials Research. — 2002. — Август. — Т. 32. — С. 163—194. — DOI: 10.1146/annurev.matsci.32.101901.155803.
7. Simulations of Phase-field Models for Crystal Growth and Phase Separation / A. Cartalade [и др.] // Procedia Materials Science. — 2014. — Дек. — Т. 7. — С. 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 [и др.] // Metallurgical and Materials Transactions A. — 2014. — Апрель. — Т. 45. — С. 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 [и др.] // Advances in Physics. — 2012. — Июль. — Т. 61. — С. 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. — Дек. — Т. 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 [и др.] // JOM. — 2007. — Июль. — Т. 59, № 7. — С. 83–90. — DOI: 10.1007/s11837-007-0095-3. — URL: <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. — Янв. — Т. 115, № 4. — С. 044101. — DOI: 10.1063/1.4862929. — URL: <https://doi.org/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>. — URL: <https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=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>. — URL: <https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=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>. — URL: <https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=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. — Т. 73, № 8. — С. 1855–1864. — DOI: <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2017.02.021>. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0898122117301001>.
17. *Zhang Z., Qiao Z.* An Adaptive Time-Stepping Strategy for the Cahn-Hilliard Equation // Communications in Computational Physics. — 2012. — Т. 11, № 4. — С. 1261–1278. — DOI: 10.4208/cicp.300810.140411s.

# Содержание

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Математическая модель</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Разностная схема</b>	<b>5</b>
3.1	Упрощающие краевые условия . . . . .	5
3.2	Разностная схема . . . . .	6
3.3	Схема с адаптивным шагом по времени . . . . .	7
<b>4</b>	<b>Адаптации по фазовому полю и по энергии</b>	<b>7</b>
4.1	Формулировка методов . . . . .	7
4.2	Связь с нормированием приращения фазового поля . . . . .	9
<b>5</b>	<b>Адаптация по устойчивости</b>	<b>10</b>
5.1	Идея подхода . . . . .	10
5.2	Доработка метода . . . . .	10
<b>6</b>	<b>Вычислительный эксперимент</b>	<b>12</b>
6.1	Параметры модели, краевые условия . . . . .	12
6.2	Структура сетки с переменным шагом по времени . . . . .	13
6.3	Результаты расчетов . . . . .	14
	<b>Список литературы</b>	<b>16</b>