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

Пономарев А. С.[1,2], Савенков Е. Б.[2], Зипунова Е. В.[2]

[1]МФТИ (НИУ)
[2]ИПМ им. М. В. Келдыша РАН

67-я Всероссийская научная конференция МФТИ

31.03.2025

Содержание

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

Физическое явление

Электрический пробой

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

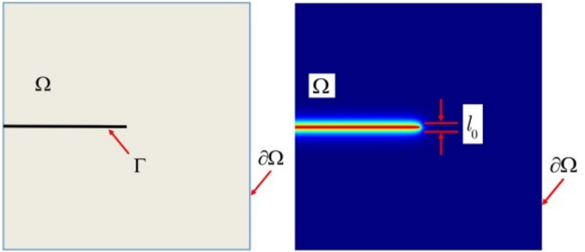
- Рассматриваем твердый диэлектрик
- Деградация диэлектрических свойств материала
- Процесс развивается в ограниченной зоне – канале пробоя
- Сложная физическая природа

Математическая модель

Модель типа диффузной границы

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

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



Содержание

1 Введение

2 Постановка задачи

3 Методы адаптации

4 Вычислительный эксперимент

5 Заключение

Уравнения динамики системы

- Уравнение электрического потенциала Φ:

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

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

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

- Плотность свободной энергии

Подробнее: [1], [2]

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

$$f(\phi) = 4\phi^3 - 3\phi^4 \qquad \epsilon(x, t) = \frac{\epsilon_0(x)}{f(\phi(x, t)) + \delta}$$

Математическая модель

Уравнения динамики системы

- Уравнение электрического потенциала Φ:

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

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

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

- Плотность свободной энергии

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

- m, Γ – параметры модели, константы

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

- $|\nabla\Phi|$ – параметр

Разностная задача

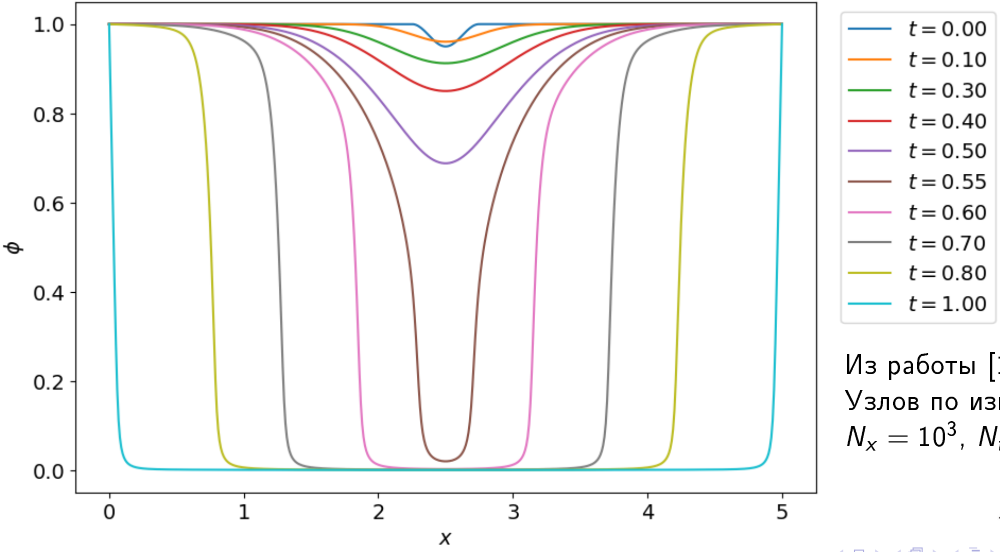
$$\frac{1}{m}\frac{\phi_i^{j+1} - \phi_i^j}{\tau} = \frac{1}{2}K_\phi^2\epsilon'(\phi_i^j) + \frac{\Gamma}{l^2}f'(\phi_i^j) + \frac{\Gamma}{2}\frac{\phi_{i+1}^j - 2\phi_i^j + \phi_{i-1}^j}{h^2}$$

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

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

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

Типичное решение



Из работы [1].

Узлов по измерениям:

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

Цель работы

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

Цель работы

Исследовать несколько подходов к адаптации расчетного шага по времени.

Содержание

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

Общий вид схемы с адаптивным шагом

- Вводится переменный шаг τ^k:

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

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

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

Методы адаптации

- По фазовому полю:

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

- По полной энергии:

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

Предложены в статьях [3] и [4].

Методы адаптации

- Условие устойчивости схемы [1]:

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

- Неравенство с первым аргументом min можно переписать в виде

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

Адаптация по устойчивости

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

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

Содержание

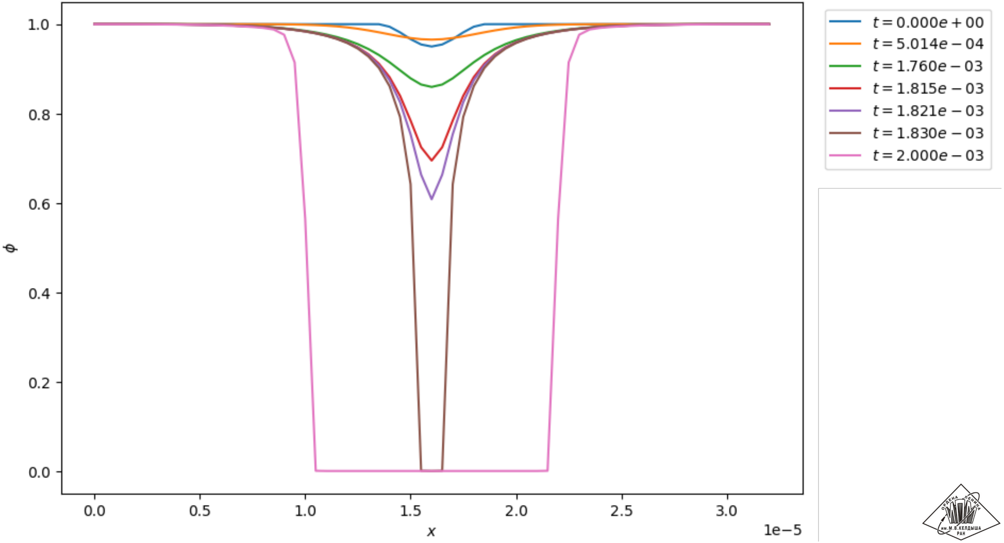
1. Введение
2. Постановка задачи
3. Методы адаптации
4. Вычислительный эксперимент
5. Заключение

Параметры модели

- Параметры, отражающие реальный физический эксперимент:

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

Поведение системы



Результаты расчетов

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

Содержание

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

Заключение

Основные результаты работы.

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

Литература

[1] А. С. Пономарев, Е. В. Зипунова и Е. Б. Савенков. “Устойчивость стационарных решений в модели развития канала электрического пробоя типа «диффузной границы»”. 2024.

[2] Е. В. Зипунова и Е. Б. Савенков. “О моделях диффузной границы для описания динамики объектов высшей коразмерности”. *Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша* (2020).

[3] Y. Li, Y. Choi и J. Kim. “Computationally efficient adaptive time step method for the Cahn–Hilliard equation”. *Computers & Mathematics with Applications* (2017).

[4] Zh. Zhang и Zh. Qiao. “An Adaptive Time-Stepping Strategy for the Cahn-Hilliard Equation”. *Communications in Computational Physics* (2012).

Спасибо за внимание!