

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

Постулируется следующее выражение для свободной энергии системы Π :

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

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

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 Φ распределяется так, чтобы свободная энергия была минимальной; согласно второму – фазовое поле ϕ 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 ϕ и Φ 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 ϕ , 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 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 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

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

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

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

Схема четырехточечная явная, на регулярной сетке с временным шагом τ и пространственным шагом h . $M = W/h$ – целое число. $(jh, k\tau)$ – узлы сетки, $j = \overline{0, M}$, $k \in \mathbb{N}_0$. ϕ_j^k – 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 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 τ^k . Уравнение (9) приобретает вид

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

Далее будет рассмотрено несколько подходов к вычислению τ^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 τ_{min} и τ_{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

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

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 Π).

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

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

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

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 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

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

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):

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

Неравенство с первым аргументом минимума эквивалентно соотношению

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

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 (16) заменить формальный максимум по $\phi \in [0, 1]$ на максимум по значениям сеточной функции ϕ_j^k и, естественно, взять наибольшее возможное τ . Таким образом получается следующая формула адаптивного шага по времени:

$$\tilde{\tau}_3^k = \frac{tol_3}{m \cdot \max_{j=0}^M |F''(\phi_j^k)|}. \quad (17)$$

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 (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 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

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

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

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

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 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: вначале убывает от 0, затем возрастает до 0; вторая производная имеет три промежутка роста: убывает, затем возрастает, затем убывает. ϵ'' 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 (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.

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

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 (17) в методе адаптации по устойчивости:

$$\tilde{\tau}_3^k = \frac{tol_3}{m \cdot \max_{j=0}^M G(\phi_j^k)}. \quad (20)$$

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 (20).

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

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}	$\leq 6.42 \cdot 10^{-6}$ с

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

Число узлов сетки по пространству $N_x \equiv M = 64$, по времени – $312 \leq N_t \leq 2 \cdot 10^7$.

При подстановке значений параметров в условие устойчивости разностной схемы (15) 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 функции $F(\phi)$ (см. формулу (16)). Оно может быть ослаблено в зависимости от значений ϕ_j^k на текущей временной итерации. Неравенство со вторым аргументом носит безусловный характер. Поэтому качестве τ_{min} взято значение $6.42 \cdot 10^{-6}$ с; $\tau_{max} = 10^{-10}$ с удовлетворяет обоим неравенствам и может рассматриваться как шаг по времени до введения адаптации.

Зададим следующие краевые условия:

$$\begin{aligned} \phi(0, t) = \phi(W, t) = 1, \quad \phi(x, 0) = \phi_0(x), \\ \phi_0(x) = \begin{cases} 1 - 0.025 \cdot \left(1 + \cos \left[\frac{\pi}{0.08} \left(\frac{x}{W} - \frac{1}{2} \right) \right] \right) & \text{при } \frac{x}{W} \in [0.42, 0.58]; \\ 1 & \text{иначе.} \end{cases} \end{aligned} \quad (21)$$

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 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 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». 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, $L_k = p_k - p_{k-1} = 2^{s_k}$, $s_k \in \mathbb{N}_0$, и к тому же $p_{k-1} \vdots L_k$.

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 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:

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

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. 1 изображен результат расчета с параметрами из табл. 1 и краевыми условиями (21) для разностной схемы (9), (10) без адаптации шага по времени. 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

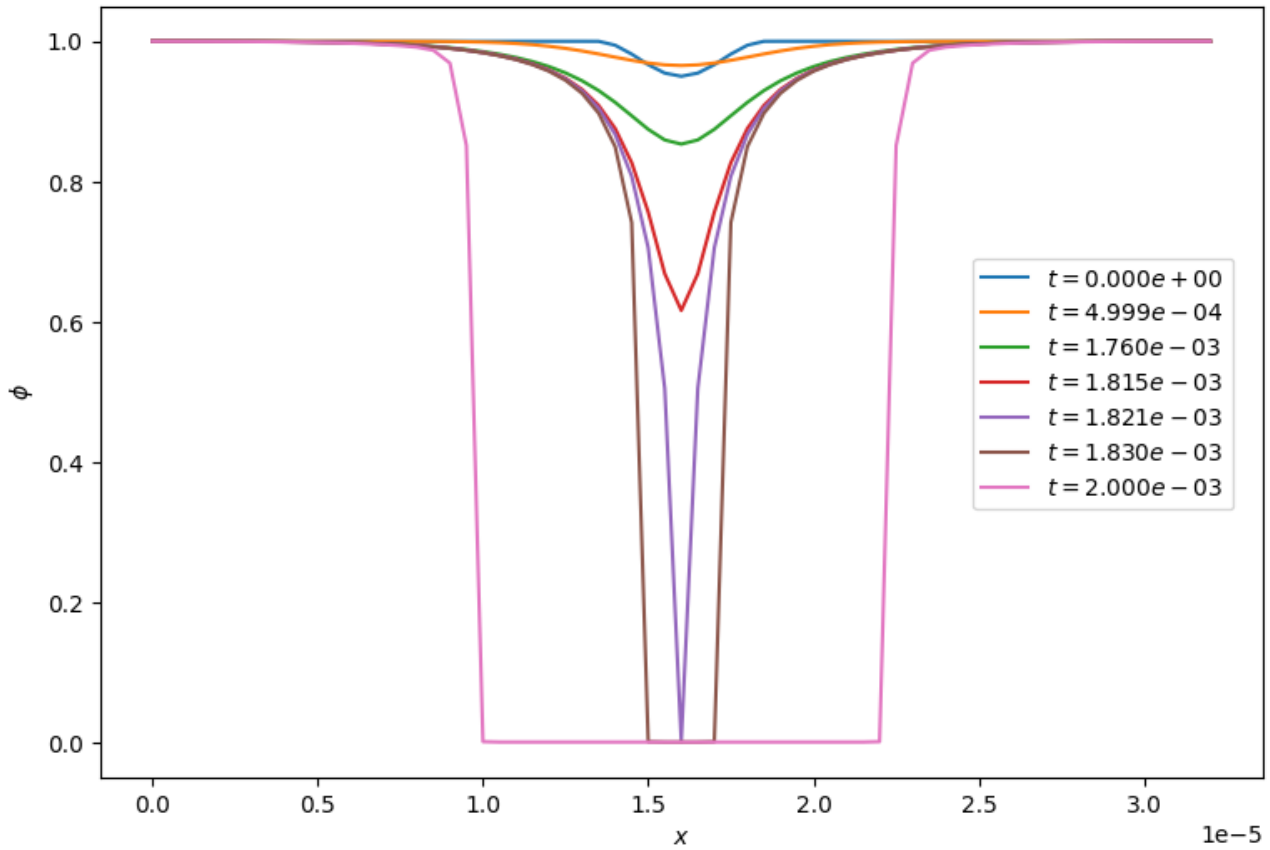


Рис. 1. Решение задачи (расчет без адаптации)

методов адаптации: по фазовому полю (13), по энергии (14), по устойчивости (20).

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 колебания по узлам сетки.

Для первых двух методов адаптации были опытным путем подобраны минимальные значения констант, при которых описанный вычислительный эксперимент завершается успешно: $tol_1 = 5 \cdot 10^{-4}$, $tol_2 = 2 \cdot 10^{-7}$. Адаптация по устойчивости дает адекватный расчет сразу, при $tol_3 = 1$, что соответствует идее метода.

Провести сравнение решений по стандартной сеточной равномерной норме $\|\cdot\|_{C,h}$ не удастся. 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.

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	$3.64 \cdot 10^{-4}$	0.3%
по энергии	107	0.68	$5.38 \cdot 10^{-4}$	0.36%
по устойчивости	1474	0.77	$1.54 \cdot 10^{-2}$	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	$1.23 \cdot 10^{-5}$	0.004%
по энергии	101	0.6	$3.27 \cdot 10^{-4}$	0.19%
по устойчивости	100	0.24	$2.23 \cdot 10^{-5}$	0.0046%

Для сравнения решений будем использовать следующую величину:

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

Формула означает, что каждому моменту времени $t_{1,k}$ первого расчета сопоставляется момент времени $t_{2,s}$ второго расчета, в который сеточное решение ψ_j^s наиболее близко к ϕ_j^k по пространственной равномерной норме.

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

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

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

[...Нужно, видимо, что-то сказать про использованные оконные фильтры...]

В табл. 2 перечислены результаты расчетов с максимальным наблюдаемым ускорением для каждого из методов адаптации. Ускорением считается уменьшение числа временных итераций после введения адаптивного шага. В качестве отклонения по ϕ рассматривается величина $\rho(\phi, \psi)$ для расчета ϕ с адаптивным шагом и эталонного расчета ψ ; в качестве отставания – $\zeta(\phi, \psi)$.

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 шага по времени по фазовому полю. Она показывает высокое ускорение и наименьшую ошибку решения. У 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. — 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

1	Введение	3
2	Математическая модель	3
3	Разностная схема	5
3.1	Упрощающие краевые условия	5
3.2	Разностная схема	6
3.3	Схема с адаптивным шагом по времени	7
4	Адаптации по фазовому полю и по энергии	7
4.1	Формулировка методов	7
4.2	Связь с нормированием приращения фазового поля	9
5	Адаптация по устойчивости	10
5.1	Идея подхода	10
5.2	Доработка метода	10
6	Вычислительный эксперимент	12
6.1	Параметры модели, краевые условия	12
6.2	Структура сетки с переменным шагом по времени	13
6.3	Результаты расчетов	14
7	Заключение	17
	Список литературы	18