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 $\phi(\boldsymbol{x}, t)$, 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 $\phi : \Omega \times [0, +\infty)_t \to \to [0, 1]$, $\phi(\boldsymbol{x}, t)$ – 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:

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

Здесь $\epsilon_0(\boldsymbol{x})$ – 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 $\Phi : \Omega \times \times [0, +\infty)_t \to \mathbb{R}$, $\Phi(\boldsymbol{x}, t)$ – потенциал электрического поля.

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

$$\Pi = \int\limits_{\Omega} \pi d\boldsymbol{x},$$

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

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

Постулируются два уравнения, определяющие динамику системы:

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

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:

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

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

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

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:

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

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, упрозающих задачу. Кратко перечислим их.

Система (1), (2) рассматривается в замкнутой области $\overline{\Omega} = [0, W]_x \times \times [0, H]_y \times I_z$, где $W, H > 0$, $I$ – некоторый отрезок. Пусть $\epsilon_0(\boldsymbol{x}) = \epsilon_0(x)$, а также задано начальное условие $\phi(\boldsymbol{x}, 0) = \phi_0(x)$, 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 $\partial\phi/\partial\boldsymbol{n} = 0$ на «гранях» области $\overline{\Omega}$, перпендикулярных осям $y$ и $z$; следующее граничное условие на $\Phi$: $\Phi|_{y=0} = \Phi^-$, $\Phi|_{y=H} = \Phi^+$, где $\Phi^-, \Phi^+ \in \mathbb{R}$, $\Phi^+ \geqslant \Phi^-$, а также $\partial\Phi/\partial\boldsymbol{n} = 0$ на «гранях» $\overline{\Omega}$, перпендикулярных осям $x$ и $z$.

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

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

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

$$\phi(x, 0) = \phi_0(x) \tag{6}$$

и граничным условием

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

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

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

и используется разностная схема

$$\begin{cases} \phi_j^{k+1} = \phi_j^k + m\tau\left(-F'(\phi_j^k) + \dfrac{\Gamma}{2}\dfrac{\phi_{j+1}^k - 2\phi_j^k + \phi_{j-1}^k}{h^2}\right), & (9) \\ \qquad\qquad j = \overline{1, N-1}, \quad k \in \mathbb{N}_0; & \\ \phi_j^0 = \phi_0(jh); \quad \phi_0^k = \phi_l(k\tau); \quad \phi_N^k = \phi_r(k\tau). & (10) \end{cases}$$

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 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 медленных процессов. Таким образом, использование регулярной по времени сетки видится нерациональным.

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

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

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

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

то есть величина $\widetilde{\tau}^k$ (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:

$$\widetilde{\tau}_1^k = \frac{tol_1}{\left\| \left[ \dfrac{\partial \phi}{\partial t} \right]_h \right\|_C}, \tag{12}$$

$$\widetilde{\tau}_2^k = \frac{tol_2}{\left| \left[ \dfrac{d\Pi}{dt} \right]_h \right|}. \tag{13}$$

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

В формуле (12) 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 удается (например, из-за проблем с синхронизацией параллельных вычислений), то можно использовать $[\partial\phi/\partial t]^{k-1/2}$, сохраненную с предыдущего шага.

В формуле (13) 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 $\Pi$), поэтому, вообще говоря, вместо взятия модуля можно написать знак $-$.

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

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

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

В формуле (13) будем использовать разностную производную энергии с предыдущего шага

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

Использование формулы (12) для расчета $\widetilde{\tau}^k$ будем условно называть адаптацией по фазовому полю, формулы (13) – 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 $[d\phi]_h$:

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

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:

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

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

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

Авторы не стали отклоняться от предложенного в работе [17] метода адаптации, однако из проделанных рассуждений получается, что из модуля производной энергии в формуле (13) 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):

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

Неравенство с первым аргументом минимума эквивалентно соотношению

$$m\tau \max_{\phi \in [0,1]} |F''(\phi)| \leqslant C, \tag{14}$$

где $1 \geqslant C \approx 1.1/2$ – 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 (14) 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:

$$\widetilde{\tau}_3^k = \frac{tol_3}{m \cdot \max\limits_{j=0}^{N} |F''(\phi_j^k)|}. \tag{15}$$

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 (15) 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

$$\epsilon'(\phi) = \epsilon'_f \cdot f' = \frac{-\epsilon_0 f'(\phi)}{(f(\phi)+\delta)^2}, \tag{16}$$

$$\epsilon''(\phi) = \epsilon''_{ff} \cdot (f')^2 + \epsilon'_f \cdot f'' = \epsilon_0 \frac{2(f'(\phi))^2 - f''(\phi)(f(\phi)+\delta)}{(f(\phi)+\delta)^3}. \tag{17}$$

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

**Утверждение 1.**

$$\frac{\delta\epsilon(\delta^{1/3}z)}{\epsilon_0} \to \frac{1}{4z^3+1} = g(z), \qquad \delta^{4/3}\frac{\epsilon'(\delta^{1/3}z)}{\epsilon_0} \to \frac{-12z^2}{(4z^3+1)^2} = g'(z),$$
$$\frac{\delta^{5/3}\epsilon''(\delta^{1/3}z)}{\epsilon_0} \to \frac{24z(8z^3-1)}{(4z^3+1)^3} = g''(z)$$

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

**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 всецело определяет поведение $F''$. $\epsilon''(\phi)$ имеет ноль $\phi_0 \sim 0.5 \cdot \delta^{1/3}$, а также локальный минимум и локальный максимум в точках

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

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

По перечисленным выше причинам функция $F''(\phi)$ в формуле (15) 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.

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

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

$$\widetilde{G}(t) = \frac{12t(16t^3 - 30\delta^{1/3}t^4 + 15\delta^{2/3}t^5 + 3t\delta^{1/3} + 2)}{(4t^3 - 3\delta^{1/3}t^4 + 1)^3};$$

$$G(\phi) = \frac{|\nabla\Phi|^2\epsilon_0}{2}\delta^{-5/3}\widetilde{G}(\delta^{-1/3}\phi) = |\nabla\Phi|^2\epsilon_0\frac{6\phi(16\phi^3 - 30\phi^4 + 15\phi^5 + 3\delta\phi + 2\delta)}{(4\phi^3 - 3\phi^4 + \delta)^3}.$$

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

Исправим формулу (15) в методе адаптации по устойчивости:

$$\widetilde{\tau}_3^k = \frac{tol_3}{m \cdot \max\limits_{j=0}^{N} G(\phi_j^k)}. \qquad (18)$$

# 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. — Авг. — 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. — Апр. — 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