СРАВНЕНИЕ МЕТОДОВ АДАПТАЦИИ ШАГА ПО ВРЕМЕНИ В МОДЕЛИ ТИПА ДИФФУЗНОЙ ГРАНИЦЫ, ВКЛЮЧАЮЩЕЙ УРАВНЕНИЕ АЛЛЕНА–КАНА

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

[1]ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, г. Москва
[2]МФТИ (НИУ), г. Долгопрудный

e.zipunova@gmail.com, ponomarev.as@phystech.edu, savenkov@keldysh.ru

В настоящее время модели типа диффузной границы составляют целый класс подходов для решения прикладных задач гидродинамики, механики деформируемого тела и теории трещин, материаловедения, солидификации и теории фазовых переходов. Предметом исследования авторов является модель подобного класса, описывающая развитие канала электрического пробоя в твердом диэлектрике, предложенная в работе [1].

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 рассматриваемой задаче значение $\phi=1$ соответствует неповрежденной среде, $\phi=0$ – полностью разрушенной. В областях однородности фазовое поле близко к постоянному, а в зоне «диффузной границы» – меняется пусть и быстро, но непрерывно.

Исследуемая модель содержит два дифференциальных уравнения в частных производных. Основной интерес представляет второе из них – уравнение динамики фазового поля типа Аллена–Кана:

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

Здесь m и Γ – числовые параметры, $\Phi(\boldsymbol{x},t)$ – электрический потенциал. Символом F обозначена определенная функция, отражающая специфику модели; будем считать F функцией от ϕ, принимающей $|\nabla\Phi|$ как параметр. Подробное описание модели см. в статье [2].

Одна из проблем при работе с моделью состоит в том, что, как правило, развитие канала пробоя происходит стремительно, но этому предшествует долгий период крайне медленных изменений в системе. Таким образом, использование в методе конечных разностей регулярной по времени расчетной сетки видится нерациональным.

Цель настоящей работы – исследовать различные подходы к адаптации расчетного шага по времени при моделировании описанной системы. 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 [3], второй – в статье [4], третий – самими авторами настоящей работы.

Введем переменный шаг по времени τ^k. Пусть каждое значение τ^k ограничивается снизу и сверху заранее выбранными τ_{min} и τ_{max} соответственно.

I подход. Шаг по времени определяется формулой

$$\tau^k = \frac{tol_1}{\|\phi_t'\|_C}, \tag{2}$$

где tol_1 – получаемый подбором коэффициент, $\|\phi_t'\|_C$ – равномерная норма производной ϕ. Рассчитать норму не составляет труда, так как ϕ_t' из левой части уравнения (1) уже используется в схеме.

II подход. Шаг по времени задается формулой

$$\tau^k = \frac{tol_2}{|\Pi_t'|}, \tag{3}$$

где tol_2 – подбираемый коэффициент, Π_t' – производная полной энергии системы П, расчет которой можно провести по известным формулам.

III подход. В работе [2] предложено условие устойчивости используемой разностной схемы, одну из частей которого можно записать в виде

$$m\tau \max_{\phi\in[0,1]}\left|F''_{\phi\phi}(\phi;\nabla\Phi)\right| \le 1. \tag{4}$$

Вместо максимума по всем $\phi \in [0,1]$ возьмем максимум лишь по значениям ϕ_j^k с текущей итерации расчета. Получим формулу

$$\tau^k = \frac{tol_3}{m \max_j G\left(\phi_j^k\right)}, \tag{5}$$

где G(ф) – определенная «удобная» функция, мажорирующая $\left|F''_{\phi\phi}\right|$. Можно отказаться от подбора коэффициента, положив $tol_3 = 1$, а можно зафиксировать некоторый $tol_3 < 1$ в зависимости от желаемой точности.

Для краткости первый подход будем называть адаптацией по фазовому полю, второй – по энергии, третий – по устойчивости.

Были проведены численные эксперименты с тремя описанными подходами с помощью программы, моделирующей упрощенный, одномерный случай задачи [2].

В расчетах использовались параметры модели, отражающие реальный физический эксперимент; интересны не конкретные значения параметров, а их нерегулярность, псевдослучайность.

Расчеты проводились для следующего типичного случая поведения системы: в начальный момент времени среда не повреждена ($\phi = 1$) везде, кроме небольшой зоны в середине образца, где $\phi \approx 0.95$. Продолжительное время система меняется очень слабо; канал пробоя постепенно растет в длину. Рост ускоряется, пока не происходит быстрого падения фазового поля до $\phi \approx 0$ в зоне роста канала пробоя. Затем канал начинает расти в толщину примерно с постоянной скоростью.

Падение фазового поля от немногим менее 1 до 0 происходит очень быстро, поэтому сравнение результатов по равномерной норме не удовлетворительно. Из-за адаптации временного шага возникает характерное «запаздывание» роста канала; даже если оно составит доли процента от всего времени опыта, равномерная норма разности решений будет порядка 1. Для сравнения решений каждому моменту времени одного расчета сопоставляется наиболее похожий момент времени другого; таким образом вычисляется более тонкая «норма разности» и величина запаздывания. Относительное запаздывание есть результат деления последнего на всю длительность опыта.

В табл. 1 перечислены результаты сравнений с исходным расчетом для трех перечисленных адаптаций при ускорении примерно в 100 раз. Видно, что лучше всего себя показал первый подход – адаптация по фазовому полю; лишь немного хуже – третий – по устойчивости.

Исследованные подходы к адаптации шага по времени универсальны для моделей типа диффузной границы с уравнением Аллена–Кана (особенно первый и второй); они могут получить дальнейшее развитие или быть прямо применены на практике.

Таблица 1: Результаты расчетов с адаптацией шага по времени при ускорении в 100 раз.

Подход	По фазовому полю	По энергии	По устойчивости
Отклонение	$1.23 \cdot 10^{-5}$	$3.27 \cdot 10^{-4}$	$2.23 \cdot 10^{-5}$
Относительное запаздывание	0.004%	0.19%	0.0046%

Список литературы:

1. Pitike K.C., Hong W. Phase-field model for dielectric breakdown in solids // Journal of Applied Physics. 2014. Vol. 115(4). P. 044101. http://doi.org/10.1063/1.4862929
2. 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. 2024. № 73. 32 с. https://doi.org/10.20948/prepr-2024-73
3. Li Y., Choi Y., Kim J. Computationally efficient adaptive time step method for the Cahn–Hilliard equation // Computers & Mathematics with Applications. 2017. Vol. 73(8). Pp. 1855–1864. https://doi.org/10.1016/j.camwa.2017.02.021
4. Zhang Z, Qiao Z. An adaptive time-stepping strategy for the Cahn–Hilliard equation // Communications in Computational Physics. 2012. Vol. 11(4). Pp. 1261–1278. https://doi.org/10.4208/cicp.300810.140411s