

УДК 51-72:517.9:538.91

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛИ ФАЗОВОГО ПОЛЯ ДЛЯ ОПИСАНИЯ РАЗВИТИЯ КАНАЛА ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПРОБОЯ В НЕОДНОРОДНОЙ СРЕДЕ

© 2024 Е. В. Зипунова^a, А. А. Кулешов^b, Е. Б. Савенков^c

*Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН,
Миусская пл., 4, г. Москва 125047, Россия*

E-mails: ^azipunova@keldysh.ru, ^bandrew_kuleshov@mail.ru, ^csavenkov@keldysh.ru

Поступила в редакцию 28.11.2023 г.; после доработки 03.02.2024 г.;
принята к публикации 03.07.2024 г.

В настоящей работе представлены результаты численного исследования математической модели типа фазового поля для развития канала электрического пробоя. Модель включает в себя группу уравнений Максвелла в квази(электро)стационарном приближении, уравнение баланса электрического заряда и уравнение Аллена–Кана для описания эволюции фазового поля. Приводится краткое описание математической модели и вычислительных алгоритмов для решения её уравнений. Рассматривается ряд постановок задач о распространении канала электрического пробоя в однородной, макроскопически и микроскопически неоднородных средах. Исследуются факторы, влияющие на характер развития канала пробоя в зависимости от постановки задачи и распределения свойств среды.

Ключевые слова: модель фазового поля, модель диффузной границы, параметр порядка, уравнение Аллена–Кана, электрический пробой, неоднородная среда.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2024.27.306

ВВЕДЕНИЕ

Электрический пробой твёрдых диэлектриков является комплексным процессом [1], который заключается в быстрой, лавинообразной деградации диэлектрических свойств материала под воздействием достаточно сильного электрического поля. Обычно процесс пробоя приводит к образованию уединённого канала пробоя, диаметр которого существенно меньше его длины. С точки зрения математического моделирования значительную сложность построения эффективной математической модели развития канала пробоя (помимо необходимости учёта целого комплекса физических процессов, сопровождающих его развитие) и необходимых для её анализа вычислительных алгоритмов представляет то, что канал пробоя является эффективно одномерным объектом, эволюционирующим в трёхмерной области, занятой средой. Среди многообразия математических моделей, предложенных для описания динамики развития канала пробоя, особое место занимает предложенная в работе [2] модель типа фазового поля или, что в рассматриваемом случае одно и то же, модель типа «диффузной границы».

Модели типа фазового поля применяются для описания динамики каких-либо «включений» в однородной среде. В роли «включений» обычно выступают зоны однородности, соответствующие дисперсной фазе многофазной системы, в роли однородной среды — дисперсионная фаза. Распределение фаз в пространстве описывается так называемым фазовым полем или параметром порядка — определённой в пространстве гладкой функцией, значение которой практически постоянно в зонах однородности и быстро, но непрерывно, меняется в пределах разделяющего их слоя — «диффузной границы». Например, в задачах гидродинамики диффузная граница отделяет две несмешивающиеся жидкости. Диффузная граница имеет

конечную толщину, которая определяется параметрами модели. Соответственно, модель имеет внутренние механизмы, обеспечивающие заданную толщину диффузной границы в ходе эволюции системы. С прикладной точки зрения, модели типа диффузной границы позволяют описать однородным по пространству и термодинамически согласованным способом динамику многофазных систем самой различной природы с прямым разрешением динамик межфазных границ.

В рассматриваемом классе математических моделей, для описания развития канала электрического пробоя, фазовое поле (или, что в рассматриваемом случае то же самое, поле параметра порядка) является скалярной функцией $\phi = \phi(\mathbf{x}, t)$, принимающей значения в интервале от 0 до 1. Каналом пробоя считается множество точек среды, в которых $\phi = 0$. Неповреждённой среде соответствует $\phi = 1$. Процесс образования и развития («роста») канала пробоя описывается как эволюция функции ϕ во времени. Повреждённое и неповреждённое состояния среды рассматриваются как две фазы, для перехода между которыми необходимо затратить определённую энергию, величина которой является параметром модели.

Предложенная в работе [2] модель построена как формальное, «механистическое» обобщение известных моделей типа диффузной границы для анализа распространения трещин в упругой среде, см. [3]. Строгий вывод модели предложен авторами настоящей работы в [4]. Вывод модели выполнен в рамках рациональной термомеханики сплошной среды и теории микросил и микронапряжений, предложенной в работах М. Гуртина (M. Gurtin), см., например, [5, 6], которая в настоящее время является основным инструментом построения и обоснования моделей типа диффузной границы. Вывод определяющих соотношений модели основан на применении процедуры Колмана—Нолла. Её суть заключается в том, что в качестве первичных соотношений модели постулируется конкретное множество параметров состояния, основные балансовые соотношения для консервативных величин и конкретный вид энтропийного неравенства. Последнее используется как ограничение на вид определяющих соотношений модели. Дальнейшее уточнение вида определяющих соотношений связано с заданием конкретного выражения для свободной энергии Гельмгольца, которое, в сущности, определяет конкретный вариант модели. В рассматриваемом случае основные допущения, используемые при задании вида свободной энергии, включают в себя следующие: переход состояния среды из повреждённой в неповреждённую фазу происходит в том случае, если значение плотности энергии электрического поля становится достаточно большим; количество энергии заданного вида, необходимое для образования участка канала пробоя единичной длины является заданным параметром среды (возможно, локальным); канал пробоя локализован в ограниченной области пространства — то есть повреждённая и неповреждённая фазы не «смешиваются» нигде за исключением узкого слоя «диффузной границы». Эти допущения минимальны в том смысле, что явно указывается лишь характер зависимости энергии системы от учитываемых физических полей. Конкретный способ их взаимодействия явно не постулируется.

Одновременно с этим известно, что электрический пробой является многообразным процессом: канал пробоя может развиваться однонаправленно или ветвиться; возможно развитие канала пробоя как между внешними границами материала, так и одновременное развитие множественных локальных пробоев, возникающих на внутренних границах раздела свойств материала или в локализованных зонах однородности.

Общие механизмы формирования этих эффектов в целом обеспечиваются допущениями модели. Однако возможность их реализации во всем многообразии вызывает вопросы. Исчерпывающий теоретический анализ уравнений модели, который бы дал на них ответ, вряд ли возможен в силу математической сложности системы уравнений, описывающих процесс. Поэтому естественным является исследование предложенной математической модели методами вычислительного эксперимента.

В настоящей работе приведены результаты численного исследования ранее предложенной авторами математической модели для описания процесса развития канала электрического

го пробоя. Цель работы — качественное исследование свойств решения в зависимости от ряда параметров модели.

Структура работы имеет следующий вид. В разделе 1 кратко описывается рассматриваемая математическая модель. В разделе 2 — соответствующие вычислительные алгоритмы. Раздел 3 посвящен непосредственно результатам численного исследования. В заключении формулируются основные выводы работы.

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В настоящем разделе опишем кратко математическую модель, используемую в настоящей работе. Вывод модели представлен в работе [4]. Рассматриваемая модель является простейшей, она учитывает эволюцию электрического поля и плотности электрического заряда в рамках квази(электро)стационарного приближения уравнений Максвелла, и непосредственно развитие канала пробоя в виде эволюционного уравнения типа Аллена—Кана для параметра порядка. Тепловые и механические эффекты не учитываются. Детали вывода модели далее не описываются, формулируется лишь конечная форма уравнений, используемая в дальнейшем.

Уравнения Максвелла в квази(электро)стационарном приближении. Уравнения Максвелла в квази(электро)стационарном приближении имеют вид

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_E, \quad \frac{\partial \rho_E}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (1)$$

Здесь \mathbf{D} — вектор электрической индукции, \mathbf{j} — вектор плотности потока электрического заряда (плотность электрического тока), ρ_E — объёмная плотность электрического заряда. При этом

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}, \quad \mathbf{j} = \sigma \mathbf{E},$$

где \mathbf{E} — вектор напряжённости электрического поля, $\epsilon > 0$ — диэлектрическая проницаемость, $\sigma > 0$ — электропроводность.

В рассматриваемой постановке распределение электрического поля является потенциальным, поэтому $\mathbf{E} = -\nabla\Phi$, где Φ — потенциал электрического поля. Отсюда $\mathbf{D} = -\epsilon\nabla\Phi$, $\mathbf{j} = -\sigma\nabla\Phi$, и уравнения (1) могут быть записаны в виде

$$\nabla \cdot (-\epsilon\nabla\Phi) = \rho_E, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho_E}{\partial t} + \nabla \cdot (-\sigma\nabla\Phi) = 0. \quad (3)$$

В том случае, если электрофизические свойства среды зависят только от точки пространства, уравнения (2), (3) представляют собой замкнутую систему уравнений относительно поля электрического потенциала $\Phi = \Phi(\mathbf{x}, t)$ и плотности электрического заряда $\rho_E = \rho_E(\mathbf{x}, t)$. В рассматриваемой модели они являются функциями параметра порядка, заданными в пространстве функции $\phi = \phi(\mathbf{x}, t)$, то есть

$$\epsilon(\mathbf{x}, t) = \epsilon^\#(\mathbf{x}, \phi(\mathbf{x}, t)), \quad \sigma(\mathbf{x}, t) = \sigma^\#(\mathbf{x}, \phi(\mathbf{x}, t)). \quad (4)$$

Здесь и далее считается, что $f^\#, f^\times, \dots$ обозначают функциональные зависимости одной и той же величины f от различного множества аргументов.

Уравнение для параметра порядка. Уравнение для параметра порядка является уравнением типа Аллена—Кана и имеет вид

$$\frac{1}{m} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \epsilon'(\phi) \frac{1}{2} \nabla\Phi \cdot \nabla\Phi + \frac{\Gamma}{l^2} f'(\phi) + \frac{\Gamma}{2} \Delta\phi + \beta\Gamma l^2 \nabla \cdot (\|\nabla\phi\|^2 \nabla\phi), \quad (5)$$

где $\phi = \phi(\mathbf{x}, t)$ — параметр порядка, $\Phi = \Phi(\mathbf{x}, t)$ — потенциал электрического поля. Штрихом обозначена производная по ϕ . Коэффициент подвижности m имеет смысл скорости изменения

фазового поля при единичной приложенной (обобщённой термодинамической) силе. При $\beta = 0$ это уравнение совпадает с предложенным в [2]. Необходимость использования $\beta > 0$ обосновывается в [4]. Величины $\Gamma = \text{const}$ и $l = \text{const}$ являются параметрами. Первый из них определяет количество энергии, необходимой для создания единицы длины канала электрического пробоя, второй — радиус размытия «диффузной» границы канала пробоя. Функция $f = f(\phi)$ считается заданной. С её помощью можно задать количество энергии, необходимое для образования области пространства, занятой повреждённой средой, см. [7]. Более подробно вывод уравнения (5) и смысл входящих в него параметров рассмотрен в [4].

Уравнение (5) по существу является уравнением баланса обобщённых термодинамических микросил и микронапряжений (в смысле теории микросил и микронапряжений М. Гуртина), описывающих эволюцию «микросостояния» среды, см. [4] в рассматриваемом случае и работы [5, 6] в целом. Параметр порядка ϕ принимает значения от 0 до 1. Значение $\phi = 1$ соответствует неповреждённой среде (неповреждённой фазе), значение $\phi = 0$ — полностью повреждённой среде (повреждённой фазе). Промежуточные значения $0 < \phi < 1$ соответствуют частично повреждённой среде. Специфика модели заключается в том, что в силу вида свободной энергии (см. ниже), зоны повреждённой среды (то есть «канал пробоя») локализованы в пространстве, см. [7]. По существу, переход среды из неповреждённого в повреждённое состояние описывается как фазовый переход, энергия этого фазового перехода связана с энергией, необходимой для образования канала пробоя единичной длины.

Определяющие соотношения. Для замыкания уравнений (2), (3) и (5) модели необходимо задать зависимость (4) электрофизических свойств среды от параметра порядка.

Сначала отметим, что для рассматриваемой модели свободная энергия Гельмгольца среды определяется как [4]

$$\psi(\mathbf{E}, \phi, \nabla\phi) = -\epsilon(\phi)\frac{1}{2}\mathbf{E}^2 + \left[\Gamma\frac{1-f(\phi)}{l^2} + \frac{1}{4}\Gamma\nabla\phi \cdot \nabla\phi + \frac{1}{4}\beta\Gamma l^2 \|\nabla\phi\|^4 \right]. \quad (6)$$

В этом соотношении ϕ — параметр порядка; $\Gamma, l = \text{const} > 0$ — параметры модели. Функция $f = f(\phi)$ — гладкая функция (функция деградации, см. ниже), которая удовлетворяет условиям $f(0) = 0, f(1) = 1, f'(0) = 0, f'(1) = 0, f'(x) \geq 0$ при $x \in (0, 1)$, см. [8]. В настоящей работе она задаётся в соответствии с выражением (10), то есть $f(\phi) = 4\phi^3 - 3\phi^4$. Первое слагаемое в (6) соответствует «обычной» энергии среды — в рассматриваемом случае это энергия электрического поля с учётом зависимости диэлектрической проницаемости от параметра порядка; второе — специфично для моделей диффузной границы.

Запишем выражение (6) в виде $\psi(\mathbf{E}, \phi, \nabla\phi) = \psi_{\text{E}}(\mathbf{E}, \phi) + \psi_{\text{br}}(\phi, \nabla\phi)$, где

$$\psi_{\text{E}}(\mathbf{E}, \phi) = -\epsilon(\phi)\frac{1}{2}\mathbf{E}^2, \quad \psi_{\text{br}}(\phi, \nabla\phi) = \Gamma\frac{1-f(\phi)}{l^2} + \frac{1}{4}\Gamma\nabla\phi \cdot \nabla\phi + \frac{1}{4}\beta\Gamma l^2 \|\nabla\phi\|^4.$$

Заметим, что при $\phi = 1, \nabla\phi = 0$, имеем $\psi_{\text{br}} = 0$ и энергия системы имеет вид $\psi(\mathbf{E}, \phi, \nabla\phi) = \psi_{\text{E}}(\mathbf{E}, \phi)$. В этом случае естественно считать, что

$$\psi(\mathbf{E}, \phi = 1) = \psi_{\text{E}}(\mathbf{E}, \phi = 1) = -\frac{1}{2}\epsilon_{\text{d}}\mathbf{E}^2, \quad (7)$$

где ϵ_{d} — диэлектрическая проницаемость неповреждённой среды.

Аналогично, при $\phi = 0$ и $\nabla\phi = 0$, то есть для полностью повреждённой среды, имеем

$$\psi_{\text{E}}(\mathbf{E}, \phi = 0) = -\frac{1}{2}\epsilon_{\text{br}}\mathbf{E}^2, \quad (8)$$

где ϵ_{br} — заданное значение диэлектрической проницаемости полностью повреждённой среды. Одновременно с этим имеем $\psi_{\text{br}} = \Gamma/l^2$, где, как уже отмечалось, Γ — энергия, необходимая для

образования единицы длины канала пробоя. Размерность Γ — «единица энергии»/«единицу длины». Такая нормировка коэффициентов в (6) отражает тот факт, что геометрически одномерный объект в рассматриваемой модели диффузной границы представляется эффективно одномерной, но трёхмерной областью диаметром $2l$. Градиентные и алгебраические слагаемые в (6) (выражение в скобках) устроены так, что области, в которых ϕ принимает промежуточные между 0 и 1 значения, локализуются в пространстве, формируя эффективно одномерные трёхмерные области, соответствующие каналу пробоя, см. [7].

В процессе образования канала пробоя происходит изменение значений параметра порядка от значения 1 (полностью неповреждённая среда) до значения 0 (полностью повреждённая среда). В ходе этого процесса, при неизменном значении электрического поля, электрическая энергия среды изменяется от значений, определяемых соотношением (7) до значений, определяемых выражением (8) за счёт изменения свойств среды, конкретно, — её диэлектрической проницаемости $\epsilon = \epsilon(\phi)$, зависящей от параметра порядка ϕ . Указанная зависимость может быть задана различным способом. В настоящей работе, следуя [2], зададим её в виде

$$\epsilon(\phi(\mathbf{x}), t) = \frac{\epsilon_d(\mathbf{x})}{g(\phi(\mathbf{x}, t)) + \delta_\epsilon}, \quad (9)$$

где $\delta_\epsilon \ll 1$ — малый параметр, $g = g(s)$ — гладкая функция, интерполирующая между 0 и 1 на отрезке $[0, 1]$. Её конкретный вид может задан по-разному, далее используется выражение

$$g(s) = 4s^3 - 3s^4. \quad (10)$$

Заметим, что для неповреждённой среды $\phi = 1$ и значение диэлектрической проницаемости $\epsilon = \epsilon_d/(1 + \delta_\epsilon) \approx \epsilon_d$. Для полностью повреждённой среды $\phi = 0$ и $\epsilon = \epsilon_{br} = \epsilon_d/\delta_\epsilon$. Такая форма зависимости (9) объясняется тем, что для идеально проводящей среды в рамках квази(электр)стационарного приближения диэлектрическую проницаемость обычно формально полагают бесконечной. Возможно использование других функций деградации, см. [8].

Аналогично должна быть задана зависимость электропроводности σ среды от фазового поля. Для полностью неповреждённой среды, которая считается диэлектриком, не проводящим электрический ток, можно считать $\sigma(\phi = 1) = \sigma_d \ll 1$, для полностью повреждённой среды электропроводность равна электропроводности канала электрического пробоя, $\sigma = \sigma_{br}$. Конкретная форма зависимости $\sigma(\phi)$ имеет вид аналогичный (9):

$$\sigma(\phi(\mathbf{x}), t) = \frac{\sigma_d(\mathbf{x})}{g(\phi(\mathbf{x}, t)) + \delta_\sigma}, \quad (11)$$

где $\delta_\sigma > 0$ — малый параметр.

Уравнения (2), (3) и (5), дополненные граничными и начальными условиями, представляют собой замкнутую систему уравнений относительно трёх неизвестных полей: фазового поля $\phi = \phi(\mathbf{x}, t)$, электрического потенциала $\Phi = \Phi(\mathbf{x}, t)$ и объёмной плотности заряда $\rho_E = \rho_E(\mathbf{x}, t)$.

Граничные и начальные условия. Рассмотрим более подробно вопрос постановки граничных условий. Пусть Ω — расчётная область — объём среды, в котором происходит развитие канала пробоя. Будем считать, что её граница $\partial\Omega = \Gamma = \Gamma_s \cup \Gamma_\Phi$, $\Gamma_\Phi \cap \Gamma_s = \emptyset$.

Будем считать, что на части Γ_s границы, с физической точки зрения, задано распределение заряда с поверхностной плотностью ρ_Γ . Тогда на этой части границы граничное условие для электрического потенциала имеет вид

$$D_n|_{\Gamma_s} = \mathbf{D} \cdot \mathbf{n}|_{\Gamma_s} = -\rho_\Gamma, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_s, \quad (12)$$

где ρ_Γ — заданная функция точки поверхности, \mathbf{n} — вектор единичной внешней нормали к границе области. На части границы Γ_Φ будем считать заданным условие Дирихле, то есть непосредственно значение электрического потенциала

$$\Phi(\mathbf{x}, t) = \Phi_\Gamma(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_\Phi.$$

Величина эквивалентного поверхностного электрического заряда на этой части границы определяется выражением (12), которое выступает в качестве определения ρ_Γ .

Граничные условия для фазового поля далее обычно соответствуют ситуации, когда на границе области среда является неповреждённой, либо значение параметра порядка постоянно вдоль нормали к границе. Эти случаи соответствуют граничным условиям Дирихле $\phi = 1$ и Неймана $\partial\phi/\partial\mathbf{n} = 0$.

Полная система уравнений модели. С учётом изложенного, полная система уравнений модели имеет вид

$$\frac{\partial\rho_E}{\partial t} + \nabla \cdot (-\sigma\nabla\Phi) = 0, \quad (13)$$

$$\nabla \cdot (-\epsilon\nabla\Phi) = \rho_E, \quad (14)$$

$$\frac{1}{m} \frac{\partial\phi}{\partial t} = \epsilon'(\phi) \frac{1}{2} \nabla\Phi \cdot \nabla\Phi + \frac{\Gamma}{l^2} f'(\phi) + \frac{\Gamma}{2} \Delta\phi + \beta\Gamma l^2 \nabla \cdot (\|\nabla\phi\|^2 \nabla\phi). \quad (15)$$

Первичными переменными модели являются $\Phi = \Phi(\mathbf{x}, t)$, $\rho_E = \rho_E(\mathbf{x}, t)$, $\phi = \phi(\mathbf{x}, t)$. Зависимости $\epsilon = \epsilon(\phi)$ и $\sigma = \sigma(\phi)$ считаются заданными в соответствии с (9) и (11). Конкретные значения скалярных параметров всех зависимостей: Γ , l , m , β в системе (14)–(15), значения ϵ_d и σ_d , параметры δ_ϵ и δ_σ в (9) и (11) — указываются ниже при описании конкретных вариантов расчётов.

2. РАЗНОСТНАЯ СХЕМА

2.1. Аппроксимации по времени

Рассмотрим сначала аппроксимации по времени электродинамической части задачи, то есть уравнений (2) и (3) или, что то же самое, уравнений (14), (13), считая распределение фазового поля заданным, например, как $\phi = 1$.

Будем рассматривать полудискретную постановку, аппроксимируя уравнения модели только по времени t . Будем считать, что задача решается на временном отрезке $t \in [0, T]$, решение определяется в моменты времени t_n , $n = 0, \bar{N}$,

$$0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_N = T.$$

Далее используем обозначения $(\Phi, \rho_E) = (\Phi(t_n), \rho_E(t_n))$, $(\hat{\Phi}, \hat{\rho}_E) = (\Phi(t_{n+1}), \rho_E(t_{n+1}))$, где зависимость от точки пространства не указывается, но предполагается.

Рассмотрим два способа построения аппроксимаций по времени. Аппроксимации по пространству могут быть выполнены одним из стандартных способов и приводятся при описании разностной схемы для решения полной задачи в последующих разделах.

Сначала рассмотрим явно-неявную схему. В этом случае сначала явным образом определяется ρ_E из уравнения

$$\frac{1}{\Delta t} (\hat{\rho}_E - \rho_E) + \nabla \cdot (-\sigma\nabla\Phi) = 0, \quad (16)$$

где $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ — шаг по времени. Далее рассчитывается потенциал электрического поля $\hat{\Phi}$ из уравнения

$$\nabla \cdot (-\epsilon\nabla\hat{\Phi}) = \hat{\rho}_E. \quad (17)$$

По существу, указанные правила перехода $(\Phi, \rho_E) \rightarrow (\hat{\Phi}, \hat{\rho}_E)$ являются одной итерацией метода Гаусса—Зейделя для решения уравнений полностью неявной схемы. В это случае переход $(\Phi, \rho_E) \rightarrow (\hat{\Phi}, \hat{\rho}_E)$ осуществляется путём последовательного решения уравнений

$$\frac{1}{\Delta t}(\hat{\rho}_E^{k+1} - \rho_E) + \nabla \cdot (-\sigma \nabla \hat{\Phi}^k) = 0, \quad \nabla \cdot (-\epsilon \nabla \hat{\Phi}^{k+1}) = \hat{\rho}_E^{k+1}$$

до сходимости. Здесь $k = 1, 2, \dots$ — номер итерации, в качестве начального приближения электрического потенциала берётся его значение решения с предыдущего временного шага, $\hat{\Phi}^1 = \Phi$.

Однако, решаемая система уравнений такова, что в итерациях между уравнениями закона сохранения заряда и закона Гаусса нет необходимости. В самом деле, неявная схема может быть записана в виде

$$\nabla \cdot (-\epsilon \nabla \hat{\Phi}) = \hat{\rho}_E, \quad \frac{1}{\Delta t}(\hat{\rho}_E - \rho_E) + \nabla \cdot (-\sigma \nabla \hat{\Phi}) = 0. \quad (18)$$

Обратим внимание, что ρ_E входит в эти уравнения линейно и ρ_E не является аргументом пространственных дифференциальных операторов. Это позволяет выразить $\hat{\rho}_E$ через $\hat{\Phi}$ из первого уравнения и подставить результат во второе. Отсюда получим следующее уравнение относительно $\hat{\Phi}$:

$$\nabla \cdot [-(\epsilon + \Delta t \sigma) \nabla \hat{\Phi}] = \rho_E. \quad (19)$$

После определения $\hat{\Phi}$ из последнего уравнения, ρ_E может быть определено из (18).

Таким образом, даже при использовании полностью неявной схемы, объём вычислений оказывается таким же, как при использовании явно-неявной схемы. Уменьшить его нельзя в силу того, что одно из уравнений модели не содержит временные производные.

В программе были реализованы обе схемы — явно-неявная вида (16), (17) и неявная вида (18), (19). Однако, при использованных в конкретных расчётах значениях физических параметров и параметров дискретизации, полностью неявная схема не показала преимуществ по сравнению с явно-неявной. По этой причине все представленные ниже расчёты были выполнены с использованием первой, явно-неявной схемы.

Для аппроксимации уравнения Аллена—Кана (15) по времени используется явная схема, причём значение $\hat{\Phi}$ потенциала электрического поля считается известным:

$$\frac{1}{m} \frac{1}{\Delta t} (\hat{\phi} - \phi) = \epsilon'(\phi) \frac{1}{2} \nabla \hat{\Phi} \cdot \nabla \hat{\Phi} + \frac{\Gamma}{l^2} f'(\phi) + \frac{\Gamma}{2} \Delta \phi + \beta \Gamma l^2 \nabla \cdot (\|\nabla \phi\|^2 \nabla \phi).$$

Здесь, как и ранее, $\phi = \phi(t)$, $\hat{\phi} = \phi(t + \Delta t)$.

2.2. Аппроксимации по пространству

В настоящем разделе приведены конечномерные аппроксимации полевых уравнений (13), (14), (15). Чтобы не загромождать изложение, сначала формально рассмотрим случай неограниченной расчётной области, в которой введена декартова ортогональная система координат $\mathcal{O}x_1x_2x_3$ с координатами x_α , $\alpha = 1, 2, 3$.

Пусть h_α , $\alpha = 1, 2, 3$ — шаги сетки по соответствующему координатному направлению. Рассмотрим равномерную сетку $\omega_{h,\alpha}$ по оси $\mathcal{O}x_\alpha$ с узлами $x_{\alpha,m} = (m - 1/2)h_\alpha$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. Будем считать, что узлы $x_{\alpha,m}$ соответствуют центрам расчётных ячеек и нумеруются целыми индексами. Также введём двойственную сетку $\omega_{h,\alpha}^*$ с узлами $x_{\alpha,m+1/2} = (x_{\alpha,m} + x_{\alpha,m+1})/2 = mh_\alpha$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. Узлы сетки $\omega_{h,\alpha}^*$ соответствуют граням ячеек и нумеруются полуцелыми индексами.

Определим необходимые в дальнейшем дискретные операторы. Пусть $H(\omega)$ — пространство сеточных функций, заданных на какой-либо из введённых сеток ω . Тогда для любой функции $v \in H(\omega_{h,\alpha})$ и $u \in H(\omega_{h,\alpha}^*)$ определим усредняющие

$$(s_\alpha v)_{m-1/2} = \frac{v_m + v_{m-1}}{2}, \quad (s_\alpha^* u)_m = \frac{u_{m+1/2} + u_{m-1/2}}{2}$$

и разностные операторы

$$(\delta_\alpha v)_{m-1/2} = \frac{v_m - v_{m-1}}{h_\alpha}, \quad (\delta_\alpha^* u)_m = \frac{u_{m+1/2} - u_{m-1/2}}{h_\alpha}, \quad (\mathring{\delta}_\alpha v)_m = \frac{v_{m+1} - v_{m-1}}{2h_\alpha}.$$

Заметим, что $\mathring{\delta}_\alpha = \delta_\alpha^* \circ s_\alpha = s_\alpha^* \circ \delta_\alpha$. Очевидно, что

$$\delta_\alpha, s_\alpha : H(\omega_{h,\alpha}) \rightarrow H(\omega_{h,\alpha}^*), \quad \delta_\alpha^*, s_\alpha^* : H(\omega_{h,\alpha}^*) \rightarrow H(\omega_{h,\alpha}).$$

Теперь рассмотрим пространственный случай. Трёхмерная сетка, соответствующая центрам расчётных ячеек определяется как $\omega_h = \omega_{h,1} \times \omega_{h,2} \times \omega_{h,3}$. Аналогично вводятся сетки $\omega_{h,\alpha}^*$, соответствующие центрам граней, ортогональных направлению $l = 1, 2, 3$. Например, $\omega_h^{*,1} = \omega_{h,1}^* \times \omega_{h,2} \times \omega_{h,3}$ и аналогично для $l = 2, 3$. Целый или полуцелый индекс по направлению x_α будем обозначать i_α .

Определённые выше дискретные операторы усреднения и дифференцирования формально могут быть продолжены на заданные в пространстве сеточные функции, если считать, что они применяются только вдоль соответствующего направления α .

В дальнейшем для обозначения значений сеточных функций в узлах сетки будем использовать безындексные обозначения. Другими словами, далее считаем, что для каждого конкретного набора индексов i_1, i_2 и i_3 , $u := u_{i_1 i_2 i_3}$, где, в зависимости от области определения сеточной функции, индексы могут принимать целые или полуцелые значения. Также используем обозначения $u_{i_\alpha+k}$ для значений сеточной функции в узле, «сдвинутом» относительно текущего на величину k в направлении i_α ; например, $u_{i_2+k} \equiv u_{i_1, i_2+k, i_3}$.

Перейдём непосредственно к описанию конечномерных аппроксимаций. Далее будем относить значения основных переменных ϕ, Φ и ρ_E к центрам расчётных ячеек — то есть к узлам основной сетки ω_h . Как и ранее, для какой-либо сеточной функции f будем использовать обозначение $f = f(t)$, $\hat{f} = f(t + \Delta t)$.

Аппроксимация уравнения (13) имеет вид

$$\frac{1}{\Delta t} (\hat{\rho}_E - \rho_E) + \sum_{\alpha=1,2,3} \delta_\alpha^* (-\sigma_{i_\alpha+1/2} \delta_\alpha \Phi) = 0, \quad (20)$$

где величины $\sigma_{i_\alpha+1/2} \in H(\omega_{h,\alpha}^*)$, то есть отнесены к граням основной сетки, ортогональным направлению x_α и определены как

$$\frac{2}{\sigma_{i_\alpha+1/2}} = \frac{1}{\sigma(\phi_{i_\alpha})} + \frac{1}{\sigma(\phi_{i_\alpha+1})}.$$

Для аппроксимации уравнения Пуассона (14) используем классическую разностную схему, которая с использованием введённых обозначений имеет вид

$$\sum_{\alpha=1,2,3} \delta_\alpha^* (-\epsilon_{i_\alpha+1/2} \delta_\alpha \hat{\Phi}) = \hat{\rho}_E, \quad \frac{2}{\epsilon_{i_\alpha+1/2}} = \frac{1}{\epsilon(\phi_{i_\alpha})} + \frac{1}{\epsilon(\phi_{i_\alpha+1})}. \quad (21)$$

Наконец, рассмотрим уравнение Аллена—Кана (15), которое предварительно запишем в виде

$$\frac{1}{m} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot \mathbf{Q} + \frac{\Gamma}{l^2} f'(\phi) + \frac{1}{2} \epsilon'_\phi (\nabla \Phi)^2, \quad (22)$$

где

$$\mathbf{Q} = [\lambda + \lambda_2 \|\nabla \phi\|^2] \nabla \phi, \quad \lambda = \frac{\Gamma}{2}, \quad \lambda_2 = \beta \Gamma l^2.$$

Для аппроксимации первого, дивергентного, слагаемого в правой части (22) имеем

$$[\nabla \cdot \mathbf{Q}]_h = \sum_{\alpha=1,2,3} \delta_\alpha^* Q_\alpha.$$

Здесь сеточные функции $Q_\alpha \in H(\omega_{h,\alpha}^*)$ отнесены к центрам граней сетки и определены как

$$Q_{l,i_\alpha+1/2} = K_{i_\alpha+1/2} \cdot (\delta_\alpha \phi)_{i_\alpha+1/2}, \quad K_{i_\alpha+1/2} = \lambda + \lambda_2 \left[s_\alpha \sum_{\beta=1,2,3} \left(\delta_\beta^\circ \phi \right)^2 \right]_{i_\alpha+1/2}.$$

В результате аппроксимации уравнения (22) имеют вид

$$\frac{1}{m} \frac{1}{\Delta t} (\hat{\phi} - \phi) = [\nabla \cdot \mathbf{Q}]_h + \frac{\Gamma}{l^2} f'(\phi) + \frac{1}{2} \epsilon'_\phi(\phi) \sum_{\alpha=1,2,3} \left(\delta_\alpha^\circ \hat{\Phi} \right)^2. \quad (23)$$

2.3. Аппроксимация граничных условий

Приведённые разностные уравнения предполагали, что аппроксимация системы уравнений (14)–(15) выполнена в неограниченной области. При расчёте задачи в ограниченной области будем считать, что она является параллелепипедом Ω , рёбра которого ориентированы вдоль координатных осей декартовой ортогональной системы координат $\mathcal{O}x_1x_2x_3$ и имеют длину L_1 , L_2 и L_3 , соответственно, $\Omega = [0, L_1] \times [0, L_2] \times [0, L_3]$.

Будем считать, что основная расчётная сетка, к узлам которой отнесены первичные переменные, представляет собой разбиение Ω на ячейки — параллелепипеды с длиной рёбер h_α , так, что $h_\alpha = L_\alpha/N_\alpha$, $\alpha = 1, 2, 3$, N_α — число ячеек вдоль оси x_α .

Как и ранее введём одномерные «основные» сетки $\omega_{h,\alpha}$ с узлами $x_{\alpha,m} = (m - 1/2)h_\alpha$, $m = \overline{1, N_\alpha}$ вдоль координатных направлений $\mathcal{O}x_\alpha$ и соответствующие двойственные сетки $\omega_{h,\alpha}^* = \{x_{\alpha,m+1/2} = mh_\alpha, m = \overline{0, N_\alpha}\}$.

Отметим, что узлы сетки $\omega_{h,\alpha}$ соответствуют центрам (одномерных) ячеек и лежат строго внутри области Ω . Узлы сетки $\omega_{h,\alpha}^*$ соответствуют граням ячеек; при $m = 0, N_\alpha$ принадлежат границам $x_\alpha = 0$ и $x_\alpha = L_\alpha$ области Ω .

Трёхмерные сетки, используемые для аппроксимации уравнений в Ω могут быть построены аналогично рассмотренному ранее случаю. Например, основная сетка, состоящая из центров расчётных ячеек, определена как $\omega_h = \omega_{h,1} \times \omega_{h,2} \times \omega_{h,3}$, а сетка центров граней, ортогональных направлению оси $\mathcal{O}x = \mathcal{O}x_1$ задаётся как $\omega_{h,\alpha}^* = \omega_{h,1} \times \omega_{h,2} \times \omega_{h,3}$.

Заметим, что участвующие в записи разностных уравнений (21), (20) и (23) дискретные операторы имеют область определения (шаблон), выходящий за границы области. Поэтому будем считать, что к границе области примыкают слои фиктивных ячеек, которым сопоставлены индексы со значениями меньшими $1/2$ или большими, чем $N_\alpha + 1/2$. Уравнения, которые определяют значения решения в них, соответствуют аппроксимациям граничных условий на границе области.

Так, например, если на границе области, ортогональной координатному направлению $\mathcal{O}x_\alpha$ для какой-либо функции u задано граничное условия типа Дирихле вида $u = g$, где g — заданная функция, то соответствующее уравнение имеет вид $(s_\alpha u)_{i_\alpha+1/2} = g$ при $i_\alpha = 0$ или $i_\alpha = N_\alpha$. Аналогично, для граничного условия Неймана вида $-\epsilon \partial u / \partial \mathbf{n} = g$, соответствующее дискретное уравнение имеет вид $\gamma \epsilon_{i_\alpha+1/2} (\delta_\alpha u)_{i_\alpha+1/2} = g$, где $\gamma_\alpha = \mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{n}$, \mathbf{e}_α — единичный орт оси $\mathcal{O}x_\alpha$, \mathbf{n} — вектор единичной внешней нормали к границе области, $i_\alpha = 0$ или $i_\alpha = N_\alpha$.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

В настоящем разделе представлены результаты моделирования с использованием описанной выше модели. Рассматриваются тесты для однородной, макроскопически неоднородной и микроскопически неоднородной среды. Основная цель моделирования — исследование вариативности в развитии сценариев канала пробоя и качественное исследование возможностей модели. В связи с этим представленные расчёты являются пространственно двумерными, а параметры сред имеют модельные значения.

3.1. Однородная среда

В настоящем разделе рассматривается ряд постановок, демонстрирующих особенности развития канала пробоя в однородной среде. Рассматриваются две серии расчётов. В первой демонстрируется зависимость характера развития канала пробоя от начального распределения повреждённого материала. Вторая серия расчётов более детально демонстрирует особенности развития канала пробоя, в частности, характер распределения электрического заряда.

Во всех случаях задача рассматривается в пространственно двумерной постановке. Расчётная область является квадратом $\Omega = [0, A] \times [0, A]$ со стороной $A = 100$. Расчётная сетка имеет $N_x = N_y = N = 200$ ячеек вдоль каждой стороны квадрата, что соответствует шагу сетки $h = 0.5$. Параметр l , задающий радиус диффузного канала пробоя, равен 2 (то есть, 4-м шагам сетки), коэффициент подвижности $m = 10^{-3}$, коэффициент перед p -лапласианом $\beta = 0.5$.

На верхней и нижней границе Ω заданы постоянные значения электрического потенциала $\Phi^+ = 80$ и $\Phi^- = 0$, соответственно. На боковых границах расчётной области задавались однородные граничные условия Неймана.

Значение фазового поля на боковых границах Ω задавалось постоянным, соответствующим неповреждённой среде, $\phi = 1$. На верхней и нижней границах Ω для фазового поля задавались однородные граничные условия Неймана.

Материал, в котором происходит пробой, является однородным. Его диэлектрическая проницаемость в неповреждённом состоянии $\epsilon_d = 4$. Электропроводность неповреждённой среды $\sigma_d = 10^{-4}$, коэффициент $\delta_\sigma = 10^{-3}$. Соответственно электропроводность полностью повреждённого материала $\sigma_d/\delta_\sigma = 0.1$. Удельная энергия каналообразования $\Gamma = 1.6928$.

Шаг по времени задавался как $\Delta t = 10^{-3} \cdot \Delta t_{\max}$, где $\Delta t_{\max} = 2 \cdot h^2/(\Gamma m)$.

Объёмная плотность заряда в начальный момент времени $\rho_E = 0$.

Не указанные выше параметры модели, конкретно, значение параметра δ_ϵ и начальное распределение параметра порядка зависят от варианта расчёта и приведены ниже.

Серия расчётов 1. В описанных ниже в настоящем разделе расчётах значение параметра $\delta_\epsilon = 10^{-3}$. Соответственно, диэлектрическая проницаемость полностью повреждённого материала $\epsilon_d/\delta_\epsilon = 4 \cdot 10^3$.

Распределение фазового поля соответствует полностью неповреждённой среде всюду в расчётной области, за исключением столбика ячеек, примыкающих к верхней границе области в её центре — в этих ячейках сетки $\phi = 0$. Рассматривается три варианта длины начальной зоны поврежденности: $L_1 = 5$ («короткая»), $L_2 = 11$ («средняя») и $L_3 = 15$ («длинная»). Для каждого варианта задания начального условия расчёт продолжался до тех пор, пока канал пробоя не «замыкался» на нижнюю границу области.

Результаты моделирования приведены на рис. 1. Первое, что обращает на себя внимание, это ветвление канала пробоя. Факт ветвления не задавался априорно и является следствием решения соответствующего уравнения Аллена—Кана. Вторым важным моментом является существенно различная скорость развития канала пробоя и, как следствие, время, необходимое для его достижения нижней границы области. Это можно объяснить следующим образом. Основной «движущей силой», вызывающей рост канала пробоя, является напряжённость электрического поля в окрестности кончике канала пробоя. Обратим внимание на то, что диэлектрическая проницаемость внутри повреждённой зоны сравнительно велика (она в $1/\delta_\epsilon$ раз

больше, чем диэлектрическая проницаемость неповреждённой зоны). По этой причине градиент электрического потенциала вдоль канала пробоя в $\sim \delta_\epsilon$ раз меньше, чем в его окрестности; потенциал поля практически постоянен вдоль осевой линии канала пробоя, см. рис. 3. По этой причине напряжённость электрического поля в окрестности кончика более длинной начальной зоны поврежденности больше, чем в окрестности более короткой. Это вызывает более быстрый рост более длинного канала, особенно на начальной стадии развития процесса.

Обратим также внимание, что в случае короткой начальной зоны поврежденности наблюдается эффект вторичного (повторного) ветвления канала пробоя. При этом после второго ветвления развивается и «доходит» до нижней границы области лишь внешние «ветви».

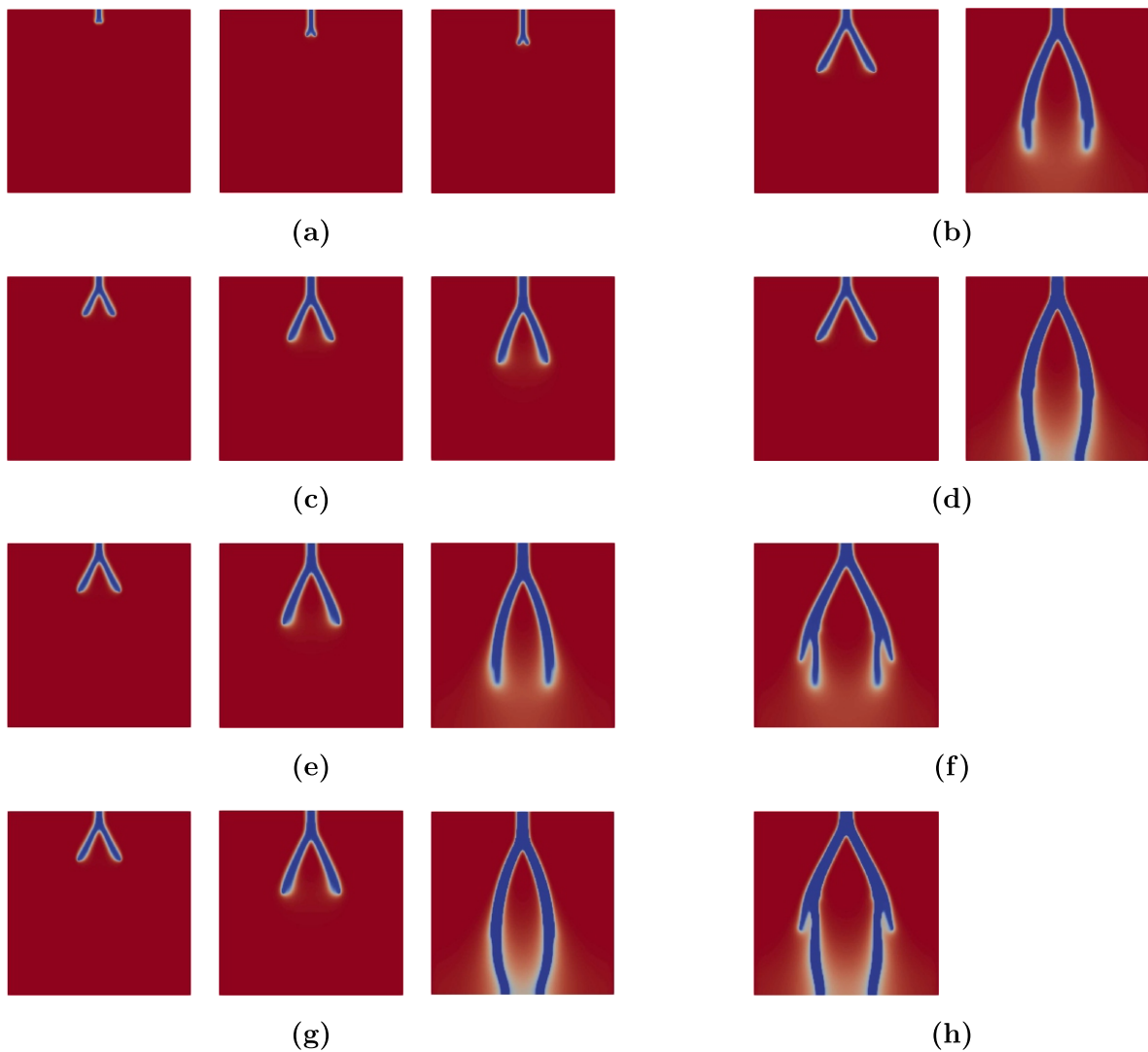


Рис. 1. Результаты расчётов для начальной зоны поврежденности различной длины. Левый столбец «короткая», средний — «средняя», правый — «длинная» для (a) $t = 400$, (c) $t = 2000$, (e) $t = 2440$, (g) $t = 2480$; Левый столбец «короткая», правый — «средняя» для (b) $t = 3000$, (d) $t = 3040$, (f) $t = 4240$, (h) $t = 4280$

Серия расчётов 2. В этом расчёте исследуется динамики развития канала пробоя с учётом перераспределения заряда. Постановка в целом сходна с рассмотренной выше за исключением того, что параметр $\delta_\epsilon = 0.1$. Соответственно диэлектрическая проницаемость полностью повреждённого материала $\epsilon_d/\delta_\epsilon = 40$.

В начальный момент времени фазовое поле равняется единице всюду, за исключением

столбика ячеек, примыкающих к верхней границе области в её центре — в этих ячейках сетки $\phi = 0$. Длина начальной зоны поврежденности в рассматриваемой постановке $L_2 = 11$. Расчёт продолжался до тех пор, пока канал пробоя не «замыкался» на нижнюю границу области.

Результаты моделирования приведены на рис. 2. Можно заметить, что в отличие от предыдущей постановки (рис. 1) в текущей постановке ветвления канала пробоя не происходит. Это связано с увеличением значения δ_ϵ , которое для предыдущей серии расчётов (рис. 1) имело значение $\delta_\epsilon = 10^{-3}$, а для текущего расчёта — $\delta_\epsilon = 0.1$. Другими словами, контраст значений диэлектрической проницаемости для повреждённой и неповреждённой среды здесь в 100 раз меньше, чем в предыдущей постановке. Это приводит к уменьшения максимального значения напряжённости в окрестности кончика канала пробоя при равной длине канала.

Эволюция фазового поля приведена на рис. 2 вверху. Соответствующее распределение электрического заряда — на том же рисунке внизу. Можно заметить, что заряд проникает во всю повреждённую область. В основном он распределён в нижней части канала, наиболее приближенной к нижней границе расчётной области, что соответствует общим представлениям о распределении электрического заряда в помещённом в электрическое поле проводнике (которым, с физической точки зрения, является канал пробоя). Детальный анализ результатов расчётов показывает, что внутри повреждённой области, образовавшейся в ходе развития канала пробоя, значение фазового поля близко к 0, но не достигает своего минимального значения и остаётся малой, но положительной величиной. Следовательно, в этой области электрическая проводимость не достигает своего максимального значения. Поэтому проводимость вновь образовавшейся части канала пробоя меньше, чем изначально повреждённой зоны, в которой $\phi \equiv 0$. По этой причине в окрестности кончика начальной зоны поврежденности можно наблюдать «запирание» электрического заряда. Расчёт на большие времена показывает, что при уменьшении параметра m с течением времени этот заряд релаксирует — чем медленнее развивается канал пробоя, тем больше времени есть у заряда, чтобы перераспределиться.

Наконец, на рис. 3 показано одномерное распределение фазового поля, диэлектрической проницаемости, электрической проводимости и электрического потенциала вдоль оси канала пробоя. Прежде всего обратим внимание на распределение фазового поля (синяя линия на рис. 3 слева). Видно, что внутри канала пробоя (отрезок оси $O\xi$ от 0 и до $\xi_2 \approx 70$), его значение близко к 0 (среда полностью повреждена) и равна нулю в области, соответствующей начальному распределению канала пробоя (от точки 0 до точки $\xi_1 \approx 10$, см. рисунок). Во вновь образовавшейся части канала пробоя (от ξ_1 до ξ_2) значение фазового поля немного больше нуля (среда повреждена практически полностью, но не до конца). Это связано с тем, что вблизи полностью повреждённого состояния, при $\phi \rightarrow 0$, скорость изменения фазового поля существенно падает в силу того, что в соответствии с (9) и (10) справедливо $\epsilon'(\phi) \rightarrow 0$ — в результате первый член в правой части (15) сравнительно мал. Поэтому значение пространственной производной ϕ в окрестности точки ξ_1 имеет скачок, что приводит к соответствующему скачку электропроводности и, как следствие, появлению «избыточного» заряда в ξ_1 (чёрная и красная линия на рис. 3 слева). Вместе с тем в соответствии с допущениями модели, значение диэлектрической проницаемости в канале пробоя сравнительно велико (фиолетовая линия на рис. 3 справа), а градиент электрического поля в области канала пробоя существенно меньше, чем в неповреждённой части расчётной области. В пределе бесконечно большого значения ϵ_{br} диэлектрической проницаемости повреждённой среды, значение электрического поля в интервале от 0 до ξ_2 будет стремиться к нулю. Эти результаты прежде всего указывают направление возможного уточнения модели: для того, чтобы избежать эффекта «запирания» заряда в окрестности точки ξ_1 , необходима модификация зависимости (2).

3.2. Макроскопически неоднородная среда

В настоящем разделе приведены примеры расчётов, демонстрирующих качественное поведение процесса развития канала электрического пробоя в рамках описанной математической

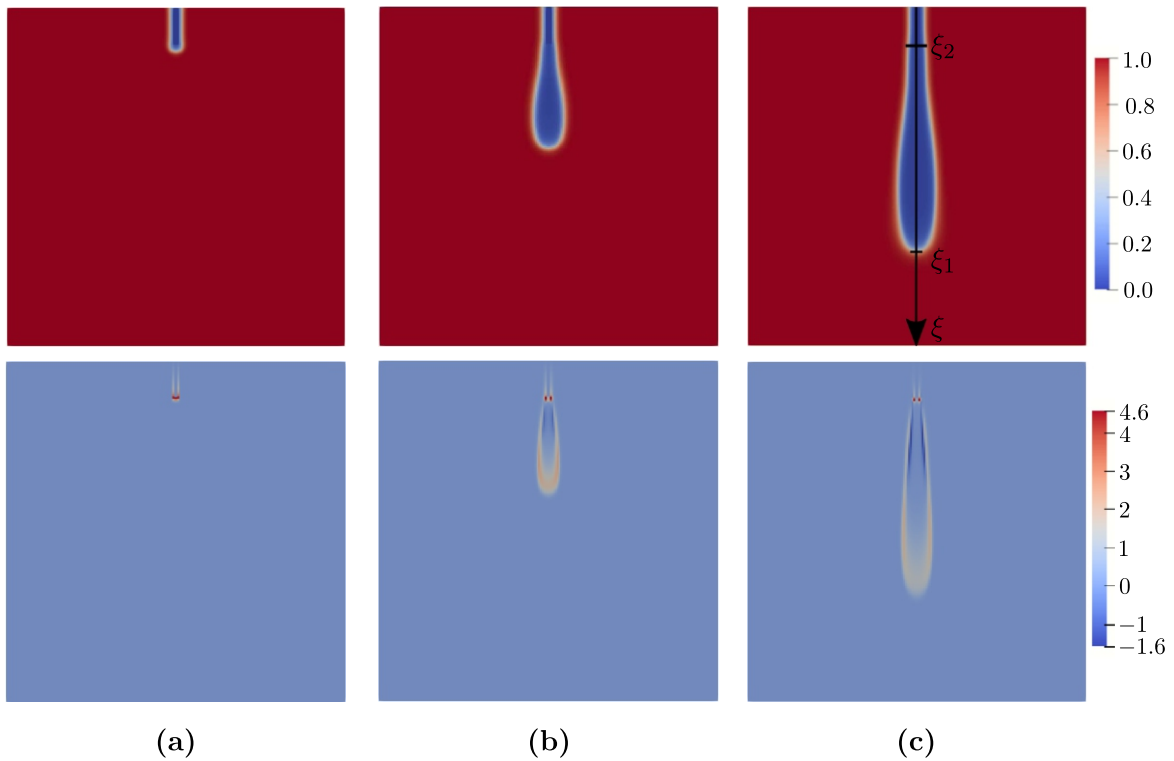


Рис. 2. Эволюция канала пробоя при $\delta_\epsilon = 0.1$ для (a) $t = 400$, (b) $t = 4000$, (c) $t = 5680$.
Вверху — распределение фазового поля ϕ , внизу — распределение заряда ρ_E

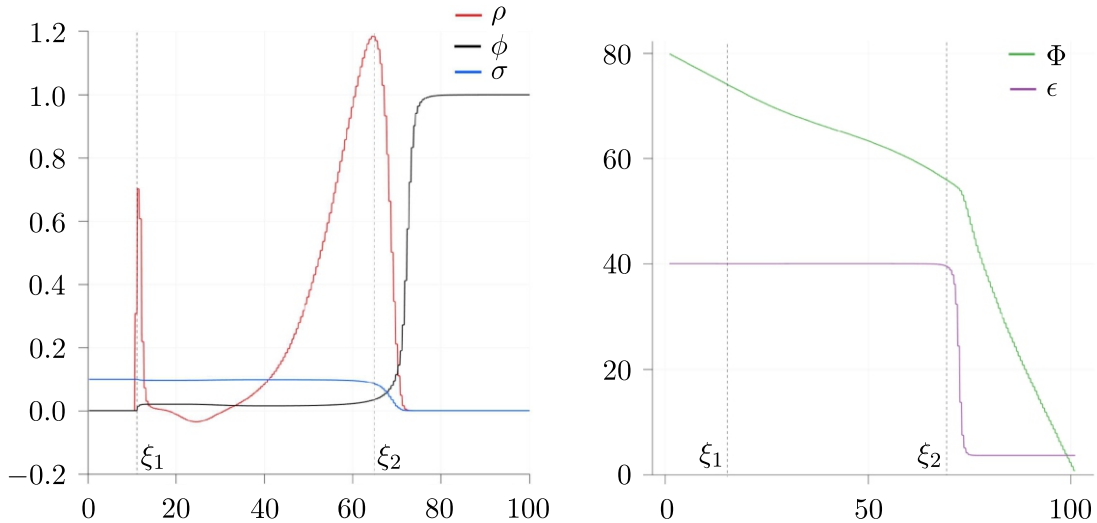


Рис. 3. Распределение полей ρ , ϕ , σ , Φ , ϵ вдоль оси симметрии образца (вариант расчёта с $\delta_\epsilon = 0.1$ при $t = 5680$ соответствует рис. 2(c)). Абсцисса направлена от верхней границы области к нижней — вдоль направления роста канала пробоя

модели без учёта динамики электрического заряда.

Физическая постановка рассматриваемой задачи имеет следующий вид. Рассматривается двумерная область, моделирующая среду между обкладками конденсатора, к которым приложена заданная разность потенциалов. Среда является неоднородной и состоит из однородного материала (вмещающей среды, «матрицы»), внутри размещены включения, обладающие различными термодинамическими свойствами: диэлектрической проницаемостью ϵ_d для непо-

вреджённому состоянию материала и удельной энергией каналообразования Γ .

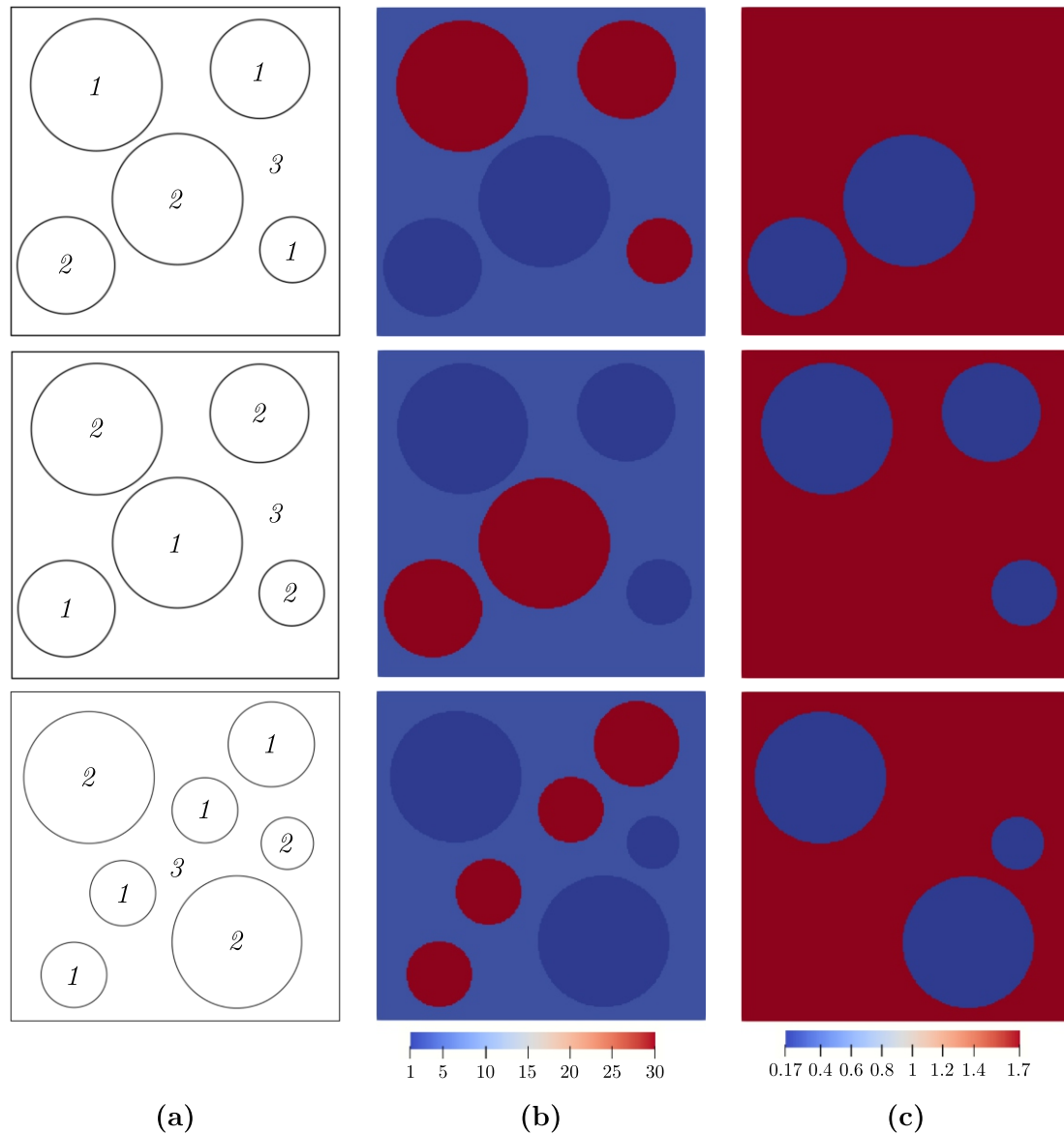


Рис. 4. Варианты по строкам 1, 2 и 3: (а) — геометрия включений, (б) — распределение ϵ_d , (с) — распределение Γ

Рассматриваются два типа материала включений, которые далее условно называются «воздухом» и «металлом». Термодинамические свойства включений в зависимости от образующего их материала представлены в таблице.

Не приведённые в ней параметры модели заданы как $\delta_\epsilon = 10^{-3}$, $l = 2$, коэффициент подвижности $m = 10^{-3}$, коэффициент перед p -лапласианом $\beta = 0.5$.

Во всех случаях расчётная область является квадратом $\Omega = [0, A] \times [0, A]$ со стороной $A = 100$. Расчётная сетка имеет $N_x = N_y = N = 200$ ячеек вдоль каждой стороны квадрата, что соответствует шагу сетки $h = 0.5$. Соответственно, параметр l , задающий радиус диффузного канала пробоя, равен 4-м шагам сетки. Временной шаг задавался как $\Delta t = 10^{-3} \cdot \Delta t_{\max}$, где $\Delta t_{\max} = 2 \cdot h^2 / (\Gamma m)$.

На верхней и нижней границе Ω заданы постоянные значения электрического потенциала $\Phi^+ = 80$ и $\Phi^- = 0$, соответственно. На вертикальных границах расчётной области задава-

Параметры материалов в неоднородной среде

Материал	ϵ_d	Γ
«матрица»	3	1.6928
«металл»	$3 \cdot 10^1$	1.6928
«воздух»	1	$1.628 \cdot 10^{-1}$

лись однородные граничные условия Неймана.

Значение фазового поля на боковых границах Ω задавалось постоянным, соответствующим неповреждённой среде, $\phi = 1$. На верхней и нижней границах Ω для фазового поля задавались однородные граничные условия Неймана. Электропроводность неповреждённой среды $\sigma_d = 0$, начальное распределение заряда $\rho_E(t = 0) \equiv 0$. Начальные условия для фазового поля зависят от варианта расчёта и рассмотрены ниже.

Рассмотрено три варианта расчёта, которые отличаются геометрической структурой среды, то есть числом включений, способом их размещения и их размерами, см. рис. 3, строки 1, 2 и 3 соответственно.

Вариант 1. Расчёт соответствует геометрической модели среды, представленной на рис. 4 строка 1. Значения параметров материалов приведены в таблице.

Начальные условия для параметра порядка имитируют наличие в расчётной области «зародыша» канала пробоя, примыкающего к центру её верхней границы. Изначально повреждённая зона имеет вид столбика ячеек длиной 10 шагов сетки. В этих ячейках значения фазового поля задавались как $\phi = 0$, во всех остальных ячейках расчётной области $\phi = 1 - 10^{-3}$.

Результаты моделирования в разные моменты времени приведены на рис. 5(а). Видно, что с течением времени начинается, во-первых, развитие изначально заданного канала пробоя, и, во-вторых, поверхностного пробоя на границе между областями, заполненными «воздухом» и «матрицей» (отметим, что именно для этой пары из находящихся в контакте материалов скачок диэлектрической проницаемости имеет наибольшее значение). Соответствующие распределения электрического потенциала и параметра порядка приведены на рис. 5(а) при $t = 400$.

Далее, возникновение зон повреждённого материала приводит к существенному увеличению значения диэлектрической проницаемости в них (в рассматриваемом случае — в 1000 раз по сравнению с локальным неповреждённым значением). В результате появляются локализованные области со сравнительно большой напряжённостью электрического поля. Это, в свою очередь, приводит к дальнейшему развитию зон повреждённого материала и образованию поверхностных пробоев на границе между «матрицей» и «металлическими» включениями. Одновременно с этим в среде развиваются частичные (то есть развивающиеся внутри объёма материала, а не с его границы) пробои. Эти эффекты можно наблюдать на рис. 5(а) при $t = 600$.

Наконец, развитие этих процессов приводит к «замыканию» горизонтальных границ области связной областью, занятой повреждённой средой, см. рис. 5(а) при $t = 720$. С этого момента времени можно считать, что среда между обкладками полностью деградировала, то есть потеряла свои электроизоляционные свойства.

Вариант 2. Расчёт соответствует геометрической модели среды, представленной на рис. 4, строка 2. Значения параметров материалов приведены в таблице. В рассматриваемом варианте расчёта включения расположены таким же образом, как и в предыдущем — однако всюду свойства материалов включений переставлены местами (если в предыдущем расчёте включение было заполнено «воздухом», то теперь оно заполнено «металлом» — и наоборот). Начальные условия для фазового поля задавались так же, как в варианте 1.

В этом случае картина развития области деградации свойств среды качественно меняется. На начальном этапе развития процесса происходит прямолинейное развитие начальной зоны поврежденности в матрице, см. рис. 5(б) при $t = 400$. В дальнейшем развитие пробоя проходит

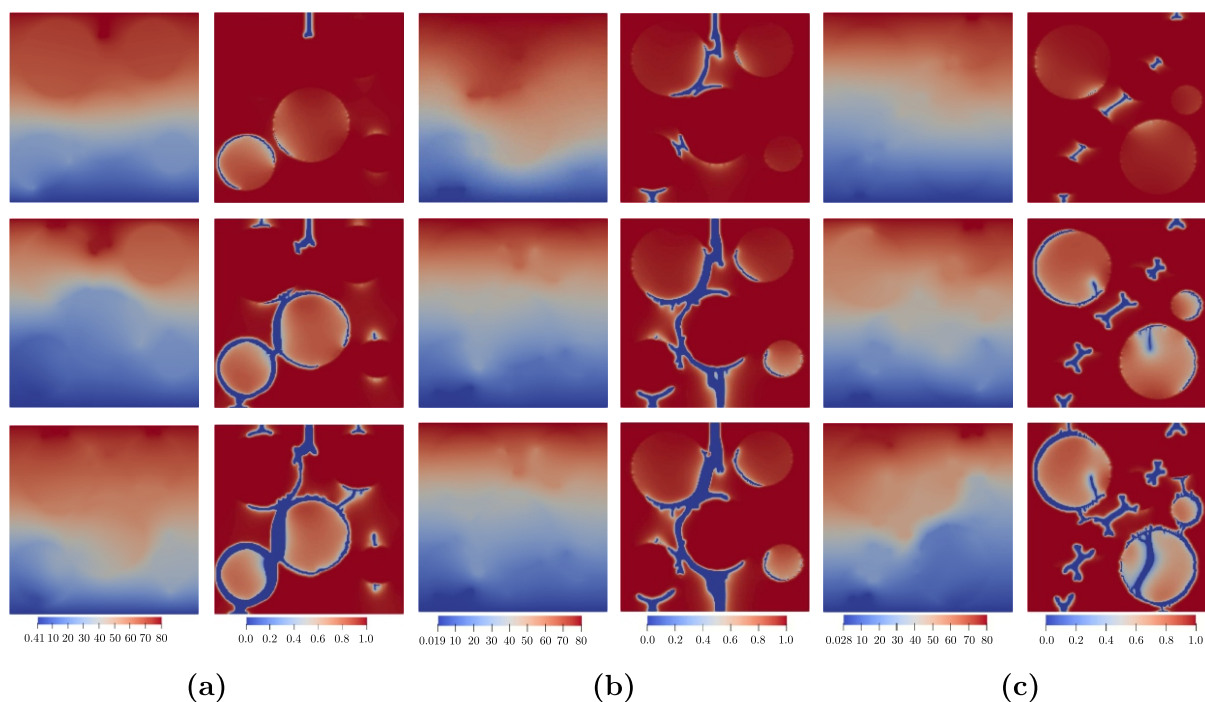


Рис. 5. Варианты 1 (а), 2 (b) и 3 (с). Распределение электрического потенциала (слева) и фазового поля (справа) в моменты времени $t = 400, 600, 720$

по границам между «матрицей» и включениями (причём заполненными как «воздухом», так и «металлом»), см. рис. 5(b) при $t = 600$ и $t = 720$. За счёт того, что на первых стадиях развития канала пробоя он образуется между распределёнными в пространстве включениями, практически сразу после начала развития процесса образуется связанная область повреждённой среды, которая граничит с обеими обкладками. В результате полная деградация среды происходит сравнительно быстро.

Вариант 3. Рассматриваемый вариант расчёта отличается от предыдущих числом и положением включений а также начальным условием для фазового поля. В отличие от предыдущих расчётов, «металлические» включения расположены сравнительно близко друг от друга и образуют достаточно плотную последовательность. Соответствующее распределение свойств показано на рис. 4, строка 3. Помимо этого, область изначально повреждённого материала отсутствует.

Результаты расчётов приведены на рис. 5(c). Как и в предыдущем варианте расчёта, на начальных этапах зоны поврежденности имеют вид узких каналов, соединяющих «металлические» включения. Возникновения каналов в этих местах связано прежде всего с большими значениями напряжённости электрического поля, см. рис. 5(c) при $t = 520$. Далее начинают развиваться поверхностные пробой, которые уже наблюдались в предыдущих расчётах — они распространяются вдоль границ между «матрицей» и включениями, заполненными «воздухом». На поздних стадиях развития процесса наблюдается ещё один эффект — развитие каналов пробоя внутри заполненных «воздухом» включений, см. рис. 5(c) при $t = 840$ и $t = 1000$. Эти внутренние каналы пробоя развиваются одновременно с граничными, расположенными в том же включении.

3.3. Микроскопически неоднородная среда

В настоящем разделе рассмотрен пример расчёта, в котором пробой развивается в «микро-неоднородной» среде. Считается, что неповреждённая среда является однородной, однако начальное распределение фазового поля является случайной величиной, принимающей значения

в заданном диапазоне. При этом характерное изменение значений фазового поля происходит на пространственном масштабе порядка шага расчётной сетки. Такая ситуация соответствует сценарию, когда развитие пробоя моделируется начиная с заданного начального состояния, в котором присутствуют множество частичных пробоев. Интерес представляет развитие зон повреждаемости в пространственном масштабе всего материала, в частности, формирование системы множественных каналов пробоя. Факт формирования такой системы каналов при моделировании говорит о качественной корректности используемой модели (реализация такого сценария вероятна с точки зрения аналогии между диффузной моделью канала пробоя и диффузной моделью развития трещин в упругой среде).

Снова рассмотрим расчётную область $\Omega = [0, A] \times [0, A]$ в виде квадрата со стороной $A = 100$. Диэлектрическая проницаемость для неповреждённого материала $\epsilon_d = 3$, коэффициент $\delta_\epsilon = 10^{-3}$. Соответственно, диэлектрическая проницаемость полностью повреждённого материала имеет значение $\epsilon_{br} = \epsilon_d / \delta_\epsilon = 3 \cdot 10^3$. Параметр l , задающий эффективный радиус диффузного канала пробоя, равен 2, коэффициент подвижности $m = 10^{-3}$, коэффициент перед p -лапласианом $\beta = 0.5$. Электропроводность неповреждённой среды $\sigma_d = 0$, начальное распределение заряда $\rho_E(t = 0) \equiv 0$. Значение удельной энергии каналообразования $\Gamma = 1.6928$.

Расчётная сетка имеет $N_x = N_y = N = 200$ ячеек вдоль каждой стороны квадрата, что соответствует шагу сетки $h = 0.5$. Соответственно, для эффективного радиуса канала имеем $l = 4h$. Временной шаг задавался как $\Delta t = 10^{-3} \cdot \Delta t_{max}$, где $\Delta t_{max} = 2 \cdot h^2 / (\Gamma m)$.

На верхней и нижней границе Ω заданы постоянные значения электрического потенциала $\Phi^+ = 80$ и $\Phi^- = 0$, соответственно. На боковых границах расчётной области задавались однородные граничные условия Неймана.

Значение фазового поля на боковых границах Ω задавалось постоянным, соответствующим неповреждённой среде, $\phi = 1$. На верхней и нижней границах Ω для фазового поля задавались однородные граничные условия Неймана.

В начальный момент времени значение фазового поля в расчётной ячейке является случайной величиной, равномерно распределённой на отрезке от 0.5 до 1. Таким образом, среднее по области значение фазового поля в ячейке равняется 0.75.

Результаты расчётов в разные моменты времени приведён на рис. 6. Расчёт проводился до того момента времени, когда образующаяся система каналов пробоя становится связной, соединяющей верхнюю и нижнюю границы расчётной области (этот момент времени оценивался визуально). Начиная с этого момента времени можно считать, что среда в целом теряет свои изоляционные свойства.

В верхнем ряду рисунков приведено распределение фазового поля в последовательные моменты времени. Отчётливо видно постепенное образование системы каналов, ориентированных вдоль вертикального направления. Отметим, что каналы образуются во всём объёме области одновременно. Более отчётливо процесс формирования системы каналов иллюстрирует следующая серия рис. 6(a)–6(d), где маркерами показаны положения 7000 ячеек с минимальными на данный момент времени значениями фазового поля ϕ (соответствующие диапазоны значений фазового поля приведены в подписях).

На рис. 6(e)–6(h) приведены гистограммы распределения значений фазового поля в ячейках сетки; высота столбика гистограммы равна числу ячеек сетки расчётной области, значения в которых попадают в заданный диапазон. Равномерное распределение начального значения фазового поля явно отражено на рис. 6(e): столбики на гистограмме имеют примерно одинаковую высоту, значения фазового поля находятся в интервале от 0.5 до 1, что соответствует заданным характеристикам начального распределения. По мере развития процесса пробоя характер распределения значений фазового поля существенно меняется. Во-первых, начинают появляться ячейки, значения фазового поля в которых становится меньше 0.5 и монотонно убывают. Этим ячейкам соответствует самый левый столбик на гистограммах. Во вторых,

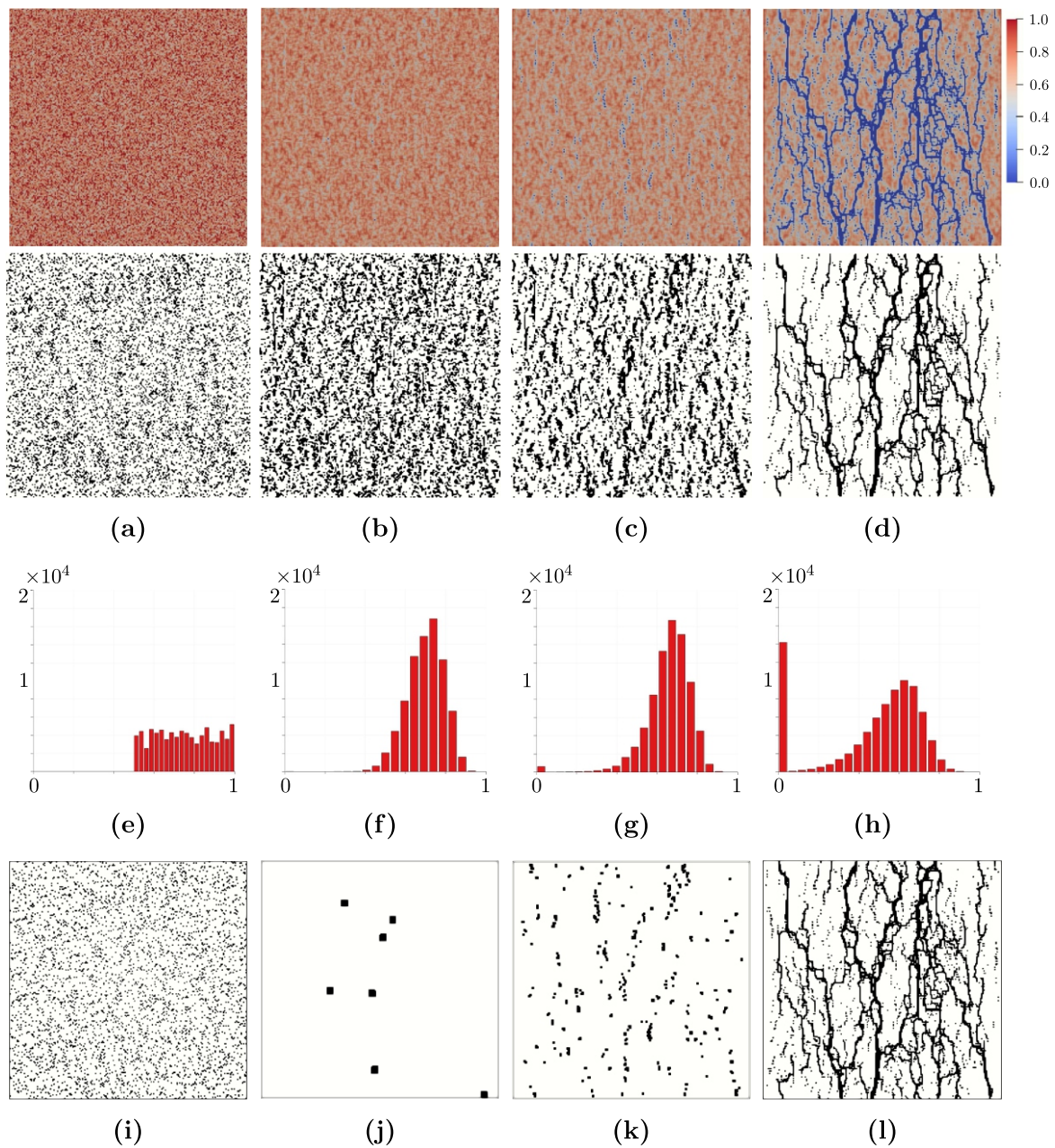


Рис. 6. Развитие пробоя из случайного начального распределения фазового поля в моменты времени $t = 0, 80, 120, 160$ по столбцам для (a) $\phi \in [0.5, 0.6]$, (b) $\phi \in [0, 0.65]$, (c) $\phi \in [0, 0.6]$, (d) $\phi \in [0, 0.05]$, (i) $\phi \in [0.5, 0.55]$, (j) $\phi \in [0, 0.1]$, (k) $\phi \in [0, 0.1]$, (l) $\phi \in [0, 0.1]$. Маркеры на рис. 6(j) и 6(k) увеличены

по мере развития процесса, самый левый столбик распределения, соответствующий значениям $\phi \sim 0$, становится все выше, что означает увеличение количества полностью повреждённых ячеек. Одновременно с этим, количество ячеек, в которых среда полностью не повреждена, уменьшается. Пик распределения в ходе процесса монотонно смещается справа налево, в область $\phi = 0$. Появление отчётливого максимума распределения в окрестности $\phi = 0$ соответствует моменту времени, когда наличие системы каналов начинает явно различаться в верхнем ряду рисунков (и, аналогично, серии рис. 6(e)–6(h) и 6(i)–6(l)). На серии рис. 6(i)–6(l) маркерами показаны ячейки сетки, которые соответствуют самому левому столбику гистограммы в соответствующий момент времени. Маркеры на этих рисунках относятся непосредственно к

той части области, которую можно считать каналом пробоя, то есть полностью (или, в ранние моменты времени — максимально) повреждённой среде.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе представлены результаты численного исследования математической модели типа диффузной границы для развития канала электрического пробоя. В соответствии с общими идеями моделей этого типа, канал пробоя определяется как зона повреждённой среды, эволюция которой описывается с помощью заданной в пространстве гладкой функции — фазового поля (или, что в рассматриваемом случае одно и то же, параметра порядка). Свойства среды зависят от степени её поврежденности. В свою очередь поврежденность увеличивается в тех областях пространства, где значения напряжённости электрического поля сравнительно велики. Модель включает в себя группу уравнений Максвелла в квази(электро)стационарном приближении, уравнение баланса электрического заряда и уравнение Аллена-Кана, непосредственно описывающего эволюцию фазового поля.

Рассмотренная математическая модель является сильно связанной системой нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных. Развитие канала пробоя обуславливается сложным процессом взаимодействия электрического поля, динамики электрического заряда в условиях изменяющихся, по мере развития канала пробоя, электрофизических свойств среды.

Результаты моделирования показывают, что модель развития канала электрического пробоя рассмотренного типа позволяет качественно воспроизводить известный характер развития каналов пробоя (зон повреждаемости), описанный в современной литературе по физике пробоя: традиционный нитевидный пробой, внутренний пробой в матрице и включениях неоднородной среды, поверхностный пробой на границах включений и в окрестности границ расчётной области. В неоднородной среде развитие канала пробоя носит комплексный характер — в приведённых примерах одновременно присутствуют различные виды пробоя, развивающиеся параллельно или последовательно во времени.

Один из основных выводов, который можно сделать из представленных результатов расчётов заключается в том, что в случае неоднородной среды основной сценарий образования канала пробоя — это не его монотонное развитие от границ области вдоль направления электрического поля, — а слияние каналов множественных внутренних пробоев, образование которых начинается одновременно. Такой сценарий принципиально не реализуем в однородной среде, в которой канал развивается планомерно, стартуя от мест расположения локальных зон большой напряжённости электрического поля. В силу этого анализ развития канала пробоя даже в микронеднородной среде, которая по формальным признакам допускает введение полей усреднённых, гомогенизированных, электрофизических свойств, принципиально невозможен без прямого разрешения микроструктуры среды.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа Е. В. Зипуновой и Е. Б. Савенкова (разделы 1, 2 и 4) выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-11-00203). Работа А.А. Кулешова (разделы 3 и 5) выполнена при финансовой поддержке Московского центра фундаментальной и прикладной математики, соглашение с Министерством науки и высшего образования РФ № 075-15-2022-283. Других источников финансирования проведения или руководства данным конкретным исследованием не было.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Воробьёв Г. А., Похолков Ю. П., Королев Ю. Д., Меркулов В. И. Физика диэлектриков (область сильных полей). Томск: Изд-во ТПУ, 2011.
2. Pitike K. C., Hong W. Phase-field model for dielectric breakdown in solids // J. Appl. Phys. 2014. V. 115, N 4. Article 044101; DOI: 10.1063/1.4862929
3. Ambati M., Gerasimov T., De Lorenzis L. A review on phase-field models of brittle fracture and a new fast hybrid formulation // Comput. Mech. 2015. V. 55, N 2. P. 383–405; DOI: 10.1007/s00466-014-1109-y
4. Zipunova E., Savenkov E. Phase field model for electrically induced damage using microforce theory // Math. Mech. Solids. 2021. V. 27, N 6; DOI: 10.1177/10812865211052078
5. Fried E., Gurtin M. E. Continuum theory of thermally induced phase transitions based on an order parameter // Physica. 1993. V. 68, N 3. P. 326–343; DOI: 10.1016/0167-2789(93)90128-N
6. Gurtin M. E. Generalized Ginzburg–Landau and Cahn–Hilliard equations based on a microforce balance // Physica D. 1996. V. 92, N 3. P. 178–192; DOI: 10.1016/0167-2789(95)00173-5
7. Zipunova E., Savenkov E. On the Diffuse Interface Models for High Codimension Dispersed Inclusions // Mathematics. 2021. V. 9, N 18; DOI: 10.3390/math9182206
8. Sargado J. M., Keilegavlen E., Berre I., Nordbotten J. M. High-accuracy phase-field models for brittle fracture based on a new family of degradation functions // J. Mech. Phys. Solids. 2018. V. 111. P. 458–489; DOI: 10.1016/j.jmps.2017.10.015

UDC 51-72:517.9:538.91

**NUMERICAL STUDIES OF THE PHASE FIELD MODEL DESCRIBING
ELECTRIC BREAKDOWN IN A HETEROGENEOUS MEDIUM**© 2024 E. V. Zipunova^a, A. A. Kuleshov^b, E. B. Savenkov^c*Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences,
Moscow, 125047 Russia*E-mails: ^azipunova@keldysh.ru, ^bandrew_kuleshov@mail.ru, ^csavenkov@keldysh.ru

Received 28.11.2023, revised 03.02.2024, accepted 03.07.2024

Abstract. This paper presents the results of numerical studies of the phase field model for the development of an electrical breakdown path. The model consists of Maxwell's equations in the quasi(electro)stationary approximation, the electric charge balance equation, and the Allen—Cahn equation describing the phase field evolution. Several problem settings concerning the development of a breakdown path in homogeneous as well as macro- and microheterogeneous media are considered.

Keywords: diffuse interface model, phase field, order parameter, electric breakdown.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2024.27.306

REFERENCES

1. G. A. Vorob'ev, Yu. P. Pokholkov, Yu. D. Korolev, and V. I. Merkulov, *Physics of Dielectrics (the Region of Strong Fields)* (Tomsk. Politekh. Univ., Tomsk, 2011) [in Russian].
2. K. C. Pitike and W. Hong, "Phase-field model for dielectric breakdown in solids," *J. Appl. Phys.* **115** (4), 044101 (2014). <https://doi.org/10.1063/1.4862929>
3. M. Ambati, T. Gerasimov, and L. De Lorenzis, "A review on phase-field models of brittle fracture and a new fast hybrid formulation," *Comput. Mech.* **55** (2), 383–405 (2015). <https://doi.org/10.1007/s00466-014-1109-y>
4. E. Zipunova and E. Savenkov, "Phase field model for electrically induced damage using microforce theory," *Math. Mech. Solids* **27** (6), (2021). <https://doi.org/10.1177/10812865211052078>
5. E. Fried and M. E. Gurtin, "Continuum theory of thermally induced phase transitions based on an order parameter," *Physica* **68** (3), 326–343 (1993). [https://doi.org/10.1016/0167-2789\(93\)90128-N](https://doi.org/10.1016/0167-2789(93)90128-N)
6. M. E. Gurtin, "Generalized Ginzburg—Landau and Cahn—Hilliard equations based on a microforce balance," *Physica D* **92** (3), 178–192 (1996). [https://doi.org/10.1016/0167-2789\(95\)00173-5](https://doi.org/10.1016/0167-2789(95)00173-5)
7. E. Zipunova and E. Savenkov, "On the diffuse interface models for high codimension dispersed inclusions," *Mathematics* **9** (18), (2021). <https://doi.org/10.3390/math9182206>
8. J. M. Sargado, E. Keilegavlen, I. Berre, and J. M. Nordbotten, "High-accuracy phase-field models for brittle fracture based on a new family of degradation functions," *J. Mech. Phys. Solids* **111**, 458–489 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2017.10.015>