

МОДЕЛЮВАННЯ РУЙНУВАННЯ НЕОДНОРІДНИХ СИСТЕМ ІЗ РЕСИЛІНГОМ

Вивчено особливості еволюції ступеня руйнування для комп'ютерних моделей електричного пробою (перехід провідник-надпровідник ПН) і механічного руйнування (перехід провідник-діелектрик ПД) при наявності ресилінгу зв'язків та дифузійного перемішування. Для моделі ПН спостерігались періодичні зміни ступеня руйнування і просторових картин пробою, з часом дифузійне перемішування призводило до незначного збільшення середнього ступеня руйнування. Для моделі ПД спостерігалось початкове збільшення, а потім зменшення ступеня руйнування і розділення системи на ряд стабільних перколяційних смуг руйнування, що пояснюється протилежною дією ресилінгу і дифузійного перемішування. Обговорюються можливі пояснення періодичної поведінки реологічних властивостей концентрованих суспензій.

1. Вступ

Вивчення процесів руйнування неоднорідних систем викликає значний інтерес не тільки з фундаментальної, а також і з практичної точки зору. В цих процесах спостерігається ряд характерних нелінійних і нерівноважних явищ, природа яких до останнього часу не вивчена ще повною мірою. Прикладами таких систем є різні типи гетерогенних матеріалів, такі як наповнені композити, гранулярні надпровідники, вологонасичені пористі системи, провідні тонкі плівки, концентровані суспензії колоїдних частинок, біологічні тканини тощо [1, 2]. Поведінка таких систем, як

правило, є нелінійною, і при руйнуванні мікроструктурних елементів можливі довготривалі часові зміни макроструктурних характеристик, а також відновлення або «заліковування» (ресилінг) зруйнованих одиниць.

Як характерний приклад можна навести механічну поведінку високодисперсних концентрованих тиксотропних систем. Для них досить типовою є реопексична поведінка з певним відновленням структурної в'язкості, із змінною в часі напруженою зсуву при заданій швидкості зсуву [3, 4]. Методи дослідження дилатантних дисперсій дають від'ємну напругу зсуву, що також указує на оберненість цього процесу [5]. Реометричні

дослідження тонкого прошарку дисперсної речовини в ротаційному віскозиметрі вказують не тільки на те, що під дією напруги зсуву відбувається дезагрегація дисперсних частинок, а й на їх можливу агрегацію, на поведінку зі змінною, можливо, періодичною, структурною в'язкістю [6, 7, 8]. Пояснення цих явищ хоча і ґрунтуються на припущенні можливості ресилінгу структурної сітки в концентрованих дисперсіях, проте повного розуміння природи явищ, що спостерігаються в даних процесах золь-гель переходів, усе ще немає.

Аналогічні процеси ресилінгу спостерігаються при електроруйнуванні біологічних тканин у сильних імпульсних електричних полях. Неоднорідність біотканини приводить до прояву просторової неоднорідності електричного руйнування. Для біотканин дуже типовими є процеси відновлення життєздатності біологічних клітин через певний час після їх електроруйнування. Тобто руйнування клітин, викликане зовнішнім полем, може через певний час зникати, «заліковуватися». Це явище експериментально спостерігалось при електроруйнуванні в імпульсних електричних полях як окремих клітин, так і клітин у біологічних тканинах [9, 10]. Здатність систем до ресилінгу визначається ступенем початкової зруйнованості і залежить від напруженості зовнішнього поля E та часу його дії t . При досить малих збуреннях систем спостерігається повний ресилінг, тобто після виключення поля матеріал може відновитися повністю. Однак при збільшенні E або t може спостерігатися неповний ресилінг. Ресилінг може бути також короткостроковим або довгостроковим [11].

Загалом поведінка, що спостерігається при руйнуванні неоднорідних систем із ресилінгом, у даний час є маловивченою. Відгук макроскопічної поведінки матеріалу на мікроскопічні зміни його властивостей може досить складно залежати від структури й топології матеріалу. Теоретичний опис процесів нестабільності ускладнюється проявом ряду малодосліджених механізмів руйнування на мікрорівні, а також необхідністю врахування макроструктури і перколяційних властивостей гетерогенних матеріалів.

Останнім часом для вивчення природи нестабільності складних гетерогенних систем широко використовуються методи комп'ютерного моделювання. Одними з найкраще досліджених є різні варіанти сіткових моделей, в яких кожен елемент сітки відтворює механічні або електричні мікроструктурні властивості. Проведено детальні дослідження явищ перколяції і скейлінгу, функцій розподілів напруженості й струмів, а також процесів розвитку руйнувань у часі [12, 13, 14, 15, 16, 17, 18]. Нині такі моделі широко застосовуються для дослідження електричної або механічної нестабільності різних типів гетерогенних матеріалів, тонких плівок і біологічних тканин [19, 20, 21].

У даній роботі досліджуються процеси руйнування двовимірних гетерогенних систем за наявності ресилінгу для двох типів моделей, що відпо-

відають електропробі і механічному руйнуванню. У моделях також враховується можливість процесів локальної дифузії зв'язків у системі.

2. Модель

Ми розглядаємо двовимірну квадратну ґратку провідностей розміром N^2 , що зорієнтована під кутом 45° стосовно зовнішніх границь, між якими прикладено зовнішню напругу U (рис. 1). Для цієї конфігурації ґратки всі $N_{tot} = N \times N$ зв'язків є еквівалентними у структурі гетерогенного середовища [16], знімається анізотропія пробою, викликана орієнтацією ґратки стосовно прикладеного поля, що спостерігалось в [19, 20, 14, 21]. У напрямку x застосовувались періодичні граничні умови.

Випадковий розподіл провідностей генерувався за допомогою закону

$$G = 1 + dG(2 \cdot ran - 1), \quad (1)$$

де dG – ступінь неоднорідності матеріалу, ran – випадкове число, рівномірно розподілене в інтервалі $(0,1)$.

У процедурі моделювання за допомогою методу релаксації розв'язувалися рівняння Кірхгофа і знаходилися потенціали в усіх вузлах ґратки. Якщо різниця потенціалів Δu^n на певному опорі n перевищувала деяке критичне значення u_c , тобто

$$\Delta u \geq u_c, \quad (2)$$

цей опір руйнувався і його провідність G^n значно змінювалась.

При руйнуванні ми робили заміну $G_i^n \rightarrow G_f^n$,

де $G_f^n = \epsilon G_i^n$, G_i^n – початкова провідність n -го елемента, який руйнується. Для моделі провідник-надпровідник (ПН) $\epsilon \gg 1$, а для моделі провідник-діелектрик – (ПД) $\epsilon \ll 1$. Ця модель є узагальненням детерміністичної моделі зв'язків електричного

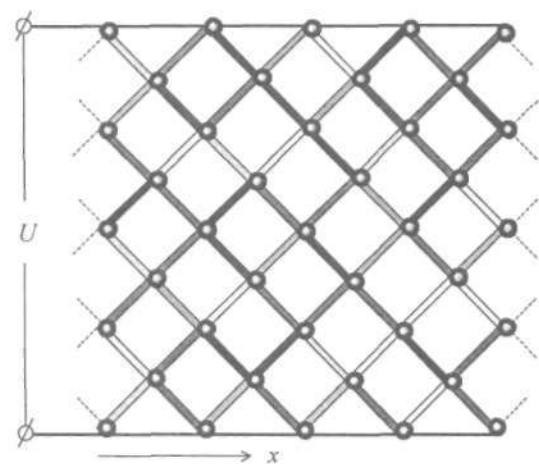
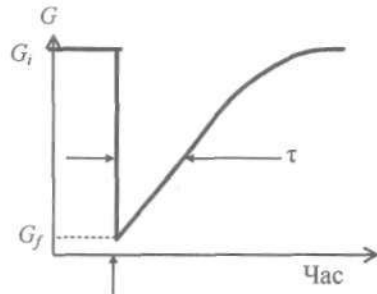
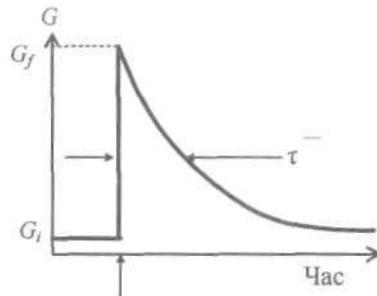


Рис. 1. Квадратна ґратка провідностей $N \times N$, $N = 8$ повернена під кутом 45° до зовнішнього поля. Зовнішня напруга U прикладено між верхньою та нижньою паралельними лініями; в напрямку x застосовувались періодичні граничні умови



Розрив механічного зв'язку:
 $G_i \rightarrow G_f = \varepsilon G_i, \varepsilon \ll 1$



Електричний пробій (утворення)
 зв'язку: $G_i \rightarrow G_f = \varepsilon G_i, \varepsilon \gg 1$

Рис. 2. При критичній напрузі u_c на зв'язку його провідність різко змінюється: $G_i \rightarrow G_f$ з наступним відновленням із характеристичним часом ресилінгу τ

пробою (випадок ПН) і механічного руйнування (випадок ПД), що була запропонована Такаюсу [13].

Напруги, близькі до u_c критичного, існують, як правило, на зв'язках, що знаходяться на межі зруйнованих і цілих елементів. У середині кластерів із зруйнованих провідників перепади напруги низькі, елементи мають змогу відновити свої провідні властивості (рис. 2). Ресилінг провідностей зв'язків апроксимувався експоненційним законом:

$$G(t) = (G_i + (G_f - G_i)) \exp(-t/\tau). \quad (3)$$

Тут час відповідає умовній одиниці, що пов'язана з часом руйнування одного зв'язку.

Дослідження проводились в межах незмінних початкових умов розподілу провідностей і в умовах можливого дифузійного переміщення зв'язків. При наявності процесів локальної дифузії на кожному часовому кроці випадковим чином проводився обмін провідностей сусідніх зв'язків.

Безрозмірна прикладена напруга визначалась як

$$U^* = U / (Nu_c). \quad (4)$$

У такому визначенні для однорідного матеріалу ($dG = 0$) повне руйнування всіх опорів системи відбувається при $U^* = 1$.

Умовою зупинки процедури релаксації приймали відносну похибку обчислення потенціалів меншу за 10^{-5} . Для визначення впливу розміру системи на результати обчислень величина N змінювалась в інтервалі $2^4 \div 2^{10}$. Попередні дослі-

дження показали, що основні результати практично не залежать від розміру для $N \geq 256$, тому всі обчислення проводились для системи $N = 256 \times 256$ і далі усереднювались по 100 різних початкових конфігураціях.

Загальний ступінь руйнування системи оцінювався як

$$P(t) = \frac{1}{N_{tot}} \sum_{n=1}^{N_{tot}} \frac{G^n(t) - G_i^n(t)}{G_f^n(t) - G_i^n(t)}, \quad (5)$$

де сума береться по всіх N_{tot} зв'язках у системі.

Середня провідність системи G_m враховувалась за допомогою модифікованого алгоритму Франка-Лобба [22, 23], а також оцінювалась з допомогою формули [24]:

$$G_m = \sum_{n=1}^{N_{tot}} G^n \left(\frac{\Delta u^n}{U} \right)^2. \quad (6)$$

3. Результати та їх обговорення

Для детерміністичної моделі втрата стабільності системи спостерігається тільки за наявності досить великої зовнішньої напруги, що перевищує деяке критичне значення U^*_{min} [14, 25]. Це значення U^*_{min} дорівнює 1 для повністю однорідної системи ($dG = 0$) і зменшується із збільшення ступеня неоднорідності системи dG . Для дуже неоднорідних систем при $dG = 0,9$ шляхом чисельних досліджень ми встановили, що $U^*_{min} \approx 0,4$.

Характерний приклад картини руйнування для випадку електричного пробію (систем провідник-надпровідник ПН, $\varepsilon \gg 1$) представлено на рис. 3. Для цього випадку електропробій починається з руйнування деяких окремих зв'язків і стимулюється різким перепадом напруги між зруйнованими і цілими елементами. Кластер

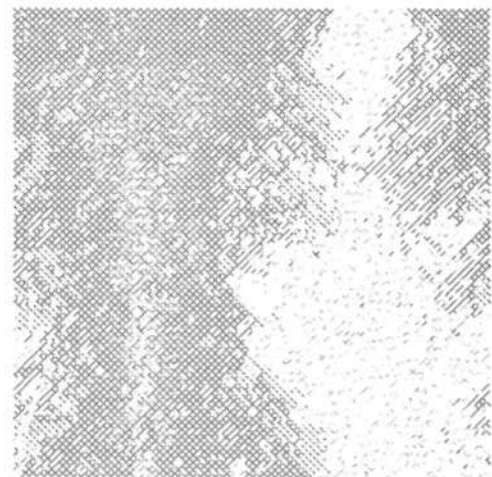


Рис. 3. Характерна картина електроруйнування для моделі ПН. Розмір ґратки 128×128 , $U^* = 0,6$, $\tau = 10$, $dG = 0,9$

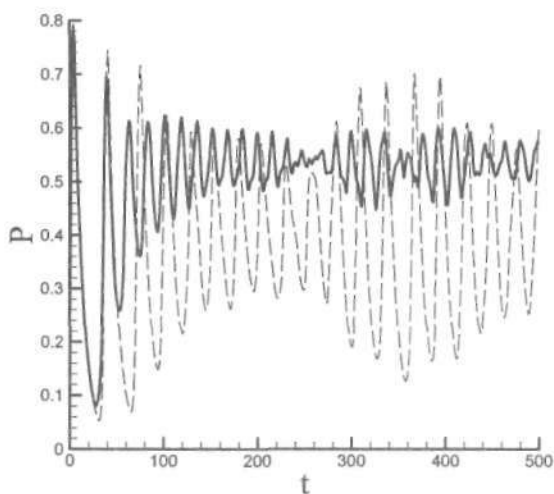


Рис. 4. Залежність міри зруйнованості P від часу t для детерміністичної моделі (пунктирна лінія) та моделі з дифузійним перемішуванням динамічної (суцільна лінія). Розмір системи становив 128×128 , $U^* = 0,7$, $\tau = 10$, $dG = 0,9$

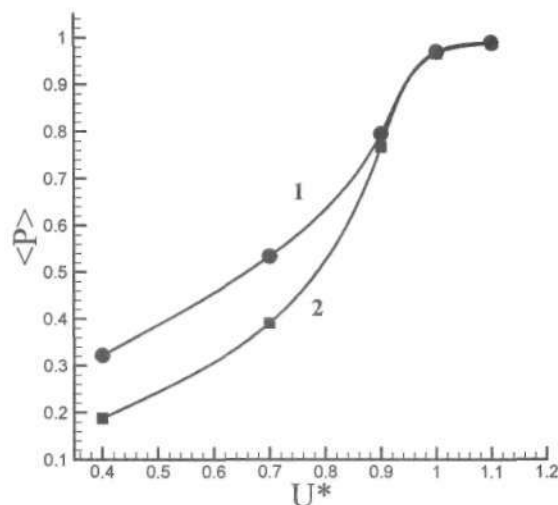


Рис. 5. Залежність середнього ступеня зруйнованості для моделі ПН $\langle P \rangle$ від нормованої напруги U^* для звичайної детерміністичної моделі (1) і моделі з дифузійним перемішуванням (2)

руйнування утворюють щільну структуру, що заповнює досить компактно всю ґратку. За наявності ресилінгу зруйновані елементи мають можливість відновлення, оскільки перепад напруги для зруйнованих елементів, що знаходяться всередині кластера, є досить малим. Важливою особливістю поведінки системи ПН є наявність періодичної зміни ступеня руйнування P із часом t (рис. 4). Періодична зміна P корелює з періодичною зміною картин електроруйнування. Таким чином, для системи ПН спостерігається просторово-часова скорельованість руйнації. Характер коливної поведінки залежить від значення прикладеної напруги U^* . При збільшенні U^* спостерігається перехід до згасаючих коливань, і при великих напруженнях ($U^* > 0,85$) відбувається повне подавлення коливань. За наявності гармонійної динаміки процесів руйнування-відновлення в системі ПН домінують процеси, що призводять до виникнення одного або декількох кластерів пробою, які періодично виникають і зліковуються приблизно в одних і тих же просторових областях, заданих початковим випадковим розподілом провідностей у системі. Детальне дослідження поведінки моделі ПН для різних значень U^* і часу ресилінгу τ проведено в роботі [26].

За наявності дифузійного перемішування відбувається міграція зруйнованих зв'язків за системою, і для малих значень $U^* \cong U^*_{\min}$ спостерігається зменшення амплітуди й періоду коливань (див. рис. 4). Середній ступінь зруйнованості системи $\langle P \rangle$ зростає при збільшенні U^* , а також за наявності дифузійного перемішування (рис. 5). Дифузійне перемішування викликає подавлення коливних процесів, що подібне до поведінки системи зі стохастичною критичною напругою [26]. Спостережуване можна пояснити порушенням заданої

просторової локалізації кластерів руйнування внаслідок дифузійного перемішування.

Характерні приклади картин механічного руйнування (для системи провідник-діелектрик ПД, $\epsilon \ll 1$) представлено на рис. 6 для випадку за відсутності (а) і наявності (б) ресилінгу. При напругах,

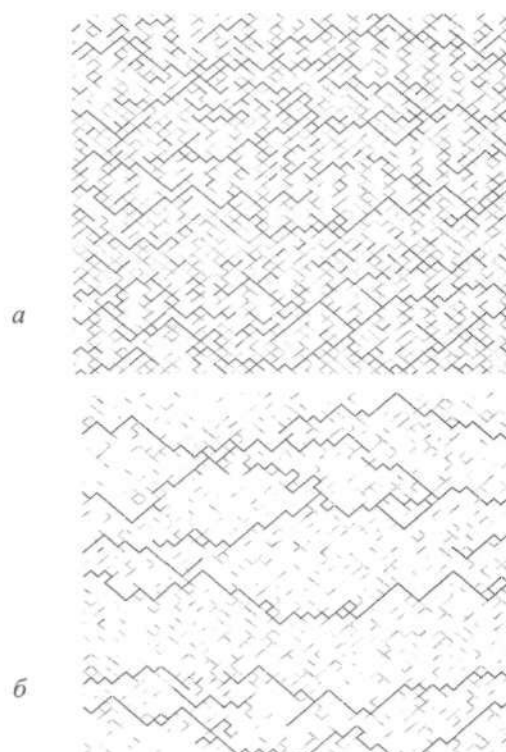


Рис. 6. Картини руйнування для моделі ПД без ресилінгу (а) і з ресилінгом (б) зв'язків. Розмір системи 64×64 при $U^* = 0,7$. Інтенсивність сірого кольору незруйнованих елементів відповідає неоднорідному розподілу міцності зв'язків

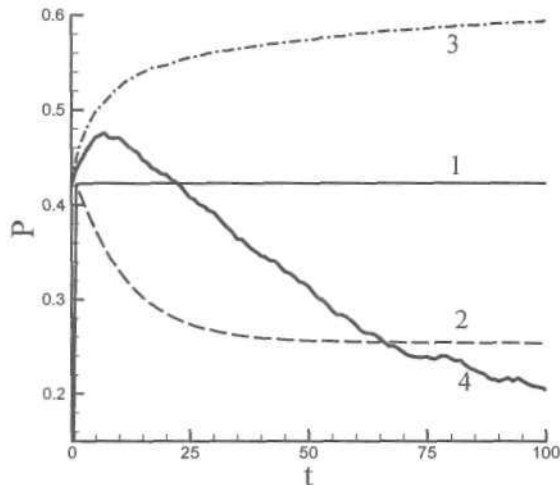


Рис. 7. Часова залежність ступеня зруйнованості P для моделі ПД: суцільна лінія (1) відповідає детерміністичній моделі, пунктирна (2) – випадку з ресилінгом без перемішування, штрихпунктирна (3) – перемішуванню без відновлення, (4) – за наявності ресилінгу і перемішування. Розмір системи становив 128×128 , $dG = 0,9$, $U^* = 1,0$, $\tau = 10$

близьких до U^*_{\min} , виникає один або декілька кластерів лідерів, але після досягнення точки перколяції подальше руйнування системи не відбувається. У цьому випадку повного руйнування системи не відбувається навіть при великих значеннях U^* . Для цієї моделі не спостерігається періодичних змін ступеня руйнування й повторення картин руйнування. За наявності ресилінгу зв'язків спостерігається поступове зникнення бічних гілок у перколяційних кластерах, загальний ступінь руйнування системи з часом може зменшуватися (пунктирна крива 2 на рис. 7). За відсутності ресилінгу перемішування порушує перколяційні кластери і стимулює розвиток нових руйнувань, результатом чого є підвищення ступеня зруйнованості (штрихпунктирна крива 3 на рис. 7). Таким чином ресилінг може спричинити зменшення, а перемішування – збільшення ступеня руйнування.

Часові залежності ступеня зруйнованості для моделі ПД при наявності ресилінгу і перемішування наведені на рис. 7, крива 4. В даному випадку конкуренція цих двох факторів призводить до того, що $P(t)$ проходить через максимум. Цікаво відзначити, що кінцевий ступінь руйнування для цього випадку може бути навіть нижчим, ніж для системи, в якій є тільки ресилінг зв'язків. Час відновлення τ впливає тільки на початковий перехідний процес, і при збільшенні τ максимум $P(t)$ спостерігається при більших значеннях часу. За наявності ресилінгу і перемішування з плином часу спостерігається цікаве розділення системи на зони з різним ступенем руйнування (рис. 8). З часом

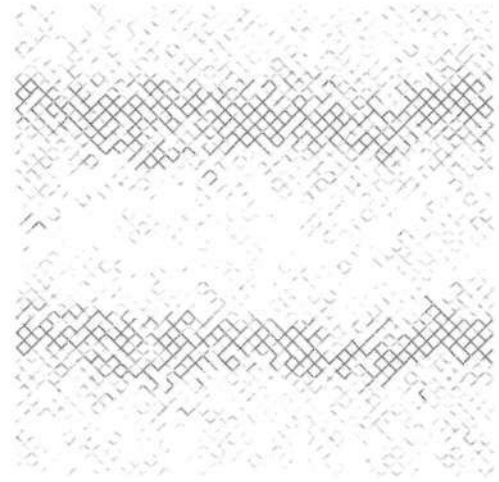


Рис. 8. Еволюція картини механічного руйнування (рис. 6, а) для моделі ПД за наявності ресилінгу та дифузійного перемішування. Розмір системи становив 64×64 , $dG = 0,9$, $\tau = 10$

система ПД розділяється на ряд стабільних перколяційних смуг. При досить великих напругах ($U^* > 2$) спостерігається майже повне руйнування, й система практично перестає бути чутливою до перемішування чи ресилінгу.

4. Висновки

Таким чином, для моделей ПН і ПД спостерігається принципово різна залежність ступеня руйнування від часу. Для моделі ПН відбуваються періодичні зміни ступеня руйнування і просторових картин пробою з часом. Дифузійне перемішування призводило до незначного збільшення середнього ступеня руйнування. Для моделі ПД спостерігалось початкове збільшення, а потім зменшення ступеня руйнування і розділення системи на ряд стабільних перколяційних смуг руйнування, що пояснюється протилежною дією ресилінгу і дифузійного перемішування. В реології збільшення ступеня руйнування структурованої системи відповідає зменшенню її структурної в'язкості. Таким чином, для пояснення експериментальних даних про періодичні зміни в'язкості в концентрованих дисперсіях [6, 7, 8] при вимірюваннях її у ротаційному віскозиметрі слід припустити наявність переходу типу ПН при дії прикладеної напруги зсуву. Це фактично відповідає дилатантній поведінці. Для повного опису реологічної поведінки таких систем необхідно розробити більш загальну ієрархічну модель, що враховувала б дилатантну і тиксотропну поведінку структурованої системи. Така модель може ґрунтуватись на комбінованому варіанті моделі ПН-ПД.

1. Фракталы в физике / Под ред. Л. Пьетронеро, Э. М. Тозатти.-М.: Мир, 1988.-С. 249-254.
2. Neumann E., Sprafke A., Boldt E., Wolf H. Biophysical consideration of membrane electroporation *II* Guide to Electroporation and electrofusion, San Diego, Academic Press, Ed. by D. C Chang, B. M. Chassy, J. A. Saunders, A. E. Sowers, 1992.-P. 77-117.
3. Curcio F., DeAngelis B. A. Dilatant behavior of superplasticized cement paste *II* Cement and concrete Research-1998- V. 28, №5.-P. 329-366.
4. Barnes H. A. Shear-thickening ("dilatancy") in suspensions of nonaggregating solid particles dispersed in Newtonian liquids *II* J. Rheol.- 1989.- V. 33, № 2.- P. 329-366.
5. Moftan K. Analysis improves selection of Theological model for slurries *II* Oil & Gas J- 1993.- V. 91, № 43,- P. 82-88.
6. Seidel O., Bagusat F., Mogel H.-J. Time periodic viscosity of concentrated kaolin suspensions at constant shear rates *II* Rheol Acta 38, 305-310 (1999).
7. Bagusat F., Seidel O., Mogel H.-J. Time periodic change of viscosity in kaolin suspensions as an example for modelling concentrated suspensions *II* Progr Colloid Polym Sci 111, 82-84 (1998).
8. Lemke T., Bagusat F., Kohnke K, Husemann K, Mogel H.-J. Time dependent viscosity of concentrated alumina suspensions *II* Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects 150, 283-287 (1999).
9. Knorr D. Novel approaches in food-processing technology: new technologies for preserving foods and modifying function, Current Opinion in Biotechnology, 10, № 5,485-191 (1999).
10. Lebovka N. I., Bazhal M. I., Vorobiev E. I. Pulsed electric field breakage of cellular tissues: Visualization of percolative properties. Innovative Food Science & Emerging Technologies, 2, 111-129 (2001) (E-print:cond-mat/0005252).
11. Teissie J., Eynard N., Gabriel B., Rois M. P. Electroporation of cell membranes *II* Advanced Drug Delivery Reviews. 35,3 (1999).
12. Sahimi M. Non-linear and non-local transport processes in heterogeneous media: from long-range correlated percolation to fracture and material breakdown. Physics Reports, 306, 213 (1999).
13. Такаясу Х. Формирование конфигураций дендритных фракталов при растрескивании и электрическом пробое. В кн.: Фракталы в физике / Под ред. Л. Пьетронеро, Э. М. Тозатти (М.: Мир, 1988).-С. 249-254.
14. Lebovka N. I., Mank V. V. Phase Diagram and Kinetics of Inhomogeneous Square Lattice Brittle Fracture. Physica A181, 346 (1992).
15. Angulo R. F., Medina E. Conductance distributions in random resistor networks; Self averaging and disorder lengths. Physica A191, 410 (1992). (Preprint: cond-mat 9405010).
16. Sornette D., Vanneste C Dendrites and fronts in a model of dynamical rupture with damage. Phys. Rev. E50, № 6, 4327 (1994).
17. Batrouni G G, Hansen A., Larson B. Current distribution in the three-dimensional random resistor network at the percolation threshold. Phys. Rev. E 53, № 3, 2292 (1995). (Preprint: cond-mat 9508041).
18. Duxbury P. M., Beale P. D., Moukarzel C. Breakdown of two-phase random resistor networks, Phys. Rev. B51, № 6, 3476 (1995).
19. Pennetta C, Reggiani L, Kiss L. B. Thermal effects on the electrical degradation of thin film resistors, Physica A266, 214(1999).
20. Pennetta C, Reggiani L., Trefan Gy. Scaling and Universality in Electrical Failure of Thin Films, Physica A266, 214 (1999).
21. Lebovka N. I., Bazhal M. I., Vorobiev E. I. Pulsed electric field breakage of cellular tissues: Visualization of percolative properties. Innovative Food Science & Emerging Technologies, 2, 111-129 (2001) (E-print:cond-mat/0005252).
22. Stauffer D., Aharony A. Introduction to Percolation Theory (Taylor and Francis, London, 1992).
23. Frank D. J., Lobb C J. Highly efficient algorithm for percolative transport studies in two dimensions, Phys. Rev. B 37, 302(1988).
24. Ranimai R., Tannous C, Breton P., Tremblay A. M. S. Phys. Rev. A31, 2662 (1985).
25. Guliy I. S., Lebovka N. I., Mank V. V., Kupchik M. P., Bazhal M. I., Matvienko A. B., Papchenko A. Y. Scientific and practical principles of electrical treatment of food products and materials. Kiev: UkrIMTEI, 1994.
26. Лебовка М. І., Мельник Р. М., Купчик М. П., Гулій І. С. Електричний пробій у ґратках резисторів за наявності ресилінгу. У друці.

R. M. Melnyk, N. I. Lebovka, M. P. Kupchik, S. V. Pahovchyshyn

SIMULATION OF DAMAGE FOR HETEROGENEOUS SYSTEMS WITH RESEALING

The damage evolution for two computational models of dielectric breakage (resistor-superconductor model) and mechanical damage (resistor-isolator model) accounting for resealing of bonds and diffusion mixing are studied. The periodical changes in damage degree P and spatial damage patterns with time are observed for the RS model. The diffusion mixing cause a small increase in damage degree. For the RI model P goes through the maximum and damage patterns displays some stable percolation damage layers. This phenomena is explained by opposite action of resealing and diffusion mixing effects. The possible explanation of the time periodic viscosity changes in concentrated suspensions are discussed.