



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • [Электронная библиотека](#)

[Препринты ИПМ](#) • [Препринт № 122 за 2020 г.](#)



ISSN 2071-2898 (Print)  
ISSN 2071-2901 (Online)

[Е.В. Зипунова](#), [Е.Б. Савенков](#)

О моделях диффузной  
границы для описания  
динамики объектов высшей  
коразмерности

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Зипунова Е.В., Савенков Е.Б. О моделях диффузной границы для описания динамики объектов высшей коразмерности // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 122. 34 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2020-122>  
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2020-122>

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
ОРДЕНА ЛЕНИНА  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
имени М. В. КЕЛДЫША

Е.В. Зипунова, Е.Б. Савенков

**О моделях диффузной границы для описания  
динамики объектов высшей коразмерности**

Москва, 2020

*Е.В. Зипунова, Е.Б. Савенков, О моделях диффузной границы для описания динамики объектов высшей коразмерности*

### **Аннотация**

Модели типа диффузной границы широко используются для описания динамики многофазных систем самой разной природы. Обычно дисперсные включения, динамику которых описывает модель, имеют пространственную размерность 3. При описании динамики уединенных трещин элементы дисперсной фазы являются непосредственно трещинами, которые являются эффективно двумерными объектами. Примером модели, в которой включения дисперсной фазы одномерны, является модель динамики развития канала электрического пробоя. Вид модели определяется функцией свободной энергии, зависящей от параметра порядка и его производных. В данной работе показано, что коразмерность диффузного «включения» может существенно ограничивать способ, в соответствии с которым энергия зависит от производных параметра порядка. Показывается, что любая модель, пригодная для описания одномерного «диффузного» объекта, зависит либо от производных высших порядков, либо от накладывает дополнительные ограничения на гладкость решения задачи, которое должно иметь производные с порядком суммирования выше второго. Для подтверждения теоретических предположений приведены результаты численного исследования.

**Ключевые слова:** модели типа диффузной границы, фазовое поле, параметр порядка, электрический пробой

*E. V. Zipunova, E. B. Savenkov, On the diffuse interface models for high codimension dispersed inclusions*

### **Abstract**

Diffuse interface models are widely used to describe evolution of multi-phase system of different nature. Usually dispersed inclusions are three dimensional objects. When describing elastic fracture evolution, elements of the dispersed phase are effectively 2d objects. An example of the model which governs evolution of effectively 1d dispersed inclusions is phase field model for electric breakdown in solids. Phase field model is defined by appropriate free energy functional, which depends on phase field and its derivatives. In this work we show that codimension of the dispersed «inclusion» significantly restrict the functional dependency of system energy on the derivatives of the problem state variables. It is shown that free energy of any phase field model suitable to describe 1d diffuse objects necessarily depends on higher order derivatives of the phase field or need an additional smoothness of the solution — it should have first derivatives integrated with power greater than two. To support theoretical discussion, some numerical experiments are presented.

**Key words and phrases:** diffuse interface models, phase field, order parameter, electric breakdown.

# 1 Введение

В настоящее время модели типа диффузной границы составляют мощный и обоснованный класс подходов для решения прикладных задач гидродинамики [1, 2, 3, 4, 5], механики деформируемого твердого тела и теории трещин [6], материаловедения [7], солидификации и теории фазовых переходов [8, 9, 10, 11], описания кристаллических структур [12, 13, 14], и многих других.

Назначением моделей с диффузной границей, в широком смысле этого термина, является описание 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* — определенной в пространстве гладкой функцией, значение которой практически постоянно в зонах однородности и быстро, но непрерывно, меняется в пределах разделяющего 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. Таким образом, диффузная граница не является просто сглаженным сильным разрывом.

Всестороннему теоретическому, прикладному и численному анализу различных моделей диффузной границы посвящено множество публикаций. Любая из указанных областей является сложной — в частности, из-за необходимой нелинейности этого класса моделей.

Одним из важнейших понятий теории моделей с диффузной границей является понятие «предела четкой границы». Грубо говоря, «четким» двойником модели с диффузной границей является модель, которая получается при стремлении толщины диффузной границы к нулю. Так, для моделей гидродинамики с диффузной границей пределом четкой границы являются классические модели гидродинамики со свободной границей (к которым отнесен контактный разрыв), на которой заданы соответствующие условия согласования консервативных величин и их потоков с учетом закона Юнга-Лапласа. Переход от модели с диффузной границей к модели с четкой границей математически обосновывается в рамках асимптотических методов или теории  $\Gamma$ -сходимости [15, 16, 17, 18, 19, 20, 21].

Связь между моделями с «четкой» и «диффузной» границей является очень тесной. С одной стороны, для ряда моделей диффузной границы наличие предельного перехода к соответствующей модели с четкой границей яв-

ляется обоснованием применимости и практической обоснованности модели. С другой стороны, корректная с термодинамической точки зрения процедура построения модели диффузной границы позволяет (в рамках процедуры Колмана-Нолла [22] или другого подхода, например, метода Лю [23]) построить определяющие соотношения модели. Но соотношения модели будут полностью определены, только если задана зависимость свободной энергии системы от значений параметра порядка и его производных определенной степени. Вид этой зависимости не дается термодинамикой — он является отправной точкой вывода модели и должен быть постулирован каким-либо «внешним» способом. В ряде случаев источником указанной зависимости является анализ априорно заданной модели с четкой границей, которая рассматривается как первичная, см., например, [24]. Наличие модели с четкой границей, соответствующей заданной модели с диффузной границей, обуславливает корректность последней.

Предметом настоящей работы является рассмотрение такого свойства модели диффузной границы как *коразмерность* «включений», динамику которых описывает модель.

Так, например, в случае моделей гидродинамики, «включения» (зоны, занятые одной, дисперсной, фазой), являются трехмерными объектами, расположенными внутри трехмерной области, занятой дисперсионной фазой. Эти «включения», таким образом, имеют коразмерность ноль. Граница между фазами является двумерной и имеет коразмерность один.

В случае диффузных моделей теории трещин, «включение», описывающее трещину, соответствует объекту (срединной поверхности трещины) размерности два (и, соответственно коразмерности один) в случае трехмерной постановки. Понятие размерности границы «включения» к этому примеру неприменимо.

Известный авторам пример модели, описывающей динамику «включений» более высокой коразмерности, приведен в работе [25], в которой рассматривается диффузная модель канала электрического пробоя.

Целью настоящей работы является демонстрация того, что коразмерность диффузного «включения» (точнее, коразмерность его возможного «четкого» предела) может существенно ограничивать вид части свободной энергии, связанной с наличием в модели параметра порядка. В частности, формальное сохранение вида энергии системы при увеличении коразмерности «включения» может приводить к некорректной с математической точки зрения модели.

Конкретно, мы показываем, что предложенная в [25] модель по крайней мере не вполне корректна для описания динамики канала пробоя как эффективно одномерного объекта. Вместе с тем, его рассмотрение как трехмерного объекта не требует представленных в [25] построений. В частности, неверным является ряд допущений, сделанных авторами при выводе модели и, как

следствие, представленных в [25] результатов. На основе ряда формальных соображений предлагается возможный способ исправления указанной модели. Изложение ведется на примере сравнительно простой модели диффузной границы для описания динамики канала электрического пробоя в твердом диэлектрике, предложенной в работе [25]. В настоящей работе рассматривается конкретный частный пример, авторы считают, что представленные в работе соображения являются универсальными и имеют системный характер.

## 2 Общее обсуждение

Предметом обсуждения настоящей работы является модель типа диффузной границы для описания динамики развития канала электрического пробоя в твердом диэлектрике, предложенная в работах [25, 26]. Эта модель далее применялась в работах [27, 28, 29, 30, 31].

Предложенная в работе [25] модель построена как формальное обобщение известных моделей типа диффузной границы для анализа распространения трещин в упругой среде. Авторы работы не приводят термодинамически обоснованный вывод предложенной ими модели, а используют формальную аналогию между процессом распространения трещины и процессом распространения канала пробоя.

Основаниями для такого подхода являются следующие рассуждения.

В традиционных моделях механики трещин (см., например, [32, 33]) непосредственно трещина рассматривается как гладкая поверхность  $\Gamma$  с краем в пространстве или отрезком кривой на плоскости, — то есть как геометрический объект коразмерности  $\text{codim } \Gamma = 1$ . Аналогично, одномерный канал  $\Lambda$  пробоя может быть рассмотрен как геометрический объект коразмерности  $\text{codim } \Lambda = 2$  — кривой в трехмерном пространстве или точкой в плоском случае.

В обоих случаях происходит развитие трещины либо канала пробоя под влиянием действующих в системе сил — механической или электродинамической природы, соответственно. Кроме того, как для трещины в упругой среде, так и для канала пробоя, возможно построение так называемого  $J$ -интеграла, который имеет смысл скорости высвобождения энергии в ходе развития трещины или канала пробоя.

Для задачи распространения трещин в упругой среде  $J$ -интеграл является хорошо известным инструментом и одним из важнейших результатов, давшим основу современной теории трещин. Впервые он был предложен в работах Г. Черепанова [32] и Дж. Райса [34]. Выражение для  $J$ -интеграла для описания развития канала пробоя получено в работе [35], в которой канал пробоя рассматривается как одномерный проводящий канал, распространя-

ющийся в диэлектрике. Так же как и для теории трещин, в качестве базовой гипотезы используется энергетический критерий развития процесса.

Это соответствие между процессами обоих видов используется авторами работы [25] для формального обобщения моделей диффузной границы для распространения трещин на случай распространения канала пробоя в диэлектрике.

Опишем коротко два основных способа построения моделей диффузной границы для задач теории трещин, см. [6] и ссылки там.

Первый способ, который далее упоминается как «механистический», впервые был предложен в рамках вариационной модели трещины в упругой среде, см. [21], [20, Глава 3] и ссылки там. Он основан на следующих построениях.

Рассмотрим область  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  ( $n = 1, 2, 3$ ), заполненную физически и геометрически линейной однородной упругой средой, к которой приложены внешние поверхностные и объемные силы. Пусть  $\Gamma \subset \Omega$  — срединная поверхность трещины, которая в двумерной постановке считается отрезком гладкой кривой, в трехмерной — гладкой поверхностью с (гладким) краем. В рамках вариационной теории трещин (здесь и далее мы следуем [21, 20, 36]) энергия системы имеет вид

$$\mathcal{J} = \mathcal{J}(\mathbf{u}, \Gamma) = \int_{\Omega \setminus \Gamma} W(\nabla \otimes \mathbf{u}) \, d\Omega + \kappa \mathcal{H}^{n-1}(\Gamma), \quad (1)$$

где  $\mathbf{u}$  — поле перемещений точек среды,  $\mathcal{H}^{n-1}(\Gamma)$  —  $(n - 1)$ -мера Хаусдорфа,  $\kappa$  — энергия, отнесенная к единице площади срединной поверхности трещины. Значение размерности меры здесь существенно. Фиксируя ее равной  $n - 1$ , мы явно говорим о том, что трещина — объект коразмерности 1.

Функционал (1) является отправной точкой для построения вариационной теории развития трещин. В частности, в соответствии с этой теорией считается, что в ходе своей эволюции трещина  $\Gamma = \Gamma(t)$  минимизирует функционал (1) — то есть перемещения  $\mathbf{u}$  среды и траектория трещины  $\Gamma(t)$  являются его экстремалью в каждый момент времени при выполнении ряда дополнительных условий, которые в настоящий момент несущественны. Детали вариационной теории трещин далее не излагаются, они широко описаны в цитированной выше литературе.

В указанной постановке анализ задачи является сложным — как с математической точки зрения теории, так и с точки зрения разработки соответствующих вычислительных алгоритмов. Причина этого в том, что для решения задачи необходимо «уметь» варьировать функционал (1), в том числе по конфигурации трещины, то есть по  $\Gamma$ .

По этой причине удобнее аппроксимировать меру Хаусдорфа в (1) объ-

емным интегралом как (см. [21, 36])

$$\mathcal{H}^{n-1}(\Gamma) \approx \int_{\Omega} \gamma_l(\phi, \nabla \phi) d\Omega,$$

где поверхностная плотность энергии трещины задается выражением

$$\gamma_l(\phi, \nabla \phi) = \frac{1}{2l} \phi^2 + \frac{l}{2} \|\nabla \phi\|^2, \quad (2)$$

в котором  $0 < l \ll 1$  — малый вещественный параметр.

В этом случае энергия (1) среды с трещиной *аппроксимируется* функционалом

$$\mathcal{J} \approx \mathcal{J}_l = \mathcal{J}_l(\mathbf{u}, \phi) = \int_{\Omega} ((1 - \phi)^2 + \epsilon) W(\nabla \otimes \mathbf{u}) d\Omega + \int_{\Omega} \kappa \gamma_l(\phi, \nabla \phi) d\Omega, \quad (3)$$

значения которого сходятся (в смысле  $\Gamma$ -сходимости) к значениям функционала (3) при  $l \rightarrow 0$ . Здесь  $0 < \epsilon \ll 1$  — малый параметр, препятствующий вырождению функционала при  $\phi = 1$ . В диффузных моделях трещины он обычно выбирается строго положительным — однако известно, что при его нулевом значении вырождения задачи не происходит, см. [37].

Принимается, что параметр порядка (фазовое поле)  $\phi$  в рассматриваемом случае  $\phi = 1$  на трещине и  $\phi = 0$  для неповрежденной среды.

Если срединная поверхность  $\Gamma$  трещины задана и известна, то легко показать, что соответствующее ей распределение  $\phi$  в пространстве определяется как экстремальное значение функционала

$$\tilde{\mathcal{J}}_l = \tilde{\mathcal{J}}_l(\mathbf{u}, \phi) = \int_{\Omega} \kappa \gamma_l(\phi, \nabla \phi) d\Omega, \quad (4)$$

с граничными условиями

$$\phi|_{\Gamma} = 1; \quad \phi \rightarrow 0, \quad \mathbf{x} \rightarrow \infty. \quad (5)$$

Соответствующее уравнения Эйлера-Лагранжа имеет вид

$$-\Delta \phi + \frac{1}{l^2} \phi = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (6)$$

Можно показать, что в одномерном случае ( $n = 1$ ,  $\Gamma = \{x_0 = 0\}$ ) решение этого уравнения имеет вид

$$\phi(x) = \exp(-|x|/l)$$

и экспоненциально убывает с ростом расстояния от точки пространства до трещины. В многомерном случае это свойство убывания также сохраняется. Параметр  $l$  в выражении для  $\gamma_l$  отвечает, таким образом, за ширину «размазывания» диффузной трещины.

Уравнение (6), приведенное выше, является модельным. В полной постановке задачи, когда характер развития трещины априорно неизвестен, это уравнение решается во всей области  $\Omega$  и имеет источник, интенсивность которого связана с упругой энергией среды. Соответственно, те точки пространства, в которых  $\phi = 1$ , соответствуют точкам трещины. В результате новая поверхность трещины (то есть множество точек пространства, в которых  $\phi = 1$ ) образуется там, где велики, например, растягивающие упругие напряжения.

С помощью описанных выше соображений был построен целый ряд диффузных моделей трещин в упругой среде.

Второй способ, который далее будем называть «термодинамическим», основан на том, что изначально постулируется вид энергии среды с трещиной. Далее постулируются или выводятся в рамках рациональной термомеханики сплошной среды уравнения, определяющие динамику развития трещин и состояние вмещающей ее среды. Эти уравнения имеют стандартный вид, типичный для моделей диффузной границы — в частности, эволюция параметра порядка  $\phi$  обычно описывается классическим уравнением типа Алена-Кана.

Отметим, что оба способа тесно связаны — в том смысле, что с использованием механистического подхода могут быть построены термодинамически обоснованные модели. Однако их корректность необходимо доказывать апостериорно — в отличие от термодинамических моделей, которые корректны по построению.

Отметим, что ни один из этих двух способов не является априорно более правильным или менее правильным. В самом деле, в термодинамических моделях необходимо с самого начала указать вид энергии среды с трещиной — который априорно неизвестен и не может быть предсказан феноменологической термодинамической теорией. Понимание того, как устроена эта энергия, приходит при рассмотрении «механистических» моделей.

Вопросом, который не обсуждается явно в литературе — и обсуждению которого посвящена настоящая работа, — является следующий. Выбор выражения для плотности энергии  $\gamma_l$  и соответствующего функционала (2) неоднозначен и имеет известный произвол. Однако он должен быть выбран так, чтобы постановка задачи минимизации

$$\tilde{\mathcal{J}}_l = \int_{\Omega} \gamma_l d\Omega \rightarrow \min \quad (7)$$

с граничными условиями вида (5) была бы математически корректна.

В случае, когда «диффузный» объект является частью поверхности в трехмерном пространстве — то есть имеет коразмерность 1, — такие вопросы не возникают в силу того, что краевая задача обычно ставится в области, граница которой имеет естественную коразмерность 1 (является двумерной в трехмерном случае или одномерной в двумерном) — и в этом смысле ничем не отличается от границы  $\partial\Omega$  области  $\Omega$ ,  $\dim \Gamma = \dim \partial\Omega = 2$ . Очевидно, что если диффузный объект имеет бóльшую коразмерность, описанный выше вопрос должен приниматься во внимание.

Рассмотрим теперь модель диффузной границы канала пробоя, приведенную в [25]. По существу, она основана на формальном обобщении описанных выше построений для модели трещин. В частности, неявно предполагается, что поведение системы описывается функционалом энергии, который имеет вид (сравнить с (1))

$$\mathcal{J} = \mathcal{J}(\mathbf{u}, \Gamma) = \int_{\Omega \setminus \Lambda} W(\nabla \otimes \Phi) d\Omega + \kappa \mathcal{H}^{n-2}(\Lambda),$$

где  $\Phi$  — потенциал электрического поля,  $\mathcal{H}^{n-2}(\Lambda)$  —  $n - 2$ -мера Хаусдорфа,  $\kappa$  — энергия, отнесенная к единице длины канала пробоя. Значение размерности меры здесь вновь существенно. На этот раз она соответствует коразмерности 2, то есть конечна для одномерного объекта в трехмерном пространстве.

Ключевым моментом далее является вопрос о том, каким образом должна быть задана соответствующая часть энергии системы, то есть  $\gamma_l$ , что бы корректно аппроксимировать значения

$$\mathcal{H}^{n-2}(\Gamma) \approx \int_{\Omega} \gamma_l(\phi, \nabla \phi) d\Omega \quad (8)$$

с учетом граничных условий (5). Ответ на этот вопрос существенно зависит от коразмерности  $\Lambda$ . В частности, как будет показано ниже, используемое в теории трещин выражение вида (2) не может быть использовано в том случае, если  $\Lambda$  — линия в трехмерном пространстве или точка на плоскости.

Обратим внимание, что выражения (7) и (8) с учетом граничных условий (5), по существу, определяют емкость множества  $\Lambda$  относительно  $\gamma_l$ . Поэтому вопрос о корректности постановки рассмотренных задач минимизации тесно связан с теорией емкости множеств, в частности с вопросом о том, является ли емкость множества заданного вида положительной.

### 3 Формальное описание модели Питике

Опишем кратко предложенную в работе [25] математическую модель типа диффузной границы для описания распространения канала электрического

пробоя в твердом диэлектрике.

Рассмотрим ограниченную область  $\Omega$ , заполненную в начальный момент времени  $t = 0$  диэлектриком с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon = \epsilon_0(\mathbf{x}, t)$ . В ходе электрического пробоя происходит образование непосредственно канала пробоя — пространственной зоны, которая имеет вид цилиндрического канала малого радиуса. По аналогии с трещинами в упругой среде, эта зона рассматривается как нарушение сплошности среды. В соответствии с методом диффузной границы будем считать, что «поврежденность» среды описывается по крайней мере непрерывной скалярной функцией (фазовым полем или параметром порядка)  $\phi = \phi(\mathbf{x}, t)$ , заданной в области  $\Omega$ . Областью значений этой функции является отрезок  $[0, 1]$ , причем значение  $\phi = 0$  соответствует веществу в канале пробоя, значение  $\phi = 1$  — неповрежденной среде. Значения  $\phi \in (\epsilon, 1 - \epsilon)$ ,  $\epsilon \ll 1$  соответствуют диффузной границе, условно отделяющей канал пробоя ( $\phi = 0$ ) от неповрежденной среды ( $\phi = 1$ ). Уравнения, определяющие эволюцию параметра порядка  $\phi$ , выбираются так, что указанная область является малой трубчатой окрестностью линии в пространстве, которая соответствует оси канала пробоя. Эффективный диаметр этой окрестности является параметром модели.

Для идеального проводника, которым в рассматриваемой модели является канал пробоя, диэлектрическая проницаемость равна бесконечности. В рассматриваемой модели в соответствии с идеями метода диффузной границы она является конечной, но очень большой. Конкретно полагается

$$\epsilon = \epsilon[\phi](\mathbf{x}, t) = \frac{\epsilon_0(\mathbf{x})}{f(\phi(\mathbf{x}, t)) + \delta}. \quad (9)$$

Здесь  $\epsilon_0 = \epsilon_0(\mathbf{x})$  — диэлектрическая проницаемость «неповрежденной» среды (в точках которой  $\phi \equiv 1$ );  $f = f(\phi)$  — так называемая «интерполирующая функция» (или, в другой терминологии, «функция деградации»), регулирующий параметр  $\delta$  является малой положительной величиной,  $0 < \delta \ll 1$ . Его использование необходимо, чтобы избежать деления на ноль в точках пространства, где  $\phi = 0$ .

Основная роль функции  $f$  — интерполяция свойств среды и параметров задачи между значениями, соответствующими «чистым» фазам  $\phi = 0$  и  $\phi = 1$ . В рассматриваемом в [25] случае она выбрана как  $f(\phi) = 4\phi^3 - 3\phi^4$ . Необходимость использования такой функции типична для моделей типа диффузной границы, см., например, [38].

В связи с тем, что процесс развития канала пробоя является существенно более медленным, чем скорость распространения электромагнитных волн в среде, считается, что энергией магнитного поля в задаче можно пренебречь. В результате задача рассматривается в квази(электро)статической постановке и распределение электрического поля считается потенциальным.

В результате *постулируется* следующий вид выражения для свободной энергии:

$$\Pi = \int_{\Omega} \pi d\Omega, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \pi &= -\frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \mathbf{D} + \Gamma \frac{1 - f(\phi)}{l^2} + \frac{\Gamma}{4} \nabla \phi \cdot \nabla \phi = \\ &= -\frac{1}{2} \epsilon[\phi] \nabla \Phi \cdot \nabla \Phi + \Gamma \frac{1 - f(\phi)}{l^2} + \frac{\Gamma}{4} \nabla \phi \cdot \nabla \phi. \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь  $\mathbf{E} = -\nabla \Phi$  — напряженность электрического поля,  $\Phi$  — потенциал электрического поля,  $\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}$  — вектор электрической индукции. Величины  $\Gamma$  и  $l$  являются параметрами модели, смысл которых будет пояснен ниже.

Выражение для энергии (уравнение (11) выше) выбрано авторами формально и совпадает с таковым для энергии, используемой в диффузных моделях трещин.

В выражении (11) для плотности свободной энергии первое слагаемое — это электростатическая энергия элемента среды. Второе и третье слагаемые соответствуют энергии, отнесенной к единице длины канала пробоя. Они отвечают за образование и эволюцию канала пробоя как области пространства, в которой параметр порядка  $\phi \approx 0$ . Параметр  $l$  — характерный диаметр канала пробоя.

Параметрами состояния модели являются величины  $\Phi$ ,  $\phi$  и  $\nabla \phi$ , так, что

$$\pi = \pi(\Phi, \phi, \nabla \phi).$$

Такой характер зависимости типичен для моделей типа диффузной границы (именно поэтому их относят к классу *слабонелокальных* или *градиентных* теорий).

Полная система уравнений, которая описывает динамику системы в нестационарном случае, постулируется в виде

$$\frac{\delta \pi}{\delta \Phi} = 0, \quad (12a)$$

$$\frac{1}{m} \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\delta \pi}{\delta \phi}. \quad (12b)$$

В этой системе уравнений первое уравнение (12a) описывает распределение электрического потенциала  $\Phi$ . Второе — имеет вид простейшего уравнения для описания кинетики параметра порядка. В нем параметр  $m > 0$  — феноменологический параметр, который обычно называют подвижностью. Он имеет смысл скорости изменения величины под действием единичной приложенной силы. Уравнение (12b) формализует эмпирическое предположение о том, что

при отклонении от равновесного состояния пространственное распределение параметра порядка эволюционирует так, чтобы компенсировать отклонение. Это уравнение является эмпирическим феноменологическим уравнением, которое описывает кинетику параметра порядка и стандартно используется в тех случаях, когда параметр порядка — неконсервативная величина.

В развернутой форме уравнения (12) имеют вид:

$$\nabla \cdot (\epsilon[\phi] \nabla \Phi) = 0, \quad (13)$$

$$\frac{1}{m} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{1}{2} \epsilon'(\phi) \nabla \Phi \cdot \nabla \Phi + \frac{\Gamma}{l} f'(\phi) + \frac{1}{2} \Gamma \Delta \phi, \quad (14)$$

где  $(\cdot)' \equiv (\cdot)'_{\phi}$ , зависимость  $\epsilon = \epsilon(\phi)$  определена в соответствии с (9).

Здесь первое из уравнений представляет собой уравнение для потенциала электрического поля с диэлектрической проницаемостью, зависящей от распределения параметра порядка. Второе уравнение имеет вид уравнения типа Алена-Кана, которое определяет пространственную и временную эволюцию параметра порядка.

Равновесное состояние среды с энергией вида (11) определяется условиями равенства нулю вариаций по  $\Phi$  и  $\phi$ , которые являются условиями минимума функционала (10). Соответствующие уравнения Эйлера-Лагранжа формально соответствуют уравнениям (12) при  $1/m \rightarrow 0$  и имеют вид:

$$\nabla \cdot (\epsilon[\phi] \nabla \Phi) = 0, \quad \frac{1}{2} \epsilon'[\phi] \nabla \Phi \cdot \nabla \Phi + \frac{\Gamma}{l^2} f'(\phi) + \frac{\Gamma}{2} \Delta \phi = 0. \quad (15)$$

Для определения структуры диффузной границы, описываемой моделью (15), рассмотрим неограниченную среду, в которой ось канала пробоя является гладкой кривой  $\Lambda$ . Будем считать, что электрическое поле в среде отсутствует, а параметр порядка  $\phi$  удовлетворяет граничным условиям

$$\begin{aligned} \text{при } \mathbf{x} \in \Lambda : \quad \phi(\mathbf{x}) &= 0, \\ \text{при } \mathbf{x} \rightarrow \infty : \quad \phi(\mathbf{x}) &\rightarrow 1, \end{aligned}$$

и уравнению

$$\frac{\Gamma}{l^2} f'(\phi) + \frac{\Gamma}{2} \Delta \phi = 0 \quad (16)$$

в области  $\mathbb{R}^3 \setminus \Lambda$ . Решение этого уравнения описывает распределение параметра порядка, которое соответствует бесконечно тонкому прямому проводнику бесконечно малого диаметра. Здесь под проводником понимается множество точек пространства с  $\epsilon = \infty$ , что соответствует значению  $\phi = 0$ .

Пусть в пространстве введена цилиндрическая система координат  $\mathcal{O}r\theta z$ , где  $r$  — расстояние от точки пространства до оси  $\mathcal{O}z$ ,  $\theta$  — полярный угол. Далее будем считать, что канал пробоя совпадает с осью  $\mathcal{O}z$ , то есть  $\Lambda =$

$Oz$  и распределение параметра порядка  $\phi$  зависит только от радиуса, то есть  $\partial\phi/\partial\theta = \partial\phi/\partial z = 0$  и  $\phi = \phi(r)$ .

В работе [25] утверждается, что осесимметричное распределение параметра порядка удовлетворяет уравнению

$$f'(\phi) + \frac{l^2}{2} \frac{d^2\phi}{dr^2} = 0 \quad (17)$$

с заданными граничными условиями

$$\phi|_{r=0} = 0; \quad \phi|_{r \rightarrow +\infty} \rightarrow 1. \quad (18)$$

Интегрирование (17) приводит к уравнению

$$\frac{d\phi}{dr} = \frac{2}{l} \sqrt{1 - f(\phi)}. \quad (19)$$

В работе [25] уравнения (17) и (19) — это уравнения (13) и (14).

## 4 Анализ модели Питике

Описанная в предыдущем разделе модель является единственной известной авторам моделью, в которой модель диффузной границы применяется для описания объекта с коразмерностью 2. Способ ее построения является «механистическим», но сравнительно распространенным.

В целом, такой подход может быть использован, но его конкретная реализация в работе [25] является неверной. Точнее говоря, вид энергии, используемый для описания «диффузной» трещины, не может быть использован для описания «диффузного» канала пробоя. Как будет показано ниже, это связано с принципиальными математическими свойствами соответствующего выражения для энергии.

Во-первых, неверным является уравнение (17), которое позиционируется как уравнение, описывающей осесимметричное (то есть не зависящее от угла) распределение параметра порядка.

В самом деле, рассмотрим первичное уравнение (16) относительно фазового поля в трехмерной области, которая содержит бесконечно протяженный канал пробоя.

Легко заметить, что с учетом выражения

$$\Delta\phi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial\phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2\phi}{\partial\theta^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}, \quad (20)$$

для оператора Лапласа в цилиндрической системе координат  $Or\theta z$ , в рассмотренном в [25] осесимметричном случае  $\partial\phi/\partial z = \partial\phi/\partial\theta = 0$ , из уравнения (16) и выражения (20) следует, что

$$\frac{1}{l^2}f'(\phi) + \frac{1}{2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial\phi}{\partial r} \right) = 0, \quad (21)$$

или, после формального вычисления производной,

$$\frac{1}{l^2}f'(\phi) + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial\phi}{\partial r} + \frac{\partial^2\phi}{\partial r^2} \right) = 0. \quad (22)$$

Прежде всего отметим, что уравнения (21) и (22) не совпадают с уравнениями (17) и (19), приведенным в работе [25] как уравнения (13) и (14).

При этом легко заметить, что указанные уравнения (17) и (19) являются верными, но не в осесимметричном, а *плоском* случае коразмерности 1.

Эта ошибка являлась бы технической, если бы не следующие обстоятельства.

Для построения решения одномерного уравнения (22) в точке  $r = 0$  и при  $r \rightarrow +\infty$  ставятся граничные условия (18) относительно значения решения. Одновременно с этим значение осесимметричного решения уравнения (16) в точке  $r = 0$ , вообще говоря, не требует постановки такого граничного условия первого рода в точке  $r = 0$ , так как указанная точка принадлежит области определения уравнения (16). Естественным способом задания граничного условия при  $r = 0$  для уравнений (22) является, в силу осесимметричности задачи, граничное условие  $\partial\phi/\partial r = 0$ .

Хорошо известно, что постановка граничного условия при  $r = 0$  на значение решения при определении осесимметричных решений уравнения типа (16), вообще говоря, некорректна. Обоснованием этого утверждения является наличие в теории дифференциальных уравнений с частными производными и теории гармонических функций так называемых «теорем об устранимых изолированных особенностях». В частности, такой результат хорошо известен в теории гармонических функций.

Рассматриваемое здесь уравнение (16) не является уравнением Лапласа, но является полулинейным эллиптическим уравнением второго порядка. Рассмотрим его в двумерном случае (то есть при условии  $\partial\phi/\partial z = 0$ ). Требование осесимметричности решения в дальнейшем нам уже не понадобится. Для полулинейного уравнения вида (16) необходимая нам теорема приведена в работе [39] и формулируется следующим образом (см. также [40, 41]):

Рассмотрим уравнение (16) в двумерной области  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ . Пусть функция  $\phi = \phi(\mathbf{x})$  является его решением в области  $\Omega \setminus \omega(\mathbf{x}_0)$ , где  $\omega(\mathbf{x}_0)$  — произвольная сколь угодно малая окрестность точки  $\mathbf{x}_0 \in \Omega$ . Тогда  $\phi = \phi(\mathbf{x})$  может быть продолжено по непрерывности во всю область  $\Omega$  и будет удовлетворять в ней уравнению (16) тогда и только тогда, когда в окрестности точки  $\mathbf{x}_0$  решение  $\phi$  растет не быстрее, чем  $\mu(\mathbf{x}) = \ln(1/\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\|)$ , то есть при  $\lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_0} \phi(\mathbf{x})/\mu(\mathbf{x}) = 0$ .

Задание граничного условия  $\phi(\mathbf{x}_0) = \phi_0$  (в рассматриваемом случае  $\mathbf{x}_0 = 0$ ) обеспечивает выполнение этого условия. Тогда  $\phi(\mathbf{x})$  удовлетворяет уравнению (16) во всей области  $\Omega$ . Как следствие, решение (16) полностью определяется заданными на границе  $\partial\Omega$  области  $\Omega$  граничными условиями.

Для осесимметричной задачи, когда  $\Omega$  — круг (диск) заданного радиуса с центром в точке  $\mathbf{x}_0 = 0$ , и с учетом условий (18) при  $r \rightarrow +\infty$ , очевидно, что таким решением будет тривиальное, то есть  $\phi(\mathbf{x}) = 1$ .

Отсюда следует, что рассмотренная в работе [25] постановка является некорректной (безотносительно того, что в работе [25] уравнение для определения осесимметричного решения само по себе является неверным).

Таким образом, результаты представленные в работе [25], в частности уравнение (13), (14) и решение на рисунке 2 (ссылки даны в соответствии с [25]), являются неверными. Они представлены для *плоского* случая, который широко используется при построении моделей диффузной границы для трещин и является математически обоснованным.

Для этого случая, фактически рассмотренного в [25], постановка граничного условия, определяющего значения решения при  $r = 0$ , вполне возможна — множество точек  $r = 0$  здесь фактически является линией на плоскости (в двумерном случае) или плоскостью в пространстве (в трехмерном). Другими словами, уравнение (16) в этом случае рассматривается в полупространстве  $0 < x_1 < +\infty$ , где  $x_1 \equiv r$ .

Отметим, что уравнение (21) может быть формально аппроксимировано подходящей разностной сеткой на отрезке  $r \in [0, R]$  при заданном граничном условии Дирихле при  $r = 0$ . При этом численное решение будет иметь качественный вид, представленный на рисунке 2 в работе [25]. Однако, при измельчении шага будет наблюдаться полное отсутствие сеточной сходимости: при измельчении шага сетки решение будет «прижиматься» одновременно к осям  $\mathcal{O}r$  и  $\mathcal{O}z$ , стремясь к единице всюду, за исключением точки  $r = 0$ . Другими словами, производная численного решения в точке  $r = 0$  будет стремиться к бесконечности, в точке  $r = R \equiv 1$  — к нулю, см. рисунок 1.

Однако, как легко показать, это не так для решения уравнения (19). В самом деле, рассмотрим уравнение (19), которое соответствует одномерному плоскосимметричному случаю. При  $r \rightarrow 0$  имеем  $\phi \rightarrow 0$ , и из уравнения (19)

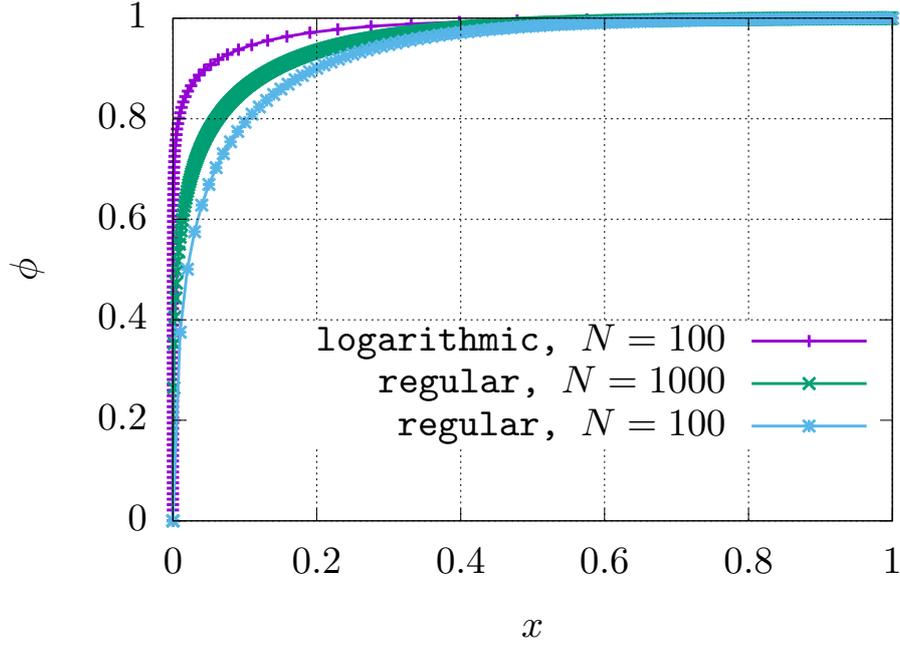


Рис. 1. Отсутствие сеточной сходимости при численном решении уравнения (21).

следует, что  $d\phi/dr \rightarrow 1$ . Аналогично, если уравнение (19) решается в области  $0 < r < R < +\infty$  с граничным условием  $\phi(r = R) = 1$ , то при  $r \rightarrow R$  имеем  $\phi \rightarrow 1$  и, как следствие,  $d\phi/dr \rightarrow 0$ .

Подчеркнем еще раз, что все эти проблемы не возникают при построении моделей диффузной границы теории трещин — в силу того, что трещины, являясь объектом коразмерности 1 (линией на плоскости или поверхностью в пространстве), не могут приводить к появлению *изолированных* особенностей.

Можно предположить, что эффект отсутствия численной сходимости не был обнаружен авторами работы [25] в силу того, что для построения профиля распределения параметра порядка в модельном случае, численно решалось не «первичное» уравнение (21) или (22), а уравнение (19), которое соответствует плоскому, а не осесимметричному случаю.

## 5 Способ исправления модели

Таким образом, на множестве  $\Lambda$  коразмерности 2, которым является канал пробоя, недопустима постановка граничных условий для уравнения (16). Соответственно, способ исправления модели основан на модификации выражения (11) для энергии системы так, что для соответствующего ему уравнения Эйлера-Лагранжа (16) постановка граничного условия Дирихле на  $\Lambda$

при  $\text{codim } \Lambda = 2$ , была бы возможна.

Проще всего это можно понять, рассмотрев уравнение (16) в контексте слабой (вариационной) теории краевых задач. Рассмотрим уравнение (16) в двумерной области  $\Omega$ , которая является односвязной и не содержит «выколотых» точек. В этом случае слабая постановка задачи (16) в двумерной области  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  имеет вид: определить функцию  $u \in V_0$ , такую, что

$$a(u, v) + (f'(u), v) = 0, \quad a(u, v) = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, d\Omega, \quad (f(u), v) = \int_{\Omega} f(u)v \, d\Omega, \quad (23)$$

для произвольной функции  $v \in V_0$ . Здесь пространство функций  $V_0 \subset V$  — пространство функций, имеющих требуемую гладкость и удовлетворяющих главным граничным условиям (Дирихле) на границе области (в нашем случае эти условия имеют вид  $u|_{\partial\Omega} = 0$ ),  $V$  — пространство всех достаточно гладких функций, определенных в области  $\Omega$ . Формально пространство  $V_0$  можно определить как замыкание бесконечно дифференцируемых в  $\Omega$  функций с компактным носителем по норме  $\|\cdot\|_V$  пространства  $V$ .

Далее для эллиптической задачи второго порядка (23) естественный класс гладкости решения — это  $V = W_2^1(\Omega)$ , то есть пространство Соболева суммируемых с квадратом функций, имеющих суммируемые с квадратом первые производные. Соответственно, пространство  $V_0 = W_{2,0}^1(\Omega)$ .

В соответствии с известной теоремой о следах (см. [42, 43]), для функций  $v \in H^1(\Omega)$  значение оператора следа определено *только* на достаточно гладких многообразиях коразмерности 1. Для многообразий коразмерности 2 — что представляет интерес в рассматриваемом нами случае, — след функций  $v \in H^1(\Omega)$  не может быть определен. Понятно, что в этом случае и граничное условие на таком многообразии не может быть задано.

Рассмотрим пространство Соболева  $W_p^q(\Omega)$ ,  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ,  $n = 3$ , которое в данном случае можно определить как пространство функций, которые имеют суммируемые со степенью  $p$  производные до порядка  $q$  включительно,

$$\|u\|_{W_p^q(\Omega)}^p = \sum_{|\alpha| \leq q} \|D^\alpha u\|^p, \quad \|\cdot\| = \|\cdot\|_{L_p(\Omega)},$$

где  $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$  — мультииндекс,

$$D^\alpha = \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{\alpha_1} \partial x_2^{\alpha_2} \dots \partial x_n^{\alpha_n}}, \quad |\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n.$$

Известно, что в соответствии с теоремами вложения,

$$W_p^q(\Omega) \subset C^{r,\alpha}(\Omega), \quad |\alpha| \leq q,$$

при условии

$$n < pq, \quad \frac{1}{p} - \frac{q}{n} = -\frac{r + \alpha}{n},$$

где  $C^{r,\alpha}(\Omega)$  — соответствующее пространство Гёльдера. Это означает, что функции, для которых величина  $pq$  достаточно велика, будут являться по крайней мере непрерывными. В рассматриваемом случае имеем  $n = 3$ , так что

$$pq > 3, \quad \frac{1}{p} - \frac{q}{3} = -\frac{r + \alpha}{n}.$$

Ограничиваясь минимальными натуральными значениями  $p$  и  $q$ , которые удовлетворяют последнему неравенству, имеем  $pq = 4$ , откуда:

$$\begin{aligned} p = 2, q = 2 : & \quad r = 0, \alpha = 1/2, \\ p = 4, q = 1 : & \quad r = 0, \alpha = 1/4. \end{aligned}$$

Таким образом, значение параметра порядка  $\phi$  будут определено на многообразии коразмерности 2, если из конечности значений функционала  $\pi$  будет следовать принадлежность  $\phi \in W_p^q(\Omega)$  с определенными выше значениями  $p$  и  $q$ . То есть,  $\phi \in W_2^q(\Omega)$  при  $q \geq 2$  и/или  $\phi \in W_p^1(\Omega)$  при  $p \geq 4$ .

В первом случае энергия  $\pi$  должна содержать по крайней мере слагаемое вида

$$\pi_{2,2} = \int_{\Omega} (\Delta\phi)^2 d\Omega.$$

Как следствие, уравнение Эйлера-Лагранжа будет включать в себя полигармонический член вида  $\Delta^2\phi$ . Во втором случае энергия  $\pi$  должна содержать по крайней мере член вида

$$\pi_{1,4} = \int_{\Omega} \frac{1}{p} \|\nabla\phi\|^p d\Omega, \quad p \geq 4.$$

Как следствие, уравнение Эйлера-Лагранжа будет включать в себя слагаемое вида  $\Delta_p\phi \equiv \nabla \cdot (\|\nabla\phi\|^{p-2}\nabla\phi)$ , (так называемый  $p$ -лапласиан). В дальнейшем для простоты ограничимся случаем  $p = 4$ .

Отметим, что постановки краевых задач для линейного полигармонического уравнения вида  $\Delta^k u = f$ ,  $k = 2, 3, \dots$ , в которых граничные условия задаются на множестве

$$\Gamma = \Gamma_0 \cup \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \dots,$$

где  $\Gamma_k$  — многообразие коразмерности  $k$ ,  $\dim \Gamma_k = k$ ,  $\text{codim} \Gamma_k = n - k$ ,  $n = \dim \Omega$ ,  $\Gamma_0 \equiv \partial\Omega$ , рассматриваются в работах [42, 44, 45, 46].

Таким образом, в случае, если кинетическое уравнение (12b) для описания динамики параметра будет включать в себя бигармонический оператор и/или  $p$ -лапласиан, то для его решения постановка граничных условий на многообразии коразмерности 1 (каковым является одномерный канал пробоя в трехмерной среде) будет иметь смысл.

Этот факт находит свое отражение в задачах механики упругих пластин — для таких задач постановка граничных условий в отдельных изолированных точках является вполне естественной.

Корректность постановки граничных условий для квазилинейного эллиптического уравнения с  $p$ -лапласианом рассмотрена в работе [47]. Отметим, что основные результаты теории краевых задач с граничными условиями, заданными на многообразиях высокой коразмерности, получены в основном в контексте теории емкости множеств. А именно, часто можно считать, что граничные условия на многообразии высокой коразмерности корректны для краевой задачи заданного вида, если соответствующее множество имеет положительную емкость относительно оператора задачи. В настоящее время теория (вырожденных) уравнений в частных производных в областях, границы которых включают в себя множества высокой коразмерности, является новой и активно развиваемой теорией на стыке теории уравнений с частными производными, теории емкости и геометрической теории меры, см., например, [48] и ссылки там.

## 6 Исправленная модель

Таким образом, формальное обобщение выражения для энергии системы, обеспечивающее корректность постановки задачи для диффузной модели канала пробоя, имеет вид:

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

$$\begin{aligned} \pi &= \pi(\Phi, \phi, \nabla\phi, \Delta\phi) \\ &= -\frac{1}{2}\epsilon[\phi]\nabla\Phi \cdot \nabla\Phi + \Gamma\frac{1-f(\phi)}{l^2} + \frac{\Gamma}{4}\nabla\phi \cdot \nabla\phi + \alpha\frac{\Gamma l^2}{8}(\Delta\phi)^2 + \beta\frac{1}{p}\Gamma l^{p-2}\|\nabla\phi\|^p, \end{aligned} \quad (24)$$

где  $p \geq 4$  — четное,  $\|\cdot\|$  — обычная евклидова норма в  $\mathbb{R}^3$ .

Параметры  $\alpha, \beta \geq 0$  являются положительными вещественными параметрами, неравными одновременно нулю,  $\alpha + \beta > 0$ .

Полная система уравнений, которая описывает динамику переменных  $\Phi$  и  $\phi$ , имеет вид (12) или, в конкретном рассматриваемом случае,

$$\nabla \cdot (\epsilon(\phi) \nabla \Phi) = 0, \quad (25a)$$

$$\frac{1}{m} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{1}{2} \epsilon'(\phi) \nabla \Phi \cdot \nabla \Phi + \frac{\Gamma}{l^2} f'(\phi) + \frac{\Gamma}{2} \Delta \phi - \alpha \frac{\Gamma l^2}{4} \Delta^2 \phi + \beta \Gamma l^{p-2} \nabla \cdot (\|\nabla \phi\|^{p-2} \nabla \phi). \quad (25b)$$

Априорно нельзя сказать, какое из регуляризирующих слагаемых в выражении (24) и в (25) является предпочтительным, в том числе с точки зрения численных свойств модели. Отметим только, что случай  $\alpha > 0$  и  $\beta = 0$  приводит к появлению в (25b) линейного бигармонического члена. Как будет показано ниже, его наличие приводит к тому, что решение задачи является гладким в окрестности  $\Lambda$ . Случай  $\alpha = 0$ ,  $\beta > 0$  приводит к появлению нелинейного члена второго порядка. При этом сама по себе указанная нелинейность не является априорно «плохим» эффектом — рассматриваемая модель и так является нелинейной, в том числе при  $\alpha, \beta = 0$ .

Следствием второго уравнения системы (25) является следующее модельное уравнение, описывающее эволюцию параметра порядка:

$$\frac{1}{m} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \alpha \frac{\Gamma l^2}{4} \Delta^2 \phi - \beta \Gamma l^{p-2} \nabla \cdot (\|\nabla \phi\|^{p-2} \nabla \phi) - \frac{\Gamma}{2} \Delta \phi - \frac{\Gamma}{l^2} f'(\phi) = 0. \quad (26)$$

При  $\beta = 0$  это уравнение широко известно и имеет название уравнения Свифта-Хохенберга. Оно является базовым уравнением в моделях фазового поля для описания кристаллов. Эти модели активно развиваются, начиная с фундаментальной работы [49], см. обзорные работы [14, 12]. Отметим, что оригинальная модель, предложенная в [49] содержит лишь бигармонический член.

Известный в литературе вывод уравнений типа Свифта-Хохенберга является физически обоснованным, а не механистическим в смысле раздела 1: слагаемое, пропорциональное  $\Delta^2 \phi$ , в выражении для энергии для этих моделей появляется из физических соображений, связанных с видом функции свободной энергии соответствующей атомарной системы, см., например, [12, 50]. Примеры моделей типа Свифта-Хохенберга, включающие в себя как бигармонические слагаемые, так и  $p$ -лапласиан, приведены в [51], см. также ссылки там.

В заключение, отметим следующее,

- Пример модели диффузной границы высокого порядка для трещин приведен в работе [36]. Мотивацией для использования такой модели в указанной работе является улучшение свойств гладкости решения и, как следствие, вычислительных свойств изogeометрического метода конечных элементов, применяемого для численного решения задачи. Таким

образом, цель сделанных в [36] обобщений является технической и не связана с корректностью модели диффузной границы как таковой.

- Как отмечается в работе [36], для моделей диффузной границы высокого порядка (с бигармоническим слагаемым) трещин в упругой среде не получены строгие и полные результаты, касающиеся  $\Gamma$ -предела модели. Другими словами, в отличие от классических моделей диффузной границы для трещин, для моделей высокого порядка не доказано, что они приближают (аппроксимируют) классическую модель Гриффитса развития тещины. Тем не менее результаты численных расчетов позволяют считать, что этот момент является техническим.

## 7 Вычислительные эксперименты

Система уравнений (25) является сильно нелинейной системой уравнений. В общем случае ее свойства неочевидны. Анализ свойств даже модельного уравнения для фазового поля является нетривиальной задачей, существенно выходящей за рамки настоящей работы. Поэтому в настоящем разделе рассмотрен ряд вычислительных экспериментов, отчасти компенсирующих этот недостаток. Они не являются строгим доказательством наличия у системы соответствующих свойств, однако по крайней мере обосновывают перспективность дальнейших теоретических исследований.

Рассмотрим уравнение (26) в стационарном случае:

$$\alpha \frac{\Gamma l^2}{4} \Delta^2 \phi - \beta \Gamma l^{p-2} \nabla \cdot (\|\nabla \phi\|^{p-2} \nabla \phi) - \frac{\Gamma}{2} \Delta \phi - \frac{\Gamma}{l^2} f'(\phi) = 0. \quad (27)$$

Пусть  $x_i = L \tilde{x}_i$ ,  $i = \overline{1, 3}$  где  $L$  — масштаб длины,  $\tilde{x}_i$  — безразмерные пространственные координаты. В этом случае последнее уравнение может быть записано в следующем (безразмерном) виде:

$$\alpha \frac{(l/L)^4}{4} \tilde{\Delta}^2 \phi - \beta (l/L)^p \tilde{\nabla} \cdot (\|\tilde{\nabla} \phi\|^{p-2} \tilde{\nabla} \phi) - \frac{(l/L)^2}{2} \tilde{\Delta} \phi - f'(\phi) = 0, \quad (28)$$

где  $\tilde{\nabla}$  и  $\tilde{\Delta}$  — операторы Гамильтона и Лапласа в безразмерных координатах. Выбирая масштаб длины  $L = l$ , получим (знак «тильда» далее опущен):

$$\alpha \frac{1}{4} \Delta^2 \phi - \beta \nabla \cdot (\|\nabla \phi\|^{p-2} \nabla \phi) - \frac{1}{2} \Delta \phi - f'(\phi) = 0. \quad (29)$$

Далее будем рассматривать это уравнение в безразмерном виде. Как уже отмечалось, это уравнение имеет богатое множество решений. Анализ их

свойств в данном конкретном случае существенно выходит за рамки настоящей работы и является предметом будущих исследований. Поэтому в настоящем разделе приведем численное исследование решений уравнения (29) в зависимости от значений входящих в него параметров. Отметим, что, в соответствии со способом вывода этого уравнения слагаемые высокого порядка имеют регуляризующую роль. Их назначение — сделать обоснованной постановку задачи с граничными условиями, заданными на многообразии координатности 2.

В ходе численного исследования нас интересует выполнение следующих критериев, которые можно считать характеристическими для параметра порядка в рассматриваемой задаче:

- область значения решения должна являться отрезком  $\phi \subset [0, 1]$ ;
- распределение параметра порядка должно быть монотонным;
- должна наблюдаться численная сходимость приближенных решений при разумном измельчении расчетной сетки;
- значения параметра порядка, близкие к нулю, должны быть локализованы в окрестности точки  $r = 0$ , то есть решение должно сравнительно быстро выходить на асимптотику  $\phi \rightarrow 1$ ,  $\partial\phi/\partial r \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow +\infty$ .

Отметим, что справедливость этих свойств в общем случае не очевидна для полулинейного уравнения рассматриваемого класса.

Численное исследование будет проводиться для модельного уравнения (29) в одномерном осесимметричном случае, которое соответствует ситуации, когда

- канал пробоя расположен вдоль оси  $Oz$  цилиндрической системы координат  $Or\theta z$ ;
- решение задачи (29) не зависит от вертикальной координаты  $Oz$  и является осесимметричным, то есть  $\partial\phi/\partial z = 0$  и  $\partial\phi/\partial\theta = 0$ .

В этом случае приходим к задаче определения решения уравнения (29), зависящего только от радиальной координаты  $r$  в цилиндрической области

$$\Omega = \{z \in \mathbb{R}, \theta \in (0, 2\pi], r \in (0, R)\}$$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} \text{при } r = 0 : \quad \phi(\mathbf{x}) = 0, \quad \left. \frac{\partial\phi}{\partial r} \right|_{r=0} &= 0, \\ \text{при } r = R : \quad \phi(\mathbf{x}) = 1, \quad \left. \frac{\partial\phi}{\partial r} \right|_{r=R} &= 0, \end{aligned}$$

при  $\alpha \neq 0$  и с граничными условиями

$$\begin{aligned} \text{при } r = 0 : \quad & \phi(\mathbf{x}) = 0, \\ \text{при } r = R : \quad & \phi(\mathbf{x}) = 1. \end{aligned}$$

при  $\alpha = 0$ .

В рассматриваемой осесимметричной постановке уравнение (29) имеет вид:

$$\alpha \frac{1}{4} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) \right] \right) - \beta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \left[ \frac{\partial \phi}{\partial r} \right]^{p-2} \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) - \frac{1}{2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) - f'(\phi) = 0. \quad (30)$$

Для численного решения задачи будем использовать разностную схему. Рассмотрим в области  $\Omega = [0, R]$  в общем случае неравномерную сетку с  $N$  узлами

$$0 = r_0 < r_1 < \dots < r_{N-2} < r_{N-1} = R.$$

Центры ячеек  $\omega_{i+1/2} = [r_i, r_{i+1}]$  будем обозначать как  $r_{i+1/2}$ ,

$$r_{i+1/2} = (r_i + r_{i+1})/2, \quad i = \overline{0, N-2}.$$

Эти узлы образуют двойственную сетку. Ее ячейки будем обозначать как  $\omega_i = [r_{i-1/2}, r_{i+1/2}]$ ,  $i = \overline{1, N-1}$ . Пусть далее  $\Delta r_{i+1/2} = |\omega_{i+1/2}| = r_{i+1} - r_i$ ,  $i = \overline{0, N-2}$  — шаг сетки,  $\Delta r_i = |\omega_i| = r_{i+1/2} - r_{i-1/2}$ ,  $i = \overline{0, N-2}$  — шаг двойственной сетки.

Далее значения сеточной функций  $\phi$ , отнесенные к целым и полужелым узлам, будем обозначать как  $\phi_i$  и  $\phi_{i+1/2}$  соответственно. Соответствующую сеточную функцию будем обозначать как  $\phi_h = (\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_{N-1})$ . В узлах «основной» сетки (с «целыми» узлами) конечно-разностная аппроксимация уравнений (30) будет иметь вид:

$$\alpha \frac{1}{4} \Delta_{\mathbf{h}}^2 \phi_{\mathbf{h}} - \beta \Delta_{\mathbf{p}, \mathbf{h}} \phi_{\mathbf{h}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{r_i} \cdot \frac{1}{\Delta r_i} \left[ r_{i+1/2} \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta r_{i+1/2}} - r_{i-1/2} \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta r_{i-1/2}} \right] - f'_i = 0,$$

где дискретный гармонический оператор  $\Delta_{\mathbf{h}}^2 \phi_{\mathbf{h}}$  в узле  $i$  вычисляется как

$$[\Delta_{\mathbf{h}} \phi_{\mathbf{h}}]_i = \frac{1}{r_i} \cdot \frac{1}{\Delta r_i} \left[ r_{i+1/2} \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta r_{i+1/2}} - r_{i-1/2} \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta r_{i-1/2}} \right], \quad i = \overline{1, N-2},$$

аппроксимация  $p$ -лапласиана — дискретный оператор  $\Delta_{\mathbf{p}, \mathbf{h}} \phi_{\mathbf{h}}$  — вычисляется по формуле:

$$[\Delta_{\mathbf{p}, \mathbf{h}} \phi_{\mathbf{h}}]_i = \frac{1}{r_i} \frac{1}{\Delta r_i} \left( r_{i+1/2} \left[ \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta r_{i+1/2}} \right]^{p-2} \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta r_{i+1/2}} - r_{i-1/2} \left[ \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta r_{i-1/2}} \right]^{p-2} \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta r_{i-1/2}} \right), \quad i = \overline{1, N-2},$$

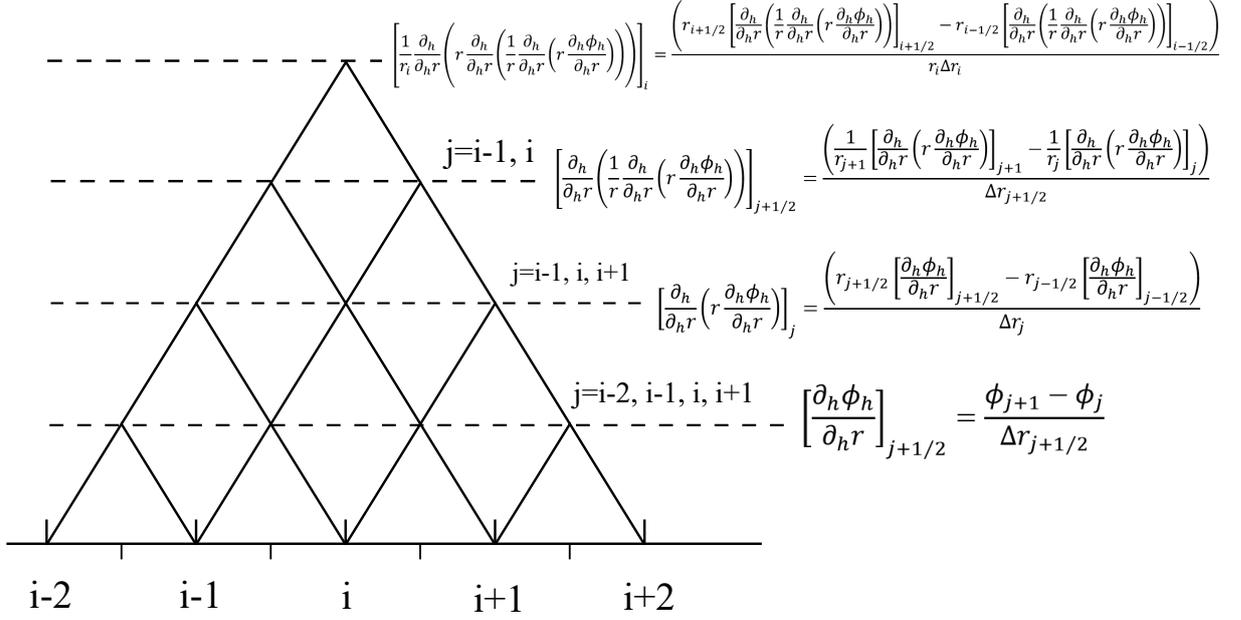


Рис. 2. Определение оператора  $\Delta_h^2 \phi_h$

дискретный бигармонический оператор  $\Delta_h^2 \phi_h$  определен как

$$[\Delta_h^2 \phi_h]_i = [\Delta_h \circ \Delta_h \phi_h]_i, \quad i = \overline{2, N-3},$$

см. рисунок 2.

Для обозначения конечноразностных аппроксимаций производных по  $r$  далее будем использовать обозначения:  $\partial_h \phi_h / \partial_h r$  для аппроксимации  $\partial \phi / \partial r$  и так далее.

В выражениях выше  $f'_i$  — значение производной функции деградации по параметру порядка в «целом» узле,

$$f'_i = f'(\phi_i).$$

При  $\alpha \neq 0$  построенные дискретные уравнения определены в узлах  $i = \overline{2, N-3}$  сетки, то есть во всех узлах, кроме двух первых и двух последних. В них заданы граничные условия:

$$\begin{aligned} \text{при } r = 0 : \quad \phi_0 = 0, \quad \left[ \frac{\partial_h \phi_h}{\partial_h r} \right]_0 &= 0, \\ \text{при } r = R : \quad \phi_{N-1} = 1, \quad \left[ \frac{\partial_h \phi_h}{\partial_h r} \right]_{N-1} &= 0, \end{aligned}$$

где разностная производная  $[\partial_h \phi_h / \partial_h r]_0$  вычисляется по трём первым узлам сетки со вторым порядком аппроксимации:

$$\left[ \frac{\partial_h \phi_h}{\partial_h r} \right]_0 = -\frac{2\Delta r_{1/2} + \Delta r_{1+1/2}}{\Delta r_{1/2}(\Delta r_{1+1/2} + \Delta r_{1/2})} \phi_0 + \frac{\Delta r_{1/2} + \Delta r_{1+1/2}}{\Delta r_{1/2} \Delta r_{1+1/2}} \phi_1 - \frac{\Delta r_{1/2}}{(\Delta r_{1/2} + \Delta r_{1+1/2}) \Delta r_{1+1/2}} \phi_2.$$

Для равномерной сетки с шагом  $\Delta r$  производная будет иметь вид:

$$\left[ \frac{\partial_h \phi_h}{\partial_h r} \right]_0 = \frac{-3\phi_0 + 4\phi_1 - \phi_2}{2\Delta r}.$$

Аналогично, производная  $[\partial_h \phi / \partial_h r]_{N-1}$  вычисляется по трём последним узлам сетки со вторым порядком аппроксимации.

При  $\alpha = 0$  построенные дискретные уравнения определены в узлах  $i = \overline{1, N-2}$  сетки, то есть во всех узлах, кроме первого и последнего. В них заданы граничные условия:

$$\begin{aligned} \text{при } r = 0 : \quad \phi_0 &= 0, \\ \text{при } r = R : \quad \phi_{N-1} &= 1. \end{aligned}$$

Построенная разностная схема является нелинейной. Для ее решения могут быть применены различные методы. В настоящей работе используется метод Ньютона. Итерации метода Ньютона продолжались до тех пор, пока значение 2-нормы невязки не уменьшилось по крайней мере в  $\varepsilon = 10^{-6}$  раз.

**Серия расчетов 1.** В этой серии расчетов исследуется зависимость качественного вида решения в зависимости от значений параметров  $\alpha$  и  $\beta$  уравнения (30). Эти параметры принимают значения

$$(\alpha, \beta) \in \{0, 10^{-2}, 10^{-1}, 1\}^2.$$

Расчетная область имеет длину  $R = 1$  в безразмерных координатах. Для проведения расчетов использовалась равномерная сетка с числом точек  $N = 100$ . На рисунке 3 приведены решения задачи. Анализ показывает, что все полученные решения монотонны, их значения принадлежат отрезку  $[0, 1]$ . Отметим, что в общем случае (при подходящих значениях параметров  $\alpha, \beta$  и виде интерполирующей функции  $f$ ), эти свойства могут не выполняться — известно, что решение обобщенного уравнения Колмогорова-Фишера является монотонным лишь при сравнительно малых  $\alpha$ , см., например, [52].

Строки таблицы графиков на рисунке 3 соответствуют изменению параметра  $\beta$ , столбцы — изменению параметра  $\alpha$ . Левый верхний рисунок соответствует значению параметров  $\alpha = \beta = 0$  и показывает формальное (не корректное, см. раздел 4) решение соответствующих уравнений.

**Серия расчетов 2.** В этой серии расчетов исследуется вид решения задачи при увеличении длины  $R$  расчетной области. Отметим, что случай неограниченного увеличения  $R$  соответствует постановке граничных условий на бесконечности.

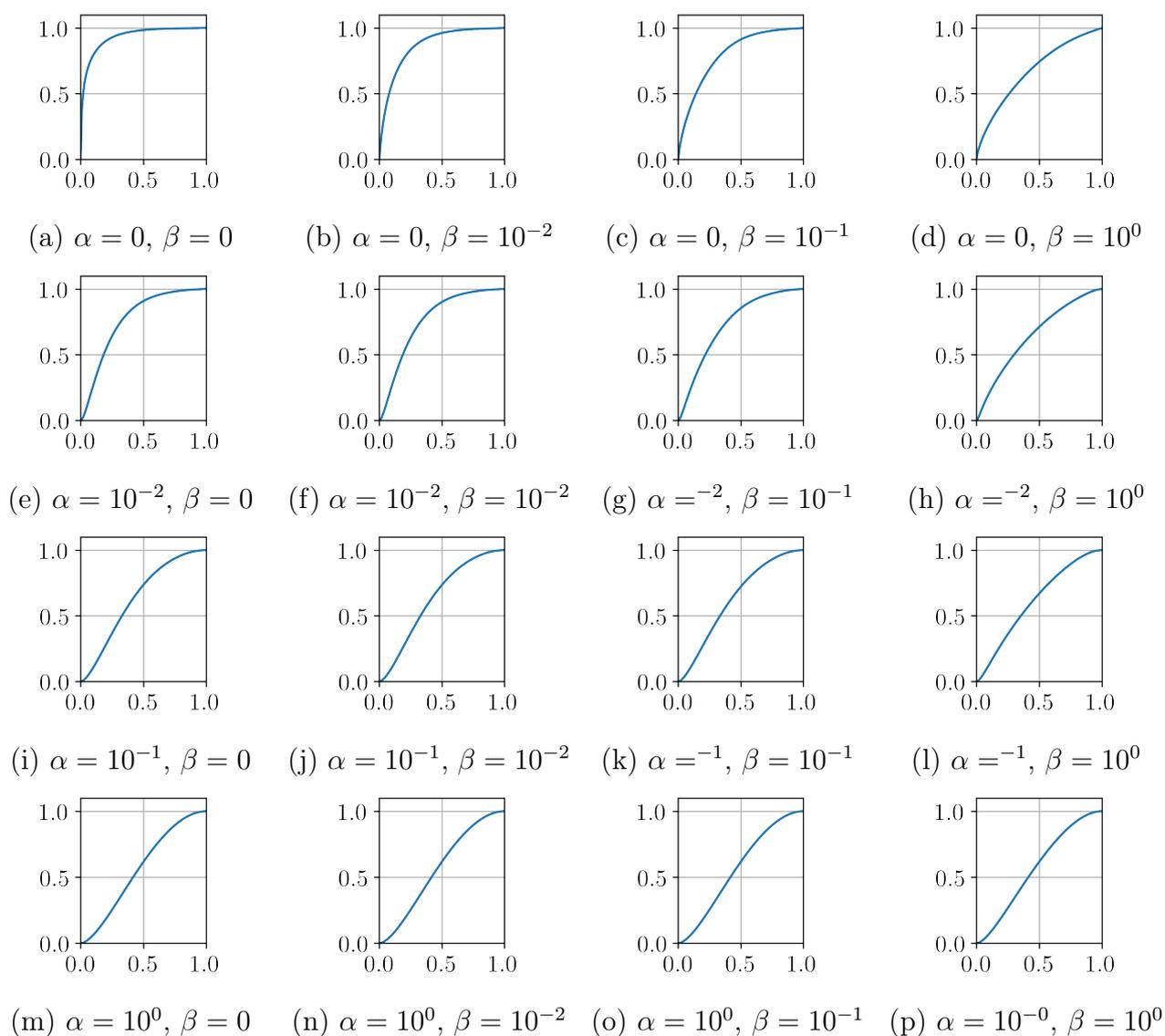


Рис. 3. Вид параметра порядка при  $(\alpha, \beta) \in \{0, 10^{-2}, 10^{-1}, 1\}^2$ .

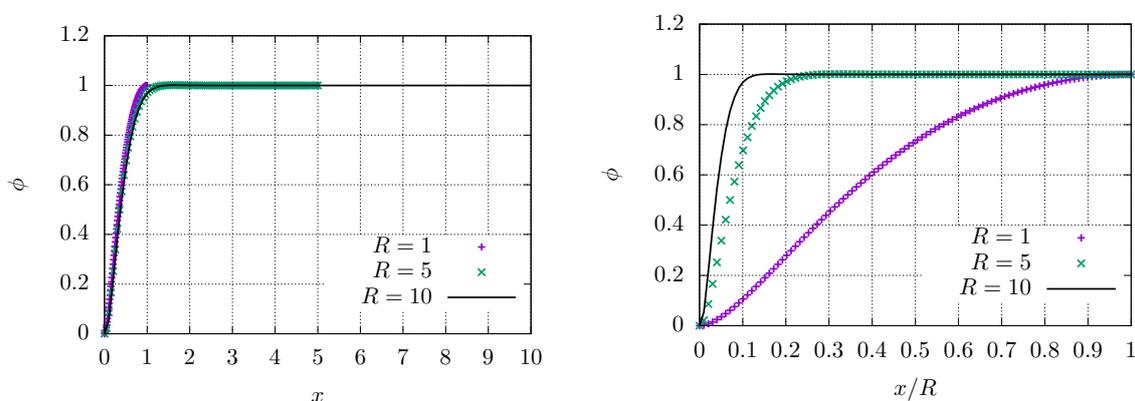


Рис. 4. Вид параметра порядка при  $R = 1, 5, 10$ . Линией показано решение при  $R = 10$ , маркерами — решение про  $R = 1, 5$ .

Для проведения расчетов выбрана равномерная сетка с числом точек  $N = 100$  и значения параметров  $\alpha = 0.1$ ,  $\beta = 0.01$ . Результаты расчетов для  $R = 1, 5, 10$  приведены на рисунке 4.

**Серия расчетов 3.** В этой серии расчетов исследуется сеточная сходимость задачи при  $\alpha = \beta = 0.0$  (когда она отсутствует) и при  $\alpha = 0.1$ ,  $\beta = 0.01$  (когда она ожидается, в соответствии с рассмотрением в предыдущих разделах). Для демонстрации разницы в характере сходимости этих двух случаев выбраны три сетки: две равномерные сетки с количеством точек  $N = 100$  и  $N = 1000$  — и адаптивная логарифмическая, где координаты узлов определены как  $r_i = (10^{-8})^{(N-1-i)/N}$ ,  $i = \overline{0, N-1}$ , с количеством точек  $N = 100$  (таким образом, минимальный шаг сетки в окрестности точки  $r = 0$  имеет величину  $\Delta \approx 10^{-8}$ ).

Расчетная область, как и ранее, имеет длину  $R = 1$  в безразмерных координатах.

Результаты расчетов приведены на рисунке 5. Хорошо видно, что в случае  $\alpha = \beta = 0.0$  при измельчении сетки численное решение приближается к решению с  $\phi = 0$ ,  $\partial\phi/\partial r \rightarrow \infty$  при  $r \rightarrow 0$  и  $\phi = 1$  — в остальных узлах сетки. При этом вид численных решений существенно изменяется при измельчении шага сетки. С учетом того, что решение задачи является гладким всюду в области своего определения, это говорит о практическом отсутствии сеточной сходимости при измельчении сетки. То есть численное решение задачи, поставленной в [25], при мельчении сетки стремится к распределению параметра порядка с бесконечно малой границей раздела сред. Это согласуется с теоретическим анализом раздела 4. В частности, это означает, что «толщина» диффузной границы не соответствует параметру  $l$  и никогда не разрешается сеткой.

При использовании регуляризованной модели характер сеточной сходимости принципиально иной: даже без использования адаптивной сетки она явно наблюдается даже при сравнительно скромных сеточных размерностях. Результаты расчетов демонстрируют сеточную сходимость и отражают тот факт, что «толщина» диффузной границы является параметром модели, а не артефактом вычислительного алгоритма, используемого для решения некорректно поставленной краевой задачи.

## 8 Заключение

В настоящей работе показано, что предложенная в работе [25], используется качественно неверное с математической точки зрения выражение для энергии диффузной модели динамики канала пробоя. Источником ошибки

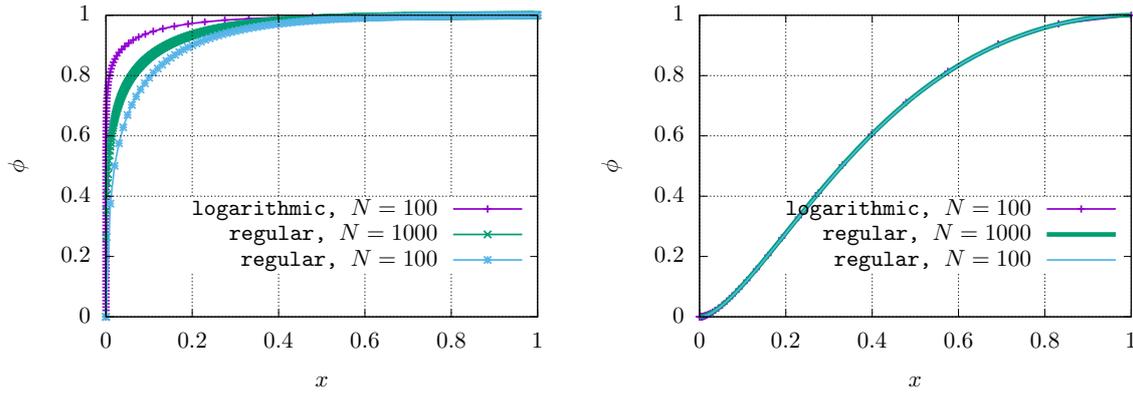


Рис. 5. Вид параметра порядка при разных численных сетках для параметров слева:  $\alpha = 0.0$ ,  $\beta = 0.0$ ; справа:  $\alpha = 0.1$ ,  $\beta = 0.01$

является, по всей видимости, формальный перенос результатов диффузных моделей теории трещин на случай канала пробоя. С математической точки зрения, это связано с тем, что при построении «новой» модели вид уравнений для описания диффузной границы переносится непосредственно, но одновременно математические свойства соответствующих уравнений радикально меняются в силу того, что меняется размерность границы, на которой ставится граничное условие.

Обратим внимание, что в работе [25] представлены результаты расчетов, которые можно охарактеризовать как вполне разумные. Это не противоречит рассмотренным в настоящем разделе вопросам. На практике некорректность модели будет заметна лишь при исследовании численной сходимости дискретных аппроксимаций соответствующих уравнений. Такие результаты не представлены ни в одной из цитированных выше работ, как теоретического, так и прикладного характера, см. [25, 26, 27, 28, 29, 30, 31]. В большинстве из них явно указывается, что расчеты были проведены с использованием коммерческого программного обеспечения.

Это подчеркивает тот факт, что при использовании моделей типа диффузной границы для получения содержательных результатов необходимо понимать, что толщина диффузной границы, измеренная в терминах параметра  $l$ , может быть сколь угодно малой — однако с точки зрения сеточных аппроксимаций, в терминах шага сетки  $h$ , она обязана быть достаточно большой, то есть разрешаться сеткой.

С теоретической точки зрения, можно ожидать, что использование неправильного выражения для энергии приведет к невозможности построения предела четкой границы и отсутствию  $\Gamma$ -сходимости решения диффузной модели к модели с четкой границей.

Наконец, главный, на взгляд авторов, вывод, который можно сделать из данной работы, заключается в том, что, по всей видимости, использование

моделей диффузной границы высокого порядка является *необходимым* в случае, когда «диффузный» объект является объектом коразмерности 2 или 3.

Несмотря на то что известны (цитируемые выше) работы, в которых модели диффузной границы применялись и ранее, их использование не носило характер принципиальной необходимости. Другими словами, они лишь количественно улучшали ранее известные модели «низкого» порядка. Так, например, в цитированной выше работе [36] их применение связано с повышением вычислительной эффективности и точности алгоритмов изогеометрического анализа.

В случае рассматриваемой здесь модели канала пробоя использование модели высокого порядка является необходимым условием их математической корректности.

## Список литературы

- [1] Lamorgese, A.G., Molin, D., Mauri, R. Phase Field Approach to Multiphase Flow Modeling // Milan Journal of Mathematics, vol. 79, pp. 597–642 (2011).
- [2] Kim, J. Phase-Field Models for Multi-Component Fluid Flows // Communications in Computational Physics, vol. 12, Iss. 3, 2012 , pp. 613–661.
- [3] Xu, Z., Meakin, P., Tartakovsky, A. Diffuse-interface model for smoothed particle hydrodynamics // Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics. 79. 036702. 2009.
- [4] Anderson, D., McFadden, G., Wheeler, A. Diffuse-Interface Methods in Fluid Mechanics // Annual Review of Fluid Mechanics. 30. 1997.
- [5] Santra, S., Mandal, S., Chakraborty, S. Phase-field modeling of multicomponent and multiphase flows in microfluidic systems: a review // International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, 2020.
- [6] Ambati, M., Gerasimov, T., De Lorenzis, L. A review on phase-field models of brittle fracture and a new fast hybrid formulation // Computational Mechanics, vol. 55, pp. 383–405. 2015.
- [7] Provatas, N., Elder, K. Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering. Weinheim, Germany: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. 2010.

- [8] Boettinger, W.J., Warren, J.A., Beckermann, C., Karma, A. Phase field simulation of solidification // *Annu. Rev. Mater. Res.* 2002. 32:163–194.
- [9] Cartalade, A., Younsi, A., Régnier, R., Schuller, S. Simulations of Phase-field Models for Crystal Growth and Phase Separation // *Procedia Materials Science*, vol. 7, 2014, pp. 72-78.
- [10] Gránásy, L., Rátkai, L., Szállás, A., Korbuly, B., Tóth, G.I., Környei, L., Pusztai, T. Phase-Field Modeling of Polycrystalline Solidification: From Needle Crystals to Spherulites — A Review // *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 45, pp. 1694–1719 (2014).
- [11] Gomez, H., Bures, M., Moure, A. A review on computational modelling of phase-transition problems // *Philos. Trans. A. Math. Phys. Eng. Sci.* 2019; 377(2143):20180203.
- [12] Emmerich, H., Löwen, H., Wittkowski, R., Gruhn, T., Tóth, G.I., Tegze, G., Gránásy, L. Phase-field-crystal models for condensed matter dynamics on atomic length and diffusive time scales: an overview // *Advances in Physics*, Vol. 61, No. 6, pp. 665–743. 2012.
- [13] Asadi, E., Zaem, M.A. A Review of Quantitative Phase-Field Crystal Modeling of Solid–Liquid Structures // *JOM*, Vol. 67, No. 1, 2015.
- [14] Provatas, N., Dantzig, J.A., Athreya, B., Chan, P., Stefanovic, P., Goldenfeld, N., Elder, K.R. Using the Phase-Field Crystal Method in the Multi-Scale Modeling of Microstructure Evolution // *JOM*, vol. 59, pp. 83–90 (2007).
- [15] Caginalp, G. Phase Field Models and Sharp Interface Limits: Some Differences in Subtle Situations // *Rocky Mountain J. Math.* 21 (1991), no. 2, pp. 603-615.
- [16] Elder, K.R., Grant, M., Provatas, N., Kosterlitz, J.M. Sharp interface limits of phase-field models // *Physical Review E*, vol. 64, iss. 2, 021604 (2001).
- [17] Abels, H., Lengeler, D. On sharp interface limits for diffuse interface models for two-phase flows // *Interfaces Free Bound.* 16(3), 395–418 (2014)
- [18] Abels, H., Liu, Y. Sharp Interface Limit for a Stokes/Allen–Cahn System // *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, vol. 229, pp. 417–502 (2018).
- [19] Rocca, E., Scala, R. A Rigorous Sharp Interface Limit of a Diffuse Interface Model Related to Tumor Growth // *Journal of Nonlinear Science*, vol. 27, pp. 847–872 (2017).

- [20] Dell’Isola, F., Gavrilyuk, S. L. (Eds.) Variational Models and Methods in Solid and Fluid Mechanics. SpringerWienNewYork, 2011, 358 p.
- [21] Bourdin, B., Francfort, G., Marigo, J.-J. The Variational Approach to Fracture // *J. Elasticity* (2008) 91:5–148.
- [22] Coleman, Bernard D. and Noll, Walter The thermodynamics of elastic materials with heat conduction and viscosity // *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 1963, No. 1, pp. 167-178, vol. 13.
- [23] Liu, I-S., Method of Lagrange multipliers for exploitation of the entropy principle // *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 46 (1972), 131–148.
- [24] Lowengrub, J., Truskinovsky, L Quasi-incompressible Cahn–Hilliard fluids and topological transitions // *Proc. R. Soc. Lond. A* (1998) 454, 2617–2654.
- [25] Pitike, K.C., Hong, W. Phase-field model for dielectric breakdown in solids // *Journal of Applied Physics* 115, 044101 (2014);
- [26] Hong, W., Pitike, K.C. Modeling breakdown-resistant composite dielectrics // *Procedia IUTAM* 12 (2015), pp. 73–82.
- [27] Cai, Z., Wang, X., Luo, B., Hong, W., Wu, L., Li, L. Nanocomposites with enhanced dielectric permittivity and breakdown strength by microstructure design of nanofillers // *Composites Science and Technology*. 151 (2017). pp. 109-114.
- [28] Cai, Z., Wang, X., Luo, B., Li, L. Hierarchical-structured dielectric permittivity and breakdown performances of polymer-ceramic nanocomposites // *Ceramics International*, vol. 44, iss. 1, 2018, pp. 843-848.
- [29] Cai, Z., Wang, X., Li, L., Hong, W. Electrical treeing: A phase-field model // *Extreme Mechanics Letters*. 28 (2019) pp. 87–95.
- [30] Cai, Z., Wang, X., Luo, L., Zhao, P., Zhu, C., Li, L. Laminated structure-induced high dielectric strength and energy storage density in dielectric composites // *Composites Science and Technology* 173 (2019) pp. 61–65.
- [31] Cai, Z., Wang, H., Zhao, P., Chen, L., Zhu, C., Hui, K., Li, L., Wang, X. Significantly enhanced dielectric breakdown strength and energy density of multilayer ceramic capacitors with high efficiency by electrodes structure design // *Appl. Phys. Lett.* 115, 023901 (2019)
- [32] Cherepanov, G.P., The propagation of cracks in a continuous medium // *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 31(3), 1967, pp. 503–512.

- [33] Anderson, T.L. Fracture Mechanics: Fundamentals and Applications. CRC Press. 1995.
- [34] Rice, J.R., A Path Independent Integral and the Approximate Analysis of Strain Concentration by Notches and Cracks // Journal of Applied Mechanics, 35, 1968, pp. 379–386.
- [35] Z. Suo, Models for breakdown -resistant dielectric and ferroelectric ceramics // J. Mech. Phys. Solids, 41, 1155-1176, 1993.
- [36] Borden, M.J. Hughes, T.J.R., Landis, C.V., Verhoosel, C.V. A higher-order phase-field model for brittle fracture: Formulation and analysis within the isogeometric analysis framework // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 273 (2014) 100–118.
- [37] Braides, A. Approximation of Free-Discontinuity Problems, Springer, Berlin, 1998.
- [38] 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 // Journal of the Mechanics and Physics of Solids 111 (2018) 458–489.
- [39] Cîrstea, F.C., Du, Y. Asymptotic behavior of solutions of semilinear elliptic equations near an isolated singularity // Journal of Functional Analysis 250 (2007) 317–346.
- [40] Hirata, K. Removable sets for continuous solutions of semilinear elliptic equations // Manuscripta Math., vol. 135, no. 1–2, pp. 245–262, (2011).
- [41] Hirata, K., Ono, T. Removable singularities and singular solutions of semilinear elliptic equations // Nonlinear Anal., vol. 105, pp. 10–23, (2014).
- [42] Соболев С.Л. Некоторые применения функционального анализа в математической физике - 3-е изд., перераб. и доп. - М. : Наука, 1988. - 333 с.
- [43] Adams, R., Fournier, J. Sobolev Spaces. Pure and Applied Mathematics, vol. 140. Academic Press, 2003.
- [44] О. А. Олейник, Т. А. Шапошникова, О задаче Дирихле для бигармонического уравнения в области, перфорированной вдоль многообразий малой размерности // Докл. РАН, 350:6 (1996), 742–745

- [45] О. А. Олейник, Т. А. Шапошникова, Об усреднении бигармонического уравнения в области, перфорированной вдоль многообразий малой размерности // Дифференц. уравнения, 32:6 (1996), 830–842;
- [46] Б. Ю. Стернин, Общие краевые задачи для эллиптических уравнений в области, границей которой служат многообразия различной размерности // Докл. АН СССР, 159:5 (1964), 992–994.
- [47] Lewis, J., Nyström, K. Quasi-linear PDEs and low-dimensional sets // J. Eur. Math. Soc. 20 (2018), 1689-1746.
- [48] David, G., Feneuil, J., Mayboroda, S. Elliptic theory in domains with boundaries of mixed dimension // arXiv:2003.09037v2[math.AP] 7 May 2020.
- [49] Elder, K.R., Katakowski, M., Haataja, M., Grant, M. Modeling Elasticity in Crystal Growth // Phys. Rev. Lett. 88, 245701. 2002.
- [50] Elder, K.R., Provatas, N., Berry, J., Stefanovic, P., Grant, M. Phase-field crystal modeling and classical density functional theory of freezing // PHYSICAL REVIEW B, 75, 064107 (2007).
- [51] Golovin, A.A., Nepomnyashchy, A.A. Disclinations in square and hexagonal patterns // Phys. Rev. E, 67:056202, 2003.
- [52] Bonheure, D., Juraj, F., Alberto, A. Qualitative properties of solutions to mixed-diffusion bistable equations. Calculus of Variations and Partial Differential Equations, Springer Verlag, 55, 2016.

# Содержание

|   |                                   |    |
|---|-----------------------------------|----|
| 1 | Введение                          | 3  |
| 2 | Общее обсуждение                  | 5  |
| 3 | Формальное описание модели Питике | 9  |
| 4 | Анализ модели Питике              | 13 |
| 5 | Способ исправления модели         | 16 |
| 6 | Исправленная модель               | 19 |
| 7 | Вычислительные эксперименты       | 21 |
| 8 | Заключение                        | 27 |