

# Моделирование кинетики накопления повреждений вероятностным клеточным автоматом

© Д.В. Алексеев, Г.А. Казунина

Кузбасский государственный технический университет,  
650026 Кемерово, Россия

E-mail: shsf@kuzstu.ru

(Поступила в Редакцию 24 февраля 2005 г.)

Для моделирования кинетики накопления повреждений и эволюции их кластерной структуры в нагруженных материалах предложен вероятностный клеточный автомат, контролируемый тремя вероятностями: заполнения свободной ячейки, прорастания периметра кластера и слияния кластеров, сблизившихся на критическое расстояние. Алгоритм автомата реализован на Microsoft Visual Basic 6.0 в виде однодокументного Windows-приложения с подключением Microsoft Excel в качестве клиента автоматизации для сохранения и обработки данных. Работа автомата проиллюстрирована на примере сравнения кинетики накопления повреждений и эволюции их кластерной структуры для двух сценариев моделирования.

PACS: 61.72.-y, 61.72.Bb, 61.72.Cc

## 1. Введение

Развитие исследований по прогнозированию разрушения материалов на основе акустической и электромагнитной эмиссии ставит принципиально важную задачу установления взаимосвязи между кинетическими процессами накопления элементарных повреждений и эволюции их многоуровневой иерархической структуры. Хотя иерархическая картина накопления повреждений подтверждена многочисленными исследованиями [1–5], временные кинетические зависимости распределения повреждений по размерам остаются еще недостаточно изученными. В частности, для описания кинетики накопления повреждений продолжается использование случайных процессов с независимыми приращениями (пуассоновский процесс, другие марковские процессы), хотя в работах [6,7] при помощи статистики нормированного размаха Херста для импульсной электромагнитной эмиссии нагруженных материалов установлено, что процесс накопления повреждений нельзя считать марковским.

Поскольку экспериментальное исследование иерархической структуры повреждений в динамике в настоящее время доступно только при помощи косвенных методов, таких как акустическая и электромагнитная эмиссия, компьютерное моделирование представляет фактически единственную возможность одновременного изучения случайного процесса импульсной эмиссии и эволюции иерархической кластерной структуры повреждений. В настоящее время для компьютерного моделирования эволюции ансамбля повреждений используются такие подходы как моделирование временных зависимостей потока элементарных актов разрушения [8], проращивание затравочных дефектов на целочисленной решетке методами случайного блуждания [9], объединение в кластеры случайно размещаемых элементарных трещин-отрезков [10,11]. В последнее время для моделирования кинетических процессов в конденсированных средах широко используются модели вероятностных клеточных

автоматов [12]. В настоящей работе простая модель вероятностного клеточного автомата применена для моделирования кинетического процесса накопления и кластеризации элементарных повреждений в нагруженных материалах.

## 2. Алгоритм моделирования и его реализация

Отличительной чертой используемого алгоритма моделирования является то, что временная зависимость числа элементарных повреждений и формируемых ими кластеров порождается изменением пространственной конфигурации элементарных повреждений за один временной шаг (цикл). Для моделирования пространственной конфигурации повреждений используется решетчатая модель, описывающая эту конфигурацию как кластеры на целочисленной решетке, построенные из квадратных ячеек. Каждая ячейка решетки может находиться в двух состояниях: неповрежденном (свободном) и поврежденном (занятом). Ядром алгоритма является генерация изменения конфигурации элементарных повреждений, осуществляемая путем перевода ячеек в поврежденное состояние тремя способами:

- 1) заполнение свободных ячеек решетки при сканировании решетки (контролируется вероятностью заполнения  $p_{occ}$ );
- 2) „проращиванием“ занятых ячеек по их периметру (контролируется вероятностью прорастания периметра  $p_{spr}$ );
- 3) слиянием ячеек разных кластеров, сблизившихся на критическое расстояние (контролируется вероятностью слияния  $p_{mer}$ ).

Вероятности, контролирующие работу клеточного автомата, могут быть как постоянными во времени и пространстве, так и переменными. Конкретный выбор поведения вероятностей определяет сценарий моделирования, простейшие из которых приведены в табл. 1.

**Таблица 1.** Сценарии моделирования накопления повреждений

Сценарий	Вероятности, контролирующие процесс
Однородный статический	Постоянные вероятности заполнения ячейки $p_{\text{осс}}$ прорастания периметра $p_{\text{spr}}$ и слияния кластеров $p_{\text{мер}}$ .
Неоднородный статический и внешний динамический	Постоянные вероятности прорастания периметра $p_{\text{spr}}$ и слияния кластеров $p_{\text{мер}}$ , зависящая от координат и времени (через механическое напряжение) вероятность заполнения ячейки $p_{\text{осс}}(x, t) = p_{\text{осс}} \exp(\gamma\sigma(x, t)/kT)$ .
Динамический внутренний	Постоянные вероятности заполнения ячейки $p_{\text{осс}}$ и слияния кластеров $p_{\text{мер}}$ , зависящая от размера кластера вероятность прорастания периметра <sup>1</sup> $p_{\text{spr}}(R) = p_{\text{spr}} \exp(\frac{\gamma\sigma}{kT} (\sqrt[4]{R^2} - \sqrt[4]{R_0^2}))$ .

Объединение занятых ячеек в кластеры осуществляется по некоторому правилу, определяемому только геометрией решетки. В качестве конечного состояния эволюции кластерной структуры элементарных повреждений выбирается конфигурация, в которой образуется кластер, соединяющий противоположные стороны решетки. Образование соединяющего кластера интерпретируется как разрушение блока, а число циклов, необходимых для образования соединяющего кластера, отождествляется с временем разрушения.

В рассматриваемой далее реализации алгоритма клеточного автомата объединение ячеек в кластеры проводится путем многократной маркировки кластеров на простой квадратной решетке по алгоритму Хошена–Копельмана<sup>2</sup>, а проращивание оккупированных ячеек по периметру кластера — по алгоритму Хаммерсли–Лиса–Александровица<sup>3</sup> (подробнее об этих алгоритмах см., например, в [13]).

Конфигурация кластерной структуры на решетке в конкретный момент времени задается числом кластеров и атрибутами каждого кластера. В качестве атрибутов кластера используются его масса  $M$  (число элементарных повреждений, образующих кластер), радиус цирку-

ляции  $R$  (среднеквадратичный радиус)

$$R^2 = 1/6 + \frac{1}{M} \sum_{(k)} ((x_k - \bar{x})^2 + (y_k - \bar{y})^2),$$

$$\bar{x} = \frac{1}{M} \sum_{(k)} x_k, \quad \bar{y} = \frac{1}{M} \sum_{(k)} y_k,$$

размахи по горизонтали и вертикали  $X, Y$  и локальная плотность (сплошность) кластера

$$\rho = \frac{M}{R^2} \frac{(X^2 + Y^2)}{12XY}.$$

Приведенные определения радиуса циркуляции и локальной плотности выбраны так, чтобы локальная плотность полностью заполненных прямоугольных кластеров равнялась единице. Кластерная структура в целом характеризуется при помощи функций распределения кластеров по массам и размерам, зависимостями между радиусом циркуляции и массой кластеров, зависимостями сплошности кластеров от их размера и т. п.

После выбора сценария моделирования и ввода его входных параметров каждый цикл алгоритма генерации случайного процесса накопления повреждений работает в следующей последовательности:

- 1) сливаются кластеры, сблизившиеся на критическое расстояние;
- 2) проращиваются периметры существующих кластеров по алгоритму Хаммерсли–Лиса–Александровица;
- 3) заполняются с заданной вероятностью свободные ячейки;
- 4) формируется кластерная структура оккупированных ячеек по алгоритму Хошена–Копельмана.

При этом в первом временном цикле два первых шага алгоритма отсутствуют.

В результате каждый временной цикл вносит по одной точке в два основных набора выходных данных:

- 1) число ячеек, занятых в последнем временном цикле;
- 2) число кластеров, сформировавшихся после последнего временного цикла.

При этом для более детального рассмотрения процесса число занятых на текущем шаге узлов разбивается на два слагаемых — число новых ячеек периметра и число новых одиночных ячеек. Все точки выходных данных формируют временные ряды числа занятых ячеек и числа кластеров, которые и являются конкретными реализациями рассматриваемых случайных процессов. По полученной реализации временных рядов вычисляются все их необходимые характеристики (статистика нормированного размаха Херста, корреляционные функции, функции распределения кластеров по массам и размерам и т. п.).

Ядро описанного алгоритма реализовано на Microsoft Visual Basic 6.0 в виде однодокументного Windows-приложения с программным подключением Microsoft Excel в качестве клиента автоматизации для сохранения

<sup>1</sup> Для получения последней формулы использовалась оценка напряжения вблизи периметра кластера через коэффициент интенсивности напряжения трещины–диска  $K = \sigma\sqrt{L}$  с линейным размером порядка радиуса циркуляции кластера.

<sup>2</sup> В этом алгоритме кластерная структура формируется путем построчного сканирования решетки, сопровождаемого присоединением занятых ячеек к левым и верхним кластерам, а также слиянием соприкасающихся кластеров.

<sup>3</sup> Шаг этого алгоритма осуществляется путем образования периметра кластера присоединением с заданной вероятностью к занятым ячейкам их ближайших соседей. В дальнейшем росте участвуют только новые ячейки периметра, а невошедшие в него ячейки всегда остаются свободными.

**Таблица 2.** Пользовательские объекты программного решения, их свойства и методы

Объект	Назначение	Свойства и методы	Базовый объект для реализации
Ячейка	Хранение данных о состоянии узла в текущий момент времени.	Координаты ячейки, номер кластера, метод визуального отображения ячейки в окне рисунка.	Модуль класса Visual Basic 6.0.
Кластер	Хранение данных о состоянии кластера в текущий момент времени.	Список всех ячеек кластера с фиксированным номером, масса, размах по горизонтали и вертикали, радиус циркуляции, сплошность.	Объект Collection (коллекция) Visual Basic 6.0, основанный на базовом объекте „Ячейка“ с функциями вычисления всех атрибутов кластера.
Периметр	Хранение данных о периметре кластера в текущий момент времени.	Список всех ячеек периметра кластера.	Основан на объекте „Кластер“.
Кластеры	Хранение данных о наборе кластеров.	Список всех кластеров в текущий момент времени.	Динамический массив объектов „Кластер“.
Периметры	Хранение данных о периметрах всех кластеров.	Список периметров всех кластеров в конкретный момент времени.	Динамический массив объектов „Периметр“.

и обработки выходных данных. Основные пользовательские объекты реализованного программного решения приведены в табл. 2. Подробности реализации на базе этих объектов таких составляющих алгоритма автомата как маркировка кластеров по Хошену–Копельману и прорастивание периметров кластеров по Хаммерсли–Лису–Александровицу приведены в [14], а дополнительные сведения о работе программного решения — в [15,16].

Тестирование реализованного программного решения проводилось в следующих предельных случаях:

- 1) кластеры Хошена–Копельмана (один временной цикл);
- 2) одиночный кластер Хаммерсли–Лиса–Александровица;
- 3) точно решаемая модель, в которой отсутствует прорастание периметров и слияние кластеров  $p_{spr} = p_{mer} = 0$ .

В последнем случае число занятых ячеек подчиняется уравнению

$$N_{n+1} = N_n + (N - N_n) \cdot p_{occ},$$

которое дает степенную зависимость плотности занятых ячеек от числа циклов  $d = N_n/N = 1 - (1 - p_{occ})^n$ .  $N$  — полное число ячеек в решетке.

Граничным условием для этого решения является образование соединяющего кластера при достижении критической плотности  $d_c \approx 0.59$ .

При малых значениях вероятности заполнения  $p_{occ} \ll 1$ , когда число циклов для образования соединяющего кластера достаточно велико, имеет место следующая связь между числом циклов и вероятностью заполнения:

$$\ln(n_{fin}) \approx -\ln(p_{occ}) + \ln(-\ln(1 - d_c)).$$

Полученная при тестировании зависимость полностью согласуется с данной моделью.

### 3. Примеры моделирования накопления повреждений

Далее приводится сравнение результатов моделирования накопления элементарных повреждений для двух качественно различных сценариев: однородного статического и динамического внутреннего. В однородном статическом режиме контролирующая работу автомата вероятности имели следующие значения:  $p_{occ} = 0.0005$ ,  $p_{spr} = 0.2$ ,  $p_{mer} = 0.2$ . В динамическом внутреннем режиме использовались те же значения вероятностей при подключении параметра роста вероятности прорастания периметра  $\alpha = (\gamma\sigma)/kT = 0.25$ . Моделирование проводилось на решетке размером  $256 \times 256$ , полученные выходные характеристики случайного процесса усреднялись по 10 реализациям.

Сравнение рассматриваемых режимов проводилось с использованием кинетических зависимостей числа занятых ячеек и числа кластеров функций распределения числа и массы кластеров по их сплошности, а также по временной зависимости плотности элементарных повреждений и зависимости массы кластеров от их радиуса циркуляции.

На рис. 1 приведен пример соединяющих кластеров для рассмотренных режимов моделирования. В случае динамического внутреннего сценария локальная плотность соединяющего кластера  $\rho = 0.27 \pm 0.02$  почти в 3 раза больше, чем для однородного статического сценария  $\rho = 0.10 \pm 0.01$ . При этом временные зависимости средней плотности элементарных повреждений  $d$  также существенно различаются (рис. 2). Для однородного статического режима имеет место линейный рост плотности вплоть до ее конечного значения  $d_c = 0.27 \pm 0.02$ , тогда как для динамического внутреннего режима имеет место экспоненциальный рост плотности, а ее конечное значение  $d_c = 0.37 \pm 0.02$ . При этом в обоих режимах конечная плотность элементарных повреждений суще-

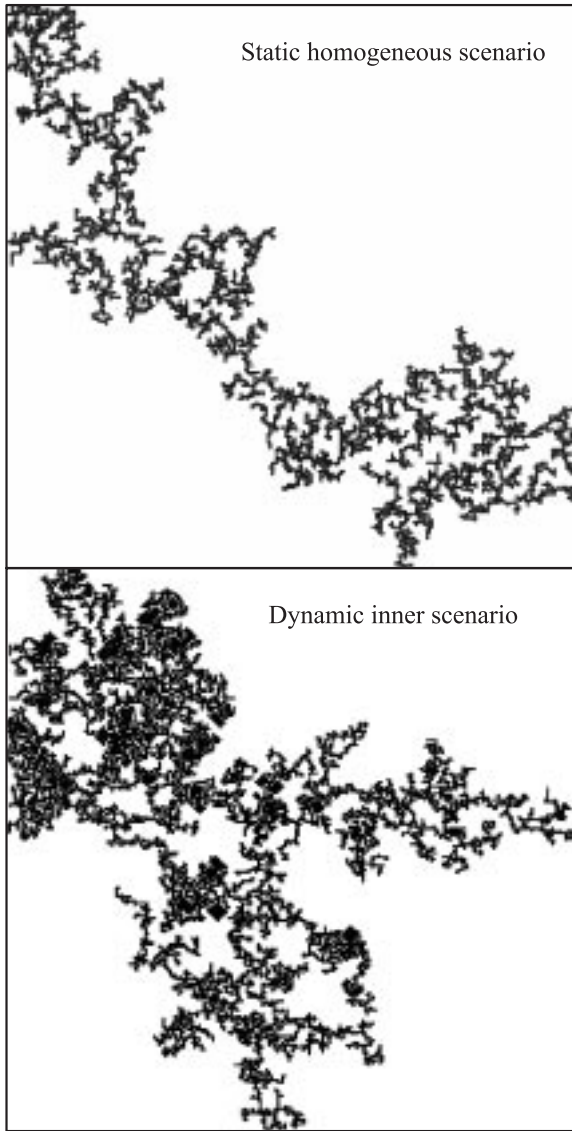


Рис. 1. Примеры соединяющих кластеров.

ственно ниже критической плотности порога перколяции на квадратной решетке  $d_c \approx 0.59$ .

Число циклов до появления соединяющего кластера  $n_{fin}$  для обоих рассмотренных сценариев определяется главным образом вероятностью заполнения ячейки, а от вероятностей „прорастания“ периметра и слияния кластеров, сблизившихся на критическое расстояние, зависит конечная плотность занятых ячеек. Для обоих режимов моделирования имеет место линейная зависимость между логарифмом вероятности заполнения  $\ln(p_{occ})$  и логарифмом числа циклов до появления соединяющего кластера  $\ln(n_{fin})$  (рис. 3).

Отметим, что когда для образования соединяющего кластера достаточно двух временных циклов — начального цикла оккупации и одного полного цикла алгоритма — между вероятностью оккупации и критической концентрацией элементарных повреждений имеет место соотношение  $d_c \approx p_{occ}$ .

Кинетическая зависимость числа кластеров (рис. 4) имеет вид асимметричного колокола, который четко разбивается на три участка: накопление числа кластеров по квадратичному закону, линейное убывание числа кластеров вплоть до момента появления соединяющего

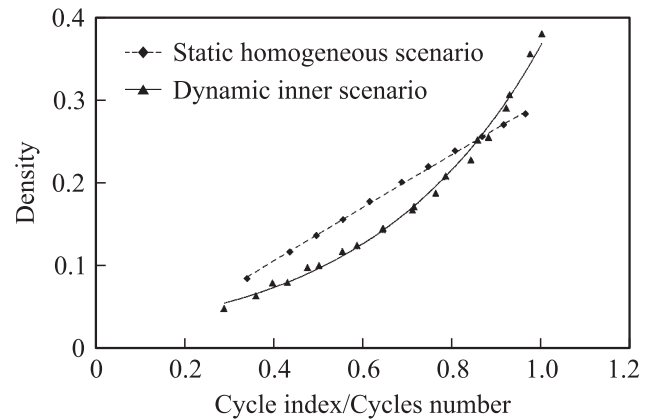


Рис. 2. Временные зависимости плотности занятых ячеек.

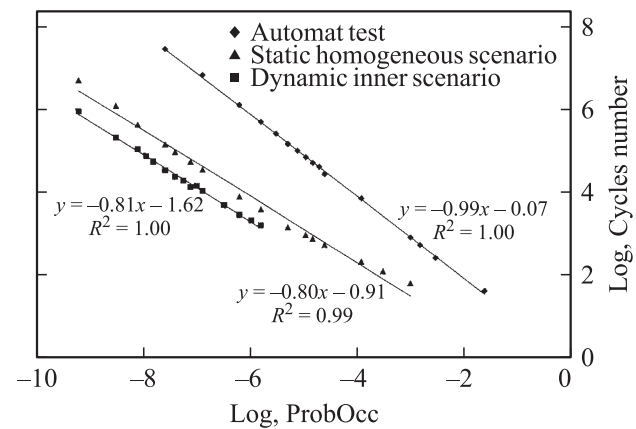


Рис. 3. Зависимость числа циклов от вероятности заполнения.

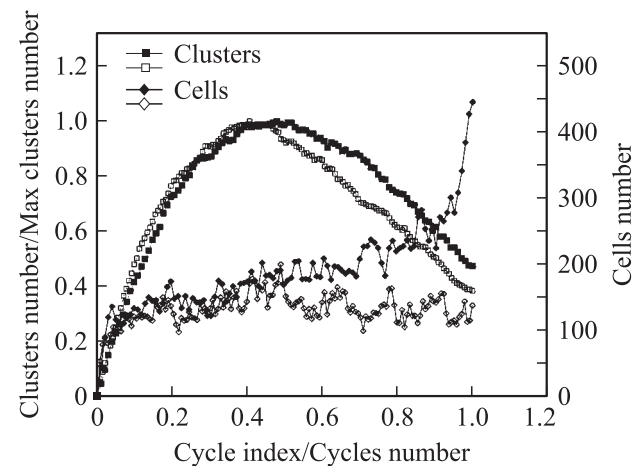


Рис. 4. Временные ряды заполнения ячеек и числа кластеров для однородного статического режима (светлые точки) и динамического внутреннего режима (темные точки).

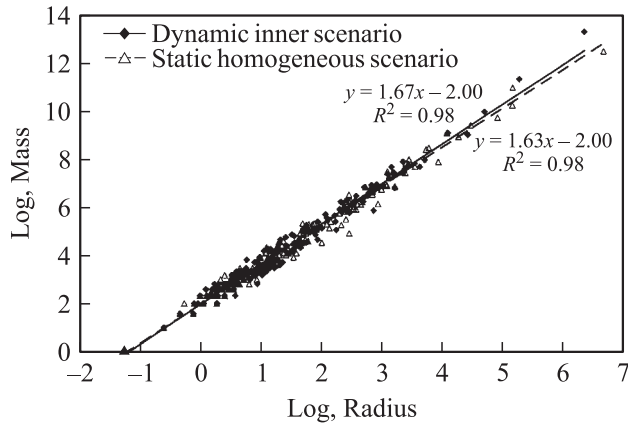


Рис. 5. Связь массы и размера кластеров.

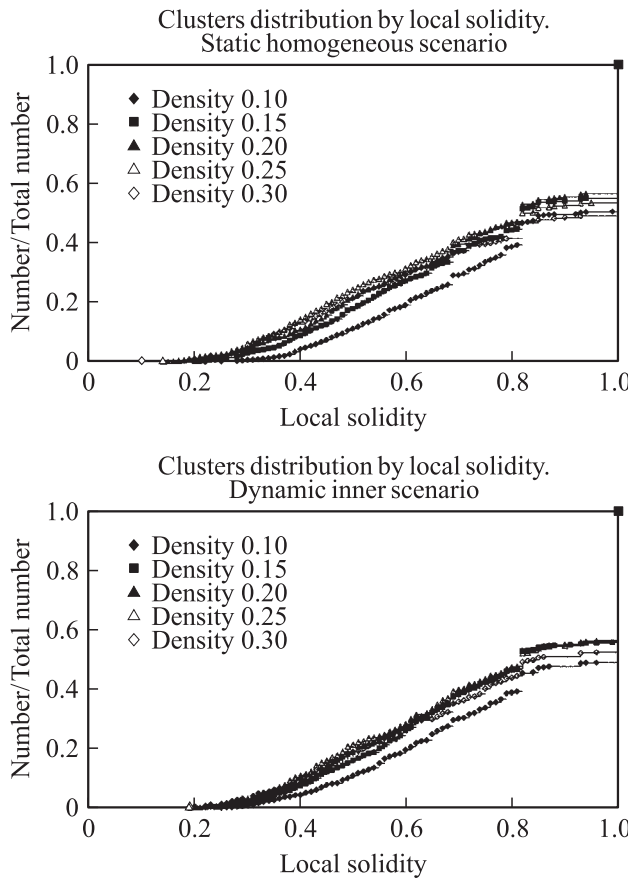


Рис. 6. Распределение числа кластеров по сплошности.

кластера и переходная зона между двумя указанными режимами.

При этом продолжительность квадратичного и линейного участков имеет примерно одинаковую длительность для однородного статического режима, а для динамического внутреннего режима начало линейного спада сдвинуто в сторону больших времен. Начало линейного участка кинетической кривой соответствует началу фазы эволюции системы, на которой формируется небольшое

число крупных кластеров, и поглощение ими мелких кластеров становится доминирующим.

Сравнение временных зависимостей для числа оккупированных ячеек показывает, что для однородного статического режима число занятых ячеек не имеет выраженного тренда от цикла к циклу, в то время как для динамического внутреннего режима число занятых ячеек растет от цикла к циклу, а скорость роста резко увеличивается перед образованием соединяющего кластера.

Одной из характеристик конфигурации кластеров элементарных повреждений, описывающих их фрактальную структуру, является зависимость массы кластера от его радиуса циркуляции [17]. Для обоих исследованных режимов эта зависимость в дважды логарифмических координатах является линейной (рис. 5) при значениях коэффициента детерминации  $R^2 > 0.98$  и точности определения коэффициентов наклона порядка 0.2%. Зависимость массы кластеров от радиуса описывается универсальной степенной зависимостью  $M(R) = 2^2 R^D$  со значениями показателя степени в интервале  $1.56 < D < 1.67$ . При этом показатель  $D$  возрастает с увеличением плотности занятых ячеек.

Более детальная информация о конфигурации кластеров содержится в функциях распределения числа и массы кластеров по их локальной плотности (сплош-

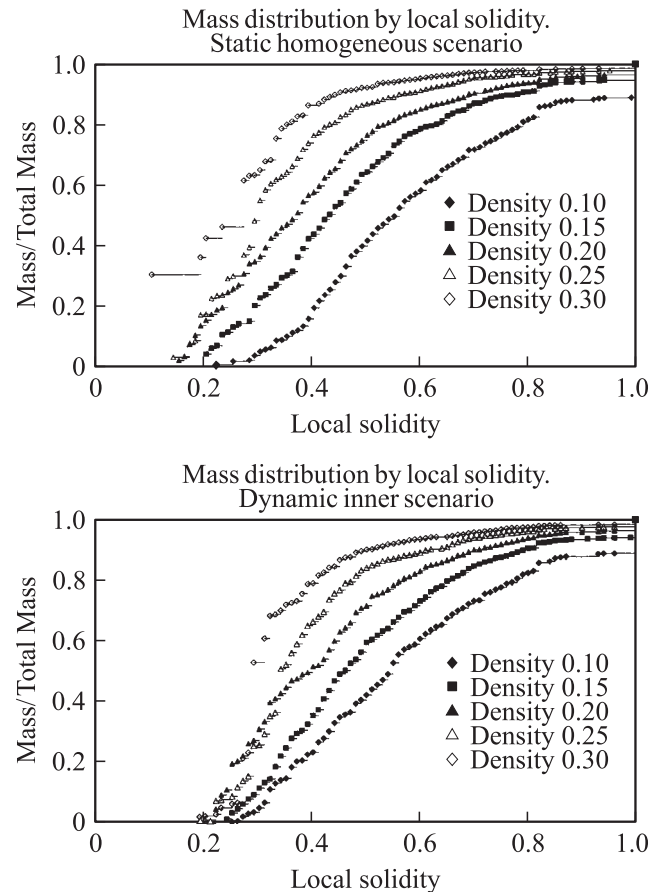


Рис. 7. Распределение массы кластеров по сплошности.

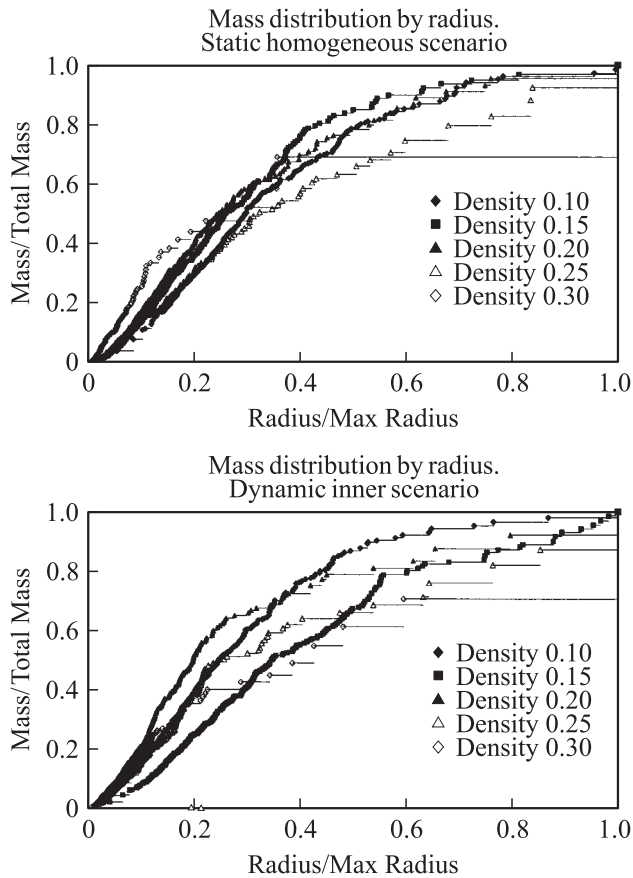


Рис. 8. Распределение массы кластеров по размерам.

ности) (рис. 6 и 7) и размеру (среднеквадратичному радиусу) (рис. 8).

Функция распределения числа кластеров по сплошности для обоих режимов имеет протяженный квазинепрерывный участок, практически совпадающий при всех значениях плотности занятых ячеек  $d > 0.10$ . Такое поведение функции распределения указывает на автомодельность процесса формирования кластерной структуры. Кроме того, из этой функции распределения видно, что доля мелких кластеров, которым соответствует значение сплошности, близкое к единице, на всем протяжении процесса составляет порядка 50%.

В противоположность этому функция распределения массы кластеров по сплошности, являясь квазинепрерывной для малых и средних плотностей элементарных повреждений, в ходе эволюции сильно смещается в сторону низких значений сплошности с образованием сильного скачка при приближении к моменту образования соединяющего кластера.

Поведение функций распределения массы кластеров по размерам для рассматриваемых режимов качественно различны. Так, близкое значение функций распределения массы кластеров при промежуточных плотностях (автомодельность) прослеживается лишь для однородного статического режима, тогда как для динамического внутреннего режима наблюдается „разбегание“ функций

распределения. Последнее можно объяснить тем, что для внутреннего динамического режима благодаря зависимости вероятности прорастания периметра от размера кластера по мере роста плотности элементарных повреждений средняя однородность системы разрушается уже вдали от порога формирования соединяющего кластера.

Однко в обоих рассмотренных сценариях отмечается наличие протяженных квазинепрерывных участков при значениях плотности, не превышающих примерно 70% от значения конечной плотности для каждого режима. При дальнейшем увеличении плотности для обоих рассмотренных режимов в функциях распределения все больше проявляется ступенчатая структура — происходит сокращение длины квазинепрерывного участка, сопровождаемое характерным увеличением ширины и высоты ступеней на хвосте функции распределения. Такое поведение функции распределения указывает на „вымирание“ кластеров промежуточных размеров по мере приближения системы к моменту образования соединяющего кластера. При этом длина ступеней функции распределения массы по размерам является случайной величиной, среднее значение которой возрастает по мере приближения к моменту образования соединяющего кластера, масса которого составляет величину порядка 30% от полной массы и превосходит среднюю массу кластеров на несколько порядков.

#### 4. Заключение

Приведенные примеры моделирования двух качественно различных режимов эволюции кластерной структуры ансамбля элементарных повреждений позволяют выделить следующие общие черты данного процесса.

1) Хотя общее число мелких кластеров в ходе эволюции убывает, их относительная доля в полном числе кластеров составляет около 50% вплоть до момента образования соединяющего кластера.

2) На конечной стадии эволюции почти 50% суммарного числа элементарных повреждений (полной массы кластеров) сосредоточивается в нескольких (менее десятка) кластерах, размеры которых более чем на порядок превосходят средний размер остальных кластеров.

3) На конечной стадии эволюции имеет место явление перемежаемости [18–20] — наличие широких и высоких ступеней у функции распределения массы кластеров по размерам.

Описанный общий характер эволюции кластерной структуры свидетельствует о том, что исследованные модели демонстрируют поведение, типичное для неравновесных систем, склонных к катастрофам [20], отличительной чертой которых являются степенные законы распределений вероятностей.

Кроме того, приведенные примеры моделирования показывают удобство использования вероятностных клеточных автоматов для моделирования эволюции ансамбля повреждений. Одним из направлений модификации рассмотренного клеточного автомата является



расширение используемых сценариев, который можно осуществлять путем комбинирования базовых сценариев табл. 1. При этом наибольший интерес представляют сценарии, включающие в качестве обязательной составляющей внутренний динамический режим, который позволяет реализовать моделирование динамической перколяции — включение зависимости вероятностей оккупации от текущего состояния всей кластерной структуры системы. Еще одним перспективным направлением модификации описанного клеточного автомата представляется его обобщение на случай, включающий более двух состояний отдельной ячейки — несколько уровней повреждения, подобно модели самоорганизованной критичности Бака–Тана–Визенфельда [21].

## Список литературы

- [1] С.Н. Журков, В.С. Куксенко, В.Н. Савельев, У. Султонов. Изв. АН СССР. Физика Земли **6**, 11 (1977).
- [2] С.Н. Журков, В.С. Куксенко, В.А. Петров. Докл. АН СССР **259**, 6, 1350 (1981).
- [3] В.А. Петров. ФТТ **25**, 10, 3110 (1983).
- [4] Н.Г. Томилин, Е.Е. Дамаскинская, В.С. Куксенко. ФТТ **36**, 10, 3101 (1994).
- [5] В.И. Веттегрень, В.С. Куксенко, Н.Г. Томилин, М.А. Крючков. ФТТ **46**, 10, 1793 (2004).
- [6] Д.В. Алексеев, П.В. Егоров. Докл. РАН **333**, 6, 769 (1993).
- [7] Д.В. Алексеев, П.В. Егоров, В.В. Иванов, А.А. Мальшин, А.Г. Пимонов. Физ.-техн. пробл. разраб. полезн. ископаемых **5**, 45 (1993).
- [8] Е.Е. Дамаскинская, Н.Г. Томилин. ФТТ **33**, 1, 278 (1991).
- [9] S. Nishiuma, S. Miyazima. Physica A **278**, 3–4, 295 (2000).
- [10] П.А. Мартынюк, Е.Н. Шер, Г.В. Башеев. Физ.-техн. пробл. разраб. месторождений полезн. ископаемых **4**, 52 (2000).
- [11] Е.Н. Шер. Физ.-техн. пробл. разраб. месторождений полезн. ископаемых **3**, 56 (2003).
- [12] Н.А. Ванаг. УФН **169**, 5, 361 (1999).
- [13] Х. Гулд, Я. Тобочник. Компьютерное моделирование в физике. Мир, М. (1990). Ч. 2. 399 с.
- [14] Д.В. Алексеев. Компьютерное моделирование физических задач в Microsoft Visual Basic. СОЛОН-Пресс, М. (2004). 528 с.
- [15] Д.В. Алексеев, Г.А. Казунина. Тр. междунар. конф. “Геодинамика и напряженное состояние недр Земли,». Институт горного дела СО РАН, Новосибирск (2004). С. 184.
- [16] Д.В. Алексеев, Г.А. Казунина. Материалы Всерос. семинара „Моделирование неравновесных систем“. Институт вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск (2004). С. 4.
- [17] Е. Федер. Фракталы. Мир, М. (1991). 260 с.
- [18] Г.Г. Малинецкий, А.Б. Потапов. Современные проблемы нелинейной динамики. УРСС, М. (2002). С. 358.
- [19] Г.Г. Малинецкий, А.В. Подлазов. Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика **5**, 5, 89 (1997).
- [20] А.В. Подлазов. Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика **9**, 1, 49 (2001).
- [21] P. Bak, C. Tang, K. Wiesenfeld. Phys. Rev. A **38**, 1, 364 (1988).