Прикладная математика и механика. Том 51, вып. 6, 1987

УДК 550.3 + 536.7

ДИНАМИКА НЕРАВНОВЕСНЫХ ФАЗОВЫХ ГРАНИЦ В ТЕПЛОПРОВОДНОЙ НЕЛИНЕЙНО-УПРУГОЙ СРЕДЕ

Трускиновский Л. М.

Фазовое превращение первого рода в нелинейно-упругой теплопроводной сплошной среде моделируется соотношениями на сильном разрыве. Дается обобщение постановки Стефана. Для неравновесных фазовых границ получено условие существования стационарного течения, аналогичное условию фазового равновесия Гиббса. В качестве модельных примеров рассматриваются чисто дилатационный фазовый переход в сжимаемой жидкости и чисто сдвиговое превращение типа двойникования в нелинейно-упругих кристаллах. Для замыкания системы соотношений на скачке решается задача о структуре.

Обычно фазовое превращение оказывается локализованным в узкой области пространства и его можно моделировать в терминах условий на сильном разрыве [1]. Постановка задачи о статическом равновесии жидких фаз, а также жидкой и (нелинейно-упругой) твердой фаз была дана Гиббсом, который предложил критерий фазового равновесия и сформулировал соответствующие условия на скачке; обобщение условий Гиббса на случай равновесия двух твердых фаз известно как в линейной [2], так и нелинейной [3] теории упругости. Динамическая задача о распространении равновесной фазовой границы рассматривается, как правило, в постановке Стефана, включающей предположение о непрерывности плотности (компонент тензора деформации) на скачке; при этом тепловая задача отделяется от механической. На скачке, моделирующем межфазную поверхность, температурные поля сшиваются при помощи известных условий Стефана, а также условия фазового равновесия, которое сводится к заданию температуры на фронте.

Цель работы — обобщение постановки Стефана—Гиббса на случай движения когерентной изотермической фазовой границы в нелинейно-упругой теплопроводной среде и вывод динамического аналога условия фазового равновесия (и условий Стефана) с учетом возможной диссипации на фронте превращения. Рассмотрены два диссипативных механизма — вязкий и кинетический. Случай равновесных фазовых границ разобран в [4—6].

1. Модель когерентной фазовой границы основана на предположении о непрерывности перемещений на фронте. Пусть $x^i = x^i(\xi^a)$ — закон деформирования упругого тела, x^i — эйлеровы декартовы координаты наблюдателя, ξ^a — лагранжевы координаты, совпадающие с эйлеровыми в отсчетном состоянии. Условие когерентности фазовой границы записывается в виде

$$[x] = 0 \tag{1.1}$$

где, как обычно, $[A] = A^+ - A^-$ — разность предельных значений функции на сторонах поверхности разрыва.

Система соотношений на покоящейся фазовой границе наряду с условием изотермичности

$$[T] = 0 \tag{1.2}$$

включает стандартное требование равенства усилий

$$[\partial f/\partial x_a{}^i]\, n_a{}^\circ = 0 \tag{1.3}$$

а также дополнительное скалярное условие фазового равновесия

$$[f] - \{\partial f/\partial x_a{}^i\}\,[x_a{}^i] = 0 \tag{1.4}$$

Здесь $f(x_a, T)$ — свободная энергия единицы массы, $x_a{}^i = \partial x^i/\partial\xi^a$ — тензор дисторсии, T — температура, $n_a{}^\circ$ — вектор единичной нормали к фазовой границе в отсчетной конфигурации, последняя принимается единой для обеих фаз; $\{A\} = {}^1/_2\,(A^+ + A^-)$.

Условия (1.1)—(1.4) позволяют определить равновесную двухфазную конфигурацию с неизвестной границей. В частном случае равновесия двух жидких фаз соотношение (1.4) сводится к известному в термодинамике условию равенства химических потенциалов $[f + pV] = 0$, где V — удельный объем, $p = -\partial f/\partial V$ — давление, непрерывное на фазовой границе в силу (1.3). Проблема статического равновесия формулируется как задача отыскания ломаной экстремали функционала свободной энергии, поэтому в (1.3), (1.4) нетрудно узнать классические условия Вейерштрасса — Эрдмана. Обычно (см. [3, 7, 8]) в условие, аналогичное (1.4), явно включается вектор нормали $n_a{}^\circ$, однако принятая здесь форма записи соотношений на ломаной экстремали также хорошо известна (см., например, [9—11]).

Для получения динамических условий на фазовом скачке выпишем систему уравнений движения теплопроводной нелинейно-упругой среды в лагранжевых координатах (в отсутствие массовых сил и тепловых источников)

$$(1.5)\qquad \rho^\circ \frac{\partial v_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \xi^a}\left(\rho^\circ \frac{\partial e}{\partial x_a{}^i}\right), \quad \rho^\circ \frac{\partial}{\partial t}\left(e + \frac{v^2}{2}\right) = \frac{\partial}{\partial \xi^a}\left(\rho^\circ \frac{\partial e}{\partial x_a{}^i} v^i\right) - \frac{\partial}{\partial \xi^a} q^{\circ a}$$

Здесь $e\ (x_a{}^i, s) = f + Ts$ — внутренняя энергия единицы массы, $x^i\ (\xi^a, t)$ — закон движения, s — плотность энтропии, $v^i = \partial x^i/\partial t$ — вектор скорости, $\rho^\circ\ (\xi^a)$ — плотность в отсчетной конфигурации, $q^{\circ a}$ — вектор притока тепла.

Допустим, что фазы характеризуются различным видом зависимости функции e от своих аргументов; иногда можно говорить об одной (невыпуклой) функции, определенной на неодносвязанной или даже несвязной области. Когерентным двухфазным состояниям отвечают разрывные ($[x^i] = 0$, $[x_a{}^i] \neq 0$, $[s] \neq 0$) решения системы (1.5). На скачке должны выполняться условия Гюгонио

$$(1.6)\qquad \left[\rho^\circ D^\circ v^i + \rho^\circ \frac{\partial e}{\partial x_a{}^i} n_a{}^\circ\right] = 0, \quad \left[\rho^\circ D^\circ\left(e + \frac{v^2}{2}\right) + \rho^\circ \frac{\partial e}{\partial x_a{}^i} v^i n_a{}^\circ\right] = [q^{\circ a} n_a{}^\circ]$$

где D° — скорость скачка в отсчетной конфигурации; поверхностными эффектами пренебрегаем. С учетом возможной диссипации энергии на скачке, обусловленной вязкостью, теплопроводностью, неравновесностью превращения и т. д., условие баланса энтропии можно представить в виде [1]

$$(1.7)\qquad [\rho^\circ D^\circ s] = [q^{\circ a} n_a{}^\circ/T] + \mathbf{R}^\circ$$

где $\mathbf{R}^\circ$ — производство энтропии на единицу площади поверхности разрыва в отсчетной конфигурации.

Полагая вслед за Стефаном, что время теплопередачи внутри фронта превращения много меньше времени прогрева области с характерным линейным размером внешней задачи, будем считать температуру на скачке непрерывной (см. (1.2)). Можно показать, что соотношений (1.2), (1.6) оказывается недостаточно для определения по состоянию перед скачком параметров за скачком и скорости скачка. Если скачок эволюционный, единственное разрывное решение может быть иногда построено с привлечением соотношения (1.7), которое формулируется как неравенство $\mathbf{R}^\circ \geqslant 0$. Для определения скорости фронта в рассматриваемом случае дозвукового движения необходимо располагать дополнительным соотношением на разрыве, например (как это делается в теории волн дефлаграции), можно явно задавать скорость скачка D° или диссипацию $\mathbf{R}^\circ T$.

Полагая, что $\mathbf{R}^\circ$ — известная функция параметров течения, получим из (1.2), (1.6), (1.7) соотношение, служащее аналогом (1.4). Воспользуемся условиями совместности Адамара

$$(1.8)\qquad [x_a{}^i] = \lambda^i n_a{}^\circ, \quad [v^i] = -\lambda^i D^\circ$$

которые являются следствиями (1.1) и исключим из (1.6), (1.7) выражение $[q^{ca} n_a{}^\circ]$. После преобразований получим

$$(1.9)\qquad \rho^\circ D^\circ \left(([f] - (\partial f/\partial x_a{}^i)_\pm [x_a{}^i]) \mp {}^1\!/_2 [v_i][v^i]\right) = -\mathbf{R}^\circ T$$

Это условие может быть, очевидно, переписано в виде

$$(1.10)\qquad \rho^\circ D^\circ ([f] - \{\partial f/\partial x_a{}^i\} [x_a{}^i]) = -\mathbf{R}^\circ T$$

Соотношение (1.10) служит искомым обобщением (1.4). Отметим, что в случае равновесных (бездиссипативных) фазовых скачков статическое условие (1.4) и динамическое условие (1.10) тождественно совпадают.

Допустим, что в пространстве тензоров $x_a{}^i$ точки $x_a{}^{i+}$ и $x_a{}^{i-}$ могут быть соединены гладким путем, целиком лежащим в области определения функции $f(x_a{}^i, T)$. Тогда, преобразуя левую часть (1.10), получим

$$(1.11)\qquad {}^1\!/_2 \rho^\circ D^\circ \left(\int\limits_{x_a^{i-}}^{x_a^{i+}} \left(\frac{\partial f}{\partial x_a{}^i} - \frac{\partial f}{\partial x_a{}^i}\Big|_+ \right) dx_a{}^i + \int\limits_{x_a^{i-}}^{x_a^{i+}} \left(\frac{\partial f}{\partial x_a{}^i} - \frac{\partial f}{\partial x_a{}^i}\Big|_- \right) dx_a{}^i \right) = -\mathbf{R}^\circ T$$

Для бездиссипативных фазовых скачков в жидкой среде условие (1.11) задает обобщенное «правило площадей Максвелла» [12]

$$(1.12)\qquad \int\limits_{V-}^{V+} (p - p_+)\, dV + \int\limits_{V-}^{V+} (p - p_-)\, dV = 0$$

При помощи (1.6), (1.7), (1.10) может быть получено условие баланса энергии на скачке в виде

$$(1.13)\qquad \rho^\circ D^\circ (T[s] + ([f] - \{\partial f/\partial x_a{}^i\} [x_a{}^i])) = [q^{ca} n_a{}^\circ]$$

Оно отличается от классического условия Стефана тем, что тепловой эффект превращения рассчитывается с учетом диссипируемого тепла.

Для замыкания системы соотношений на фазовом скачке необходимо определить величину $\mathbf{R}^\circ$, привлекая дополнительную информацию о неравновесных процессах в межфазной области и решая задачу о структуре разрыва. В некоторых случаях могут быть использованы феноменологические модели, содержащие эмпирически определяемые параметры.

Введем по определению $[\mu] \equiv [f] - \{\partial f/\partial x_a{}^i\} [x_a{}^i]$ и заметим, что выражение $m_0 = -\rho^\circ D^\circ$ задает поток массы через фазовую границу. Тогда условие (1.10) может быть переписано в виде $m_0 [\mu] = \mathbf{R}^\circ T$. Это соотношение напоминает формулу для объемной диссипации в однородной химически реагирующей смеси (мономолекулярная реакция); состоянию равновесия отвечает равенство нулю «термодинамической силы»: $[\mu] = 0$. В пределе слабой неравновесности «потоки» и «силы» можно связать линейным соотношением

$$m_0 = \gamma_0^{-1} [\mu], \quad T\mathrm{R}^\circ = \gamma_0^{-1} [\mu]^2 = \gamma_0 m_0^2$$

Задача исследования структуры сводится в этом приближении к определению единственного параметра γ_0. По указанному принципу строится теория «нормального» роста кристаллов из переохлажденного расплава и теория неравновесной конденсации Герца — Кнудсена.

2. Переход от (1.10) к (1.4) для равновесных фазовых границ осуществляется в предположении о ненулевом потоке массы через поверхность, поэтому найденные таким образом условия статического равновесия требуют дополнительного обоснования. Для разъяснения этого вопроса дадим независимый вариационный вывод условий на фазовом скачке, имея также в виду возможное обобщение на случай некогерентных превращений. Это позволит получить естественную тензорную запись соотношения (1.10).

Чтобы упростить изложение и избежать несущественных деталей, ограничимся рассмотрением изотермической задачи, полагая $T \equiv T_0$, и пренебрежем диссипацией. Дальнейший анализ удобно провести в четырехмерном виде, дополняя три пространственные лагранжевы координаты ξ^a ($a = 1, 2, 3$) четвертой — временной $\xi^4 = t$. Греческими индексами будем обозначать координаты в R^4 ($\alpha, \beta = 1, 2, 3, 4$), латинскими — в R^3.

Уравнения движения и граничные условия на фронте превращения могут быть получены при помощи вариационного принципа Гамильтона — Остроградского [1, 9]

$$(2.1) \qquad \delta \int\limits_{V^4} \Lambda^\circ (x_a{}^i, x^i, \xi^\alpha, T_0)\, d^4\xi = 0, \quad \Lambda^\circ = \rho^\circ (v^2/2 - f)$$

Допустим, что $V_3(t)$ — трехмерный объем, занимаемый средой в отсчетной конфигурации, ∂V_3 — его внешняя поверхность, V_4 — четырехмерный объем, образованный положениями V_3 в разные моменты времени $t \in (t_1, t_2)$. Пусть внутри объема V_3 имеется двумерная, поверхность сильного разрыва $\Sigma_2(t)$, которая перемещается по частицам вещества, образуя в R^4 трехмерную поверхность $\Sigma_3 \subset V_4$. Положение поверхности Σ_3 может быть задано набором функций: $\bar\xi^a = \bar\xi^a(u^A, t)$, $\bar t = t$, где u^A — координаты на Σ_2, $A = 1, 2$.

Рассмотрим вариации закона движения частиц среды: $\delta x^i = x^{i'}(\xi^a, t) - x^i(\xi^a, t)$, а также вариации положения поверхности сильного разрыва по частицам: $\delta\bar\xi^\alpha = \bar\xi^{\alpha'}(u^A, t) - \bar\xi^\alpha(u^A, t)$. Полагая равными нулю все вариации на ∂V_3 и производя стандартные преобразования [1, 9], получим из (2.1)

$$(2.2) \qquad \int\limits_{V_4^+ \cup V_4^-} \frac{\delta\Lambda^\circ}{\delta x^i} \delta x^i d^4\xi + \int\limits_{\Sigma_3} \left[\frac{\partial\Lambda^\circ}{\partial x_a{}^i} \Delta x^i + \left(\Lambda^\circ \delta_\beta{}^\alpha - \frac{\partial\Lambda^\circ}{\partial x_\alpha{}^i} x_\beta{}^i \right) \delta\bar\xi^\beta \right] \times$$
$$\times\, n_\alpha{}^\circ d\sigma^\circ = 0$$
$$\delta/\delta x^i = \partial/\partial x^i - (\partial/\partial\xi^\alpha)(\partial/\partial x_\alpha{}^i)$$
$$\Delta x^i = \delta x^i + x_\beta{}^i \delta\bar\xi^\beta$$

где $\delta/\delta x^i$ — вариационная производная, $n_\alpha{}^\circ$ — единичный 4-вектор нормали к Σ_3, $d\sigma^\circ$ — инвариантный элемент поверхности в отсчетной конфигурации, Δx^i — полные вариации координат поверхности. Для учета диссипации необходимо перейти от вариационного принципа (2.1) к вариационному уравнению Седова [1], добавив в (2.1) неголономный член

$$\delta W^* = \int_{\Sigma_3} \mathrm{R}^\circ T_0 \delta\bar{\xi}^\alpha n_\alpha{}^\circ \, d\sigma^\circ$$

Приравнивая нулю коэффициенты при объемных вариациях δx^i в (2.2), получим первое из уравнений (1.5). Уравнение энергии заменяется условием изотермичности. Вследствие независимости вариаций Δx^i и $\delta\bar{\xi}^\alpha$ на Σ_3 имеем

$$(2.3)\qquad \left[\frac{\partial\Lambda^\circ}{\partial x_a{}^i}\Delta x^i\right] n_\alpha{}^\circ = 0, \quad [(\Lambda^\circ\delta_\beta{}^\alpha - (\partial\Lambda^\circ/\partial x_\alpha{}^i)\, x_\beta{}^i)\, \delta\bar{\xi}^\beta]\, n_\alpha{}^\circ = 0$$

Для когерентных границ $[\Delta x^i] = 0$, $[\delta\bar{\xi}^\beta] = 0$, поэтому

$$(2.4)\qquad [\partial\Lambda^\circ/\partial x_\alpha{}^i]\, n_\alpha{}^\circ = 0$$

$$(2.5)\qquad [\Lambda^\circ\delta_\beta{}^\alpha - (\partial\Lambda^\circ/\partial x_\alpha{}^i)\, x_\beta{}^i]\, n_\alpha{}^\circ = 0$$

В трех условиях (2.4) нетрудно узнать первую группу соотношений Гюгонио (1.6), обеспечивающих непрерывность потока импульса ($n_4{}^\circ = -D^\circ$). Взятое с обратным знаком выражение в квадратных скобках в (2.5) называется тензором энергии — импульса; его пространственная часть

$$T_b{}^a = \rho^\circ\, (f\delta_b{}^a - (\partial f/\partial x_a{}^i)\, x_b{}^i)$$

известна в теории упругих дефектов как тензор Эшелби [13]. Для когерентных фазовых границ в силу условий совместности $[x_\alpha{}^i] = \lambda^i n_\alpha{}^\circ$ из четырех соотношений (2.5) только одно независимо; оно может быть записано, например, так (ср. [6]):

$$(2.6)\qquad [\Lambda^\circ] - \{\partial\Lambda^\circ/\partial x_\alpha{}^i\}\, [x_\alpha{}^i] = 0$$

Проектируя (2.5) на ось времени ($\beta = 4$), получим условие (1.9). Отмеченные выше трудности вывода статических условий из динамических связаны с тем, что проектирование на ось ξ^4 является в статике вырожденной операцией.

Пространственную проекцию (2.5) при помощи тензора Эшелби можно в статическом случае записать в виде

$$(2.7)\qquad [T_b{}^a]\, n_a{}^\circ n^{\circ b} = 0$$

В связи с тем, что соотношение (2.7) служит обобщением условия равенства химических потенциалов жидких фаз, тензор $T_b{}^a$ иногда называют тензором химического потенциала [7].

Используя известный дуализм между тензором Эшелби и тензором напряжений Коши [14], уравнения движения можно перепи сать в терминах $T_b{}^a$. Так, при $\rho^\circ = \mathrm{const}$ получим соотношения $\rho^\circ \partial v_b/\partial t = \partial T_b{}^a/\partial \xi^a$, которые являются следствиями уравнений движения (тождества Нетер); здесь $v_b = v_i x_b{}^i$.

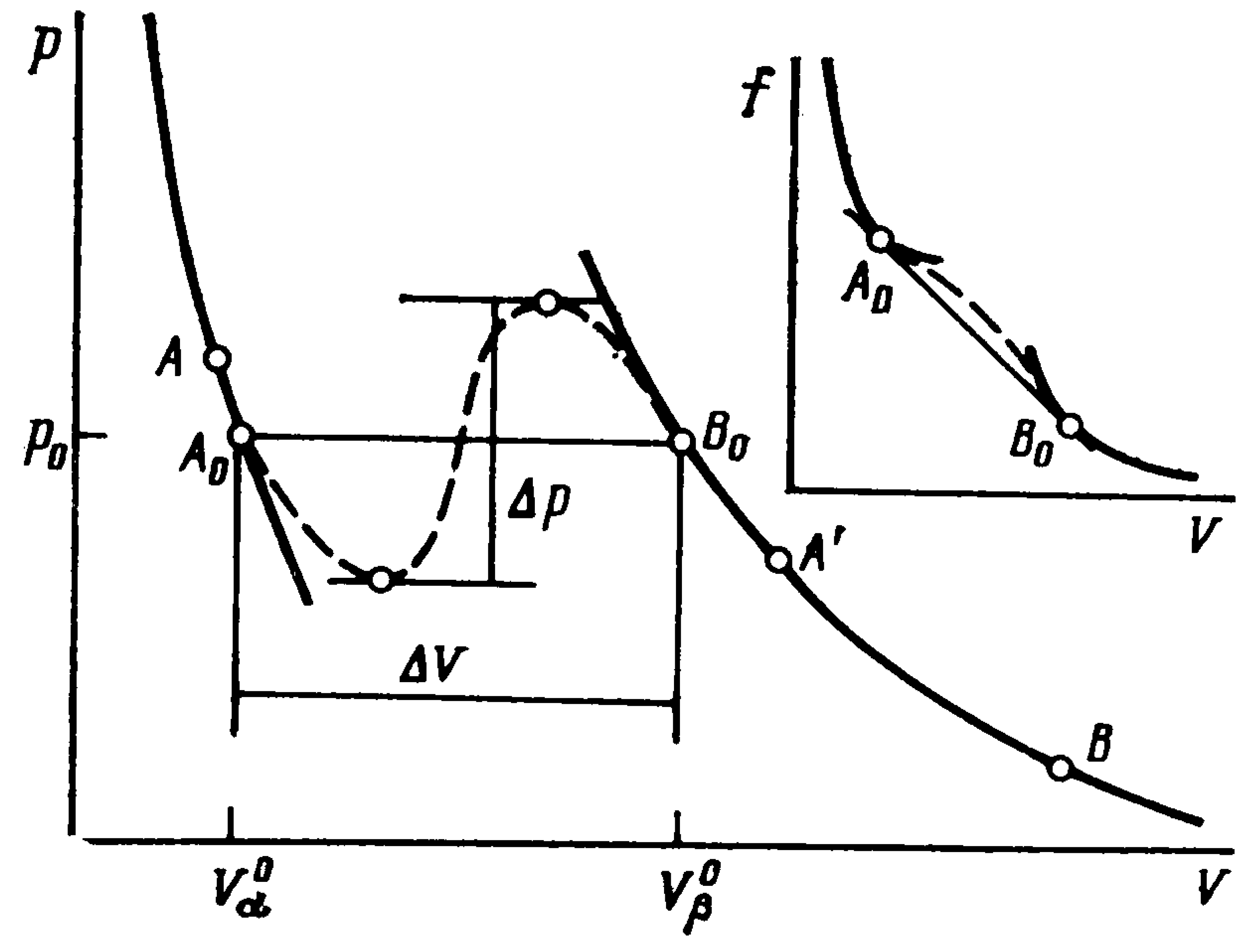
Отметим один, важный для дальнейшего, случай, когда использование этих соотношений упрощает исследование. Пусть $f = \bar{f}\,(\rho, \partial\rho/\partial x^i, T_0)$, $\rho = \rho^\circ/\det \| x_a{}^i \|$, тогда тензор Коши, не будучи в общем случае шаровым, имеет вид

$$(2.8)\qquad P_i{}^k = \left(-\rho^2\frac{\partial\bar{f}}{\partial\rho} + \rho\frac{\partial\bar{f}}{\partial\rho_{,j}}\rho_{,j} + \rho^2\left(\frac{\partial\bar{f}}{\partial\rho_{,j}}\right)_{,j}\right)\delta_i{}^k - \rho\frac{\partial\bar{f}}{\partial\rho_{,k}}\rho_{,i}$$

(запятая перед индексом означает дифференцирование). В то же время тензор Эшелби

$$T_b{}^a = \rho^\circ\left(\bar{f} + \rho\frac{\partial\bar{f}}{\partial\rho} - \frac{\partial\bar{f}}{\partial\rho_{,i}}\rho_{,i} - \rho\left(\frac{\partial\bar{f}}{\partial\rho_{,i}}\right)_{,i}\right)\delta_b{}^a$$

оказывается шаровым, поэтому уравнения равновесия могут быть один раз проинтегрированы [15].



Фиг. 1

Для построения моделей некогерентных границ, необходимо вернуться к (2.3) и сформулировать соответствующие ограничения на вариации $\Delta x^{i\pm}$, $\delta\xi^{\beta\pm}$ [7, 8, 16].

3. Простейшим примером приложений полученных выше результатов является фазовый переход в жидкости. В этом случае свободная энергия зависит от единственной деформационной характеристики, что позволяет конкретизировать вид этой функции, построить структуру изотермического фазового скачка и вычислить диссипацию, обусловленную вязким трением [5].

Запишем уравнения изотермических ($T \equiv T_0$) течений сжимаемой жидкости в виде плоских волн

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0, \quad \rho \frac{\partial v}{\partial t} + \rho v \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial x} = 0 \tag{3.1}$$

Соответствующие условия Гюгонио имеют вид

$$[\rho (D - v)] = 0, \quad [\rho (D - v)^2 + p] = 0 \tag{3.2}$$

где D — скорость скачка в системе координат наблюдателя. Для жидкости, претерпевающей фазовый переход, функция $f\ (V,\ T_0)$ имеет две ветви, отвечающие разным фазам.

Классические разрывные решения (3.1) со скачком типа B — A' (ударные волны, фиг. 1) удовлетворяют условиям теоремы Цемплена и определяются соотношениями (3.2) однозначно. Скачки типа B — A не удовлетворяют условию эволюционности

$$\left.\frac{\partial p}{\partial V}\right|_A \leqslant \frac{p(A) - p(B)}{V(A) - V(B)} \leqslant \left.\frac{\partial p}{\partial V}\right|_B$$

Поэтому соотношений (3.2) оказывается недостаточно для построения разрывного решения. В случае равновесных фазовых скачков ($\mathbf{R} = 0$) дополнительное условие (1.10) может быть записано в виде

$$[f + p/\rho + {}^1/_2\,(D - v)^2] = 0$$

Если диссипация отлична от нуля, для ее вычисления необходимо обратиться к задаче о структуре разрыва.

Для получения непрерывных решений требуется однозначное уравнение состояния $f\ (V,\ T_0)$ в области значений V, отвечающих межфазной зоне. Простейшая модель «равновесной смеси» предполагает построение максимального выпуклого продолжения для f и сводится к определению с помощью соотношений $[\partial f/\partial V] = 0$, $[f - V\partial f/\partial V] = 0$ (условия Гиббса) точек A_0 и B_0 на графике $f(V, T_0)$, которые затем соединяются отрезком прямой. Учет поверхностных эффектов в гетерофазной области приводит к невыпуклому (фиг. 1) продолжению f [17]. Для «подавления» термодинамической неустойчивости материала в области с $\partial^2 f/\partial V^2 < 0$ Ван дер Ваальс предложил учитывать нелокальные члены в уравнении состояния, положив

$$\tilde{f}(\rho, \nabla\rho, T) = f(\rho, T) + \varepsilon(\nabla\rho)^2 \tag{3.3}$$

Здесь $\varepsilon > 0$ — функция плотности и температуры, которая после приведения к безразмерному виду может рассматриваться как малый параметр. Реалистичной физической моделью гетерофазной смеси служит среда с неоднородностями; соответствующие (3.3) дисперсионные соотношения для среды с периодически расположенными фазовыми включениями могут быть получены методами работы [18].

Рассмотрим моделирующие структуру скачка решения уравнений (3.1) вида $\rho(\xi)$, $v(\xi)$, где $\xi = x - Dt$, с граничными условиями $\rho(\pm\infty) = \rho_{\beta,\alpha}$, $v(\pm\infty) = v_{\beta,\alpha}$. Учитывая нелокальные слагаемые в выражении для тензора напряжений (2.8), а также вязкие напряжения, получим после интегрирования

$$\rho u = m_0, \quad u = v - D \tag{3.4}$$

$$p - \rho^2 \frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho}\left(\frac{\partial\rho}{d\xi}\right)^2 - 2\varepsilon\rho^2\frac{d^2\rho}{d\xi^2} - \eta\frac{du}{d\xi} + \rho u^2 = \pi_0$$

где η — коэффициент вязкости, m_0, π_0 — постоянные интегрирования. Исключая $u(\xi)$ из (3.4) и вводя обозначение $y(\rho) = d\rho/d\xi$, приходим к краевой задаче для уравнения первого порядка [5, 12, 19]

$$d(\varepsilon y^2 - \mu)/d\rho = m_0\eta y/\rho^4, \quad y(\rho_\alpha) = y(\rho_\beta) = 0 \tag{3.5}$$

$$\mu = f(\rho, T_0) - {}^1/_2 m_0^2/\rho^2 + \pi_0/\rho$$

$\rho_{\alpha,\beta}$ — две соседние точки $\min\mu(\rho)$.

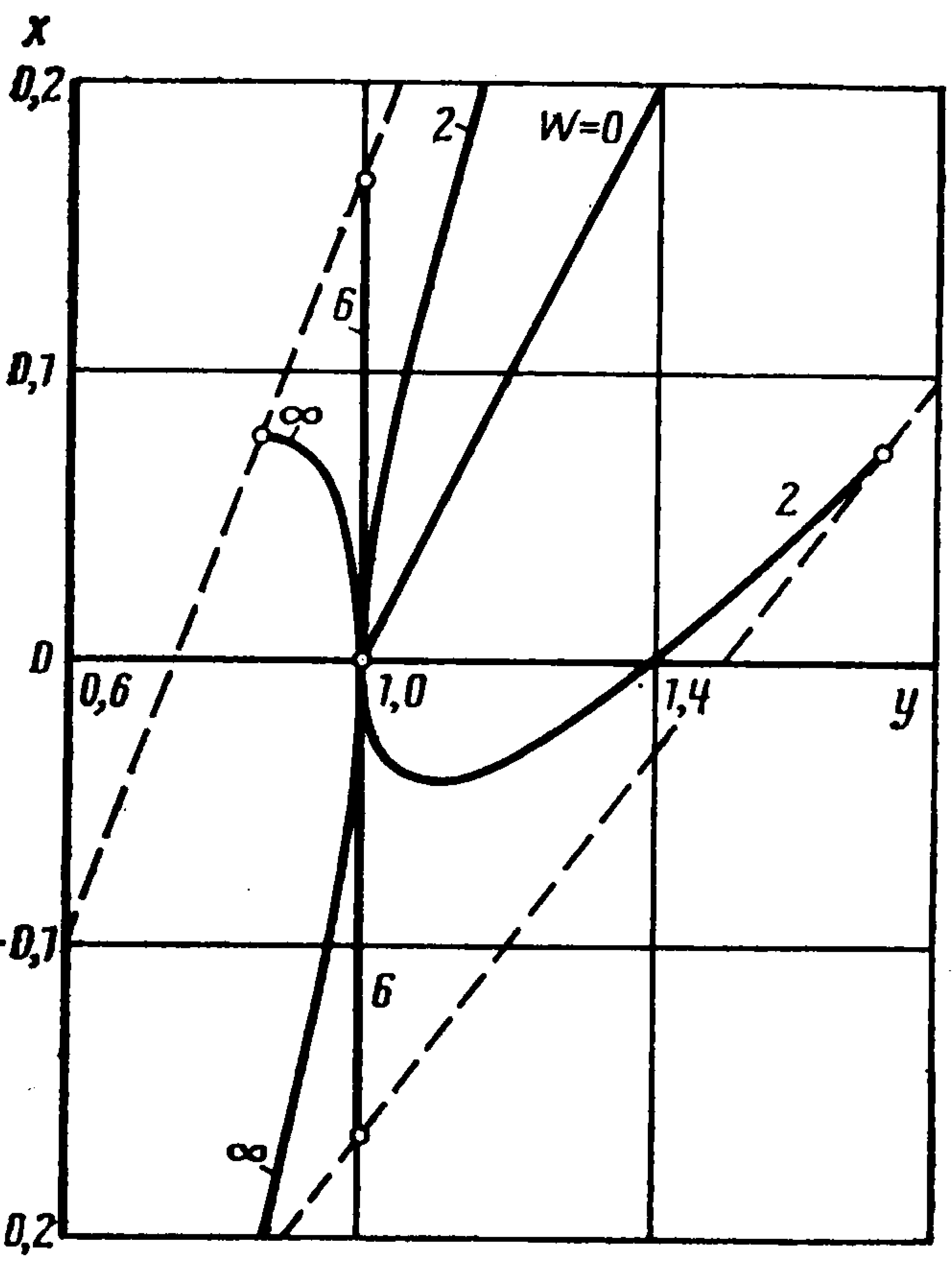
Краевая задача (3.5) имеет решение лишь при специальных значениях параметров; соответствующая связь $m_0(\pi_0, T_0)$ как раз и позволяет определить по состоянию перед скачком его скорость. Необходимое условие существования решения (3.5)

$$m_0(\mu(\rho_\alpha) - \mu(\rho_\beta)) = \eta m_0^2 \int\limits_{\rho_\alpha}^{\rho_\beta} \frac{y(\rho)}{\rho^4}\,d\rho \tag{3.6}$$

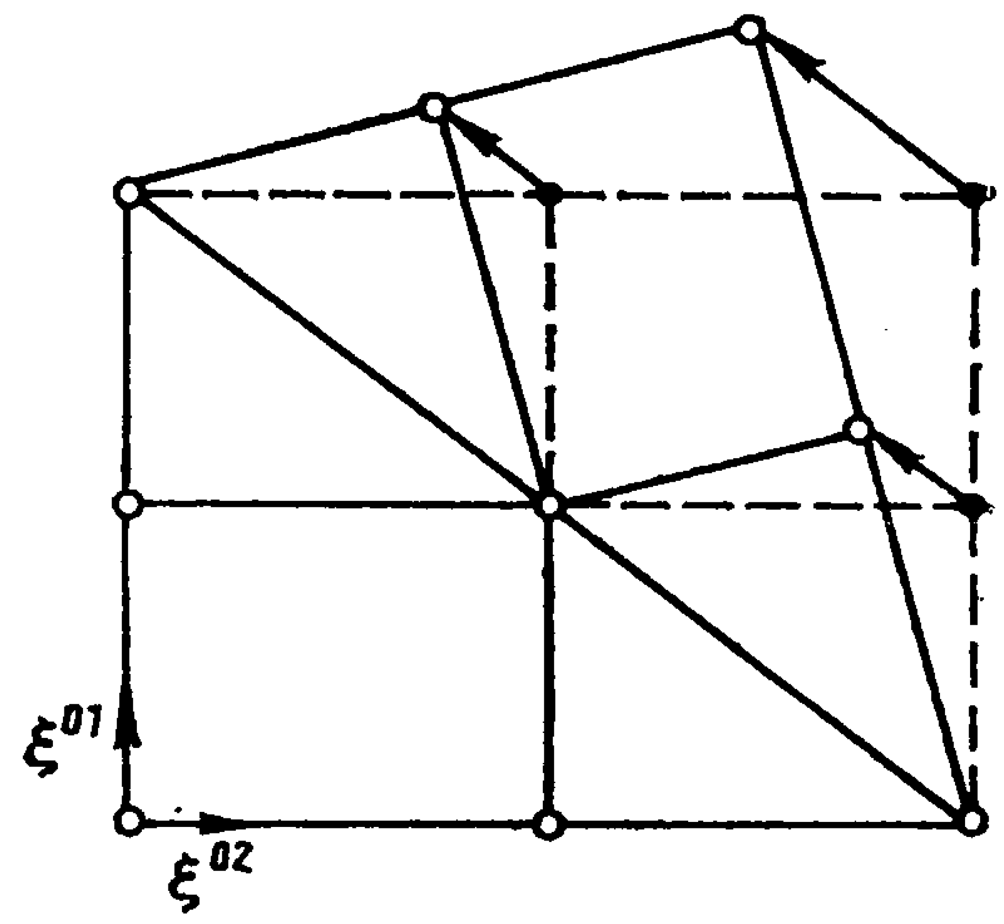
совпадает с (1.10), причем диссипация $\mathbf{R}T_0$, равная правой части (3.6), может быть вычислена в явном виде по известной функции $y(\rho)$.

Вопросы существования и единственности решения краевой задачи (3.5) рассмотрены в [12, 19].

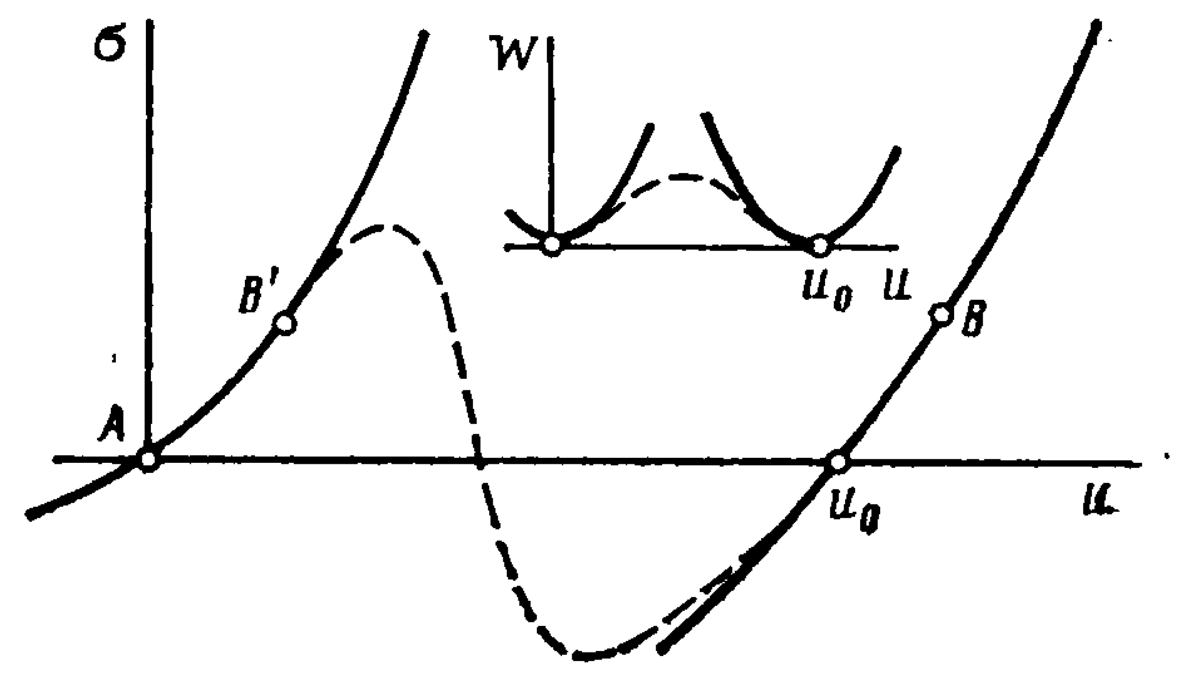
Приблизим функцию $p(V, T_0)$ кубической параболой. Допустим, что известно максвелловское давление $p_0(T_0)$ и удельные объемы фаз $V_\alpha^\circ < V_\beta^\circ$, равновесно со существующих при $T_1 = T_0$, $p = p_0$. Этим изотерма $p = p_0 - k(V - V_\alpha^\circ)(V - V_\beta^\circ)\cdot(V - {}^1/_2(V_\alpha^\circ + V_\beta^\circ))$ определяется с точностью до постоянной $k = 6\sqrt{3}\Delta p/\Delta V^3$, $\Delta V = V_\beta^\circ - V_\alpha^\circ$, характеризующей достижимую степень метастабильности Δp (фиг. 1). В случае бездиссипативных превращений ($\eta \equiv 0$, $\mu(\rho_\alpha^e) = \mu(\rho_\beta^e)$) получим $V_\alpha^e + V_\beta^e = V_\alpha^\circ + V_\beta^\circ$, что позволяет по состоянию перед скачком (V_β^e; $v_\beta = 0$) определить состояние за скачком (V_α^e; $v_\alpha = D(2V_\beta^e - V_\alpha^\circ - V_\beta^\circ)$, а также скорость скачка $D^2 = k(V_\beta^e)^2(V_\beta^\circ - V_\beta^e)(V_\alpha^\circ - V_\beta^e)$. Если $\eta \neq 0$, необходимо решать уравнение (3.5) численно, однако в случае $\varepsilon = \varepsilon_0/\rho^4$, $\varepsilon_0 = \text{const}$ задача имеет аналити



Фиг. 2



Фиг. 3



Фиг. 4

ческое решение

$$V(\xi)=\frac{V_\alpha+V_\beta}{2}+\frac{V_\alpha-V_\beta}{2}\,\mathrm{th}\left(\frac{\sqrt{k}\,(V_\alpha-V_\beta)}{4\sqrt{\varepsilon_0}}(\xi-\xi_0)\right)$$

Для других зависимостей ε (ρ) приведенное решение может рассматриваться как приближенное, справедливость его вблизи критической точки жидкость—пар отмечается в [20].

Связь между параметрами до и после скачка дается уравнением второго порядка

$$3\,(1-6/\mathrm{W})\,(2x-y+1)^2+y^2=1,\quad \mathrm{W}={}^1/_2\eta^2/\varepsilon_0$$
$$x=(V_\beta{}^\circ-V_\beta)/\Delta V,\ y=(V_\beta-V_\alpha)/\Delta V$$

Зависимость $x\,(y)$ представлена на фиг. 2 для разных значений безразмерного параметра W; штриховым линиям отвечают режимы Жуге [12]. При $2x-y+1\geqslant 0$ имеем фазовые скачки разряжения, при $2x-y+1\leqslant 0$ — скачки сжатия; при достаточно малых W возможны два режима течения со скачком сжатия — быстрый и медленный (фиг. 2).

Вычисление диссипации на скачке по (3.6) дает

(3.7) $$\mathrm{R}T_0=\gamma m_0{}^2\,(1+am_0)^3$$

$$\gamma=\frac{\sqrt{2k\mathrm{W}}}{12}\,(\Delta V)^3\,(1+2x)^3,\quad a=-\frac{\sqrt{2\mathrm{W}/k}}{6\,(1+2x)\,\Delta V}$$

Обратим внимание, что хотя в уравнениях структуры была использована линейная модель диссипации (ньютоновская вязкость), линейное соотношение между термодинамической силой и потоком на фазовой границе соблюдается лишь в пределе $m_0\to 0$, при этом $\gamma\to\gamma_0$, где $\gamma_0{}^2=(\sqrt{3}/12)\,\mathrm{W}\Delta p\,(\Delta V)^3$.

4. Альтернативой фазовому переходу в жидкой фазе служит двойникование в упругих кристаллических веществах, которое происходит вообще без изменения объема [21]; в качестве примера рассмотрим весьма специальный случай двойникования в тетрагональных кристаллах.

Допустим, что лагранжевы координатные оси $\xi^{\circ a}$ ($a=1,\,2,\,3$) совмещены с осями симметрии кристалла. Обозначим: a, b, b — параметры элементарной ячейки и сделаем в плоскости $\xi^{\circ 1}$, $\xi^{\circ 2}$ поворот системы координат на угол $\varphi=\mathrm{arctg}\,(b/a)$, перейдя к новой материальной системе ξ^1, ξ^2, ξ^3 (фиг. 3). Рассмотрим сдвиговые деформации вида

(4.1) $$x^1=\xi^1,\ x^2=u\xi^1+\xi^2,\ x^3=\xi^3$$

и обозначим свободную энергию единицы объема кристалла на этом классе изохорических деформаций с параметром u через $W(u) = \rho^\circ f(x_a^{\ i}, T_0)$.

При помощи фиг. 3 можно убедиться, что функция $W(u)$ имеет два минимума, отвечающих зеркально-симметричным двойникам. Это — недеформированное состояние с $u \equiv 0$ и состояние простого сдвига с $u_0 = 2(b^2 - a^2)/ab$. Очевидно, что в отсутствие внешних напряжений возможны кусочно-однородные (сдвойникованные) равновесные конфигурации типа изображенной на фиг. 3.

Выпишем уравнения изотермических движений в виде плоских волн ($u^i = u^i(\xi^1, t)$) рассматриваемой нелинейно-упругой среды

$$\rho^\circ \partial v^i/\partial t = \partial \sigma^{i1}/\partial \xi^1 \tag{4.2}$$

где $u^i = x^i - \xi^i$ — вектор перемещений, $v^i = \partial x^i/\partial t$ — вектор скорости, $\sigma^{i1} = \partial W/\partial(\partial x^i/\partial \xi^1)$ — ненулевые компоненты тензора напряжений Пиолы — Кирхгофа.

Условия Гюгонио и соотношения совместности на фазовом скачке имеют вид

$$[\rho^\circ D^\circ v^i + \sigma^{i1}] = 0, \quad [v^i + D^\circ(\partial x^i/\partial \xi^1)] = 0 \tag{4.3}$$

Для рассматриваемого класса деформаций (4.1) индекс i принимает единственное значение ($i = 2$), поэтому в дальнейшем его опускаем. Условия эволюционности

$$\left.\frac{\partial \sigma}{\partial u}\right|_A \leqslant \frac{\sigma(B) - \sigma(A)}{u(B) - u(A)} \leqslant \left.\frac{\partial \sigma}{\partial u}\right|_B$$

выполняются для обычных ударных волн типа $A - B'$, но не выполняются для фазовых скачков типа $A - B$ (фиг. 4). В качестве дополнительного условия на скачке может быть использовано полученное выше условие (1.10), которое записывается в виде

$$D^\circ([W] - \{\sigma\}[u]) = -\mathbf{R}^\circ T_0 \tag{4.4}$$

В статике имеем равновесное решение $u^+ = 0$, $u^- = u_0$, $\sigma^\pm = 0$.

Согласно (4.4), движение границы двойникования по невозмущенному фону ($u^+ = 0$, $\sigma^+ = 0$) возможно только при наличии диссипации на фронте и обеспечивается однородным сдвиговым напряжением ($\sigma^- = \sigma_0$) за скачком. Таким образом, при известном выражении для $\mathbf{R}^\circ$ формула (4.4) устанавливает соответствие между скоростью движения границы двойникования и приложенным напряжением и может быть использована для определения закона пластического течения, обусловленного двойникованием, исследования динамики деформирования материалов с памятью формы (псевдоупругость [22]).

Для определения диссипации необходимо решить задачу о структуре разрыва, используя усложненные уравнения состояния и реологические соотношения. Структура равновесной границы двойникования может быть построена, если, следуя аналогии со случаем жидкости, рассмотреть энергию вида $\overline{W} = W(u) + \varepsilon(\nabla u)^2$ [23]. Вопрос о механизме диссипации при двойниковании является, однако, существенно более сложным, и для его решения необходимо привлекать детальную микромодель процесса смещения двойниковой границы.

Приведем простейшую феноменологическую схему, позволяющую учесть неравновесность превращения в случае квазистатических процессов, когда можно считать $[\sigma] \cong 0$. Допустим, что фазовые состояния характеризуются различными значениями некоторого внутреннего параметра η, а свободная энергия Гиббса единицы массы записывается в виде $\bar{g}(\eta, \nabla\eta, T, \sigma) = \overline{W} - \sigma u$. Среду будем считать покоящейся, а плотность — постоянной.

Релаксация внутреннего параметра η может быть описана в рамках феноменологической модели Гинзбурга — Ландау при помощи кинетического уравнения [24]: $\partial\eta/\partial t = -\Gamma\delta\bar{g}/\delta\eta$, где $\delta/\delta\eta$ — вариационная производная. В изотермическом случае ($T \equiv T_0$) существуют солитонные решения этого уравнения, зависящие от $\xi = x - Dt$ и описывающие структуру фазового скачка — разрыва переменной η. Диссипация, обусловленная неравновесностью превращения, будет, очевидно, пропорциональна величине [25]

$$\int_{-\infty}^{\infty} (d\eta/d\xi)^2\, d\xi$$

Пусть, например, $\eta = (u - u_2)/(u_1 - u_2)$, где $u_{1,2}(\sigma_0)$ — корни уравнения $\sigma_0 = \partial W/\partial u$. Положим

$$\bar{g}/g_0 = g(\eta, \sigma_0, T_0) + \varepsilon(\nabla\eta)^2, \quad \partial g/\partial\eta = \eta(\eta - 1)(\eta - \eta_0).$$

Параметр η_0 зависит от внешнего сдвигового напряжения σ_0. При $0 < \eta < 1/2$ кинетическое уравнение имеет аналитическое решение искомого вида

$$\eta = (1 + \exp(\xi - \xi_0)/(2\sqrt{\varepsilon}))^{-1}$$

Скорость волны $D = -m_0/\rho_0$ дается формулой $D = (1 - 2\eta_0)\, g_0\Gamma\sqrt{\varepsilon}$. Для диссипации на скачке имеем

$$\mathrm{R}T_0 = \gamma_0 m_0^2, \quad \gamma_0^{-1} = 3\rho_0^2\Gamma\sqrt{\varepsilon}$$

Таким образом, для малых m_0 снова приходим к квадратичному по потоку выражению для скорости производства энтропии. Как и в случае вязких фазовых скачков в сжимаемой жидкости, анализ структуры разрыва позволяет вычислить значение феноменологического коэффициента γ_0.

Автор благодарит В. Л. Бердичевского, А. Н. Голубятникова, А. В. Жукова, А. Г. Куликовского и А. Л. Ройтбурда за обсуждение работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Седов Л. И.* Механика сплошной среды. М.: Наука. 1973. Т. 1. 536 с.; Т. 2. 584 с
2. *Ройтбурд А. Л.* О равновесии кристаллов, образующихся в твердой фазе // Докл. АН СССР (ДАН СССР). 1971. Т. 197. № 5. С. 1051—1054.
3. *Гринфельд М. А.* Об условиях термодинамического равновесия фаз нелинейно-упругого материала // Докл. АН СССР (ДАН СССР). 1980. Т. 251. № 4. С. 824—828.
4. *Кондауров В. И., Никитин Л. В.* О фазовых переходах первого рода в нелинейно-упругих средах // Докл. АН СССР (ДАН СССР). 1982. Т. 262. № 6. С. 1348—1351.
5. *Трускиновский Л. М.* Равновесные межфазные границы // Докл. АН СССР (ДАН СССР). 1982. Т. 265. № 2. С. 306—310.
6. *Косилов А. Т., Перевозников А. М., Рощупкин А. М.* Динамическая теория когерентных межфазных границ в кристаллах // Поверхность. 1983. № 10. С. 36—45.
7. *Гринфельд М. А.* О двух типах гетерогенных фазовых равновесий // Докл. АН СССР (ДАН СССР). 1981. Т. 258. № 3. С. 567—569.
8. *Larche F. C., Cahn J. W.* Thermochemical equilibrium of multiphase solids under stress // Acta Met. 1978. V. 26. No. 10. P. 1579—1589.
9. *Гюнтер Н. М.* Курс вариационного исчисления. Л.; М.: Гостехиздат. 1941. 308 с.
10. *Gurtin M. E.* Two-phase deformations of elastic solids // Arch. Rat. Mech. Analysis. 1983. V. 84. No. 1. P. 1—29.
11. *Ройтбурд А. Л.* Равновесие когерентных фаз и диаграммы состояния в твердом теле // ФТТ. 1984. Т. 26. Вып. 7. С. 2025—2032.
12. *Трускиновский Л. М.* Структура изотермического фазового скачка // Докл. АН СССР (ДАН СССР). 1985. Т. 285. № 2. С. 309—315.
13. *Эшелби Дж.* Континуальная теория дислокаций. М.: Изд-во иностр. лит. 1963. 247 с.
14. *Эриксен Дж.* Исследования по механике сплошных сред. М.: Мир. 1977. 246 с

15. *Трускиновский Л. М.* Критические зародыши в модели Ван дер Ваальса // Докл. АН СССР (ДАН СССР). 1983. Т. 269. № 3. С. 587—592.
16. *Трускиновский Л. М.* О тензоре химического потенциала // Геохимия. 1983. № 12. С. 1730—1744.
17. *Gurtin M. E.* On a theory of phase transitions with interfacial energy // Arch. Rat. Mech. Anal. 1985. V. 87. No. 3. P. 187—212.
18. *Бердичевский В. Л., Сутырин В. Г.* Динамика периодических структур // Докл. АН СССР (ДАН СССР). 1983. Т. 269. № 2. С. 324—329.
19. *Hagan R., Slemrod M.* The viscosity-capillarity criterion for shocks and phase transitions // Arch. Rat. Mech. Analysis. 1983. V. 83. No. 4. P. 333—361.
20. *Маломед Б. А., Руманов Э. Н.* «Собственная» скорость межфазной границы // Докл. АН СССР (ДАН СССР). 1985. Т. 284. № 6. С. 1355—1359.
21. *Ericksen J. L.* Continuous martensitic transitions in thermoelastic solids // J. Thermal Stresses. 1981. V. 4. No. 2. P. 107—119.
22. *Otsuka K., Shimizu K.* Pseudoelasticity and shape memory effects in alloys // Intern. Metals Rev. 1986. V. 31. No. 3. P. 93—114.
23. *Roitburd A. L.* Martensitic transformation as a typical phase transformation in solids // Solid State Physics. N. Y.: Acad. Press. 1978. V. 33. P. 317—390.
24. *Паташинский А. З., Покровский В. Л.* Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука. 1982. 381 с.
25. *Chan S. K.* Steady-state kinetics of diffusionless first order phase transformations // J. Chem. Phys. 1977. V. 67. No. 12. P. 5755—5762.

Москва

Поступила в редакцию
28.IV.1986