

УДК 539.374

**ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ПЕРВОГО РОДА
В УПРУГОВЯЗКОПЛАСТИЧЕСКОЙ СРЕДЕ**

КОНДАУРОВ В. И., НИКИТИН Л. В.

Исследование фазовых превращений в твердых деформируемых телах представляет интерес при разработке разнообразных технологических процессов [1], а также в науках о Земле [2]. Условия равновесия фаз в жидких и газообразных средах изучены достаточно хорошо [3]. В последние годы заметен прогресс в изучении фазовых переходов в твердых телах на основе различных феноменологических подходов [4–7].

При описании поведения кусочно-гомогенной системы, состоящей из различных фаз одного и того же материала, которые отличаются по своим реологическим свойствам и разделены поверхностями сильных разрывов, возникают две основные проблемы. Первая связана с тем, что неискаженные или естественные конфигурации, которые обычно выбираются в качестве отсчетных при формулировке реологических соотношений, для различных фаз не совпадают. Поэтому для единого описания совместного деформирования двухфазной системы возникает необходимость записи определяющих соотношений обоих фаз в одной отсчетной конфигурации. Вторая проблема – установление соотношений, связывающих значения величин на поверхности сильного разрыва, являющегося границей раздела двух фаз. Близкие в той или иной мере вопросы возникают в задачах о скреплении тел с предварительным натягом [8], расчете напряжений в растущих телах [9], распространении волн в предварительно напряженной среде [10] и некоторых других.

В публикуемой работе вводится понятие кинематических характеристик фазового перехода первого рода в твердых деформируемых телах, формулируется полная система уравнений для конечных деформаций материала с мгновенно упругой реакцией, а именно – вязкоупругой среды релаксационного типа [11] и упруговязкопластического материала [12]. Отмечается, что в случае динамики и квазитермостатики система дифференциальных уравнений является дивергентной, что позволяет рассматривать слабые, кусочно-гладкие решения.

В рамках традиционных предположений об адабатичности процесса и непрерывности на ударной волне перемещений, потоков массы, импульса и энергии формулируется замкнутая система соотношений на быстро движущейся поверхности фазового превращения. В случае квазитермостатики, соответствующей медленным движениям и малым градиентам температуры, для замыкания системы соотношений на разрыве кроме основных законов сохранений используется уравнение для энтропии и закон теплопроводности. Показывается, что в рассматриваемой модели квазитермостатический фазовый переход первого рода характеризуется непрерывностью перемещений, температуры, вектора напряжений и в общем случае разрывом нормальной компоненты тензора химического потенциала.

В качестве примера рассматривается сферически-симметричная задача о квазистатической кристаллизации расплава в вязкоупругую среду.

1. Основные уравнения. Пусть $\boldsymbol{\xi}^{(n)}$ ($n=1, 2$) – отсчетные конфигурации тела, целиком находящегося в одном из двух фазовых состояний. Предположим, что $\boldsymbol{\xi}^{(n)}$ являются неискаженными конфигурациями, в которых температуры $\theta_0^{(n)}$ постоянны и равны θ_0 .

Обозначим радиус-вектор материальной частицы ξ в отсчетной конфигурации через $\mathbf{X}^{(n)} = \mathbf{X}^{(n)}(\xi)$, $\rho_{\boldsymbol{\xi}}^{(n)}$ – плотность массы в $\boldsymbol{\xi}^{(n)}$, \mathbf{F}_0 – градиент невырожденного отображения $\boldsymbol{\xi}^{(2)} \rightarrow \boldsymbol{\xi}^{(1)}$ так, что

$$d\mathbf{X}^{(1)} = \mathbf{F}_0 d\mathbf{X}^{(2)}, \quad \det \mathbf{F}_0 \neq 0 \quad (1.1)$$

Ограничимся рассмотрением однородных изотропных сред. Тогда любая конфигурация, отличающаяся от $\boldsymbol{\xi}^{(n)}$ вращением, также является неискаженной и без ограничения общности можно полагать, что $\boldsymbol{\xi}^{(1)}$ и $\boldsymbol{\xi}^{(2)}$

связаны преобразованием чистой деформации $F_0 = U_0$, где U_0 — симметричный положительно-определеный тензор. Этот тензор удобно представить в виде

$$U_0 = \Delta_* U_*, \quad \Delta_* = \rho_*^{(2)} / \rho_*^{(1)}, \quad |\det U_*| = 1 \quad (1.2)$$

Локальные величины Δ_* и U_* являются паспортными кинематическими характеристиками фазового перехода первого рода данного материала, и, хотя рассматриваются изотропные материалы, нет никаких априорных оснований полагать $U_* = I$. Очевидно, что величины Δ_* , U_* зависят от температуры θ_0 .

Пусть материальная частица, которая может быть идентифицирована вектором $X^{(n)}$, в актуальной конфигурации занимает положение $x = x^{(n)}(X^{(n)}, t)$ и имеет температуру $\theta = \theta^{(n)}(X^{(n)}, t)$. Если $F^{(n)}$ — градиент деформации, такой, что $dx = F^{(n)} dX^{(n)}$, то для градиентов деформаций $F^{(n)}$ и температуры $\gamma^{(n)} = \nabla_{x^{(n)}} \theta$ получим

$$F^{(2)} = \Delta_* F^{(1)} U_*, \quad \gamma^{(2)} = \Delta_* U_* \gamma^{(1)} \quad (1.3)$$

С помощью соотношений (1.3) определяющие уравнения одной из фаз, записанные в своей отсчетной неискаженной конфигурации, могут быть записаны в терминах отсчетной конфигурации другой фазы, если заданы кинематические характеристики фазового перехода.

Из теоремы Нолла [13] о связи групп симметрии $g_x^{(n)}$ реологических соотношений, записанных с помощью двух отсчетных конфигураций $x^{(n)}$, с учетом (1.1), (1.2) следует $g_x^{(1)} = U_* g_x^{(2)} U_*^{-1}$.

Отсюда видно, что если вторая фаза является идеальным телом, для которого $g_x^{(2)} = o$, где o — унимодулярная группа, то и $g_x^{(1)} = o$. В этом случае зависимость реологии второй фазы от U_* исчезает в силу инвариантности определяющих соотношений относительно унимодулярных преобразований отсчетной конфигурации и остается зависимость только от Δ_* .

В случае, когда обе фазы — упрочняющийся материал, для которого $g_x^{(2)} = o$, где o — полная ортогональная группа, при переходе от $x^{(2)}$ к $x^{(1)}$ группа симметрии имеет вид $g_x^{(1)} = U_* o U_*^{-1} \neq o$.

Перейдем к формулировке полной системы уравнений.

Запишем законы сохранения энергии, импульса, совместности деформаций и скоростей, а также эволюционные уравнения, задающие радиус-вектор частицы и кинетику внутренних (структурных) параметров среды, используя в качестве отсчетной конфигурацию $x = x^{(1)}$.

В лагранжевых переменных $X = X^{(1)}$ эта система имеет вид

$$\begin{aligned} \rho_* \partial (\varepsilon + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) / \partial t - \operatorname{Div} (\mathbf{T}_*^T \mathbf{v} + \mathbf{q}_*) &= \rho_* (r + \mathbf{b} \cdot \mathbf{v}) \\ \rho_* \partial \mathbf{v} / \partial t - \operatorname{Div} \mathbf{T}_* &= \rho_* \mathbf{b}, \quad \partial \mathbf{F} / \partial t - \nabla_x \mathbf{v} = 0 \\ \partial (\rho \Delta) / \partial t &= 0, \quad \partial \mathbf{x} / \partial t = \mathbf{v}, \quad \partial \mathbf{W} / \partial t = \Phi \end{aligned} \quad (1.4)$$

Здесь ε — плотность внутренней энергии, $\Delta = \det F$, ρ — плотность массы в актуальной конфигурации, \mathbf{b} — вектор массовых сил, r — плотность распределенных источников тепла, $\mathbf{T}_* = (\rho_* / \rho) T F^{-1T}$ — несимметричный тензор напряжений Пиолы — Кирхгофа первого рода, \mathbf{q}_* — вектор теплового потока в переменных X . Тензор-функция Φ определяет скорость изменения внутренних параметров — неупругих деформаций \mathbf{W} , задающих зависимость текущего состояния от предыстории деформаций и температуры.

В эйлеровых переменных x система дифференциальных уравнений имеет вид

$$\begin{aligned} \partial [\rho (\varepsilon + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v})] / \partial t + \operatorname{div} [\rho (\varepsilon + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) \mathbf{v} - \mathbf{T} \mathbf{v} - \mathbf{q}] &= \rho (r + \mathbf{b} \cdot \mathbf{v}) \\ \partial (\rho \mathbf{v}) / \partial t + \operatorname{div} (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} - \mathbf{T}) &= \rho \mathbf{b} \\ \partial \rho / \partial t + \operatorname{div} (\rho \mathbf{v}) &= 0, \quad \partial (\rho \mathbf{F}) / \partial t + \operatorname{div} (\rho \mathbf{F} \otimes \mathbf{v} - \rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{F}^T) = 0 \\ \partial (\rho \mathbf{W}) / \partial t + \operatorname{div} (\rho \mathbf{W} \otimes \mathbf{v}) &= \rho \Phi, \quad \partial (\rho \mathbf{X}) / \partial t + \operatorname{div} (\rho \mathbf{X} \otimes \mathbf{v}) = 0 \end{aligned} \quad (1.5)$$

Форма первых трех законов сохранения известна. Вывод закона сохранения совместности деформаций и скоростей в переменных \mathbf{x} содержится в [14]. Уравнение эволюции внутренних параметров получается умножением шестого уравнения (1.4) на ρ и сложением с уравнением неразрывности, умноженным на W . Последнее уравнение системы (1.5), которое является аналогом уравнения $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{v}$ в системе (1.4), получается из соотношения $d\mathbf{X}/dt = 0$ и уравнения неразрывности.

Для замыкания системы (1.4) или (1.5) используются недифференциальные, конечные реологические соотношения. Для упрочняющегося упруговязкопластического материала и вязкоупругого материала релаксационного типа при конечных деформациях эти соотношения с учетом (1.2) и (1.3) имеют вид [15]:

$$\begin{aligned} A &= \varepsilon - \theta \eta = A^{(n)}(\mathbf{U}, \mathbf{W}, \theta, \mathbf{U}_0 \delta_{1n}), \quad \eta = -\partial A^{(n)}/\partial \theta \\ \mathbf{T} &= \rho \mathbf{F} (\partial A^{(n)}/\partial \mathbf{C}) \mathbf{F}^T, \quad \mathbf{q} = \mathbf{R} \mathbf{q}^{(n)}(\mathbf{U}, \mathbf{W}, \theta, \nabla_x \theta, \mathbf{U}_0 \delta_{1n}) \\ \Phi &= \Phi^{(n)}(\mathbf{U}, \mathbf{W}, \theta, \mathbf{U}_0 \delta_{1n}) \end{aligned} \quad (1.6)$$

Для идеальных тел рассматриваемого типа имеет место

$$\begin{aligned} A &= A^{(n)}(\mathbf{e}, \Delta_p, \theta, \Delta_* \delta_{1n}), \quad \eta = -\partial A^{(n)}/\partial \theta \\ \mathbf{T} &= \rho (\mathbf{I} - 2\mathbf{e}) \partial A^{(n)}/\partial \mathbf{e} \end{aligned} \quad (1.7)$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}^{(n)}(\mathbf{e}, \Delta_p, \theta, \nabla \theta, \Delta_* \delta_{1n}), \quad \Phi = \Psi^{(n)}(\mathbf{U}_e^*, \Delta_p, \theta, \Delta_* \delta_{1n}) \mathbf{W}$$

где \mathbf{U}, \mathbf{W} — симметричные положительно-определенные тензоры, а \mathbf{R} и \mathbf{H} — ортогональные тензоры, входящие в полярные разложения градиентов полной и пластической деформации. $\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U}$, $\mathbf{P} = \mathbf{H}\mathbf{W}$, $\mathbf{F} = \mathbf{E}\mathbf{P}$. Величины $\Delta_p = \det \mathbf{P}$, $\mathbf{U}_e^2 = \mathbf{E}^T \mathbf{E}$, $\mathbf{e} = 1/2(\mathbf{I} - \mathbf{F}^{-1T} \mathbf{W}^2 \mathbf{F}^{-1})$, δ_{mn} — символ Кронекера, $\mathbf{C} = \mathbf{U}^2 = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$, $\mathbf{U}_e^* = \mathbf{H}^T \mathbf{U}_e \mathbf{H}$.

Таким образом, в используемой модели внутренний параметр отождествляется с симметричной частью \mathbf{W} невырожденного градиента неупругих деформаций \mathbf{P} . Тензор $\mathbf{P} = \mathbf{P}(\mathbf{X}, t)$ представляет собой градиент отображения отсчетной конфигурации \mathbf{x} в касательную промежуточную или разгруженную конфигурацию. Последняя, по определению, является конфигурацией, получаемой мгновенным снятием напряжений и температуры из актуальной конфигурации однородно деформированного и нагретого тела с деформациями и температурой, равными всюду деформациям и температуре в точке \mathbf{X} . Возможность такого процесса и, следовательно, возможность разложения $\mathbf{F} = \mathbf{E}\mathbf{P}$, разумеется, существует только для частных моделей неупругих сред. Для рассматриваемых материалов такой процесс мгновенной разгрузки предполагается допустимым: уравнение для внутреннего параметра $\mathbf{W}^* = \Phi(\mathbf{U}, \mathbf{W}, \theta, \mathbf{U}_0)$ таково, что скачкообразное изменение \mathbf{U} и θ вызывает ограниченное изменение \mathbf{W}^* , а $\mathbf{T}(\mathbf{W}, \mathbf{W}, \theta_0, \mathbf{U}_0) = 0$.

Для упруговязкопластических тел скорость производства \mathbf{W}^* равна нулю внутри поверхности текучести и отлична от нуля вне ее.

Из (1.4) следует, что скорость роста плотности энтропии η определяется уравнением

$$\begin{aligned} \rho_x \eta - \text{Div}(\theta^{-1} \mathbf{q}_x) &= \rho_x \theta^{-1} \{ \text{tr}(\tau \Phi) + (\rho_x \theta)^{-1} \mathbf{q}_x \nabla_x \theta + r \} \\ \tau &= -\partial \varepsilon(\mathbf{F}, \mathbf{W}, \eta)/\partial \mathbf{W} = -\partial A(\mathbf{F}, \mathbf{W}, \theta)/\partial \mathbf{W} \end{aligned} \quad (1.8)$$

Аналогично в эйлеровых переменных

$$\partial \rho \eta / \partial t + \text{div}(\rho \eta \mathbf{v} - \theta^{-1} \mathbf{q}) = \rho \theta^{-1} \{ \text{tr}(\tau \Phi) + (\rho \theta)^{-1} \mathbf{q} \nabla \theta + r \} \quad (1.9)$$

Величина $\delta_w = \text{tr}(\tau \Phi)$, которая определяет обусловленную чисто вязкими свойствами скорость диссоциации энергии, неотрицательна. Это следует из (1.6), (1.7) и независимости δ_w от $\nabla \theta$.

2. Соотношения на фазовой границе. Системы (1.4), (1.8) или (1.5), (1.9) являются системами дивергентных дифференциальных уравнений по крайней мере в двух предельных случаях. Первый — квазитермостатика — соответствует медленным движениям и малым градиентам температуры. В этом случае можно пренебречь инерционными членами в уравнении движения и скоростью термической диссипации энергии $\mathbf{q} \nabla \theta / \theta^2$. Второй — соответствует быстрым, динамическим движениям среды, для которых приемлемо адиабатическое приближение $\mathbf{q} = 0$.

Дивергентная форма уравнений позволяет рассматривать не только

классические, дифференцируемые решения, но и слабые решения, области гладкости которых разделены поверхностями сильного разрыва [16]. При этом, если дивергентная система имеет вид $\partial\psi/\partial t + \operatorname{Div} \psi = f$, то для скачков величин на поверхности сильного разрыва $\phi(X, t) = 0$ движущейся со скоростью c_n в направлении нормали n_n , в общем случае имеет место $-c_n[\psi] + [\psi]n_n = \zeta$, где ζ – вектор сингулярных источников типа δ -функций, сосредоточенных на рассматриваемой поверхности. Совокупность предположений об амплитудах этих источников для системы независимых законов сохранения является самостоятельной частью любой допускающей разрывные решения модели сплошной среды.

Будем предполагать, что на движущихся поверхностях ($c_n \neq 0$) сильных разрывов, разделяющих две фазы материала, отсутствуют сингулярные источники перемещений, потока массы, импульса и неупругих деформаций.

Из первого предположения и уравнения $x = v$ следует

$$[x] = 0 \quad (2.1)$$

Из (2.1) в силу непрерывности касательной производной радиуса-вектора x автоматически следует отсутствие сингулярных источников в дивергентном уравнении совместности деформации и скоростей и связь между скачками $[F]$ и $[v]$: $c_n[F] + [v] \otimes n_n = 0$.

Если обозначить $h_n = -[v]/c_n$, то предыдущее соотношение записывается в виде

$$[F] = h_n \otimes n_n \quad (2.2)$$

Далее, предположение об отсутствии на поверхности фазового перехода сингулярного источника неупругих деформаций, справедливое в случае, если характерное время фазового превращения существенно меньше характерного времени релаксации вязкоупругого материала, приводит к условию на движущейся волне фазового перехода

$$[W] = 0 \quad (2.3)$$

Из уравнения движения в отсутствие сингулярных источников следует с учетом определения h_n :

$$\rho_n c_n^2 h_n - [T_n] n_n = 0 \quad (2.4)$$

Аналогично уравнение энергии дает $\rho_n c_n [\epsilon] + 1/2 \rho_n c_n [v^2] + n_n [T_n^T v] = 0$. Используя соотношение $[ab] = \langle a \rangle [b] + [a] \langle b \rangle$, где $\langle a \rangle = 1/2 (a^+ + a^-)$ – полусумма значений a на сторонах разрыва, получим $\rho_n [\epsilon] = 1/(\rho_n c_n^2) \langle T_n n_n \rangle - [T_n n_n]$.

Поскольку $\langle T_n n_n \rangle [T_n n_n] = 1/2 n_n [T_n^T T_n] n_n$, соотношение для скачка энергии можно записать в виде свертки с нормалями скачка симметричного тензора второго ранга

$$n_n [(\rho_n c_n)^2 \epsilon I - 1/2 T_n^T T_n] n_n = 0 \quad (2.5)$$

Помимо полевых величин ϵ и T_n рассматриваемый тензор зависит от величины $\rho_n c_n$, определяющей плотность потока массы материала, испытывающего фазовое превращение.

Если воспользоваться формулами, связывающими вектор нормали и скорость распространения поверхности $\phi=0$ разрыва в переменных X, t и x, t , то соотношение (2.5) можно записать в «эйлеровой» форме $n_n [(\rho c)^2 \epsilon I - 1/2 T^2] n_n = 0$.

Рассматривая (2.2) – (2.5) как систему нелинейных алгебраических уравнений для скачков, можно видеть, что при заданной скорости c_n система сводится к уравнениям (2.4), (2.5) относительно неизвестных h_n и $[\epsilon]$, характеризующих скачки деформации и энергии. Если решение указанной системы существует, то из дивергентного дифференциального уравнения для скорости производства энтропии следует, что величина $[\eta]$ характеризует, как и в классической теории ударных волн [16], сингулярный источник диссипации в динамическом процессе, интенсивность которого определяется реологией обеих фаз материала, интенсивностью разрыва и скоростью движения последнего.

Перейдем к случаю квазимеростатики. В отличие от динамики, где предположения о неразрывности перемещений, неупругих деформаций

и потоков импульса и энергии полностью определяют скачки всех величин на поверхности разрыва, в том числе и скачок температуры, в данном случае система соотношений для скачков остается незамкнутой. Для ее замыкания рассмотрим сначала уравнение для теплового потока \mathbf{q} , входящее в реологические соотношения (1.6) или (1.7). Если это уравнение взаимно однозначно разрешимо относительно градиента температуры, т. е. $\nabla_{\mathbf{x}}\theta = \mathbf{g}(\mathbf{F}, \mathbf{W}, \theta, \mathbf{q})$, или в дивергентной форме $\text{Div}(\theta\mathbf{l}) = \mathbf{g}(\mathbf{F}, \mathbf{W}, \theta, \mathbf{q})$, и тепловой поток не имеет сингулярных составляющих, так как в противном случае не выполняются условия квазитермостатики, то

$$[\theta] = 0 \quad (2.6)$$

Из уравнений равновесия и энергии, записанных в скачках, с учетом формулы $[\mathbf{v}] = -c_{\infty}\mathbf{h}_{\infty}$ следует на движущихся ($c_{\infty} \neq 0$) поверхностях

$$[\mathbf{T}_{\infty}] \mathbf{n}_{\infty} = 0, \quad \rho_{\infty} [\varepsilon] + c_{\infty}^{-1} [\mathbf{q}_{\infty}] \mathbf{n}_{\infty} = \mathbf{h}_{\infty} \mathbf{T}_{\infty} \mathbf{n}_{\infty} \quad (2.7)$$

Поскольку \mathbf{q}_{∞} зависит от $\nabla_{\mathbf{x}}\theta$, это означает, что энергетическое уравнение связывает скачки параметров состояния $\mathbf{F}, \mathbf{W}, \theta$ со скачком нормальной производной температуры на фронте волны. Величина $[\mathbf{q}_{\infty}] \mathbf{n}_{\infty}$ может быть выражена через скачки параметров состояния и сингулярный источник диссипации.

Действительно, из уравнения для скорости изменения энтропии, которое в рассматриваемом приближении имеет вид $\rho_{\infty}\eta - \text{Div}(\theta^{-1}\mathbf{q}_{\infty}) = \rho_{\infty}\theta^{-1}\delta_w(\mathbf{U}, \mathbf{W}, \theta)$, с учетом (2.6) следует на фронте волны $\rho_{\infty}[\theta\eta] + c_{\infty}^{-1}[\mathbf{q}_{\infty}] \mathbf{n}_{\infty} = -\rho_{\infty}\delta_{*}$, где δ_{*} — плотность энтропии, производимая в единице массы среды сингулярным источником диссипации в квазитермостатическом процессе. Отсюда получаем $[\mathbf{q}_{\infty}] \mathbf{n}_{\infty} = -\rho_{\infty}c_{\infty}(\delta_{*} + [\theta\eta])$. Подставляя это выражение в (2.7), найдем

$$[\rho_{\infty}\mathbf{A}] = \mathbf{h}_{\infty} \mathbf{T}_{\infty} \mathbf{n}_{\infty} + \rho_{\infty}\delta_{*} \quad (2.8)$$

Соотношения (2.6) — (2.8) показывают, что при квазитермостатическом фазовом превращении скачок температуры равен нулю, а скачок свободной энергии определяется работой вектора напряжений и диссипацией δ_{*} .

Подобно (2.5), равенство (2.8), которое является аналогом условия равенства химических потенциалов в классической теории равновесия фаз [3], может быть записано в виде свертки с нормалями симметричного тензора второго ранга

$$\mathbf{n}_{\infty} [\chi_{\infty}] \mathbf{n}_{\infty} = \rho_{\infty}\delta_{*}, \quad \chi_{\infty} = \rho_{\infty}\mathbf{A}\mathbf{l} - \mathbf{F}^T \mathbf{T}_{\infty} \quad (2.9)$$

поскольку $\mathbf{h}_{\infty} \mathbf{T}_{\infty} \mathbf{n}_{\infty} = [\mathbf{F}] \mathbf{n}_{\infty} \cdot \mathbf{T}_{\infty} \mathbf{n}_{\infty} = \mathbf{n}_{\infty} [\mathbf{F}^T \mathbf{T}_{\infty}] \mathbf{n}_{\infty}$.

Тензор χ_{∞} введен в [5] и назван тензором химического потенциала.

В феноменологических теориях фазовых переходов первого рода, как правило, используется гипотеза о том, что величина δ_{*} пренебрежимо мала по сравнению с $[\chi_{\infty}]$.

В гидродинамическом приближении некоторое обоснование гипотезы о малости δ_{*} следует из рассмотрения задачи о структуре волны фазового превращения для материала со специальным образом выбранной функцией свободной энергии [7]. Для нелинейно-упругого тела в подходе [5], основанном на вариационном принципе Гиббса [3], эта гипотеза вводится неявным образом в виде предположения о том, что носители вариаций полей перемещений и энтропии определены в области вне фазовой границы. Таким образом, условия на границе раздела фаз являются следствием не только принципа Гиббса, но и предположений о наличии или отсутствии сингулярных источников в общих уравнениях термомеханики сплошной среды.

Если воспользоваться системой уравнений (1.5), (1.9) в переменных x, t , то вместо (2.2), первого из уравнений (2.7) и (2.9) получим соотношения на фазовой границе в эйлеровой форме

$$[\mathbf{F}] = \mathbf{h} \otimes \rho \mathbf{F}^T \mathbf{n}, \quad [\mathbf{T}] \mathbf{n} = 0, \quad [\mathbf{A}] = \mathbf{h} \cdot \mathbf{T} \mathbf{n} + \delta_{*} \quad (2.10)$$

$$\mathbf{h} = -[\mathbf{v}] / \rho c, \quad [\rho c] = 0, \quad [\rho \mathbf{F}^T \mathbf{n}] = 0$$

Если обозначить $\beta = \rho^2 \mathbf{F}^T / (\rho \mathbf{F}^T \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{F}^T \mathbf{n}) = (|\nabla \varphi| / |\nabla_{\mathbf{x}} \varphi|)^2 \mathbf{F}^T$, то последнее из соотношений (2.10) можно записать в виде

$$\mathbf{n} [\beta \chi] \mathbf{n} = \delta_{*}, \quad \chi = \mathbf{A}\mathbf{l} - \rho^{-1} \mathbf{T} \quad (2.11)$$

где χ — симметричный тензор химического потенциала Боуэна [17].

Из (2.9), (2.11) очевидна связь между потенциалами $\chi = \mathbf{F}^T \chi \mathbf{F}^{-1T}$, которая показывает эквивалентность формулировок условий на фазовой границе в эйлеровых и лагранжевых переменных.

3. Пример. Рассмотрим сферически-симметричную задачу об изотермической квазистатической кристаллизации идеальной упругосжимаемой жидкости в вязкоупругую твердую фазу.

Пусть отсчетная конфигурация $\boldsymbol{\chi}_f$ — сферическая область радиуса b , занимаемая ненапряженной жидкостью с температурой $\theta = \text{const}$, от которой как от параметра зависит решение задачи. Плотность жидкой фазы в этой естественной конфигурации равна ρ_f . В результате теплоотвода через границу тела, которая либо неподвижна, либо находится под действием сжимающего напряжения σ_0 , $\sigma_0 = \text{const}$, периферическая часть сферы переходит в твердое состояние. Радиус зоны расплава $a(t)$ находится из решения задачи и изменяется во времени вследствие релаксации напряжений в вязкоупругой фазе.

Указанная постановка задачи соответствует предположению, что теплопроводность настолько высока, что характерное время установления постоянной температуры порядка характерного времени кинетики фазового превращения, которое пре-небрежимо мало по сравнению со временем релаксации напряжений.

Считая, что возникающие в процессе кристаллизации деформации малы, плотность свободной энергии и напряжения в жидкости можно представить в виде

$$\rho_f A_f = 1/2 K_f I_1^2, \quad \mathbf{T} = -p \mathbf{I} = K_f I_1 \mathbf{I}, \quad p = -K_f I_1 \quad (3.1)$$

где $K_f = K_f(\theta)$ — объемный модуль сжатия, $I_1 = 1 - \rho/\rho_f$.

Твердая фаза предполагается однородным изотропным идеальным вязкоупругим материалом Максвелла с плотностью ρ_e в естественной конфигурации $\boldsymbol{\chi}_e$, причем $|\rho_e - \rho_f|/\rho_e \ll 1$. Определяющие соотношения для такой среды, записанные с помощью отсчетной конфигурации $\boldsymbol{\chi}_f$, имеют вид

$$\rho_e A_e = A_* + \text{tr}(\mathbf{T}_* \boldsymbol{\varepsilon}) + 1/2 \lambda I_1^2 + \mu J, \quad \mathbf{T} = \mathbf{T}_* + \lambda I_1 \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}$ — тензор малых упругих деформаций, $I_1 = \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}$, $J = \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}^2$, $\lambda(\theta)$, $\mu(\theta)$ — модули упругости, \mathbf{T}_* — тензор «начальных» напряжений в конфигурации $\boldsymbol{\chi}_f$, от которой производится отсчет деформаций. Величина $A_* = A_0 + 1/2 \text{tr}(\mathbf{T}_* \boldsymbol{\varepsilon}_*)$, где A_0 — потенциал твердой фазы в естественной конфигурации $\boldsymbol{\chi}_e$, $\boldsymbol{\varepsilon}_*$ — деформация $\boldsymbol{\chi}_e$ в $\boldsymbol{\chi}_f$. Тензоры \mathbf{T}_* и $\boldsymbol{\varepsilon}_*$ в силу соотношений (1.7) и малости отличия ρ_e и ρ_f можно представить в виде

$$\mathbf{T}_* = p_* \mathbf{I}, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_* = p_* \mathbf{I} / (3\lambda + 2\mu) \quad (3.2)$$

Если $\rho_e > \rho_f$, то $p_* > 0$, и, наоборот, если $\rho_e \leq \rho_f$, то $p_* \leq 0$. Таким образом, с учетом (3.2):

$$\rho_e A_e = A_* + p_* I_1 + 1/2 \lambda I_1^2 + \mu J, \quad \mathbf{T} = (p_* + \lambda I_1) \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon} \quad (3.3)$$

Полные деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$ складываются из упругих $\boldsymbol{\varepsilon}$ и пластических $\boldsymbol{\varepsilon}^{(p)}$ деформаций, так что

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon}^{(p)} = 1/2 (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad (3.4)$$

где \mathbf{u} — вектор перемещений из конфигурации $\boldsymbol{\chi}_f$ в актуальную конфигурацию тела.

Скорость изменения $\boldsymbol{\varepsilon}^{(p)}$ в данной модели определяется уравнением

$$\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{(p)} / \partial t = (\boldsymbol{\varepsilon} - 1/3 I_1 \mathbf{I}) / \tau = s/2\mu\tau, \quad \tau = \text{const} > 0 \quad (3.5)$$

где $s = \mathbf{T} - 1/3 I_1 \text{tr} \mathbf{T}$ — девиатор тензора напряжений.

В сферической системе координат (r, φ, θ) для физических компонент имеем

$$\mathbf{u} = (u, 0, 0), \quad e_r = \partial u / \partial r, \quad e_\varphi = e_\theta = u/r, \quad I_1 = \partial u / \partial r + 2u/r \quad (3.6)$$

$$\partial \sigma_r / \partial r + 2(\sigma_r - \sigma_\varphi) / r = 0 \quad (3.7)$$

В жидкой фазе из (3.1), (3.7), (3.6) и условия $|u| < \infty$ при $r \rightarrow 0$ получаем

$$u = C(t)r, \quad p = -3K_f C, \quad \rho_f A_f = 1/2 K_f C^2, \quad 0 \leq r \leq a(t) \quad (3.8)$$

Для твердой фазы из соотношений (3.3) – (3.7) следует уравнение

$$\begin{aligned}\partial z / \partial t &= -\alpha z, \quad z(r, t) = \partial(\partial u / \partial r + 2u/r) / \partial r \\ \alpha &= (\lambda + 2\mu/3) / \tau(\lambda + 2\mu)\end{aligned}\quad (3.9)$$

Его общее решение

$$u = U(t)r + V(t)r^{-2} + 3rf(r)e^{-\alpha t} \quad (3.10)$$

где $f(r)$, $U(t)$ и $V(t)$ – произвольные функции своих аргументов.

Помимо (3.9) из (3.3) – (3.5) следует уравнение

$$\mathbf{T} = M_1 \mathbf{I} + \mu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) - s \mathbf{s} \quad (3.11)$$

где $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{u}}$ – скорость частицы. В рассматриваемой задаче (3.11) с учетом $s_r = -2s_\varphi$ сводится к уравнениям

$$\operatorname{tr} \mathbf{T} = 3K_e I_1, \quad \partial(s_r e^{\beta t}) / \partial t = -4\mu e^{\beta t} \Phi(r, t) \quad (3.12)$$

$$\beta = \tau^{-1}, \quad K_e = \lambda + 2\mu/3, \quad \Phi(r, t) = V^*(t)r^{-3} + arf'(r)e^{-\alpha t}$$

Входящие в решения (3.8), (3.10) неизвестные функции $f(r)$, $C(t)$, $U(t)$, $V(t)$, радиус $a(t)$ поверхности контакта твердой и жидкой фаз и начальные данные для уравнений (3.12) определяются краевыми условиями. Ими являются условия при $t=0$, $a(0) \leq r \leq b$, которые представляют собой решение задачи о равновесии жидкости с линейно-упругим материалом; граничное условие на поверхности сферы при $r=b$, $t>0$; условия сопряжения на поверхности $r=a(t)$ фазового перехода.

В рассматриваемой задаче возможны два принципиально различных случая. В первом радиус зоны расплава монотонно увеличивается после мгновенной кристаллизации части материала, $a(t) \geq a(0)$, $a'(t) \geq 0$, сечение $t=\text{const}$ области определения решений уравнений (3.9), (3.12) уменьшается с ростом t и начальные данные при $t=0$, $a(0) \leq r \leq b$ полностью определяют решение (3.12). В противоположном случае объем кристаллизующегося материала монотонно растет со временем, $a(t) < a(0)$, $a'(t) < 0$, начальные данные для (3.12) ставятся при $t=0$, $a(0) \leq r \leq b$ и на волне сильного разрыва при $r=a(t)$.

Рассмотрим сначала первый, более простой случай, когда процесс релаксации напряжений сопровождается плавлением. Обращаясь к решению задачи для линейно-упругого материала при $t=0$, можно показать, что поле радиальных перемещений u_0 определяется выражением

$$u_0 = B_0 r + B_1 r^{-2}, \quad B_0, B_1 = \text{const}, \quad a(0) \leq r \leq b \quad (3.13)$$

Из (3.13) видно, что величина $z(r, t) = \partial(\partial u / \partial r + 2u/r) / \partial r = 3(rf'' + 4f')e^{-\alpha t}$ равна нулю при $t=0$. Отсюда следует, что при $a(0) \leq r \leq b$ функция $f(r) = f_0 + f_1/r^3$, $f_0, f_1 = \text{const}$. Полагая $U(0) = B_0$, $V(0) = B_1$, находим, что $f(r) = 0$.

Тогда перемещения (3.10) и напряжения, определяемые уравнениями (3.12), записываются в виде

$$u = U(t)r + Z(t)b^3/r^2, \quad p = p_* + 3K_e U(t) \quad (3.14)$$

$$s_r = 3K_e S(t)b^3/r^2, \quad Z(t) = V(t)/b^3, \quad \omega = 4\mu/(3K_e)$$

$$S(t) = -\omega e^{-\beta t} \left\{ Z(0) + \int_0^t e^{\beta \xi} Z'(\xi) d\xi \right\}$$

Очевидно, что для $S(t)$ имеет место

$$S' + \beta S + \omega Z = 0, \quad S(0) = -\omega Z(0) \quad (3.15)$$

а напряжения тождественно удовлетворяют уравнению равновесия.

Рассмотрим краевые условия, которые представляют собой условия непрерывности перемещений (2.1), вектора напряжений (2.7) и нормальной компоненты тензора химического потенциала (2.8) на поверхности $r=a(t)$, $a'(t) \geq 0$ раздела двух фаз якоупругого материала

$$[u] = 0, \quad [\sigma_r] = 0, \quad [\rho A] = \sigma_r [e_r] \quad (3.16)$$

Условие непрерывности температуры в рассматриваемой задаче выполняется тождественно, условие непрерывности неупругих деформаций не используется в силу специфики второй фазы, являющейся идеальной жидкостью.

Принимая во внимание формулы (3.1), (3.3), (3.8), (3.14), условия сопряжения (3.16) можно записать для рассматриваемого случая в виде системы алгебраических уравнений относительно неизвестных $U(t)$, $Z(t)$, $C(t)$, $S(t)$ и $\gamma(t)=b^3/a^3(t)$:

$$\begin{aligned} U - C + \gamma Z &= 0, \quad 3K_e U - 3K_f C + 3K_e \gamma S + p_* = 0 \\ 3K_e U^2 - 3K_f C^2 + 6K_e \gamma S U - 3K_e \omega \gamma^2 S^2 &= A_* \end{aligned} \quad (3.17)$$

Систему (3.15), (3.17) замыкают условия на поверхности сферы $r=b$. Далее рассматриваются два типа граничных условий. Первый соответствует кристаллизации в жесткой обойме, когда

$$u(b, t) = 0, \quad t > 0 \quad (3.18)$$

Второй соответствует заданию на поверхности сферы $r=b$ нормальных напряжений

$$\sigma_r(b, t) = -\sigma_0, \quad \sigma_0 = \text{const} > 0 \quad (3.19)$$

Из (3.14) следует, что граничные условия (3.18), (3.19) записываются соответственно

$$U + Z = 0 \quad (3.20)$$

$$3K_e(U + S) + (p_* + \sigma_0) = 0 \quad (3.21)$$

Обозначим $\delta = p_*/(3K_e)$, $p_1 = 1 + \sigma_0/p_*$, $A_1 = 2A_*/(9K_e\delta^2)$. Поскольку деформации малы, то $\delta \ll 1$, U , C , Z , $S = O(\delta)$, $A_* = O(\delta^2)$. Будем далее для простоты считать, что отличие объемных модулей сжатия жидкой и твердой фазы невелико, т. е. имеет место $K_f = K_e(1 + O(\delta))$. Тогда (3.17), (3.21) в рассматриваемом приближении принимают вид

$$U - C + \gamma Z = 0, \quad U - C + \gamma S = -\delta \quad (3.22)$$

$$U^2 - C^2 + 2\gamma S U - (\gamma^2/\omega) S^2 = A_1 \delta^2$$

и соответственно

$$U + S + p_1 \delta = 0 \quad (3.23)$$

При $t=0$ величина $S(0) = -\omega Z(0)$. Отсюда следует, что начальное распределение в задаче (3.18) определяется формулами

$$U(0) = -1/2\delta((1+\omega)^{-1} + A_1), \quad C(0) = 1/2\delta((1+\omega)^{-1} - A_1) \quad (3.24)$$

$$Z(0) = 1/2\delta((1+\omega)^{-1} + A_1), \quad \gamma^{-1}(0) = 1/2(1 + (1+\omega)A_1)$$

Аналогично начальное распределение в задаче (3.19) дается соотношениями

$$U(0) = -1/2\delta((1+\omega)^{-1} + A_1), \quad C(0) = 1/2\delta((1+\omega)^{-1} - A_1) \quad (3.25)$$

$$Z(0) = 1/2\delta\omega^{-1}(2p_1 - (1+\omega)^{-1} - A_1), \quad \gamma^{-1}(0) = 1/2(1+\omega)\omega^{-1}(2p_1 - (1+\omega)^{-1} - A_1)$$

Процесс при $t > 0$ определяется совместным решением четырех алгебраических соотношений и обыкновенного дифференциального уравнения (3.15) с начальными данными (3.24) или (3.25).

Перейдем к формулировке системы уравнений для случая $a^*(t) \leq 0$, при котором релаксация напряжений сопровождается движением фронта кристаллизации к центру сферы. В этом случае при $a^*(0) \leq r \leq b$ перемещения и напряжения описываются соотношениями (3.14). В области $a^*(t) \leq r \leq a^*(0)$ перемещение имеет вид (3.10), $I_1 = 3(U(t) + (3f(r) + rf'(r))e^{-\alpha t})$, $f(r) \neq 0$.

Записывая уравнение равновесия (3.7) в форме $\partial s_r / \partial r + 3s_r / r = -\partial p / \partial r$, можно с учетом выражения для I_1 получить общее решение этого уравнения

$$s_r(r, t) = 3K_e \{B(t)b^3/r^3 - rf'(r)e^{-\alpha t}\}$$

Поскольку при $a(0) \leq r \leq b$ функция $f(r) = 0$, то, сравнивая с (3.14), находим, что $B(t) = S(t)$. Следовательно

$$s_r(r, t) = 3K_e \{S(t) b^3/r^3 - rf'(r) e^{-\alpha t}\}, \quad a(t) \leq r \leq a(0)$$

Учитывая (3.15) и равенство $\beta = (1+\omega)\alpha$, можно видеть, что эволюционное уравнение (3.12) выполняется тождественно.

К условиям сопряжения (3.16) в рассматриваемом случае добавляется условие непрерывности неупругих деформаций (2.3), что с учетом специфики задачи означает $\varepsilon_r^{(p)} = 0$ в частицах твердой фазы на волне сильного разрыва. Отсюда получим при $r = a(t)$:

$$U - C + \gamma Z + 3fe^{-\alpha t} = 0, \quad U - C + \gamma S + 3fe^{-\alpha t} = -\delta \quad (3.26)$$

$$\gamma S + \omega \gamma Z - (1+\omega)rf'e^{-\alpha t} = 0, \quad 2C + (A_1 - (1+\omega)^{-1})\delta = 0$$

Уравнения (3.26) вместе с (3.15) и граничным условием (3.20) или (3.23) образуют замкнутую систему.

Несложно получить некоторые оценки решения сформулированной системы при малых t . Учитывая, что $f(0) = 0$, $S(0) = -\omega Z(0)$, $C(t) = C(0)$, из (3.15), (3.20), (3.26) получим

$$f'(0) = 0, \quad U^*(0) = -Z^*(0) = -\omega \beta \delta (1+\omega)^{-2}$$

$$\gamma^*(0) = 2\omega \beta (1+\omega)^{-1} [(1+\omega)A_1 - 1] / [1 + (1+\alpha)A_1]^{-2}$$

Условия $\gamma^*(0) > 0$, $a(0)/b < 1$ дают противоречивые ограничения на A_1 и ω , откуда следует, что в задаче (3.18) с неподвижной внешней границей всегда реализуется первый случай.

Для задачи (3.19) с заданным на внешней границе давлением из (3.15), (3.23) и (3.25) при $t \rightarrow 0$ получаем

$$U^*(0) = -S^*(0) = -\omega \beta \delta (1+\omega)^{-2}$$

$$\gamma^*(0) = 2\omega \beta (1+\omega)^{-2} B^{-1} (2\omega (1+\omega)^{-1} B^{-1} - 1)$$

где $B = 2p_1 - 1/(1+\omega) - A_1$. Из условий $\gamma^*(0) > 0$ и $a(0)/b < 1$ следует ограничение $B < 2\omega/(1+\omega)$.

Если воспользоваться предположением о затухании девиатора напряжений и скоростей движения всех частиц тела при $t \rightarrow \infty$, то $U^*(t) \rightarrow 0$, $Z^*(t) \rightarrow 0$, $S(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$. Из системы (3.20), (3.22) следует для первой задачи

$$\gamma_\infty^{-1} = 1/2(1+A_1), \quad C_\infty = 1/2\delta(1-A_1), \quad U_\infty = -Z_\infty = -\gamma_\infty^{-1} \quad (3.27)$$

где индекс ∞ указывает на значения функций при $t \rightarrow \infty$.

В отличие от (3.27) решение второй задачи, такое, что $\gamma_\infty < \infty$, $f_\infty' < \infty$, не существует в общем случае. Отказ от предположения об ограниченности γ_∞ , f_∞' приводит к решению

$$U_\infty = -p_1 \delta, \quad Z_\infty = S_\infty = 0, \quad a_\infty^3/b^3 = 0 \quad (3.28)$$

Сравнение (3.24)–(3.25) и (3.27)–(3.28) показывает качественное отличие процессов кристаллизации расплава в вязкоупругую твердую фазу при различных граничных условиях: в постоянном объеме (при $\theta = \text{const}$) процесс заканчивается равновесием твердой и жидкой фаз; при заданном давлении процесс идет до полного превращения расплава в твердую фазу.

Далее, если $\delta > 0$, что соответствует твердой фазе, более плотной по сравнению с расплавом в ненапряженном состоянии, то из (3.24), (3.27) можно видеть, что условие $C < 0$ сжатия жидкой фазы и условие $a/b < 1$ взаимно противоречивы. Кристаллизация при заданных условиях может идти, если $\rho_e < \rho_i$, как, например, в случае льда и воды. При $\delta < 0$ и $a(0) < -a_\infty$ получаем, что $A_* < 0$. Таким образом, расплав сначала «мгновенно» кристаллизуется с поверхности до радиуса $a(0)$, а затем, по мере релаксации сдвиговых напряжений, твердая фаза плавится в области $a(0) \leq r \leq a_\infty$.

Задача (3.19) имеет решение как при $\delta < 0$, $A_1 < 1/(1+\omega)$, так и при

$\delta > 0$, $A_1 > 1/(1+\omega)$, $2p_1 - A_1 \leq (2\omega + 1)/(\omega + 1)$ и характеризуется постоянным давлением в расплаве, равным $\frac{1}{2}p^*(A_1 + 1/(\omega + 1))$, и монотонным движением фазовой границы к центру сферы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Курдюков Г. В., Утевский Л. М., Энтин Р. И. Превращения в железе и стали. М.: Наука, 1977. 238 с.
2. Магницкий В. А. Внутреннее строение и физика Земли. М.: Наука, 1965. 379 с.
3. Гиббс Дж. В. Термодинамика. Статистическая механика. М.: Наука, 1982. 584 с.
4. Бердичевский В. Л. Вариационные принципы механики сплошной среды. М.: Наука, 1983. 448 с.
5. Гринфельд М. А. Об условиях термодинамического равновесия фаз нелинейно-упругого материала. — Докл. АН СССР, 1980, т. 251, № 4, с. 824—828.
6. Кондауров В. И., Никитин Л. В. О фазовых переходах первого рода в нелинейно-упругих средах. — Докл. АН СССР, 1982, т. 262, № 6, с. 1348—1351.
7. Трускиновский Л. М. Равновесные межфазные границы. — Докл. АН СССР, 1982, т. 265, № 2, с. 306—310.
8. Лурье А. И. Теория упругости. М.: Наука, 1970. 939 с.
9. Арутюнян Н. Х., Наумов В. Э. Краевая задача теории вязкоупругопластичности для растущего тела, подверженного старению. — ПММ, 1984, т. 48, вып. 1, с. 17—28.
10. Никитин Л. В. Об анизотропии упругой среды с начальными напряжениями. — Изв. АН СССР. Физика Земли, 1983, № 12, с. 29—33.
11. Ильюшин А. А., Победря Б. Е. Основы математической теории термовязкоупругости. М.: Наука, 1970. 280 с.
12. Соколовский В. В. Распространение упруговязкопластических волн в стержнях. — ПММ, 1948, т. 12, вып. 3, с. 261—280.
13. Truesdell C., Noll W. The nonlinear field theories of mechanics. — In: Handbuch der Physik. B. III/3. B.—Heidelberg — N. Y.: Springer, 1965. 602 S.
14. Кондауров В. И. О законах сохранения и симметризации уравнений нелинейной теории термоупругости. — Докл. АН СССР, 1981, т. 256, № 4, с. 819—823.
15. Кондауров В. И. Об уравнениях упруговязкопластической среды с конечными деформациями. — ПМТФ, 1982, № 4, с. 133—139.
16. Курант Р. Уравнения с частными производными. М.: Мир, 1964. 830 с.
17. Bowen R. M. Toward a thermodynamics and mechanics of mixtures. — Arch. Rat. Mech. Anal., 1967, v. 24, No. 5, p. 370—403.

Поступила в редакцию
5.VI.1985

Москва