Прикладная механика и техническая физика, 1996, т. 37, № 1

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В УПРУГИХ СРЕДАХ

УДК 539.3

И. А. Калиев

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск

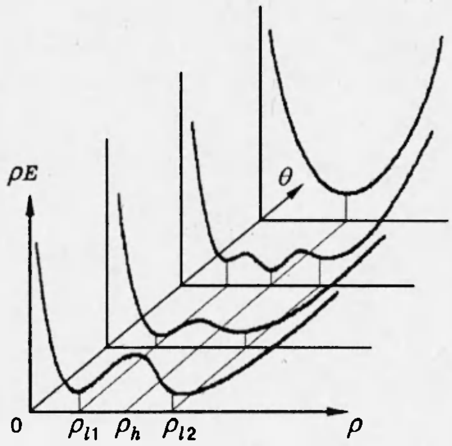
Предлагаются различные модификации модели для описания фазовых переходов в многомерных упругих средах с использованием невыпуклой функции свободной энергии. В качестве параметра порядка, отвечающего за различие между фазами, выбирается плотность вещества. Эти модели могут быть привлечены к описанию таких физических явлений, как фазовые переходы в твердых телах (например, графит — алмаз), или к описанию материалов с «памятью» формы. В случае одной пространственной переменной модель является обобщением известной модели Фалька [1–3]. Найдены некоторые частные решения.

1. Введение. Считается, что имеет место *фазовый переход*, если некоторые величины, характеризующие макроскопические свойства вещества, меняются скачком относительно внешних переменных. В качестве одного из параметров для описания состояния вещества используется функция энергии. Это может быть внутренняя энергия, свободная энергия Гельмгольца либо свободная энергия Гиббса, которые связаны преобразованием Лежандра. Нас будут интересовать не обычные фазовые переходы стефановского типа, когда энергия вещества меняется скачком, а такие, при которых сама функция энергии изменяется непрерывным образом. Рваться могут ее производные. Если первые производные терпят скачок, то это — фазовые переходы *первого рода.* Для фазовых переходов *второго рода* только вторые производные могут терпеть разрыв. Обычно предполагают, что внутренняя энергия и свободная энергия Гельмгольца являются невыпуклыми функциями в некотором диапазоне своих аргументов. Более детально описать фазовые переходы можно с помощью специфического параметра, характеризующего различие между фазами, так называемого *параметра порядка.*

Теоретическое описание процессов фазового перехода началось со знаменитого уравнения Ван-дер-Ваальса (см. [4]) для фазового перехода первого рода между жидкостью и паром. В этой работе впервые фазовые переходы описываются с использованием невыпуклой функции энергии. В [5] добавлена зависимость от градиента плотности в свободную энергию, чтобы получить непрерывный профиль при пересечении границы раздела жидкость — пар.

Важный шаг для описания фазовых переходов второго рода сделал Л. Д. Ландау [6], который начал разрабатывать теорию, названную позже его именем. Основное предположение, сделанное в [6], состоит в том, что функция энергии зависит только от параметра порядка и температуры. Чтобы избежать резкого выделения границ между фазами В. Л. Гинзбург [7] добавил зависимость от градиента параметра порядка в функцию энергии. Получаемые при этом дифференциальные уравнения часто называют теорией фазовых переходов Гинзбурга — Ландау. Независимо от них А. Ф. Девоншир [8] развил подобную теорию для случая ферроэлектрика.

В [1–3] при описании фазовых переходов в упругих средах в качестве параметра порядка, отвечающего за различие между фазами, выбирается деформация. При этом свободная



энергия имеет вид, подобный предложенному в [6, 7]. Задачи, связанные с одномерной моделью Фалька, исследовались рядом авторов [9, 10].

В качестве замечания к моделям Фалька можно высказать то, что они предполагают постоянство плотности материала, что не всегда оправдано на практике.

2. Статическая теория типа Ландау. Пусть тело занимает объем Ω и находится в равновесии. Рассмотрим случай равновесия, когда все переменные не зависят от времени и температура θ постоянна во всем объеме Ω. Положение равновесия определяется минимумом полной свободной энергии

$$\mathcal{E} = \int\limits_{\Omega} \rho E \, dx + \mathcal{E}_{\text{ext}} ,$$

где $\rho = \rho(\mathbf{x})$ — плотность вещества; $\mathbf{x}$ — пространственные координаты; ρE — плотность свободной энергии Гельмгольца на единицу объема; E — удельная свободная энергия; $\mathcal{E}_{\text{ext}}$ — вклад в полную энергию за счет внешних сил. В теории типа Ландау будем предполагать, что E зависит от плотности ρ и температуры θ, а в теории типа Гинзбурга — Ландау E зависит также от градиента плотности $\nabla\rho$. Вид функции $\mathcal{E}_{\text{ext}}$ уточнять не будем, лишь заметим, что $\mathcal{E}_{\text{ext}}$ есть функционал от вектора перемещений. Для простоты изложения можно положить $\mathcal{E}_{\text{ext}} = 0$. Это соответствует отсутствию внешних объемных сил, и граница области $\partial\Omega$ также свободна от действия внешних поверхностных сил, т. е. тело свободное. Свободное тело находится в равновесии, если равновесная плотность ρ_{eq} доставляет минимум функции ρE.

Для дальнейшего постулируем уравнение состояния как зависимость E от ρ и θ. Будем предполагать, что E, а точнее функция $F = \rho E$, имеет вид, подобный приведенному на рисунке: F — невыпуклая функция относительно аргумента ρ, $F \to \infty$ при $\rho \to 0$ и при $\rho \to \infty$, F имеет единственный минимум при больших температурах, который соответствует плотности ρ_h высокотемпературной фазы, и два (или более) минимума при низких температурах, отвечающих плотностям ρ_{l_i} низкотемпературных фаз. При некоторых температурах могут сосуществовать высокотемпературная и низкотемпературные фазы.

Абсолютный минимум по ρ при фиксированной температуре соответствует устойчивой фазе, а остальные минимумы — метастабильным фазам. Среда для понижения своей энергии может перейти из метастабильного состояния в устойчивое, но для этого необходимо преодолеть некоторый энергетический барьер.

3. Динамическая теория типа Ландау. Для упругих тел наиболее удобным является лагранжево описание, которое применяется в дальнейшем. Используя уравнение состояния $E = E(\rho, \theta)$, можно выписать систему уравнений для ρ, θ и вектора перемещений $\mathbf{u}$. Делается это так же, как в теории термоупругости, с той лишь разницей, что в теории термоупругости $E = E(\hat{\varepsilon}, \theta)$, где $\hat{\varepsilon}$ — лагранжев тензор деформаций:

$$2\hat{\varepsilon} = \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \boldsymbol{\xi}}\right)^* + \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \boldsymbol{\xi}}\right) + \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \boldsymbol{\xi}}\right)^* \circ \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \boldsymbol{\xi}}\right), \quad \mathbf{u} = \mathbf{x} - \boldsymbol{\xi} \tag{3.1}$$

($\boldsymbol{\xi}$ — лагранжевы координаты, $\mathbf{x}$ — эйлеровы координаты, $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}, t)$).

Из уравнений неразрывности и импульсов можно получить формулу для плотности [11]:

$$\rho(\boldsymbol{\xi}, t) = \rho_0(\boldsymbol{\xi})(1 + 2J_1 + 4J_2 + 8J_3)^{-1/2}. \tag{3.2}$$

Здесь $\rho_0(\boldsymbol{\xi})$ — начальное распределение плотности; $J_k = J_k(\hat{\varepsilon})$ — k-й инвариант тензора деформаций $\hat{\varepsilon} = \hat{\varepsilon}(\boldsymbol{\xi}, t)$ $(k = 1,\ 2,\ 3)$.

Внутренняя энергия U связана со свободной энергией E, температурой θ и энтропией $\mathcal{S}$ соотношением $U = E + \theta\mathcal{S}$. Для дальнейшего удобно ввести обозначение $\widehat{P}$ для вспомогательного тензора, связанного с тензором напряжений P формулами

$$P = T \circ \widehat{P} \circ T^*, \quad \widehat{P} = T^{-1} \circ P \circ T^{*-1}, \tag{3.3}$$

где

$$T = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \boldsymbol{\xi}} = I + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \boldsymbol{\xi}} \tag{3.4}$$

— тензор дисторсии; I — единичный тензор.

Из уравнения притока тепла с использованием аксиомы термодинамики упругого тела [11]

$$\rho\theta \frac{d\mathcal{S}}{dt} = \operatorname{div}(æ\nabla\theta) \tag{3.5}$$

можно получить

$$\widehat{P} = \rho \frac{\partial E}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial \hat{\varepsilon}}, \qquad \mathcal{S} = -\frac{\partial E}{\partial \theta}. \tag{3.6}$$

Здесь $\partial\rho/\partial\hat{\varepsilon}$ — градиент тензорной функции $\rho(\hat{\varepsilon})$ по тензору $\hat{\varepsilon}$.

Воспользовавшись (3.2), (3.6), вычислим $\widehat{P}$:

$$\widehat{P} = -\rho \frac{\partial E}{\partial \rho} \left[\frac{1}{2} \rho_0 (1 + 2J_1 + 4J_2 + 8J_3)^{-3/2}\, 2\left(\frac{\partial J_1}{\partial \hat{\varepsilon}} + 2\frac{\partial J_2}{\partial \hat{\varepsilon}} + 4\frac{\partial J_3}{\partial \hat{\varepsilon}}\right)\right] =$$

$$= -\rho \frac{\partial E}{\partial \rho} \frac{\rho^3}{\rho_0^2} [I + 2(J_1 I - \hat{\varepsilon}) + 4(J_2 I - J_1\hat{\varepsilon} + \hat{\varepsilon}^2)], \tag{3.7}$$

$$\widehat{P} = -\frac{\rho^4}{\rho_0^2} \frac{\partial E}{\partial \rho} [(1 + 2J_1 + 4J_2)I - (2 + 4J_1)\hat{\varepsilon} + 4\hat{\varepsilon}^2].$$

Вторая из формул (3.6) и аксиома (3.5) используются при получении уравнения для температуры:

$$-\rho\theta \frac{\partial^2 E}{\partial \theta^2} \frac{\partial \theta}{\partial t} = \operatorname{div}(æ\nabla\theta) - \theta \frac{\partial \widehat{P}}{\partial \theta} : \frac{\partial \hat{\varepsilon}}{\partial t}. \tag{3.8}$$

Приведем пример зависимости E от θ:

$$\rho E(\rho,\theta) = E_0(\theta) + (\theta-\theta_0)E_1(\rho) + E_2(\rho), \quad E_0(\theta) = C_1 + C_2\theta - C\theta\ln\theta.$$

В данном примере коэффициент при θ_t в уравнении (3.8) равен C. В общем случае естественно предположить, что

$$0 < -\rho\theta\,\frac{\partial^2 E}{\partial\theta^2} < \infty.$$

В уравнение импульсов перемещение $\mathbf{u}$ вводится с помощью соотношений

$$\mathbf{v} = \frac{\partial\mathbf{x}}{\partial t} = \frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t}, \qquad \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{\partial^2\mathbf{u}}{\partial t^2}.$$

Уравнение импульсов принимает вид

$$\rho\,\frac{\partial^2\mathbf{u}}{\partial t^2} = \operatorname{div} P + \rho\mathbf{f}. \tag{3.9}$$

Легко проверить, что уравнения (3.8) и (3.9) вместе с равенствами (3.1)–(3.4), (3.7) образуют замкнутую систему уравнений для нахождения $\mathbf{u}$ и θ. Для полноты записи уравнений требуется еще преобразовать входящие в (3.8) и (3.9) операции div к лагранжевым координатам. Если писать div_x для этой операции в эйлеровых координатах, а div_ξ — в лагранжевых (аналогичный смысл имеют ∇_x и ∇_ξ), то нужное преобразование дается формулами

$$\operatorname{div}_x P = \operatorname{div}_\xi(T\circ\widehat{P}) - T\circ\widehat{P}\circ T^*\langle\operatorname{div}_\xi(T^{*^{-1}})\rangle; \tag{3.10}$$

$$\operatorname{div}_x(æ\nabla\theta) = \operatorname{div}_\xi(æT^{-1}\circ T^{*^{-1}}\langle\nabla_\xi\theta\rangle) - æT^{*^{-1}}\langle\nabla_\xi\theta\rangle\operatorname{div}_\xi(T^{*^{-1}}). \tag{3.11}$$

Система (3.1)–(3.4), (3.7)–(3.11) сложна как для решения конкретных задач, так и для общего математического анализа. Поэтому рассмотрим ее линейный вариант.

Отправным пунктом линейной теории является понятие *естественного* состояния термоупругого тела. Естественным назовем такое состояние, в котором отсутствуют деформации ($\hat{\varepsilon} = 0$), а плотность и температура постоянны ($\rho = \rho_0$, $\theta = \theta_0$). Ищется другое решение, мало отличающееся от естественного состояния. Деформация называется малой, если норма тензора $T - I$ мала по сравнению с единицей. В силу формул (3.1) и (3.4) малость деформаций равносильна малости нормы тензора $\partial\mathbf{u}/\partial\boldsymbol{\xi}$ или $\hat{\varepsilon}$. Кроме того, будем предполагать, что разность температур $\tilde{\theta} = \theta - \theta_0$ и ее производные малы (порядка малости тензора $\hat{\varepsilon}$). Соотношения линейной теории получаются, если во всех точных соотношениях отбросить величины высшего порядка малости по сравнению с малой нормой тензора $T-I$. Так, в линейной теории соотношения (3.1), (3.2) упрощаются до следующих:

$$2\hat{\varepsilon} = \left(\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial\boldsymbol{\xi}}\right)^* + \left(\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial\boldsymbol{\xi}}\right); \tag{3.12}$$

$$\rho = \rho_0(1 - J_1(\hat{\varepsilon})). \tag{3.13}$$

Формула (3.7) примет вид

$$\widehat{P} = (-p - \alpha\tilde{\theta} + \lambda J_1)I + 2\mu\hat{\varepsilon}, \tag{3.14}$$

где

$$p = \mu = \rho_0^2\,\frac{\partial E}{\partial\rho}(\rho_0,\theta_0); \qquad \alpha = \rho_0^2\,\frac{\partial^2 E}{\partial\rho\partial\theta}(\rho_0,\theta_0);$$

$$\lambda = 2\rho_0^2\,\frac{\partial E}{\partial \rho}(\rho_0,\theta_0) + \rho_0^3\,\frac{\partial^2 E}{\partial \rho^2}(\rho_0,\theta_0).$$

Линеаризованный эйлеров тензор напряжений P из (3.3) с учетом (3.14) запишем как

$$P = (-p - \alpha\tilde{\theta} + \lambda J_1)I. \tag{3.15}$$

Наконец, будем предполагать, что коэффициент теплопроводности $æ = \mathrm{const}$. В итоге уравнения (3.8), (3.9) сводятся к следующей системе уравнений:

$$\rho_0\,\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = -\alpha\nabla\theta + \lambda\nabla(\operatorname{div}\mathbf{u}) + \rho_0\mathbf{f}; \tag{3.16}$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = k\Delta\theta - \beta\,\frac{\partial}{\partial t}(\operatorname{div}\mathbf{u}). \tag{3.17}$$

Здесь

$$k = \frac{æ}{-\rho_0\theta_0\,\dfrac{\partial^2 E}{\partial\theta^2}(\rho_0,\theta_0)}; \qquad \beta = \frac{\alpha\theta_0}{-\rho_0\theta_0\dfrac{\partial^2 E}{\partial\theta^2}(\rho_0,\theta_0)}.$$

В (3.16), (3.17) операции div, ∇, Δ выполняются по лагранжевым переменным $\boldsymbol{\xi}$ (индекс $\boldsymbol{\xi}$ для краткости опущен).

В отличие от соответствующих уравнений классической линейной теории термоупругости, в уравнении (3.16) отсутствует слагаемое с $\Delta\mathbf{u}$. Это принципиально, поскольку в стационарной задаче оставшееся слагаемое $\lambda\nabla(\operatorname{div}\mathbf{u})$ не является эллиптическим оператором.

Начальные условия к уравнениям (3.16), (3.17) имеют вид

$$\mathbf{u}\Big|_{t=0} = \mathbf{u}_0(\boldsymbol{\xi}), \quad \mathbf{u}_t\Big|_{t=0} = \mathbf{u}_1(\boldsymbol{\xi}), \quad \theta\Big|_{t=0} = \theta_0(\boldsymbol{\xi}), \tag{3.18}$$

а граничные условия на боковой поверхности цилиндра $S_T = \partial\Omega \times (0,T)$ следующие:

$$(\operatorname{div}\mathbf{u})\Big|_{S_T} = v_s(\boldsymbol{\xi},t), \quad \theta\Big|_{S_T} = \theta_s(\boldsymbol{\xi},t). \tag{3.19}$$

Задача (3.16)–(3.19) при $k > 0$, $\lambda > 0$ является корректной, т. е. решение $\{\mathbf{u},\theta\}$ существует, единственно и непрерывно зависит от данных задачи. Доказательство этого утверждения в данной работе не приводится.

В случае одной пространственной переменной $((\xi,t) \in Q_T = (\xi_1,\xi_2)\times(0,T))$ уравнения (3.16), (3.17) примут вид

$$\rho_0 u_{tt} = -\alpha\theta_\xi + \lambda u_{\xi\xi} + \rho_0 f; \tag{3.20}$$

$$\theta_t = k\theta_{\xi\xi} - \beta u_{\xi t}. \tag{3.21}$$

Рассмотрим решения системы (3.20), (3.21) с сильным разрывом, а именно: предполагается, что существует гладкая функция $\xi = R(t)$, которая делит область Q_T на две подобласти (Q_T^- и Q_T^+). В каждой из подобластей Q_T^- и Q_T^+ функции u, θ являются гладкими функциями и удовлетворяют уравнениям (3.20), (3.21) в классическом смысле. На границе раздела фаз $\xi = R(t)$ функции u, θ могут терпеть разрывы. При этом скачки функций u, θ, u_ξ, θ_ξ не будут произвольными, они связаны определенными соотношениями, которые называются уравнениями сильного разрыва:

$$D[\rho_0 u_t] - [\alpha\theta] + [\lambda u_\xi] = 0; \tag{3.22}$$

$$D[\theta] + D[\beta u_\xi] + [k\theta_\xi] = 0. \tag{3.23}$$

Здесь $[g] = \lim\limits_{\xi\to R(t)+0} g(\xi,t) - \lim\limits_{\xi\to R(t)-0} g(\xi,t)$; D — скорость движения границы $\xi = R(t)$: $D = dR(t)/dt$; коэффициенты ρ_0, α, λ, k, β — константы, различные в Q_T^- и Q_T^+.

Будем искать частные решения с сильным разрывом в бесконечной области $(\xi,t) \in (-\infty,\infty)\times(0,\infty)$ типа бегущих волн: $u(\xi,t) = u(\xi - at)$, $\theta(\xi,t) = \theta(\xi - at)$, $R(t) = at$. Для этого необходимо предположить, что $\rho_0 f = \varphi(\xi - at)$ с известной функцией φ и заданным числом a. Введем обозначения: $\xi - at = z$, $u^- = u(z)$, $\theta^- = \theta(z)$ при $z < 0$, $u^+ = u(z)$, $\theta^+ = \theta(z)$ при $z > 0$. Для функций $u^\pm$, $\theta^\pm$ из уравнений (3.20), (3.21) получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$a^2\rho_0 u_{zz} = -\alpha\theta_z + \lambda u_{zz} + \varphi; \tag{3.24}$$

$$-a\theta_z = k\theta_{zz} + a\beta u_{zz}, \tag{3.25}$$

а из уравнений сильного разрыва (3.22), (3.23) следуют условия сопряжения при $z = 0$:

$$a^2[\rho_0 u_z] + [\alpha\theta] - [\lambda u_z] = 0; \tag{3.26}$$

$$a[\theta] + a[\beta u_z] + [k\theta_z] = 0 \tag{3.27}$$

($[g] = g^+(0) - g^-(0)$). Проинтегрировав систему (3.24), (3.25), имеем

$$\theta^\pm(z) = \theta^\pm(0) + \theta_z^\pm(0)\,\frac{k^\pm}{A^\pm}\Big(1 - e^{-\frac{A^\pm}{k^\pm}z}\Big) - \frac{a\beta^\pm}{k^\pm(a^2\rho_0^\pm - \lambda^\pm)}\,e^{-\frac{A^\pm}{k^\pm}z}\int\limits_0^z e^{\frac{A^\pm}{k^\pm}y}\int\limits_0^y \varphi(x)\,dx\,dy,$$

$$u^\pm(z) = u^\pm(0) + \bigg(u_z^\pm(0) - \theta_z^\pm(0)\,\frac{k^\pm\alpha^\pm}{A^\pm(a^2\rho_0^\pm - \lambda^\pm)}\bigg)z +$$

$$+\,\theta_z^\pm(0)\,\frac{(k^\pm)^2\alpha^\pm}{(A^\pm)^2(a^2\rho_0^\pm - \lambda^\pm)}\Big(1 - e^{-\frac{A^\pm}{k^\pm}z}\Big) + \frac{1}{(a^2\rho_0^\pm - \lambda^\pm)}\int\limits_0^z\int\limits_0^y \varphi(x)\,dx\,dy +$$

$$+\,\frac{a\alpha^\pm\beta^\pm}{k^\pm(a^2\rho_0^\pm - \lambda^\pm)^2}\int\limits_0^z e^{-\frac{A^\pm}{k^\pm}w}\int\limits_0^w e^{\frac{A^\pm}{k^\pm}y}\int\limits_0^y \varphi(x)\,dx\,dy\,dw,$$

$$A^\pm = a\bigg(1 - \frac{\alpha^\pm\beta^\pm}{(a^2\rho_0^\pm - \lambda^\pm)}\bigg).$$

Верхние индексы + и − соответствуют значениям величин при $z > 0$ и $z < 0$. Восемь постоянных интегрирования ($u^\pm(0)$, $u_z^\pm(0)$, $\theta^\pm(0)$, $\theta_z^\pm(0)$) должны удовлетворять двум соотношениям (3.26), (3.27), и, следовательно, только шесть из них являются независимыми, например: $u^\pm(0)$, $u_z^-(0)$, $\theta^\pm(0)$, $\theta_z^-(0)$. Тогда $u_z^+(0)$, $\theta_z^+(0)$ находятся из (3.26), (3.27).

4. Динамическая теория типа Гинзбурга — Ландау. В теории фазовых переходов типа Гинзбурга — Ландау будем предполагать, что удельная свободная энергия E зависит от плотности ρ, температуры θ, а также от градиента плотности $\nabla_\xi\rho = \rho_\xi = \Big(\frac{\partial\rho}{\partial\xi_1}, \frac{\partial\rho}{\partial\xi_2}, \frac{\partial\rho}{\partial\xi_3}\Big)$:

$$E = E(\rho,\theta,\nabla_\xi\rho) = E_L(\rho,\theta) + \frac{\gamma}{2}\,\frac{|\nabla_\xi\rho|^2}{\rho} \tag{4.1}$$

($E_L(\rho,\theta)$ — свободная энергия типа Ландау).

Основная задача данного пункта — получить зависимость лагранжева тензора деформаций $\hat P$ от $\hat\varepsilon$ и θ, соответствующую заданной функции E из (4.1).

Рассмотрим произвольное движение области Ω : $\hat{\varepsilon} = \hat{\varepsilon}(\xi, t)$, $\theta = \theta(\xi, t)$, удовлетворяющее уравнению баланса энергии [11]:

$$\int\limits_{Q_T} \rho \frac{\partial U}{\partial t} \, d\xi dt = \int\limits_{Q_T} (\hat{P} : \hat{\varepsilon}_t + \operatorname{div}(æ \nabla \theta)) \, d\xi dt, \tag{4.2}$$

а на границе области $S_T = \partial\Omega \times (0, T)$ — условию

$$\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{n}}\bigg|_{S_T} = \frac{\partial \rho}{\partial \xi} \cdot \mathbf{n}\bigg|_{S_T} = 0 \tag{4.3}$$

($\mathbf{n}$ — вектор внешней нормали к $\partial\Omega$).

Поскольку $U(\xi, t) = E + \theta \mathcal{S}$, то

$$\rho \frac{\partial U}{\partial t} = \rho \frac{\partial E}{\partial t} + \rho \theta \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial t} + \rho \mathcal{S} \frac{\partial \theta}{\partial t}; \tag{4.4}$$

$$\rho \frac{\partial E}{\partial t} = \rho \frac{\partial E}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial E}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \rho \frac{\partial E}{\partial \rho_\xi} \frac{\partial \rho_\xi}{\partial t} =$$

$$= \rho \Big(\frac{\partial E_L}{\partial \rho} - \frac{\gamma}{2\rho^2} |\nabla_\xi \rho|^2 \Big) \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial E_L}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \rho \Big(\frac{\gamma}{\rho} \rho_\xi \Big) \frac{\partial \rho_\xi}{\partial t}. \tag{4.5}$$

Подставив (4.4), (4.5) в (4.2) и используя (3.5), получим

$$\int\limits_{Q_T} \Big\{ \Big(\rho \frac{\partial E_L}{\partial \rho} - \frac{\gamma}{2\rho} |\nabla_\xi \rho|^2 \Big) \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \Big(\frac{\partial E_L}{\partial \theta} + \mathcal{S} \Big) \frac{\partial \theta}{\partial t} \Big\} \, d\xi dt +$$

$$+ \int\limits_{Q_T} \gamma \rho_\xi \frac{\partial \rho_\xi}{\partial t} \, d\xi dt = \int\limits_{Q_T} \hat{P} : \hat{\varepsilon}_t \, d\xi dt. \tag{4.6}$$

Отдельно рассмотрим

$$\int\limits_{Q_T} \gamma \rho_\xi \frac{\partial \rho_\xi}{\partial t} \, d\xi dt = \gamma \int\limits_{Q_T} \Big\{ \operatorname{div}_\xi \Big(\rho_\xi \frac{\partial \rho}{\partial t} \Big) - \Delta_\xi \rho \frac{\partial \rho}{\partial t} \Big\} \, d\xi dt =$$

$$= \gamma \int\limits_{S_T} \rho_\xi \cdot \mathbf{n} \frac{\partial \rho}{\partial t} \, d\xi dt - \gamma \int\limits_{Q_T} \Delta_\xi \rho \frac{\partial \rho}{\partial t} \, d\xi dt. \tag{4.7}$$

Интеграл по границе S_T в (4.7) зануляется за счет условия (4.3). Учитывая, что $\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial \hat{\varepsilon}} : \hat{\varepsilon}_t$, из (4.6), (4.7) выводим

$$\int\limits_{Q_T} \Big\{ \Big(\rho \frac{\partial E_L}{\partial \rho} - \frac{\gamma}{2\rho} |\nabla_\xi \rho|^2 - \gamma \Delta_\xi \rho \Big) \frac{\partial \rho}{\partial \hat{\varepsilon}} - \hat{P} \Big\} : \hat{\varepsilon}_t \, d\boldsymbol{\xi} dt + \int\limits_{Q_T} \rho \Big(\frac{\partial E_L}{\partial \theta} + \mathcal{S} \Big) \frac{\partial \theta}{\partial t} \, d\boldsymbol{\xi} dt = 0. \tag{4.8}$$

Поскольку $\hat{\varepsilon}$ и θ независимы и произвольны, то из (4.8) имеем

$$\mathcal{S} = -\frac{\partial E_L}{\partial \theta}, \quad \hat{P} = \Big(\rho \frac{\partial E_L}{\partial \rho} - \frac{\gamma}{2\rho} |\nabla_\xi \rho|^2 - \gamma \Delta_\xi \rho \Big) \frac{\partial \rho}{\partial \hat{\varepsilon}}. \tag{4.9}$$

Величина $\partial \rho / \partial \hat{\varepsilon}$ уже вычислена при получении формулы (3.7). Подстановка этого выражения в (4.9) приводит к формуле

$$\hat{P}=\left(-\frac{\rho^4}{\rho_0^2}\frac{\partial E_L}{\partial\rho}+\frac{\gamma\rho^2}{2\rho_0^2}|\nabla_\xi\rho|^2+\frac{\gamma\rho^3}{\rho_0^2}\Delta_\xi\rho\right)[(1+2J_1+4J_2)I-(2+4J_1)\hat{\varepsilon}+4\hat{\varepsilon}^2]. \tag{4.10}$$

Интересно сравнить формулу (4.10) с выражением для тензора напряжений, приведенным Кортевегом [12] для сжимаемой жидкости:

$$K=\left(-\rho^2\frac{\partial E}{\partial\rho}+c_1|\nabla\rho|^2+c_2\Delta\rho\right)I+c_3\nabla\rho\otimes\nabla\rho+c_4\nabla\otimes\nabla\rho. \tag{4.11}$$

Здесь c_i — функции от плотности ρ и температуры θ; $(\mathbf{a}\otimes\mathbf{b})_{ij}=a_ib_j$. Видно, что слагаемые с единичным тензором I в (4.10) и (4.11) имеют подобный вид.

Уравнения (3.8) и (3.9) вместе с формулами (3.1)–(3.4), (4.10) образуют замкнутую систему уравнений для нахождения $\mathbf{u}$ и θ.

Действуя так же, как в п. **3**, после линеаризации получим линеаризованный лагранжев тензор напряжений

$$\hat{P}=(-p-\alpha\tilde{\theta}+\lambda J_1+\gamma\rho_0\Delta\rho)I+2\mu\hat{\varepsilon},$$

где p, α, λ, μ те же, что и в формуле (3.14), только вместо E надо подставить E_L. Линеаризованный эйлеров тензор напряжений

$$P=(-p-\alpha\tilde{\theta}+\lambda J_1+\gamma\rho_0\Delta\rho)I.$$

Аналоги уравнений (3.16), (3.17) для $\mathbf{u}$, θ примут вид

$$\rho_0\frac{\partial^2\mathbf{u}}{\partial t^2}=-\alpha\nabla\theta+\lambda\nabla(\operatorname{div}\mathbf{u})-\gamma\rho_0^2\nabla\Delta(\operatorname{div}\mathbf{u})+\rho_0\mathbf{f}; \tag{4.12}$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial t}=k\Delta\theta-\beta\frac{\partial}{\partial t}(\operatorname{div}\mathbf{u}). \tag{4.13}$$

Начальные условия к уравнениям (4.12), (4.13) следующие:

$$\mathbf{u}\Big|_{t=0}=\mathbf{u}_0(\xi),\quad \mathbf{u}_t\Big|_{t=0}=\mathbf{u}_1(\xi),\quad \theta\Big|_{t=0}=\theta_0(\xi), \tag{4.14}$$

а на боковой поверхности цилиндра $S_T=\partial\Omega\times(0,T)$ задаются

$$(\operatorname{div}\mathbf{u})\Big|_{S_T}=0,\quad \frac{\partial(\operatorname{div}\mathbf{u})}{\partial\mathbf{n}}\Big|_{S_T}=0,\quad \theta\Big|_{S_T}=\theta_s(\xi,t). \tag{4.15}$$

Задача (4.12)–(4.15) является корректной.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 95-01-00985а) и Международного научного фонда (грант RCK300).

ЛИТЕРАТУРА

1. **Falk F.** Ginsburg — Landau theory of static domain walls in shape-memory alloys // Z. Phys. 1983. Bd 51. S. 177–185.
2. **Falk F.** Elastic phase transitions and nonconvex energy functions // Free Boundary Problems: Theory and Applications. 1988. V. 1. (Pitman Res. Notes in Math. Ser. 185). P. 45–59.

3. **Falk F., Konopka P.** Three-dimensional Landau theory describing the martensitic phase transitions of shape memory alloys // J. Phys.-Condens. Matter. 1990. N 2. P. 61–77.
4. **Van der Waals J. D.** Die Kontinuität des gasförmigen und flüssigen Zustandes: Thesis Leiden, 1873.
5. **Van der Waals J. D.** The thermodynamic theory of capillarity flow under the hypothesis of a continuous variation of density (in Dutch) // Verhandel. Konink. Akad. Weten. Sect. 1. 1893. V. 1. N 8.
6. **Ландау Л. Д.** К теории фазовых переходов // ЖЭТФ. 1937. Т. 7, № 7. С. 19–37.
7. **Гинзбург В. Л.** Несколько замечаний о фазовых переходах второго рода и макроскопической теории сегнетоэлектриков // ФТТ. 1960. Т. 2, № 9. С. 2031–2043.
8. **Devonshire A. F.** Theory of ferroelectrics // Adv. Phys. 1954. V. 3, N 10. P. 85–130.
9. **Niezgodka M., Sprekels J.** Existence of solutions for a mathematical model of structural phase transitions in shape memory alloys // Math. Meth. Appl. Sci. 1988. N 10. P. 197–223.
10. **Sprekels J.** Global existance for thermomechanical processes with non-convex free energies of Ginsburg — Landau form // J. Math. Anal. Appl. 1989. V. 141. P. 333–348.
11. **Овсянников Л. В.** Введение в механику сплошных сред. Новосибирск, 1977. Ч. 2.
12. **Korteweg D. J.** Sur la forme que prennent les equations des movement des fluides si l'on tient comple des forces capillaires par des variations de densite // Arch. Neerl. Sci. Exactes. Nat. Ser. II. 1901. N 6. P. 1–24.

Поступила в редакцию 6/II 1995 г.