Лекция I(Самара 2009).

Исследование процесса направленной кристаллизации методом математической реконструкции.

Е. В. Радкевич[1], [2]

Тема лекций–проблемы реконструкции процесса направленной кристаллизации [1], включая математическое описание возникновения при этом микропористой структуры. Современные подходы к теоретическому описанию начальной стадии процесса кристаллизации дают для скорости нарастания твердой фазы на начальной сдадии значения, на порядки отличающиеся от экспериментальных.

$\ln(1/t)$(система фазового поля, модель Кана-Хилларда),

Ct(Статистическая теория скорости течения Колмогорова)

$C\sqrt{t}$- эксперимент

Поэтому возникла необходимость построения математический объект, воспроизводящего основные неустойчивости процесса и стабилизирующие их обратные связи. Задача визуализации процесса, его РЕКОНСТРУКЦИИ.

Создание такого математического объекта потребовало согласования

микро и макро масштабов,

волнового и диффузионного процессов.

[1] Московский Государственный Университет им М.В.Ломоносова

[2] Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант N 09-01-00171) и (грант N 09-01-00288)

1. Физические основы реконструкции процесса направленной кристаллизации. В настоящее время значительно расширились возможности теоретического материаловедения благодаря развитию вычислительных средств. Без этих подходов невозможносоздание материалов, эксплуатируемых в жестких условиях, например, **жаропрочных сплавов**

(задача– получить сплавы с темп. плавл. 1400-1600 град. против 900 гр. на сенодняшний день).

В производстве литых лопаток турбин авиационных двигателей используется метод направленной кристаллизации, который позволяет получать дендритную структуру дисперсионно упрочненного сплава. Экспериментальные исследования, проведенные за последние годы широким спектром, позволили установить многие детали этого процесса, который является основой технологии [1]. Хотя основные черты процесса направленной кристаллизации хорошо изучены, этого нельзя сказать о всех деталях процесса, которые ответственны за структуру сплава. В данной работе предпринята попытка по основным чертам процесса построить более детальное теоретическое описание, для чего на наш взгляд, следует использовать термин "реконструкция". Этот термин будет означать, что по основным известным чертам воспроизведится более детальный теоретический образ исследуемого объекта, который на этапе вычислительного эксперимента должен сопоставляться с реальным объектом. Для этого было предложено теоретическое описание на основе математических моделей. Ряд проблем повышения качества и надежности литых лопаток связан с необходимостью снижения микропористости сплава, повышения жаропрочности и снижения высокотемпературной ползучести.

Известно [1], что формирование структуры сплава, получаемого методом направленной кристаллизации,

1. происходит в твердо-жидкой области. Эта область представляет собою динамическую пористую среду, где твердая фаза представлена растущими дендритами, промежутки между которыми заполнены жидкой фазой расплава.

2. Естественно предположить, что перекрывание дендритов (особенно их вторичных ветвей) может привести к тому, что последующее затвердевание расплава приведет к его усадке с формированием внутренних напряжений и микропор.

3. В свою очередь твердо-жидкая зона кристаллизации формируется за счет неустойчивости фронта кристаллизации, обусловленной концентрационным переохлаждением,

4. а также ликвацией компонентов расплава. Причиной, вызывающей ликвацию, является спинодальный распад жидкого расплава, происходящий за счет "глубокого"внедрения системы (расплава) в метастабильную или даже в лабильную область в ходе высокоскоростного (высокоградиентного) охлаждения.

Таким образом, возникает математический объект

с **несколькими "вложенными"друг в друга частными (локальными) математическими моделями.**

В этом математическом объекте должно быть представлено **взаимовлияние нескольких процессов**,

процессов **разного временного и пространственного масштабов**.

2. **Статистическая теория скорости течения процесса кристаллизации металлов** Начнем с обзора некоторых моделей, исходных для наших исследований, и прежде всего со статистического метода описания процесса кристаллизации, предложенного Колмогоровым [19]. (Этот метод при схематичных, но довольно общих предположениях дает решение задачи о скорости течения процесса кристаллизации вне начальной стадии, где по эксперниմенту скорость нарастания твердой фазы порядка $\sqrt{t}$.) Но решаемые при этом задачи– принципиальны для дальнейших обобщений.

Как мы уже отмечали, для металлургии имеет существенное значение изучение скорости роста кристаллов

1. при <u>случайном</u> образовании центров кристаллизации (зародышей).

Известные затруднения представляет <u>учет столкновений</u> зерен кристаллического вещества, возникающих вокруг отдельных зародышей кристаллизации. Эти столкновения нарушают правильную форму зерен, прекращая их рост в некоторых направлениях.

2. В предположении несущественности последствий таких столкновений

в [19] при довольно широких допущениях дается <u>точная</u> формула для вероятности $p(t)$, с которой наудачу выбранная точка P объема, заполненного подлежащим кристаллизации веществом, попадает в течение промежутка кристаллизации внутрь уже закристаллизовавшейся массы. С вполне достаточным приближением можно считать, что доля вещества, закристаллизовавшегося за промежуток времени t, также равна $p(t)$. Это позволяет определить число зародышей кристаллизации, образующихся в течение всего процесса кристаллизации.

0.1 Математическая постановка задачи

Дан некоторый объем $V \in \mathbb{R}^d$, $d = 2, 3$. В начальный момент ($t = 0$) объем V занят "маточной фазой". Через время t часть $V_1(t)$ этого объема заполняется кристаллизовавшимся веществом. Рост объема $V_1(t)$ со временем t совершается следующим образом.

1. В свободной части $V \setminus V_1$ объема V возникают новые зародыши кристаллизации, так что для любого объема $V' \in V \setminus V_1$ вероятность образования одного зародыша в этом объеме за промежуток времени от t до $t + \Delta t$ равна $\alpha(t) V' \Delta t + o(\Delta t)$ и более, чем одного зародыша — $o(\Delta t)$, где $o(\Delta t)$ — бесконечно малая величина по сравнению с Δt. Эти вероятности не зависят от распределения зародышей кристаллизации, образовавшихся раньше момента t (марковость процесса), если только оно гарантирует свободу объема V' от кристаллической массы к моменту t.

2. Вокруг новообразовавшихся зародышей и вокруг всей кристаллизованной массы происходит наростание этой массы с линейной скоростью $c(t, n) = k(t)\, c(n)$, зависящей от времени t и направления n, $|n| = 1$. Предполагается, что концы векторов $c(n)n$, отложенных в направлении n из начала координат, образуют выпуклую поверхность.

В сформулированных условиях существенным ограничением является то, что линейная скорость $c(t, n)$, хотя и может зависеть от направления n, но зависимость эта во всех точках однородна. Иначе говоря, выводимые далее формулы справедливы либо

a) при упрощенном предположении равномерного роста во всех направлениях, либо

b) для случая одинаково ориентированных в пространстве кристаллов произвольной формы.

3. Отметим еще один особый случай: все зародыши кристаллизации образуются в самом начале, в среднем по β на единицу объема. Соответствующие формулы получаются, если учесть, что в этом случае функция $\alpha(t)$ есть дельта-функция Дирака $\beta\delta(0)$, сосредоточенная в нуле.

0.2 Выводы

Введем среднюю по всем направлениям скорость наростания закристаллизованной массы c по формуле

$$c^d = \frac{1}{|S|}\int\limits_{S} c^d(n)ds, \quad d = 2, 3,$$

где интегрирование производится по поверхности единичной сферы S в $\mathbb{R}^d$ с центром в начале координат, $|S| = 4\pi, d = 3$ и $|S| = 2\pi, d = 2$. Справедливы следующие результаты.

1. При достаточно большом по сравнению с размером отдельных зародышей объеме V объем $V_1(t)$, занимаемый кристаллизовавшимся веществом, имеет вид

$$V_1(t) = V(1 - e^{-A_d c_d^d \Omega_d}). \tag{1}$$

Если $\alpha(t)$ и $c(t, n)$ не зависят от времени, можно положить $\alpha(t) = \alpha$, $k(t) = 1$. Тогда

$$\Omega_d = \frac{\alpha\, t^{d+1}}{d+1} \qquad \Longrightarrow V_1(t) = V(1 - e^{-\frac{A_d}{d+1} c_d^d \alpha\, t^{d+1}}). \tag{2}$$

2. Если все зародыши кристаллизации образуются в самом начале, то

$$\Omega_d = \int\limits_0^t \alpha(t')\Big(\int\limits_{t'}^{t} k(\tau)d\tau\Big)^d dt' = \beta\Big(\int\limits_0^t k(\tau)d\tau\Big)^d. \tag{3}$$

Если, кроме того, $k = 1$, т.е. $c(t, n)$ не зависит от t, то

$$\Omega_d = \beta\, t^d, \tag{4}$$

$$V_1(t) = V(1 - e^{-A_d c_d^d \beta\, t^d}). \tag{5}$$

Формула (4) позволяет оценить скорость роста зародыша, когда все зародыши кристаллизации образуются в самом начале (начальная задача). Имеем

$$\frac{dV_1}{dt} = A_d c_d^d V\, \beta\, d\, t^{d-1}\, e^{-A_d c_d^d \beta\, t^d} \tag{6}$$

и, в частности, для плоской модели $(d = 2)$ процесса кристаллизации

$$\frac{dV_1}{dt} = 2\pi\, c_2^2\, V\, \beta\, t\, e^{-\pi\, c_2^2 \beta\, t^2}. \tag{7}$$

Отметим существенный для дальнейшего факт, вытекающий из (6), (7): *на начальной стадии кристаллизации скорость роста доли вещества, закристаллизовавшегося за промежуток времени t, имеет степенной рост, например, для двумерной модели она пропорциональна t* (см. (7)). С другой стороны, отсутствие механизма взаимодействия между зародышами приводит к абсурдному факту для процесса кристаллизации двухкомпонентных смесей — скорость при $t = 0$ конечна, что отрицает начальную стадию спинодального распада, из которой возникает начальное распределение зародышей.

Правильная оценка скорости роста закристаллизованной массы позволит нам в дальнейшем провести отбор допустимых моделей кристаллизации.

3. Система фазового поля(D. Callginalp).

В этом параграфе мы рассмотрим систему фазового поля [17], [18], описывающую медленные процессы кристаллизации, когда на временном интервале (который не зависит от малого параметра) существует неустойчивая область промежуточного агрегатного состояния. Для этой задачи мы предлагаем слабую постановку, которая по сути является интегральной аппроксимацией условий ортогональности для линеаризованного стандартного уравнения, возникающего при построении стабилизирующегося асимптотического решения. Такой выбор дает возможность обосновать предельный переход по малому параметру для решений типа цуга волн [17].

Артифакт–**обычное $\mathcal{D}'$ определение приводит к нелепости: при мылых возмущениях(порядка $\varepsilon^{\gamma},\ 0<\gamma<\ 1,$) фронт раздела фаз может дернуться на расстояние порядкм $O(1)$.**

Старый спор с Кружковым о ценности теоремы существ. и единств. с потерей информации о фронте!!!!!

Количество ошибочныцных результатов, даже у людей очень известный, опирающихся на предельный переход в $\mathcal{D}'$ определении слабого решения в нелинейных задачах–несчетно!!!!

Этот же артифакт нужно учитывать при переходе к пределу в нелинейных цепочках (nonlinear chains).

Решения типа цуга волн и соответствующая сингулярно-предельная задача

Рассмотрим более общий случай, когда $\overline{\varphi^0} \in BV$, но $\overline{\varphi^0} \notin BVC$. Это случай диффузии области

ПАС(промежуточного агрегатного состояния, фамильярно-"полочки").

Наши рассмотрения базируются на трактовке, предложенной в [11], согласно которой область смеси рассматривается как большое число M областей чистых фаз, жидких и твердых, малых объемов порядка v_ε ($M = M(\varepsilon) \to \infty$ и $v_\varepsilon \to 0$ при $\varepsilon \to 0$). Макроскопическое описание области смеси предлагается получить вычислением слабого предела решений типа цуга волн при $\varepsilon \to 0$.

Начнем с описания начальной геометрической структуры. Предположим, что для $t = 0$ область Ω содержит области чистых фаз (жидкой и твердой) $\Omega^{\pm}_{0,\varepsilon}$ и области смеси (расплава) $\Omega^*_{0,\varepsilon}$, заполненные большим числом областей чистых фаз (твердой и жидкой) малого объема $\Omega^i_{0,\varepsilon}$, $i = 1, 2, \ldots, M$, разделенные поверхностями фазового перехода. Здесь M — число четное. Чтобы упростить изложение, рассмотрим случай квазисферической симметрии. Пусть $\Gamma^i_{0,\varepsilon}$, $i = 1, \ldots, M-1$, — поверхности раздела между областями $\Omega^i_{0,\varepsilon}$ такие, что $\partial\Omega^i_{0,\varepsilon} = \Gamma^{i-1}_{0,\varepsilon} \cup \Gamma^i_{0,\varepsilon}$, и пусть $\Gamma^0_{0,\varepsilon} = \partial\Omega^-_{0,\varepsilon}$, $\partial\Omega^+_{0,\varepsilon} = \Gamma^M_{0,\varepsilon} \cup \partial\Omega$. Через $D^i_{0,\varepsilon}$ обозначим области, ограниченные $\Gamma^i_{0,\varepsilon}$, и предположим, что $D^i_{0,\varepsilon} \subset D^{i+1}_{0,\varepsilon}$, $i = 0, \ldots, M$, где $D^0_{0,\varepsilon} = \Omega^-_{0,\varepsilon}$ и $D^{M+1}_{0,\varepsilon} \equiv \Omega$. Также будем считать что $\Gamma^i_{0,\varepsilon}$ — гладкие поверхности коразмерности 1 такие, что

$$c_1\varepsilon^\alpha \le \operatorname{dist}(\Gamma^{k-1}_{0,\varepsilon}, \Gamma^k_{0,\varepsilon}) \le c_2\varepsilon^\alpha, \;\; c_1^{\pm} \le |\Omega^{\pm}_{0,\varepsilon}| \le c_2^{\pm}, \;\; \operatorname{dist}(\Gamma^M_{0,\varepsilon}, \partial\Omega) \ge c_3, \tag{8}$$

где $k = 1, \ldots, M$, $\alpha \in (0,1)$ и постоянные $c_l^{\pm}, c_j > 0$ не зависят от ε.

Предположим, что выполнено следующее геометрическое условие.

Условие 0.1.

(A) Система поверхностей $\Gamma^i_{0,\varepsilon}$, $i = 0, \dots, M$, такова, что каждая $\Gamma^i_{0,\varepsilon} \in C^3$ равномерно для $\varepsilon \in [0, \varepsilon_0]$, $M \to \infty$ и $M\varepsilon^\alpha \to L = \mathrm{const}$, если $\varepsilon \to 0$, и в пределе эти поверхности заполняют область смеси Ω^*_0, ограниченную C^3-поверхностью Γ^-_0 и Γ^+_0.

Если условие (A) выполнено, то существует функция $s^0(x, \varepsilon) \in C^3(\overline{\Omega})$ такая, что любая $\Gamma^i_{0,\varepsilon}$ является линией уровня этой функции.

Выберем специальные начальные условия для допредельной системы фазового поля как базовой для построения жестко-фронтовых асимптотических решений. Очевидно, что (8) предполагает, что начальные данные локально представимы разложениями типа (23) при $t = 0$.

Кроме того, формула (23) показывает, что здесь нет взаимодействия (с точностью $\mathcal{O}(\varepsilon^\infty)$) между соседними волнами (решениями типа кинка) до расстояний между ними не меньше, чем $\mathcal{O}(\varepsilon^{1-\delta})$ с любой постоянной $\delta > 0$. Таким образом, для достаточно малых t асимптотическое решение рассматриваемой задачи выражается суперпозицией локальных решений (23):

$$\varphi^{\mathrm{as}}_1(x, t, \varepsilon) = \sum_{i=0}^{M} (-1)^i \chi(\eta_i) + \varepsilon \Big\{ \frac{\kappa}{2} \theta^{\mathrm{as}}_0(x, t, h) + \sum_{i=0}^{M} \omega_i(\eta_i, x) \Big\}. \tag{9}$$

Для удобства мы предположили существование функций $s^{(1)}(x, t, \varepsilon)$ и $s^{(2)}(x, t, \varepsilon)$, которые описывают соответственно поверхности $\Gamma^i_{t,\varepsilon}$ с четными и нечетными номерами для $t \geq 0$. Через $\Omega^i_{t,\varepsilon}$ обозначены области между поверхностями $\Gamma^{i-1}_{t,\varepsilon}$ и $\Gamma^i_{t,\varepsilon}$, $i = 1, \dots, M$. Полагаем $\Omega^*_{t,\varepsilon} = \bigcup\limits_{i=1}^{M} \Omega^i_{t,\varepsilon}$.

При построении формального асимптотического решения получим $s^{(j)}(x,t,\varepsilon) = s_0^{(j)}(x,t,h) + \varepsilon c_1^{(j)}(x,t,h)$, $h = \varepsilon^\alpha$, $\varepsilon \in [0,\varepsilon_0]$, $j = 1,2$, так что $|\nabla_x s^{(j)}| > 0$ равномерно в $x \in \Omega^*_{t,\varepsilon}$ для любого $h \in [0, h_0 = \varepsilon_0^\alpha]$ и $\Gamma^i_{t,\varepsilon} = \{x, s_0^{(n_i)}(x,t,h) = ih\}$, $n_i = 1$, $i = 2k$, $n_i = 2$, $i = 2k+1$, $0 \le i \le M$. Очевидно, что $s^{(1)}\big|_{t=0} = s^{(2)}\big|_{t=0} = s^0(x,\varepsilon)$ и, с точностью $\mathcal{O}(\varepsilon)$, $\nu_i = \nabla s_0^{(n_i)}/|\nabla s_0^{(n_i)}|\,\big|_{\Gamma^i_{t,\varepsilon}}$ — внешние нормали к $D^i_{t,\varepsilon}$. Кроме того, в (9) использовано обозначение $\eta_i = (s^{(n_i)}(x,t,\varepsilon) - ih)/(|\nabla s_0^{(n_i)}|\varepsilon)$, $\omega_i \in \mathbf{S}$; здесь θ_0^{as} — гладкая функция (для фиксированного $\varepsilon > 0$), локальное представление которой имеет вид

$$\theta_0^{\mathrm{as}} = \frac{1}{2}(\theta_{i-1,c} + \theta_{i,c}) + \frac{1}{2}(\theta_{i-1,c} - \theta_{i,c})\chi(\eta_i), \quad x \in \Omega^{i-1}_{t,\varepsilon}\bigcup \Omega^i_{t,\varepsilon}.$$

По аналогии с жестко-фронтовым решением $\theta_{i,c}$ — достаточно гладкое продолжение вспомогательных функций $\theta_i = \theta_i(x,t,h)$. Напомним, что семейство функций $\{\theta_i\}$ и $s_0^{(j)}$, $j = 1,2$, определяется как решение цепочки задач Стефана — Гиббса — Томпсона

$$\frac{\partial \theta_i}{\partial t} = \Delta\theta_i, \quad x \in \Omega^i_{t,\varepsilon}, \quad t > 0, \tag{10}$$

$$\theta_{i-1}\big|_{\Gamma^{i-1}_{t,\varepsilon}-0} = \theta_i\big|_{\Gamma^{i-1}_{t,\varepsilon}+0}, \quad \theta_i\big|_{\Gamma^i_{t,\varepsilon}-0} = \theta_{i+1}\big|_{\Gamma^i_{t,\varepsilon}+0}, \tag{11}$$

$$\begin{gathered}\frac{\partial\theta_{i-1}}{\partial\nu_{i-1}}\Big|_{\Gamma^{i-1}_{t,\varepsilon}-0} - \frac{\partial\theta_i}{\partial\nu_{i-1}}\Big|_{\Gamma^{i-1}_{t,\varepsilon}+0} = (-1)^{i+1}2V_{\nu_{i-1}},\\ \frac{\partial\theta_i}{\partial\nu_i}\Big|_{\Gamma^i_{t,\varepsilon}-0} - \frac{\partial\theta_{i+1}}{\partial\nu_i}\Big|_{\Gamma^i_{t,\varepsilon}+0} = (-1)^i 2V_{\nu_i},\end{gathered} \tag{12}$$

$$(-1)^{i-1}\kappa_1\theta_i\big|_{\Gamma^{i-1}_{t,\varepsilon}-0} = \mathcal{K}^{i-1}_t - V_{\nu_{i-1}}, \quad (-1)^i\kappa_1\theta_i\big|_{\Gamma^i_{t,\varepsilon}+0} = \mathcal{K}^i_t - V_{\nu_i}, \tag{13}$$

замыкаемой начальными и граничными (на $\partial\Omega$) условиями. Здесь $i = 0,\dots,M+1$. Мы положили $\Gamma^{-1}_{t,\varepsilon} = \Gamma^{M+1}_{t,\varepsilon} = \emptyset$, так что первое (второе) условие в (11)–(13) исчезает при $i = 0$ ($i = M+1$). Кроме того,

$$V_{\nu_i} = -(|\nabla s_0^{(n_i)}|)^{-1}\frac{\partial s_0^{(n_i)}}{\partial t}\Big|_{\Gamma^i_{t,\varepsilon}}, \quad \mathcal{K}^i_t = -\operatorname{div}\nu_i\big|_{\Gamma^i_{t,\varepsilon}}.$$

Через $\Omega^0_{t,\varepsilon} = \Omega^-_{t,\varepsilon}$ обозначаем область, ограниченную $\Gamma^0_{t,\varepsilon}$. Область $\Omega^{M+1}_{t,\varepsilon} = \Omega^+_{t,\varepsilon}$ ограничена $\Gamma^M_{t,\varepsilon}$ и $\partial\Omega$. Малые поправки $c_1^{(j)}(x,t,h)$ также являются поправками порядка $\mathcal{O}(\varepsilon)$ для температуры, которые могут быть вычислены как решения линеаризованной цепочки задач Стефана — Гиббса — Томпсона (см. [18]).

Для фиксированного $\varepsilon > 0$ и достаточно малого $t > 0$ классическая разрешимость цепочки задач Стефана — Гиббса — Томпсона получается аналогично [18]. В то же время, на основе приведенной выше предельной задачи нельзя сформулировать условия на начальные данные для температуры $\theta^0(x,\varepsilon)$ так, чтобы эти условия имели смысл при $\varepsilon \to 0$, поскольку классическая разрешимость задачи Стефана — Гиббса — Томпсона предполагает условия согласования на поверхностях $\Gamma^i_{0,\varepsilon}$ для любого $M \to \infty$. Однако мы можем обойти эти трудности, если найдем модельную задачу для слабого предела температуры при $\varepsilon \to 0$. Итак, выбираем начальные данные

$$\varphi\big|_{t=0} = \varphi_1^{\mathrm{as}}(x,0,\varepsilon) + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \tag{14}$$
$$\theta\big|_{t=0} = \theta_0^{\mathrm{as}}(x,0,\varepsilon) + \mathcal{O}(\varepsilon), \quad s^{(j)}\big|_{t=0} = s^0(x,\varepsilon),$$

где $\theta_0^{\mathrm{as}}(x,0,\varepsilon)$, $\varphi_1^{\mathrm{as}}(x,0,\varepsilon)$, и гладкие функции $s^0(x,\varepsilon)$ таковы, что условия согласования выполнены для фиксированного $\varepsilon > 0$. Однако мы сделаем эти условия более точными, выявив предельную задачу.

4. Проблемы предельного перехода. Исследуя предельный переход при $\varepsilon \to 0$ мы столкнулись с поразительным фактом

Корректность и слабые решения В этом параграфе на примере системы фазового поля мы приведем метод отбора корректного определения слабого решения сингулярной задачи с точки зрения его устойчивости при предельном переходе по малому параметру. Основное внимание уделяется проблеме предельного перехода, когда предел $\overline{\varphi^0}(x)$ начальных данных функции порядка $\varphi^0(x,\varepsilon)$ принадлежит $BVC(\Omega) = \{\varphi, \varphi \in BV(\Omega), |\varphi| = 1\}$, где BV — стандартное обозначение пространства функций с ограниченной вариацией. Для таких начальных данных при дополнительных предположениях предел функции порядка $\varphi(x,t,\varepsilon)$ принадлежит $BVC(\Omega)$ для почти всех $t \in [0,T]$. В этом случае предельная функция имеет не более конечного числа поверхностей Γ_t коразмерности 1, на которых предельная температура $\overline{\theta}$ имеет слабый разрыв (т.е. $\overline{\theta} \in C$ и $\overline{\theta} \notin C^1$). Эти поверхности разделяют область Ω на области $\Omega_t^{\pm}$, заполненные различными агрегатными состояниями. В $\Omega_t^{\pm}$ предельная функция порядка $\varphi_{\lim}(x,t)$ принимает одно из значений ± 1. Такие состояния среды называются *жестко-фронтовыми*.

Как мы отмечали выше, в теории фазовых переходов первого рода возможно состояние другого рода, когда, наряду с областями $\Omega_t^{\pm}$, заполненными "чистыми" фазами — однородными агрегатными состояниями (твердой или жидкой фазами), существует также стратифицированная (слоистая) область Ω_t^*, заполненная средой в промежуточном агрегатном состоянии. Такую область будем называть *областью промежуточного агрегатного состояния* (ПАС). С точки зрения предельного перехода (цепочки сингулярно-предельных задач со свободной границей) области ПАС рассматривались в [11],

[18]. Одним из замечательных свойств системы фазового поля, как гладкой аппроксимации модификаций задачи Стефана со свободной границей, является возможность описания области ПАС как результата предельного перехода в системе фазового поля со специальными начальными данными. Изучение этого свойства будет главной целью данного параграфа.

Мы подробно рассмотрим только одно из возможных соотношений между параметрами τ, ξ и a: $\tau = \xi^2 = a$, $\ell = 1$ и $K = 1$. Положим $a = \varepsilon \ll 1$. После переобозначений в начальных и граничных условиях запишем систему фазового поля в виде

$$
\begin{gathered}
\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \frac{\partial\theta}{\partial t} = \Delta\theta, \quad (x,t) \in Q, \\
\varepsilon^2 \frac{\partial\varphi}{\partial t} = \varepsilon^2 \Delta\varphi + \varphi - \varphi^3 + \varepsilon\kappa\theta, \qquad (15) \\
\varphi\big|_{t=0} = \varphi^0(x,\varepsilon), \quad \theta\big|_{t=0} = \theta^0(x,\varepsilon), \quad \varphi\big|_{\Sigma} = 1, \quad \theta\big|_{\Sigma} = \theta_b.
\end{gathered}
$$

Здесь $\kappa = \text{const}$, $Q = (0,T) \times \Omega$, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ — ограниченная область с C^∞-границей, $n \leq 3$, $\Sigma = [0,T] \times \partial\Omega$, функции φ^0 и θ^0 достаточно гладкие при $\varepsilon \geq \text{const} > 0$ и функция θ_b также достаточно гладкая.

Пусть Γ_0 — гладкая поверхность коразмерности 1, $\Gamma_0 \cap \partial\Omega = \emptyset$, разделяющая Ω на две части $\Omega_0^\pm$ так, что $\Omega = \Omega_0^+ \cup \Gamma_0 \cup \Omega_0^-$. Пусть φ^0 и θ^0 — специальные начальные данные такие, что $\varphi^0 = \pm 1 + \mathcal{O}(\varepsilon)$ вне ε-окрестности поверхности Γ_0 и $\theta^0 \in C(\Omega)$ (см. подробности в [17] и комментарий ниже). Сингулярно-предельная задача в этом случае имеет вид

$$
\frac{\partial\theta^\pm}{\partial t} = \Delta\theta^\pm, \quad x \in \Omega_t^\pm, \quad t > 0, \qquad (16)
$$

$$
\theta^\pm\big|_{t=0} = \theta^0_\pm(x), \quad x \in \Omega_0^\pm, \quad \theta^+\big|_{\Sigma} = \theta_b, \qquad (17)
$$

$$
[\theta^\pm]\big|_{\Gamma_t} = 0, \quad \left[\frac{\partial\theta^\pm}{\partial\nu}\right]\big|_{\Gamma_t} = -2V_\nu, \qquad (18)
$$

$$\kappa_1 \theta^{\pm}\big|_{\Gamma_t} = \mathcal{K}_t - V_\nu. \tag{19}$$

Это хорошо известная *задача Стефана — Гиббса — Томпсона*. Здесь $\theta^0_{\pm}(x) = \overline{\theta^0}(x)$ для $x \in \Omega^{\pm}_0$. Через $[f]\big|_{\Gamma_t}$ обозначен скачок функции f на свободной границе Γ_t; ν обозначает нормаль к Γ_t (внешнюю к Ω^-_t), V_ν — нормальную скорость фронта Γ_t, $\mathcal{K}_t = -\operatorname{div}(\nu)\big|_{\Gamma_t}$ — среднюю кривизну поверхности Γ_t и $\kappa_1 = 3\kappa/\sqrt{2}$. Предположим, что $\Gamma_t \cap \partial\Omega = \emptyset$ для любых $t \geq 0$, т.е. фронт не пересекает фиксированную границу $\partial\Omega$.

Для описания области ПАС сформулируем следующие условия.

Условие 0.2. *(1) Функция порядка $\varphi(x,t,\varepsilon)$ должна быть такой, что ее слабый предел при $\varepsilon \to 0$ равен тождественно нулю для $x \in \Omega^*_t$, принадлежащих переходной зоне Ω^*_t.*

2) В допредельной области $\Omega^*_{t,\varepsilon}$, соответствующей регуляризации области ПАС (диффузии области ПАС), решение системы фазового поля может быть описано в терминах структуры цуга волн. В этом случае область Ω разбита на достаточно большое число областей "малого" объема, заполненных "чистыми фазами" — твердой или жидкой — и переходными зонами между ними.

Условие (1) означает, в частности,что для почти всех t предельная функция порядка $\overline{\varphi}$ принадлежит $BV(\Omega)$, но $\overline{\varphi} \notin BVC(\Omega)$.

Условие (2) основано на концепции, предложенной в [17], согласно которой структура цуга волн описывается цепочкой модифицированных задач Стефана внутри областей "малого" объема, заполненных "чистыми фазами" (твердой или жидкой), и может быть использована для описания аппроксимации температуры в области ПАС. Такую структуру мы называем *диффузией области* ПАС.

Наша задача — выработать принцип тестирования начальных данных на предмет существования процесса диффузии в области ПАС на временном интервале, который не зависит от ε. Это позволит получить сингулярно-предельную задачу, описывающую процессы в предельной области ПАС. Важнейшим вопросом в этой задаче является процедура предельного перехода при $\varepsilon \to 0$, который может быть совершен только в слабом смысле. Соответственно, мы должны получить корректное (допустимое) определение слабого решения (15), для которого возможен предельный переход для решений типа цуга волн.

Слабая постановка задачи должна удовлетворять следующим естественным предположениям:

1. В жестко-фронтовой ситуации невзаимодействующих переходных зон, находящихся на достаточно большом расстоянии друг от друга, предельный переход по малому параметру должен приводить к предельной модифицированной задаче Стефана с несколькими непересекающимися границами (в частности, начальная функция φ^0 должна быть выбрана такой, чтобы предельная функция $\overline{\varphi^0}$ принадлежала пространству $BVC(\Omega)$).

2. В случае диффузии области ПАС предельный переход при $\varepsilon \to 0$ должен привести к корректно поставленному определению слабого решения предельной задачи для решений типа цуга волн.

3. Слабая постановка должна быть устойчивой относительно достаточно малых возмущений начальных данных.

Классический метод(линейные задачи). Классический метод проверки корректности слабой постановки задачи широко используется в теории распределений. А именно, слабое определение (например, производной в $\mathcal{D}'$) для допустимых функций (из C^∞) должно привести к тому же результату в классическом определении.

Здесь мы покажем, что **стандартная $\mathcal{D}'$-процедура определения слабого решения системы фазового поля непригодна**. В частности, она неустойчива даже в жестко-фронтовой ситуации.

Чтобы дать обоснование предельного перехода для решений типа цуга волн [17], [10] мы предлагаем другое определение слабого решения системы фазового поля [11]. В основе этого определения заключены условия разрешимости (ортогональности) для линеаризованного стандартного уравнения, возникающие при построении стабилизирующегося асимптотического решения. Отметим, что условие ортогональности играет центральную роль в нелинейном асимптотическом анализе. В частности, условие ортогональности приводит к граничному условию Стефана — Гиббса — Томпсона на свободной границе [10, 11, 18]. При определении слабого решения мы опираемся на тот факт, что слабая постановка есть интегральная аппроксимация условий ортогональности. Например, граничное условие Стефана — Гиббса — Томпсона слабо аппроксимируется интегральным тождеством, которое допускает слабый предельный переход при $\varepsilon \to 0$.

Тестовая проверка (см. ниже) показывает, что даже в простейшей жестко-фронтовой ситуации новая слабая постановка позволяет перейти к пределу при $\varepsilon \to 0$. Более того, формулировка слабого решения устойчива относительно малых возмущений.

Результат, касающийся слабой постановки системы фазового поля и, особенно, устойчивости нового определения слабого решения имеет важное значение и может оказаться полезным для подходов к решению других похожих задач, например, задачи Маскета, волн горения, модифицированной задачи Стефана и т.д. Получив условие ортогональности при построении стабилизирующегося асимптотического решения (как этап нелинейного асимптотического анализа), можно применить это условие для построения корректного определения слабого решения модели как гладкой аппроксимации сингулярно-предельной задачи. Последнее позволит построить соответствующее определение слабого решения самой сингулярно-предельной задачи. Пара слабых постановок дает иерархию свойств их решений при предельном переходе, что можно назвать *корректностью гладкой аппроксимации*.

Замечание.

1. Ситуация, когда предельная функция порядка $\overline{\varphi}$ равна нулю на множестве ненулевой меры, "очень" плоха, так как это значение функции порядка соответствует неустойчивым решениям изотермического уравнения диффузии (зоне спинодала). Ясно, что такие решения могут существовать только в очень специальных случаях. В связи с этим естественно, что мы получаем жесткие ограничения одновременно и на геометрию областей Ω, Ω_t^*, и на начальные и граничные условия.

2. С точки зрения теории распределений задачи со свободной границей являются задачами о распространении особенностей. Действительно, в жестко-фронтовой ситуации предельная функция порядка есть функция типа Хевисайда ($\overline{\varphi} = 1$ на Ω_t^+ и $\overline{\varphi} = -1$ на Ω_t^-) и предельная температура остается непрерывной, но со слабым разрывом на свободной границе

$\Gamma_t = \overline{\Omega_t^+} \cap \overline{\Omega_t^-}$. Поэтому граничные условия (18), (19) можно интерпретировать как условия типа Гюгонио, соответствующие задаче о распространении строгого разрыва предельной функции порядка $\overline{\varphi}$ и задаче о распространении слабого разрыва предельной температуры $\overline{\theta}$. Такую интерпретацию можно обосновать следующими аргументами. Хорошо известно, что необходимые условия существования решений типа ударной волны для квазилинейных гиперболических уравнений порождают неустойчивую цепочку условий типа Гюгонио [**?**]. Те же условия неустойчивости мы получим для граничных условий на свободной границе, если используем классическое определение слабого решения для системы фазового поля [**?**, **?**]. В дальнейшем будем называть граничные условия, возникающие при интерпретации области ПАС как предела решений типа цуга волн, *условиями типа Гюгонио*.

5. Фиаско классического слабого решения

Напомним классическое (стандартное) определения слабого решения, которое используется при исследовании линейных дифференциальных уравнения (см., например, [**?**, **?**]).

Функции $\theta \in L^2\big(0,T;W_2^1(\Omega)\big) \cap L^\infty\big(0,T;L^2(\Omega)\big)$ и $\varphi \in L^\infty\big(0,T;W_2^1(\Omega)\cap L^4(\Omega)\big)$ называются *слабым решением* задачи (15) если для любых тестовых функций

$$\xi, g \in C^1(\overline{Q}), \quad \xi\big|_\Sigma = g\big|_\Sigma = 0, \quad \xi\big|_{t=T} = g\big|_{t=T} = 0 \tag{20}$$

функции θ, φ удовлетворяют интегральным тождествам

$$I_\theta = \int\limits_Q \big(\langle\nabla\theta,\nabla\xi\rangle - (\theta+\varphi)\xi_t\big)\,dxdt + \int\limits_\Omega (\theta^0+\varphi^0)\xi(x,0)\,dx = 0, \tag{21}$$

$$I_\varphi = \int\limits_Q \Big(\varepsilon\langle\nabla\varphi,\nabla g\rangle - \frac{1}{\varepsilon}(\varphi-\varphi^3)g - \kappa\theta g - \varepsilon\varphi g_t\Big)\,dxdt+$$

$$+\varepsilon\int\limits_\Omega \varphi^0 g(x,0)\,dx = 0. \tag{22}$$

Здесь $\langle\cdot,\cdot\rangle$ — произведение в $\mathbb{R}^n$ и W_2^1 — пространство Соболева.

Как обычно, для гладких функций θ и φ, соотношения (21), (22) можно получить умножением (15) на тестовые функции ξ и g и интегрированием по частям. В рамках теории распределений это соответствует D'-определению слабого решения системы (15). Такое же определение слабого решения предложено например в хорошо известной работе Старовойтова и Плотникова. (Заметим, что в этой работе исследуется версия системы фазового поля без φ_t во втором уравнении, капиллярной задаче со свободной границей.)

Проверим, позволяет ли классическое определение слабого решения **получить сингулярно-предельную задачу (16)–(19) даже в жнстко-фронтовой ситуации**.

В жестко-фронтовой ситуации, когда $V_\nu \neq 0$, решение, получаемое при обосновании асимптотического решения [17], имеет простой вид

$$\theta_0^{\mathrm{as}} = \frac{1}{2}\big(\theta_c^+(x,t) + \theta_c^-(x,t)\big) + \frac{1}{2}\big(\theta_c^+(x,t) - \theta_c^-(x,t)\big)\chi(\eta), \quad (23)$$

$$\varphi_1^{\mathrm{as}} = \chi(\eta) + \varepsilon\Big\{\frac{\kappa}{2}\theta_0^{\mathrm{as}} + \omega(\eta,x)\Big\}, \quad \eta = \frac{s(x,t,\varepsilon)}{\varepsilon}, \quad \chi(\eta) = \operatorname{th}\Big(\frac{\eta}{\sqrt{2}}\Big). \quad (24)$$

Здесь θ_0^{as} является главным членом асимптотического разложения θ^{as} для температуры и φ_1^{as} обозначает первые два члена асимптотического разложения φ^{as} функции порядка, $s(x,t,\varepsilon) = s_0(x,t) + \varepsilon s_1(x)$ — функция расстояния между фронтом Γ_t и точками $x \in \Omega$. Функция s_0 имеет представление $s_0 = (t + \psi(x))/|\nabla\psi|$.

Функция $\psi(x)$ и сферически симметричная функция $\theta^\pm$ являются классическим решением задачи (16)–(19) с фронтом, нормальной скоростью и средней кривизной соответственно

$$\Gamma_t = \{x, \psi(x) = -t\}, \quad \nu = \frac{\nabla\psi}{|\nabla\psi|}, \quad V_\nu = -\frac{1}{|\nabla\psi|}, \quad \mathcal{K}_t = -\operatorname{div}\nu. \quad (25)$$

Обозначим гладкие продолжения функций $\theta^\pm(x,t)$ через $\theta_c^\pm$, $\omega = \omega(\eta,x) \in \mathbf{S}$, где $\mathbf{S} = C^\infty\big(\Omega; S(\mathbb{R}^1_\eta)\big)$, S — пространство Шварца, $s_1 = \psi_1(x)/|\nabla\psi|$ — гладкая функция. Как мы отмечали выше, главная часть асимптотического решения не зависит от способа продолжения. Построение поправки ψ_1 и низших членов асимптотического разложения приведено в предыдущем параграфе.

Рассмотрим задачу (15) с начальными данными

$$\varphi\big|_{t=0} = \chi(\eta^0) + \varepsilon\Big\{\frac{\kappa}{4}\theta_0^{\mathrm{as}}\big|_{t=0} + \omega_1^0(\eta^0, x)\Big\}, \tag{26}$$

$$\theta\big|_{t=0} = \theta_0^{\mathrm{as}}\big|_{t=0}, \tag{27}$$

где $\eta^0 = s^0(x)/\varepsilon$, $s^0(x)$ определяет расстояние от Γ_0, функция $\omega_1^0(\eta^0, x) \in \mathbf{S}$ отличается от фиксированной функции $\omega(\eta, x)\big|_{\eta=\eta^0}$ в формуле для асимптотического решения φ_1^{as} с точностью $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ (см. (23)). Заметим, что слабый предел любой функции $\varepsilon^{-1}\omega\big((t+\psi)/\varepsilon, x\big)$, $\omega(\eta, x) \in \mathbf{S}$, является δ-функцией Дирака на поверхности $\mathcal{T} = \bigcup\limits_{t\in[0,T]} \Gamma_t \subset Q$.

Лемма 0.1. Предположим, что $\omega(\eta, x) \in \mathbf{S}$, $\psi(x) \in C^2(\overline{\Omega})$, $|\nabla\psi| \neq 0$ и $\mathrm{dist}(\Gamma_t, \partial\Omega) \geq \mathrm{const} > 0$. Тогда для любой функции $g \in C^1(\overline{Q})$

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \varepsilon^{-1} \int\limits_Q \omega\Big(\frac{s}{\varepsilon}, x\Big) g(x,t)\, dxdt = \int\limits_{\Omega_T} A_\omega(x)\beta^{-1}(x) g(x, -\psi)\, dx, \tag{28}$$

где $s = (t+\psi)\beta + \varepsilon s_1$, $\beta = |\nabla\psi|^{-1}$, $A_\omega = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \omega(\eta, x)\, d\eta$ и Ω_T — область между поверхностями Γ_0 и Γ_T.

Эта лемма – следствие хорошо известных теорем теории распределений (см., например Гельфанда и Шилова [24]).

Очевидно, что правая часть (28) может быть записана в виде

$$\int\limits_{\Omega_T} A_\omega(x)\beta^{-1}(x) g(x, -\psi)\, dx = \big(A_\omega \delta(\mathcal{T}), g\big) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \int\limits_{\mathcal{T}} A_\omega g\, d\sigma, \tag{29}$$

где $\delta(\mathcal{T})$ — δ-функция на поверхности $\mathcal{T}$, $\beta^{-1}dx$ — мера Лере $d\sigma$ на $\mathcal{T}$, определяемая равенством $d\big(\beta(t+\psi)\big) \wedge d\sigma\big|_{t=-\psi} = dtdx$ (см. [24]).

Тестирование определения классического слабого решения. Тестирование определения классического слабого решения начнем с вычисления интегралов в (21), (22). Из (23), (25) и (28) получаем

$$
\begin{gathered}
-\int\limits_{Q} \varphi \xi_t \, dxdt + \int\limits_{\Omega} \varphi^0 \xi(x,0)\, dx \\
= \varepsilon^{-1} \int\limits_{Q} (\beta \dot{\chi} + \varepsilon v) \xi \, dxdt + \mathcal{O}(\varepsilon) \to 2 \int\limits_{\mathcal{T}} \beta \xi \, d\sigma, \quad \varepsilon \to 0. \qquad (30)
\end{gathered}
$$

Здесь $v = v_0\big(s/\varepsilon, x\big) + \mathcal{O}(\varepsilon)$, функция $v_0(\eta, x) \in \mathbf{S}$ вычислена с помощью (25) и учтено, что $A_{\dot{\chi}} = 2$. Имеем

$$
\begin{gathered}
I_\theta \to \int\limits_0^T \Big\{ -\int\limits_{\Omega_t^+} (\Delta\theta^+ - \theta_t^+) \xi \, dx - \int\limits_{\Omega_t^-} (\Delta\theta^- - \theta_t^-) \xi \, dx \Big\} \, dt \\
- \int\limits_{\mathcal{T}} \Big(\frac{\partial \theta^+}{\partial \nu} - \frac{\partial \theta^-}{\partial \nu} - 2\beta \Big) \xi \, d\sigma = 0, \quad \varepsilon \to 0,
\end{gathered}
$$

что приводит к (16) и классическому условию Стефана (18).

Подставляя (26)–(27) в (22), запишем (22) в виде

$$
\begin{gathered}
I_\varphi = -\varepsilon^{-1} \int\limits_{Q} (\ddot{\chi} + \chi - \chi^3) g \, dxdt - \int\limits_{Q} (F + \varepsilon^{1/2}(1 - 3\chi^2)\omega_1) g \, dxdt \\
+\varepsilon^{1/2} \int\limits_{Q} \langle \varepsilon \nabla \omega_1, \varepsilon \nabla g \rangle \, dxdt + \mathcal{O}(\varepsilon) = 0, \qquad (31)
\end{gathered}
$$

где

$$F = 2(\eta\langle\nabla\psi, \nabla\beta\rangle + \beta^2\langle\nabla\psi, \nabla\psi_1\rangle)\ddot{\chi}+$$
$$+(2\langle\nabla\psi, \nabla\beta\rangle + \beta(\Delta\psi - 1))\dot{\chi} + \frac{3}{2}\kappa\theta_0^{\mathrm{as}}(1-\chi^2). \qquad (32)$$

Первый интеграл в (31) равен нулю, так как $\chi = \mathrm{th}(\eta/\sqrt{2})$. Вычисляя оставшиеся интегралы, получим

$$I_\varphi = -\varepsilon \int\limits_{\Omega_T} \Big\{ 2\beta(\Delta\psi - 1) + \frac{3}{2}\kappa\theta^{\pm}(x, -\psi)A_{(1-\chi^2)} \Big\} g(x, -\psi)\beta^{-1}\, dx$$
$$-\varepsilon^{1/2} \int\limits_{Q} f_1(\eta, x, t, \varepsilon) g\, dxdt + \mathcal{O}(\varepsilon^{3/2}) = 0, \qquad (33)$$

где

$$f_1(\eta, x, t, \varepsilon) = (1 - 3\chi^2(\eta))\omega_1(\eta, x, t, \varepsilon)$$

и

$$A_{(1-\chi^2)} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} (1-\chi^2)\, d\eta = 2\sqrt{2},$$

откуда $\|f_1; C\big(0, T; L^2(\Omega)\big)\| \le \mathrm{const}$ равномерно по ε. Однако мы не можем гарантировать $\mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon})$ при $\varepsilon \to 0$. Функция $f_1(x, t, \varepsilon)$ локализована в окрестности свободной границы, так как линеаризованное изотермическое уравнение диффузии

$$\varepsilon^2 \frac{\partial\varphi}{\partial t} = \varepsilon^2 \Delta\varphi + (\varphi - \varphi^3)$$

в окрестности φ^{as} имеет непрерывный спектр. Если функция $f_1((t+\psi)/\varepsilon, x, t, \varepsilon) \mod \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon})$ не локализованная, то в противоположность (19) из (33) получаем

$$\lim_{\varepsilon\to 0} f_1\Big(\frac{(t+\psi)}{\varepsilon}, x, t, \varepsilon\Big) = 0, \qquad (34)$$

где предел понимается в смысле $\mathcal{D}'(Q)$ и, вообще говоря, (34) должно быть выполнено в целой области Q.

Если $f_1((t+\psi)/\varepsilon, x, t, \varepsilon) \mod \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon})$ локализованная, то в смысле $\mathcal{D}'(Q)$ она порядка $\mathcal{O}(\varepsilon^{1/2})$. В этом случае (33) справедливо, сумма интегралов необходимо обращается в нуль, и мы получаем

$$\kappa_1\theta^{\pm}(x, -\psi) = V_\nu(\Delta\psi - 1) - \frac{1}{2}\overline{A}_{f_1}\big|_{t=-\psi}. \tag{35}$$

Здесь использованы (19), (24) и тот факт, что

$$\overline{A}_{f_1} = \lim_{\varepsilon\to 0}\int\limits_{-\infty}^{\infty} f_1(\eta, x, t, \varepsilon)d\eta$$

в $\mathcal{D}'(Q)$.

Очевидно, что оба условия (34) и (35) отличаются от условия Гиббса — Томпсона (19).

$$\kappa_1\theta^{\pm}\big|_{\Gamma_t} = \mathcal{K}_t - V_\nu.$$

Более того, здесь мы получили неизвестную функции $\overline{A}_{f_1}$ (или $\bar{f}_1$), зависящую от первой поправки ω_1 в (26), (27).

Таким образом (в противоположность (19)), соотношение (35) (или (34)) **не дополняет систему (16), (18) до замкнутой системы**, так что мы не можем вычислить

положение свободной границы.

6 Допустимое определение слабого решения

Именим определение слабого решения система фазового поля так, чтобы необходимое условие существования жестко-фронтового решения стало точно условием Гиббса — Томпсона (19), но не (34) (или (35)).

Определение 1. *Пара функций*

$$\theta \in L^2\big(0,T;W_2^1(\Omega)\big)\cap L^\infty\big(0,T;L^2(\Omega)\big),$$
$$\varphi \in W_2^{2,1}(Q)\cap L^\infty\big(0,T;W_2^1(\Omega)\cap L^4(\Omega)\big)$$

называется слабым решением задачи (15), если для любых пробных функций $\xi(x,t)$, $g(x,t) = (g_1(x,t),\dots,g_n(x,t))$, *удовлетворяющих (20), функции* θ *и* φ *удовлетворяют (21) и интегральному тождеству*

$$J_\varphi = \varepsilon\int_Q \varphi_t\langle g,\nabla\varphi\rangle\,dxdt - \int_Q e_\varepsilon(\varphi)\operatorname{div} g\,dxdt + \int_Q \big(\varepsilon\langle\nabla\varphi, g_x\nabla\varphi\rangle + \kappa\varphi\operatorname{div}(g\theta)\big)\,dxdt = 0, \tag{36}$$

где $e_\varepsilon(\varphi) = \frac{1}{2}\varepsilon|\nabla\varphi|^2 + \frac{1}{\varepsilon}W(\varphi)$, $W(\varphi) = (\varphi^2-1)^2/4$ *и* g_x *— матрица* $(g_x)_{ik} = \partial g_i/\partial x_k$.

Как видим, в отличии от $\mathcal{D}'$ определение, это нелинейное определение слабого решения . Тождество (36) может быть получено для гладких функций φ, θ умножением второго уравнения в (15) на

на $\langle g,\nabla\varphi\rangle$

и интегрированием по частям.

Протестируем это определение (1), следуя процедуре, примененной к классическому определению слабого решени.

Тестирование определения (1). Достаточно вычислить интеграл J_φ при $\varepsilon \to 0$. Используя представление (26)–(27) решения задачи (15), (27), получим

$$J_\varphi = \varepsilon^{-2} \int\limits_Q (\ddot{\chi} + \chi - \chi^3)(\beta \langle g, \nabla\psi \rangle \dot{\chi} + \varepsilon G)\, dxdt$$

$$+\varepsilon^{-1} \int\limits_Q \beta \langle g, \nabla\psi \rangle (\varepsilon^{1/2}\omega_1 L + F)\dot{\chi}\, dxdt + \mathcal{O}(\varepsilon^{1/2}) = 0, \qquad (37)$$

$$L = \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + 1 - 3\chi^2,$$

G — ограниченная функция в $C\big(0, T; L^2(\Omega)\big)$. Так как $\chi = \mathrm{th}(\eta/\sqrt{2})$ и $L\dot{\chi} = 0$, в силу леммы 0.1 получаем, что соотношение (37) может быть преобразовано в следующее:

$$J_\varphi = \int\limits_{\Omega_T} \Big\{ \int\limits_{-\infty}^{\infty} F\dot{\chi}\, d\eta \Big\} \langle g, \nabla\psi \rangle \big|_{t=-\psi}\, dx + \mathcal{O}(\varepsilon^{1/2}) = 0. \qquad (38)$$

Для справедливости (38) необходимо, чтобы выражение в фигурных скобках обратилось в нуль. Используя точное выражение (32) для функции F, мы выводим в точности условие Гиббса — Томпсона (19).

Разлагая φ^{as}, θ^{as}, и J_φ в ряды по ε, нетрудно заметить, что полученная цепочка соотношений, в отличие от цепочки определения (1), треугольная.

Таким образом, для классического определения вклад малых, типа солитона возмущений решения в уравнение динамики свободной границы имеет порядок $\mathcal{O}(1)$, тогда как как для определения (1) вклад тех же возмущений в этот же закон движения будет порядка ε. Другими словами, предельная задача, порожденная определением 1, устойчива относительно малых возмущений.

Мы протестировали определение 1 только для специальных начальных данных (27) с возмущениями типа солитона. Результаты [11] подтверждают возможность предельного перехода в определении 1 в общем случае.

Литература

[1.] Каблов Е.Н. Литые лопатки газотурбинных двигателей (сплавы, технология, покрытия). М.: МИСИС, 2001. - 632 с.

[2.] Лякишев Н.П., Бурханов Г.С. Металлические монокристаллы. М.: Элиз, 2002. - 312 с.

[3.] Шемякин Ф.М., Михалев П.Ф. Физико-химические периодические процессы. М.: АН СССР, 1938. - 183 с.

[4.] Безбах И.Ж., Захаров Б.Г., Прохоров И.А. Рентгенографическая характеризация микросегрегации в кристаллах. // Труды 6-ой международной конференции ќРост монокристаллов и тепломассопереносљ. Обнинск: Физико-энергетический институт им. Ф.И. Лейпунского, 2005. - т. 2. - С. 352 - 361.

[5.] Matthews J.W., Blacslee A.E. Defects in epitaxial multilayers. I. Misfit dislocations. // J. Crystal Growth, 1974. - v. 27, N 1. - P. 118 - 125.

[6.] Вигдорович В.Н., Вольпян А.Е., Курдюмов Г.М. Направленная кристаллизация и физико-химический анализ. М.: Химия, 1976. - 200 с.

[7.] Бессонов О.А., Полежаев В.И. Термокапиллярная конвекция в гидродинамической модели метода Чохральского: неустойчивости пространственного течения и колебания температуры. // Труды 6-ой международной конференции «Рост монокристаллов и тепломассоперенос». Обнинск: Физико-энергетический институт им. Ф.И. Лейпунского, 2005. - т. 4. - С. 766 - 775.

[8.] Никитин Н.В., Никитин С.А., Полежаев В.И. Конвективные неустойчивости в гидродинамической модели Чохральского. // Успехи механики, 2003. - N 4. - С. 3 - 45.

[9.] Андреев В.К., Захватаев В.Е., Рябицкий Е.А. Термокапиллярная неустойчивость. Новосибирск: Наука, 2000. - 280 с.

[10.] Радкевич Е.В., Матемаматические вопросы неравновесных процессов//Издат. Тамара Рожковская, Белая книга, т 4(2007), Новосибирск, ISSN 1817-3799

[11.] Danilov V. G., Omel'yanov G. A., and Radkevich E. V., *Hugoniot-type conditions and weak solutions to the phase field system*// Eur. J. Appl. Math. v.10(1999), pp 55–77.

[12.] Яковлев Н.Н., Лукашев Е.А., Радкевич Е.В. Проблемы реконструкции процесса направленной кристаллизации. // ДАН РФ, 2008. - т. 421, N 5. - С. 625 - 629.

[13.] Васильева О.А., Лукашев Е.А., Радкевич Е.В., Яковлев Н.Н. Неизотермическая модель Кана-Хилларда с конвекцией. // Труды международной научно-технической конференции, посвященной 100-летию со дня рождения академика С.Т. Кишкина. М.: ВИАМ, 2006. - С. 157 - 160.

[14.] Яковлев Н.Н., Радкевич Е.В., Лукашев Е.А. Постановка задачи моделирования твердо-жидкой области при кристаллизации двойного эвтектического сплава. // Тезисы докладов международной научно-технической конференции

«Актуальные вопросы авиационного материаловедения». М.: ФГУП ВИАМ, 2006. - С. 26.

[15.] Шалин Р.Е., Светлов И.Л., Качанов Е.Б., Толораия В.Н., Гаврилин О.С. Монокристаллы никелевых жаропрочных сплавов. М.: Машиностроение, 1997. - 336.

[16.] *Зайцев Н.А., Рыков Ю.Г.* Численный расчет одной модели, описывающей кристаллизацию металлов I. Одномерный случай// препринт ИПМ им. М.В.Келдыша, N 72 (2007).

[17] Danilov V. G., Omel'yanov G. A., and Radkevich E. V., *Asymptotic solution of the conserved phase field system in the fast relaxation case*// Eur. J. Appl. Math. v. 9 (1998), pp 1–21.

[18] *V. Visintin* Models of phase transitions//, Birkhauser Verlag, Boston (1996)

[19] *Колмогоров А.Н.* К статистической теории кристаллизации металлов// Изв. АН СССР, Сер. мат., 1937. - N 3. - С. 355 - 359.

[20] *M. A. Biot* Mechanics of deformation and acoustic propogation in porous media//J. Appl. Phys. 33(4)(1962), pp. 1482-1498

[21] *Cahn J. W., Hillard J. E.* Free energy of a nonuniform system/ Part I: Interfacial free energy// J. Chemical Physics. — 1958. — *28*, т 1. — С. 258–267

[22] *Golovin A. A., Davis S. H., Nepomnyashchy A. A.* A convective Cahn-Hillard model for the formation of facets and carners in crystal growth, // Physical D 118, pp. 202-230 (1998)

[23] *Watson S. J., Otto F., Rubinstein B. Y., Davis S. H.* Coarsening dynamics for the Convective Cahn-Hilliard equation// Univ. Bonn, Preprimt 2003

[24] Гельфанд И. М., Шилов Г. Е., *Распределения и операции с ними. 1*, М., Физматлит, 1959.