

Лекция II(Самара 2009).

Предельная задача.

Промежуточное агрегатное состояние(ПАС).

Е. В. Радкевич^{1, 2}

В этой лекции мы продолжим исследование модели фазового поля. Следует отметить, что в теории динамики фазовых переходов и математического моделирования процессов кристаллизации имеются определенные успехи [10]. Так, например, в [11] при моделировании процесса кристаллизации в рамках концепции фазового поля получено решение для распределения температуры в области фазового перехода, имеющее пилообразную форму. Этот результат коррелирует с качественным описанием авторами [2] автоколебательной кристаллизации, возникающей за счет колебаний скорости кристаллизации и приводящей к полосчатой неоднородности сплава. Сопоставление этих теоретических и экспериментальных результатов позволяет предположить, что колебания температуры в зоне фазового перехода связаны с колебаниями теплоотвода, которые, в свою очередь, порождают колебания скорости кристаллизации. Ряд теоретических результатов, полученных методами математического моделирования, связанных с необходимостью введения в рассмотрение промежуточного агрегатного состояния и его интерпретации в виде цуга волн, формулировки задач, описывающих течения Хилле-Шоу (задача Лейбензона) [11], находит свои аналогии в качественном описании формирования структур при кристаллизации сплавов. По-видимому, существуют глубокие

¹Московский Государственный Университет им М.В.Ломоносова

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

аналогии между стратифицированной областью в расплаве перед фронтом кристаллизации и описанием путей диффузии компонентов расплава при формировании различных структур при направленной кристаллизации эвтектик [2]. Однако эти предположения могут быть проверены только при наличии обобщенной математической модели, в которой присутствуют блоки, представляющие соответствующие процессы, и резервированные параметры, которые могут быть оценены по результатам эксперимента. Причем эта оценка может проводиться, исходя из данных независимых экспериментов или исходя из результатов верификации математической модели, т.е. в форме обратной задачи, когда параметры оцениваются путем сопоставления результатов технологического и вычислительного экспериментов. Таким образом, основная задача, которая ставится перед исследователями в области материаловедения, - это установление причин, порождающих формирование структурных особенностей твердой фазы. В свою очередь, это установление причин может быть достигнуто средствами математической реконструкции технологического объекта, когда исходная физическая картина процесса принимается в качестве гипотезы, и на основе которой разрабатывается математическая модель. Качественная верификация математической модели, позволяет оценить принятые гипотетические положения.

1. Предельная задача Для эволюции решения мы имеем две существенно разные возможности (обусловленные начальными данными)

$$\frac{\partial s_0^{(1)}}{\partial t} \frac{\partial s_0^{(2)}}{\partial t} < 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial s_0^{(1)}}{\partial t} \frac{\partial s_0^{(2)}}{\partial t} > 0. \quad (2)$$

В случае (1) границы движутся в противоположных направлениях. Как следствие, структура типа цуга волн существует только в течение малого временного интервала, так как области $\Omega_{t,\varepsilon}^{2k}$ или $\Omega_{t,\varepsilon}^{2k+1}$ исчезают при $t \sim \varepsilon^\alpha$. Подобная ситуация для классической задачи Стефана рассмотрена в [26]. Для системы фазового поля можно доказать, что из (1) следует одно из двух условий: либо “перегретая” область, либо “переохлажденная” область появляется в Ω_t^* .

Чтобы выяснить условия, при которых решение типа цуга волн существует в течение некоторого конечного независящего от ε интервала времени, рассмотрим случай (2), когда границы движутся в одном направлении. Пусть выполнено следующее условие.

Условие 0.0.1.

(В) Существует $T > 0$ такое, что для любого $0 \leq t \leq T$ существует семейство функций $\theta_i(x, t, h)$, $i = 0, \dots, M+1$, такое, что функция $\tilde{\theta}(x, t, \varepsilon)$ (определяемая по значениям $\tilde{\theta} = \theta_i$ для $x \in \overline{\Omega_{t,\varepsilon}^i}$) является непрерывной и равномерно ограниченной для $\varepsilon \in [0, \varepsilon_0]$. Более того, пусть $\theta_i \in C^1(Q_\varepsilon^i)$ равномерно для $\varepsilon \in [0, \varepsilon_0]$, где $Q_\varepsilon^i = \bigcup_{t \in [0, T]} \overline{\Omega_{t,\varepsilon}^i}$, и пусть $\Gamma_{t,\varepsilon}^i \in C^3$.

Выясним, какие свойства вытекают из условия (В). Очевидно, что следствием гладкости функций θ_i является $\theta_i|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^i-0} -$

$\theta_i|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^{i-1+0}} = \mathcal{O}(h)$. Это утверждение и закон Гиббса — Томпсона (19) ведут к соотношению $\mathcal{K}_t^i - V_{\nu_i} + \mathcal{K}_t^{i-1} - V_{\nu_{i-1}} = \mathcal{O}(h)$. Однако в силу наших предположений поверхности $\Gamma_{t,\varepsilon}^i$ гладкие и $V_{\nu_{i-1}}V_{\nu_i} > 0$. Поэтому

$$s_0^{(j)}(x, t, h) = s_0(x, t) + h\tilde{s}_0^{(j)}(x, t, h), \quad j = 1, 2, \quad (3)$$

где функции s_0 , $\tilde{s}_0^{(j)}$ и их производные третьего порядка равномерно ограничены для $h \in [0, h_0]$. Как следствие,

$$V_{\nu_i} = \mathcal{K}_t^i + \mathcal{O}(h). \quad (4)$$

В силу (4) и (13), Лекц. I,

$$(-1)^{i-1}\kappa_1\theta_i|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^{i-1-0}} = \mathcal{K}_t^{i-1} - V_{\nu_{i-1}}, \quad (-1)^i\kappa_1\theta_i|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^i+0} = \mathcal{K}_t^i - V_{\nu_i},$$

поочередно получаем $\theta_i|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^i} = \mathcal{O}(h)$. Из условия (B) следует

$$\tilde{\theta}(x, t, \varepsilon) = h\tilde{\theta}^1, \quad \tilde{\theta}^1 = \mathcal{O}(1), \quad x \in \overline{\Omega_{t,\varepsilon}^*}, \quad t \in [0, T], \quad (5)$$

где $\tilde{\theta}^1$ определяется по $\tilde{\theta}^1 = \tilde{\theta}_i^1$ для $x \in \overline{\Omega_{t,\varepsilon}^i}$.

Согласно закону Гиббса — Томпсона

$$\frac{\mathcal{K}_t^i - \mathcal{K}_t^{i-1}}{h} - \frac{V_{\nu_i} - V_{\nu_{i-1}}}{h} = (-1)^i\kappa_1 \left(\tilde{\theta}_i^1|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^i-0} + \tilde{\theta}_i^1|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^{i-1+0}} \right).$$

Так как $\Gamma_{t,\varepsilon}^i \in C^3$ равномерно по h , получаем $\tilde{\theta}_i^1 \in C^1(Q_\varepsilon^i)$.

Для дальнейшего анализа нам потребуется следующее утверждение.

Лемма 0.0.1. (а) Пусть ζ_i — точки разбиения интервала $[0, L]$, $\zeta_0 < \zeta_1 < \dots < \zeta_M$ и $h = \max_i(\zeta_i - \zeta_{i-1})$. Предположим, что число M четное, $F(\zeta) \in C([0, L])$ и $F(\zeta) \in C^1([\zeta_{i-1}, \zeta_i])$ для любого $i = 1, \dots, M$. Тогда

$$\left| \sum_{i=0}^M (-1)^i F(\zeta_i) \right| \leq \text{const} \quad \text{равномерно по } M \geq 2.$$

(b) Предположим, что $F(\zeta) \in C([0, L])$ и $F(\zeta) \in C^2([\zeta_{i-1}, \zeta_i])$ для любого $i = 1, \dots, M$. Тогда

$$\sum_{i=0}^M (-1)^i F(\zeta_i) = \frac{1}{2} (F(\zeta_0) + F(\zeta_M)) + \mathcal{O}(h) \quad \text{равномерно для четных } M \geq 2.$$

Для доказательства этой леммы надо сгруппировать члены в $F(\zeta_i) - F(\zeta_{i-1})$ так, чтобы представить их как разность производных.

Обозначая $\mathcal{T}_\varepsilon^i = \bigcup_{t \in [0, T]} \Gamma_{t, \varepsilon}^i$, $i = 0, \dots, M$, и $\mathcal{T}_\varepsilon^{M+1} \equiv \mathcal{T}^{M+1} = \partial\Omega \times [0, T]$, подставим (9) из Лекц. I

$$\varphi_1^{\text{as}}(x, t, \varepsilon) = \sum_{i=0}^M (-1)^i \chi(\eta_i) + \varepsilon \left\{ \frac{\kappa}{2} \theta_0^{\text{as}}(x, t, h) + \sum_{i=0}^M \omega_i(\eta_i, x) \right\}. \quad (6)$$

в интегральное тождество (36) из Лекц. I

$$\begin{aligned} J_\varphi &= \varepsilon \int_Q \varphi_t \langle g, \nabla \varphi \rangle dx dt - \int_Q e_\varepsilon(\varphi) \operatorname{div} g dx dt \\ &+ \int_Q (\varepsilon \langle \nabla \varphi, g_x \nabla \varphi \rangle + \kappa \varphi \operatorname{div}(g\theta)) dx dt = 0, \end{aligned}$$

В силу леммы (01) из Лекц. I

Лемма 0.0.2. Предположим, что $\omega(\eta, x) \in \mathbf{S}$, $\psi(x) \in C^2(\overline{\Omega})$, $|\nabla \psi| \neq 0$ и $\operatorname{dist}(\Gamma_t, \partial\Omega) \geq \operatorname{const} > 0$. Тогда для любой функции $g \in C^1(\overline{Q})$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon^{-1} \int_Q \omega\left(\frac{s}{\varepsilon}, x\right) g(x, t) dx dt = \int_{\Omega_T} A_\omega(x) \beta^{-1}(x) g(x, -\psi) dx,$$

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

получим

$$J_\varphi = \sum_{i=0}^M (\langle g, \nabla s_0 \rangle (\mathcal{K}_t^i - V_{\nu_i}) A_{\dot{\chi}^2}, \delta(\mathcal{T}_\varepsilon^i)) - \sum_{i=0}^M (-1)^i (\langle g, \nabla s_0 \rangle \theta A_{\dot{\chi}}, \delta(\mathcal{T}_\varepsilon^i)) + \mathcal{O}(\varepsilon h^{-1} + h) = 0.$$

Применив утверждения (а) леммы 0.0.1 ко второй сумме и используя (5) и условие (B), находим

$$J_\varphi = \sum_{i=0}^M (\langle g, \nabla s_0 \rangle (\mathcal{K}_t^i - V_{\nu_i}) A_{\dot{\chi}^2}, \delta(\mathcal{T}_\varepsilon^i)) + \mathcal{O}(\varepsilon h^{-1} + h) = 0. \quad (7)$$

Мы опять получаем соотношение (4), так как первая сумма в (7) имеет порядок $\mathcal{O}(h^{-1})$. Учитывая (3) и переходя к пределу $\varepsilon \rightarrow 0$, мы видим, что (7) влечет (4) в полной области $\Omega_t^* = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Omega_{t,\varepsilon}^*$. Следовательно,

$$|\nabla s_0|^{-1} \frac{\partial s_0}{\partial t} = \operatorname{div} \left(\frac{\nabla s_0}{|\nabla s_0|} \right), \quad x \in \Omega_t^*, \quad t > 0.$$

Рассмотрим интегральное тождество (21) из Лекц. I

$$I_\theta = \int_Q (\langle \nabla \theta, \nabla \xi \rangle - (\theta + \varphi) \xi_t) dx dt + \int_\Omega (\theta^0 + \varphi^0) \xi(x, 0) dx = 0,$$

Сначала вычислим слабый предел цуга волн в производной $-\varphi_t$ уравнения теплопроводности.

Лемма 0.0.3. Пусть $\varphi(x, t, \varepsilon) = \varphi_1^{\text{as}}(x, t, \varepsilon) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$, где φ_1^{as} определяется (6), и $c_1 h \leq \operatorname{dist}(\mathcal{T}_\varepsilon^i, \mathcal{T}_\varepsilon^{i+1}) \leq c_2 h$, $i = 0, \dots, M-1$, постоянные c_1 и c_2 , не зависят от ε . Тогда

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial t}, \xi \right) = 2 \left(\left\{ \sum_{j=0}^M (-1)^{j+1} V_{\nu_j} \delta(\mathcal{T}_\varepsilon^j) \right\}, \xi \right) + C_1 + \mathcal{O}(\varepsilon h^{-1} + h) \quad (8)$$

для любой функции $\xi \in C^1(\overline{Q})$, удовлетворяющей (20) из Лекц. I

$$\xi, g \in C^1(\overline{Q}), \quad \xi|_{\Sigma} = g|_{\Sigma} = 0, \quad \xi|_{t=T} = g|_{t=T} = 0 \quad (9)$$

Здесь $C_1 = \mathcal{O}((\tilde{s}_0^{(1)} - \tilde{s}_0^{(2)})|_{h=0})$ является возможным вкладом членов, зависящих от первой поправки к фазе s_0 относительно h .

Положим $F(\zeta_k) = \int_{\mathcal{I}_\varepsilon^k} V_{\nu_k} d\sigma_k$. Тогда можно применить утверждение (b) леммы 0.0.1 к (8). Получим

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial t}, \xi\right) = - \int_{\mathcal{I}_\varepsilon^0} \xi V_{\nu_0} d\sigma_0 - \int_{\mathcal{I}_\varepsilon^M} \xi V_{\nu_M} d\sigma_M + C_1 + \mathcal{O}(\varepsilon h^{-1} + h). \quad (10)$$

Напомним, что по условию (B) семейство $\{\tilde{\theta}(x, t, \varepsilon)\}$ равномерно ограничено по ε в $L^\infty(0, T; W_2^1(\Omega_t^*))$ и поэтому *-слабо сходится в $L^\infty(0, T; W_2^1(\Omega_t^*))$ и в силу (5) $\tilde{\theta} \rightarrow 0$ при $\varepsilon \rightarrow 0$ для $x \in \Omega_t^*$ в смысле $L^2((0, T) \times \Omega_t^*)$ -сходимости. Получаем $\bar{\theta}(x, t) \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \tilde{\theta}(x, t, \varepsilon) = 0$ для $x \in \Omega_t^*$.

Очевидно, что (5) не противоречит (10), если только знак главного члена поправок (зависящих от $\tilde{s}_0^{(j)}$) к скоростям не зависит от j и тогда $C_1 = 0$. С другой стороны, в области Ω_t^* предел уравнения теплопроводности имеет в качестве правой части C_1 . Чтобы проверить это, мы должны доказать, что $\tilde{s}_0^{(1)} = \tilde{s}_0^{(2)} + \mathcal{O}(h)$. Доказательство будет дано ниже в сферически симметричном случае, так как необходима специальная геометрия для существования рассматриваемой структуры. Продолжим вычисления в интегральном тождестве (??):

$$\tilde{I}_\theta \stackrel{\text{def}}{=} \int_Q \{ -\xi_t \theta + \langle \nabla \xi, \nabla \theta \rangle \} dx dt + \int_\Omega \xi(x, 0) \theta^0 dx.$$

Интегрируя по частям, находим

$$\begin{aligned}
\tilde{I}_\theta &= \int_0^T \left\{ \int_{\Omega_{t,\varepsilon}^0} \xi \left(\frac{\partial \theta_{(0)}}{\partial t} - \Delta \theta_{(0)} \right) dx + \int_{\Omega_{t,\varepsilon}^{M+1}} \xi \left(\frac{\partial \theta_{(M+1)}}{\partial t} - \Delta \theta_{(M+1)} \right) dx \right\} dt \\
&+ \int_{\mathcal{T}_\varepsilon^0} \xi \frac{\partial \theta_{(0)}}{\partial \nu_0} d\sigma_0 - \int_{\mathcal{T}_\varepsilon^M} \xi \frac{\partial \theta_{(M+1)}}{\partial \nu_M} d\sigma_M + \sum_{i=1}^M \int_0^T \int_{\Omega_{t,\varepsilon}^i} \theta_{(i)} \left(-\frac{\partial \xi}{\partial t} - \Delta \xi \right) dx dt \\
&+ \int_{\mathcal{T}_\varepsilon^i} \theta_{(i)} \frac{\partial \xi}{\partial \nu_i} d\sigma_i - \int_{\mathcal{T}_\varepsilon^{i-1}} \theta_{(i)} \frac{\partial \xi}{\partial \nu_{i-1}} d\sigma_{i-1} + \int_{\Omega_{0,\varepsilon}^*} \xi(x, 0) \theta^0 dx, \quad (11)
\end{aligned}$$

где $\theta_{(i)} = \theta|_{Q_\varepsilon^i}$. В силу (5) интегралы по $\Omega_{t,\varepsilon}^i$ и $\mathcal{T}_\varepsilon^i$, $i = 1, \dots, M$, стремятся к нулю при $\varepsilon \rightarrow 0$. Напомним, что по определению ??

$$I_\theta = \tilde{I}_\theta - \int_Q \varphi \xi_t dx dt + \int_\Omega \varphi^0 \xi(x, 0) dx = 0.$$

Учитывая (4), (10) и (11), при $\varepsilon \rightarrow 0$ получаем требуемый результат

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} = \Delta \bar{\theta}, \quad x \in \Omega \setminus \Omega_t^*, \quad t > 0, \quad (12)$$

$$\bar{\theta} = 0, \quad x \in \Omega_t^*, \quad t \geq 0,$$

$$\frac{\partial s_0}{\partial t} = |\nabla s_0| \operatorname{div} \left(\frac{\nabla s_0}{|\nabla s_0|} \right), \quad x \in \Omega_t^*, \quad t > 0, \quad (13)$$

$$\bar{\theta}|_{\partial \Omega_t^*} = 0, \quad \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial n}|_{\partial \Omega_t^*} = V_n, \quad t \geq 0, \quad (14)$$

$$\bar{\theta}|_{t=0} = \bar{\theta}^0(x), \quad x \in \Omega \setminus \Omega_0^*, \quad s_0|_{t=0} = s^0(x), \quad x \in \Omega_0^*, \quad \bar{\theta}|_{\partial \Omega} = \theta_b,$$

где $\partial \Omega_t^* = \Gamma_t^- \cup \Gamma_t^+$, $\Gamma_t^- = \{x \in \Omega, s_0(x, t) = 0\}$, $\Gamma_t^+ = \{x \in \Omega, s_0(x, t) = L\}$, n обозначает внешнюю нормаль к Ω_t^* , $V_n = |\nabla s_0|^{-1} \partial s_0 / \partial t|_{\partial \Omega_t^*}$ и $s^0(x) \equiv s^0(x, 0)$.

Задачу (32)–(34) можно интерпретировать как две классические однофазные задачи Стефана, объединенные уравнением (33).

Такая интерпретация приводит к постановке задачи об области смеси для процессов с поверхностным натяжением (см. [?, ?]). Условия (33), (34) и соотношение $\bar{\theta} = 0$ на Ω_t^* являются условиями типа Гюгонио, так как они должны быть выполнены для существования рассматриваемого решения.

Remark 1. Оператор в правой части (33) вырождается в направлении ∇s_0 , т.е. вдоль y_1 , если мы введем новые координаты $y_1 = s_0, y_2, \dots, y_n$, где y_2, \dots, y_n — координаты на поверхности $s_0 = \text{const}$. Уравнение (33) ультрапараболическое. Хорошо известно [27], что однородное ультрапараболическое уравнение не имеет вещественно-аналитических решений по t и y_1 , исключая случай, когда решение не зависит от касательных переменных. Далее, для уравнения теплопроводности (32) мы должны решить задачу Коши (34) относительно y_1 с начальными данными на поверхности $\partial\Omega_t^*$. Для достаточно малых y_1 и t эта плохо поставленная задача имеет решение только для вещественно-аналитических поверхностей и начальных данных [27], и в этом случае значения $\bar{\theta}$ на внешней границе и для начального значения времени однозначно определяются значениями на $\partial\Omega_t^*$. Эти рассуждения дают основания предположить, что при $n = 3$ решение существует только в сферически симметричном случае со специальными начальными и граничными данными (на внешней границе).

Пусть $n = 3$ и $\Omega = \{x, R_- < r < R_+\}$, где $r = |x|$, $R_- > 0$, и $\Omega_0^* = \{r_-(0) < r < r_+(0)\}$. Тогда (33) — уравнение первого порядка

$$\frac{\partial s_0}{\partial t} = \frac{2}{r} \frac{\partial s_0}{\partial r}, \quad r \in \Omega_t^* = \{r_-(t) < r < r_+(t)\}, \quad t > 0. \quad (15)$$

Очевидно, что (15), дополненное начальным условием $s_0|_{t=0} = s^0(r)$, может быть легко решено. А именно, $s_0(r, t) = s^0(r^0)$ вдоль характеристик $r(r^0, t) = \sqrt{(r^0)^2 - 4t}$, $r_-(0) \leq r^0 \leq r_+(0)$ для любой гладкой функции $s^0(r)$ такой, что $s_r^0 > 0$.

Теперь (32), (34), где $V_n = 2/r|_{\partial\Omega_t^*}$, является задачей Коши (относительно r) в двух областях $Q_1 = \{R_- < r < r_-(t), t > 0\}$ и $Q_2 = \{r_+(t) < r < R_+, t > 0\}$. Чтобы сформулировать условия разрешимости для этой некорректной задачи, напомним хорошо известный факт (см., например, [25]): для локального существования решения (32), (34) достаточно, чтобы кривые $r_{\pm}(t)$ были вещественно-аналитическими по t , т.е. $r_-(0) > 0$ и $t < r_-^2(0)/4$. Следовательно, для достаточно малого $\delta_0 > 0$ и $T_0 = T_0(\delta_0)$, в областях $Q_1^* = \{r_-(0) - \delta_0 < r < r_-(t), t < T_0\}$ и $Q_2^* = \{r_+(t) < r < r_+(0) + \delta_0, t < T_0\}$ существует вещественно-аналитическое решение $\bar{\theta}$ соответствующей задачи Коши. Таким образом, чтобы предельная задача (32)–(34) была решена, мы должны поставить следующее условие.

Условие 0.0.2.

(C) Пусть Ω — сферически симметричный слой в \mathbb{R}^3 , начальные и граничные данные задачи

$$\begin{aligned} \partial_t \varphi + \partial_t \theta &= \Delta \theta, & (16) \\ \varepsilon^2 \partial_t \varphi &= \varepsilon^2 \Delta \varphi + \varphi - \varphi^3 + \varepsilon \kappa \theta \\ \varphi|_{t=0} &= \varphi^0(x, \varepsilon), \quad \theta|_{t=0} = \theta^0(x, \varepsilon), \\ \varphi|_{\Sigma} &= 1, \quad \theta|_{\Sigma} = \theta_b \end{aligned}$$

— сферически симметричны и $\Gamma_{0,\varepsilon}^i = \{x \in \Omega, |x| = r_i^0\}$, где $0 < R_- < r_0^0 < r_1^0 < \dots < r_M^0 < R_+$. Пусть $r_{j+1}^0 - r_j^0 = h$ и разности $r_0^0 - R_-$ и $R_+ - r_M^0$ достаточно малы. Предположим, что $s^0(r)$ вещественно-аналитические, $\partial s^0 / \partial r > 0$, $\bar{\theta}^0(x)$ и θ_b — специальные данные, соответствующие решению задачи Коши для уравнения теплопроводности (32), (34).

Вернемся к основной задаче (10)–(13) из Лекц. I

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta_i}{\partial t} &= \Delta \theta_i, \quad x \in \Omega_{t,\varepsilon}^i, \quad t > 0, \\ \theta_{i-1} \Big|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^{i-1-0}} &= \theta_i \Big|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^{i-1+0}}, \quad \theta_i \Big|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^i-0} = \theta_{i+1} \Big|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^i+0}, \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta_{i-1}}{\partial \nu_{i-1}} \Big|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^{i-1-0}} - \frac{\partial \theta_i}{\partial \nu_{i-1}} \Big|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^{i-1+0}} &= (-1)^{i+1} 2V_{\nu_{i-1}}, \\ \frac{\partial \theta_i}{\partial \nu_i} \Big|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^i-0} - \frac{\partial \theta_{i+1}}{\partial \nu_i} \Big|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^i+0} &= (-1)^i 2V_{\nu_i}, \end{aligned} \quad (18)$$

$$(-1)^{i-1} \kappa_1 \theta_i \Big|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^{i-1-0}} = \mathcal{K}_t^{i-1} - V_{\nu_{i-1}}, \quad (-1)^i \kappa_1 \theta_i \Big|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^i+0} = \mathcal{K}_t^i - V_{\nu_i}, \quad (19)$$

чтобы доказать справедливость предположения (B) при условии (C) и того, что C_1 в (10) равно нулю. Через $\rho_i = \rho_i(t, h)$ обозначим функции, описывающие положение свободных границ $\Gamma_{t,\varepsilon}^i$ в момент времени t , так что $\Gamma_{t,\varepsilon}^i = \{r, r = \rho_i(t, h)\}$. Очевидно, что в сферически симметричном случае $\mathcal{K}_t^i = -2/\rho_i$. Тогда в силу (4) имеем $V_{\nu_i} = -2/\rho_i + \mathcal{O}(h)$, выбрав противоположные нормальям (w.r.t. $D_{t,\varepsilon}^i$) направления ν_i . Сделаем замену переменных $\theta_i = w_i/r$. Тогда

$$\partial_t \theta = \Delta \theta, \quad x \in \Omega_{t,\varepsilon}^i, \quad t > 0$$

примет вид

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} = \frac{\partial^2 w_i}{\partial r^2}, \quad r \in (\rho_{i-1}(t), \rho_i(t)), \quad t > 0, \quad (20)$$

и, так как $V_{\nu_i} = -2\rho_i^{-1}(1 + h\nu_{\nu_i})$, $\nu_{\nu_i} \stackrel{\text{def}}{=} \rho_i(\mathcal{K}_t^i - V_{\nu_i})/2h$, условия (17), (18) могут быть переписаны следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial w_{i-1}}{\partial r} \Big|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^{i-1-0}} - \frac{\partial w_i}{\partial r} \Big|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^{i-1+0}} &= (-1)^i 4(1 + h\nu_{\nu_{i-1}}), \\ \frac{\partial w_i}{\partial r} \Big|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^i-0} - \frac{\partial w_{i+1}}{\partial r} \Big|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^i+0} &= (-1)^{i+1} 4(1 + h\nu_{\nu_i}), \end{aligned} \quad (21)$$

$$w_{i-1}|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^{i-1-0}} = w_i|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^{i-1+0}}, \quad w_i|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^i-0} = w_{i+1}|_{\Gamma_{t,\varepsilon}^i+0}.$$

Теперь надо показать, что задача (20), (21) имеет решение, удовлетворяющее следующим свойствам:

1) $w_i = \mathcal{O}(h)$ равномерно по i ,

2) для любого t значения $\{\widehat{w}_i = (-1)^i w_i|_{r=\rho_i}\}$ с точностью $\mathcal{O}(h^2)$ определяются значениями некоторой функции $\widehat{w} \in C^1[\rho_0, \rho_M]$ на решетке $\{\rho_0, \dots, \rho_M\}$.

Заметим, что первое свойство относится к условию (19) и соотношению (4). Решение w_i задачи (20), (21) будем искать в виде

$$w_i = a_i(r - \rho_{i-1}) + b_i(t) + u_i(t, r, h), \quad (22)$$

где первые два члена соответствуют условиям Стефана (21) и u_i — решение связанной цепочки задач:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} - \frac{\partial^2 u_i}{\partial r^2} = a_i \dot{\rho}_{i-1} - \dot{b}_i, \quad i = 1, \dots, M, \quad (23)$$

$$(u_j - u_{j+1})|_{r=\rho_j} = 0, \quad \left(\frac{\partial u_j}{\partial r} - \frac{\partial u_{j+1}}{\partial r} \right)|_{r=\rho_j} = 0, \quad j = 0, \dots, M.$$

Заметим, что эта цепочка задач аналогична цепочке, рассмотренной в [26]. Отличие в том, что правые части $f_i = a_i \dot{\rho}_{i-1} - \dot{b}_i$ в (23) зависят от t , но, очевидно, вклад в решение цепочки в силу этой зависимости будет порядка $\mathcal{O}(h^2)$.

Чтобы решить (23), мы сначала вычислим коэффициенты a_i и b_i . Из (21) и (23) получаем

$$a_i = 2(-1)^{i+1}(1 + hv_{\nu_i}), \quad b_1 = 0,$$

$$b_j = 2 \sum_{k=2}^j (-1)^k [(1 + hv_{\nu_{k-1}})\rho_{k-1} - (1 + hv_{\nu_{k-2}})\rho_{k-2}], \quad j = 2, \dots, M.$$

Пусть а priori

$$\tilde{s}_0^{(j)}(x, t, h) = s_1(x, t) + \mathcal{O}(h), \quad j = 1, 2, \quad (24)$$

где функции $\tilde{s}_0^{(j)}$ определены в (3). Это предположение может привести к противоречию в уравнении для поправки к скорости (линеаризованное уравнение Гиббса — Томпсона для функций $\tilde{s}_0^{(j)}$), если функции ω_i , вычисленные в силу этого предположения, не удовлетворяют выше поставленным условиям 1) и 2). Однако, как мы покажем ниже, противоречия здесь нет.

Через $R(z, t, h)$ обозначим решение неявного уравнения

$$s_0(R, t) + hs_1(R, t) = z.$$

По построению $\rho_i = R(ih, t, h)$, и равномерно по i до порядка $\mathcal{O}(h)$ функции v_{ν_i} являются следами некоторой C^1 -функции v на поверхностях $r = \rho_i$. Заметим, что $\partial R / \partial z > 0$. Кроме того,

$$b_j = 2h \sum_{k=2}^j (-1)^k \frac{\partial R}{\partial z} \Big|_{z=h(k-2)} + \mathcal{O}(h^2) = \mathcal{O}(h).$$

В силу леммы 0.0.1 последняя оценка равномерна относительно j . Далее,

$$b_{j+2} - b_j = 2(-1)^{j+1}(\rho_{j+1} - 2\rho_j + \rho_{j-1}) + \mathcal{O}(h^3) = \mathcal{O}(h^2), \quad (25)$$

и эта оценка также равномерна по j . Теперь видим, что

$$b_{j+1} - b_j = 2(-1)^{j+1} \left(h \frac{\partial R}{\partial z} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 R}{\partial z^2} + h^2 \frac{\partial}{\partial z} (Rv) \right) \Big|_{z=(j-1)h} + \mathcal{O}(h^3). \quad (26)$$

Кроме того, из (25) в силу леммы 0.0.1 находим $b_{j+2l} - b_j = \mathcal{O}(h^2)$, где оценка $\mathcal{O}(h^2)$ равномерна по j и l . В частности, из этой оценки, равенства (26) и условия $b_1 = 0$ следует

$$b_{2l} = 2h \frac{\partial R}{\partial z} \Big|_{z=(2l-1)h} + \mathcal{O}(h^2), \quad b_{2l+1} = \mathcal{O}(h^2).$$

Рассмотрим ломаную \mathcal{L} , линейные части которой определяются уравнениями $a_i(r - \rho_{i-1}) + b_i$ на сегментах $[\rho_{i-1}, \rho_i]$. Очевидно, что b_i являются значениями \mathcal{L} в точках $r = \rho_{i-1}$.

Следовательно, ломаная \mathcal{L} несимметрична относительно нулевой линии (она направлена в область положительных значений). Однако ломаная может быть центрирована за счет уменьшения ее значений $h \frac{\partial R}{\partial z} \Big|_{z=h(i-1)}$ на каждом сегменте $[\rho_{i-1}, \rho_i]$. Очевидно, что это эквивалентно существованию функции $m = h \frac{\partial R}{\partial z} \Big|_{z=z(r,t,h)}$ из \mathcal{L} . Здесь $z = z(r, t, h)$ удовлетворяет уравнению $R(z, t, h) = r$.

Положим $\mathcal{L}_1 = \mathcal{L} - m$ и $U_i = u_i + m$. Тогда для U_i имеем задачи вида (23) с правыми частями G_i вместо f_i вида

$$G_i = a_i \dot{\rho}_{i-1} - \dot{b}_i + \frac{\partial m}{\partial t} - \frac{\partial^2 m}{\partial r^2}, \quad r \in (\rho_{i-1}, \rho_i).$$

Чтобы построить асимптотическое разложение U_i , решим цепочку наших задач. Будем искать решение в виде

$$U_i = c_i(r - \rho_{i-1})(\rho_i - r) + c_{i1}(r - \rho_{i-1})^2(\rho_i - r) + c_{1i}(r - \rho_{i-1})(\rho_i - r)^2 + \dots,$$

где точками обозначены полиномы высшего порядка. Заметим, что полиномы порядка выше, чем 2, допускают оценку $O(h^3)$, и коэффициенты c_i определяются соотношениями

$$c_i = 2(-1)^{i+1} \dot{\rho}_{i-1} + O(h), \quad i = 1, \dots, M.$$

Вклад в решение U_i слагаемых порядка $O(h)$ в правой части G_i имеет порядок $O(h^3)$. Следовательно, $U_i = \widehat{U}_i + O(h^3)$, и функция $\widehat{U}_i = c_i(r - \rho_{i-1})(\rho_i - r)$ определяется последовательностью симметричных относительно нулей парабол порядка $\text{mod} O(h^3)$, так как $a_i \dot{\rho}_{i-1} + a_{i+1} \dot{\rho}_i = O(h)$. Отсюда получаем, что $\widehat{U}_i = O(h^2)$ для $r \in (\rho_{i-1}, \rho_i)$ и значения ломаной \mathcal{L}_1 в точках ρ_j даются соотношением

$$\mathcal{L}_1 \Big|_{r=\rho_j} = (-1)^j h \frac{\partial R}{\partial z} \Big|_{z=(j-1)h} + O(h^2), \quad j = 1, \dots, M. \quad (27)$$

Таким образом, задача (20), (21) имеет решение со свойствами 1) и 2).

Осталось построить θ в областях $R_- \leq r \leq \rho_0(t)$ и $\rho_M(t) \leq r \leq R_+$. Заметим что, при построении ломаной \mathcal{L}_1 мы определили $\text{mod } \mathcal{O}(h)$ значения θ и $\frac{\partial \theta}{\partial r}$ в точках $r = \rho_0(t)$ и $r = \rho_M(t)$. По аналогии с (32)–(34) это завершает построение θ , и нам снова необходимо решить задачу Коши относительно r для уравнения теплопроводности. Тем не менее, теперь в силу условия (С) условие аналитичности (необходимое условие разрешимости) уже выполнено.

Итак, ввиду (27) функции $\hat{\theta}_i(t) = (-1)^i \theta|_{r=\rho_i}$ являются с точностью $\mathcal{O}(h^2)$ следами на поверхностях $\Gamma_{t,\varepsilon}^i$ некоторой C^1 -функции $\hat{\theta}(x, t, h) = \mathcal{O}(h)$. Этот факт позволяет вычислить первую поправку для фазы $s_0(r, t)$. Действительно, подставляя разложение (3) в (19), получим линеаризованные условия Гиббса — Томпсона

$$\left(\frac{\partial \tilde{s}_0^{(n_i)}}{\partial t} - \frac{2}{r} \frac{\partial \tilde{s}_0^{(n_i)}}{\partial r} \right) \Big|_{r=\rho_i} = (-1)^i \theta_i \frac{\kappa_1}{h} \frac{\partial s_0}{\partial r} \Big|_{r=\rho_i} + \mathcal{O}(h). \quad (28)$$

Наш анализ показывает, что с точностью $\mathcal{O}(h)$ правая часть (28) является следом C^1 -функции. Поэтому из (27) и условия $\tilde{s}_0^{(1)}|_{t=0} = \tilde{s}_0^{(2)}|_{t=0} = 0$ получаем

$$\left(\frac{\partial s_1}{\partial t} - \frac{2}{r} \frac{\partial s_1}{\partial r} \right) \Big|_{r=\rho_i} = \frac{\kappa_1}{r} \frac{\partial R}{\partial z} \Big|_{z=(i-1)h} \frac{\partial s_0}{\partial r} \Big|_{r=\rho_i} + \mathcal{O}(h). \quad (29)$$

Пусть $\rho_i(t, h) = r_i(t) + h\tilde{r}_i(t, h)$, так что $\tilde{r}_i(t, h)/r_i(t) = \mathcal{O}(1)$ равномерно по $i = 0, \dots, M$. Принимая во внимание уравнение (15), получим $r_i = \sqrt{g^2(ih) - 4t}$, где $g(z)$ — обратная к s^0 функция, т.е. $s^0(g(z)) = z$. Таким образом, пренебрегая членами порядка $\mathcal{O}(h)$, можно преобразовать (29) следующим образом:

$$\frac{\partial s_1}{\partial t} = \frac{2}{r} \frac{\partial s_1}{\partial r} + \frac{\kappa_1}{r}, \quad s_1|_{t=0} = 0,$$

т.е. мы не пришли к противоречию и наше предположение о функции $s_1(r, t)$ выполнено. Отметим, что в силу (24)

значение C_1 в (8), (10) равно нулю и, следовательно, уравнение теплопроводности в Ω_t^* не имеет правой части. Таким образом, условие (B) выполнено при справедливости условия (C). В результате получаем (32)–(34) как предел цепочки задач Стефана — Гиббса — Томпсона в смысле определения 1 Лекц. I

Definition 2. Пара функций

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

называется **слабым решением задачи** (16), если для любых пробных функций $\xi(x, t)$, $g(x, t) = (g_1(x, t), \dots, g_n(x, t))$, удовлетворяющих (9), функции θ и φ удовлетворяют

$$I_\theta = \int_Q (\langle \nabla \theta, \nabla \xi \rangle - (\theta + \varphi) \xi_t) dxdt + \int_\Omega (\theta^0 + \varphi^0) \xi(x, 0) dx = 0, \quad (30)$$

и интегральному тождеству

$$\begin{aligned}J_\varphi &= \varepsilon \int_Q \varphi_t \langle g, \nabla \varphi \rangle dxdt - \int_Q e_\varepsilon(\varphi) \operatorname{div} g dxdt \\ &+ \int_Q (\varepsilon \langle \nabla \varphi, g_x \nabla \varphi \rangle + \kappa \varphi \operatorname{div}(g\theta)) dxdt = 0, \quad (31)\end{aligned}$$

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 $(g_x)_{ik} = \partial g_i / \partial x_k$.

Суммируя предыдущие рассуждения, сформулируем условия на начальные данные. Предположим, что выполнены условия (A) и (C). Пусть $\varphi|_{t=0}$ вида

$$\varphi|_{t=0} = \varphi_1^{as}(x, 0, \varepsilon) + O(\varepsilon^2), \quad S^j|_{t=0} = s^0(x, \varepsilon),$$

где $s^0(x, \varepsilon) = s^0(r)$. Пусть также $\theta|_{t=0}$ в областях $\Omega_{0,\varepsilon}^i = \{r_{i-1}^0 < r < r_i^0\}$, $i = 1, \dots, M$, определена соотношением

$$\theta_{(i)}|_{t=0} = (-1)^{i+1} \frac{2}{r} \left(-\frac{h}{2(s^0)'_r} + (r - r_{i-1}^0) + \mathcal{O}(h^2) \right).$$

В областях $R_- < r < r_0^0$ и $r_M^0 < r < R_+$ положим $\theta|_{t=0} = \Xi|_{t=0}$, где Ξ — решение специальной задачи Коши (относительно r) для уравнения теплопроводности (32).

Теорема 0.0.1. При сформулированных выше условиях асимптотическое решение системы фазового поля, удовлетворяющее условию (B), существует, и в системе (16) можно перейти к пределу при $\varepsilon \rightarrow 0$ в смысле определения 2. Решение предельной задачи

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} = \Delta \bar{\theta}, \quad x \in \Omega \setminus \Omega_t^*, \quad t > 0, \quad (32)$$

$$\bar{\theta} = 0, \quad x \in \Omega_t^*, \quad t \geq 0,$$

$$\frac{\partial s_0}{\partial t} = |\nabla s_0| \operatorname{div} \left(\frac{\nabla s_0}{|\nabla s_0|} \right), \quad x \in \Omega_t^*, \quad t > 0, \quad (33)$$

$$\bar{\theta}|_{\partial \Omega_t^*} = 0, \quad \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial n}|_{\partial \Omega_t^*} = V_n, \quad t \geq 0, \quad (34)$$

$\bar{\theta}|_{t=0} = \bar{\theta}^0(x)$, $x \in \Omega \setminus \Omega_0^*$, $s_0|_{t=0} = s^0(x)$, $x \in \Omega_0^*$, $\bar{\theta}|_{\partial \Omega} = \theta_b$, где $\partial \Omega_t^* = \Gamma_t^- \cup \Gamma_t^+$, $\Gamma_t^- = \{x \in \Omega, s_0(x, t) = 0\}$, $\Gamma_t^+ = \{x \in \Omega, s_0(x, t) = L\}$, n обозначает внешнюю нормаль к Ω_t^* , $V_n = |\nabla s_0|^{-1} \partial s_0 / \partial t|_{\partial \Omega_t^*}$ и $s^0(x) \equiv s^0(x, 0)$,

существует, по крайней мере, для достаточно малых (но ε -независимых) значений времени.

Задачу (32)–(34) можно интерпретировать как две классические однофазные задачи Стефана, объединенные уравнением (33). Такая интерпретация приводит к постановке задачи об области смеси для процессов с поверхностным натяжением. Условия (33), (34) и соотношение $\bar{\theta} = 0$ на Ω_t^* являются условиями типа Гюгонио, так как они должны быть выполнены для существования рассматриваемого решения.

Рассмотренный случай определяется тем, что вне стратифицированного слоя $r_0 \leq r \leq r_M$ функция порядка

первоначальной задачи принимает разные значения: $\varphi \sim -1$ для $r < r_0$ и $\varphi \sim 1$ для $r > r_M$. Очевидно, что все аргументы применимы и тогда, когда φ принимает те же значения, $\varphi \sim -1$ или $\varphi \sim 1$, для $r \notin [r_0, r_M]$. Это предполагает, что число M нечетно. Тогда мы опять получим предельную задачу вида (32)–(34). Этот предельный переход можно обосновать так же, как выше, решая цепочку задач (17)–(19), которые можно свести к цепочке задач (23). В обоих случаях (M четно или нечетно) задачи некорректны. Однако, как отмечалось в [11], авторы были удивлены, увидев, что именно описанные выше структуры типа цуга волн появляются при компьютерном эксперименте как решения системы фазового поля для начальных данных $\theta^0 = 0$ при $R_- \leq r \leq R_+$ и $\varphi^0 = 1 + \sum_{j=0}^M (-1)^j \operatorname{th} \left(\frac{r - r_j^0}{\varepsilon} \right)$ для нечетного M и $\varphi^0 = \sum_{j=0}^M (-1)^j \operatorname{th} \left(\frac{r - r_j^0}{\varepsilon} \right)$ для четного M .

На рис. 1 справа изображены графики двух типов решений системы фазового поля со сферически симметричными начальными данными при $M = 19$ и $\varepsilon = 10^{-2}$ в различные значения времени. Можно видеть, что температура в области смеси имеет пило-зубчатую форму. Как раз такая функция является главной частью асимптотического разложения (22) решения цепочки задач Стефана — Гиббса — Томпсона (17)–(19). В численном счете, проведенном О.А. Васильевой, температура $\theta = 0$ на внешних границах. Это приводит к эффекту, показанному на рисунках для $t = 0.02$: пило-зубчатая структура начинает разрушаться под влиянием этих неспециальных граничных данных. Однако функция порядка более устойчива и сохраняет форму.

Приведем еще один интереснейший пример численного счета, проведенный О. А. Васильевой, так называемого решения типа пульсара, радиально-симметричного, когда областью

стратификации является шар с центром в начале координат. Тогда значение функции порядка в центре пульсара во времени имеет периодическую структуру. Мы приведем график для температуры и функции порядка для $t = 0$ (начальные условия), $t = 0.0035$ и 0.0137 . Температура $\theta = 0, \varphi = 1$ на внешней границе шара.

На рис. 1 слева изображены графики решения системы фазового поля со сферически симметричными начальными данными при $M = 7$ и $\varepsilon = 10^{-2}$ в различные значения времени. Можно видеть что температура в области ПАС имеет пило-зубчатую форму, в центре она периодична с амплитудой $l = 1$, что дает структуру пульсара. Именно такая функция является главной частью асимптотического разложения (22) решения цепочки задач Стефана — Гиббса — Томпсона (17)–(19) в этом случае. Пило-зубчатая структура съезжает к центру и начинает разрушаться под влиянием неспециальных граничных данных. Функция порядка более устойчива и сохраняет форму и в этом случае.

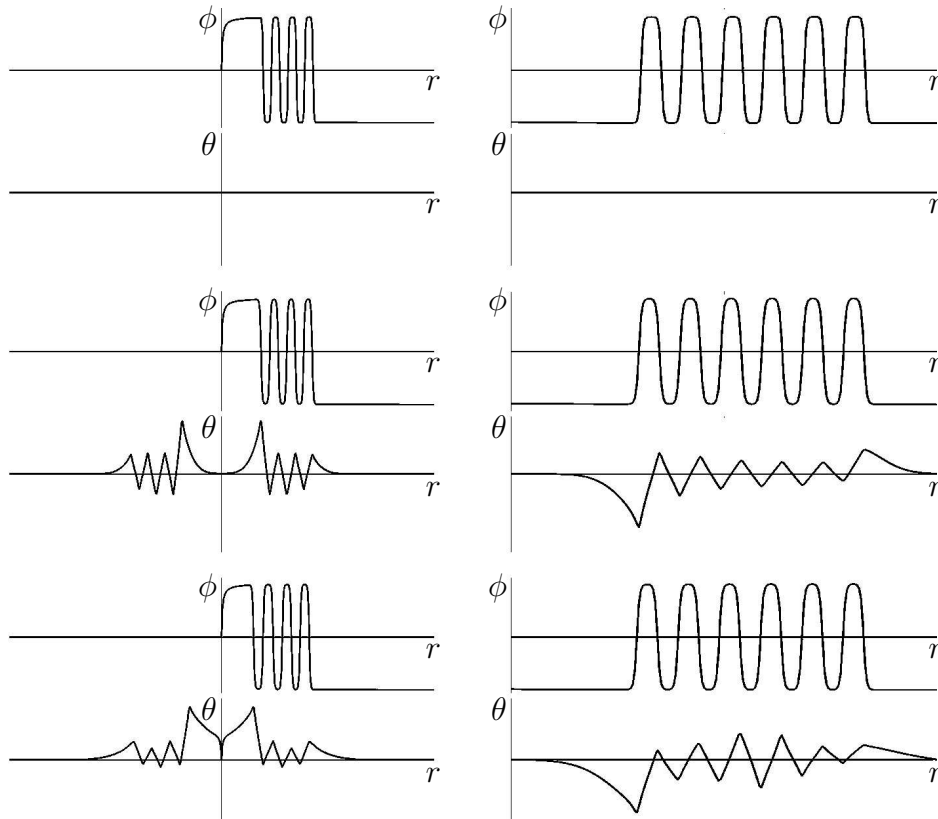


Рис. 1:

Замечания и комментарии Мы установили, что стандартное определение слабого решения для нелинейных задач может быть некорректным. На примере системы фазового поля показано, что в пределе можно не получить закон Гиббса — Томпсона о движении фронта фазового перехода даже в обычной жестко-фронтальной ситуации, описывающей динамическое равновесие фаз. Эту ситуацию можно скорректировать введением допустимого (корректного) определения слабого решения. Особенно необходимо иметь корректное, хорошо поставленное определение слабого решения в нелинейных задачах, которые, вообще говоря, не имеют классического решения. Пример такой задачи дает хорошо известная проблема области промежуточного агрегатного состояния в интерпретации цуга волн. Мы установили, что решение типа цуга волн может

существовать только для специальной геометрии граничных данных и специальных начальных данных. Эти ограничения гарантируют существование асимптотического решения цепочки задач Стефана — Гиббса — Томпсона для достаточно малых (но ε -независимых) значений времени, что позволило перейти к пределу в слабой постановке цепочки задач Стефана — Гиббса — Томпсона (в смысле определения 2) и получить предельную задачу (32)–(34). Мы показали, что в рассмотренных примерах температура $\theta(x, t, \varepsilon)$ мала ($\theta \rightarrow 0$ при $\varepsilon \rightarrow 0$) и имеет специальную “периодическую” структуру в стратифицированной области. В случае радиальной симметрии ($n = 2$) техника, развитая в этой главе, приводит к двумерной предельной задаче (32)–(34). Тогда, если параметры $\ell \sim K$ достаточно большие в первоначальной модели системы фазового поля, получаем уравнение теплопроводности в (16) $\delta \partial \theta / \partial t$ вместо $\partial \theta / \partial t$, где $\delta \ll 1$ — малый параметр. Повторяя построения в этом случае, получим уравнение теплопроводности (32) с членом $\delta \partial \bar{\theta} / \partial t$ в правой части. Тогда при $\delta \rightarrow 0$ уравнение (32) перейдет в уравнение Лапласа.

В этом случае предельная задача (32)–(34) описывает соответственно два специальных течения Хил-Шоу (задача Лейбензона), разделенные областью стагнации (т.е. областью ПАС). Тогда нормальная скорость фронта $V_n(t)$ внутреннего течения удовлетворяет уравнению $\dot{V}_n = V_n^{-1}$ на внешней границе. Можно получить более общее уравнение для $V_n(t)$, умножив оператор Лапласа в уравнении для функции порядка на положительную вещественно-аналитическую функцию. Таким образом, система (16), формально модифицированная указанным приемом, является регуляризацией некоторого класса задач, описывающих течение Хил-Шоу. Это позволяет трактовать регуляризацию как задачу Лейбензона — Полубариновой-Кочиной.

2. Процесс кристаллизации для уравнения Кана — Хилларда с конвекцией

Одним из факторов неустойчивости при формировании структуры жаропрочных сплавов является конвекция. В [23] была предложена одномерная модель Кана — Хилларда с новым членом, который можно интерпретировать как эффективную силу, вызванную конвекцией. Благодаря этой модификации удалось получить качественное описание двумерного процесса кристаллизации при наличии конвекции.

В этом параграфе мы рассмотрим подход [23] к реконструкции влияния конвекции на процесс кристаллизации. Эта модификация классической модели дает качественное описание двумерного процесса кристаллизации при наличии конвекции. Существенным в этом описании являются два фактора:

1. Необходимым условием реализации модели является сосуществование двух несимметричных фаз, обеспечивающих специфику слияния зародышей, что дает по времени порядок $O(\sqrt{t})$ роста закристаллизованной зоны, согласующийся с экспериментальным. Более того, специфика взаимодействия этих фаз дает качественное описание вклада жаропрочной и легкоплавких составляющих в процессе кристаллизации.

2. Модель допускает случайное моделирование начального распределения зародышей базовой фазы (например, никеля в алюминий-никелевых сплавах) и легирующей составляющей.

Одной из задач реконструкции является моделирование причин, в силу которых в алюминий-никелевых сплавах предпочтительны композиции с сочетанием γ - и γ' -образующих элементов, обеспечивающие при литье наименьшее различие плотности расплава и жидкости междендритного состава за счет оптимального сочетания легких и тяжелых элементов (их распределения за счет оптимального сочетания легких

и тяжелых элементов) и минимальный временной интервал кристаллизации.

Рассмотрим расширение одномерного уравнения Кана — Хилларда [23]

$$q_{\tilde{t}} - Vqq_{\tilde{x}} = \mu(q^3 - q - \nu^2 q_{\tilde{x}\tilde{x}})_{\tilde{x}\tilde{x}}; \quad (35)$$

здесь безразмерная приведенная концентрация $q(\tilde{x}, \tilde{t})$ (равна $+1$ в одной фазе, например, никеле, и -1 в другой фазе) является функцией безразмерных пространственной переменной $\tilde{x} \in \mathbb{R}$ и времени \tilde{t} , V — скорость ($[V] = LT^{-1}$), μ — коэффициент диффузии ($[\mu] = L^2T^{-1}$) и ν — микроскопическая нормировка длины ($[\nu] = L$). Уравнение (35) используется, например, в качестве феноменологической модели гранения в кинетически контролируемом росте кристалла [22].

0.0.1 Анализ нормировки.

После выбора нормировки длины l_P согласно соотношению $l_P = \mu/V$, перенормируем (35) по отношению нормировке пространственной переменной $-l_P$ и нормировке времени $t_P = \mu/V^2$, положив

$$x = \tilde{x}/l_P, \quad t = \tilde{t}/t_P. \quad (36)$$

Придем к безразмерной форме конвективного уравнения Кана — Хилларда

$$q_t - qq_x = (q^3 - q - \varepsilon^2 q_{xx})_{xx}, \quad (37)$$

где $\varepsilon = \nu/l_P$. Если не оговорено иное, мы будем рассматривать модель Кана — Хилларда с конвекцией в безразмерном виде, ассоциированным с (37).

Ломаная с нарушенной вниз в силу роста кристалла симметрией звеньев моделируется добавлением члена с конвекцией в виде

нелинейности Хопфа: qq_x , добавление которой в классическое уравнение Кана — Хилларда

$$q_t = (q^3 - q - \varepsilon^2 q_{xx})_{xx} \quad (38)$$

нарушает симметрию: $x \rightarrow -x$ в (38) Углу–долине сопоставляется стационарное убывающее решение уравнения (37) (кинк) и углу–горбу — стационарное возрастающее решение уравнения (37) (анти-кинк). Сопоставление сохраняет несимметрию, а именно: наклоны долин становится круче, наклоны холмов — мельче.

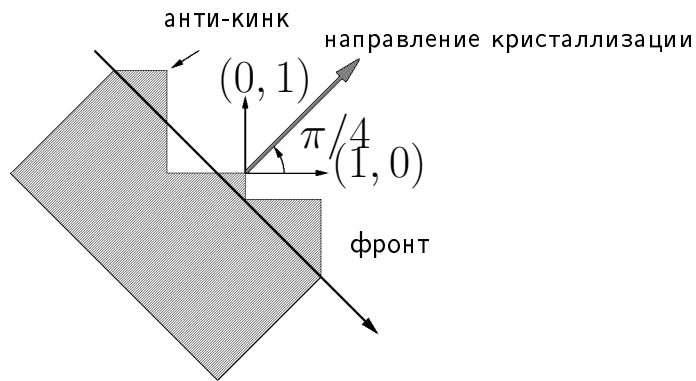


Рис. 2: Схематическое представление граней двумерного роста кристалла в его расплаве с направлением кристаллизации $\pi/4$ к главным кристаллографическим осям $(0, 1)$, $(1, 0)$.

Нелинейный асимптотический анализ жестко-фронтového решения (37), с одним фронтом — одной границей фазового перехода обнаруживает два типа решений, два типа фазовых переходов, порожденных конвекцией: кинк и анти-кинк в терминологии [22]. Их эволюция определяется слиянием (взаимодействием) соседних фронтов.

Численный эксперимент [10] (см. рис. 3) показал, что взаимодействие трех фронтов (т.е. триады: кинк/анти-кинк/кинк) реализуется на порядок быстрее, чем взаимодействие двух фронтов (т.е. пары: кинк/анти-кинк). Обратим внимание, что скорость слияния (взаимодействия) триады на порядок больше скорости слияния пары. Таким образом, слияние

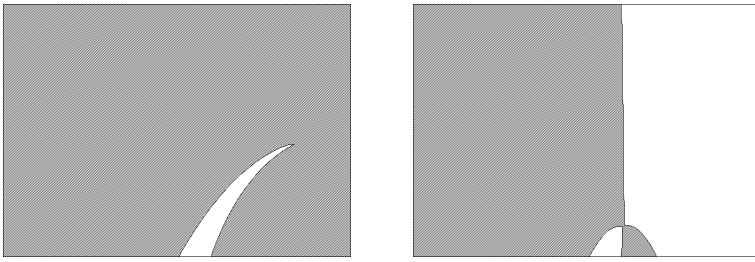


Рис. 3:

триады — это наиболее реализуемая ситуация. На этом и других рисунках белым отмечена область положительных значений параметра порядка u (приведенной концентрации), черным — область отрицательных значений параметра порядка u .

Напомним, что классическое уравнение Кана — Хилларда (38) реконструирует изотермический спиновальный распад двухкомпонентного сплава [21]. Однако следует уточнить, в каком именно смысле.

1. Численный эксперимент показывает, что специальное однородное состояние $q \equiv 0$ неустойчиво и малые его начальные возмущения приводят к рождению периодического решения с длиной волны пропорциональной $\lambda = 2\sqrt{2}\varepsilon$. В динамике оно переходит в структуру со средней длиной волны, которая возрастает (в силу взаимодействия фронтов) вплоть до жестко-фронтového решения с двумя внешними областями, где $q(x, t; \varepsilon) = \pm 1$, между которыми находится зона фазового перехода (внутренний слой) толщины $O(\varepsilon)$ быстрого изменения гладкого параметра порядка $q(x, t; \varepsilon)$.

2. Динамика кристаллизации в модели Кана — Хилларда служит типичным примером равновесного процесса кристаллизации, когда в начально специально однородной смеси, $q \equiv 0$, выделяется в результате закаливания хорошо гранулированная кристаллическая смесь. Сформированная таким образом мелкозернистая среда последовательно затвердевает в большеразмерную структуру с характерной длиной $\mathcal{L}(t)$ —

средним расстоянием между соседними фронтами, которое в одномерном случае [?] имеет порядок $\mathcal{L}(t) \sim |\ln(t)|$, что не соответствует эксперименту.

Процесс теплового гранения, описываемый модификацией уравнения Кана — Хилларда (38), в котором, следуя изменению температуры, плоская кристаллическая поверхность разрушается на горб (анти-кинк) и долину (кинк) является структурой, аналогичной спинодальному распаду. Аналогия наблюдается только в одномерном случае (нет кривизны), но существенное отличие появляется в многомерном случае, когда ориентация локально касательных плоскостей служит векторным параметром и поверхностное натяжение индуцирует эффективную свободную энергию. Более того, поверхностное натяжение — существенно анизотропно так, что кристаллические поверхности являются термодинамически неустойчивыми и принимают так называемую форму Вульфа [10]. Устойчивая пара граней соответствует бикасательным точкам поверхностной свободной энергии и шероховатая (горб — долина) структура затвердевает со скоростью зависящей от 1) механизма поверхностной релаксации, 2) эффективных размеров структуры, 3) групп симметрии поверхностей кристалла [1].

В одномерном случае (38) тепловое гранение кристаллической поверхности вызывает сетку роста (зародыши в расплаве или капельки пара) — аналог спинодального разложения, как в модели Кана — Хилларда, однако скорость затвердевания в этом случае существенно быстрее:

$$\mathcal{L}(t) \sim t^{1/2} \quad (39)$$

Заметим, что скорость $d\mathcal{L}(t)/dt$ становится бесконечной при $t = 0$, что соответствует спинодальному распаду в начальный момент времени. Постараемся объяснить этот эффект столь большого разрыва в порядках $\mathcal{L}(t)$ классической модели и ее модификации

(38).

Линейный анализ устойчивости специального расположения кинков и анти-кинков [23] приводит к следующим выводам:

- (a) парное слияние фазовых границ невозможно,
- (b) тройное слияние может быть осуществлено только через взаимодействие тройки кинков: двух кинков и одного анти-кинка между ними.

Таким образом, сливаются фронты только пары кинков, движущихся навстречу к находящемуся между ними анти-кинку. В результате их слияния промежуточный анти-кинк исчезает, и мы получаем один кинк. Только при таком расположении движущихся навстречу друг другу фронтов кинков и анти-кинка возможно взаимодействие. Заметим, что противоположный случай, когда два анти-кинка движутся в сторону находящегося между ними кинка, является более устойчивым: скорость их сближения намного медленнее. Поэтому доминантным является первый случай. Оба эти результата следуют из спектральных свойств динамической системы, описывающей движения фронтов тройки.

Пусть $x_i(t)$ — соседние фронты в момент времени t и $L(t) = x_i(t) - x_{i-1}(t)$ — расстояние между i -м и $i + 1$ -м фронтами. Соотношения Ранкин — Гюгонио на фронтах в первом приближении $O(\varepsilon)$ определяют динамику движения фронтов

$$\frac{dx_i}{dt} = (-1)^{i+1} \left[J(L_i) - J(L_{i-1}) \right], \quad (40)$$

где $\varepsilon \leq L(t) \leq 1$ и $J(L) \sim 1/L$ при $L \rightarrow +0$. Следовательно, нормировка $t \rightarrow \lambda^2 t$, $L \rightarrow \lambda L$ в силу уравнений (40), записанных для L_i , приводит к соотношению $L(t) \sim \sqrt{t}$, откуда следует (39).

3. Численный анализ задачи Коши. Специальные начальные данные

Описанный выше механизм взаимодействия фронтов подсказывает структуру начальных данных для уравнения (38) для реконструкции двумерного процесса кристаллизации. На рис 4 распределение сгущений и разряженных мест

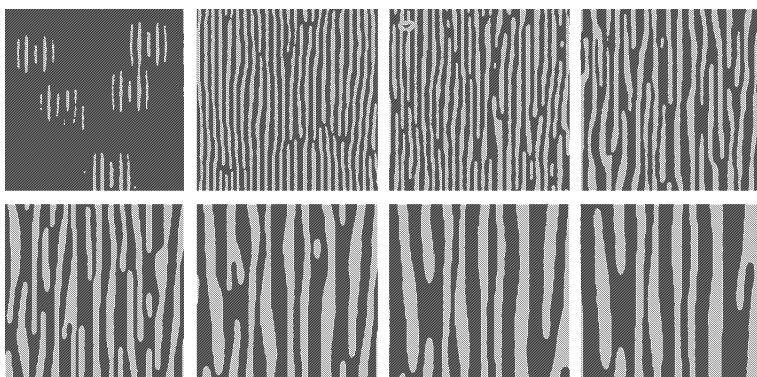


Рис. 4:

можно интерпретировать как отражение сложной геометрии поверхности заготовки, когда на ее выпуклых частях наблюдается скопление зародышей, в то время как на вогнутых — зарождается их меньшее число. Следует заметить, что в обоих случаях со временем происходит рост одной из фаз и сокращение доли другой. Заметен еще один факт — структурная упорядоченность, что дает реконструкцию направленной кристаллизации.

По аналогии с [11] применим технику специальных обобщенных решений уравнения Кана — Хилларда с конвекцией, так называемых цугов волн, для описания процесса кристаллизации. Она включает применение самоподобного начального распределения специально периодически расположенных кинков/анти-кинков в направлении доминантного линейно-нестабильного собственного вектора. Наш выбор представления асимптотического решения мотивируется следующим. Во-первых, несуществованием слияния триады, включающей два анти-кинка и кинк, как отражение взаимодействия отталкивания

между двумя анти-кинками. Во-вторых, выбор начальных самоподобных данных обусловлен значением самоподобности в процессе затвердевания, поскольку самоподобие распределения отмечается еще на ранних стадиях (ранних временах).

Численный анализ [23] показывает, что средняя морфологическая нормировка длины \mathcal{L}_M растет со временем через слияние фронтов; последовательность таких слияний уменьшает число включенных фронтов. Так как кинк и анти-кинк необходимо альтернативны, любое конечное число слияний четного порядка будет включать одинаковое число кинков и анти-кинков, тогда как нечетное число приведет к доминантному типу—кинку или анти-кинку. Четный порядок слияний приводит к устранению всех фронтов (фазовых границ), тогда как нечетный порядок порождает единственную фазовую границу доминантного типа.

Приведем начальную стадию численного эксперимента (начальную стадию затвердевания) для уравнения Кана — Хилларда с конвекцией с периодическими граничными условиями для различных начальных распределений центров зародышей в режиме $\varepsilon \ll 1$.

Проанализируем численный эксперимент.

I. Однородное состояние $q = 0$ неустойчиво, и любое возмущение развивается как периодическая структура с длиной волны λ , совпадающей с диктуемой линейным анализом, т.е. $\lambda = 2\sqrt{2}\pi\varepsilon$. Длина волны решения возрастает вплоть до тех пор пока появится жестко-фронтальная структура. Тогда имеются внешние области, где $q \simeq \pm 1$, связанные слоем быстрого изменения (зоной фазового перехода) толщины $O(\varepsilon)$. Относительно направления возрастания x получаем кинк, если $q = -\sqrt{1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\varepsilon} \rightarrow q = \sqrt{1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\varepsilon}$, или анти-кинк, если

$$q = \sqrt{1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\varepsilon} \rightarrow q = -\sqrt{1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\varepsilon}.$$

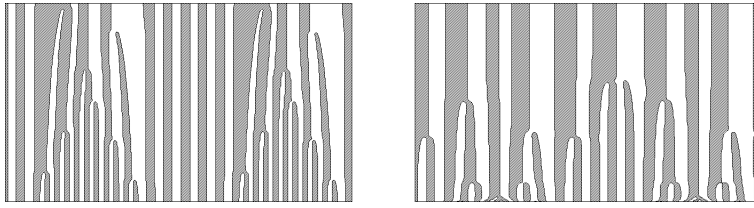


Рис. 5: Левая часть: ($L_0 = 14$, $T_0 = 40$, $\varepsilon = 0.3$); правая часть: ($L_0 = 14$, $T_0 = 40$, $\varepsilon = 0.6$), L_0 — длина интервала распределения зародышей, T_0 — временной интервал кристаллизации. Область $\{u > 0\}$ — белый цвет, область $\{u < 0\}$ — черный цвет.

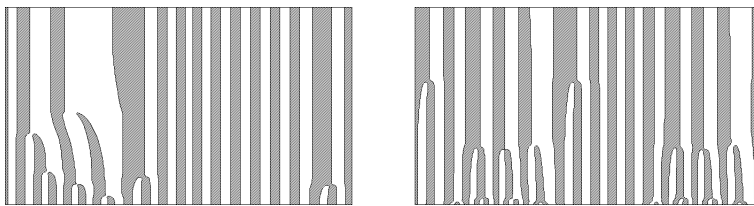


Рис. 6: Левая часть: ($L_0 = 14$, $T_0 = 40$, $\varepsilon = 0.5$); правая часть: ($L_0 = 14$, $T_0 = 40$, $\varepsilon = 0.5$).

II. Среднее расстояние между центрами зародышей (морфологическая нормировка длины) \mathcal{L}_M специальной последовательности чередующихся фронтов (распределением фронтов) растет во времени в результате взаимодействия “кинк / анти-кинк” и их соответствующей аннигиляции. При численной реализации различается три различных режима в поведения $\mathcal{L}_M(t)$

Режим нормировки Закон нормировки для $\mathcal{L}_M(t)$

$$\varepsilon \ll \mathcal{L}_M(t) \ll 1$$

$$\mathcal{L}_M \simeq 1$$

$$\mathcal{L}_M \gg 1$$

$$t^{1/2}$$

переходный

$$\ln(t)$$

III. При $\varepsilon \simeq 1$ морфология решения не затвердевает во времени, скорее показывает периодическую структуру.

IV. Как видно из рис. 5 и 6, выбор начального распределения фронтов—начального распределения сгущений (сгущений

центров кристаллизации) и разряженных участков (разряжений центров кристаллизации) существенно меняет структуру области кристаллизации. Этот факт можно использовать для реконструкции сложной геометрии отливки, поскольку на ее выпуклых участках наблюдается сгущения зародышей кристаллизации, в то время как на вогнутых участках — разряжение.

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 характеристика микросегрегации в кристаллах. // Труды 6-ой международной конференции «Рост монокристаллов и тепломассоперенос». 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., Математические 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 propagation 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-Hilliard model for the formation of facets and corners 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, Preprint 2003
- [24] Гельфанд И. М., Шилов Г. Е., *Распределения и операции с ними. 1*, М., Физматлит, 1959.
- [25] Radkevich E. V., *The Gibbs–Thomson effect and existence conditions of classical solution for the modified Stefan problem*, In: *Free Boundary Problems Involving Solids* (Chadam J.M. and Henning R., Eds.), Longman Scientific & Technical, Harlow, England, 1993, p. 135-142.
- [26] Lacey A. A. and Tayler A. B., *A mushy region in a Stefan problem*, IMA J. Appl. Math. **30** (1983), no. 3, 303–313.
- [27] Oleynik O. A. and Radkevich E. V., *Second Order Equations with Nonnegative Characteristic Form*, Providence, Am. Math. Soc.,

1973.