

другу. После разрушения вследствие истечения ПД оболочки набирает не более 10 % от максимальной скорости. Это позволяет использовать формулы (2.1), (4.1)–(4.3) для оценки скорости оболочки в инженерных расчетах. В данной работе был выбран критерий разрушения Тейлора, справедливый для толстых оболочек [3, 4]. В случае тонких оболочек необходимо применять энергетический критерий [10], что приведет к некоторому изменению скорости оболочки и деформации разрушения, в частности к возникновению масштабного эффекта.

В заключение отметим, что обнаруженный эффект существенного уменьшения скорости оболочки в результате разрушения будет, по-видимому, иметь место и для тонких оболочек, так как он обусловлен волновыми процессами в продуктах детонации. Однако этот вопрос требует дополнительного исследования.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Баум Ф. А., Орленко Л. П., Станюкович К. П. и др. Физика взрыва.— М.: Наука, 1975.
2. Одинцов В. А., Селиванов В. В., Чудов Л. А. Расширение идеально пластической оболочки под действием продуктов детонации // ПМТФ.— 1974.— № 2.
3. Taylor G. I. Scient. Papers.— Cambridge, 1963.— V. 3.
4. Hogget G., Recht R. F. Fracture behavior of tubular bomb // J. Appl. Phys.— 1968.— V. 39, N 3.
5. Каширский А. В., Коровин Ю. В., Одинцов В. А. Движение оболочки при осевой детонации // ПМТФ.— 1971.— № 1.
6. Одинцов В. А., Чудов Л. А. Расширение и разрушение оболочек под действием продуктов детонации // Проблемы упругопластических сред.— М.: Мир, 1975.
7. Меркиевский Л. А., Реснянский А. Д. Расширение металлических трубок под действием продуктов детонации // Динамика сплошной среды.— Новосибирск: ИГ СО АН СССР, 1983.— Вып. 60.
8. Гладышев А. М., Саножников Г. А. Численный расчет метания пластин под действием продуктов детонации // Численные методы решения задач теории упругости и пластичности.— Новосибирск: ИТПМ СО АН СССР, 1986.
9. Finger M., Honing H. C., Lee E. L., Kury J. W. Metal acceleration by composite explosives // Fifth Symp. (Intern.) on Detonation.— Pasadena, California, 1970.
10. Иванов А. Г., Кочкин Л. И. и др. Высокоскоростное разрушение тонкостенных труб из мягкой стали // ПМТФ.— 1983.— № 1.
11. Сериков С. В. Оценка осколкообразования при разрушении шаровой оболочки // ПМТФ.— 1983.— № 3.
12. Фомин В. М., Киселев С. П. Комбинированный разрыв в смеси газа и твердых частиц // ЧММСС.— 1984.— Т. 15, № 2.
13. Рождественский Б. Л., Яненко Н. И. Система квазилинейных уравнений.— М.: Наука, 1978.
14. Уилкинс М. Расчет упругопластических течений // Вычислительные методы в гидродинамике.— М.: Мир, 1967.
15. Крайко А. Н., Миллер Л. Г., Ширковский И. А. О течениях газа в пористой среде с поверхностями разрыва пористости // ПМТФ.— 1982.— № 1.

г. Новосибирск

Поступила 1/VII 1987 г.,  
в окончательном варианте —  
15/III 1988 г.

УДК 536.421 ]

И. Г. Гетуц, А. М. Мейрманов

#### МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ БИНАРНОГО СПЛАВА

Предлагается модель обобщенного движения (ОД), описывающая кристаллизацию бинарного сплава с переходной фазой. Модель ОД содержит в себе как частный случай общепринятую модель с выделенной границей фазового перехода и удобна для численных расчетов, например, методом сквозного счета с использованием неявных схем.

В рамках феноменологической теории задача о кристаллизации бинарного сплава, как правило, формулируется следующим образом: в области  $\Omega$  требуется определить гладкую поверхность  $\Gamma(t)$  (граница фазового перехода), разбивающую область  $\Omega$  на две подобласти  $\Omega^+(t)$  и  $\Omega^-(t)$ , за-

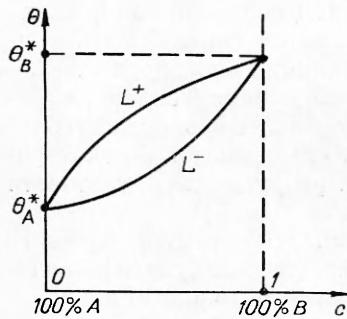


Рис. 1

нятые соответственно жидкой и твердой фазами. Жидкое или твердое состояние среды в данной точке пространства в данный момент времени определяется с помощью диаграммы фазового равновесия (рис. 1) по значениям температуры  $\theta$  и концентрации примеси  $c$ : если температура  $\theta$  больше  $\varphi^+(c)$ , то среда находится в жидком состоянии, а если температура меньше  $\varphi^-(c)$ , то — в твердом. Кривые  $L^\pm = \{(\theta, c) | \theta = \varphi^\pm(c), 0 < c < 1\} = \{(\theta, c) | c = f^\pm(\theta), \theta_A^* < \theta < \theta_B^*\}$  носят название ликвидус и солидус. В каждой из областей  $\Omega^\pm(t)$  температура удовлетворяет уравнению теплопроводности

$$(1) \quad a \partial \theta / \partial t = \operatorname{div}(\kappa \nabla \theta),$$

а концентрация — уравнению диффузии примеси

$$(2) \quad \partial c / \partial t = \operatorname{div}(D \nabla c).$$

Здесь  $a$ ,  $\kappa$ ,  $D$  — коэффициенты теплоемкости, теплопроводности и диффузии, которые, как правило, считаются постоянными в каждой фазе, но, вообще говоря, различными. Например,  $a = a^+ = \text{const}$  в жидкой фазе,  $a = a^- = \text{const}$  в твердой фазе и  $a^+ \neq a^-$ .

На искомой границе  $\Gamma(t)$  должны выполняться условия баланса энергии (условие Стефана)

$$(3) \quad [U] V_n = -[\kappa \partial \theta / \partial n], \quad x \in \Gamma(t)$$

и баланса массы

$$(4) \quad [c] V_n = -[D \partial c / \partial n], \quad x \in \Gamma(t),$$

где  $[U] = U^+ - U^-$ ;  $U^\pm$  — предельное значение энталпии  $U$  на границе  $\Gamma(t)$  из  $\Omega^\pm(t)$ ;  $V_n$  — скорость перемещения границы  $\Gamma(t)$  в направлении нормали  $n$  к этой границе.

Предельные значения температуры на  $\Gamma(t)$  совпадают:

$$(5) \quad [\theta] = 0, \quad x \in \Gamma(t),$$

а предельные значения концентрации определяются из диаграммы фазового равновесия:

$$(6) \quad \varphi^+(c^+) = \varphi^-(c^-) = \theta^+ = \theta^-, \quad x \in \Gamma(t).$$

Математическая модель замыкается двумя условиями на границе  $\Omega$  для температуры и концентрации и начальными условиями для температуры, концентрации и границы раздела фаз. В описанной модели поверхность  $\Gamma(t)$  есть поверхность сильного разрыва концентрации  $c$  и энталпии  $U$ , поэтому естественно эту модель назвать движением с сильным разрывом (ДСР), а ее решения по аналогии с задачей Стефана [1] — классическими.

Как начально-краевая задача модель ДСР (1)–(6) сложная, и к настоящему времени доказано существование классического решения только для одной пространственной переменной на достаточно малом интервале времени [2]. Кроме того, в [3, 4] обнаружены странные решения, в которых за и перед фронтом кристаллизации температура меньше значения, определяемого линией солидуса  $L^-$  на диаграмме фазового равновесия, и сказано, что полученные решения описывают процесс переохлаждения, хотя очевидно, что они, удовлетворяя условиям (1)–(6), не являются решением модели ДСР, так как не выполнено основное требование, при котором имеет смысл граница  $\Gamma(t)$ : в  $\Omega^-(t)$   $\theta$  меньше  $\varphi^-(c)$ , а в  $\Omega^+(t)$   $\theta$  больше  $\varphi^+(c)$ .

Таким образом, не удается показать существование классического решения в целом по времени, а в некоторых случаях его просто нет (на наш взгляд, в этом и состоит результат [3, 4]). По аналогии с задачей Стефана [1] следует предположить, что и для бинарного сплава кристаллизация описывается более широким классом обобщенных решений, содержащим в себе как подкласс классические решения. Такие попытки делались рядом авторов [5—8], и достаточно завершенный вид модели ОД для малых концентраций приведен в [6].

Цель настоящей работы — аксиоматическое построение модели ОД исходя из минимального числа общепринятых постулатов термодинамики. Как и в задаче Стефана [1], основная аксиома модели допускает возможность существования переходной фазы, когда температура среды совпадает с температурой плавления, а энталпия может принимать значения из целого интервала, определяемого предельными значениями энталпии из жидкой и твердой фаз.

При кристаллизации бинарного сплава термодинамическое состояние среды определяют семь параметров: энталпия  $U$ , температура  $\theta$ , энтропия  $S$ , концентрации  $c_A$ ,  $c_B$  и химические потенциалы  $\mu_A$ ,  $\mu_B$  соответственно веществ  $A$  и  $B$ . Пусть указанные параметры в каждой фазе удовлетворяют тождеству Гиббса  $dU = \theta dS + \mu_A dc_A + \mu_B dc_B$  ( $c_A + c_B = 1$ ) и энталпия зависит только от температуры:

$$(7) \quad U = \alpha\theta + \beta \quad (\alpha, \beta = \text{const}).$$

Принятые предположения и теорема Гиббса — Дюгема [9, с. 67], утверждающая, что

$$(8) \quad \mu_A = \Psi = U - \theta S - c\mu$$

( $c = c_B$ ,  $\mu = \mu_B - \mu_A$ ), позволяют ввести два независимых параметра, например температуру  $\theta$  и потенциал  $\mu$ , определяющие все остальные параметры и, следовательно, термодинамическое состояние среды.

Тождество Гиббса для независимых переменных  $\theta$  и  $\mu$  примет вид

$$(9) \quad d\Psi = -Sd\theta - cd\mu,$$

откуда вытекает, что  $S = -\partial\Psi/\partial\theta$ ,  $c = -\partial\Psi/\partial\mu$ . В частности, рассматривая (8) как уравнение первого порядка относительно  $\Psi$  с заданной равенством (7) функцией  $U$ , получим, что в каждой фазе

$$(10) \quad \Psi(\theta, \mu) = \Psi_0(\mu/\theta)\theta - \alpha\theta \ln \theta + \beta$$

( $\Psi_0(\tau)$  — произвольная функция).

Первая аксиома А<sub>1</sub> модели ОД утверждает, что в жидкой и твердой фазах справедливы тождество (9) и представление (7), а фазовый переход из жидкого состояния в твердое (или наоборот) происходит при локальном термодинамическом равновесии фаз, т. е. температура  $\theta$  и химические потенциалы  $\mu_A$  и  $\mu_B$  жидкой фазы равны аналогичным параметрам твердой фазы.

Последнее утверждение отвечает существованию в плоскости переменных  $\theta$  и  $\mu$  кривой  $\mu = \Phi(\theta)$ , разбивающей плоскость на две подобласти  $\Pi^+$  и  $\Pi^-$  так, что значения  $\theta$  и  $\mu$  из  $\Pi^+$  определяют жидкую фазу, а значения  $\theta$  и  $\mu$  из  $\Pi^-$  — твердую, вдоль указанной кривой  $\Psi^+(\theta, \mu) = \Psi^-(\theta, \mu)$ .

Обращаясь к конкретному виду  $\Psi$  в каждой фазе, имеем

$$(11) \quad \mu = \Phi(\theta) = \theta\varphi(\theta).$$

Обратная к (11) зависимость температуры от потенциала  $\mu$  определяет температуру плавления среды  $\theta = \theta^*(\mu)$ . Будем считать, что в каждой фазе энталпия есть возрастающая функция температуры и при переходе из твердого состояния в жидкое она увеличивается, т. е. либо  $\alpha^+ \geq \alpha^- > 0$ ,  $\theta \geq \theta_0 = -[\beta]/[\alpha]$ , либо  $\alpha^- \geq \alpha^+ > 0$ ,  $\theta \leq \theta_0$ .

Согласно принципам построения модели ОД, считаем, что вдоль кривой фазового равновесия (11) расположена складка, в которой спрятано

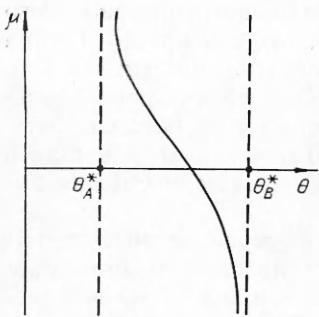


Рис. 2

переходное состояние. Один из вариантов разглаживания складки — переход к переменным  $\theta$  и  $c$ . Для этого из уравнений  $c = -\partial\Psi^\pm/\partial\mu$  находится значение  $\mu = \theta g^\pm(c)$  и подставляется в (11):  $\theta = (\varphi^{-1} \circ g^\pm)(c) = \varphi^\pm(c)$ . На диаграмме фазового равновесия (см. рис. 1) области  $\Pi^+$  переменных  $\theta$  и  $\mu$  соответствует область  $\{\theta > \varphi^+(c), 0 < c < 1\}$  (обозначим ее также  $\Pi^+$ ), а берегу складки (11) со стороны жидкой фазы — кривая ликвидуса  $L^+$ . Аналогично области  $\Pi^-$  переменных  $\theta$  и  $\mu$  отвечает область  $\{\theta < \varphi^-(c), 0 < c < 1\}$ , а берегу складки (11) со стороны твердой фазы — кривая солидуса  $L^-$ .

Имея перед собой диаграмму фазового равновесия в плоскости переменных  $\theta$  и  $c$ , нетрудно восстановить линию фазового равновесия (11). Для этого, дифференцируя тождество

$$\theta\Psi_0^+(\varphi(\theta)) - \alpha^+\theta \ln \theta + \beta^+ = \theta\Psi_0^-(\varphi(\theta)) - \alpha^-\theta \ln \theta + \beta^-$$

по температуре и привлекая (7), находим

$$\frac{d\varphi}{d\theta} = \frac{1}{\theta^2} \frac{U^+ - U^-}{c^+ - c^-} = \frac{1}{\theta^2} \frac{[U]}{[c]}.$$

Будем считать, что линии ликвидуса и солидуса на диаграмме фазового равновесия подходят к линиям  $c = 0$  и  $c = 1$  под различными углами, не кратными  $\pi/2$ . Тогда функция  $\varphi$  в (11) имеет логарифмическую особенность в точках  $\theta_A^*$  и  $\theta_B^*$  и потенциал  $\mu$  вдоль (11) неограниченно растет при приближении температуры к этим значениям. Примерный вид кривой фазового равновесия в плоскости  $\theta$  и  $\mu$  приведен на рис. 2.

Область  $\Pi^*$  в плоскости переменных  $\theta$  и  $c$ , ограниченная кривыми ликвидуса и солидуса, соответствует переходной фазе, в которой еще ничего не определено. Как продолжить термодинамические параметры  $\Psi$ ,  $U$ ,  $S$ ,  $\mu$  в переходную фазу? Прежде всего естественным является предположение о справедливости тождества (9) и представления (8) для потенциала  $\Psi$ . Кроме того, также естественно и предположение о существовании процесса, при котором бинарная смесь переходит из жидкого состояния в твердое (или наоборот) через переходное состояние (в области  $\Pi^*$  переменных  $\theta$  и  $c$  этому процессу отвечает непрерывная кривая, соединяющая линии ликвидуса и солидуса) так, что химические потенциалы  $\mu_A$  и  $\mu_B$  (или потенциалы  $\mu$  и  $\Psi$ ) меняются непрерывно. Другими словами, в области  $\Pi$  изменения параметров  $\theta$  и  $c$  потенциалы  $\mu$  и  $\Psi$  определены и непрерывны.

Требование непрерывности основное, и потенциалы  $\mu$  и  $\Psi$  восстанавливаются в области  $\Pi^*$  единственным образом. Для этого достаточно рассмотреть отрезки  $I_\theta = \{(\theta, c) | \theta = \text{const}\}$  из  $\Pi^*$ , соединяющие линии ликвидуса и солидуса. В плоскости переменных  $\theta$  и  $\mu$  отрезку  $I_\theta$  соответствует точка на кривой фазового равновесия (11), т. е. вдоль  $I_\theta$  в  $\Pi^*$  значение потенциала  $\mu$  постоянно. Из тождества (9) и уравнения (11) следует, что  $\Psi$  также постоянна вдоль  $I_\theta$ .

Поскольку  $F = \Psi + c\mu$ , то наряду с потенциалами  $\Psi$  и  $\mu$  в области  $\Pi$  свободная энергия  $F$  непрерывна. Переписывая тождество (9) в виде  $dF = -Sd\theta + \mu dc$ , убеждаемся, что и энтропия  $S$  непрерывна при переходе через линии ликвидуса и солидуса. В самом деле, последнее тождество эквивалентно равенствам  $\mu = \partial F / \partial c$  и  $S = -\partial F / \partial \theta$ . Пусть  $F = F^*$ ,  $\mu = \mu^*$  в  $\Pi^*$  и  $F = F^+$ ,  $\mu = \mu^+$  в  $\Pi^+$ . По условию  $F^+(\theta, f^+(\theta)) = F^*(\theta, f^+(\theta))$  и  $\mu^*(\theta, f^+(\theta)) = \frac{\partial F}{\partial c}(\theta, f^+(\theta)) = \frac{\partial F^+}{\partial c}(\theta, f^+(\theta)) = \mu^+(\theta, f^+(\theta))$ .

Дифференцируя соотношение  $F^+ = F^*$  вдоль линии ликвидуса, получим  $\partial F^+ / \partial \theta + \mu^+ \partial f^+ / \partial \theta = \partial F^* / \partial \theta + \mu^* \partial f^+ / \partial \theta$ , откуда вытекает непрерывность

энтропии при переходе через линию ликвидуса. Аналогично рассматривается линия солидуса.

Непрерывность энтропии и формула  $U = F + \theta S$  влекут за собой непрерывность энталпии всюду в  $\Pi$ . Обращаясь к легко выводимому следствию тождества Гиббса  $\partial(\mu/\theta)/\partial\theta + (1/\theta^2)\partial U/\partial c = 0$  и определению  $\mu$  в переходной фазе, заключаем, что в переходной фазе энталпия зависит от концентрации линейно:

$$(12) \quad U = \alpha^- \theta + \beta^- + \frac{[\alpha] \theta + [\beta]}{f^+(\theta) - f^-(\theta)} (c - f^-(\theta))$$

при  $f^+(\theta) < c < f^-(\theta)$ ,  $\theta_A^* < \theta < \theta_B^*$ .

Вторая аксиома  $A_2$  модели ОД утверждает, что все состояния, отвечающие значениям параметров  $\theta$  и  $c$  из области  $\Pi^*$ , физически реализуемы, в  $\Pi^*$  справедливы тождество (9) и представление (7) и химические потенциалы  $\mu_A$  и  $\mu_B$  определены и непрерывны в  $\Pi$ .

Потенциал  $\mu$  неограниченно растет в крайних точках диаграммы фазового равновесия, поэтому удобнее в качестве искомой функции рассматривать  $v$ , определяемую из равенства  $\theta\varphi(v) = \mu$ . Возвращаясь к конкретному виду потенциала  $\Psi$  и концентрации  $c$  в жидкой и твердой фазах, видим, что там потенциал  $v$  зависит только от концентрации. По построению в переходной фазе  $v = \theta$ . Это равенство справедливо и на границе  $\Pi^*$  на линиях ликвидуса  $L^+$  и солидуса  $L^-$ :  $v = \theta = f^+(c)$  на  $L^+$  и  $v = \theta = f^-(c)$  на  $L^-$ . Следовательно, всюду в  $\Pi^+ v = f^+(c)$ , а в  $\Pi^- v = f^-(c)$ .

Более детальный анализ показывает, что складка, идущая вдоль кривой (11) в плоскости  $\theta$  и  $\mu$ , в плоскости переменных  $\theta$  и  $c$  разгладилась не полностью: в точках  $(\theta_A^*, 0)$  и  $(\theta_B^*, 1)$  остались спрятанными переходные состояния, соответствующие фазовым переходам чистых веществ  $A$  и  $B$ . В новых переменных  $U$  и  $v$  складка разворачивается полностью. В плоскости  $U$  и  $v$  жидкой фазе отвечает область  $\Pi^+ = \{U \geq \alpha^+ v + \beta^+, \theta_A^* \leq v \leq \theta_B^*\}$ , твердой — область  $\Pi^- = \{U \leq \alpha^- v + \beta^-, \theta_A^* \leq v \leq \theta_B^*\}$ , переходной фазе — область  $\Pi^* = \{\beta^- + \alpha^- v \leq U \leq \beta^+ + \alpha^+ v, \theta_A^* \leq v \leq \theta_B^*\}$ . Переходному состоянию чистых веществ  $A$  и  $B$  отвечают отрезки  $\{\theta_A^* = v\}$  и  $\{\theta_B^* = v\}$  из  $\Pi^*$ .

Зависимости температуры и концентрации от энталпии  $U$  ( $v = \text{const}$ ) и потенциала  $v$  ( $U = \text{const}$ ) показаны на рис. 3, 4. По построению функции  $\theta$  и  $c$  непрерывны, а их первые производные терпят разрыв первого рода. Точки разрыва производных функций  $c$  на рис. 4 перемещаются вдоль линий ликвидуса и солидуса так, что функция  $c(U, v)$  все время монотонно растет с увеличением  $v$ .

Термодинамическое состояние бинарной смеси определяется двумя независимыми параметрами ( $\theta$  и  $c$ , если  $0 < c < 1$ , или  $U$  и  $v$ ). Поэтому для полного описания поведения среды необходимы два дополнительных уравнения, которыми являются законы сохранения энергии и массы. Указанные уравнения должны быть определены для всех значений независимых термодинамических параметров всюду в области  $\Omega$  при всех

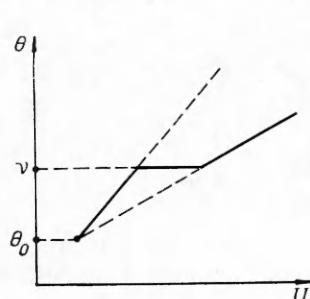


Рис. 3

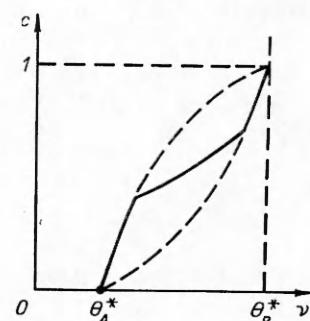


Рис. 4

значениях времени. Поскольку модель ОД строится как расширение модели ДСР, то в областях, занятых жидкой и твердой фазами, закон сохранения энергии должен совпадать с уравнением теплопроводности (1), а закон сохранения массы — с уравнением диффузии (2).

В задаче Стефана [1], которая служит для нас моделью-лоцманом, намеченная программа реализуется в виде уравнения

$$(13) \quad \partial U / \partial t = \operatorname{div} (\kappa \nabla \theta),$$

в котором зависимость температуры  $\theta$  от энталпии  $U$  с заданным значением  $v$  приведена на рис. 3. Если  $v = \text{const}$  (температура плавления чистого вещества постоянна), то в (13) коэффициент  $\kappa$  определен в жидкой и твердой фазах, а в переходной фазе достаточно считать его ограниченным: там  $\kappa \nabla \theta \equiv 0$ . Если же  $v = v(x, t)$ , то в переходной фазе необходимо доопределить коэффициент теплопроводности. Никаких дополнительных соображений, как это делать, к настоящему моменту не имеется, поэтому обычно используется наиболее простой способ экстраполяции: в переходной фазе  $\kappa$  есть линейная функция энталпии, непрерывно соединяющая значения  $\kappa^+$  и  $\kappa^-$ .

Итак, в уравнении (13) все величины описаны. По своему физическому смыслу функция  $U$ , стоящая под знаком производной в (13), может терпеть разрыв первого рода. Как тогда понимать уравнение? Следуя [10], его надо понимать в обобщенном смысле как интегральное тождество

$$(14) \quad \int_{\Omega_T} \left\{ -U \frac{\partial \zeta}{\partial t} + \kappa \nabla \theta \cdot \nabla \zeta \right\} dx dt = 0,$$

справедливое для всех гладких финитных в  $\Omega_T = \Omega \times (0, T)$  функций  $\zeta$ . Легко показывается, что если в  $\Omega$  существует гладкая поверхность  $\Gamma(t)$ , разбивающая  $\Omega$  на подобласти  $\Omega^\pm(t)$ , занятые соответственно жидкой ( $U \geq \alpha^+ v + \beta^+$ ) и твердой ( $U \leq \alpha^- v + \beta^-$ ) фазами, то в  $\Omega^\pm(t)$  температура  $\theta$  удовлетворяет уравнению (1), а на границе  $\Gamma(t)$  — условию Стефана (3).

Аналогично задаче Стефана будем считать, что в модели ОД выполняется уравнение (13), в котором коэффициент  $\kappa$  в  $\Pi^+$  и  $\Pi^-$  совпадает со значениями  $\kappa^+$  и  $\kappa^-$  соответственно, линейно зависит от  $U$  (если независимыми переменными являются  $U$  и  $v$ ) или  $c$  (если независимые переменные  $\theta$  и  $c$ ) в  $\Pi^*$  и непрерывен всюду в  $\Pi$ . Если независимыми переменными будут  $\theta$  и  $c$ , то зависимость энталпии от температуры в  $\Pi^+$  и  $\Pi^-$  дается формулой (7), а в  $\Pi^*$  — формулой (12). Если независимыми переменными являются  $U$  и  $v$ , то  $\theta = \theta(U, v)$  изображается диаграммой на рис. 3.

Рассмотрим теперь закон сохранения массы. Если считать, что он описывается всюду уравнением (2), то, доопределяя коэффициент  $D$  в переходной фазе, как это было сделано в [11], сразу исключим классические решения модели ДСР. Как известно, все решения уравнения (2) с  $D \geq D_0 = \text{const} > 0$  непрерывны [10, с. 238], а в классическом решении концентрация  $c$  терпит разрыв первого рода на поверхности  $\Gamma(t)$  фазового перехода.

На самом деле уравнение диффузии примеси имеет другой, нежели (2), вид. Если считать, что существует вектор потока массы  $j$  такой, что  $dc/\partial t = \operatorname{div} j$ , то, используя формулу Гиббса  $\theta dS = dU + \mu dc$ , принцип неубывания энтропии для произвольного теплоизолированного объема  $\omega$

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} S dx \geq 0, \quad j \cdot n|_{\partial\omega} = 0, \quad \nabla \theta \cdot n|_{\partial\omega} = 0$$

и принцип симметрии Онзагера [9], нетрудно вывести представление  $j = \Lambda \nabla(\mu/\theta) = \lambda \nabla v$ , которое и положим в основу уравнения диффузии примеси

$$(15) \quad \partial c / \partial t = \operatorname{div} (\lambda \nabla v).$$

Последнее совпадает с (2) в жидкой и твердой фазах, если

$$\lambda^\pm \frac{d\varphi^\pm}{dc}(c) = D^\pm.$$

В переходной фазе коэффициент  $\lambda$  можно доопределить как линейную функцию энталпии, непрерывную при всех значениях независимых параметров. Уравнение (15), как и (13), понимается в обобщенном смысле как выполнение соответствующего тождества. Если решения (13), (15) таковы, что  $\theta$  и  $v$  непрерывны в  $\Omega_T$  и в области  $\Omega$  существует гладкая поверхность  $\Gamma(t)$ , разделяющая области  $\Omega^\pm(t)$ , занятые жидкой и твердой фазами, то из (15) вытекают уравнение диффузии (2) для концентраций в каждой из областей  $\Omega^\pm(t)$  и условие баланса массы (4) на границе  $\Gamma(t)$ .

Условия (5), (6) — следствие непрерывности  $\theta$  и  $v$ . Таким образом, модель ОД содержит в себе как частный случай модель ДСР. Аксиома  $A_3$ , завершающая построение модели ОД, постулирует справедливость уравнений (13) и (15) всюду в области  $\Omega_T$  и описывает коэффициенты  $\kappa$  и  $\lambda$ .

Математическая модель ОД кристаллизации бинарного сплава по существу шире модели ДСР. Это уже можно обнаружить в самом простом случае стационарной одномерной задачи, когда область  $\Omega$  есть отрезок  $(0,1)$ . Точные результаты сформулированы в [1], и один из них заключается в следующем: если на одной границе  $\Omega$  задано жидкое состояние, а на другой — твердое, то при достаточно малых отклонениях от положения равновесия в области  $\Omega$  присутствует переходная фаза, заполняющая область  $\Omega^* \subset \Omega$ .

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Мейрманов А. М. Задача Стефана.— Новосибирск: Наука, 1986.
2. Петрова А. Г. Локальная разрешимость термодиффузационной задачи Стефана // Динамика сплошной среды.— Новосибирск: ИГ СО АН СССР, 1982.— Вып. 58.
3. Авдонин Н. А. Математическое описание процессов кристаллизации.— Рига: Зинатне, 1980.
4. Иванцов Г. П. «Диффузионное» переохлаждение при кристаллизации бинарного сплава // ДАН СССР.— 1951.— Т. 81, № 2.
5. Crowley A. B., Ockendon J. R. On the numerical solution of an alloy solidification problem // Intern. J. Heat Mass Transfer.— 1979.— V. 22, N 6.
6. Bermudes A., Saguez C. Mathematical formulation and numerical solution of an alloy solidification problem // Free boundary problems: theory and applications.— Boston: Pitman, 1983.— (Res. Not. in Math.— V. 78).
7. Crowley A. B. Numerical solution of alloy solidification problem revisited // Free boundary problems: applications and theory.— Boston: Pitman, 1985.— (Res. Not. in Math.— V. 120).
8. Alexiades V., Wilson D., Solomon A. Modeling binary alloy solidification processes.— Oak Ridge, 1983.— (Prepr. ORNL/CSD — 117).
9. Булатов Н. Г., Лундин А. Б. Термодинамика необратимых физико-химических процессов.— М.: Химия, 1984.
10. Ладыженская О. А., Солонников В. А., Уральцева Н. Н. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа.— М.: Наука, 1967.
11. Данилюк И. И. Математическое моделирование фазовых превращений в двухкомпонентных средах // ДАН УССР. Сер. А.— 1984.— № 12.