DOI: <u>10.7242/1999-6691/2022.15.4.36</u> УДК 539.3

# ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ ОБЛАСТЕЙ НОВОЙ ФАЗЫ В УПРУГОМ ТЕЛЕ

П.К. Кабанова, А.Б. Фрейдин

Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация

Проектирование и использование функциональных материалов и элементов конструкций требует понимания и количественной оценки эффектов, вызванных фазовыми превращениями. В данной работе исследована задача об эволюции областей новой фазы в упругом теле, возникающих в результате фазовых превращений при деформировании. Фазовый переход сопровождается собственной деформацией превращения и изменением модулей упругости. Движение границы области – межфазной границы – описывается кинетическим уравнением, связывающим нормальную компоненту скорости границы с конфигурационной (термодинамической) силой, равной скачку нормальной компоненты тензора энергии-импульса Эшелби. Разработана численная процедура, основанная на методе конечных элементов и верифицированная рассмотрением задачи о термодинамическом равновесии и кинетике плоского слоя новой фазы, имеющей аналитическое решение. Построены распределения конфигурационной силы вдоль межфазной границы и показано, что эти распределения могут быть инструментом для предсказания особенностей развития области. В результате численных экспериментов обнаружены различные сценарии эволюции области новой фазы при внешних деформациях, как допускающих, так и не допускающих существование равновесной двухфазной конфигурации. На примере эллиптического отверстия продемонстрировано, что концентратор напряжений может вызывать развитие новой фазы даже при малых внешних деформациях, при которых фазовый переход в однородном теле не происходит. Показано, что область новой фазы сама может создавать концентрацию напряжений, способствующую дальнейшему фазовому превращению.

*Ключевые слова:* фазовые превращения при деформировании, распространение межфазной границы, конфигурационная сила, тензор энергии-импульса Эшелби, численное моделирование

# NUMERICAL INVESTIGATION OF THE EVOLUTION OF NEW PHASE DOMAINS IN AN ELASTIC SOLID

## P.K. Kabanova and A.B. Freidin

#### Institute for Problems in Mechanical Engineering RAS, St. Petersburg, Russian Federation

Designing and using functional (smart) materials and structural elements requires understanding and quantifying the effects caused by phase transformations. This paper investigates the problem of evolution of new phase domains in an elastic solid arising as a result of stress-induced phase transformations during deformation. The phase transition is accompanied by the transformation strain and a change in elastic moduli. The motion of the domain boundary – the interface – is described by a kinetic equation relating the normal component of the interface velocity with a configurational (thermodynamic) force equal to the jump of the normal component of the Eshelby energy-momentum tensor. A finite element procedure has been developed and verified by considering the problem of thermodynamic equilibrium and the kinetics of a new phase plane layer that has an analytical solution. The distributions of the configurational force along the interface are constructed. It is shown that these distributions can be used as a tool for predicting the characteristic features of the new phase domain evolution. The numerical experiments revealed various scenarios of the new phase domain evolution under external deformation, which allow or exclude the existence of equilibrium two-phase configuration. Using the example of an elliptical hole, it is demonstrated that a stress concentrator can cause the development of a new phase even at small external strains, at which a phase transition does not occur in a homogeneous body. It is shown that the new phase domain itself can induce stress concentration, which contributes to a further phase transition.

Key words: stress-induced phase transformations, interface propagation, configurational force, Eshelby stress tensor, numerical modeling

## 1. Введение

Теоретические исследования фазовых переходов в процессе деформирования твердых тел находятся на стыке материаловедения, физики твердого тела и механики сплошной среды. Важным классом таких переходов являются мартенситные превращения, которые сопровождаются собственной деформацией и могут проходить как при деформировании, так и при изменении температуры (см., например, [1]). Это приводит к эффектам памяти формы, используемым при проектировании элементов конструкций, нетривиально реагирующих на внешние термомеханические воздействия и создающих механические воздействия, например, актуаторов (см. [2, 3]). С превращением аустенита в мартенсит связывается формирование процесс-зоны в окрестности вершины трещины — дополнительного источника диссипации энергии при разрушении [4–7]. Эволюция области фазовых переходов вокруг растущей трещины наблюдалась в [7, 8]. Другим примером зон с измененными свойствами вблизи концентраторов напряжений являются крейзы (трещиноподобные области, заполненные вытянутыми макромолекулами полимера и пустотами). Возникновение такой зоны наблюдалось, например, в вершине трещины при растяжении полистирола [9], а также в вершине выреза при циклическом нагружении [10, 11].

Проектирование элементов конструкций с использованием функциональных (smart) материалов требует понимания и количественной оценки эффектов, вызываемых фазовыми превращениями. Можно выделить два подхода к анализу взаимосвязей напряженно-деформированного состояния (НДС) и фазовых переходов:

1. Модели, основанные на введении дополнительных параметров состояния, характеризующих особенности структуры материала в среднем, например, объемной доли новой фазы, для которых формулируются специальные определяющие соотношения [2, 12–15].

2. Модели с межфазными границами, описывающие эволюцию областей новой фазы. Эти модели можно разделить на два типа: модели, основанные на рассмотрении фазовых превращений при деформировании в рамках теории фазового поля с «размытой» границей фаз, и модели, в которых межфазные границы полагаются поверхностями бесконечно малой толщины.

В теории фазового поля межфазные границы представляются как переходные слои конечной толщины, в которых свойства материала изменяются плавно [16–19] (см. также обзор [20]). Изменение свойств задается введением параметров порядка, эволюция которых определяется дополнительными уравнениями типа уравнений Гинзбурга–Ландау. Например, в [21–23] теория фазового поля использована для исследования геометрии зоны фазового превращения в окрестности трещины (процесс-зоны).

Постановка, основанная на явном введении межфазных границ, включает условия на границе. В моделях, аналогичных моделям теории пластичности, напряженное состояние на границе материала в исходном и новом фазовых состояниях таково, что выполняется некоторый критерий для напряжения Мизеса или комбинации инвариантов тензора напряжений подобно критериям пластичности [24–26]. В частности, в [27] для оценки размера области превращения используются модель зоны пластичности Ирвина и билинейная зависимость напряжений и деформаций. В [28] представлено сравнение форм и размеров областей превращения, полученных с помощью различных критериев.

Другой подход к включению в модель межфазных границ восходит к классической теории фазовых переходов Гиббса. Он основан на вариационном принципе минимизации функционала энергии (вариационном принципе Гиббса) и концепции химического потенциала, скачок которого должен быть равен нулю на равновесной межфазной границе [29].

Во второй половине XX века пришло осознание, что термодинамическое равновесие на элементарной площадке в твердом теле должно зависеть от ее ориентации и поэтому химический потенциал должен быть тензором [30]. Показано, что в роли этого тензора выступает тензор энергии-импульса Эшелби, введенный ранее в [31] (см. также [32]), а условие термодинамического равновесия означает непрерывность его нормальной компоненты. В настоящее время этот тензор также называют тензором напряжений Эшелби. Использование условия термодинамического равновесия привело к связанной задаче, в которой положение равновесной границы обусловлено напряжениями, а напряжения в двухфазном теле зависят от положения границы. Также установлено, что в случае межфазной границы, распространяющейся в результате фазового превращения одной части двухфазного тела в другую, диссипация энергии равна произведению скачка нормальной компоненты тензора Эшелби и нормальной компоненты вектора скорости границы [33]. С точки зрения механики конфигурационных сил [34–36] это означает, что скачок является конфигурационной (термодинамическої) силой, управляющей распространением границы, и дает основание для формулировки кинетического уравнения в виде зависимости нормальной компоненты скорости границы от скачка нормальной компоненты тензора Эшелби.

Этот подход использовался для аналитического и численного моделирования распространения межфазной границы, например, в [38–44], а также распространения фронтов химических реакций под действием напряжения с конфигурационной силой, определяемой тензором химического сродства, который представляет собой комбинацию тензоров напряжений Эшелби для компонентов реакции [45–49].

Цель настоящей работы заключается в численном исследовании эволюции областей новой фазы в упругом теле в зависимости от внешней деформации и размера начальной области новой фазы. В разделе 2 приведен краткий обзор основных соотношений для расчета НДС двухфазного твердого тела с движущейся межфазной границей. Раздел 3 посвящен верификации численной процедуры путем рассмотрения задачи о распространении плоской межфазной границы, имеющей аналитическое решение. Раздел 4 содержит результаты численного моделирования распространения межфазной границы с разными начальными конфигурациями, эволюции межфазной границы при разных значениях внешней нагрузки, а также начальной эволюции области новой фазы в окрестности эллиптического отверстия. Выводы сформулированы в разделе 5.

## 2. Двухфазные состояния упругого тела: равновесие и кинетика межфазных границ

Задача описания двухфазного упругого тела с межфазной границей  $\Gamma$  состоит в нахождении поля перемещений  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ , где  $\mathbf{x}$  — точка тела, и зависящего от времени положения границы. Индексами «–» и «+» обозначены величины, относящиеся к материалу, соответственно, находящемуся в начальном и новом фазовых состояниях (Рис. 1). Перемещение считается достаточно гладким и в квазистатическом случае удовлетворяет уравнению механического равновесия:

$$\mathbf{x} \notin \Gamma: \qquad \nabla \cdot \mathbf{\sigma} = \mathbf{0},\tag{1}$$

граничным условиям на границе тела и условиям непрерывности перемещений и нормальной компоненты тензора напряжений на неизвестной межфазной границе Г:

$$\mathbf{x} \in \Gamma$$
:  $[\mathbf{u}] = 0, \quad [\boldsymbol{\sigma}] \cdot \mathbf{n} = 0,$  (2)



где **σ** — тензор напряжений, **n** — единичный вектор нормали к границе Г, внешний по отношению к фазе «+», скобки [ ] обозначают скачок величины из фазы «-» в фазу «+»:  $[] = (...)_{+} - (...)_{-}$ .

> Для описания зависимости положения межфазной границы Г времени необходимо дополнительное определяющее от соотношение — кинетическое уравнение. Диссипация энергии вследствие распространения межфазной границы представима в виде:

$$D = -\int_{\Gamma} \chi v_{\Gamma} d \Gamma \ge 0$$

Рис. 1. Схематичное изображение лвухфазного тела

где v<sub>г</sub> — нормальная составляющая скорости межфазной границы, χ — конфигурационная сила, равная скачку нормальной составляющей тензора энергии-импульса Эшелби

**b** (см., например, [33]):

$$\chi = \mathbf{n} \cdot [\mathbf{b}] \cdot \mathbf{n}, \tag{3}$$

где в случае малых деформаций  $\mathbf{b} = f \mathbf{E} - \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$ , при этом  $\mathbf{E}$  — единичный тензор второго ранга, f объемная плотность свободной энергии Гельмгольца. Разным положениям межфазной границы соответствуют разные двухфазные тела, то есть разные двухфазные конфигурации. Поэтому величину  $\chi$ называют конфигурационной силой; она определяет диссипацию энергии вследствие изменения конфигурации тела. Выражение (3) перепишем как

$$\chi = [f] - \boldsymbol{\sigma}_{\pm} : [\boldsymbol{\varepsilon}] = [f] - \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle : [\boldsymbol{\varepsilon}], \qquad (4)$$

где є — тензор деформаций. Тензор напряжений **σ** в (4) может быть взят на любой из сторон границы, так как в силу непрерывности перемещений и усилий на межфазной границе справедливы равенства:

$$\boldsymbol{\sigma}_{+} : [\boldsymbol{\varepsilon}] = \boldsymbol{\sigma}_{-} : [\boldsymbol{\varepsilon}] = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle : [\boldsymbol{\varepsilon}],$$

где  $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = (1/2) (\boldsymbol{\sigma}_+ + \boldsymbol{\sigma}_-).$ 

Выражение для диссипации энергии подсказывает форму кинетического уравнения в виде зависимости нормальной составляющей скорости межфазной границы  $v_{\Gamma}$  от конфигурационной силы  $\chi$  [34, 42]:

$$v_{\Gamma} = V(\chi), \tag{5}$$

причем такой, что если  $v_{\Gamma} \neq 0$ , то  $\chi V(\chi) < 0$ .

Рассмотрим фазовые превращения в упругом теле. Определяющие соотношения для материалов фаз имеют вил:

$$\boldsymbol{\sigma}_{\pm}\left(\boldsymbol{\varepsilon}\right) = \mathbf{C}_{\pm} : \left(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\pm}^{*}\right), \tag{6}$$

где  $\mathbf{C}_{\pm}$  — тензоры модулей упругости материалов фаз,  $\boldsymbol{\epsilon}_{\pm}^{*}$  — тензоры деформации фаз в ненапряженном состоянии. Тогда объемная плотность свободной энергии Гельмгольца в теле, претерпевающем фазовое превращение, равна:

$$f(\mathbf{\epsilon}) = \min_{-,+} \left\{ f^{-}(\mathbf{\epsilon}), f^{+}(\mathbf{\epsilon}) \right\},$$
  
$$f^{\pm}(\mathbf{\epsilon}) = f_{0}^{\pm} + (1/2) \left( \mathbf{\epsilon} - \mathbf{\epsilon}_{\pm}^{*} \right) : \mathbf{C}_{\pm} : \left( \mathbf{\epsilon} - \mathbf{\epsilon}_{\pm}^{*} \right),$$
  
(7)

где  $f_0^{\pm}$  — плотности свободной энергии в ненапряженных состояниях.

Независимо от кинетического уравнения в [30, 50] показано, что в случае термодинамического равновесия фаз

$$\chi = 0. \tag{8}$$

Тогда кинетическое уравнение представимо в виде:

$$v_{\Gamma} = -\kappa \chi, \tag{9}$$

где  $\kappa > 0$  — кинетический коэффициент.

Соотношения (1)–(9) определяют связанную задачу для двухфазного тела с движущейся межфазной границей, когда НДС зависит от положения межфазной границы, а скорость межфазной границы зависит от НДС тела.

Полагаем далее, что  $\mathbf{\epsilon}_{-}^{*} = 0$ , тогда  $\mathbf{\epsilon}_{+}^{*} = \mathbf{\epsilon}^{tr}$  — собственная деформация превращения. Из (4)–(7) следует, что выражение для конфигурационной силы имеет вид:

$$\chi = \gamma - (1/2) \boldsymbol{\sigma}_{-} : \boldsymbol{\varepsilon}_{-} + (1/2) \boldsymbol{\sigma}_{+} : (\boldsymbol{\varepsilon}_{+} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tr}}) - \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle : (\boldsymbol{\varepsilon}_{+} - \boldsymbol{\varepsilon}_{-}), \qquad (10)$$

где  $\gamma = f_0^+ - f_0^-$  — энергетический параметр.

Заметим, что выражение для конфигурационной силы можно записать в виде функции нормали и деформаций или напряжений только с одной из сторон границы [51]. Такое представление очень полезно для аналитических исследований, но для численных конечно-элементных процедур лучше использовать формулу (10), так как при численных расчетах находятся деформации и напряжения по обе стороны границы фаз, и нет необходимости дополнительно пересчитывать деформации с одной стороны границы в деформации на другой стороне.

## 3. Верификация численной процедуры

Решение задачи об эволюции области новой фазы в теле получено путем численного моделирования с использованием метода конечных элементов. Предполагается, что межфазная граница проходит по границам элементов сетки, при этом на каждом временном шаге происходит перестроение расчетной сетки. Отметим, что стадия зарождения новой фазы моделью не описывается, в связи с чем считаем, что межфазная граница имеет известное начальное положение.

Алгоритм численного расчета для одной итерации содержит следующие шаги:

- 1. Описание геометрии области и начального положения межфазной границы.
- 2. Задание свойств материала, параметров сетки и граничных условий.
- 3. Расчет НДС методом конечных элементов.
- 4. Вычисление конфигурационной силы на границе фаз согласно (10).

5. Определение нового положения межфазной границы с помощью кинетического уравнения (9).

6. Переход на новую итерацию.



Рис. 2. Двухфазное тело с плоским слоем новой фазы

Для верификации численной процедуры в постановке плоской деформации рассмотрена задача об одноосном растяжении двухфазного бруса с квадратным сечением  $x \in [-L, L]$ ,  $y \in [-H, H]$ , H = L. Слой новой фазы ограничен межфазными границами  $y = \pm h$ . Граничные условия с учетом симметрии расчетной области записывали для ее четверти:

$$u_{y}\Big|_{y=0} = 0, \quad u_{y}\Big|_{y=H} = u_{0}, \quad u_{x}\Big|_{x=0} = 0, \quad u_{x}\Big|_{x=L} = 0,$$
 (11)

где  $u_x$ ,  $u_y$  — компоненты вектора перемещений (Рис. 2).

Полагали, что фазы изотропные:

$$\boldsymbol{C}_{\pm} = \lambda_{\pm} \mathbf{E} \otimes \mathbf{E} + 2\boldsymbol{\mu}_{\pm} \mathbf{I} , \qquad (12)$$

где I — единичный тензор четвертого ранга,  $\lambda_{_{\pm}},\,\mu_{_{\pm}}$  — параметры Ламе.

В постановке плоской деформации  $\varepsilon^{tr} = (\vartheta^{tr}/2)(\mathbf{E} - \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z)$ , где  $\mathbf{e}_z$  — единичный вектор, перпендикулярный плоскости Оху.

Решение задачи (1), (2) нахождения перемещений при учете (6), (12) и граничных условий (11) имеет вид:

$$\mathbf{u} = u_{y\pm} \mathbf{e}_y, \qquad u_{y\pm} = A_{\pm} y + B_{\pm}, \tag{13}$$

где  $\mathbf{e}_{y}$  — единичный вектор, направленный по оси *y*,

$$A_{+} = \frac{(\lambda_{-} + 2\mu_{-})\varepsilon_{0} + (1-\zeta)(\lambda_{+} + \mu_{+})\vartheta^{tr}}{(1-\zeta)(\lambda_{+} + 2\mu_{+}) + \zeta(\lambda_{-} + 2\mu_{-})},$$

$$A_{-} = \frac{(\lambda_{+} + 2\mu_{+})\varepsilon_{0} - \zeta(\lambda_{+} + \mu_{+})\vartheta^{tr}}{(1-\zeta)(\lambda_{+} + 2\mu_{+}) + \zeta(\lambda_{-} + 2\mu_{-})},$$

$$B_{+} = 0,$$

$$B_{-} = (\varepsilon_{0} - A_{-})H,$$
(14)

где  $\zeta = h/H$ ,  $\varepsilon_0 = u_0/H$ .

Согласно (13), (14), выражение для конфигурационной силы (10) принимает вид [52]:

$$\chi = F_1 + \frac{F_2}{\tilde{\zeta}^2}, \qquad \tilde{\zeta} = \zeta - g, \tag{15}$$

где

$$g = \frac{q_{+}}{[q]}, \quad F_{1} = \gamma + \frac{p_{+} \left(9^{\text{tr}}\right)^{2}}{2} \left(1 - \frac{p_{+}}{[q]}\right), \quad F_{2} = \frac{q_{-}q_{+}}{2[q]^{3}} \left([q]\epsilon_{0} - p_{+}9^{\text{tr}}\right)^{2},$$
$$p_{+} = \lambda_{+} + \mu_{+}, \quad q_{\pm} = \lambda_{\pm} + 2\mu_{\pm}.$$

Зависимость равновесного положения  $\zeta_{eq} = h_{eq}/H$  межфазной границы от внешней деформации  $\varepsilon_0$  следует из условия термодинамического равновесия (8) и с учетом (15) записывается как

$$\tilde{\zeta}^2 = f_2, \tag{16}$$

где  $f_2 = -F_2/F_1$ .

Вещественное решение уравнения (16) существует только при условии  $f_2 > 0$ . Тогда, после интегрирования кинетического уравнения (9) с конфигурационной силой (15), получается зависимость положения границы от времени в виде:

$$-\frac{\kappa F_1}{H}t = \tilde{\zeta} - \frac{\sqrt{f_2}}{2}\ln\left|\frac{\sqrt{f_2} + \tilde{\zeta}}{\sqrt{f_2} - \tilde{\zeta}}\right| + f_3,\tag{17}$$

где  $f_3$  определяется из начального условия  $\tilde{\zeta}(0) = \zeta(0) - g$ .

Отметим, что равенство нулю конфигурационной силы является лишь необходимым условием минимизации энергии. Равновесная поверхность, перпендикулярная направлению деформации растяжения, в зависимости от параметров материала может быть устойчивой или неустойчивой. Аналитические процедуры анализа устойчивости развиты и апробированы ранее (см. [53, 54]). Они включают анализ кинетической устойчивости (если наложенные возмущения растут в силу кинетического уравнения, то межфазная граница неустойчива) и экспресс-оценку устойчивости в результате сравнения деформаций на межфазной границе с деформациями, соответствующими границе зоны фазовых переходов, образованной в пространстве деформаций всеми деформациями, которые могут существовать

на равновесных межфазных границах [51]. Доказано [55], что соответствие деформаций на межфазной границе деформациям на границе зоны фазовых переходов является необходимым условием устойчивости межфазной границы. В результате численных симуляций в [47, 48] продемонстрировано, что в случае устойчивого равновесия распространяющаяся межфазная граница «гладко» приходит к положению равновесия, а при неустойчивом равновесии теряет устойчивость до достижения равновесия.

Параметры материала, используемые в расчетах, приведены в таблице 1. Величины выбраны так, чтобы выполнялись следующие условия: существовала равновесная граница фаз, то есть  $f_2 > 0$ ; деформации на межфазной границе соответствовали деформациям на границе зоны фазовых переходов; не нарушалась согласованность с подходом малых деформаций. Расчетная область имела размеры: H = L = 1 м.

	E, ГПа	ν	$\vartheta^{\mathrm{tr}}$	γ, ГДж/м <sup>3</sup>	к, м <sup>4</sup> /(Дж·с)
Фаза «+»	59,2	0,139	0,01	0,013	1.10-11
Фаза «–»	86,4	0,27	-		

Таблица 1. Параметры материалов, используемые в расчетах

Зависимость безразмерного положения равновесия плоской межфазной границы  $\zeta_{eq}$  от внешней деформации  $\varepsilon_0$ , получаемая из (16), показана на рисунке 3. Она позволяет найти диапазон деформаций, при которых в теле могут существовать равновесные межфазные границы. При выбранных параметрах материала зависимость практически линейная.

Для моделирования распространения плоской межфазной границы внешняя деформация задана равной  $\varepsilon_0 = 0,02$ , а начальное положение границы  $h_0 = 0,1H$ . Равновесное положение границы при данном внешнем растяжении составило:  $\zeta_{eq} = 0,517$ .



Рис. 3. Зависимость безразмерного положения равновесной границы от внешней деформации



аналитически по формуле (17), а также равновесное положение межфазной границы. Совпадение кривых, полученных численно и аналитически, и плавное схождение межфазной границы к положению равновесия свидетельствуют о корректности численной реализации и подтверждают устойчивость решения при выбранных параметрах.



**Рис. 4.** Эволюция во времени плоской межфазной границы от начального положения l к равновесному положению 2 (*a*); зависимость положения границы при численном и аналитическом расчетах и сходимость к равновесному положению ( $\delta$ )

## 4. Результаты

Разработанную численную процедуру применим для исследования влияния начальной формы межфазной границы на достижение равновесного положения и влияния величины внешней деформации на кинетику межфазной границы. Параметры и граничные условия возьмем те же, что и в задаче верификации, описанной в разделе 3.

## 4.1. Распространение межфазных границ при различных начальных конфигурациях

Рассмотрим эволюцию области новой фазы при различных начальных конфигурациях межфазной границы и внешней деформации, равной  $\varepsilon_0 = 0,02$ . Согласно рисунку 3, равновесное положение границы при этой деформации существует и равно  $\zeta_{eq} = 0,517$ . На рисунке 5 представлены положения межфазной границы в различные моменты времени для случаев, когда начальная форма границы (линия *I*) в правой четверти области: а) плоская с неровностью, вогнутой вниз; б) плоская с выпуклой неровностью; в) плоская под наклоном; г) эллиптическая.



**Рис. 5.** Эволюция межфазной границы при различных начальных конфигурациях и  $\varepsilon_0 = 0,02$ : начальное (линия *I*) и равновесное (2) положения границы

<u>Случаи а) и б)</u>: выпуклость и вогнутость, заданные на границе в начальный момент, с течением времени исчезают. Граница превращается в плоскость и стремится к равновесному положению;

<u>Случай в):</u> граница, заданная в начальный момент времени под наклоном, с течением времени приходит к горизонтальному виду и к положению равновесия;

<u>Случай г)</u>: при границе, имеющей эллиптическую форму, происходит рост области новой фазы вверх, к равновесному положению, и вправо, к границе расчетной области. После достижения границы расчетной области распространение межфазной границы становится аналогичным распространению границы под наклоном. Таким образом, при внешней деформации, допускающей положение равновессия, начальная форма межфазной границы не влияет на достижение равновесного положения. Полученные результаты являются дополнительной верификацией численной процедуры и выбора параметров, обеспечивающих устойчивость межфазной границы.

## 4.2. Эволюция круговой области новой фазы



Внешняя деформация определяет положение равновесной межфазной границы и напряжения на границе области новой фазы. Исследуем влияние величины внешней деформации на кинетику межфазной границы для начальной области новой фазы в виде кругового зародыша (Рис. 6).

Рассмотрим эволюцию области новой фазы под действием деформации растяжения, равной  $\varepsilon_0 = 0,02$ . Как отмечалось выше, при этой деформации равновесное положение границы равно  $\zeta_{eq} = 0,517$ . Начальную область новой фазы зададим в виде кругового зародыша радиусом r = 0,01L.

В результате численного моделирования получены положения границы в различные моменты времени (см. Рис. 7*a*). Показаны безразмерные положения X = x/L, Y = y/H для трех моментов

времени (кривые 1, 2, 3), где x, y — координаты точек границы. При заданном внешнем растяжении происходит рост области новой фазы в направлениях x и y. При этом характер распространения области новой фазы аналогичен представленному на рисунке 5z, то есть дальнейшее продвижение межфазной границы предполагает достижение правой границы области и движение вверх к положению равновесия. На рисунке 7 $\delta$  приведены распределения конфигурационной силы в зависимости от угловой координаты, соответствующей точкам границы на рисунке 7a. Видно, что конфигурационная сила имеет отрицательные значения на всей границе, что подразумевает рост области новой фазы во всех направлениях.

Исследуем далее эволюцию области новой фазы при внешней деформации  $\varepsilon_0 = 0,013$ , которой соответствует узкий равновесный слой новой фазы с границей  $\zeta_{eq} = 0,047$ . Рассмотрим примеры, когда



**Рис. 7.** Положение межфазной границы (*a*) и распределение конфигурационной силы на границе ( $\delta$ ) при  $\varepsilon_0 = 0,02$ 

радиус зародыша меньше толщины равновесного слоя: r = 0,01L (Рис. 8), и больше ее: r = 0,06L (Рис. 9). В первом случае (Рис. 8*a*) на начальной стадии происходит превращение кругового зародыша в слой с уменьшением толщины и увеличением длины (кривые 1, 2). Конфигурационная сила, соответствующая данным временным отрезкам (Рис. 8*б*), имеет как отрицательные значения, так и положительные, что и определяет характер движения границы. При достижении определенного положения происходит обратное движение границы вверх по оси *y*, то есть к равновесному положению (кривые 3, 4).



**Рис. 8.** Положение межфазной границы (*a*) и распределение конфигурационной силы на границе ( $\delta$ ) при  $\varepsilon_n = 0,013$  ( $r < h_{en}$ )

Похожая картина движения границы наблюдается и при начальном радиусе области новой фазы, большем толщины равновесного слоя (Рис. 9a). Область новой фазы в первые моменты времени сжимается по оси y, проходит положение равновесия и стремится вытянуться в слой (кривые 2, 3, 4). После достижения некоторого положения область новой фазы начинает расти вверх к равновесному положению.



**Рис. 9.** Положение межфазной границы (*a*) и распределение конфигурационной силы на границе ( $\delta$ ) при  $\varepsilon_0 = 0,013$  ( $r > h_{so}$ )

Рассмотрим поведение области новой фазы в условиях растяжения при  $\varepsilon_0 = 0,012$ , когда в однородно деформированном теле равновесный слой новой фазы не может существовать. Зададим начальную область новой фазы в виде кругового зародыша радиусом r = 0,01L. Из рисунка 10a видим, что область новой фазы в первые моменты времени сжимается по оси y и стремится исчезнуть. При этом конфигурационная

сила (Рис. 10б) имеет положительные значения на всей межфазной границе (кривая 1). Однако далее конфигурационная сила меняет знак на части границы (кривые 2, 3, 4), вследствие чего область новой фазы начинает расти вправо и продолжает сжиматься по вертикали, то есть стремится превратится в слой. Несмотря на малую внешнюю деформацию, рост вправо происходит под влиянием концентрации напряжений, порождаемой самой областью новой фазы.

Уменьшим внешнюю деформацию до  $\varepsilon_0 = 0,005$ . На рисунке 11*a* показано, как происходит исчезновение новой фазы: ее область стягивается по всем направлениям. В отличие от предыдущего случая (Рис. 10), также описывающего исчезновение области новой фазы, стадия роста области в горизонтальном направлении отсутствует. Конфигурационная сила имеет положительные значения на всей межфазной границе (Рис. 11*б*), вследствие чего область новой фазы сжимается по осям *x* и *y*.



Рис. 10. Положение межфазной границы (a) и распределение конфигурационной силы на границе ( $\delta$ ) при  $\varepsilon_0 = 0,012$ 



**Рис. 11.** Положение межфазной границы (*a*) и распределение конфигурационной силы на границе ( $\delta$ ) при  $\varepsilon_0 = 0,005$ 

## 4.3. Эволюция новой фазы в окрестности концентратора напряжений

В предыдущем подразделе показано, что при внешней деформации, равной  $\varepsilon_0 = 0,005$ , существование области новой фазы невозможно, даже если область новой фазы сама создает концентрацию напряжений. Однако недостаточный уровень внешних напряжений при  $\varepsilon_0 = 0,005$  может быть компенсирован введением в тело концентратора напряжений.

Рассмотрим эволюцию области новой фазы при  $\varepsilon_0 = 0,005$  в теле с концентратором напряжений, имеющим в сечении вид вытянутого эллиптического отверстия с соотношением полуосей 9:1. Вокруг отверстия в начальный момент времени задан прилегающий слой новой фазы некоторой толщины (Рис. 12). Полагаем, что новая фаза может оставаться в метастабильном состоянии и не исчезать при положительном значении конфигурационной силы. Заметим, что возможность сохранения метастабильных фазовых состояний на разгруженных берегах трещины позади ее вершины отмечалась в [21]. Диссипативное неравенство  $\chi v_{\Gamma} \leq 0$  может быть выполнено как равенство, если  $\chi > 0$ , но  $v_{\Gamma} = 0$ . Такое состояние называют «фальшивым» равновесием [56]. Поэтому в данном примере при моделировании распространения межфазной границы считаем, что  $v_{\Gamma} > 0$ , если  $\chi < 0$ , и  $v_{\Gamma} = 0$ , если  $\chi > 0$ . По представленной на рисунке 12 начальной стадии эволюции области новой фазы можно заключить, что, как и ожидалось, концентрации напряжений на эллиптическом отверстии может быть достаточно для фазового превращения и роста области новой фазы. Другие примеры и более подробный анализ эволюции области новой фазы в окрестности концентраторов напряжений приведены в работе [52].



**Рис. 12.** Эволюция области новой фазы в окрестности эллиптического отверстия при  $\varepsilon_0 = 0,005$ 

## 5. Заключение

Для решения связанных задач, в которых требуется описание взаимосвязей НДС и фазовых превращений мартенситного типа, разработана и верифицирована численная процедура моделирования эволюции области новой фазы в упругом теле. Использовано кинетическое уравнение, задающее зависимость скорости межфазной границы от конфигурационной силы, в роли которой выступает скачок нормальной компоненты тензора напряжений Эшелби. Исследованы распределения конфигурационной силы вдоль межфазной границы для различных размеров начальной области новой фазы относительно толщины равновесного слоя и для разных величин внешней деформации. Показано, что построение этих распределений может быть эффективным инструментом для предсказания характера эволюции области.

В результате проделанных численных экспериментов продемонстрированы различные сценарии эволюции области новой фазы, согласно которым характер ее изменений зависит от внешней деформации:

 – если деформация допускает существование равновесной области новой фазы, начальные области новой фазы приходят к равновесной конфигурации независимо от начальной формы области;

 при относительно большой внешней деформации и, соответственно, довольно большой толщине равновесного слоя область новой фазы растет во всех направлениях;

– при уменьшении внешней деформации и соответствующей толщины равновесного слоя на начальной стадии может наблюдаться «анизотропия роста»: область новой фазы удлиняется в направлении, перпендикулярном направлению растяжения, но сужается по оси растяжения, затем начинается обратное увеличение толщины в направлении растяжения. Такое поведение характерно как для зародышей, имеющих начальный диаметр, больший толщины равновесного слоя, так и для зародышей меньшего диаметра;

– при малых внешних деформациях, не допускающих существование равновесных областей новой фазы, появившиеся зародыши новой фазы, убывая в одном направлении, могут расти в другом за счет концентрации напряжений, которую они же и порождают;

- с дальнейшим уменьшением внешней деформации область новой фазы со временем сжимается по всем направлениям;

– концентраторы напряжений могут инициировать рост области новой фазы даже при очень малых величинах внешней деформации.

Авторы выражают признательность А.В. Морозову за обсуждение постановки и результатов работы.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-19-00552-П), https://rscf.ru/project/22-19-35065/.

# Литература

- 1. Бойко В.С., Гарбер Р.И., Косевич А.М. Обратимая пластичность кристаллов. М.: Наука, 1991. 280 с.
- Беляев С.П., Волков А.Е., Ермолаев В.А., Каменцева З.П., Кузьмин С.Л., Лихачев В.А., Мозгунов В.Ф., Разов А.И., Хайров Р.Ю. Материалы с эффектом памяти формы. Справ. изд. / Под ред. В.А. Лихачева. СПб.: Изд-во НИИХ СПбГУ. Т. 1. 1997. 424 с.; Т. 2. 1998. 374 с.; Т. 3. 1998. 474 с.; Т. 4. 1998. 268 с.
- 3. *Мовчан А.А., Экстер Н.М.* Актуатор с последовательным соединением стержня из сплава с памятью формы и упругого элемента смещения // МКМК. 2021. Т. 27, № 2. С. 169-190. https://doi.org/10.33113/mkmk.ras.2021.27.02.169 190.02
- McKelvey A.L., Ritchie R.O. Fatigue-crack propagation in Nitinol, a shape-memory and superelastic endovascular stent material // J. Biomed. Mater. Res. 1999. Vol. 47. P. 301-308. https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-4636(19991205)47:3<301::AID-JBM3>3.0.CO;2-H
- 5. Wilkes K.E., Liaw P.K. The fatigue behavior of shape-memory alloys // JOM. 2000. Vol. 52. P. 45-51. https://doi.org/10.1007/s11837-000-0083-3
- Robertson S.W., Ritchie R.O. In vitro fatigue–crack growth and fracture toughness behavior of thin-walled superelastic Nitinol tube for endovascular stents: A basis for defining the effect of crack-like defects // Biomaterials. 2007. Vol. 28. P. 700-709. https://doi.org/10.1016/j.biomaterials.2006.09.034
- Daly S., Miller A., Ravichandran G., Bhattacharya K. An experimental investigation of crack initiation in thin sheets of nitinol // Acta Mater. 2007. Vol. 55. P. 6322-6330. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2007.07.038

- Roth I., Krupp U., Christ H.J., Kübbeler M., Fritzen C.-P. Deformation induced martensite formation in metastable austenitic steel during in situ fatigue loading in a scanning electron microscope // ESOMAT. 2009. 06030. https://doi.org/10.1051/esomat/200906030
- 9. Bevis M., Hull D. Craze distribution around cracks in polystyrene // J. Mater. Sci. 1970. Vol. 5. P. 983-987. https://doi.org/10.1007/BF00558180
- Botsis J., Chudnovsky A., Moet A. Fatigue crack layer propagation in polystyrene Part I experimental observations // Int. J. Fract. 1987. Vol. 33. P. 263-276. https://doi.org/10.1007/BF00044415
- 11. Chudnovsky A. Slow crack growth, its modeling and crack-layer approach: A review // Int. J. Eng. Sci. 2014. Vol. 83. P. 6-41. https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2014.05.015
- 12. Волков А.Е. Микроструктурное моделирование деформации сплавов при повторяющихся мартенситных превращениях // Изв. РАН. Сер. Физическая. 2002. Т. 66, № 9. С. 1290-1297.
- 13. *Мовчан А.А., Мовчан И.А.* Одномерная микромеханическая модель нелинейного деформирования сплавов с памятью формы при прямом и обратном термоупругих превращениях // МКМК. 2007. Т. 13, № 3. С. 297-322.
- 14. Lagoudas D., Hartl D., Chemisky Y., Machado L., Popov P. Constitutive model for the numerical analysis of phase transformation in polycrystalline shape memory alloys // Int. J. Plast. 2012. Vol. 32-33. P. 155-183. https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2011.10.009
- 15. Тихомирова К.А. Разработка и численная реализация одномерной феноменологической модели фазовой деформации в сплавах с памятью формы // Вычисл. мех. сплош. сред. 2016. Т. 9, № 2. С. 192-206. https://doi.org/10.7242/1999-6691/2016.9.2.17
- 16. Chen L.-Q. Phase-field models for microstructure evolution // Annu. Rev. Mater. Res. 2002. Vol. 32. P. 113-140. https://doi.org/10.1146/annurev.matsci.32.112001.132041
- 17. Levitas V.I., Lee D.W., Preston D.L. Interface propagation and microstructure evolution in phase field models of stressinduced martensitic phase transformations // Int. J. Plast. 2010. Vol. 26. P. 395-422. https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2009.08.003
- Mamivand M., Zaeem M.A., El Kadiri H. A review on phase field modeling of martensitic phase transformation // Comput. Mat. Sci. 2013. Vol. 77. P. 304-311. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2013.04.059
- Rezaee-Hajidehi M., Stupkiewicz S. Phase-field modeling of multivariant martensitic microstructures and size effects in nano-indentation // Mech. Mater. 2020. Vol. 141. 103267. https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2019.103267
- 20. Levitas V.I. Phase transformations, fracture, and other structural changes in inelastic materials // Int. J. Plast. 2021. Vol. 140. 102914. https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2020.102914
- Boulbitch A., Korzhenevskii A.L. Morphological transformation of the process zone at the tip of a propagating crack. I. Simulation // Phys. Rev. E. 2020. Vol. 101. 033003. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.101.033003
- 22. Boulbitch A., Korzhenevskii A.L. Morphological transformation of the process zone at the tip of a propagating crack. II. Geometrical parameters of the process zone // Phys. Rev. E. 2020. Vol. 101. 033004. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.101.033004
- 23. Boulbitch A., Korzhenevskii A.L. Transformation toughness induced by surface tension of the crack-tip process zone interface: A field-theoretical approach // Phys. Rev. E. 2021. Vol. 103. 023001. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.103.023001
- 24. Birman V. On mode I fracture of shape memory alloy plates // Smart Mater. Struct. 1998. Vol. 7. P. 433-437. https://doi.org/10.1088/0964-1726/7/4/001
- Yi S., Gao S. Fracture toughening mechanism of shape memory alloys due to martensite transformation // Int. J. Solids Struct. 2000. Vol. 37. P. 5315-5327. https://doi.org/10.1016/S0020-7683(99)00213-9
- 26. Laydi M.R., Lexcellent C. Determination of phase transformation surfaces around crack tip in shape memory alloys // MATEC Web of Conferences. 2015. Vol. 33. 02010. https://doi.org/10.1051/matecconf/20153302010
- Maletta C., Furgiuele F. Analytical modeling of stress-induced martensitic transformation in the crack tip region of nickeltitanium alloys // Acta Mater. 2010. Vol. 58. P. 92-101. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.08.060
- Hazar S., Anlas G., Moumni Z. Evaluation of transformation region around crack tip in shape memory alloys // Int. J. Fract. 2016. Vol. 197. P. 99-110. https://doi.org/10.1007/s10704-015-0069-3
- 29. Гиббс Дж. Термодинамика. Статистическая механика. М.: Наука, 1982. 584 с.
- 30. Гринфельд М.А. Методы механики сплошных сред в теории фазовых превращений. М.: Наука, 1990. 312 с.
- 31. Eshelby J.D. The elastic energy-momentum tensor // J. Elasticity. 1975. Vol. 5. P. 321-335. https://doi.org/10.1007/BF00126994
- 32. Collected works of J.D. Eshelby. The mechanics of defects and inhomogeneities / Ed. X. Markenscoff, A. Gupta. Springer, 2006. 939 p.
- 33. Wilmanski K. Thermomechanics of Continua. Springer, 1998. 273 p. https://doi.org/10.1007/978-3-642-58934-8
- 34. Gurtin M.E. Configurational forces as basic concepts of continuum physics. Springer, 2000. https://doi.org/10.1007/b97847
- 35. *Kienzler R., Herrmann G.* Mechanics in material space: with applications to defect and fracture mechanics. Springer, 2000. 307 p. https://doi.org/10.1007/978-3-642-57010-0
- Maugin G.A. Configurational forces: Thermomechanics, mathematics, physics, and numerics. Chapman and Hall/CRC, 2010. 527 p. https://doi.org/10.1201/b10356
- 37. Фрейдин А.Б. О конфигурационных силах в механике фазовых и химических превращений // ПММ. 2022. Т. 86, № 4. С. 571-583. https://doi.org/10.31857/S0032823522040075
- Mueller R., Gross D. 3D simulation of equilibrium morphologies of precipitates // Comput. Mater. Sci. 1998. Vol. 11. P. 35-44. https://doi.org/10.1016/S0927-0256(97)00193-6
- Mueller R., Gross D., Lupascu D.C. Driving forces on domain walls in ferroelectric materials and interaction with defects // Comput. Mater. Sci. 2006. Vol. 35. P. 42-52. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2005.02.014
- Gross D., Mueller R., Kolling S. Configurational forces morphology evolution and finite elements // Mech. Res. Comm. 2002. Vol. 29. P. 529-536. https://doi.org/10.1016/S0093-6413(02)00296-3

- Gross D., Kolling S., Mueller R., Schmidt I. Configurational forces and their application in solid mechanics // Eur. J. Mech. Solid. 2003. Vol. 22. P. 669-692. https://doi.org/10.1016/S0997-7538(03)00076-7
- 42. Abeyaratne R., Knowles J.K. Evolution of phase transitions: A continuum theory. Cambridge University Press, 2006. 242 p.
- 43. Le K.C. On kinetics of hysteresis // Continuum Mech. Thermodyn. 2007. Vol. 18. P. 335-342. https://doi.org/10.1007/s00161-006-0034-5
- 44. Freidin A.B., Eremeyev V.A. On kinetic nature of hysteresis phenomena in stress-induced phase transformations // Dynamical processes in generalized continua and structures / Ed. H. Altenbach, A. Belyaev, V. Eremeyev, A. Krivtsov, A. Porubov. Springer Cham, 2019. P. 223-229. https://doi.org/10.1007/978-3-030-11665-1\_12
- 45. Freidin A.B., Vilchevskaya E.N., Korolev I.K. Stress-assist chemical reactions front propagation in deformable solids // Int. J. Eng. Sci. 2014. Vol. 83. P. 57-75. https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2014.03.008
- 46. Freidin A.B., Korolev I.K., Aleshchenko S.P., Vilchevskaya E.N. Chemical affinity tensor and chemical reaction front propagation: theory and FE-simulations // Int. J. Fract. 2016. Vol. 202. P. 245-259. https://doi.org/10.1007/s10704-016-0155-1
- 47. Morozov A.V., Freidin A.B., Müller W.H. Stability of chemical reaction fronts in the vicinity of a blocking state // PNRPU Mechanics Bulletin. 2019. No. 3. P. 58-64. https://doi.org/10.15593/perm.mech/2019.3.06
- 48. Morozov A. Numerical and analytical studies of kinetics, equilibrium, and stability of the chemical reaction fronts in deformable solids / PhD thesis. Technische Universitat Berlin, 2021. 129 p.
- Freidin A.B., Korolev I.K., Aleshchenko S.P. FEM-simulations of a chemical reaction front propagation in an elastic solid with a cylindrical hole // Mechanics and control of solids and structures / Ed. V.A. Polyanskiy, A.K. Belyaev. Springer Cham, 2022. P. 195-208. https://doi.org/10.1007/978-3-030-93076-9 10
- Grinfel'd M.A. Stability of heterogeneous equilibrium in systems containing solid elastic phases // Dokl. Akad. Nauk SSSR. 1982. Vol. 265, No. 4. P. 836-840.
- 51. Морозов Н.Ф., Фрейдин А.Б. Зоны фазовых переходов и фазовые превращения упругих тел при различных видах напряженного состояния // Тр. мат. ин-та им. В.А. Стеклова. 1998. Т. 223. С. 220-232.
- 52. Kabanova P.K., Morozov A., Freidin A.B., Chudnovsky A. Numerical simulations of interface propagation in elastic solids with stress concentrators // Mechanics of heterogeneous materials / Ed. H. Altenbach, G. Bruno, V.A. Eremeyev, M. Gutkin, W.H. Müller. Springer, 2023 [accepted for publication]
- 53. Еремеев В.А., Фрейдин А.Б., Шарипова Л.Л. О неединственности и устойчивости в задачах равновесия упругих двухфазных тел // ДАН. 2003. Т. 391, № 2. С. 189-193. (English version https://doi.org/10.1134/1.1598247)
- 54. Еремеев В.А., Фрейдин А.Б., Шарипова Л.Л. Об устойчивости равновесия двухфазных упругих тел // ПММ. 2007. Т. 71, № 1. С. 61-84. (English version https://doi.org/10.1016/j.jappmathmech.2007.03.007)
- Grabovsky Y., Truskinovsky L. Roughening instability of broken extremals // Arch. Rational Mech. Anal. 2011. Vol. 200. P. 183-202. https://doi.org/10.1007/s00205-010-0377-8
- 56. Prigogine I., Defay R. Chemical thermodynamics. London: Longmans, Green, 1954. 543 p.

## References

- Boyko V.S., Garber R.I., Kosevich A.M. Obratimaya plastichnost' kristallov [the reversible plasticity of crystals]. Moscow, Nauka, 1991. 280 p.
- Belyayev S.P., Volkov A.E., Ermolayev V.A., Kamentseva Z.P., Kuz'min S.L., Likhachev V.A., Mozgunov V.F., Razov A.I., Khayrov R.Yu. *Materialy s effektom pamyati formy: Sprav. izd.* [Materials with shape memory effect]. Saint Petersburg, NIIKh SPbGU, 1998. Vol. 1, 1997. 424 p.; Vol. 2, 1998. 374 p.; Vol. 3, 1998. 474 p.; Vol. 4, 1998. 268 p.
- 3. Movchan A.A., Ekster N.M. Actuator with a series connection of a shape memory alloy's rod and an elastic bias element. *MKMK* – *Composite Mechanics and Design*, 2021, vol. 27, no. 2, pp. 169-190. https://doi.org/10.33113/mkmk.ras.2021.27.02.169 190.02
- McKelvey A.L., Ritchie R.O. Fatigue-crack propagation in Nitinol, a shape-memory and superelastic endovascular stent material. J. Biomed. Mater. Res., 1999, vol. 47, pp. 301-308. https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-4636(19991205)47:3<301::AID-JBM3>3.0.CO;2-H
- 5. Wilkes K.E., Liaw P.K. The fatigue behavior of shape-memory alloys. JOM, 2000, vol. 52, pp. 45-51. https://doi.org/10.1007/s11837-000-0083-3
- Robertson S.W., Ritchie R.O. In vitro fatigue–crack growth and fracture toughness behavior of thin-walled superelastic Nitinol tube for endovascular stents: A basis for defining the effect of crack-like defects. *Biomaterials*, 2007, vol. 28, pp. 700-709. https://doi.org/10.1016/j.biomaterials.2006.09.034
- Daly S., Miller A., Ravichandran G., Bhattacharya K. An experimental investigation of crack initiation in thin sheets of nitinol. *Acta Mater.*, 2007, vol. 55, pp. 6322-6330. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2007.07.038
- 8. Roth I., Krupp U., Christ H.J., Kübbeler M., Fritzen C.-P. Deformation induced martensite formation in metastable austenitic steel during in situ fatigue loading in a scanning electron microscope. *ESOMAT*, 2009, 06030. https://doi.org/10.1051/esomat/200906030
- 9. Bevis M., Hull D. Craze distribution around cracks in polystyrene. J. Mater. Sci., 1970, vol. 5, pp. 983-987. https://doi.org/10.1007/BF00558180
- Botsis J., Chudnovsky A., Moet A. Fatigue crack layer propagation in polystyrene Part I experimental observations. Int. J. Fract., 1987, vol. 33, pp. 263-276. https://doi.org/10.1007/BF00044415
- 11. Chudnovsky A. Slow crack growth, its modeling and crack-layer approach: A review. Int. J. Eng. Sci., 2014, vol. 83, pp. 6-41. https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2014.05.015
- Volkov A.E. Mikrostrukturnoye modelirovaniye deformatsii splavov pri povtoryayushchikhsya martensitnykh prevrashcheniyakh [Microstructural modeling of the alloy deformation under repeated martensitic transformations]. *Izv. RAN. Ser. Fizicheskaya – Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.*, 2002, vol. 66, no. 9, pp. 1290-1297.

- 13. Movchan A.A., Movchan I.A. Odnomernaya mikromekhanicheskaya model' nelineynogo deformirovaniya splavov s pamyat'yu formy pri pryamom i obratnom termouprugikh prevrashcheniyakh [One-dimensional micromechanical model for nonlinear deformation of shape memory alloys under forward and inverse thermoelastic transformations]. *MKMK Composite Mechanics and Design*, 2007, vol. 13, no. 3, pp. 297-322.
- Lagoudas D., Hartl D., Chemisky Y., Machado L., Popov P. Constitutive model for the numerical analysis of phase transformation in polycrystalline shape memory alloys. *Int. J. Plast.*, 2012, vol. 32-33, pp. 155-183. https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2011.10.009
- Tikhomirova K.A. Development and numerical implementation of one-dimensional phenomenological model for phase deformation in shape memory alloys. *Vychisl. mekh. splosh. sred – Comput. Contin. Mech.*, 2016, vol. 9, no. 2, pp. 192-206. https://doi.org/10.7242/1999-6691/2016.9.2.17
- 16. Chen L.-Q. Phase-field models for microstructure evolution. Annu. Rev. Mater. Res., 2002, vol. 32, pp. 113-140. https://doi.org/10.1146/annurev.matsci.32.112001.132041
- Levitas V.I., Lee D.W., Preston D.L. Interface propagation and microstructure evolution in phase field models of stressinduced martensitic phase transformations. *Int. J. Plast.*, 2010, vol. 26, pp. 395-422. https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2009.08.003
- Mamivand M., Zaeem M.A., El Kadiri H. A review on phase field modeling of martensitic phase transformation. *Comput. Mat. Sci.*, 2013, vol. 77, pp. 304-311. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2013.04.059
- Rezaee-Hajidehi M., Stupkiewicz S. Phase-field modeling of multivariant martensitic microstructures and size effects in nano-indentation. *Mech. Mater.*, 2020, vol. 141, 103267. https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2019.103267
- Levitas V.I. Phase transformations, fracture, and other structural changes in inelastic materials. Int. J. Plast., 2021, vol. 140, 102914. https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2020.102914
- Boulbitch A., Korzhenevskii A.L. Morphological transformation of the process zone at the tip of a propagating crack. I. Simulation. *Phys. Rev. E.*, 2020, vol. 101, 033003. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.101.033003
- 22. Boulbitch A., Korzhenevskii A.L. Morphological transformation of the process zone at the tip of a propagating crack. II. Geometrical parameters of the process zone. *Phys. Rev. E.*, 2020, vol. 101, 033004. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.101.033004
- Boulbitch A., Korzhenevskii A.L. Transformation toughness induced by surface tension of the crack-tip process zone interface: A field-theoretical approach. *Phys. Rev. E.*, 2021, vol. 103, 023001. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.103.023001
- 24. Birman V. On mode I fracture of shape memory alloy plates. Smart Mater. Struct., 1998, vol. 7, pp. 433-437. https://doi.org/10.1088/0964-1726/7/4/001
- Yi S., Gao S. Fracture toughening mechanism of shape memory alloys due to martensite transformation. Int. J. Solids Struct., 2000, vol. 37, pp. 5315-5327. https://doi.org/10.1016/S0020-7683(99)00213-9
- 26. Laydi M.R., Lexcellent C. Determination of phase transformation surfaces around crack tip in shape memory alloys. MATEC Web of Conferences, 2015, vol. 33, 02010. https://doi.org/10.1051/matecconf/20153302010
- Maletta C., Furgiuele F. Analytical modeling of stress-induced martensitic transformation in the crack tip region of nickeltitanium alloys. *Acta Mater.*, 2010, vol. 58, pp. 92-101. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.08.060
- Hazar S., Anlas G., Moumni Z. Evaluation of transformation region around crack tip in shape memory alloys. Int. J. Fract., 2016, vol. 197, pp. 99-110. https://doi.org/10.1007/s10704-015-0069-3
- 29. The collected works of J. Willard Gibbs. Vol. 1, 2. Longmans, Green and Co, 1928.
- 30. Grinfel'd M.A. *Metody mekhaniki sploshnykh sred v teorii fazovykh prevrashcheniy* [Methods of continuum mechanics in the theory of phase transitions]. Moscow, Nauka, 1990. 312 p.
- 31. Eshelby J.D. The elastic energy-momentum tensor. J. Elasticity, 1975, vol. 5, pp. 321-335. https://doi.org/10.1007/BF00126994
- 32. Markenscoff X., Gupta A. (ed.) Collected works of J.D. Eshelby. The mechanics of defects and inhomogeneities. Springer, 2006. 939 p.
- 33. Wilmanski K. Thermomechanics of Continua. Springer, 1998. 273 p. https://doi.org/10.1007/978-3-642-58934-8
- 34. Gurtin M.E. Configurational forces as basic concepts of continuum physics. Springer, 2000. https://doi.org/10.1007/b97847
- 35. Kienzler R., Herrmann G. *Mechanics in material space: with application to defect and fracture mechanics*. Springer, 2000. 307 p. https://doi.org/10.1007/978-3-642-57010-0
- 36. Maugin G.A. Configurational forces: Thermomechanics, physics, mathematics, and numerics. Chapman and Hall/CRC, 2010. 527 p. https://doi.org/10.1201/b10356
- Freidin A.B. On configurational forces in mechanics of phase and chemical transformations. *PMM Mechanics of Solids*, 2022, vol. 86, no. 4, pp. 571-583. https://doi.org/10.31857/S0032823522040075
- 38. Mueller R., Gross D. 3D simulation of equilibrium morphologies of precipitates. *Comput. Mater. Sci.*, 1998, vol. 11, pp. 35-44. https://doi.org/10.1016/S0927-0256(97)00193-6
- Mueller R., Gross D., Lupascu D.C. Driving forces on domain walls in ferroelectric materials and interaction with defects. *Comput. Mater. Sci.*, 2006, vol. 35, pp. 42-52. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2005.02.014
- 40. Gross D., Mueller R., Kolling S. Configurational forces morphology evolution and finite elements. *Mech. Res. Comm.*, 2002, vol. 29, pp. 529-536. https://doi.org/10.1016/S0093-6413(02)00296-3
- Gross D., Kolling S., Mueller R., Schmidt I. Configurational forces and their application in solid mechanics. *Eur. J. Mech. Solid.*, 2003, vol. 22, pp. 669-692. https://doi.org/10.1016/S0997-7538(03)00076-7
- 42. Abeyaratne R., Knowles J.K. Evolution of phase transitions: A continuum theory. Cambridge University Press, 2006. 242 p.
- 43. Le K.C. On kinetics of hysteresis. *Continuum Mech. Thermodyn.*, 2007, vol. 18, pp. 335-342. https://doi.org/10.1007/s00161-006-0034-5
- 44. Freidin A.B., Eremeyev V.A. On kinetic nature of hysteresis phenomena in stress-induced phase transformations. *Dynamical processes in generalized continua and structures*, ed. H. Altenbach, A. Belyaev, V. Eremeyev, A. Krivtsov, A. Porubov. Springer Cham, 2019. Pp. 223-229. https://doi.org/10.1007/978-3-030-11665-1\_12

- 45. Freidin A.B., Vilchevskaya E.N., Korolev I.K. Stress-assist chemical reactions front propagation in deformable solids. *Int. J. Eng. Sci.*, 2014, vol. 83, pp. 57-75. https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2014.03.008
- Freidin A.B., Korolev I.K., Aleshchenko S.P., Vilchevskaya E.N. Chemical affinity tensor and chemical reaction front propagation: theory and FE-simulations. *Int. J. Fract.*, 2016, vol. 202, pp. 245-259. https://doi.org/10.1007/s10704-016-0155-1
- Morozov A.V., Freidin A.B., Müller W.H. Stability of chemical reaction fronts in the vicinity of a blocking state. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2019, no. 3, pp. 58-64. https://doi.org/10.15593/perm.mech/2019.3.06
- 48. Morozov A. Numerical and analytical studies of kinetics, equilibrium, and stability of the chemical reaction fronts in deformable solids. PhD thesis, Technische Universität Berlin, 2021. 129 p.
- Freidin A.B., Korolev I.K., Aleshchenko S.P. FEM-simulations of a chemical reaction front propagation in an elastic solid with a cylindrical hole. *Mechanics and control of solids and structures*, ed. V.A. Polyanskiy, A.K. Belyaev. Springer Cham, 2022. Pp. 195-208. https://doi.org/10.1007/978-3-030-93076-9\_10
- 50. Grinfel'd M.A. Stability of heterogeneous equilibrium in system containing solid elastic phases. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 1982, vol. 265, no. 4, pp. 836-840.
- 51. Morozov N.F., Freidin A.B. Zones of phase transitions and phase transformations in elastic bodies under various stress states. *Proc. Steklov Inst. Math.*, 1998, vol. 223, pp. 220-232.
- 52. Kabanova P.K., Morozov A., Freidin A.B., Chudnovsky A. Numerical simulations of interface propagation in elastic solids with stress concentrators. *Mechanics of heterogeneous materials*, ed. Altenbach, G. Bruno, V.A. Eremeyev, M. Gutkin, W.H. Müller. Springer, 2023 [submitted for publication]
- Eremeev V.A., Freidin A.B., Sharipova L.L. Nonuniqueness and stability in problems of equilibrium of elastic two-phase bodies. *Dokl. Phys.*, 2003, vol. 48, no. 7, pp. 359-363. https://doi.org/10.1134/1.1598247
- 54. Yeremeyev V.A., Freidin A.B., Sharipova L.L. The stability of the equilibrium of two-phase elastic solids. J. Appl. Math. Mech., 2007, vol. 71, no. 1, pp. 61-84. https://doi.org/10.1016/j.jappmathmech.2007.03.007
- Grabovsky Y., Truskinovsky L. Roughening instability of broken extremals. Arch. Rational Mech. Anal., 2011, vol. 200, pp. 183-202. https://doi.org/10.1007/s00205-010-0377-8
- 56. Prigogine I., Defay R. Chemical Thermodynamics. London: Longmans, Green, 1954. 543 p.

Поступила в редакцию 28.11.2022; после доработки 29.11.2021; принята к опубликованию 30.11.2022

Сведения об авторах

Кабанова Полина Константиновна, асп., стаж.-иссл., Институт проблем машиноведения РАН (ИПМаш РАН), 199178, г. Санкт-Петербург, Большой проспект В.О., д. 61: e-mail: kabanovapk@mail.ru

Фрейдин Александр Борисович, дфмн, гнс, зав. лаб., ИПМаш РАН: e-mail: alexander.freidin@gmail.com