Зміст

3 Побудова математичних моделей базових фізичних процесів

3.0 Оператор ∇ (лікбез математичної теорії поля)

Визначення 3.0.0.1 (оператора ∇ в $\mathbb{R}^2$)**.** Для двовимірного евклідового простору $\mathbb{R}^2$ у прямокутній декартовій системі координат *оператор набла* визначається наступним чином:

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{j} \tag{3.0.1}$$

де $\vec{i}$, $\vec{j}$ — одиничні вектори по вісям x і y відповідно.

Визначення 3.0.0.2 (оператора ∇ в $\mathbb{R}^3$)**.**

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k}, \tag{3.0.2}$$

де $\vec{i}$, $\vec{j}$, $\vec{k}$ — одиничні вектори по вісям x, y і z відповідно.

3.0.1 Властивості оператора ∇

Визначення 3.0.1.1 (градієнту через оператор ∇)**.** Якщо "скалярно помножити" вектор ∇ на скалярну функцію $f = f(x, y, z)$, то вийде вектор:

$$\nabla f = \frac{\partial f}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial f}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial f}{\partial z}\vec{k} = \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}\right) = \operatorname{grad} f, \tag{3.0.3}$$

який є нічим іншим як *градієнтом* $\operatorname{grad} f$ функції f.

Визначення 3.0.1.2 (дивергенції через оператор ∇)**.** Якщо "скалярно помножити" вектор ∇ на вектор-функцію

$$\vec{F} = (f, g, h) = (f(x, y, z), g(x, y, z), h(x, y, z)), \tag{3.0.4}$$

то вийде скаляр:

$$\nabla \cdot \vec{F} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial g}{\partial y} + \frac{\partial h}{\partial z} = \mathbf{d}iv\vec{F}, \tag{3.0.5}$$

який є нічим іншим як *дивергенцією* $\operatorname{div} \vec{F}$ функції $\vec{F}$.

Визначення 3.0.1.3 (ротора через оператор ∇)**.** Якщо "векторно помножити" вектор ∇ на вектор-функцію

$$\vec{F} = (f, g, h) = (f(x, y, z), g(x, y, z), h(x, y, z)), \tag{3.0.6}$$

то вийде вектор:

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{F} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ f & g & h \end{vmatrix} = \\ = \left(\frac{\partial h}{\partial y} - \frac{\partial g}{\partial z}\right)\vec{i} + \left(\frac{\partial f}{\partial z} - \frac{\partial h}{\partial x}\right)\vec{j} + \left(\frac{\partial g}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial y}\right)\vec{k} = \operatorname{rot} \vec{F}. \end{aligned} \tag{3.0.7}$$

який є нічим іншим як *ротором* $\operatorname{rot} \vec{F}$ функції $\vec{F}$.

Визначення 3.0.1.4 (оператора Лапласа через оператор ∇)**.** Склаярний добуток $\nabla \cdot \nabla = \nabla^2$ є ніщо янше як оператор Лапласа, який також позначається Δ.

У декартових координатах оператор Лапласа має вигляд

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \tag{3.0.8}$$

3.0.2 Оператори другого порядку

Оскільки існують різні способи множення веткорів і скалярів, з допомогою оператор набла можна записати різі види "диференціювання". так, комбінування склаярних і векторних добутків дає 7 різних варіантів "похідних" другого порядку:

$$\operatorname{div}(\operatorname{grad} f) = \nabla \cdot (\nabla f) \tag{3.0.9}$$

$$\operatorname{rot}(\operatorname{grad} f) = \nabla \times (\nabla f) \tag{3.0.10}$$

$$\Delta f = \nabla^2 f) \tag{3.0.11}$$

$$\operatorname{grad}(\operatorname{div} \vec{F}) = \nabla(\nabla \cdot \vec{F}) \tag{3.0.12}$$

$$\operatorname{div}(\operatorname{rot} \vec{F}) = \nabla \cdot (\nabla \times \vec{F}) \tag{3.0.13}$$

$$\operatorname{rot}(\operatorname{rot} \vec{F}) = \nabla \times (\nabla \times \vec{F}) \tag{3.0.14}$$

$$\Delta \vec{F} = \nabla^2 \vec{F} \tag{3.0.15}$$

Для достатньо гладких полів (двічі неперервно диференційовних) ці оператори не незалежні. Два з них тотожньо дорівнюють нулю:

$$\operatorname{rot}(\operatorname{grad} f) = \nabla \times (\nabla f) = (\nabla \times \nabla) f = 0 \tag{3.0.16}$$

$$\operatorname{div}(\operatorname{rot} \vec{F}) = \nabla \cdot (\nabla \times \vec{F}) = (\nabla \times \nabla) \cdot \vec{F} = 0. \tag{3.0.17}$$

Два завжди рівні:

$$\operatorname{div}(\operatorname{grad} f) = \nabla \cdot (\nabla f) = (\nabla \cdot \nabla) f = \nabla^2 f = \Delta f. \tag{3.0.18}$$

А решта три пов'язані співвідношенням:

$$\nabla \times (\nabla \vec{F}) = \nabla(\nabla \cdot \vec{F}) - \nabla^2 \vec{F}. \tag{3.0.19}$$

І ще один може бути виражене через тензорний добуток векторів:

$$\nabla(\nabla \cdot \vec{F}) = \nabla \cdot (\nabla \otimes \vec{F}) \tag{3.0.20}$$

3.0.3 Приклади

Приклад 3.0.3.1

Нехай $z = z(x, y) = xy$, тоді

$$\nabla z = \frac{\partial z}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial z}{\partial y}\vec{j} = y\vec{i} + x\vec{j}. \tag{3.0.21}$$

Приклад 3.0.3.2
Нехай $z = z(x, y) = 30yx^3$, тоді

$$\nabla z = \frac{\partial z}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial z}{\partial y}\vec{j} = 90yx^2\vec{i} + 30x^3\vec{j}. \tag{3.0.22}$$

3.1 Математичні моделі розповсюдження тепла та дифузії речовини

Для запису математичної моделі введемо величини:

- $x = (x_1, x_2, x_3) \in G \subset \mathbb{R}^3$ об'єм тіла, t — час;
- $u(x, t)$ — температура в точці x у момент часу t;
- $c(x)$ — теплоємність (кількість тепла, яка необхідна, для підняти температуру одиниці маси тіла на один градус);
- $k(x)$ — теплопровідність речовини (здатність проводити тепло);
- $\rho(x)$ — щільність речовини;
- $f(x, t)$ — інтенсивність джерел теплової енергії в точці x в момент часу t.

3.1.1 Закон збереження теплової енергії

Складемо баланс теплової енергії для довільного об'єму тіла G за довільний інтервал часу $t_1 < t < t_2$. Для цього обчислимо кількість тепла, яка міститься в нескінченно малому об'ємі $\mathrm{d}G$:

$$\rho(x) \cdot \mathrm{d}G \cdot c(x) \cdot u(x, t) \tag{3.1.1}$$

та в об'ємі G в момент часу t:

$$Q_1(t) = \iiint\limits_G c(x)\rho(x)u(x, t)\,\mathrm{d}G. \tag{3.1.2}$$

Припустимо, що з часом температура змінилася від значення $u(x, t_1)$ до значення $u(x, t_2)$. Обчислимо кількість тепла, витрачену на зміну температури:

$$\Delta Q_1(t_1, t_2) = Q_1(t_2) - Q_1(t_1) = \iiint\limits_G c(x)\rho(x)(u(x, t_2) - u(x, t_1))\,\mathrm{d}G. \tag{3.1.3}$$

Температура в об'ємі G може змінюватись за рахунок таких факторів:

1. нерівномірності нагрівання тіла, викликає потік тепла через поверхню S, яка обмежує уявне тіло об'єму G;

2. зміна кількості тепла за рахунок внутрішніх теплових джерел.

Нехай $\vec{n}$ — зовнішня нормаль до поверхні S. Обчислимо кількість тепла, яка поступає всередину об'єму G через елементарну поверхню $\mathrm{d}S$ в одиницю часу:

$$\mathrm{d}Q(x,t) = k(x) \cdot \frac{\partial u(x,t)}{\partial \vec{n}} \cdot \mathrm{d}S \tag{3.1.4}$$

Ця формула є математичним виразом фізичного закону Фур'є.

Кількість тепла, яка проходить через всю поверхню S за час від t_1 до t_2 обчислюється за формулою

$$Q_2(t_1,t_2) = \int\limits_{t_1}^{t_2} \iint\limits_{S} \left(k(x) \cdot \frac{\partial u(x,t)}{\partial \vec{n}} \right) \mathrm{d}S\, \mathrm{d}t. \tag{3.1.5}$$

Кількість тепла за рахунок теплових джерел в об'ємі G можна обчислити у вигляді:

$$Q_3(t_1,t_2) = \int\limits_{t_1}^{t_2} \iiint\limits_{G} f(x,t)\, \mathrm{d}G\, \mathrm{d}t. \tag{3.1.6}$$

Таким чином можна записати

Закон (збереження теплової енергії)
Виконується співвідношення:

$$\Delta Q_1(t_1,t_2) = Q_2(t_1,t_2) + Q_3(t_1,t_2), \tag{3.1.7}$$

або після підстановки усіх величин маємо

Закон (збереження теплової енергії в інтегральному вигляді)
Виконується співвідношення:

$$\iiint\limits_{G} c(x)\rho(x)(u(x,t_2) - u(x,t_1))\,\mathrm{d}G =$$
$$= \int\limits_{t_1}^{t_2} \iint\limits_{S} \left(k(x)\cdot\frac{\partial u(x,t)}{\partial \vec{n}}\right) \mathrm{d}S\,\mathrm{d}t + \int\limits_{t_1}^{t_2} \iiint\limits_{G} f(x,t)\,\mathrm{d}G\,\mathrm{d}t. \quad (3.1.8)$$

Для перетворення першого інтегралу правої частини останньої рівності застосуємо формулу Остроградського Гауса,

$$\iint\limits_{S} \langle A, \vec{n}\rangle\,\mathrm{d}S = \iiint\limits_{G} \left(\nabla\cdot\vec{A}\right)\mathrm{d}G, \quad (3.1.9)$$

де $\vec{A}$ — векторне поле,

$$\nabla\cdot A = \frac{\partial A_1}{\partial x_1} + \frac{\partial A_2}{\partial x_2} + \frac{\partial A_3}{\partial x_3}. \quad (3.1.10)$$

В результаті отримаємо:

$$\int\limits_{t_1}^{t_2} \iiint\limits_{G} \left(c(x)\rho(x)\frac{\partial u(x,t)}{\partial t}\right)\mathrm{d}G\,\mathrm{d}t =$$
$$= \int\limits_{t_1}^{t_2} \iiint\limits_{G} (\nabla\cdot(k(x)\nabla u))\,\mathrm{d}G\,\mathrm{d}t + \int\limits_{t_1}^{t_2} \iiint\limits_{G} f(x,t)\,\mathrm{d}G\,\mathrm{d}t. \quad (3.1.11)$$

Враховуючи, що остання рівність отримана для довільного об'єму G та довільних моментів часу, можна зробити висновок, що вона має місце тоді і лише тоді, коли має місце рівність підінтегральних виразів:

$$c(x)\rho(x)\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \nabla\cdot(k(x)\nabla u) + f(x,t), \quad (3.1.12)$$

де $x \in G$, $t > 0$.

Це рівняння повинно виконуватись для кожної точки x реального фізичного об'єму тіла (збережемо для нього позначення G, а для його поверхні позначення S), та для кожного моменту часу t.

Для виділення єдиного розв'язку цього рівняння окрім самого диференціального рівняння необхідно задавати додаткові умови на границі просторово-часової області. Будемо використовувати фізичні міркування для задавання таких умов.

1. Якщо на границі області відома температура тіла, тоді на границі тіла задають умову Діріхле.

   > **Визначення 3.1.1.1** (умови Діріхле)**.** Крайовою умовою першого роду, або *умовою Діріхле* називають співвідношення
   >
   > $$u(x,t)|_{x\in S} = v(x,t). \tag{3.1.13}$$

2. Якщо на границі області відомий тепловий потік в одиницю часу, який поступає всередину тіла через одиничну площу, тоді на границі задають граничну умову Неймана.

   > **Визначення 3.1.1.2** (умови Неймана)**.** Крайовою умовою другого роду, або *умовою Неймана* називають співвідношення
   >
   > $$k(x)\frac{\partial u(x,t)}{\partial \vec{n}}\bigg|_{x\in S} = q(x,t). \tag{3.1.14}$$

3. Якщо на границі тіла відбувається конвективний теплообмін з оточуючим середовищем відомої температури згідно до закону Ньютона, тоді на границі задають крайову умову Ньютона

   > **Визначення 3.1.1.3** (умови Ньютона)**.** Крайовою умовою третього роду, або *умовою Ньютона* називають співвідношення
   >
   > $$k(x)\frac{\partial u(x,t)}{\partial \vec{n}}\bigg|_{x\in S} = \alpha(x,t)(v(x,t)-u(x,t))|_{x\in S}\,, \tag{3.1.15}$$
   >
   > де $\alpha(x,t) > 0$ — коефіцієнт теплообміну, $v(x,t)$ — температура оточуючого середовища.

4. В початковий момент часу задають температура усіх внутрішніх точок тіла:

   $$u(x,t)|_{t=0} = u_0(x). \tag{3.1.16}$$

Визначення 3.1.1.4 (початкової умови)**.** *Початковою умовою* називається співвідношення

$$u(x,t)|_{t=0} = u_0(x), \tag{3.1.17}$$

при цьому $u_0(x)$ називається *початковою температурою.*

3.1.2 Частинні випадки рівняння теплопровідності

Зауваження 3.1.2.1 — У випадку, коли коефіцієнт теплопровідності та інтенсивність теплових джерел залежить не лише від точки простору і часу, а і від самої температури, тобто $k = k(u,x,t)$, $f = f(u,x,t)$, лінійне диференціальне рівняння (3.1.12) стає квазілінійним, тобто лінійним відносно старших похідних.

Окрім загального вигляду рівняння теплопровідності, у практичних випадках часто використовуються частинні випадки рівняння.

Зокрема, можна розглядати розповсюдження тепла в одновимірних та двовимірних тілах:

- У пластині:

$$\nabla \cdot (k(x)\nabla u(x,t)) = \frac{\partial}{\partial x_1}\left(k(x)\frac{\partial u(x,t)}{\partial x_1}\right) + \frac{\partial}{\partial x_2}\left(k(x)\frac{\partial u(x,t)}{\partial x_2}\right). \tag{3.1.18}$$

- У стрижні:

$$\nabla \cdot (k(x)\nabla u(x,t)) = \frac{\partial}{\partial x}\left(k(x)\frac{\partial u(x,t)}{\partial x}\right). \tag{3.1.19}$$

Для однорідних тіл усі коефіцієнти рівняння можна вважати константами, зокрема $c = c_0$, $\rho = \rho_0$, $k = k_0$. В результаті вищезгадане диференціальне рівняння буде мати вигляд

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = a^2 \Delta u + \frac{1}{c_0\rho_0} \cdot f(x,t), \tag{3.1.20}$$

де

$$a^2 = \frac{k_0}{c_0\rho_0} > 0, \tag{3.1.21}$$

і було введено

Визначення 3.1.2.1 (оператор Лапласа)**.** *Оператором Лапласа* називається диференціальний оператор Δ що діє на функцію $u(x,t)$ по векторній змінній x наступним чином:

$$\Delta u(x,t) = \nabla \cdot (\nabla u(x,t)) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x_i^2}. \tag{3.1.22}$$

Зауваження 3.1.2.2 — Зокрема одновимірне рівняння теплопровідності має вигляд:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + \frac{1}{c_0 \rho_0} f(x,t). \tag{3.1.23}$$

3.1.3 Рівняння дифузії речовини

Процес дифузії речовини це процес вирівнювання концентрації речовини у розчинах, розплавах або в сумішах. Фізика вирівнювання температури в тілах та концентрації у розчинах чи розплавах має багато схожих рис і з цього приводу навіть процес розповсюдження тепла називають дифузією тепла.

Для отримання моделі дифузії речовини використаємо наступну таблицю аналогії.

Дифузія	Теплопровідність	Пояснення
$u(x,t)$	$u(x,t)$	Концентрація речовини в розчині, або у розплаві
$c(x)$	$c(x)\rho(x)$	Коефіцієнт пористості, відображає відношення об'єму пор до загального об'єму тіла і вказує на кількість речовини необхідну для зміни концентрації на одну одиницю в одиниці об'єму.

Дифузія	Теплопровідність	Пояснення
$D\dfrac{\partial u}{\partial \vec{n}}\,\mathrm{d}S$	$k\dfrac{\partial u}{\partial \vec{n}}\,\mathrm{d}S$	Закон Нерста, описує кількість речовини, яка поступає всередину тіла через його поверхню в одиницю часу за рахунок нерівномірності концентрації.
$f(x,t)$	$f(x,t)$	Інтенсивність джерела речовини в середині об'єму.
$D\dfrac{\partial u}{\partial \vec{n}} = \alpha\,(v-u)\|_S$	$k\dfrac{\partial u}{\partial \vec{n}} = \alpha\,(v-u)\|_S$	Кількість речовини, яка поступає через поверхню S тіла за законом, аналогічним закону Ньютона, v — відома концентрація речовини в тому чи іншому середовищі; α — коефіцієнт проникності поверхні.

Побудови математичної моделі процесу дифузії відбувається за аналогією згідно до попередньої таблиці.

Кількість речовини, яка витрачена для зміни концентрації від $u(x,t_1) \to u(x,t_2)$, $t_1 < t_2$ має вигляд:

$$\Delta Q_1(t_1,t_2) = Q_1(t_2) - Q_1(t_1) = \iiint\limits_G c(x)(u(x,t_2) - u(x,t_1))\,\mathrm{d}G. \quad (3.1.24)$$

Кількість речовини, яка проходить через всю поверхню S за час від $t_1 \to t_2$:

$$Q_2(t_1,t_2) = \int\limits_{t_1}^{t_2} \iint\limits_S \left(D(x,t)\frac{\partial u}{\partial \vec{n}}\right)\mathrm{d}S\,\mathrm{d}t. \quad (3.1.25)$$

Кількість речовини, яка поступає за рахунок джерел речовини в об'ємі G за час від t_1 до t_2:

$$Q_3(t_1,t_2) = \int\limits_{t_1}^{t_2} \iiint\limits_G f(x,t)\,\mathrm{d}G\,\mathrm{d}t. \quad (3.1.26)$$

Отже, отримали

Закон (збереження маси)
Виконується співвідношення:

$$\Delta Q_1(t_1, t_2) = Q_2(t_1, t_2) + Q_3(t_1, t_2). \tag{3.1.27}$$

а також

Закон (збереження маси в інтегральному вигляді)
Виконується співвідношення:

$$\iiint\limits_G c(x)(u(x,t_2) - u(x,t_1))\,\mathrm{d}G =$$

$$= \int\limits_{t_1}^{t_2} \iint\limits_S \left(D(x,t)\frac{\partial u(x,t)}{\partial \vec{n}} \right) \mathrm{d}S\,\mathrm{d}t + \int\limits_{t_1}^{t_2} \iiint\limits_G f(x,t)\,\mathrm{d}G\,\mathrm{d}t. \tag{3.1.28}$$

Після застосування формули Остроградського-Гауса та прирівнювання підінтегральних виразів отримаємо рівняння дифузії речовини у вигляді:

$$c(x)\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (D(x,t)\nabla u) + f(x,t), \tag{3.1.29}$$

де $x \in G$, $t > 0$.

Додаткові умови на границі області задають аналогічно умовам для рівняння теплопровідності:

1. Якщо відома концентрація речовини на поверхні:
$$u(x,t)|_{x \in S} = v(x,t); \tag{3.1.30}$$
2. Якщо на границі відомий потік речовини:
$$D \cdot \left.\frac{\partial u(x,t)}{\partial \vec{n}}\right|_{x \in S} = g(x,t); \tag{3.1.31}$$
3. Якщо на границі відбувається обмін речовиною з оточуючим середовищем через напівпроникливу мембрану за законом аналогічним закону Ньютона:
$$D(x,t)\left.\frac{\partial u(x,t)}{\partial \vec{n}}\right|_{x \in S} = \alpha(x,t)\,\left(v(x,t) - u(x,t)\right)|_{x \in S}\,; \tag{3.1.32}$$

4. Якщо в початковий момент часу відома концентрація речовини:

$$u(x,0) = u_0(x). \tag{3.1.33}$$

Зауваження 3.1.3.1 — У випадку, коли коефіцієнти рівняння та граничних умов не залежать від часу t, розв'язок рівняння не залежить від часу в результаті отримаємо стаціонарне рівняння теплопровідності та дифузії:

$$\nabla \cdot (k(x)\nabla u(x)) = -f(x), \tag{3.1.34}$$

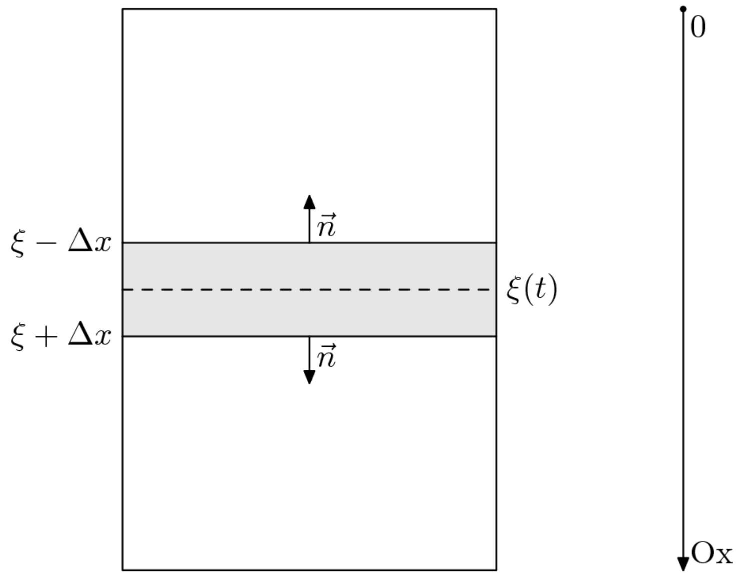
$$\nabla \cdot (D(x)\nabla u(x)) = -f(x). \tag{3.1.35}$$

3.1.4 Задача Стефана (задача про остигання та затвердіння розплавленого металу)

Вертикальний циліндричний посуд заповнений розплавленим металом, який знаходиться при заданій температурі $U_0 > U_{melt}$ - температура плавління металу. Починаючи з моменту часу t_0 вільна поверхня розплавленого металу підтримується при постійній температурі $U_1 < U_{melt}$. Поставимо задачу про остудження та затвердіння металу, якщо дно і бокова поверхня посуду теплоізольовані. Термічними деформаціями об'єму будемо нехтувати тобто процес розповсюдження тепла відбувається лише вздовж вісі циліндру. Введемо позначення:

- ρ_s, ρ_l — щільність твердої (eng. *solid*) та рідкої (eng. *liquid*) фази металу;
- c_s, c_l — теплоємність твердої та рідкої фази металу;
- k_s, k_l — теплопровідність твердої та рідкої фази металу;
- $\xi(t)$ — положення границі розділу твердої та рідкої фаз;
- L — висота циліндру, S — площа основи циліндру;
- λ — питома теплота плавлення;
- $u(x,t)$ — температура в момент часу t в точці x.

Деякі з введених позначень краще видно на наступній ілюстрації:



Отримаємо рівняння теплового балансу для нескінченно малого об'єму розплавленого металу, який знаходиться між перерізами x та $x + \Delta x$ за проміжок часу від t до $t + \Delta t$.

Обчислимо кількість тепла, яка необхідна для зміни температури у виділеному елементарному об'ємі від значення $u(x, t)$ до значення $u(x, t+\Delta t)$. Кількість тепла, що міститься в виділеному об'ємі в момент часу t можна обчислити за формулою

$$\mathrm{d}Q(t) = c_l \cdot \rho_l \cdot S \cdot \Delta x \cdot u(x, t). \tag{3.1.36}$$

Аналогічно для моменту часу $t + \Delta t$ кількість тепла дорівнює

$$\mathrm{d}Q(t + \Delta t) = c_l \cdot \rho_l \cdot S \cdot \Delta x \cdot u(x, t + \Delta t). \tag{3.1.37}$$

При цьому нехтуємо, зміною температури по просторовій змінній у середині елементарного об'єму. Тоді кількість тепла, необхідна для зміни температури всередині об'єму дорівнює:

$$\Delta Q(t, t + \Delta t) = c_l \cdot \rho_l \cdot S \cdot \Delta x \cdot (u(x, t + \Delta t) - u(x, t)). \tag{3.1.38}$$

Ця зміна може відбуватися за рахунок теплових потоків, через перерізи x та $x + \Delta x$. Підрахуємо кількість тепла, яка поступає всередину тіла через переріз $x + \Delta x$ за час Δt:

$$\mathrm{d}Q(x + \Delta x) = k_l \frac{\partial u(x + \Delta x, t)}{\partial \vec{n}} S \Delta t = k_l \frac{\partial u(x + \Delta x, t)}{\partial x} S \Delta t \tag{3.1.39}$$

Напрям нормалі $\vec{n}$ в цьому перерізі співпадає з напрямом вісі Ox.

Кількість тепла, яка поступає всередину тіла через переріз x за час Δt можна записати у вигляді:

$$\mathrm{d}Q(x) = k_l \frac{\partial u(x,t)}{\partial \vec{n}} S\Delta t = -k_l \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} S\Delta t \tag{3.1.40}$$

Таким чином можна скласти рівняння теплового балансу:

$$\mathrm{d}Q(t, t+\Delta t) = \mathrm{d}Q(x+\Delta x) + \mathrm{d}Q(x). \tag{3.1.41}$$

Або після підстановки відповідних значень поділених на $\Delta x \cdot \Delta t \cdot S$ отримаємо:

$$\frac{c_l \rho_l (u(x,t+\Delta t) - u(x,t))}{\Delta t} = k_l \left(\frac{\partial u(x+\Delta x,t)}{\partial x} - \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \right) \frac{1}{\Delta x}. \tag{3.1.42}$$

Після граничного переходу коли Δx та Δt прямують до нуля, отримаємо диференціальне рівняння:

$$c_l \rho_l \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = k_l \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, \tag{3.1.43}$$

де $\xi(t) < x < L$, $t > t_0$.

Аналогічні міркування дозволяють отримати рівняння для твердої фази:

$$c_s \rho_s \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = k_s \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, \tag{3.1.44}$$

де $0 < x < \xi(t)$, $t > t_0$.

Визначення 3.1.4.1 (співвідношення на границі розділу фаз)**.** Температура при переході через границю розділу фаз повинна змінюватись неперервно і співпадати з температурою плавлення металу, тобто повинно виконуватись настуну співвідношення:

$$u(\xi(t)-0,t) = u(\xi(t)+0,t) = U_{melt}, \tag{3.1.45}$$

яке називається *співвідношенням на границі розділу фаз.*

Отримаємо рівняння теплового балансу для елементарного об'єму обмеженого перерізами $\xi(t) - \Delta x$ та $\xi(t) + \Delta x$.

За час Δt затвердіє об'єм металу рівний

$$(\xi(t+\Delta t) - \xi(t)) \cdot S. \tag{3.1.46}$$

При цьому буде виділено кількість тепла рівна

$$\mathrm{d}Q_{melt} = (\xi(t + \Delta t) - \xi(t)) \cdot S \cdot \lambda \cdot \rho_s. \tag{3.1.47}$$

Кількість тепла, яка надійде всередину об'єму за рахунок теплових потоків через відповідні перерізи за час Δt може бути записана у вигляді:

$$\Delta t \cdot S \cdot \left(k_l \cdot \frac{\partial u(\xi(t) + \Delta x, t)}{\partial x} - k_s \cdot \frac{\partial u(\xi(t) - \Delta x, t)}{\partial x} \right). \tag{3.1.48}$$

Оскільки фазовий перехід відбувається при постійній температурі, то в околі границі розділу фаз $\xi(t)$ зміною температури по змінній t можна нехтувати, в зв'язку з чим можна не враховувати кількість тепла, яка витрачається на зміну температури у виділеному елементарному об'ємі.

Рівняння теплового балансу для елементарного об'єму обмеженого перерізами $\xi(t) - \Delta x$ та $\xi(t) + \Delta x$ можна записати у вигляді:

$$\begin{aligned}(\xi(t + \Delta t) - \xi(t))S\lambda\rho_s = \\ = \Delta t S \left(k_l \frac{\partial u(\xi(t) + \Delta x, t)}{\partial x} - k_s \frac{\partial u(\xi(t) - \Delta x, t)}{\partial x} \right)\end{aligned} \tag{3.1.49}$$

Поділивши обидві частини на Δt, скоротивши на S і спрямувавши Δx, Δt до нуля отримаємо співвідношення:

$$\lambda\rho_s \frac{\partial \xi(t)}{\partial t} = k_l \frac{\partial u(\xi(t) + 0, t)}{\partial x} - k_s \frac{\partial u(\xi(t) - 0, t)}{\partial x}. \tag{3.1.50}$$

Визначення 3.1.4.2 (внутрішніх граничних умов (умов спряження))**.** Останню умову

$$\lambda\rho_s \frac{\partial \xi(t)}{\partial t} = k_l \frac{\partial u(\xi(t) + 0, t)}{\partial x} - k_s \frac{\partial u(\xi(t) - 0, t)}{\partial x}. \tag{3.1.51}$$

разом із співвідношенням (3.1.45) на границі розділу фаз називають *внутрішніми граничними умовами*, або *умовами спряження*.

Запишемо початкові умови та умови на верхній та нижній основі циліндру:

- В початковий момент часу задана температура розплавленого металу:

$$u(x, t_0) = U_0, \quad 0 < x < L. \tag{3.1.52}$$

- На верхній основі задана температура:

$$u(0, t) = U_1, \quad t > t_0. \tag{3.1.53}$$

- Нижня основа теплоізольована, тобто тепловий потік, який поступає всередину тіла дорівнює нулю:

$$\frac{\partial u(L, t)}{\partial x} = 0, \quad t > t_0. \tag{3.1.54}$$

- В початковий момент часу положення границі фазового переходу співпадає з верхньою основою циліндру:

$$\xi(t_0) = 0. \tag{3.1.55}$$

Таким чином, до моменту часу, коли весь метал затвердіє постановка задачі Стефана включає в себе диференційні рівняння (3.1.43), (3.1.44), співвідношення на границі розділу фаз (3.1.45), умови спряження (3.1.51), початкові умови (3.1.52), (3.1.55) та граничні умови (3.1.53), (3.1.54).

Зауваження 3.1.4.1 — Після повного затвердіння металу, тобто коли $\xi(t_1) = L$, процес буде описуватись звичайним рівнянням теплообміну для $t > t_1$ з граничними умовами

$$u(0, t) = U_1, \tag{3.1.56}$$

$$\frac{\partial u(L, t)}{\partial x} = 0, \tag{3.1.57}$$

та початковою температурою $u(x, t_1)$.