

**Numerické riešenie jednorozmerného Stefanovho problému
na konečnej oblasti**

BAKALÁRSKA PRÁCA

Lukáš Papranec

**UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY
KATEDRA APLIKOVANEJ MATEMATIKY A ŠTATISTIKY**

9.1.9 Aplikovaná matematika

Vedúci bakalárskej práce:
Mgr. Juraj Kyselica

Kód práce:
437794D4-21F9-430A-A822-3573FC156DA0

BRATISLAVA 2011



Univerzita Komenského v Bratislave
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

ZADANIE ZÁVEREČNEJ PRÁCE

Meno a priezvisko študenta: Lukáš Papranec
Študijný program: ekonomická a finančná matematika (Jednoodborové štúdium, bakalársky I. st., denná forma)
Študijný odbor: 9.1.9. aplikovaná matematika
Typ záverečnej práce: bakalárska
Jazyk záverečnej práce: slovenský

Názov : Numerické riešenie jednorozmerného Stefanovho problému na konečnej oblasti

Cieľ : Cieľom práce je numericky simulovať vývoj fázového rozhrania pri tuhnutí kvapaliny (tzv. Stefanov problém).

Literatúra : [1] Worster, M. G. 2000: Solidification of Fluids. In Perspectives in Fluid Dynamics (ed. G. K. Batchelor & H. K. Moffat & M. G. Worster), str. 393-446, Cambridge, University Press. [2] Crank, J. 1975: The Mathematics of Diffusion. Clarendon Press, Oxford.

Anotácia : Stefanov problém predstavuje matematický model tuhnutia kvapaliny neobsahujúcej rozpustené prímiesy (napr. tvorba ľadu tuhnutím čistej vody). V práci by sa uvažovala nasledovná fyzikálna situácia: uvažujme jednorozmernú oblasť $(0,1)$ vyplnenú kvapalinou, ktorej teplotu na hranici $x=0$ v počiatočnom časovom okamihu znížime pod teplotu tuhnutia. Následkom toho dochádza k tuhnutiu kvapaliny. V uvažovanej oblasti bude v ďalších časových okamihoch prítomná tuhá fáza oddelená od kvapalnej fázy fázovým rozhraním, ktorého poloha sa v čase mení. Samotný matematický model charakterizuje rozloženie teploty v oboch fázach a časový vývoj rozhrania. Na popis rozloženia teploty sa využíva parciálna diferenciálna rovnica vedenia tepla. V porovnaní so Stefanovým problémom na polonekonečnej oblasti $(0, \infty)$, v prípade konečnej oblasti nie sú známe explicitné riešenia, t.j. funkcie, ktoré by popisovali vývoj teploty a fázového rozhrania. Je však možné tieto riešenia nájsť približne, t.j. numerickými metódami. Ťažiskom práce je nastudovanie modelu, jeho transformácia na problém s pevným rozhraním a následné numerické riešenie metódou konečných diferencií (nahradenie parciálnych derivácií diferenciami).

Vedúci : Mgr. Juraj Kyselica

Dátum zadania: 27.10.2010

Dátum schválenia: 08.11.2010

.....
doc. RNDr. Margaréta Halická, CSc.
garant študijného programu

.....
L. Papranec

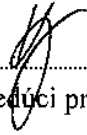
študent

.....
vedúci práce



Univerzita Komenského v Bratislave
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

Dátum potvrdenia finálnej verzie práce, súhlas s jej odovzdaním (vrátane spôsobu sprístupnenia)


.....
vedúci práce

Dátum kompilácie: 30. máj 2011

Typeset in L^AT_EX

Abstrakt

Táto práca sa zaoberá matematickým modelovaním procesu fázovej premeny kvapaliny na konečnej oblasti. Základ modelu tvoria rovnice vedenia tepla, ktoré popisujú rozloženie teplôt v jednotlivých fázach. Komplikáciou, ktorá vzniká pri riešení tejto úlohy, je voľná hranica – fázové rozhranie. Z geometrického hľadiska ide teda o nelineárnu úlohu, aj keď nelinearita priamo v rovniciach obsiahnutá nie je. Úloha je riešená numericky, metódou konečných diferencií, pričom vhodnou transformáciou je úloha s voľnou hranicou prevedená na úlohu s fixnou hranicou.

Kľúčové slová: parciálne diferenciálne rovnice, rovnica vedenia tepla, úloha s voľnou hranicou, numerické metódy

Čestné prehlásenie

Prehlasujem, že som túto bakalársku prácu vypracoval samostatne pod odborným vedením Mgr. Juraja Kyselicu s použitím uvedenej odbornej literatúry.

Bratislava, 30. máj 2011

.....
Lukáš Papranec

Podakovanie

Touto cestou vyjadrujem úprimné podakovanie môjmu vedúcemu Mgr. Jurajovi Kyselicovi za nekonečnú ochotu odpovedať na moje otázky, za čas a úsilie, ktoré vynaložil pri vedení tejto práce.

Osobitne ďakujem svojim rodičom - Vierke a Igorovi, za možnosť štúdia na univerzite a za podporu, bez ktorej by som štúdium nezvládol.

Ďakujem.

Obsah

Úvod	1
Zoznam použitých symbolov	3
1 Základné pojmy z termodynamiky	4
1.1 Matematický model difúzie	4
1.2 Vedenie tepla	5
1.2.1 Fourierov zákon vedenia tepla	6
1.2.2 Rovnica vedenia tepla	7
1.3 Dynamika fázovej premeny	9
1.3.1 Fázový diagram jednozložkového systému	10
1.4 Stefanova podmienka	11
2 Stefanov problém	14
2.1 Predpoklady a zjednodušenia modelu	14
2.2 Formulácia problému	15
2.3 Transformácia na bezrozmerný tvar	17
2.4 Problém voľnej hranice	19
3 Numerické riešenie	22
3.1 Metóda konečných diferencií	22
3.2 Diskretizácia úlohy	23
3.2.1 Definovanie časopriestorovej siete	23
3.2.2 Diskretizácia rovníc a odvodenie numerickej schémy	24
3.3 Programová realizácia	28
3.3.1 Výsledky numerického experimentu	29
3.3.2 Analýza konvergenzie numerického riešenia	30
Záver	34
Apendix A	36
A.1 Gauss-Ostrogradského veta	36
A.2 Kubický interpolačný splajn	36
Apendix B	38
Zdrojový kód Matlab®	38

Úvod

Dôležitým nástrojom v matematickom modelovaní sú parciálne diferenciálne rovnice. Jedným zo základných modelov, ktorý je prostredníctvom nich možné zapísať je známa úloha o vedení tepla

$$\begin{aligned}\rho C \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= \nabla \cdot (k \nabla T(\mathbf{x}, t)) + f(\mathbf{x}, t), \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, \tau) \\ T(\mathbf{x}, 0) &= T_0(\mathbf{x}) \quad \text{na } \Omega \\ T(\mathbf{x}, t) &= \phi(\mathbf{x}, t) \quad \text{na } \partial\Omega \times (0, \tau)\end{aligned}$$

ktorá po zvolení vhodných parametrov aproximuje reálny vývoj teplôt T nejakej látky v pevne zadanej oblasti Ω . Pohľad na úlohu o vedení tepla sa zmení, ak pripustíme skupenské zmeny, ktoré môžu vzniknúť v dôsledku zmien v teplote v uvažovanej oblasti Ω . Procesy vedenia tepla v nových fázach však už pôvodný model nepopisuje. Vtedy je potrebné do pôvodného modelu pridať ďalšie rovnice a predpoklady, ktoré zohľadnia fyzikálne vlastnosti rozličných skupenstiev.

Väčšina povrchu Zeme je tvorená vodou, obsiahnutou v oceánoch, moriach, riekach. Okrem toho sa v prírode vyskytuje aj vo forme ľadovcov, kryštálikov ľadu a pary, z ktorých sa vytvárajú oblaky. Zmenou vhodných fyzikálnych veličín možno tieto formy navzájom premieňať. Tieto premeny sa nazývajú aj fázové alebo skupenské premeny. Vzájomná interakcia týchto foriem ako aj ich vlastnosti, sa stali predmetom skúmania mnohých fyzikov. Jednými z nich boli aj G. Lamé a B. P. É. Clapeyron (19. stor.), ktorí sa zaoberali úlohami fázových premien. O niekoľko rokov neskôr, v priebehu 19. storočia, na to nadviazal slovenský fyzik Josef Stefan, ktorý rozriešil úlohu tuhnutia, keď skúmal rýchlosť rastu vrstvy ľadu na vodnej hladine.

Úlohy súvisiace s fázovými premenami sa taktiež označujú spoločným názvom – Stefanove problémy, pomenované podľa spomínaného fyzika, J. Stefana. Tieto sa objavujú v mnohých modeloch matematickej fyziky. Z pohľadu matematickej klasifikácie ide o úlohy s voľnou hranicou, ktoré sa vyznačujú tým, že hranice oblasti riešenia nie sú vopred známe a sú súčasťou riešenia. Táto vlastnosť je jednou z hlavných, ktoré charakterizujú Stefanove problémy. Ďalšou črtou, ktorá ich charakterizuje sú vedúce rovnice, najčastejšie parabolické, popisujúce vedenie tepla. Vzhľadom na rôzne fyzikálne vlastnosti fáz, v ktorých sa kvapalina môže nachádzať, sa uvažuje viac rovníc s príslušnými parametrami pre každú z fáz. Pre úlohu s dvoma fázami, ktorou sa zaoberá aj táto práca, sa uvažujú dve vedúce rovnice.

Všeobecne sú úlohy s voľnou hranicou analyticky riešiteľné len v niekoľkých prípadoch. Z geometrického hľadiska ide o nelineárne úlohy, pričom práve nelinearita spôsobuje komplikácie pri hľadaní analytického riešenia. Práve z tohto dôvodu sa stalo hlavnou oblasťou záujmu hľadanie aproximácie riešenia prostredníctvom numerických metód. Analytické riešenia možno nájsť pre niektoré prípady Stefanovho problému na polonekonečnej oblasti. V prípade konečnej oblasti nie sú známe explicitné vzorce, ktoré by popisovali vývoj polohy fázového rozhrania a rozloženie teplôt v jednotlivých fázach.

Primárnym cieľom tejto práce je sformulovať jednorozmerný Stefanov problém na konečnej oblasti a vzniknutú úlohu riešiť numerickými metódami. Prvá kapitola obsahuje teoretický základ, objasňuje princípy vedenia tepla a ich vplyv na fázové premeny v kvapalinách.

Ďalšie kapitoly sa zaoberajú Stefanovým problémom. Je tu sformulovaný základný model, s ktorým sa pracuje v ďalších častiach práce. Ten je prevedený dôležitou transformáciou do tvaru, ktorý je riešiteľný metódou konečných diferencií. Transformácia úlohy je potrebná práve kvôli prítomnosti voľnej hranice, ktorá spôsobuje značné komplikácie pri numerickom riešení. Numerické riešenie ako aj skúmanie vlastností riešenia vplyvom zmeny parametrov sú predmetom poslednej kapitoly.

Hlavnou inšpiráciou pri písaní tejto práce bola diplomová práca [Kys10] a článok [Hup89]. Niektoré časti sú podrobnejšie rozpracované a prispôbené téme. V teoretickej časti sa odvolávame hlavne na [Gup03], [Jij09] a [Bae06].

Zoznam použitých symbolov

Fyzikálne veličiny

T	-	teplota $[T] = \text{K}$
L	-	merné latentné teplo $[L] = \text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$
\mathbf{q}	-	intenzita tepelného toku $[\mathbf{q}] = \text{J} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{sec}^{-1}$
Q	-	tepelná energia, teplo $[Q] = \text{J}$
k	-	súčiniteľ tepelnej vodivosti $[k] = \text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
κ	-	súčiniteľ teplotnej vodivosti $[\kappa] = \text{m}^2 \cdot \text{sec}^{-1}$
C	-	merná tepelná kapacita $[C] = \text{J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{kg}^{-1}$
ρ	-	hustota $[\rho] = \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$

Diferenciálne operátory

$(\cdot)_t = \frac{\partial(\cdot)}{\partial t}$	-	časová derivácia
$(\cdot)_{xx} = \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial x^2}$	-	derivácia 2. rádu podľa priestorovej premennej x
$\nabla(\cdot)$	-	gradient $\left[\frac{\partial(\cdot)}{\partial x_1} \quad \dots \quad \frac{\partial(\cdot)}{\partial x_n} \right]^T$
$\nabla \cdot \nabla(\cdot)$	-	divergencia $\sum_{k=1}^n \frac{\partial(\cdot)_k}{\partial x_k}$

Ostatné symboly

$\Omega, \Omega_+, \Omega_-$	-	oblasť - otvorená súvislá množina
$C^k(M)$	-	množina spojitých diferencovateľných funkcií do rádu k na množine M
\mathcal{P}_k	-	množina polynómov k -teho stupňa
$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$	-	štandardný skalárny súčin $\sum_{k=1}^n x_k y_k$ pre $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$
$\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$	-	štandardná báza \mathbb{R}^3 jednotkových vektorov
$\delta_{i,j}$	-	Kroneckerovo delta $\delta_{i,j} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$

Skratky

PDR	-	parciálna diferenciálna rovnica
RVT	-	rovnica vedenia tepla

Kapitola 1

Základné pojmy z termodynamiky

V tejto kapitole budú sformulované a zhrnuté poznatky z termodynamiky a dynamiky fázovej premeny, nevyhnutné pre štúdium Stefanovho problému. Ide predovšetkým o model difúzie, zákon zachovania energie a rovnicu vedenia tepla. Jadro Stefanovho problému tvoria spomenuté rovnice vedenia tepla, ktoré sú vyjadrením zákona zachovania energie v termodynamickom systéme. Táto kapitola v žiadnom prípade neposkytuje prehľad fyzikálnej teórie, len obsahuje jej význačné aspekty, využívané v modeli. Pri písaní tejto časti sme vychádzali z [Sev08], [Bae06], [Cra75], [Jij09] a [Til04].

1.1 Matematický model difúzie

Difúzia je proces, pri ktorom sa častice látky presúvajú z istej oblasti do iných miest. Tento pohyb je spôsobený tendenciou látky presúvať sa z miest s vyššou koncentráciou do miest, kde je koncentrácia nižšia. Tento jav vzniká v dôsledku nepredvídateľného pohybu častíc látky v tekutine, tzv. *Brownovho pohybu*. Difúzny proces môžeme pozorovať napríklad v roptyľovaní sa látky vo vode. Toto rozptyľovanie môže pôsobiť zdanlivo usporiadane, no pri pohľade na jednotlivé molekuly látky možno pozorovať náhodný pohyb. Toto chaotické správanie je však v súlade s tým, že transport látky je závislý od jej koncentrácie.

V prírode možno difúziu pozorovať v rôznych formách, a preto je obsiahnutá v množstve matematických modelov. Objaviteľom fundamentálnych zákonov difúzie bol A. Fick (1829–1901) [Bae06]. Vychádzal pri tom z poznatkov o vedení tepla, ktoré podal niekoľko rokov pred ním J. B. Fourier. Podľa prvého Fickovho zákona možno vyjadriť difúzny tok látky v závislosti od jej koncentrácie vzťahom $\mathbf{J} = -D\nabla C$, kde \mathbf{J} je hustota toku a D je difúzny koeficient. Ide o analógiu k Fourierovmu zákonu vedenia tepla. Táto závislosť medzi hustotou toku a koncentráciou je dôležitým poznatkom pri odvodzovaní rovnice difúzie

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (D\nabla C).$$

V prípade konštantného difúzneho koeficientu sú všeobecné riešenia difúznej rovnice známe, pre rôzne okrajové a počiatkové podmienky. V opačnom prípade sa do rovníc vnáša nelinearita, ktorá môže spôsobiť problémy s hľadáním analytických riešení problému.

Konkrétnejším modelom je model vedenia tepla. Aj keď nejde o korektný príklad difúzie, šírenie tepla vedením je tiež spôsobené náhodným pohybom molekúl. Medzi týmito procesmi teda možno pozorovať istú analógiu. Veličina, ktorá tu vystupuje v pozícii transportovanej, je teplo. Látka, v ktorej sa teplo šíri môže byť rôznorodá. Jej vlastnosti sú charakterizované fyzikálnymi parametrami, získanými z experimentov. Matematickým modelom opisujúcim šírenie tepla v trojrozmernej oblasti je parciálna diferenciálna rovnica

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T), \quad (1.1)$$

kde $T = T(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^3$ a k, C, ρ sú fyzikálne parametre¹. V našej práci sa bude vyskytovať jednorozmerný prípad tejto rovnice. Neznámou je funkcia $T : \Omega \times (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$, ktorá popisuje rozloženie tepla (teplotné pole) v oblasti $\Omega \subset \mathbb{R}$.

Poznámka. Pre rovnicu (1.1) nie je možné určiť jednoznačné riešenie bez datočných podmienok - počiatkových, okrajových. V prípade, že je uvažovaná ohraničená oblasť Ω , tak treba pridať okrajové podmienky (napr. Dirichletova, Neumanova)

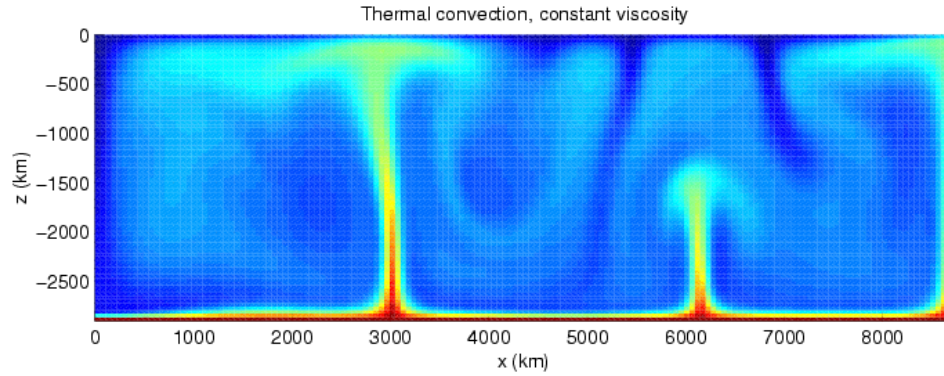
1.2 Vedenie tepla

Prenos tepla sa uskutočňuje *vedením* (kondukciou), *prúdením* (konvekciou) a *žiarením* (radiáciou). Pri kvapalinách je šírenie vedením a prúdením úzko prepojené, pretože zmenou teploty kvapaliny dochádza k zmene fyzikálnych vlastností, napríklad hustoty. Zmeny v hustote môžu vyvolávať prúdenie. Prenos tepla prúdením v zemskom plášti je znázornený na Obrázku 1.1.

Pre väčšinu látok platí, že s narastajúcou teplotou sa znižuje ich hustota. Toto pozorovanie však neplatí pre vodu. Voda dosahuje najväčšiu hustotu pri teplote približne 277.15 stupňov Kelvina (4°C). Nad touto teplotou sa voda správa ako väčšina ostatných látok, t.j. s narastajúcou teplotou klesá hustota. Na druhej strane, so znižujúcou sa teplotou jej hustota opäť klesá (ľad pláva na vode). Tento jav sa nazýva *anomália vody* a tým sa odlišuje od väčšiny ostatných látok.

Prenos tepla radiáciou je založený na vysielaní žiarenia, ktoré je ďalej pohlcované látkou. Tento spôsob prenosu vedie k zvyšovaniu vnútornej energie látky, ktorá takto vysielané teplo absorbuje.

¹Parameter k je súčiniteľ tepelnej vodivosti, ρ hustota materiálu a C tepelná kapacita. V nasledujúcom texte budeme symbolom κ označovať podiel $k/C\rho$, ktorý sa nazýva súčiniteľ teplotnej vodivosti.



Obr. 1.1: Tepelná konvekcia, resp. prenos tepla prúdením v zemskom plášti. Červená farba znázorňuje najteplejšie oblasti, modrá naopak najchladnejšie. Prúdenie smerom zdola nahor je spôsobené rozdielmi v hustote. **Autor:** H. Schmeling

Teplo je definované ako energia, ktorá prestupuje cez hranice termodynamického systému vplyvom teplotného rozdielu systému a jeho okolia (podľa [Bae06]). V prípade, že je rozloženie teploty v systéme známe, možno jednoducho pozorovať zákonitosti vedenia tepla. Preto je jednou zo základných otázok súvis rozloženia teploty a hustoty toku tepelnej energie v systéme. Touto otázkou sa zaoberá *Fourierov zákon*.

1.2.1 Fourierov zákon vedenia tepla

Fourierov zákon hovorí o hustote tepelného toku, ktorú dáva do súvisu s teplotou, pričom vyššia teplota v istom bode teplotného poľa implikuje intenzívnejší tepelný tok v jeho okolí.

Uvažujme tyč dĺžky δ . Jej konce budú x a $x_\delta = x + \delta$. Predpokladajme rozličnú teplotu na oboch koncoch, $T(x, t)$ a $T(x_\delta, t)$. Plocha prierezu tyče nech je S . Experimentálne bola ukázaná priama úmernosť

$$\Delta Q = kS \frac{T(x, t) - T(x_\delta, t)}{\delta} \Delta t, \quad (1.2)$$

kde ΔQ je objem tepla pretečeného plochou S za čas Δt a k je súčiniteľ tepelnej vodivosti² materiálu. Z uvedeného vyplýva, že takéto množstvo tepla je priamo úmerné ploche S a teplotnému rozdielu na koncoch, a nepriamo úmerná dĺžke tyče. Koeficientom úmernosti je k . Limitným prechodom $\delta \rightarrow 0^+$ dostaneme

$$\frac{\Delta Q}{\Delta t} = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} kS \frac{T(x, t) - T(x_\delta, t)}{\delta} = -kS \frac{\partial T(x, t)}{\partial x}.$$

V nasledujúcom texte budeme používať $q = \Delta Q / \Delta t S$ a táto veličina sa nazýva hustota tepelného toku. Je vyjadrením množstva tepla, preneseného jednotkovou

²Treba rozlišovať pojem *teplotnej* $[\kappa] = \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ a *tepelnej* $[k] = \text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ vodivosti materiálu.

plochou za jednotku času. Uvedený vzťah (1.2) však platí len na veľmi krátke časy, resp. časové okamihy dĺžky Δt , pretože prenos tepla závisí od teploty, ktorá je zrejme premenlivá. Preto možno písať

$$\frac{1}{S} \frac{dQ}{dt} = q.$$

Z uvedenej úvahy o toku v jednom rozmere možno formulovať zákonitosť v trojrozmernom prípade

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}, t) = -k \left(\frac{\partial T}{\partial x} \mathbf{e}_x + \frac{\partial T}{\partial y} \mathbf{e}_y + \frac{\partial T}{\partial z} \mathbf{e}_z \right) = -k \nabla T(\mathbf{x}, t), \quad (1.3)$$

pričom uvažujeme teplotu premenlivú v závislosti od času t . Pri stálych teplotných poliach sa neuvažuje časová závislosť. V tomto prípade tepelný tok reprezentuje trojrozmerný vektor \mathbf{q} , ktorý je daný súčtom teplotných tokov vo všetkých smeroch - x, y a z . Záporné znamienko v rovnici (1.3) je dôsledkom 2. termodynamického zákona, t.j. tepelný tok je v smere klesajúcej teploty. V prípade akejkoľvek orientovanej plochy \mathbf{S} , určenej svojim normálovým vektorom, možno hustotu tepelného toku zapísať v tvare

$$\frac{dQ}{dt} = \mathbf{S} \cdot \mathbf{q} = -k \mathbf{S} \cdot \nabla T(\mathbf{x}, t), \quad (1.4)$$

Ide teda o projekciu vektora tepelného toku na jednotkový vektor normály, ktorým je určená orientovaná plocha \mathbf{S} . V prípade oblasti $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ s hranicou $\partial\Omega$ možno zapísať zákon (1.3) v integrálnom tvare

$$\frac{dQ}{dt} = -k \oint_{\partial\Omega} \nabla T(\mathbf{x}, t) \cdot d\mathbf{S}.$$

Symbolom $d\mathbf{S}$ označujeme vektor $\mathbf{n} dS$, kde dS je diferenciál plochy, ktorý sa vzťahuje na hranicu $\partial\Omega$. Výraz dQ/dt udáva množstvo tepla, ktoré pretečie hranicou oblasti $\partial\Omega$ za jednotku času. Tento tvar použijeme v nasledovnej časti, pri odvodení rovnice vedenia tepla.

1.2.2 Rovnica vedenia tepla

Odvodenie rovnice (1.1) vychádza zo zákona zachovania energie a Fourierovho zákona. Zjednodušenú formu zákona zachovania energie v nejakej oblasti Ω možno vyjadriť rovnicou

$$\dot{E} = \dot{E}_{\text{in}} + \dot{E}_{\text{g}} - \dot{E}_{\text{out}}, \quad (1.5)$$

kde \dot{E} je zmena vnútornej energie, \dot{E}_{in} je zmena energie dodanej systému, \dot{E}_{g} energie dodanej z externých zdrojov a \dot{E}_{out} energie odobranej zo systému (podľa [Jij09]). Uvedená rovnica je, pre teplo ako formu energie, veľmi všeobecná a priamo nezahŕňa časovú závislosť. Preto je pri riešení úloh o teple vhodnejšie

upraviť rovnicu (1.5) na tvar zahŕňajúci časovú závislosť. Tým bude rovnica vedenia tepla, ktorú ako prvý odvodil J. B. Fourier.

Odvodenie RVT. Uvažujme oblasť $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, ktorú budeme chápať ako súčasť termodynamického systému s konštantou hustotou ρ . Označme elementárny objem $\Delta\Omega$ a časový okamih Δt . Množstvo tepla, ktoré sa spotrebuje pri zvýšení teploty objemu $\Delta\Omega$ o ΔT stupňov Kelvina je

$$\Delta Q = C \Delta m \Delta T = \rho C \Delta\Omega \Delta T \approx \rho C \frac{\partial T}{\partial t} \Delta t \Delta\Omega,$$

kde uvedenú aproximáciu teplotného prírastku ΔT sme získali rozvojom do Taylorovho radu. Tento výraz sa vzťahuje na $\Delta\Omega$. Pre celú oblasť Ω je dodané teplo \dot{Q} dané integrálom

$$\dot{Q} = \Delta t \int_{\Omega} \rho C \frac{\partial T}{\partial t} d\Omega. \quad (1.6)$$

Dodané teplo \dot{Q} reprezentuje zmenu vnútornej energie v zmysle rovnice (1.5). Teraz vyjadríme bilanciu tepelnej energie $\dot{Q}_{\text{out}} - \dot{Q}_{\text{in}}$, ktorá prechádza hranicou $\partial\Omega$. Podľa vzťahu (1.4) môžeme vyjadriť množstvo tepla vzhľadom na orientovanú plochu $d\mathbf{S}$ ako $\mathbf{q} \cdot d\mathbf{S} \Delta t$. Cez celú hranicu je

$$\dot{Q}_{\text{out}} - \dot{Q}_{\text{in}} = \Delta t \oint_{\partial\Omega} \mathbf{q} \cdot d\mathbf{S} = \Delta t \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{q} d\Omega, \quad (1.7)$$

kde posledná rovnosť vyplýva z *Gauss-Ostrogradského vety* (Apendix A.1). V nami uvažovanom prípade neuvažujeme teplo \dot{Q}_g dodané z externých zdrojov, preto v zmysle rovnice (1.5) platí

$$\dot{Q} + \dot{Q}_{\text{out}} - \dot{Q}_{\text{in}} = 0$$

a dostávame tak rovnosť

$$\int_{\Omega} \rho C \frac{\partial T}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{q} d\Omega = \int_{\Omega} \left[\rho C \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla T) \right] d\Omega = 0.$$

Využili sme pritom vzťah (1.3). Rovnosť je splnená pre ľubovoľnú oblasť Ω termodynamického systému, preto musí byť integrand nutne rovný nule v každom bode oblasti Ω . Dostávame tak rovnicu

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T).$$

Ako bolo spomenuté, neuvažujeme externé zdroje tepla. Ak by sme tieto do modelu zahrnuli, rovnica by nadobudla tvar

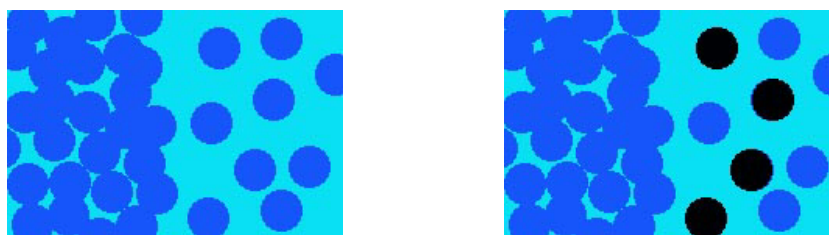
$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + f.$$

Funkcia $f = f(\mathbf{x}, t)$ predstavuje intenzitu tepelného zdroja v bode $\mathbf{x} \in \Omega$ a čase $t > 0$. Podrobnejšie informácie možno nájsť v [Sev08].

1.3 Dynamika fázovej premeny

Tuhnutie kvapaliny je jej fázová premena, ku ktorej dochádza napríklad vplyvom zmeny jej teploty. Teplota totiž nie je jediným faktorom, ktorý ovplyvňuje stav, resp. skupenstvo kvapaliny. Ďalším je napríklad tlak. Prirodzene možno proces tuhnutia pozorovať na zamrznutí vody. Teplota jej tuhnutia je 273.15 stupňov Kelvina pri bežnom atmosférickom tlaku. Toto číslo sa mení v závislosti od hodnoty tlaku. Fázová premena však nemusí nastať ani po zmene teploty pod úroveň teploty tuhnutia. Ide o tzv. *podchladenie*, kedy si látka i pri takej teplote zachová kvapalné skupenstvo. K takému javu dochádza vtedy, keď v látke nie sú prítomné, resp. nevznikli podmienky pre tvorbu *nukleačných jadier* (zárodokov), pomocou ktorých sa začne proces kryštalizácie. Nukleačné jadrá sú tvorené čiastočkami tuhej fázy. Následným zväčšovaním týchto zárodokov - pridružovaním molekúl kvapalnej fázy vzniká nová fáza. Nukleácia jadier môže byť *homogénna* a *heterogénna*. Pri homogénnej nukleácii dochádza k spontánnej tvorbe jadier pri dosiahnutí istej teplotnej hranice. K heterogénnej nukleácii dochádza za prítomnosti častíc tuhej fázy cudzích látok. Jadrá sa v tomto prípade môžu vytvárať napríklad na nádobe, prípadne inej tuhej látke, ktorá prichádza do styku s kvapalinou.

Všeobecne treba teplotu kvapaliny chápať ako mieru rýchlosti pohybu jej molekúl. Ak je teplota vysoká, potom je ich pohyb rýchly a naopak. Tuhá fáza sa vyznačuje istou symetriou, v zmysle usporiadania molekúl. V tejto fáze sú molekuly usporiadané do kryštalickej mriežky. V prípade kvapalnej, resp. plynnej fázy nejde o symetrické usporiadanie, pretože molekuly vykazujú pohyb. Rýchlosť tohto pohybu závisí od teploty. Zahrievaním tuhej fázy sa molekuly začínajú uvoľňovať a kolidujú s inými, pevne usporiadanými v kryštalickej mriežke. Týmto spôsobom sa prenáša kinetická energia pohybujúcej sa molekuly, ktorá je dostatočná na to, aby uvoľnila inú molekulu z kryštalickej štruktúry. Pôvodná molekula však odovzdá časť svojej kinetickej energie a následne zníži rýchlosť svojho pohybu. Týmto postupom dochádza k fázovej premene.



Obr. 1.2: Na prvom obrázku sú zachytené voľne pohybujúce sa molekuly vody popri molekulách zaradených v kryštalickej mriežke ľadu. Druhý obrázok navyše obsahuje molekuly soli (chlorid sodný NaCl). Zdroj: <http://www.waynesthisandthat.com/saltice.html>

Samotný proces fázovej premeny kvapaliny je ovplyvnený jej zložením. V prípade

zmesi dvoch látok - binárneho systému, napr. voda H_2O a chlorid sodný NaCl , je teplota tuhnutia nižšia ako teplota tuhnutia vody - jednozložkového systému. Závisí však od koncentrácie prímеси (v tomto prípade NaCl). Situácia je znázornená na Obrázku 1.2. Pridaním chloridu sodného k tuhej zložke vody dochádza k situácii, kedy niektoré molekuly H_2O sú nahradené molekulami NaCl . Existuje teda menšia časť molekúl vody, ktoré sa zaradia do kryštalickej štruktúry ako tých, ktoré sa z kryštalickej mriežky uvoľnia vplyvmi kolízií. Ľad má teda pridaním soli tendenciu rozpúšťať sa.

Fázové rozhranie. Tuhú a kvapalnú fázu oddeľuje fázové rozhranie. V nasledujúcom texte bude označované písmenom s a chápané len ako funkcia času

$$s : (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}.$$

V jednorozmernom modeli, ktorým sa zaoberá táto práca sa uvažuje fázové rozhranie ako pohybujúci sa bod na úsečke. V skutočnosti však nemožno oddeliť kvapalnú a tuhú fázu presne jedným bodom. Ďalej bude pri tvorbe modelu dôležitý predpoklad hladkosti pohybu rozhrania, t.j. $s \in C^1(0, \infty)$. Vo viacrozmernom prípade je potrebné uvažovať navyše závislosť od polohy \mathbf{x} , t.j. $s = s(\mathbf{x}, t)$.

1.3.1 Fázový diagram jednozložkového systému

Pod jednozložkovým systémom sa rozumie systém skladajúci sa len z jednej chemickej zložky (napr. voda H_2O). Tento je úplne popísaný stavovými veličinami, ako sú tlak a teplota. Rôznym kombináciám hodnôt týchto veličín zodpovedajú rôzne fázy (skupenstvá). Jednoduchá látka sa môže nachádzať v troch fázach - kvapalnej, tuhej a plynnej. Pri ostatných látkach je situácia zložitejšia. Okrem troch základných fáz vznikajú aj nové fázy. Na Obrázku (1.3) je znázornená závislosť medzi teplotou, tlakom a fázou, v ktorej sa systém nachádza, tzv. *fázový diagram*.

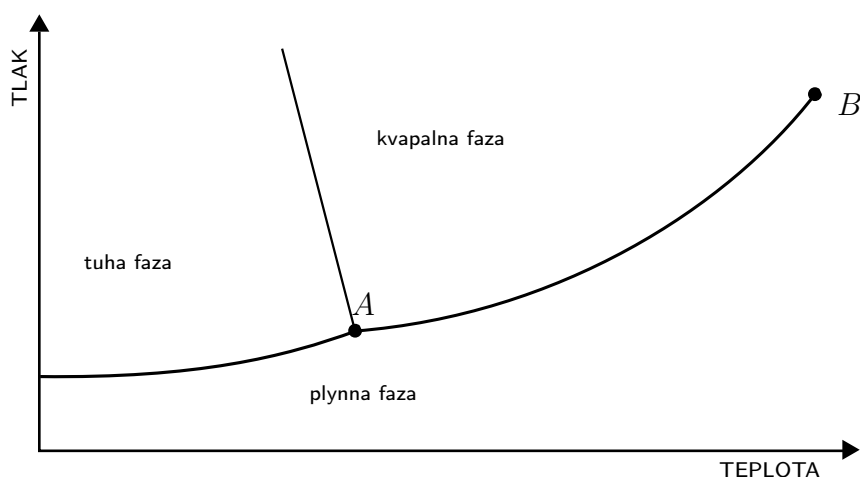
Gibbsovo pravidlo. V 19. storočí predstavil J.W. Gibbs fázové pravidlo, ktoré hovorí o závislosti medzi počtom stupňov voľnosti³, počtom fáz a počtom zložiek. Jeho vyjadrenie je

$$F = C - P + 2 \tag{1.8}$$

kde F je počet stupňov voľnosti, C je počet zložiek⁴ a P je počet fáz. Platnosť Gibbsovho pravidla možno ilustrovať aj na fázovom diagrame. V miestach na krivke spájajúcej body A a B je počet stupňov voľnosti $F = 1$, aby zostala zachovaná termodynamická rovnováha. Rovnaký výsledok plynie z Gibbsovho pravidla $F = 1 - 2 + 2 = 1$. Odtiaľ vyplýva, že nezávisle môžeme meniť len jednu stavovú veličinu.

³Počet stupňov voľnosti je počet stavových veličín, ktoré možno meniť, pričom systém zostane v termodynamickej rovnováhe.

⁴V prípade jednozložkového systému je $C = 1$.

Obr. 1.3: Štandardný fázový diagram jednozložkového systému pre H₂O

Krivky vo fázovom diagrame (1.3) zodpovedajú fázovým rozhraniam, medzi jednotlivými fázami. Na fázovom rozhraní koexistujú obe fázy súčasne. Vyznačený bod *A* sa nazýva *trojný bod*. Tento určuje veličiny teplotu a tlaku, pri ktorých existujú všetky tri fázy súčasne. Ak postupujeme k vyšším hodnotám tlaku a teploty, dospejeme ku *kritickému bodu* (v diagrame vyznačený *B*). V kritickom bode sa nadobúda kritická teplota a kritický tlak. V oblasti za kritickým bodom nemožno od seba odlíšiť kvapalnú a plynnú fázou. Preto možno uvažovať fázovú premenu plynu na kvapalinu zmenou tlaku len vtedy, keď je teplota pod úrovňou kritického teploty.

V jednozložkovom systéme pre H₂O sa kritický bod nadobúda pri teplote 647.01 K a tlaku 218 atm⁵. Trojný bod vody zodpovedá teplote 273.16 K a tlaku 6×10^{-3} atm. V tomto stave sa stretávajú voda, ľad a para súčasne. Z Gibbsovoho pravidla máme pre trojný bod nulový počet stupňov voľnosti. Preto ľubovoľná zmena ktorejkoľvek stavovej veličiny spôsobí zánik termodynamického rovnováhy a systém prejde do iného stavu.

1.4 Stefanova podmienka

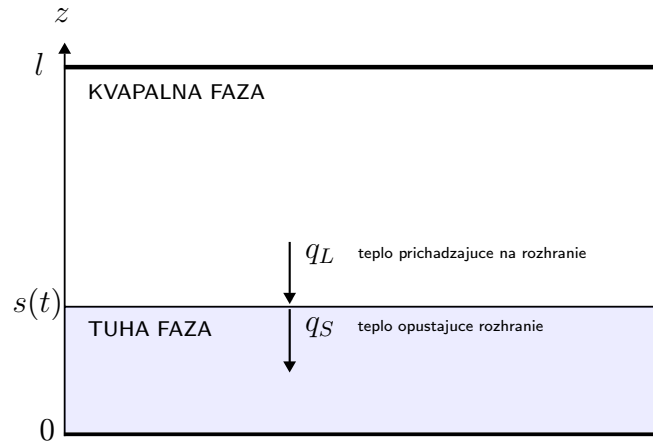
Jednou zo základných zložiek modelu, ktorý bude popísaný v nasledovnej kapitole je tzv. Stefanova podmienka. Táto je vyjadrením zákona zachovania energie na fázovom rozhraní a modeluje pohyb rozhrania v čase pri fázovej premene. Uvažujeme fázovú premenu z kvapalnej do tuhej fázy. Dôležitým pojmom pri odvodení Stefanovej podmienky je pojem *latentného tepla*. Merné latentné teplo L je množstvo tepla potrebného k zmene skupenstva 1 kilogramu látky pri teplote tuhnutia, respektíve tavenia. Taká zmena skupenstva prebieha práve na fázovom rozhraní.

Za časový okamih Δt sa fázové rozhranie pohne približne o $s \Delta t$, kde s je

⁵atm - atmosféra (jednotka tlaku), pričom $1 \text{ atm} = 1.01325 \times 10^5 \text{ Pa}$.

okamžitá rýchlosť⁶ pohybu rozhrania. Na úseku tejto dĺžky teda došlo k fázovej premene a teplo uvoľnené pri tomto procese možno vyjadriť

$$Q_{\text{Lat}} = \rho L \frac{ds}{dt} \Delta t.$$



Obr. 1.4: Ilustrácia toku tepla cez fázové rozhranie

Toto teplo postupuje ďalej k ochladenej hranici. Za predpokladu, že je známe teplotné pole T v kvapalnej fáze, je teplo privedené na rozhranie z kvapalnej fázy podľa (1.4) rovné

$$q_L = -k_L \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{s^+}.$$

Teplo odchádzajúce z rozhrania smerom do tuhej fázy možno analogicky vyjadriť

$$q_S = -k_S \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{s^-}.$$

Zo zákona zachovania energie⁷ (1.5) platí, že teplo odchádzajúce z fázového rozhrania je súčtom latentného tepla a tepla, ktoré bolo privedené na rozhranie z kvapalnej fázy

$$-k_S \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{s^-} \Delta t = -k_L \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{s^+} \Delta t + \rho L \frac{ds}{dt} \Delta t.$$

Po predelení oboch strán rovnosti nenulovým Δt a preskupení členov dostávame Stefanovu podmienku

$$\rho L \frac{ds}{dt} = k_S \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{s^-} - k_L \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{s^+}. \quad (1.9)$$

⁶Okamžitá rýchlosť je definovaná ako derivácia podľa časovej premennej $\dot{s} := ds/dt$.

⁷Neuvažujeme teplo dodané z externých zdrojov.

V podmienke sa vyskytujú jednostranné derivácie. Vo všeobecnosti totiž neplatí, že sa zhodujú. Rozdiely spočívajú v rozličnej teplotnej vodivosti kvapalnej a tuhej fázy. Z matematického hľadiska možno túto situáciu interpretovať tak, že teplotné pole $T(z, t)$, $z \in [0, l]$ nie je na rozhraní vo všeobecnosti hladké.

Viacrozmerný prípad. Analógiou je tvar podmienky vo viacrozmernom prípade. Fázové rozhranie je tu krivka v dvojrozmernom prípade, plocha v trojrozmernom prípade. Nech \mathbf{n} je vektor vonkajšej normály⁸ k fázovému rozhraniu. Potom možno odvodiť Stefanovu podmienku v tvare

$$\rho L \dot{s}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{k}) = k_S(\mathbf{n} \cdot \nabla T)|_{s^-} - k_L(\mathbf{n} \cdot \nabla T)|_{s^+},$$

kde \mathbf{k} je vektor $[0 \ 1]^T$ resp. $[0 \ 0 \ 1]^T$. Bližšie informácie o odvodení možno nájsť v [Kys10].

⁸Pre dvojrozmerný prípad je $\mathbf{n} = 1/\sqrt{1 + \left(\frac{\partial s}{\partial x}\right)^2} \left[-\frac{\partial s}{\partial x} \ 1\right]^T$.

Kapitola 2

Stefanov problém

Josef Stefan (1835 – 1893) sa stal profesorom fyziky na Viedenskej univerzite v roku 1863. Venoval sa oblasti vedenia tepla a difúzie v tekutinách, pričom na túto tému napísal množstvo vedeckých článkov [Bae06]. Podľa neho bola pomenovaná trieda problémov, tzv. *Stefanove problémy*. Tieto v sebe obsahujú niekoľko charakteristických črt. Ide predovšetkým o dynamiku fázovej premeny tekutín a popis vedenia tepla. Ďalšou črtou je *voľná hranica* alebo pohyblivé fázové rozhranie. V nasledujúcom texte bude sformulovaný jednorozmerný Stefanov problém na konečnej oblasti a jeho transformácie, ktoré umožnia jednoduchšie numerické riešenie.

2.1 Predpoklady a zjednodušenia modelu

Matematický model, ktorým sa zaoberá táto práca, má vo svojej formulácii isté zjednodušenia. Niektoré fyzikálne faktory, ktoré sú súčasťou reálnej fázovej premeny, zanedbávame. Tieto zjednodušenia vedú k zostaveniu tzv. *klasického* Stefanovho problému.

Jednými z predpokladov sú konštantná hustota ρ , konštantné latentné teplo L a konštantná teplota na fázovom rozhraní. Ak by sme predpoklad o rovnakej hustote $\rho_L = \rho_S$ pre obe fázy neprijali, potom je nutné do modelu započítať javy súvisiace s prúdením. Prípád $\rho_L < \rho_S$ zodpovedá situácii, keď pri prechode z kvapalného skupenstva do tuhého látka znižuje svoj objem. Prípád $\rho_L > \rho_S$, naopak, zodpovedá situácii, keď pri fázovej premene dochádza k zväčšovaniu celkového objemu danej látky. Ďalšími predpokladmi sú rôzne súčinitele $k_L \neq k_S$ pre každú fázu a fázové rozhranie s nulovou šírkou. Podstatné zjednodušenie, súvisiace s konštantnou hustotou, je prenos tepla len vedením. Ako bolo spomenuté v prvej kapitole, rozdielna hustota jednotlivých fáz vyvoláva v kvapalnej fáze prúdenie¹. Zároveň vylučujeme vonkajšie vplyvy, napríklad gravitačného alebo chemického charakteru.

¹Bližšie informácie ohľadom modelu, zohľadňujúceho vplyvy prúdenia možno nájsť v [Gup03].

2.2 Formulácia problému

Ako bolo spomenuté, v našej práci sa obmedzíme² na jednorozmerný prípad na súvislej ohraničenej oblasti $\Omega \subset \mathbb{R}$. Oblasťou, na ktorej prebieha proces fázovej premeny, bude definovaná

$$\Omega := \{z \in \mathbb{R} : 0 < z < l\}.$$

Treba rozlíšiť dve oblasti, na ktorých situáciu modelujeme. Sú to

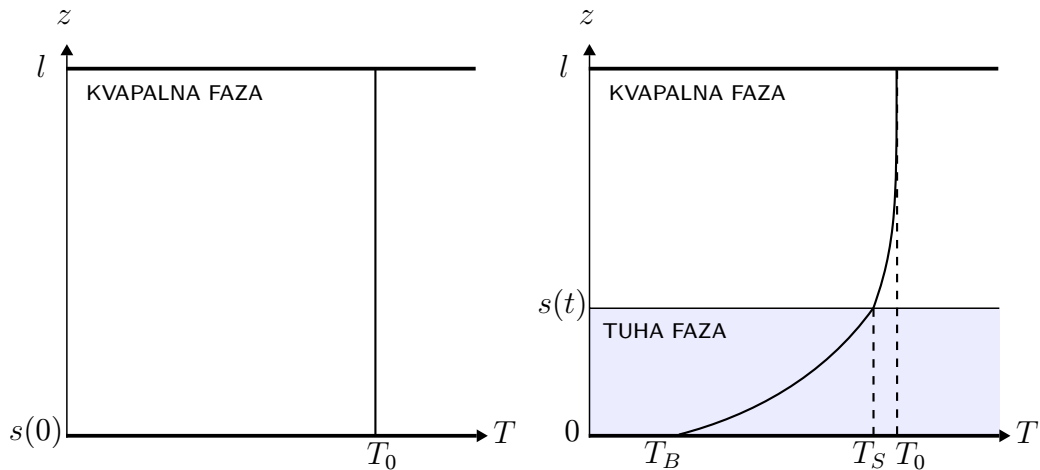
$$\left. \begin{array}{l} \text{tuhá fáza :} \quad \Omega_S(t) := \{z \in \mathbb{R} : 0 < z < s(t)\} \\ \text{kvapalná fáza:} \quad \Omega_L(t) := \{z \in \mathbb{R} : s(t) < z < l\} \end{array} \right\} \quad t > 0$$

Oblasti $\Omega_{S,L}$ sú závislé od času t , jedná sa teda o úlohu s voľnou hranicou, zrejme $\Omega_S, \Omega_L \subset \Omega$, a navzájom sú disjunktné. Platí

$$\Omega = \Omega_L(t) \cup \Omega_S(t) \cup \{s(t)\}, \quad t \in (0, \infty).$$

Jedným z predpokladov je, že celá oblasť je v čase $t = 0$ vyplnená látkou v kvapalnom skupenstve. Teplotu jej tuhnutia označme T_S . Počiatočná teplota kvapaliny je $T(z, 0) = T_0$ pre $z \in (0, l)$. Teplota na dolnej hranici je $T(0, t) = T_B$, ktorá je ale nižšia, ako teplota tuhnutia. Teplota na hornej hranici zostane konštantná $T_0 = T(l, t)$.

Príčinou fázovej premeny je počiatočné náhle ochladenie na hranici $z = 0$ pod teplotu tuhnutia. Kvapalnú a tuhú fázu od seba oddeľuje *fázové rozhranie*. Toto



Obr. 2.1: Prvý diagram zachytáva počiatočný stav systému. Ako vidno, fázové rozhranie je totožné s vodorovnou osou a teplota je v každom bode konštantná T_0 . Na druhom obrázku je znázornená situácia v čase $t \neq 0$. Fázové rozhranie sa pohybuje z počiatočnej polohy smerom nahor, pričom rozloženie tepla v jednotlivých fázach je znázornené krivkou.

²Stabilitou a fázovou premenou binárneho systému na dvojrozmernej oblasti sa zaoberá diplomová práca [Kys10].

môžeme vyjadriť ako funkciu časovej premennej $s = s(t)$ a $s \in C^1(0, \infty)$. Teplota na fázovom rozhraní je rovná teplote tuhnutia, teda $T(s, t) = T_S = \text{const}$. Jednou z neznámych funkcií, ktoré v modeli vystupujú, je rozloženie teploty. Ďalšou je poloha fázového rozhrania v čase. Tieto dve neznáme funkcie zväzuje *Stefanova podmienka* (1.9) na rozhraní. Rozloženie tepla, resp. teplotné pole v jednotlivých fázach popisuje rovnica vedenia tepla. Súčiniteľ teplotnej vodivosti bude mať rôzne hodnoty pre kvapalnú a tuhú fázu

$$\kappa_L = \frac{k_L}{\rho C_L}, \quad \kappa_S = \frac{k_S}{\rho C_S}$$

kde C_i je merná tepelná kapacita, k_i je súčiniteľ tepelnej vodivosti ($i = S, L$). Zhrnutím predchádzajúceho môžeme model zapísať v tvare

(i) *vedenie tepla*

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} &= \kappa_L \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, & (z, t) \in \Omega_L(t) \times (0, \infty), \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= \kappa_S \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, & (z, t) \in \Omega_S(t) \times (0, \infty) \end{aligned} \quad (2.1)$$

(ii) *podmienky na rozhraní*

$$\begin{aligned} T(s, t) &= T_S, \\ \rho L \frac{ds}{dt} &= k_S \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{s^-} - k_L \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{s^+} \end{aligned} \quad (2.2)$$

(iii) *počiatočné podmienky*

$$\begin{aligned} s(0) &= 0, \\ T(z, 0) &= T_0 \quad \text{pre} \quad 0 < z \leq l \end{aligned} \quad (2.3)$$

(iv) *okrajové podmienky*

$$\left. \begin{aligned} T(0, t) &= T_B \\ T(l, t) &= T_0 \end{aligned} \right\} \quad \text{pre} \quad t \geq 0. \quad (2.4)$$

Súčasťou riešenia uvedenej úlohy je aj funkcia $s = s(t)$. Ide teda o nelineárnu úlohu a to aj napriek tomu, že priamo v rovniciach sa nelinearita nevyskytuje.

Poznámka. Tento model popisuje fázovú premenu z kvapalného skupenstva na tuhé. Opačný prípad, t.j. premena tuhého skupenstva na kvapalné (tavenie), nie je náročné sformulovať. Stačí urobiť príslušné úpravy v rovniciach (2.1), (2.2), (2.3) a (2.4). Napríklad počiatočnú hodnotu teploty systému zvolíme pod úroveň teploty tuhnutia a hodnota teploty na dolnej hranici bude nad touto teplotou.

2.3 Transformácia na bezrozmerný tvar

Uvedené rovnice (2.1), (2.2) a podmienky (2.3), (2.4) nie sú bezrozmerné. Veľičiny, ktoré v nich vystupujú majú fyzikálny rozmer. Lepší pohľad na problém pri riešení nám poskytne bezrozmerný tvar rovníc. Teplotu T uvádzame v stupňoch Kelvina $[T] = \text{K}$. Časový rozmer je sekunda, $[t] = \text{sec}$. Polohu fázového rozhrania a súradnicu z uvádzame v metroch $[s] = [z] = \text{m}$. Fyzikálne parametre teplotnej vodivosti majú rozmer $[\kappa_S] = [\kappa_L] = \text{m}^2 \cdot \text{sec}^{-1}$. Zavedieme nasledovné transformácie

$$\tilde{T}(\tilde{z}, \tilde{t}) = \frac{T(z, t) - T_S}{\Delta T}, \quad \tilde{t} = \frac{\kappa_L t}{l^2}, \quad \tilde{z} = \frac{z}{l}, \quad (2.5)$$

kde definujeme rozdiel $\Delta T := T_0 - T_S$. Uvedené transformácie aplikujeme na rozmerné rovnice. Tým dostaneme model v bezrozmernej forme s novými neznámymi a premennými. Bezrozmerné teplotné pole označujeme $\tilde{T} = \tilde{T}(\tilde{z}, \tilde{t})$, priestorovú premennú \tilde{z} a časovú premennú \tilde{t} .

Najprv transformujeme rovnicu vedenia tepla. Podľa vzťahu (2.5) platí $T(x, t) = \tilde{T}(\tilde{z}, \tilde{t})\Delta T + T_S$ a teda časová derivácia $T_t(z, t)$ je

$$\frac{\partial T(z, t)}{\partial t} = \Delta T \frac{\partial \tilde{T}(\tilde{z}, \tilde{t})}{\partial \tilde{t}} \frac{d\tilde{t}}{dt} = \frac{\kappa_L \Delta T}{l^2} \frac{\partial \tilde{T}(\tilde{z}, \tilde{t})}{\partial \tilde{t}}.$$

Prvá derivácia podľa priestorovej premennej je

$$\frac{\partial T(z, t)}{\partial z} = \Delta T \frac{\partial \tilde{T}(\tilde{z}, \tilde{t})}{\partial \tilde{z}} \frac{d\tilde{z}}{dz} = \frac{\Delta T}{l} \frac{\partial \tilde{T}(\tilde{z}, \tilde{t})}{\partial \tilde{z}}. \quad (2.6)$$

Rovnakým spôsobom vypočítame druhú deriváciu

$$\frac{\partial^2 T(z, t)}{\partial z^2} = \frac{\Delta T}{l} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\partial \tilde{T}(\tilde{z}, \tilde{t})}{\partial \tilde{z}} \right] = \frac{\Delta T}{l^2} \frac{\partial^2 \tilde{T}(\tilde{z}, \tilde{t})}{\partial \tilde{z}^2}.$$

Dosadením získaných vzťahov do rovníc pre vedenie tepla získame (2.7). Teraz odvodíme bezrozmerný tvar Stefanovej podmienky. Označme $l\nu(\tilde{t}) = s(t)$, kde ν je bezrozmerné. Potom platí

$$\frac{ds(t)}{dt} = l \frac{d\nu(\tilde{t})}{dt} = l \frac{d\nu(\tilde{t})}{d\tilde{t}} \frac{d\tilde{t}}{dt} = \frac{\kappa_L}{l} \frac{d\nu(\tilde{t})}{d\tilde{t}}.$$

Derivácia $T_z(z, t)$ už bola odvodená v (2.6). Použitím týchto vzťahov teda dostaneme podmienku (2.8). Kvôli prehľadnosti sme v tejto podmienke označili bezrozmerné číslo

$$K = \frac{\rho L \kappa_L}{k_L \Delta T}.$$

Oblasti Ω, Ω_L a Ω_S , na ktorých bol model v pôvodnom tvare definovaný, sa transformujú taktiež. Priamo podľa transformačných vzťahov je

$$\Omega \rightarrow \tilde{\Omega} = \{\tilde{z} \in \mathbb{R} : 0 < \tilde{z} < 1\}.$$

Analogicky pre oblasti $\tilde{\Omega}_S(\tilde{t}) = \{\tilde{z} \in \mathbb{R} : 0 < \tilde{z} < \nu(t)\}$ a $\tilde{\Omega}_L(\tilde{t}) = \{\tilde{z} \in \mathbb{R} : \nu(t) < \tilde{z} < 1\}$. Riešenie úlohy na pôvodnej oblasti Ω , t.j. na intervale $(0, l)$ sa celkovo zmenilo na riešenie na intervale $(0, 1)$. Rozklad na navzájom disjunktné množiny však zostáva zachovaný

$$\tilde{\Omega}(t) = \tilde{\Omega}_L(t) \cup \tilde{\Omega}_S(t) \cup \{\nu(t)\}, \quad t \in (0, \infty).$$

Poznámka. V nasledujúcom texte budeme pre zjednodušenie zápisov označovať \tilde{z}, \tilde{t} a \tilde{T} symbolmi z, t a T . Teraz však už z, t, T budú reprezentovať bezrozmerné veličiny. Podiel κ_S/κ_L označíme κ_{SL} , podobne podiel $k_S/k_L = k_{SL}$.

Model má po uvedených transformáciách nasledovný tvar

(i) *vedenie tepla*

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, & (z, t) \in \tilde{\Omega}_L(t) \times (0, \infty) \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= \kappa_{SL} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, & (z, t) \in \tilde{\Omega}_S(t) \times (0, \infty) \end{aligned} \quad (2.7)$$

(ii) *podmienky na rozhraní*

$$\begin{aligned} T(\nu, t) &= 0, \\ K\dot{\nu}(t) &= k_{SL} \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{\nu^-} - \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{\nu^+} \end{aligned} \quad (2.8)$$

(iii) *počiatočné podmienky*

$$\begin{aligned} \nu(0) &= 0, \\ T(z, 0) &= 1 \quad \text{pre} \quad 0 < z \leq 1 \end{aligned} \quad (2.9)$$

(iv) *okrajové podmienky*

$$\left. \begin{aligned} T(0, t) &= \frac{T_B - T_S}{\Delta T} \\ T(1, t) &= 1 \end{aligned} \right\} \quad \text{pre} \quad t \geq 0. \quad (2.10)$$

Uvedené rovnice popisujú tzv. Stefanov problém *s dvoma fázami*, pretože uvažujeme vedenie tepla v dvoch navzájom rozličných fázach. Ak zadáme namiesto počiatočnej podmienky $T(z, 0) = T_0$ podmienku $T(z, 0) = T_S$, teda kvapalina má v čase $t = 0$ rovnovážnu teplotu T_S , potom hovoríme o Stefanovom probléme *s jednou fázou*. Vedenie tepla má v tomto prípade zmysel uvažovať len v tuhej fáze $z \in \tilde{\Omega}_S(t)$. Gradient teplotného poľa kvapalnej fázy $z \in \tilde{\Omega}_L(t)$ nadobúda nulovú hodnotu [Gup03].

2.4 Problém voľnej hranice

Riešenia úloh, ktoré sú formulované prostredníctvom parciálnych diferenciálnych rovníc, závisia od okrajových a počiatkových podmienok. V prípade, že sa vo formulácii úlohy vyskytuje okrajová podmienka určená na hranici závislej od času, potom hovoríme o úlohe s voľnou hranicou. Tieto úlohy spôsobujú značné komplikácie pri ich numerickom riešení. Vhodnou transformáciou možno úlohu previesť na úlohu s fixnou hranicou. V tejto časti predstavíme také transformácie, ktoré umožnia numerické riešenie problému (2.7)–(2.10) metódou konečných diferencií.

Pre účely úlohy (2.7)–(2.10) zavedieme transformáciu zvlášť pre každú fázu. V prípade polonekonečnej oblasti by stačilo pre všetky $z \in (0, \infty)$ uvažovať transformáciu

$$z \rightarrow \zeta = \frac{z}{\nu(t)}.$$

V našej práci však rozoberáme úlohu na ohraničenej oblasti. Touto transformáciou by sa fixná horná hranica $z = 1$ transformovala na voľnú. Preto transformujeme každú z oblastí $\tilde{\Omega}_S(t)$ a $\tilde{\Omega}_L(t)$ zvlášť nasledovným spôsobom

$$z \rightarrow \zeta = \begin{cases} \frac{z}{\nu(t)} & \text{pre } z \in \tilde{\Omega}_S(t) \\ \frac{1-z}{1-\nu(t)} & \text{pre } z \in \tilde{\Omega}_L(t) \end{cases} \quad (2.11)$$

V prípade, že $z = 0$, tak aj $\zeta = 0$. Ak $z = \nu$, potom $\zeta = 1$ pre oba transformačné vzťahy. Voľná hranica je teda po tejto transformácii fixná. Dosadením hornej hranice $z = 1$ je $\zeta = 0$.

Transformácia RVT na $\tilde{\Omega}_S(t)$. Naším cieľom je transformovať rovnice (2.7)–(2.10) pomocou transformácie 2.11. Najprv transformujeme (2.7) pre tuhú fázu. Označme $T(z, t) = \vartheta_S(\zeta, t)$, kde ζ je premenná definovaná podľa (2.11). Derivácia T podľa časovej premennej je podľa pravidla o derivovaní zloženej funkcie

$$\begin{aligned} \frac{\partial T(z, t)}{\partial t} &= \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial t} = \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial t} \\ &= \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial t} - \frac{z \dot{\nu}}{\nu^2} \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta} = \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial t} - \frac{\dot{\nu} \zeta}{\nu} \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta} \end{aligned}$$

pričom pri poslednej rovnosti sme využili $\zeta = z/\nu$. Prvá a druhá derivácia podľa priestorovej premennej

$$\begin{aligned} \frac{\partial T(z, t)}{\partial z} &= \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial z} = \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial z} = \frac{1}{\nu} \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial^2 T(z, t)}{\partial z^2} &= \frac{1}{\nu} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta} \right] = \frac{1}{\nu^2} \frac{\partial^2 \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta^2} \end{aligned}$$

Rovnica vedenia tepla pre tuhú fázu nadobudne tvar

$$\frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial t} = \frac{\dot{\nu} \zeta}{\nu} \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta} + \frac{\kappa_{SL}}{\nu^2} \frac{\partial^2 \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta^2}, \quad (\zeta, t) \in (0, 1) \times (0, \infty).$$

Transformácia RVT na $\tilde{\Omega}_L(t)$. Rovnako, ako v prvom prípade, aj tu transformujeme $T(z, t) = \vartheta_L(\zeta, t)$, teraz je však premenná ζ definovaná iným spôsobom. Pre zjednodušenie zápisov, najprv vypočítame derivácie premennej ζ

$$\begin{aligned} \frac{\partial \zeta}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1-z}{1-\nu} \right) = \dot{\nu} \frac{1-z}{(1-\nu)^2} = \frac{\zeta \dot{\nu}}{1-\nu} \\ \frac{\partial \zeta}{\partial z} &= \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1-z}{1-\nu} \right) = \frac{-1}{1-\nu} \end{aligned}$$

Postup pri výpočte derivácií funkcie T bude rovnaký ako v prípade na oblasti $(0, \nu)$. Teda

$$\begin{aligned} \frac{\partial T(z, t)}{\partial t} &= \frac{\partial \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial t} + \frac{\zeta \dot{\nu}}{1-\nu} \frac{\partial \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial^2 T(z, t)}{\partial z^2} &= \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{-1}{1-\nu} \frac{\partial \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial \zeta} \right] = \frac{1}{(1-\nu)^2} \frac{\partial^2 \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial \zeta^2} \end{aligned}$$

Dostávame tak rovnicu vedenia tepla pre kvapalnú fázu v tvare

$$\frac{\partial \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial t} = \frac{1}{(1-\nu)^2} \frac{\partial^2 \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial \zeta^2} - \frac{\zeta \dot{\nu}}{1-\nu} \frac{\partial \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial \zeta}, \quad (\zeta, t) \in (0, 1) \times (0, \infty).$$

Aj v tomto prípade sa uvedená rovnica rieši pre $(\zeta, t) \in (0, 1) \times (0, \infty)$, čo vyplýva z podstaty transformácie.

Transformácia Stefanovej podmienky. V Stefanovej podmienke na fázovom rozhraní zohľadňujeme jednostranné derivácie. Prvá charakterizuje hustotu teplotného toku smerom do tuhej fázy ν^- . Preto je pri tejto derivácii potrebné použiť transformáciu (2.11) a $z \in \tilde{\Omega}_S(t)$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{\nu^-} = \left. \frac{1}{\nu} \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta} \right|_{1^-}.$$

V tomto prípade je už novou premennou $\zeta = z/\nu$ a teda ak šlo o jednostrannú deriváciu v ν^- , tak po transformácii pôjde o deriváciu v 1^- , kde 1 teraz reprezentuje fixné fázové rozhranie. Prípad druhej jednostrannej derivácie je analogický, pričom použijeme transformačný vzťah (2.11) pre oblasť $\tilde{\Omega}_L(t)$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{\nu^+} = \left. \frac{-1}{1-\nu} \frac{\partial \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial \zeta} \right|_{1^-}$$

Aj v tomto prípade pôjde o jednostrannú deriváciu 1^- . Vyplýva z transformačného vzťahu, teda ak $z \rightarrow \nu^+$, tak $\zeta \rightarrow 1^-$. Stefanova podmienka nadobudne tvar

$$K\dot{\nu} = \frac{k_{SL}}{\nu} \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta} \Big|_{1^-} + \frac{1}{1-\nu} \frac{\partial \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial \zeta} \Big|_{1^-}$$

Po uvedených transformáciách ide o úlohu s pevnou hranicou, ktorú možno riešiť numericky. Úloha má teda tvar

(i) *transformované rovnice vedenia tepla*

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial t} &= \frac{1}{(1-\nu)^2} \frac{\partial^2 \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial \zeta^2} - \frac{\zeta \dot{\nu}}{1-\nu} \frac{\partial \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial \zeta}, \quad (\zeta, t) \in (0, 1) \times (0, \infty) \\ \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial t} &= \frac{\dot{\nu} \zeta}{\nu} \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta} + \frac{\kappa_{SL}}{\nu^2} \frac{\partial^2 \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta^2}, \quad (\zeta, t) \in (0, 1) \times (0, \infty) \end{aligned} \quad (2.12)$$

(ii) *transformovaná podmienka na rozhraní*

$$K\dot{\nu} = \frac{k_{SL}}{\nu} \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta} \Big|_{1^-} + \frac{1}{1-\nu} \frac{\partial \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial \zeta} \Big|_{1^-} \quad (2.13)$$

(iii) *počiatočné podmienky*

$$\begin{aligned} \nu(0) &= 0 \\ \vartheta_L(\zeta, 0) &= 1 \quad \text{pre} \quad 0 < \zeta < 1 \end{aligned} \quad (2.14)$$

(iv) *okrajové podmienky*

$$\left. \begin{aligned} \vartheta_L(0, t) &= 1 \\ \vartheta_L(1, t) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad \text{pre} \quad t > 0 \quad (2.15)$$

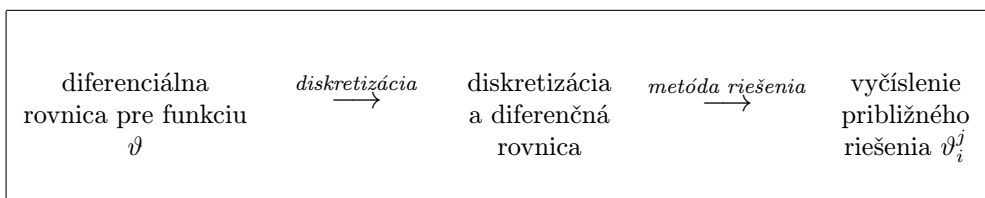
Kapitola 3

Numerické riešenie

Táto kapitola sa venuje numerickému experimentu, v ktorom skúmame parametrické vlastnosti riešení úlohy, formulovanej v predchádzajúcej kapitole. Spomínanú úlohu nie je možné riešiť explicitne, a preto sa zameriavame na numerické riešenie. Explicitne riešiteľných je len malé množstvo úloh tohto typu, pretože počiatočné, okrajové podmienky ako aj podmienky na fázovom rozhraní môžu pri rôznych modifikáciách vniesť do problému nelinearitu. Obvyklou metódou numerického riešenia úloh Stefanovho typu je metóda konečných diferencií. Prehľad variácií metódy konečných diferencií ako aj iné metódy na riešenie úloh s voľnou hranicou možno nájsť v [Cra75].

3.1 Metóda konečných diferencií

Metóda konečných diferencií (ďalej len MKD), je jednou z numerických metód na riešenie diferenciálnych rovníc. Jej hlavná myšlienka je jednoduchá a spočíva v nahradení diferenciálnych výrazov diskretnými analógiami a následnom odvodení diferenčnej rovnice, presnejšie systému diferenčných rovníc. Približné riešenie je teda vyčíselné na diskretnej sieti v diskretizačných uzloch. Nahradenie diferenciálnych rovníc diferenčnými však spôsobuje odchýlky, ktorých veľkosť závisí od hustoty siete, ako aj od konkrétneho typu a parametrov úlohy.



Prvý krok riešenia spočíva v diskretizácii oblasti, na ktorej je úloha zadaná. Následne sú vypočítané aproximácie riešenia v diskretizačných uzloch (i, j) . Zjednodušený diagram¹, uvedený vyššie, zachytáva vzťah spojitého analytického ϑ a numerického riešenia diferenciálnej rovnice (napríklad RVT).

¹Diagram podľa [Rec04].

Na aproximáciu derivácií sa používajú rôzne typy konečných diferencií (spätná, dopredná, centrálna) rôznej presnosti, ktorých vhodná voľba môže zlepšiť výslednú presnosť. Tvary konečných diferencií možno odvodiť z Taylorovej formuly. Voľbou diferencií, tvorbou siete, ako aj konštrukciou systému diferenčných rovníc pre transformovaný Stefanov problém sa zaoberajú nasledovné časti. Výsledkom diskretizačného procesu sú lineárne algebraické systémy, ktoré sú však najmä pri jemnej diskretizácii "veľmi veľké", rádovo o stovkách až tisícoch neznámych.

3.2 Diskretizácia úlohy

3.2.1 Definovanie časopriestorovej siete

Uvažujme transformované rovnice vedenia tepla z (2.12)

$$\frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial t} = \frac{\dot{\nu} \zeta}{\nu} \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta} + \frac{\kappa_{SL}}{\nu^2} \frac{\partial^2 \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta^2}, \quad (\zeta, t) \in (0, 1) \times (0, \infty), \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial t} = \frac{1}{(1-\nu)^2} \frac{\partial^2 \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial \zeta^2} - \frac{\zeta \dot{\nu}}{1-\nu} \frac{\partial \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial \zeta}, \quad (\zeta, t) \in (0, 1) \times (0, \infty). \quad (3.2)$$

Obe rovnice sú uvažované na rovnakej oblasti $(0, 1) \times (0, \infty)$. Pre potreby numerického experimentu budeme uvažovať oblasť $(0, 1) \times (0, \tau)$, kde $\tau > 0$. Nech $M, N \in \mathbb{N}$. Interval $(0, 1)$ prislúchajúci priestorovej premennej ζ funkcie ϑ_S bude tvoriť N deliacich bodov, zvyšných M deliacich bodov rozdelí interval prislúchajúci premennej ζ pre funkciu ϑ_L . Platia teda vzťahy

$$\Delta \zeta_S = \frac{1}{N} \quad \text{a} \quad \Delta \zeta_L = \frac{1}{M}, \quad (3.3)$$

kde $\Delta \zeta_S$ a $\Delta \zeta_L$ sú dĺžky priestorového kroku prislúchajúce jednotlivým rovniciam. Ďalej označme Q počet deliacich bodov časového intervalu. Potom analogicky

$$\Delta t = \frac{\tau}{Q}$$

Na základe predchádzajúceho definujeme časopriestorovú sieť

(i) *pre rovnicu (3.1)*

$$\begin{aligned} \zeta_i &:= (i-1)\Delta \zeta_S & i &= 1, 2, \dots, N+1 \\ t_j &:= (j-1)\Delta t & j &= 1, 2, \dots, Q+1 \end{aligned}$$

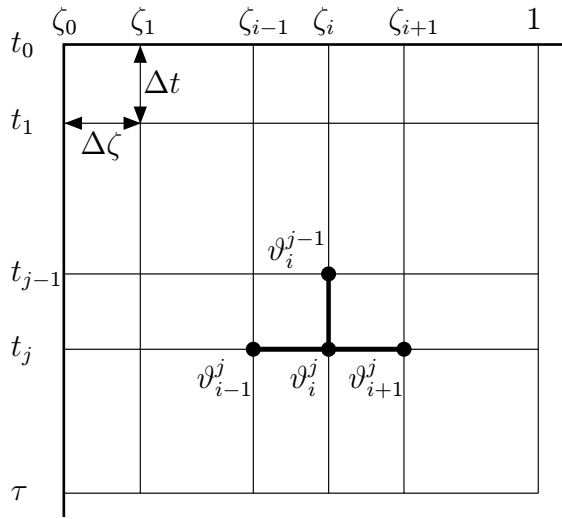
(ii) *pre rovnicu (3.2)*

$$\begin{aligned} \zeta_i &:= (i-1)\Delta \zeta_L & i &= 1, 2, \dots, M+1 \\ t_j &:= (j-1)\Delta t & j &= 1, 2, \dots, Q+1 \end{aligned}$$

Hodnotu numerického riešenia v uzle (i, j) budeme označovať

$$\vartheta_S(\zeta_i, t_j) \approx (\vartheta_S)_i^j \quad \text{resp.} \quad \vartheta_L(\zeta_i, t_j) \approx (\vartheta_L)_i^j$$

Súčasťou numerického riešenia je aj poloha fázového rozhrania (závislého len od časovej premennej), ktoré označíme $\nu(t_j) \approx \nu^j$.



Obr. 3.1: Sieť pozostávajúca z diskretizačných uzlov. Čas t je znázornený na vertikálnej, poloha ζ na vodorovnej osi. V sieti je zaznačený aj spôsob výpočtu teplôt ϑ v novej časovej vrstve.

3.2.2 Diskretizácia rovníc a odvodenie numerickej schémy

Rovnice (3.1) a (3.2) pred diskretizáciou prevedieme na vhodnejší tvar. Ich ekvivalentný zápis je

$$\nu^2 \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial t} = \nu \nu \zeta \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta} + \kappa_{SL} \frac{\partial^2 \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta^2}, \quad (3.4)$$

$$(1 - \nu)^2 \frac{\partial \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial \zeta^2} - \zeta(1 - \nu) \dot{\nu} \frac{\partial \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial \zeta}. \quad (3.5)$$

Pri ďalšej úprave rovníc (3.4), (3.5) využijeme nasledovné identity

$$\frac{1}{2} \frac{d\nu^2}{dt} = \nu \dot{\nu} \quad \text{a} \quad \frac{1}{2} \frac{d(1 - \nu)^2}{dt} = -(1 - \nu) \dot{\nu},$$

ktorých dosadením dostávame

$$\begin{aligned} \nu^2 \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial t} &= \kappa_{SL} \frac{\partial^2 \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta^2} + \frac{\zeta}{2} \frac{d\nu^2}{dt} \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta}, \\ (1 - \nu)^2 \frac{\partial \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial t} &= \frac{\partial^2 \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial \zeta^2} + \frac{\zeta}{2} \frac{d(1 - \nu)^2}{dt} \frac{\partial \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial \zeta}. \end{aligned}$$

Rovnakú úpravu použijeme aj pre Stefanovu podmienku, t.j.

$$\begin{aligned} K\nu \dot{\nu} &= k_{SL} \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta} \Big|_{1-} + \frac{\nu}{1 - \nu} \frac{\partial \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial \zeta} \Big|_{1-} \\ \frac{K}{2} \frac{d\nu^2}{dt} &= k_{SL} \frac{\partial \vartheta_S(\zeta, t)}{\partial \zeta} \Big|_{1-} + \frac{\nu}{1 - \nu} \frac{\partial \vartheta_L(\zeta, t)}{\partial \zeta} \Big|_{1-} \end{aligned} \quad (3.6)$$

Diskretizácia RVT pre tuhú fázu. Diferenciálne výrazy, obsiahnuté v rovnici, nahradíme aproximáciami v podobe konečných diferencií. Časové derivácie

funkcií ϑ_S a ν^2 aproximujeme spätnými diferenciami presnosti $\mathcal{O}(\Delta t)$

$$\frac{\partial \vartheta_S(\zeta_i, t_j)}{\partial t} \approx \frac{(\vartheta_S)_i^j - (\vartheta_S)_i^{j-1}}{\Delta t}, \quad \frac{d\nu^2(t_j)}{dt} \approx \frac{(\nu^j)^2 - (\nu^{j-1})^2}{\Delta t}$$

Priestorovú deriváciu nahradíme centrálnou diferenciou presnosti $\mathcal{O}(\Delta \zeta_S^2)$

$$\frac{\partial \vartheta_S(\zeta_i, t_j)}{\partial \zeta} \approx \frac{(\vartheta_S)_{i+1}^j - (\vartheta_S)_{i-1}^j}{2\Delta \zeta_S}.$$

Deriváciu druhého rádu podľa priestorovej premennej nahradíme diferenciou presnosti $\mathcal{O}(\Delta \zeta_S^2)$

$$\frac{\partial^2 \vartheta_S(\zeta_i, t_j)}{\partial \zeta^2} \approx \frac{(\vartheta_S)_{i+1}^j - 2(\vartheta_S)_i^j + (\vartheta_S)_{i-1}^j}{\Delta \zeta_S^2}.$$

Všetky uvedené aproximácie sú v vyjadrené v uzle (i, j) a nahradením derivácií dostaneme diferenčnú schému v uzle (i, j)

$$\begin{aligned} (\nu^j)^2 \frac{(\vartheta_S)_i^j - (\vartheta_S)_i^{j-1}}{\Delta t} = & \kappa_{SL} \frac{(\vartheta_S)_{i+1}^j - 2(\vartheta_S)_i^j + (\vartheta_S)_{i-1}^j}{\Delta \zeta_S^2} \\ & + \zeta_i \frac{(\nu^j)^2 - (\nu^{j-1})^2}{4\Delta t \Delta \zeta_S} [(\vartheta_S)_{i+1}^j - (\vartheta_S)_{i-1}^j]. \end{aligned}$$

Využitím vzťahu $i - 1 = \zeta_i / \Delta \zeta_S$ z definície časopriestorovej siete tak odvodzame

$$\begin{aligned} (\nu^j)^2 (\vartheta_S)_i^{j-1} = & \left\{ \frac{i-1}{4} [(\nu^j)^2 - (\nu^{j-1})^2] - \kappa_{SL} \mu_S \right\} (\vartheta_S)_{i-1}^j \\ & + [(\nu^j)^2 + 2\kappa_{SL} \mu_S] (\vartheta_S)_i^j \\ & - \left\{ \frac{i-1}{4} [(\nu^j)^2 - (\nu^{j-1})^2] + \kappa_{SL} \mu_S \right\} (\vartheta_S)_{i+1}^j, \end{aligned} \quad (3.7)$$

kde $\mu_S := \Delta t / \Delta \zeta_S^2$. Uvedenú diferenčnú rovnicu možno zapísať v tvare

$$(\vartheta_S)_i^{j-1} = L_{i-1}^j (\vartheta_S)_{i-1}^j + D_{i-1}^j (\vartheta_S)_i^j + U_{i-1}^j (\vartheta_S)_{i+1}^j, \quad i = 2, 3, \dots, N, \quad (3.8)$$

kde L_{i-1}^j, D_{i-1}^j resp. U_{i-1}^j sú príslušné koeficienty vystupujúce v (3.7) pri $(\vartheta_S)_{i-1}^j, (\vartheta_S)_i^j$ resp. $(\vartheta_S)_{i+1}^j$ predelené členom $(\nu^j)^2$. Podľa okrajových podmienok $(\vartheta_S)_1^j = \frac{T_B - T_S}{\Delta T}$ a $(\vartheta_S)_{N+1}^j = 0$ platí dosadením $i = 2$ a $i = N$ do vzťahu (3.8) nasledovné

$$\begin{aligned} (\vartheta_S)_2^{j-1} + \kappa_{SL} \mu_S \frac{T_B - T_S}{(\nu^j)^2 \Delta T} &= D_1^j (\vartheta_S)_2^j + U_1^j (\vartheta_S)_3^j, \\ (\vartheta_S)_N^{j-1} &= L_{N-1}^j (\vartheta_S)_{N-1}^j + D_{N-1}^j (\vartheta_S)_N^j. \end{aligned}$$

Rekurentný zápis (3.7) má spolu so zohľadnením okrajových podmienok maticové vyjadrenie

$$\mathbf{u}_S^{j-1} = \mathbf{M}_S^j (\boldsymbol{\vartheta}_S)^j, \quad (3.9)$$

pričom

$$\mathbf{M}_S^j = \begin{bmatrix} D_1^j & U_1^j & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ L_2^j & D_2^j & U_2^j & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & L_3^j & D_3^j & U_3^j & & 0 \\ & \vdots & & & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & L_{N-1}^j & D_{N-2}^j & U_{N-2}^j \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & L_{N-1}^j & D_{N-1}^j \end{bmatrix}, \quad (\boldsymbol{\vartheta}_S)^j = \begin{bmatrix} (\vartheta_S)_2^j \\ (\vartheta_S)_3^j \\ (\vartheta_S)_4^j \\ \vdots \\ (\vartheta_S)_N^j \end{bmatrix}.$$

\mathbf{M}_S^j je tridiagonálna s rozmermi $(N-1) \times (N-1)$. Vektor \mathbf{u}_S^{j-1} pozostáva zo zložiek $(u_2^{j-1}, \dots, u_N^{j-1})$ a platí

$$u_i^{j-1} = (\vartheta_S)_i^{j-1} + \kappa_{SL}\mu_S \frac{T_B - T_S}{(\nu^j)^2 \Delta T} \delta_{2,i}, \quad i = 2, 3, \dots, N$$

Medzi zložkami vektora $(\boldsymbol{\vartheta}_S)^j$ nie sú zahrnuté okrajové hodnoty $(\vartheta_S)_{1,N+1}^j$, pretože tieto sú pevne zadané a v čase sa nemenia. Zápis (3.9) je *implicitná numerická schéma* pre rovnicu (3.4).

Diskretizácia RVT pre kvapalnú fázu. Rovnicu (3.5) diskretizujeme rovnakým spôsobom ako (3.4), t.j. používame rovnaké typy konečných diferencií

$$(1 - \nu^j)^2 \frac{(\vartheta_L)_i^j - (\vartheta_L)_i^{j-1}}{\Delta t} = \frac{(\vartheta_L)_{i+1}^j - 2(\vartheta_L)_i^j + (\vartheta_L)_{i-1}^j}{\Delta \zeta_L^2} + \zeta_i \frac{(1 - \nu^j)^2 - (1 - \nu^{j-1})^2}{4\Delta t \Delta \zeta_L} [(\vartheta_L)_{i+1}^j - (\vartheta_L)_{i-1}^j]$$

čo možno upraviť na tvar

$$(1 - \nu^j)^2 (\vartheta_L)_i^{j-1} = \left\{ \frac{i-1}{4} [(1 - \nu^j)^2 - (1 - \nu^{j-1})^2] - \mu_L \right\} (\vartheta_L)_{i-1}^j + [2\mu_L + (1 - \nu^j)^2] (\vartheta_L)_i^j - \left\{ \frac{i-1}{4} [(1 - \nu^j)^2 - (1 - \nu^{j-1})^2] + \mu_L \right\} (\vartheta_L)_{i+1}^j \quad (3.10)$$

kde $\mu_L := \Delta t / \Delta \zeta_L^2$. Analogicky, ako v predchádzajúcom prípade možno túto diferenčnú rovnicu zapísať v maticovom tvare

$$\mathbf{u}_L^{j-1} = \mathbf{M}_L^j (\boldsymbol{\vartheta}_L)^j$$

Teraz má \mathbf{M}_L^j rozmery $(M-1) \times (M-1)$, avšak má rovnakú štruktúru ako \mathbf{M}_S^j , pričom teraz pre príslušné diagonálne a mimodiagonálne prvky platí v zmysle (3.10)

$$\begin{aligned} L_{i-1}^j &= \frac{i-1}{4} [(1-\nu^j)^2 - (1-\nu^{j-1})^2] - \mu_L, \\ D_{i-1}^j &= 2\mu_L + (1-\nu^j)^2, \\ U_{i-1}^j &= \frac{i-1}{4} [(1-\nu^j)^2 - (1-\nu^{j-1})^2] + \mu_L. \end{aligned}$$

Vektor \mathbf{u}_L podobne

$$u_i^{j-1} = (\vartheta_L)_i^{j-1} + \frac{\mu_L}{(1-\nu^j)^2} \delta_{2,i}, \quad i = 2, 3, \dots, M$$

Treba poznamenať, že matice \mathbf{M}_S^j ani \mathbf{M}_L^j nie sú symetrické a prvky usporiadané nad a pod diagonálou sú závislé od hodnoty i .

Diskretizácia podmienky na rozhraní. Jednostranné derivácie, ktoré sa vyskytujú v podmienke (3.6) budeme aproximovať spätnou diferenciou presnosti $\mathcal{O}(\Delta\zeta_L^2)$ resp. $\mathcal{O}(\Delta\zeta_S^2)$

$$\left. \frac{\partial \vartheta_n(\zeta, t)}{\partial \zeta} \right|_{1-} = \frac{(\vartheta_n)_{N-1}^j - 4(\vartheta_n)_N^j + 3(\vartheta_n)_{N+1}^j}{2\Delta\zeta_n} + \mathcal{O}(\Delta\zeta_n^2),$$

kde $n = S$ alebo $n = L$. Člen $(\vartheta_n)_{N+1}^j$ zodpovedá fázovému rozhraniu, kde platí $(\vartheta_n)_{N+1}^j = 0$. Na aproximáciu časovej derivácie funkcie ν^2 používame rovnakú diferenciu ako pri diskretizácii RVT pre tuhú fázu.

Dosadením diferencií do (3.6) možno odvodiť vzťah

$$\begin{aligned} & (\nu^j)^3 - (\nu^j)^2 + \\ + \nu^j & \left\{ \frac{\mu_L}{K} [(\vartheta_L)_{N-1}^j - 4(\vartheta_L)_N^j] - \frac{\mu_S k_{SL}}{K} [(\vartheta_S)_{N-1}^j - 4(\vartheta_S)_N^j] - (\nu^{j-1})^2 \right\} + \\ & + (\nu^{j-1})^2 + \frac{\mu_S k_{SL}}{K} [(\vartheta_S)_{N-1}^j - 4(\vartheta_S)_N^j] = 0 \end{aligned}$$

Na pravej strane rovnosti je kubický polynóm a k výpočtu polohy fázového rozhrania ν^j v novej časovej vrstve je potrebné určiť jeho korene. Pre tieto môžu teoreticky nastať dve možnosti

1. jeden koreň je reálny a zvyšné dva sú komplexne združené
2. všetky tri korene sú reálne

V prvom prípade volíme za ν^j jediný reálny koreň a pokračujeme ďalšou časovou vrstvou. V druhom prípade možno využiť spojitosť časového vývoja rozhrania, keďže predpokladáme hladkosť $\nu \in C^1(0, \infty)$. Potom za ν^j volíme koreň, ktorý je najbližšie k ν^{j-1} vzhľadom na štandardnú euklidovskú metriku. Bližšie informácie o voľbe koreňa možno nájsť v nasledovnej časti.

3.3 Programová realizácia

Všetky simulácie boli vykonané v systéme MATLAB podľa nasledovného algoritmu:

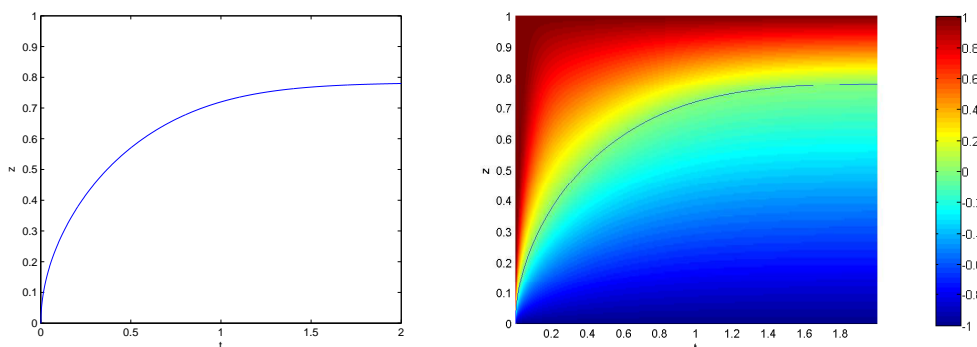
- 1° definovanie rozmerov N , M , T , konštánt a začiatkovej iterácie
 $Nu(1)$
 $Sol(i, 1)$ pre $i=1:N-1$
 $Liq(i, 1)$ pre $i=1:M-1$
- 2° hlavný cyklus $j=1:Time$
 výpočet $Nu(j+1)$ pomocou $Nu(j)$, Sol a Liq
 výpočet $Sol(:, j+1)$ a $Liq(:, j+1)$ v novej časovej vrstve
- 3° priradenie $j=j+1$ a návrat do bodu 2°

Hodnota T určuje počet časových vrstiev, N , M sú počty deliacich bodov v tuhej, resp. kvapalnej fáze. Poloha fázového rozhrania sa ukladá do vektora Nu . V kroku 2° sa hľadajú korene kubického polynómu prostredníctvom dostupnej funkcie `roots()`, ktorej argument je štvorzložkový vektor tvorený koeficientami príslušného polynómu.

Pre účely programovej realizácie sme zvolili počiatkovú polohu fázového rozhrania $Nu(1)=10^{-4}$, aby mohol byť proces odštartovaný. Keďže v pôvodnej forme modelu, v počiatkovom čase $t = 0$ neexistuje tuhá fáza, rovnica (3.1) pre $t = 0$ nemá počiatkové podmienky. Pri numerickom riešení však v čase $t = 0$ uvažujeme aj prítomnosť tuhej fázy s rozhraním $\nu > 0$, pričom volíme lineárne rozloženie teplôt pre tuhú fázu

$$i=1, \dots, N-1: \quad Sol(i) = T_b - (i-1) \frac{T_b}{N-2},$$

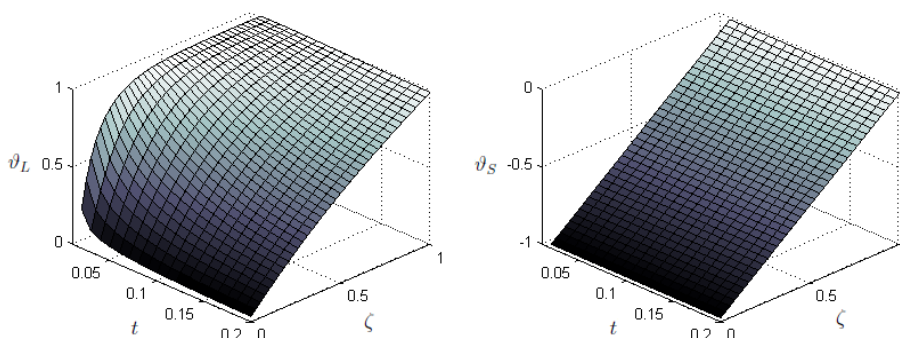
kde T_b je bezrozmerná teplota na dolnej hranici. Kvapalná fáza je prítomná už v $t = 0$, počiatkové podmienky pre (3.2) sú teda dobre definované.



Obr. 3.2: Vľavo - časový priebeh fázového rozhrania. Vpravo - časový vývoj teplotného profilu so znázorneným fázovým rozhraním.

3.3.1 Výsledky numerického experimentu

Rovnice (3.1) a (3.2) riešime na rovnakej oblasti² $(\zeta, t) \in (0, 1) \times (0, 1)$. Počet deliacich bodov, dĺžky krokov spolu s ďalšími vstupnými parametrami sú zhrnuté v Tabuľke 3.1. Numerické riešenie je znázornené na Obrázku 3.4. Ako vidno, približné riešenie ϑ_L sa v čase viditeľne mení, naopak ϑ_S sa v čase mení len minimálne. Toto je spôsobené transformáciami a voľbou fyzikálnych parametrov.



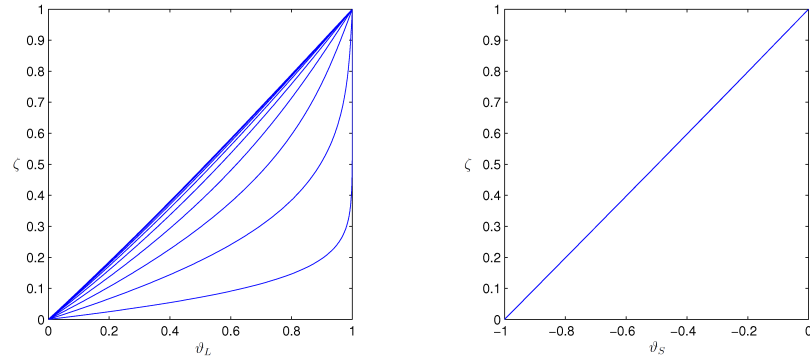
Obr. 3.3: Numerické riešenie transformovanej RVT, vľavo pre kvapalnú fázu, vpravo pre tuhú fázu.

Časový vývoj polohy fázového rozhrania je znázornený na Obrázku 3.2. S narastajúcim časom sa fázové rozhranie ušľahuje na istej hodnote, v závislosti od vstupných parametrov.

Parametre delenia siete			
Dĺžka priestorového kroku	$\Delta\zeta_S$		$2.5 \cdot 10^{-3}$
Dĺžka priestorového kroku	$\Delta\zeta_L$		$2.5 \cdot 10^{-3}$
Dĺžka časového kroku	Δt		10^{-3}
Počet deliacich bodov	N		400
Počet deliacich bodov	M		400
Fyzikálne parametre			
Počiatočná teplota systému	T_0	283.15	K
Teplota na dolnej ochladenej hranici	T_B	263.15	K
Teplota na fázovom rozhraní	T_S	273.15	K
Hustota	ρ	999.83	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$
Merná tepelná kapacita vody	C_L	4.18	$\text{J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{kg}^{-1}$
Merná tepelná kapacita ľadu	C_S	2.11	$\text{J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{kg}^{-1}$
Súčiniteľ tepelnej vodivosti vody	k_L	0.61	$\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
Súčiniteľ tepelnej vodivosti ľadu	k_S	2.20	$\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
Merné latentné teplo	L	334.00	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$

Tabuľka 3.1: Vstupné parametre úlohy

²Horné obmedzenie pre časový interval $\tau = 1$.



Obr. 3.4: Časové rezy riešením transformovanej RVT, vľavo pre kvapalnú fázu, vpravo pre tuhú fázu. Postupne po 10, 50, 100, 150, 200, 250, 300, 350 a 400 časových krokoch.

3.3.2 Analýza konvergenie numerického riešenia

Cieľom tejto časti je skúmať konvergenciu numerického riešenia k stacionárnemu stavu. Stacionárne riešenie je riešenie rovníc (2.7)–(2.10) s vlastnosťou, že sa v čase nemení. Toto riešenie obsahuje limitnú polohu fázového rozhrania, ktorá sa nachádza niekde v intervale $(0, 1)$, v závislosti od voľby fyzikálnych konštánt, ovplyvňujúcich vlastnosti fázovej premeny. Ďalej zahŕňa limitné rozloženie teplôt pre kvapalnú a tuhú fázu. Keďže stacionárne riešenie sa v čase nemení, možno ho vyjadriť ako funkciu len priestorovej premennej $\hat{T} = \hat{T}(z)$ a fázové rozhranie konštantou $\hat{\nu} \in (0, 1)$. Potom platí

$$\forall z \in (0, 1) : \frac{\partial \hat{T}(z)}{\partial t} = 0 \quad \text{a} \quad \frac{d\hat{\nu}}{dt} = 0.$$

Dosadením do rovníc (2.7) a (2.8) je

$$\frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial z^2} = 0, \quad z \in (0, \hat{\nu}), \quad (3.11)$$

$$\kappa_{SL} \frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial z^2} = 0, \quad z \in (\hat{\nu}, 1), \quad (3.12)$$

$$\kappa_{SL} \left. \frac{\partial \hat{T}}{\partial z} \right|_{\hat{\nu}^-} - \left. \frac{\partial \hat{T}}{\partial z} \right|_{\hat{\nu}^+} = 0, \quad (3.13)$$

spolu s okrajovými podmienkami a podmienkami na rozhraní

$$\hat{T}(\hat{\nu}) = 0, \quad \hat{T}(0) = \frac{T_B - T_S}{\Delta T}, \quad \hat{T}(1) = 1. \quad (3.14)$$

Riešením týchto rovníc možno jednoducho nájsť stacionárne riešenie $\hat{T} = \hat{T}(z)$ a konštantu $\hat{\nu}$. Uvažujme $z \in (0, \hat{\nu})$, potom \hat{T} možno určiť z prvej rovnice dvojnásobným integrovaním. Rovnako pre druhú rovnicu a teda funkcia \hat{T} má tvar

$$\hat{T}(z) = \begin{cases} A_1 z + A_2, & z \in (0, \hat{\nu}) \\ B_1 z + B_2, & z \in (\hat{\nu}, 1) \end{cases}$$

kde A_1, B_1, A_2, B_2 sú konštanty. Pre jednostranné derivácie z rovnice (3.13) platí

$$k_{SL} \left. \frac{\partial \hat{T}}{\partial z} \right|_{\hat{\nu}^-} - \left. \frac{\partial \hat{T}}{\partial z} \right|_{\hat{\nu}^+} = k_{SL} A_1 - B_1.$$

Uvážením okrajových podmienok (3.14) pre funkciu \hat{T} dostávame nelineárny systém piatich rovníc o piatich neznámých A_1, A_2, B_1, B_2 a $\hat{\nu}$

$$\begin{aligned} A_2 &= \frac{T_B - T_S}{\Delta T}, \\ A_1 \hat{\nu} + A_2 &= 0, \\ B_1 \hat{\nu} + B_2 &= 0, \\ B_1 + B_2 &= 1, \\ k_{SL} A_1 - B_1 &= 0, \end{aligned}$$

ktorého riešením je

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{1}{k_{SL}} - \frac{T_B - T_S}{\Delta T}, & A_2 &= \frac{T_B - T_S}{\Delta T}, \\ B_1 &= 1 - k_{SL} \frac{T_B - T_S}{\Delta T}, & B_2 &= k_{SL} \frac{T_B - T_S}{\Delta T}, \\ \hat{\nu} &= \frac{k_{SL}(T_B - T_S)}{k_{SL}(T_B - T_S) - \Delta T}. \end{aligned}$$

3.3.2.1 Spätná transformácia

Vypočítané numerické riešenie je pre obe fázy známe len v diskretných bodoch $(\zeta_{S,L})_i$ intervalu $(0, 1)$. Pre porovnanie stacionárneho a priebežného riešenia je potrebné vyčíslieť hodnotu približného riešenia aj medzi uvedenými diskretnými bodmi. Vzťah medzi $\vartheta_{S,L}$ a pôvodnou funkciou³ T je

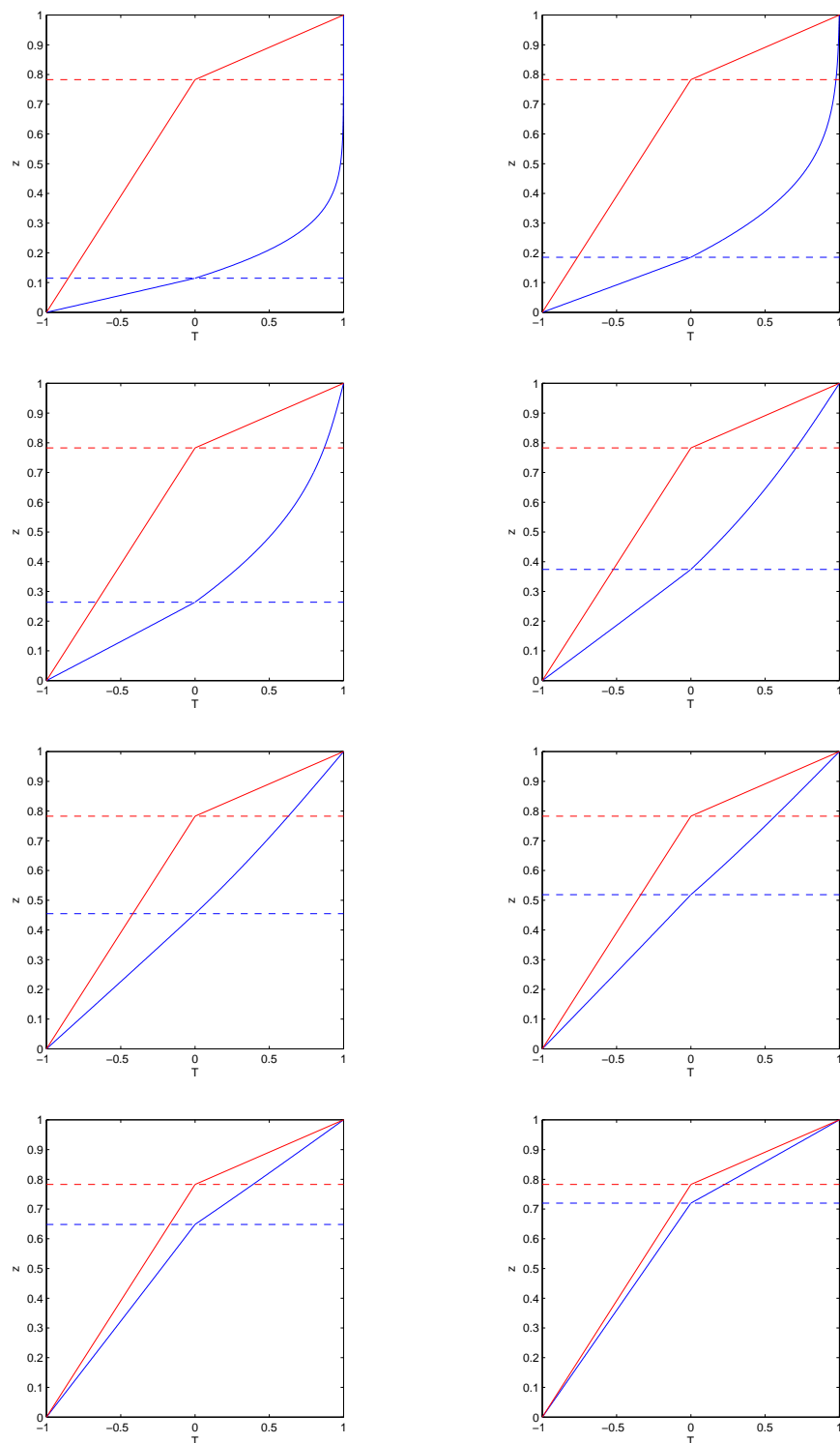
$$T(z, t) = \begin{cases} \vartheta_S \left(\frac{z}{\nu}, t \right), & z \in \tilde{\Omega}_S \\ \vartheta_L \left(\frac{1-z}{1-\nu}, t \right), & z \in \tilde{\Omega}_L \end{cases}$$

Na takú aproximáciu sme medzi každými dvoma bodmi $(\zeta_{S,L})_i, (\zeta_{S,L})_j$ použili kubický splajn. Vďaka tomu možno vyčíslieť približnú hodnotu funkcie T v ľubovoľnom bode z (viac o kubickom splajne v Apendix A.2).

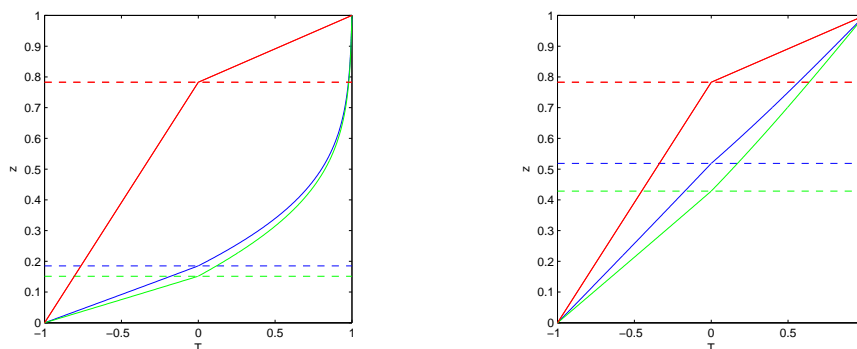
Časový priebeh rozloženia teplôt a konvergencia k stacionárnemu stavu sú pre zadané parametre z Tabuľky 3.1 znázornené na Obrázkoch 3.5.

Hodnota latentného tepla je $334.00 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$. Zmena tejto veličiny stacionárne riešenie nemení, avšak ovplyvňuje rýchlosť konvergencie k stacionárnemu stavu. Pre $L > 334.00$ sa konvergencia k stacionárnemu stavu spomaľuje, pretože na usku-točnenie fázovej premeny bude potrebné uvoľniť viac tepla. Naopak, ak zvolíme $L < 334.00$ tak sa konvergencia zrýchli, pretože k fázovej premene dôjde pri uvoľnení menšieho objemu tepla. Situácia pre $L = 534.00$ je znázornená na Obrázku 3.6, pre $L = 134.00$ je na Obrázku 3.7.

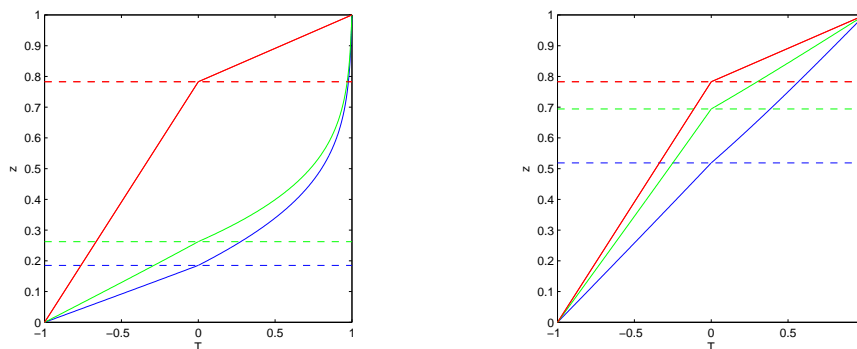
³Pod pôvodnou chápeme bezrozmerný tvar.



Obr. 3.5: Znázornenie konvergence k stacionárnemu riešeniu. Rozloženie teploty T postupne zhora nadol v (bezrozmernom) čase 0.02, 0.05, 0.10, 0.20, 0.30, 0.40, 0.70 a 1.00 (to zodpovedá časovým iteráciám 20, 50, 100, 200, 300, 400, 700 a 1000). Červenou je vyznačené stacionárne riešenie, modrou priebežné riešenie v danom časovom okamihu. Prerušovanou čiarou je vyznačená poloha fázového rozhrania.



Obr. 3.6: Prvý obrázok zachytáva stav po 50, druhý po 400 krokoch. Červenou je vyznačené stacionárne riešenie, modrou priebežné riešenie s latentným teplom $L = 334.00$ a zelenou je priebežné riešenie so zvýšeným latentným teplom $L = 534.00$.



Obr. 3.7: Prvý obrázok zachytáva stav po 50, druhý po 400 krokoch. Červenou je vyznačené stacionárne riešenie, modrou priebežné riešenie s latentným teplom $L = 334.00$ a zelenou je priebežné riešenie so zníženým latentným teplom $L = 134.00$.

Iterácia	$L = 534.00$	$L = 334.00$	$L = 134.00$
100	0.2168147699	0.2651072648	0.3763977978
200	0.3066340557	0.3747141171	0.5290429577
300	0.3740702712	0.4554865823	0.6294191935
400	0.4288227024	0.5191151995	0.6945764493
500	0.4750060522	0.5708175218	0.7347678336
600	0.5148490381	0.6134117821	0.7578572091
700	0.5496805543	0.6485930645	0.7702841900
800	0.5803590027	0.6775175164	0.7766690186
900	0.6074780567	0.7010762784	0.7798588599
1000	0.6314731143	0.7200294871	0.7814283695
1100	0.6526812269	0.7350678147	0.7821945855
1300	0.6877962838	0.7559136035	0.7827480181
1500	0.7146283603	0.7680661388	0.7828782024
1700	0.7346938035	0.7748848991	0.7829087729
1900	0.7493576290	0.7786159901	0.7829159487
∞	0.7829181494	0.7829181494	0.7829181494

Tabuľka 3.2: Časový vývoj polohy fázového rozhrania v závislosti od voľby L .

Záver

V práci bol predstavený zjednodušený model fázovej premeny jednozložkovej kvapaliny v konečnej oblasti ako úloha s voľnou hranicou. Zjednodušenia spočívali v jednorozmernom pohľade na problém a obmedzení niektorých fyzikálnych činiteľov, ktoré majú v reálnom svete opodstatnenie. Keďže v prípade konečnej oblasti nie je známe explicitné riešenie príslušných rovníc popisujúcich uvedený problém, je nutné riešiť ich numericky. Pre samotné numerické riešenie úlohy nami zvolenou metódou, bolo potrebné previesť úlohu s voľnou hranicou na úlohu s fixnou hranicou. Následné riešenie spočívalo v odvodení implicitnej numerickej schémy, z ktorej možno nájsť riešením systému algebraických rovníc aproximáciu presného riešenia. Po zostavení základného algoritmu sme skúmali časový vývoj riešenia. Toto riešenie konvergovalo k stacionárnemu stavu, ktorého tvar je rôzny pre rôzne hodnoty vstupných parametrov. Primárne sme volili parametre pre vodu H_2O a následne sme pozorovali vplyv zmeny latentného tepla na konvergenciu riešenia. Všetky numerické experimenty boli vykonané v systéme Matlab®.

Literatúra

- [Kys10] KYSELICA, J.: *Analýza globálnej stability fázového rozhrania*, Diplomová práca FMFI UK, Bratislava 2010
- [Hup89] HUPPERT, H. E.: *The fluid mechanics of solidification*, J. Fluid Mech., 209-240
- [Bae06] BAEHR H.D., STEPHAN, K.: *Heat and Mass Transfer*, Springer, Nemecko 2006
- [Cra75] CRANK, J.: *Mathematics of Diffusion*, Oxford University Press, Veľká Británia 1975
- [Cra87] CRANK, J.: *Free and Moving Boundary Problems*, Oxford University Press, Veľká Británia 1987
- [Gup03] GUPTA, S.C.: *The Classical Stefan Problem*, Elsevier Science, Holandsko 2003
- [Jij09] JIJ, L.M.: *Heat Conduction*, Springer, USA 2009
- [Til04] TILLEY, R.J.D.: *Understanding Solids*, John Wiley and Sons, USA 2004
- [Ale93] ALEXIADES, V., SOLOMON, A.: *Mathematical modeling of melting and freezing processes*, Taylor & Francis, USA 1993
- [Mei92] MEIRMANOV, A. M.: *The Stefan Problem*, Walter de Gruyter, Nemecko 1992
- [Vei78] VEIS, Š. A KOL.: *Mechanika a molekulová fyzika*, Alfa, Bratislava 1978
- [Sev08] ŠEVČOVIČ, D.: *Parciálne diferenciálne rovnice a ich aplikácie*, Vydavateľstvo IRIS, spol. s r. o., Bratislava 2008
- [Bab99] BABUŠÍKOVÁ, J. A KOL.: *Numerické metódy*, učebný text FMFI UK, Bratislava 2008
- [Rec04] RECKTENWALD, G. W.: *Finite-Difference Approximations to the Heat Equation*, USA 2004
- [Blu06] BLUM, E. K. A KOL.: *Mathematics of Physics and Engineering*, World Scientific 2006
- [Web01] ime.fme.vutbr.cz/Files/Vyuka/BUM/07-BUM.ppt
- [Web02] www.win.tue.nl/casa/meetings/special/ecmi08/snow-melting.pdf

Apendix A

A.1 Gauss-Ostrogradského veta

Veta. Nech $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ je ohraničená oblasť s hranicou $\partial\Omega$ pozostávajúcou z konečného počtu hladkých orientovaných plôch. Nech $\mathbf{F} = (F_x, F_y, F_z)$ je vektorové pole, ktorého komponenty F_x, F_y, F_z majú spojité prvé parciálne derivácie na oblasti obsahujúcej Ω . Potom platí

$$\oint_{\partial\Omega} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \, dS = \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{F} \, d\Omega$$

kde \mathbf{n} je vektor vonkajšej normály k hranici $\partial\Omega$. Ak Ω pozostáva z konečného počtu častí, potom je integrál na pravej strane rovný súčtu integrálov prislúchajúcich jednotlivým častiam.

Gauss-Ostrogradského veta sa často objavuje pri odvodzovaní rovníc matematickej fyziky, napr. v dynamike kvapalín. V literatúre sa tiež označuje samostatne ako *Gaussova veta* alebo *Ostrogradského veta*. V anglickej literatúre pod názvom *Divergence theorem*.

A.2 Kubický interpolačný splajn

Splajn je vo všeobecnosti po častiach polynomická funkcia s vlastnosťou, že má spojité derivácie do istého rádu. Pomocou splajnu možno aproximovať spojitú funkciu na základe znalosti jej funkčných hodnôt v uzloch

$$x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n.$$

Definícia. Hovoríme, že $S : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ je kubický interpolačný splajn, ak

1. $S|_{[x_{i-1}, x_i]} \in \mathcal{P}_3$
2. $S \in C^2([a, b])$
3. $s(x_i) = y_i$ pre $i = 0, 1, 2, \dots, n$

Ak je daných $n+1$ bodov, potom na určenie kubického splajnu S treba určiť predpisy n kubických polynómov - reštrikcií S na interval $[x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, 2, \dots, n$. Spolu teda treba nájsť hodnoty $4n$ koeficientov. Z definičných vlastností je: $n+1$ podmienok z interpolácie, $n-1$ podmienok zo spojitosti S , $n-1$ podmienok zo spojitosti 1. derivácie S , $n-1$ podmienok zo spojitosti 2. derivácie S . Spolu máme $4n-2$ podmienok. Zvyšné 2 podmienky sú v závislosti na type

- $S''(x_0) = S''(x_n) = 0$ pre prirodzený kubický splajn
- $S'(x_0) = y'_0, S'(x_n) = y'_n$ pre obyčajný kubický splajn

V systéme Matlab® je prítomná funkcia `spline`, ktorá vytvára kubický splajn zo zadaných uzlov $[x_i, y_i]$.

Apendix B

Zdrojový kód Matlab®

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Definovanie konštánt, siete a počiatočných stavov
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

N=400;
M=400;
t_Max=1;
t_Step=10^(-3);
Zeta_Step_S=1/N;
Zeta_Step_L=1/M;
Mu_S=t_Step/(Zeta_Step_S)^2;
Mu_L=t_Step/(Zeta_Step_L)^2;
T_0=283.15;
T_S=273.15;
Delta_T=T_0-T_S;
Tb=(263.15-T_S)/Delta_T;
Rho=999.83;
C_L=4.18;
C_S=2.11;
K_L=0.61;
K_S=2.20;
K_SL=K_S/K_L;
Kappa_L=K_L/(C_L*Rho);
Kappa_S=K_S/(C_S*Rho);
Kappa_SL=Kappa_S/Kappa_L;
Latent=334;
K=Rho*Latent*Kappa_L/(K_L*Delta_T);
Nu_Previous=0.0001;
Nu_Next=0;
Time=1000;
for i=1:N-1
    Sol(i)=Tb-(i-1)*(Tb/(N-2));
```

```

end
Sol=Sol';
Liq=ones(M-1,1);

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Základný cyklus
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
for j=1:Time
    Coef1=1;
    Coef2=-1;
    Coef3=(t_Step/(K*Zeta_Step_L))*(Liq(N-2)-4*Liq(N-1))
        -(K_SL*t_Step/(Zeta_Step_S*K))*(Sol(N-2)-4*Sol(N-1))-Nu_Previous^2;
    Coef4=Nu_Previous^2+(K_SL*t_Step/(K*Zeta_Step_S))*(Sol(N-2)-4*Sol(N-1));
    Roots=roots([Coef1,Coef2,Coef3,Coef4]);
    if sum(Roots>Nu_Previous & Roots<1)==0
        Nu_Next=-min(abs(Roots));
    else
        Roots=Roots(Roots>Nu_Previous & Roots<1);
        Nu_Next=min(Roots);
    end
    end
    Matrix=0;
    for i=2:N
        L(((i-1)/4)*(Nu_Next^2-Nu_Previous^2)-Kappa_SL*Mu_S)/(Nu_Next^2);
        D=(Nu_Next^2+2*Kappa_SL*Mu_S)/(Nu_Next^2);
        U=(-Kappa_SL*Mu_S-((i-1)/4)*(Nu_Next^2-Nu_Previous^2))/(Nu_Next^2);
        if i==2
            Matrix(i-1,i-1)=D;
            Matrix(i-1,i)=U;
        elseif i==N
            Matrix(i-1,i-2)=L;
            Matrix(i-1,i-1)=D;
        else
            Matrix(i-1,i-2)=L;
            Matrix(i-1,i-1)=D;
            Matrix(i-1,i)=U;
        end
    end
    end
    Sol(1)=Sol(1)+Kappa_SL*Mu_S*Tb/(Nu_Next^2);
    Sol=Matrix\ Sol;
    Matrix=0;
    for i=2:M
        L(((i-1)/4)*((1-Nu_Next)^2-(1-Nu_Previous)^2)-Mu_L)/((1-Nu_Next)^2);
        D=(2*Mu_L+(1-Nu_Next)^2)/((1-Nu_Next)^2);
        U=(-Mu_L-((i-1)/4)*((1-Nu_Next)^2-(1-Nu_Previous)^2))/((1-Nu_Next)^2);

```

```
    if i==2
        Matrix(i-1,i-1)=D;
        Matrix(i-1,i)=U;
    elseif i==M
        Matrix(i-1,i-2)=L;
        Matrix(i-1,i-1)=D;
    else
        Matrix(i-1,i-2)=L;
        Matrix(i-1,i-1)=D;
        Matrix(i-1,i)=U;
    end
end
Liq(1)=Liq(1)+Mu_L/((1-Nu_Next)^ 2);
Liq=Matrix\Liq;
Nu_Previous=Nu_Next;
end
```