

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE  
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky  
Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky



---

# ANALÝZA GLOBÁLNEJ STABILITY FÁZOVÉHO ROZHRAŇIA

---

Diplomová práca

Juraj Kyselica

9.1.9 Aplikovaná matematika  
Ekonomická a finančná matematika

Školiteľ:  
Doc. Mgr. Peter Guba, PhD.

BRATISLAVA 2010

# ANALÝZA GLOBÁLNEJ STABILITY FÁZOVÉHO ROZHRANIA

Juraj Kyselica

E-mail: *juraj.kyselica@gmail.com*

Doc. Mgr. Peter Guba, PhD.

E-mail: *peter.guba@fmph.uniba.sk*

Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky

Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

Univerzita Komenského v Bratislave

Mlynská dolina, 846 48 Bratislava

Slovenská republika

---

©2010 Juraj Kyselica

Design ©2010 Vladimír Lacko (*lackovladimir@gmail.com*)

Diplomová práca z 9.1.9 Aplikovaná matematika

Dátum kompilácie: 26. apríla 2010

Typeset in L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X

## Abstrakt

Práca sa zaoberá analytickou a numerickou analýzou globálnej stability v dynamike kvapalín. Teoretická časť práce je venovaná tzv. metóde energie, ktorej hlavným nástrojom je variačný počet. Použitím tejto metódy je analyzovaný problém toku viskózne nestlačiteľnej kvapaliny a problém tepelnej konvekcie. Druhá časť práce sa zaoberá modelom difúzneho tuhnutia binárneho systému, popísaného systémom difúzných rovníc s voľným fázovým rozhraním. Po transformácii uvedeného problému na problém s fixnou hranicou je odvodená implicitná numerická schéma na jeho riešenie a následne simulovaný vývoj porúch fázového rozhrania a teplotného a koncentračného poľa.

**Kľúčové slová:** metóda energie • variačný počet • tuhnutie binárneho systému • difúzne rovnice • úloha s pohyblivou hranicou • transformácia na fixnú hranicu • metóda konečných diferencií

## Abstract

This thesis deals with the analytical and numerical analyses of stability in fluid dynamics. The theoretical part of thesis focuses on the method of energy, making use of variational calculus. Then, the problem of viscous incompressible flow and the problem of thermal convection are analysed by this method. In the second part of the thesis we derive a numerical scheme for solving the problem of binary alloy solidification and this scheme is then used for simulation of the evolution of perturbed phase interface and temperature and concentration fields.

**Keywords:** method of energy • variational calculus • binary alloy solidification • diffusion equations • the moving boundary problem • fixed boundary transformation • finite difference method

**AMS Subject Classification:** AMSSC 1 • AMSSC 2.

Prehlasujem, že som diplomovú prácu vypracoval samostatne s využitím svojich poznatkov a s použitím uvedenej literatúry.

V Bratislave 26. apríla 2010

.....  
Juraj Kyselica

Touto cestou by som chcel poďakovať môjmu školiteľovi

Doc. Mgr. Petrovi Gubovi, PhD.

za ochotu, pomoc pri zaobstaraní potrebnej literatúry a za všetok svoj čas a námahu,  
ktoré vynaložil, aby ma viedol pri písaní tejto práce.

Ďakujem.

# Obsah

Úvod	1
Zoznam použitých symbolov	4
<b>1 Prehľad literatúry a súčasný stav problematiky</b>	<b>5</b>
<b>2 Ciele diplomovej práce</b>	<b>7</b>
<b>3 Teória globálnej stability v dynamike kvapalín</b>	<b>8</b>
3.1 Globálna stabilita toku viskózne, nestlačiteľnej kvapaliny . . . . .	8
3.1.1 Navierove–Stokesove rovnice. Transformácia na bezrozmerný tvar . . . . .	9
3.1.2 Energia poruchy základného stavu . . . . .	10
3.1.3 Variačná formulácia problému. Eulerova–Lagrangeova rovnica	11
3.1.4 Kritická hodnota čísla $Re$ ako minimálna vlastná hodnota Eulerovej–Lagrangeovej rovnice . . . . .	13
3.2 Tepelná konvekcia. Globálna stabilita nestacionárnych, difúzne riadených základných stavov . . . . .	13
3.2.1 Boussinesqove rovnice. Transformácia na bezrozmerný tvar . .	14
3.2.2 Identity pre energiu poruchy . . . . .	16
3.2.3 Variačná formulácia. Eulerove–Lagrangeove rovnice . . . . .	17
3.2.4 Problém optimálnej hranice stability . . . . .	21
<b>4 Difúzne tuhnutie dvojrozmerného binárneho systému z rovinatej hranice</b>	<b>23</b>
4.1 Fázový diagram binárneho systému . . . . .	23
4.2 Matematický model difúzneho tuhnutia binárneho systému . . . . .	25
4.2.1 Idealizovaný fázový diagram . . . . .	25
4.2.2 Formulácia úlohy s voľnou hranicou . . . . .	25
4.3 Transformácia rovníc do bezrozmernej formy . . . . .	28
4.4 Transformácia oblasti s pohyblivou hranicou na oblasť s fixnou hranicou	29
4.5 Jednorozmerný základný stav pre problém difúzneho tuhnutia binárneho systému . . . . .	31
4.5.1 Bezrozmerné rovnice pre jednorozmerný základný stav v pôvodných a transformovaných premenných . . . . .	31
4.5.2 Analytické riešenie transformovaných bezrozmerných rovníc .	32

4.5.3	Numerická reprodukcia základného stavu . . . . .	35
<b>5</b>	<b>Analýza globálnej stability fázového rozhrania</b>	<b>39</b>
5.1	Analytická analýza globálnej stability aplikáciou metódy energie . . .	39
5.2	Numerická analýza globálnej stability . . . . .	39
5.2.1	Odvodenie implicitnej schémy . . . . .	39
5.2.2	Programová realizácia . . . . .	43
5.2.3	Numerické simulácie . . . . .	47
	<b>Záver</b>	<b>53</b>
	<b>Literatúra</b>	<b>54</b>
	<b>Appendix A</b>	<b>56</b>
A.1	Integrálne identity . . . . .	56
A.2	Reynoldsova transportná veta . . . . .	56
A.3	Základné lemy variačného počtu . . . . .	57
A.4	Transformácia na pevnú oblasť . . . . .	57
	<b>Appendix B</b>	<b>59</b>
B.1	Zdrojové kódy v jazyku Matlab . . . . .	59
B.1.1	Numerické riešenie dvojrozmerného problému difúzneho tuhnutia binárneho systému . . . . .	59
B.1.2	Explicitné riešenie pre jednorozmerný základný stav (podprogramy využité pri riešení dvojrozmerného problému) . . . . .	72

# Úvod

Časovo-priestorový vývoj fyzikálnych systémov je často charakterizovaný prostredníctvom *parciálnych diferenciálnych rovníc*. Jednou z kľúčových otázok, ktoré si kladieme pri analýze týchto systémov, je otázka ich *stability*, t.j. ako je budúce správanie systému ovplyvnené odchýlkami od jeho aktuálneho (základného) stavu. Zaujíma nás predovšetkým, za akých podmienok majú tieto odchýlky tendenciu zaniknúť v čase. Pri samotnej matematickej analýze stability je dôležité stanoviť charakter uvažovaných (prípustných) porúch — t.j. či nás zaujíma stabilita voči dostatočne malým (infinitezimálnym) poruchám alebo poruchám ľubovoľne veľkým. V prvom prípade hovoríme o *lineárnej* stabilite, v druhom prípade o *globálnej* stabilite uvažovaného systému. Formálne možno uvedený problém charakterizovať ako problém stability samotných riešení príslušných parciálnych diferenciálnych rovníc.

*Tuhnutie kvapaliny* je proces, pri ktorom dochádza k zmene kvapalného skupenstva na tuhé. Aby k tejto zmene mohlo dôjsť, je potrebné, aby bolo určité množstvo tepla z kvapaliny uvoľnené a odvedené preč: najskôr je potrebné ochladiť danú kvapalinu na teplotu tuhnutia, ďalším ochladzovaním dochádza k samotnej premene skupenstva. Keďže k odvádzaniu tepla dochádza aj v dôsledku prúdenia prítomného v kvapaline, je dynamika kvapalín dôležitým faktorom ovplyvňujúcim proces tuhnutia. Samotný tok však tuhnutie nielen ovplyvňuje, ale môže byť jeho priamym dôsledkom. Pri ochladzovaní kvapaliny totiž dochádza k vzniku teplotných gradientov a tie majú za následok vznik vztlakových síl vyvolávajúcich konvektívne toky. Medzi tuhou a kvapalnou fázou súčasne vzniká fázové rozhranie s charakterom voľnej hranice. Táto hranica sa vo všeobecnosti deformuje — lokálna rýchlosť, akou táto hranica postupuje, závisí od veľkosti teplotného toku v danom mieste. Teplotné pole, rýchlostné pole a samotné fázové rozhranie tak tvoria prepojený, navzájom ovplyvňujúci sa systém. Za určitých podmienok môže byť fázové rozhranie nestabilné, t.j. náchylné k tvorbe porúch. Tieto poruchy sa následne môžu vyvinúť do formy pomerne komplikovaných štruktúr — príkladom takejto nestability môže byť tvorba snehových vločiek.

V prípade, že je v kvapaline rozpustená ďalšia látka, je percentuálne zloženie vzniknutej tuhej fázy vo väčšine prípadov odlišné od zloženia kvapaliny, t.j. koncentrácia rozpustenej látky je v tuhej fáze iná ako v kvapalnej fáze. To znamená, že na fázovom rozhraní dochádza k vylučovaniu jednej zo zložiek systému. Táto vylúčená zložka je následne odvedená od rozhrania preč do kvapalnej fázy. Uvedený prenos je zvýšený v blízkosti „výbežkov“ tuhej fázy do kvapaliny. Tuhá fáza preto rastie v týchto oblastiach rýchlejšie a teda fázové rozhranie je nestabilné. Výsledkom takého nestabilného vývoja býva formovanie tzv. *dendritickej vrstvy*. Ide o vrstvu tvorenú navzájom poprepletanými kryštálmi tuhej fázy, pričom priestor medzi nimi



je vyplnený kvapalnou fázou. Z makroskopického pohľadu má dendritická vrstva charakter *pórovitého prostredia* s časovo premenlivou permeabilitou.

Správne kvalitatívne a kvantitatívne pochopenie procesu tuhnutia môže nájsť aplikácie v rôznych vedných oblastiach, ako sú náuka o materiáloch alebo geofyzika. V prípade zemského jadra, samotná oblasť, v ktorej dochádza k tuhnutiu materiálu vonkajšieho (kvapalného) jadra a formovaniu vnútorného (tuhého) jadra, je zmesou kvapalnej a tuhej fázy. Gravitačne-vztlaková kvapalina uvoľnená pri tuhnutí potom stúpa do kvapalného jadra, kde sa stáva súčasťou konvektívnych pohybov, ktoré sú nevyhnutné pre generáciu magnetického poľa Zeme (Šimkanin, Hejda & Saxonbergová-Jankovičová 2010; Šimkanin & Hejda 2009).

V tejto práci bude predmetom nášho záujmu model *difúzneho tuhnutia binárneho systému* — t.j. dvojzložkového systému, pri tuhnutí ktorého neuvažujeme konvekciu, t.j. tok v kvapalnej fáze (preto prívlastok „difúzny“). Z matematického hľadiska ide o systém *difúznych rovníc* (rovnice vedenia tepla v tuhej a kvapalnej fáze a rovnica difúzie rozpustenej látky v kvapalnej fáze) s *voľným fázovým rozhraním* (voľnou hranicou). Naším cieľom bude analýza globálnej stability fázového rozhrania a teplotného, resp. koncentračného poľa.

Samotná práca je rozdelená do piatich kapitol. Prvá kapitola obsahuje prehľad hlavných výsledkov dosiahnutých v oblasti tuhnutia binárnych systémov a tiež stručný prehľad najdôležitejšej literatúry. V druhej kapitole stručne zhrnieme hlavné ciele našej práce. Samotnej otázke globálnej stability a modelu tuhnutia binárnych systémov je venovaná tretia, štvrtá a piata kapitola.

Tretia kapitola má teoretický charakter. Jej cieľom je zhrnúť základné princípy tzv. *metódy energie*. Majúc daný základný stav, táto metóda slúži na určenie podmienok, za akých je tento stav globálne stabilný, t.j. stabilný voči ľubovoľne veľkým poruchám. Samotné kritérium stability je dané požiadavkou, aby parametre modelu ležali v určitej oblasti parametrického priestoru. Základným nástrojom metódy energie sú metódy variačného počtu — cieľom je určiť, za akých podmienok *funkcionál celkovej energie poruchy* základného stavu klesá v čase. V prvej časti sa zameriame na analýzu globálnej stability tokov popísaných systémom Navierových–Stokesových rovníc. Pri písaní tejto časti sme vychádzali z článku Serrin (1959). Druhá časť kapitoly je venovaná aplikácii metódy energie na problém tepelnej konvekcie. Na rozdiel od predchádzajúceho prípadu tu okrem rýchlostého poľa uvažujeme aj teplotné pole. V tejto časti kapitoly sú použité postupy a výsledky z článkov Homsy (1973), Joseph (1965), Joseph (1966) a knihy Joseph (1976a). V oboch prípadoch vedie metóda energie na riešenie Eulerových–Lagrangeových rovníc zodpovedajúcich príslušnej variačnej úlohe. Z matematického hľadiska tieto rovnice predstavujú *vlastnohodnotový problém* pre parciálne diferenciálne rovnice. Samotnému riešeniu tohto problému sme sa však ďalej nevenovali, našim cieľom v tejto kapitole bolo ukázať, ako tento problém sformulovať. Na jeho riešenie potom možno použiť štandardné numerické metódy.

Štvrtá kapitola sa zaoberá samotným modelom difúzneho tuhnutia binárneho systému. V prvej časti kapitoly sa zameriame na odvodenie podmienok na fázovom rozhraní. Tieto podmienky totiž hrajú kľúčovú úlohu pri analýze časového vývoja fázového rozhrania. Pri písaní tejto časti sme vychádzali s prác Guba (2000) a

Worster (2000). Prítomnosť voľnej hranice však spôsobuje značné komplikácie pri numerickom riešení difúzných rovníc popisujúcich tuhnutie binárneho systému. Preto v ďalšej časti kapitoly zavádzame transformáciu, ktorá úlohu s voľnou hranicou prevádza na úlohu s pevnou hranicou (Crank 1984). Vďaka tejto transformácii a podmienkam na rozhraní je možné nájsť explicitnú formulu pre časový vývoj fázového rozhrania v prípade jednorozmerného modelu. Na základe znalosti tejto explicitnej formuly potom možno odvodiť riešenie samotných parciálnych diferenciálnych rovníc charakterizujúcich časopriestorový vývoj teplotného a koncentračného poľa.

Cieľom piatej kapitoly je samotná analýza globálnej stability fázového rozhrania a teplotného a koncentračného poľa. Prvá časť sa venuje pokusu a aplikáciu metódy energie, druhá časť numerickej analýze stability. Je tu odvodená implicitná numerická schéma pre riešenie dvojrozmerného problému tuhnutia binárneho systému. Keďže tento problém nemá známe analytické riešenie, jediný možný spôsob, ako ho riešiť, je numericky. Zvyšok kapitoly je venovaný numerickým simuláciám vývoja porúch fázového rozhrania teplotného a koncentračného poľa.

# Zoznam použitých symbolov

$ \mathbf{u} $	euklidovská norma vektora $\mathbf{u}$ , $ \mathbf{u}  := \sum_i u_i^2$
$\mathbf{r}$	$\mathbf{r} := (x, y, z)^\top$ , resp. $\mathbf{r} := (x_1, x_2, x_3)^\top$
$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$	skalárny súčin vektorov $\mathbf{u}$ a $\mathbf{v}$ , $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} := \sum_i u_i v_i$
$\mathbf{A} \cdot \mathbf{u}$	súčin matice $\mathbf{A}$ a vektora $\mathbf{u}$
$\mathbf{A} : \mathbf{B}$	skalárny súčin matíc $\mathbf{A}$ a $\mathbf{B}$ , $\mathbf{A} : \mathbf{B} := \sum_i \sum_j A_{ij} B_{ij}$
$\nabla \theta$	gradient skalárnej funkcie $\theta$ , $\nabla \theta := \left( \frac{\partial \theta}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial \theta}{\partial x_n} \right)^\top$
$\nabla \mathbf{u}$	Jacobiho matica vektorovej funkcie $\mathbf{u}$ , $(\nabla \mathbf{u})_{ij} := \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$
$\nabla^2 \theta, \nabla^2 \mathbf{u}$	Laplaceov operátor, $\nabla^2 \theta := \sum_i \frac{\partial^2 \theta}{\partial x_i^2}$ , $\nabla^2 \mathbf{u} := \sum_i \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x_i^2}$
$\nabla \cdot \mathbf{u}$	divergencia vektorovej funkcie $\mathbf{u}$
$\nabla \times \mathbf{u}$	rotácia vektorovej funkcie $\mathbf{u}$
$\int_{\mathcal{V}} (\dots) d\mathcal{V}$	integrál po oblasti $\mathcal{V}$ s uzavretou hranicou $\mathcal{S}$
$\oint_{\mathcal{S}} (\dots) d\mathcal{S}$	integrál po uzavretej hranici $\mathcal{S}$
$\mathbf{I}_n$	jednotková matica rozmerov $n \times n$
$\mathbf{0}$	nulová matica

# Kapitola 1

## Prehľad literatúry a súčasný stav problematiky

Najjednoduchším modelom tuhnutia kvapalnej látky je tzv. *Stefanov problém* (Huppert 1990), v ktorom sa uvažuje iba *jednozložkový* systém (t.j. v rovniciach modelu nie je prítomná funkcia koncentrácie  $C$ ) ochladzovaný zdola. V našej práci sa naopak zaoberáme modelom tuhnutia *binárneho* systému. Príslušné rovnice sú odvodené na základe zákonov zachovania tepla a hmoty na fázovom rozhraní. Ide o základný model, ktorý je východiskom pre komplikovanejší model tzv. *dendritických* vrstiev, t.j. vrstiev obsahujúcich tuhú aj kvapalnú fázu (pozri Úvod). Matematickým modelom takého systému sa venuje článok Worster (1986). Ďalším rozšírením tohto modelu je jeho rozšírenie o tzv. *konvekciu* (Worster 1991). Ide o jav, kedy v dendritickej vrstve vzniká tok v dôsledku vylučovania zložky s menšou hustotou (tzv. vztlaková konvekcia).

Doterajší výskum v oblasti teórie stability difúzneho základného stavu tuhnuceho systému bol zameraný hlavne na analýzu *nelineárnej stability* voči poruchám metódami *bifurkačnej analýzy*. Práca Guba (2001) sa zaoberá problematikou konvekcie v rotujúcich dendritických vrstvách, práca Guba & Worster (2006b) sa zasa venuje problému konvekcie v dendritickej vrstve v prípade, že ochladená hranica je vertikálna. V článkoch Guba & Worster (2006a), Guba & Worster (2010) je študovaná nelineárna stabilita oscilačnej konvekcie v dvojrozmerných dendritických vrstvách pomocou metód *slabo-nelineárnej analýzy*. Dizertačná práca Guba (2000) sa zaoberá aplikáciou slabo-nelineárnej analýzy pri štúdiu nelineárnej konvekcie v rotujúcej dendritickej vrstve. *Lineárnou* stabilitou konvekcie v rotujúcich dendritických vrstvách sa zaoberala práca Guba & Boďa (1998).

Základy analýzy globálnej stability *metódou energie* boli položené O. Reynoldsom a W. McF. Orrom na prelome 19. a 20. storočia v rámci dynamiky kvapalín. Podstatou energetickej metódy je odvodiť identity pre energiu poruchy základného stavu a nájsť oblasť hodnôt istého parametra úlohy, pre ktoré je táto energia klesajúca v čase (resp. konverguje k nule) — základným aparátom riešenia takýchto úloh sú potom metódy variačného počtu, pričom kritická hodnota parametra je daná ako minimálna, resp. maximálna vlastná hodnota príslušného systému Eulerovych–Lagrangeovych rovníc. Dôležitou prácou zaoberajúcou sa aplikáciou tejto metódy bol článok Serrin (1959). Hlavným výsledkom bolo odvodenie kritéria stability ľubovoľného viskózneho

toku (popísaného systémom Navierových–Stokesových rovníc) v ohraničenej oblasti (určenie kritickej hodnoty Reynoldsovho čísla  $Re$ , po prekročení ktorej už tok nie je stabilný voči ľubovoľne veľkým počiatočným poruchám).

Následne bola metóda energie aplikovaná množstvom autorov aj na problém *tepelnej konvekcie*. Predmetom záujmu boli toky vyvolané rozdielmi v hustote kvapaliny v dôsledku teplotných gradientov (vyvolaných zmenou teploty na hranici uvažovanej oblasti) — menej hustá (teplejšia) kvapalina prúdi proti smeru pôsobenia vonkajšieho (gravitačného) poľa. Články Joseph (1965), Joseph (1966) a Joseph & Shir (1966) sa zaoberali globálnou stabilitou *netrivialneho* základného stavu (netrivialny tok), popísaného systémom Boussinesqových rovníc (Navier–Stokesove rovnice doplnené o závislosť hustoty od teplotného gradientu spolu s advektívnou rovnicou prenosu tepla). Podarilo sa určiť maximálnu hodnotu Rayleighovho čísla  $Ra$  pri fixovanom Reynoldsovom čísle  $Re$ , pre ktorú celková energia poruchy klesá. V Homsy (1973) bola metóda energie aplikovaná na *difúzny* základný stav (nulový základný tok). Článok Dudis & Davis (1971) skúmal globálnu stabilitu vertikálnej hraničnej vztlakovej vrstvy — základný stav bol daný netriviálnym tokom vo vertikálnom smere kvapaliny ohraničenej vertikálnou pevnou hranicou, pričom rozdiel teplôt medzi touto hranicou a nekonečnom bol pevne zvolený. Hlavným problémom v porovnaní s predchádzajúcimi prácami bolo, že išlo o polonekonečnú oblasť v smere osi  $x$  (v smeroch  $y$  a  $z$  možno uvažovať periodický priebeh porúch, čím sa problém s nekonečnosťou v týchto smeroch odstráni). Podrobne sa teóriou globálnej stability zaoberajú knihy Joseph (1976a) a Joseph (1976b). V Joseph (1976a) sú rozpracované aplikácie metódy energie v hydrodynamike (Navierove–Stokesove rovnice); Joseph (1976b) sa zaoberá modelmi rozšírenými o advekciu (okrem rýchlostného poľa sa uvažuje prítomnosť poľa teplotného a koncentračného).

Problém tuhnutia binárneho systému predstavuje *problém s voľnou hranicou*. Modelmi s voľnou hranicou a ich riešením (analytickým aj numerickým) sa zaoberá publikácia Crank (1984).

# Kapitola 2

## Ciele diplomovej práce

Táto diplomová práca má dva nasledujúce, nezávislé ciele:

1. Aplikáciou metódy energie nájsť kritické hodnoty bezrozmerných parametrov  $\bar{\kappa}$  a  $\gamma_l$  charakterizujúce nástup nestabilného režimu. Parameter  $\bar{\kappa}$  predstavuje pomer difúzných konštánt pri vedení tepla v tuhej a kvapalnej fáze, parameter  $\gamma_l$  je zase pomerom medzi difúznou konštantou charakterizujúcou difúziu hmoty a difúznou konštantou pri vedení tepla v kvapalnej fáze. Táto časť vyžaduje odvodenie identít pre celkovú energiu porúch v kvapalnej aj tuhej fáze s využitím podmienok na fázovom rozhraní.
2. Odvodenie numerickej schémy pre riešenie dvojrozmerného problému difúzneho tuhnutia binárneho systému a pomocou tejto schémy testovať výsledky odvodené v prvej časti cieľov diplomovej práce.

# Kapitola 3

## Teória globálnej stability v dynamike kvapalín

Metóda energie je jedným z nástrojov na analýzu globálnej stability základného stavu fyzikálneho systému za predpokladu, že tento základný stav je daný ako riešenie parciálnych diferenciálnych rovníc. Vychádzajúc z tohto základného stavu, cieľom teórie globálnej stability je určiť, za akých podmienok na parametre modelu ľubovoľne veľká počiatočná odchýlka (porucha) od základného stavu zanikne s rastúcim časom. Rozdiel oproti lineárnej teórii stability spočíva v tom, že sa neobmedzujeme len na dostatočne malé (infinitezimálne) odchýlky — do úvahy prichádzajú ľubovoľne veľké odchýlky.

V prípade metódy energie je mierou „veľkosti“ poruchy jej energia. Cieľom je nájsť oblasť hodnôt bezrozmerného parametra (resp. parametrov) úlohy, pre ktoré je táto energia klesajúca — presnejšie povedané, zaujíma nás tzv. *kritická hodnota* parametra, t.j. hodnota oddeľujúca oblasť hodnôt, pre ktoré je táto energia klesajúca, od oblasti hodnôt, pre ktoré je táto energia rastúca. Samotnú metódu možno zhrnúť do nasledovných krokov:

1. Odvodenie tvaru funkcionálu energie poruchy základného stavu
2. Formulácia variačnej úlohy a odvodenie Eulerových–Lagrangeových rovníc pre túto úlohu
3. Určenie kritických hodnôt parametrov úlohy na základe riešenia vlastnohodnotového problému pre Eulerove–Lagrangeove rovnice.

Cieľom tejto kapitoly je uviesť základné princípy metódy energie na niektorých modeloch z hydrodynamiky. Prvým analyzovaným modelom bude model toku nestlačiteľnej viskózne kvapaliny, druhým modelom bude model tepelnej konvekcie.

### 3.1 Globálna stabilita toku viskózne, nestlačiteľnej kvapaliny

V tejto časti sa budeme zaoberať globálnou stabilitou tokov vyhovujúcich systému *Navierových–Stokesových rovníc*. Ide o nelineárny systém parciálnych diferenciálnych

rovníc charakterizujúci tok nestlačiteľnej, viskózne kvapaliny. V prípade, že uvažujeme tok vo fixnej oblasti, pričom hraničné podmienky a vonkajšie silové pôsobenie sú dané (a tiež fixné), je riešenie týchto rovníc závislé od hodnoty *kinematickej viskozity*  $\nu$  a počiatočnej podmienky. Ak uvažujeme *bezrozmernú formu* Navierových–Stokesových rovníc, namiesto závislosti od kinematickej viskozity dostávame závislosť od hodnoty bezrozmerného *Reynoldovho čísla*  $Re$ .

Všetky riešenia bezrozmerných Navierových–Stokesových rovníc majú tú dôležitú vlastnosť, že pre hodnoty Reynoldsovo čísla menšie ako jeho kritická hodnota konvergujú k základnému toku (počiatočnej podmienke). Navyše, *energia odchýlky* od základného toku v takomto prípade klesá v čase.

### 3.1.1 Navierove–Stokesove rovnice. Transformácia na bezrozmerný tvar

Uvažujme tok kvapaliny v ohraničenej, časovo závislej oblasti  $\mathcal{V}(t)$  s hladkou hranicou  $\mathcal{S}(t)$ , pričom jednotkový vektor vonkajšej normály k  $\mathcal{S}$  budeme označovať  $\hat{\mathbf{n}}$ . *Rozmerný* systém Navierových–Stokesových rovníc popisujúcich tento tok vyzerá nasledovne

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{U} + \mathbf{g}, \quad (3.1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (3.1b)$$

kde  $\mathbf{U} = \mathbf{U}(\mathbf{r}, t)$  predstavuje (rozmernú) rýchlosť toku,  $p$  je tlak,  $\rho$  je hustota kvapaliny (o hustote predpokladáme, že je konštantná v čase aj priestore) a  $\mathbf{g}$  je vektor gravitačného zrýchlenia. Ide o nelineárne rovnice — zdrojom nelinearity je *advektívny člen*  $(\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U}$ . Všeobecná definícia *advektívneho operátora*  $\mathbf{U} \cdot \nabla$  je nasledovná

$$(\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{V} := \left( \sum_i U_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right) \mathbf{V} = \sum_i U_i \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x_i} = \nabla \mathbf{V} \cdot \mathbf{U}. \quad (3.2)$$

Obmedzenie v tvare nulovej divergencie (3.1b) je vyjadrením podmienky nestlačiteľnosti uvažovanej kvapaliny.

Označme  $U$  typickú rýchlosť toku,  $l$  typickú dĺžkovú škálu a  $g$  veľkosť gravitačného zrýchlenia. Definujme  $\hat{\mathbf{k}} := (0, 0, 1)^T$  a zaveďme nasledovnú transformáciu do *bezrozmerných* premenných

$$t \mapsto \frac{l}{U} t, \quad \mathbf{r} \mapsto l \mathbf{r}, \quad \mathbf{U} \mapsto U \mathbf{U}, \quad p \mapsto \frac{1}{\rho U^2} p, \quad \mathbf{g} \mapsto -g \hat{\mathbf{k}},$$

pričom veličiny na ľavej strane sú rozmerné a veličiny na pravej strane bezrozmerné. Bezrozmerný tvar Navierových–Stokesových rovníc potom vyzerá nasledovne

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{U} + \frac{gl}{U^2} \hat{\mathbf{k}}, \quad (3.3a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (3.3b)$$

kde  $Re := Ul/\nu$  je bezrozmerné *Reynoldsovo číslo*.



### 3.1.2 Energia poruchy základného stavu

V tejto časti odvodíme identitu pre časovú deriváciu energie poruchy základného stavu. Cieľom metódy energie je potom určiť, pre aké hodnoty  $\text{Re}$  táto energia klesá v čase. Označme  $\mathbf{U}$ ,  $p$  veličiny charakterizujúce základný stav. Porušený stav  $\mathbf{U}^*$ ,  $p^*$  potom možno zapísať nasledovne

$$\mathbf{U}^* = \mathbf{U} + \mathbf{u}, \quad p^* = p + \pi, \quad (3.4)$$

kde  $\mathbf{u}$  a  $\pi$  sú poruchy. Predpokladáme pritom, že  $\mathbf{u} = \mathbf{0}$  a  $\pi = 0^1$  na  $\mathcal{S}$ . Následne definujeme funkcionál energie poruchy nasledovným predpisom

$$E(t) := \frac{1}{2} \int_{\mathcal{V}} |\mathbf{u}|^2 d\mathcal{V}.$$

Časová závislosť tohto funkcionálu je daná časovou závislosťou rýchlosti  $\mathbf{u}$  a samotnej oblasti  $\mathcal{V}$ .

Porušený stav tiež vyhovuje rovniciam (3.3), t.j.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{U}^*}{\partial t} + (\mathbf{U}^* \cdot \nabla) \mathbf{U}^* &= -\nabla p^* + \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 \mathbf{U}^* + \frac{gl}{U^2} \hat{\mathbf{k}}, \\ \nabla \cdot \mathbf{U}^* &= 0. \end{aligned}$$

Dosadením (3.4) do týchto rovníc a využitím faktu, že pre základný stav platia rovnice (3.3a, b), dostaneme systém rovníc pre poruchy

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{U} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla \pi + \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (3.6a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.6b)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{0} \quad \text{na } \mathcal{S}. \quad (3.6c)$$

Využitím definície advektívneho operátora (3.2), vynásobením vektorom  $\mathbf{u}$  zľava a následným integrovaním dostaneme nasledovnú integrálnu formuláciu rovnice (3.6a)

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial}{\partial t} |\mathbf{u}|^2 d\mathcal{V} &= - \int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{U} \cdot \mathbf{u} d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{U} d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} d\mathcal{V} \\ &\quad + \frac{1}{\text{Re}} \int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \nabla^2 \mathbf{u} d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \nabla \pi d\mathcal{V}. \end{aligned}$$

Pri úprave ľavej strany sme využili vzťah  $2\mathbf{u} \cdot (\partial \mathbf{u} / \partial t) = \partial |\mathbf{u}|^2 / \partial t$ . Počítajme jednotlivé integrály. Pomocou Greenovej formule pre integráciu per partes (A.1a) dostaneme

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{U} d\mathcal{V} &= \sum_i \sum_j \int_{\mathcal{V}} u_i \frac{\partial u_i}{\partial x_j} U_j d\mathcal{V} \\ &= \sum_i \sum_j \left( \oint_{\mathcal{S}} u_i^2 U_j n_j d\mathcal{S} - \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i U_j) u_i d\mathcal{V} \right) \end{aligned}$$

<sup>1</sup>Predpokladáme spojitost tlaku  $\pi$  na hranici  $\mathcal{S}$ . Keďže  $\pi = 0$  mimo oblasti  $\mathcal{V}$ , musí byť  $\pi = 0$  aj na  $\mathcal{S}$ .

$$\begin{aligned}
 &= - \sum_i \sum_j \left( \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} U_j u_i \, d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}} u_i^2 \frac{\partial U_j}{\partial x_j} \, d\mathcal{V} \right) \\
 &= - \int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{U} \, d\mathcal{V},
 \end{aligned}$$

pričom sme využili podmienky (3.6b, c). Dostávame tak

$$\int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{U} \, d\mathcal{V} = 0, \text{ analogicky } \int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \, d\mathcal{V} = 0.$$

Ďalej z (A.1b), (A.1c) a (3.6b, c) vyplýva

$$\int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \nabla^2 \mathbf{u} \, d\mathcal{V} = - \int_{\mathcal{V}} \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{u} \, d\mathcal{V}, \quad \int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \nabla \pi \, d\mathcal{V} = 0.$$

Navyše, môžeme písať

$$\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{U} \cdot \mathbf{u} = \frac{1}{2} (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{U} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{U}^T \cdot \mathbf{u}) = \mathbf{u} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{u},$$

kde  $\mathbf{D} := \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T)$  je symetrický *tenzor rýchlosti deformácie*. Odvodili sme tak nasledovnú identitu

$$\frac{1}{2} \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial}{\partial t} |\mathbf{u}|^2 \, d\mathcal{V} = - \int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{u} \, d\mathcal{V} - \frac{1}{\text{Re}} \int_{\mathcal{V}} \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{u} \, d\mathcal{V},$$

z ktorej pomocou *Reynoldsovej transportnej vety* (A.3) dostávame hľadanú identitu pre časovú deriváciu energie poruchy

$$\frac{dE}{dt} = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} |\mathbf{u}|^2 \, d\mathcal{V} = - \int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{u} \, d\mathcal{V} - \frac{1}{\text{Re}} \int_{\mathcal{V}} \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{u} \, d\mathcal{V}. \quad (3.7)$$

### 3.1.3 Variačná formulácia problému. Eulerova–Lagrangeova rovnica

Ako sme už spomínali vyššie, naším cieľom bude určiť podmienky na bezrozmerný parameter  $\text{Re}$  tak, aby energia  $E$  bola klesajúca v čase, t.j. chceme zabezpečiť, aby platilo

$$\frac{dE}{dt} < 0,$$

čo je ekvivalentné s podmienkou

$$\frac{1}{\text{Re}} > - \frac{\int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{u} \, d\mathcal{V}}{\int_{\mathcal{V}} \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{u} \, d\mathcal{V}} =: - \frac{I(\mathbf{u})}{D(\mathbf{u})}$$

pre ľubovoľnú poruchu  $\mathbf{u}$ , kde  $I(\mathbf{u}) := \int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{u} \, d\mathcal{V}$  a  $D(\mathbf{u}) := \int_{\mathcal{V}} \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{u} \, d\mathcal{V}$ . Na splnenie predchádzajúcej podmienky stačí, aby parameter  $\text{Re}$  splňal nerovnosť

$$\frac{1}{\text{Re}} > \frac{1}{\text{Re}^*},$$

kde  $\text{Re}^*$  je tzv. *kritická hodnota* Reynoldsovho čísla daná vzťahom

$$\frac{1}{\text{Re}^*} := \max_{\mathbf{u} \in H} \left\{ -\frac{I(\mathbf{u})}{D(\mathbf{u})} \right\}. \quad (3.8)$$

Priestor  $H$  všetkých prípustných porúch je definovaný nasledovne

$$H := \{ \mathbf{u} \mid \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \mathbf{u} = \mathbf{0} \text{ na } \mathcal{S} \}.$$

Základný stav je potom globálne stabilný pre hodnoty  $\text{Re}$  spĺňajúce nerovnosť

$$\text{Re} < \text{Re}^*.$$

Odvodíme *Eulerovu–Lagrangeovu rovnicu* pre úlohu (3.8). Nech  $\hat{\mathbf{u}}$  je riešením úlohy (3.8) a nech  $\boldsymbol{\eta} \in H \cap \{ \boldsymbol{\eta} \mid \boldsymbol{\eta} \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0 \text{ na } \mathcal{S} \}$ . Potom aj  $\mathbf{u}_\varepsilon := \hat{\mathbf{u}} + \varepsilon \boldsymbol{\eta} \in H$  a navyše platí  $\mathbf{u}_0 \equiv \hat{\mathbf{u}}$ . Vzhľadom na optimalitu  $\hat{\mathbf{u}}$  tak dostávame, že funkcia

$$F(\varepsilon) := -\frac{\int_{\mathcal{V}} (\hat{\mathbf{u}} + \varepsilon \boldsymbol{\eta}) \cdot \mathbf{D} \cdot (\hat{\mathbf{u}} + \varepsilon \boldsymbol{\eta}) \, d\mathcal{V}}{\int_{\mathcal{V}} \nabla (\hat{\mathbf{u}} + \varepsilon \boldsymbol{\eta}) : \nabla (\hat{\mathbf{u}} + \varepsilon \boldsymbol{\eta}) \, d\mathcal{V}} \equiv -\frac{F_1(\varepsilon)}{F_2(\varepsilon)}$$

nadobúda svoje maximum pre  $\varepsilon = 0$ , t.j.

$$\left. \frac{dF}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} = \left. \frac{\frac{dF_1}{d\varepsilon} F_2 - F_1 \frac{dF_2}{d\varepsilon}}{F_2^2} \right|_{\varepsilon=0} = 0. \quad (3.9)$$

Platí

$$\left. \frac{dF_1}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} = 2 \int_{\mathcal{V}} \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\eta} \, d\mathcal{V}, \quad \left. \frac{dF_2}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} = 2 \int_{\mathcal{V}} \nabla \hat{\mathbf{u}} : \nabla \boldsymbol{\eta} \, d\mathcal{V}.$$

Z (3.9) tak dostávame

$$\int_{\mathcal{V}} \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\eta} \, d\mathcal{V} + \frac{1}{\text{Re}^*} \int_{\mathcal{V}} \nabla \hat{\mathbf{u}} : \nabla \boldsymbol{\eta} \, d\mathcal{V} = 0,$$

kde

$$\frac{1}{\text{Re}^*} := -\frac{\int_{\mathcal{V}} \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{D} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\mathcal{V}}{\int_{\mathcal{V}} \nabla \hat{\mathbf{u}} : \nabla \hat{\mathbf{u}} \, d\mathcal{V}}.$$

Z poslednej uvedenej rovnice na základe (A.1c) dostávame

$$\int_{\mathcal{V}} \left( \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{D} - \frac{1}{\text{Re}^*} \nabla^2 \hat{\mathbf{u}} \right) \cdot \boldsymbol{\eta} \, d\mathcal{V} = 0,$$

a teda z lemy A.3.2 vyplýva, že existuje funkcia  $\hat{p} = \hat{p}(\mathbf{r})$  taká, že platí

$$\mathbf{D} \cdot \hat{\mathbf{u}} - \frac{1}{\text{Re}^*} \nabla^2 \hat{\mathbf{u}} = -\nabla \hat{p}, \quad (3.10)$$

čo je *Eulerova–Lagrangeova rovnica* pre variačnú úlohu (3.8).

### 3.1.4 Kritická hodnota čísla $Re$ ako minimálna vlastná hodnota Eulerovej–Lagrangeovej rovnice

Z (3.10) vyplýva, že trojica  $(\hat{\mathbf{u}}, Re^*, \hat{p})$  je riešením nasledovného *vlastnohodnotového problému*

$$\mathbf{D} \cdot \mathbf{u} - \frac{1}{R} \nabla^2 \mathbf{u} = -\nabla p, \quad (3.11a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.11b)$$

$$\mathbf{S} = \mathbf{0} \quad \text{na } \mathcal{S} \quad (3.11c)$$

s vlastnou hodnotou  $R$ . Nech  $(\mathbf{u}, R, p)$  je ľubovoľná vlastná trojica tohto problému. Vynásobme rovnicu (3.11a) vektorom  $\mathbf{u}$  a integrujme

$$\int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{u} \, d\mathcal{V} - \frac{1}{R} \int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \nabla^2 \mathbf{u} \, d\mathcal{V} = - \int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \nabla p \, d\mathcal{V}.$$

S využitím (A.1b) a (A.1c) dostaneme

$$\int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{u} \, d\mathcal{V} = -\frac{1}{R} \int_{\mathcal{V}} \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{u} \, d\mathcal{V},$$

resp.

$$\frac{1}{R} = -\frac{I(\mathbf{u})}{D(\mathbf{u})}. \quad (3.12)$$

Uvažujme teraz trojicu  $(\hat{\mathbf{u}}, Re^*, \hat{p})$  predstavujúcu riešenie variačnej úlohy (3.8). Táto trojica je súčasne riešením problému (3.11a–c), a preto na základe (3.12) platí

$$\frac{1}{Re^*} = -\frac{I(\hat{\mathbf{u}})}{D(\hat{\mathbf{u}})} \geq -\frac{I(\mathbf{u})}{D(\mathbf{u})} = \frac{1}{R}.$$

Kedže vlastná trojica  $(\mathbf{u}, R, p)$  bola ľubovoľná, dostávame, že pre ľubovoľnú vlastnú hodnotu  $Re$  problému (3.11a–c) platí

$$Re^* \leq R.$$

Kritická hodnota  $Re^*$  je teda minimálnou vlastnou hodnotou problému (3.11a–c).

## 3.2 Tepelná konvekcia. Globálna stabilita nestacionárnych, difúzne riadených základných stavov

Cieľom tejto časti je štúdium globálnej stability nestacionárnych (časovo závislých), *difúzných* (uvažujeme nulový tok) základných stavov (teplotných profilov) v horizontálnych vrstvách kvapalín, ktoré sú vystavené *impulzným* zmenám teploty na hraniciach. Pod impulzou zmenou teploty na hraniciach rozumieme situáciu, keď náhle zmeníme teplotu na horizontálnych hraniciach tak, že v nasledujúcich časových okamihoch je rozdiel teplôt na týchto hraniciach rovný zadanej hodnote  $\Delta T$ . Z fyzikálneho hľadiska ide o problém *tepelnej konvekcie* — interakcie prúdenia (rýchlostné pole  $\mathbf{u}$ ) a prenosu tepla (teplotné pole  $T$ ), kedy dochádza k vzniku tokov vyvolaných rozdielmi v hustote danej kvapaliny v dôsledku teplotných gradientov — menej hustá (teplejšia) kvapalina prúdi proti smeru pôsobenia vonkajšieho (gravitačného) poľa.

### 3.2.1 Boussinesqove rovnice. Transformácia na bezrozmerný tvar

Uvažujme kvapalinu nachádzajúcu sa medzi dvoma rovnobežnými horizontálnymi hranicami, ktorých vzdialenosť je rovná  $d$ . Difúzny základný stav je daný nasledovným (rozmerným) systémom rovníc

$$\begin{aligned}\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} &= \kappa \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial z^2}, \quad z \in \langle 0, d \rangle, \\ \bar{T}(d, t) &= \bar{T}(0, t) + \Delta T, \quad t > 0, \quad (\text{resp. } \bar{T}(d, t) = \bar{T}(0, t) - \Delta T) \\ \bar{\mathbf{u}} &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{0} &= -\frac{1}{\rho} \nabla \bar{p} + \mathbf{g},\end{aligned}$$

kde  $\kappa$  je difúzna konštanta vedenia tepla. Poslednú rovnicu dostaneme z Navierových–Stokesových rovníc (3.1) v prípade nulového rýchlostného poľa. Uvažujeme teda len prenos tepla a žiaden tok, pričom  $\bar{T} = \bar{T}(z, t)$ . Ďalej označme  $T$ ,  $\mathbf{u} = (u, v, w)^T$  a  $p$  veličiny charakterizujúce porušený stav, t.j.

$$T = \bar{T} + \tilde{T}, \quad (3.13a)$$

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{u}}, \quad (3.13b)$$

$$p = \bar{p} + \tilde{p}, \quad (3.13c)$$

kde  $\tilde{T} = \tilde{T}(\mathbf{r}, t)$ ,  $\tilde{\mathbf{u}} = \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t)$  a  $\tilde{p} = \tilde{p}(z, t)$  sú poruchy. Porušený stav sa riadi systémom *Boussinesqovych rovníc*

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p + \frac{\Delta \rho}{\rho_0} \mathbf{g} + \nu \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (3.14a)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T = \kappa \nabla^2 T, \quad (3.14b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.14c)$$

$$\rho(T) := \rho_0 [1 - \beta(T - T_0)], \quad (3.14d)$$

kde  $\nu$  je koeficient kinematickej viskozity a  $\Delta \rho := \rho - \rho_0$  ( $\rho_0$  predstavuje vopred zvolenú referenčnú hustotu). Zo stavovej rovnice (3.14d) potom vyplýva

$$\Delta \rho = -\rho_0 \beta (T - T_0).$$

Skôr ako prejdeme ďalej, transformujeme tento systém do bezrozmernej formy zavedením nasledovných bezrozmerných premenných

$$\begin{aligned}\mathbf{r} &\mapsto d\mathbf{r}, \quad t \mapsto \frac{d^2}{\kappa} t, \\ \mathbf{u} &\mapsto \frac{\kappa}{d} \mathbf{u}, \quad T \mapsto \Delta T \theta, \quad p \mapsto \frac{\rho_0 \kappa \nu}{d^2} p, \quad \mathbf{g} \mapsto -g \hat{\mathbf{k}},\end{aligned}$$

kde  $\hat{\mathbf{k}} = (0, 0, 1)^T$ , pričom bezrozmerné veličiny (na pravej strane) budeme označovať rovnako ako pôvodné (s výnimkou teploty) rozmerné veličiny (ľavá strana). Ďalej definujeme bezrozmerné čísla Ra (Rayleighovo číslo) a Pr (Prandtlovo číslo) vzťahmi

$$\text{Ra} := \frac{g\beta\Delta T d^3}{\kappa\nu}, \quad \text{Pr} := \frac{\nu}{\kappa}.$$

Systém bezrozmerných Boussinesqových rovníc pre porušený stav potom vyzerá nasledovne

$$\frac{1}{\text{Pr}} \left[ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right] = -\nabla p_R + \text{Ra} \theta \hat{\mathbf{k}} + \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (3.15a)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \theta = \nabla^2 \theta, \quad (3.15b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.15c)$$

kde  $p_R := p + \beta g T_0 z$  je tzv. redukovaný tlak, spolu s hraničnou podmienkou na hranici  $\mathcal{S}$

$$\mathbf{u} = \mathbf{0}.$$

Analogicky dostaneme bezrozmerný tvar rovníc pre difúzny základný stav

$$\mathbf{0} = -\nabla \bar{p}_R + \text{Ra} \bar{\theta} \hat{\mathbf{k}}, \quad (3.16a)$$

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} = \frac{\partial^2 \bar{\theta}}{\partial z^2}, \quad (3.16b)$$

$$\bar{\mathbf{u}} = \mathbf{0}. \quad (3.16c)$$

Cieľom je určiť, pre aké hodnoty Ra je tento základný stav stabilný voči ľubovoľne veľkým poruchám. Dosadením vzťahov (3.13a-c) do (3.15a-c) a využitím rovníc pre základný stav dostaneme

$$\frac{1}{\text{Pr}} \left[ \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \tilde{\mathbf{u}} \right] = -\nabla \tilde{p}_R + \text{Ra} \tilde{\theta} \hat{\mathbf{k}} + \nabla^2 \tilde{\mathbf{u}}, \quad (3.17a)$$

$$\frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial t} + (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \tilde{\theta} = \nabla^2 \tilde{\theta} - \tilde{w} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z}, \quad (3.17b)$$

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} = 0, \quad (3.17c)$$

pričom sme využili závislosť teploty  $\bar{\theta}$  len od vertikálnej priestorovej premennej, t.j.  $\bar{\theta} = \bar{\theta}(z, t)$ . Vidíme, že vlastnosti základného stavu vstupujú do rovníc pre poruchy práve prostredníctvom člena  $\tilde{w} \partial \bar{\theta} / \partial z$ . Navyše uvažujeme nasledovné hraničné podmienky na hranici  $\mathcal{S}$  oblasti  $\mathcal{V}$

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla \tilde{\theta} + L \tilde{\theta} = 0, \quad L \geq 0, \quad (3.18a)$$

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{0}, \quad (3.18b)$$

kde  $\hat{\mathbf{n}}$  je vektor vonkajšej normály k  $\mathcal{S}$ .

### 3.2.2 Identity pre energiu poruchy

Pre jednoduchosť budeme v ďalšom texte písať  $\mathbf{u}$ ,  $\theta$ ,  $p_R$  namiesto  $\tilde{\mathbf{u}}$ ,  $\tilde{\theta}$ ,  $\tilde{p}_R$ . *Kinetickú energiu poruchy* definujeme vzťahom

$$K := \frac{1}{2\text{Pr}} \int_{\mathcal{V}} |\mathbf{u}|^2 d\mathcal{V}$$

a *tepelnú energiu* vzťahom

$$\Theta := \frac{1}{2} \int_{\mathcal{V}} \theta^2 d\mathcal{V}.$$

Rovnakým spôsobom, ako pri odvodzovaní identity (3.7), dostaneme z rovnice (3.17a) identitu

$$\frac{1}{2\text{Pr}} \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} |\mathbf{u}|^2 d\mathcal{V} = - \int_{\mathcal{V}} \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{u} d\mathcal{V} + \text{Ra} \int_{\mathcal{V}} \theta w d\mathcal{V}.$$

Ďalej vynásobme rovnicu (3.17b) funkciou  $\theta$ , integrovaním dostaneme

$$\int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \theta}{\partial t} \theta d\mathcal{V} = - \int_{\mathcal{V}} \theta \nabla \theta \cdot \mathbf{u} d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}} \theta \nabla^2 \theta d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}} w \theta \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} d\mathcal{V},$$

pričom sme využili analógiu identity (3.2) pre skalárne funkcie

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla) \theta := \nabla \theta \cdot \mathbf{u}.$$

Využitím vzťahov (A.1e), (A.1d) a hraničnej podmienky (3.18a) dostaneme

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}} \theta \nabla \theta \cdot \mathbf{u} d\mathcal{V} &= 0, \\ \int_{\mathcal{V}} \theta \nabla^2 \theta d\mathcal{V} &= - \oint_{\mathcal{S}} L \theta^2 d\mathcal{S} - \int_{\mathcal{V}} |\nabla \theta|^2 d\mathcal{V}. \end{aligned}$$

Platí teda

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} \theta^2 d\mathcal{V} = - \int_{\mathcal{V}} |\nabla \theta|^2 d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}} w \theta \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} d\mathcal{V} - \oint_{\mathcal{S}} L \theta^2 d\mathcal{S}$$

a z toho pomocou Reynoldsovej transportnej vety A.3 dostaneme

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} \theta^2 d\mathcal{V} = - \int_{\mathcal{V}} |\nabla \theta|^2 d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}} w \theta \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} d\mathcal{V} - \oint_{\mathcal{S}} L \theta^2 d\mathcal{S}.$$

Odvodili sme tak nasledovné dve identity pre časovú deriváciu *kinetickej a tepelnej energie poruchy základného stavu*

$$\frac{dK}{dt} = - \int_{\mathcal{V}} \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{u} d\mathcal{V} + \text{Ra} \int_{\mathcal{V}} \theta w d\mathcal{V}, \quad (3.19a)$$

$$\frac{d\Theta}{dt} = - \int_{\mathcal{V}} |\nabla \theta|^2 d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}} w \theta \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} d\mathcal{V} - \oint_{\mathcal{S}} L \theta^2 d\mathcal{S}. \quad (3.19b)$$

### 3.2.3 Variačná formulácia. Eulerove–Lagrangeove rovnice

Skonstruujeme kladne definitný *funkcionál celkovej energie poruchy*  $E_\lambda$  predpisom

$$E_\lambda(\mathbf{u}, \theta) = K(\mathbf{u}) + \lambda \text{Ra} \Theta(\theta), \quad \lambda > 0, \text{Ra} > 0,$$

pričom kladný parameter  $\lambda$  určíme tak, aby sme dostali čo možno najväčšiu oblasť pre číslo  $\text{Ra}$ , v ktorej je derivácia celkovej energie záporná. Z identít (3.19a, b) máme

$$\begin{aligned} \frac{dE_\lambda}{dt} &= \text{Ra} \left( \int_{\mathcal{V}} w\theta \, d\mathcal{V} - \lambda \int_{\mathcal{V}} w\theta \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \, d\mathcal{V} \right) \\ &\quad - \int_{\mathcal{V}} \left( \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{u} + \lambda \text{Ra} \int_{\mathcal{V}} |\nabla \theta|^2 \, d\mathcal{V} \right) - \lambda \text{Ra} \oint_S L\theta^2 \, d\mathcal{S}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Túto identitu ďalej transformujeme pomocou transformácie

$$\theta \mapsto \frac{\phi}{(\lambda \text{Ra})^{1/2}}.$$

Dostaneme tak

$$\begin{aligned} E_\lambda(\mathbf{u}, \phi) &= \frac{1}{2} \int_{\mathcal{V}} \left( \frac{1}{\text{Pr}} |\mathbf{u}|^2 + \phi^2 \right) \, d\mathcal{V}, \\ \frac{dE_\lambda}{dt} &= \frac{\text{Ra}^{1/2}}{\lambda^{1/2}} \int_{\mathcal{V}} w\phi \, d\mathcal{V} - (\lambda \text{Ra})^{1/2} \int_{\mathcal{V}} w\phi \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \, d\mathcal{V} \\ &\quad - \int_{\mathcal{V}} \left( \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{u} + |\nabla \phi|^2 \right) \, d\mathcal{V} - \oint_S L\phi^2 \, d\mathcal{S} \\ &= \text{Ra}^{1/2} I_\lambda(\mathbf{u}, \phi) - D(\mathbf{u}, \phi), \end{aligned}$$

kde

$$\begin{aligned} I_\lambda(\mathbf{v}, \phi) &:= \int_{\mathcal{V}} \left( \frac{1}{\lambda^{1/2}} - \lambda^{1/2} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right) w\phi \, d\mathcal{V}, \\ D(\mathbf{u}, \phi) &:= \int_{\mathcal{V}} \left( \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{u} + |\nabla \phi|^2 \right) \, d\mathcal{V} + \oint_S L\phi^2 \, d\mathcal{S} > 0. \end{aligned}$$

Platí nasledovná nerovnosť

$$\frac{dE_\lambda}{dt} = - \left( 1 - \text{Ra}^{1/2} \frac{I_\lambda}{D} \right) D \leq - \left( 1 - \frac{\text{Ra}^{1/2}}{\hat{R}_\lambda} \right) D, \quad (3.21)$$

kde

$$\frac{1}{\hat{R}_\lambda} := \max_{(\mathbf{u}, \phi)^T \in H} \frac{I_\lambda(\mathbf{u}, \phi)}{D(\mathbf{u}, \phi)}, \quad (3.22)$$

pričom  $H$  predstavuje priestor všetkých prípustných dvojíc  $(\mathbf{u}, \phi)^T$  definovaný nasledovne

$$H := \{(\mathbf{u}, \phi)^T \mid \nabla \cdot \mathbf{u} = 0; \mathbf{u} = \mathbf{0} \text{ na } S, \nabla \phi \cdot \hat{\mathbf{n}} + L\phi = 0 \text{ na } S\}.$$



Ak teda bude platiť

$$\text{Ra}^{1/2} < \hat{R}_\lambda,$$

bude časová derivácia energie  $E$  záporná, a teda energia poruchy bude klesať. Určenie hranice stability sa teda redukuje na riešenie variačnej úlohy (3.22). Dôležité však je uvedomiť si časovú závislosť hranice stability spôsobenú parametricky časovou závislosťou teplotného gradientu základného stavu ( $\partial\bar{\theta}/\partial z$  je vo všeobecnosti funkciou bezrozmerného času  $t$ ), t.j.

$$\hat{R}_\lambda = \hat{R}_\lambda(t).$$

Predchádzajúce úvahy možno zhrnúť do nasledovnej vety, ktorá nám za určitých predpokladov zaručuje *exponenciálny pokles* energie poruchy, a teda globálnu stabilitu základného stavu. Táto veta je analógiou vety z článku Joseph & Shir (1966).

**Veta 3.2.1** (O exponenciálnom poklese energie poruchy). *Nech existujú konštanty  $a^2 > 0$ ,  $b^2 > 0$  také, že platí*

$$\begin{aligned} a^2 \frac{1}{2\text{Pr}} \int_{\mathcal{V}} |\mathbf{u}|^2 d\mathcal{V} &\leq \int_{\mathcal{V}} \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{u} d\mathcal{V}, \\ b^2 \frac{1}{2} \int_{\mathcal{V}} \phi^2 d\mathcal{V} &\leq \int_{\mathcal{V}} |\nabla \phi|^2 d\mathcal{V} + \oint_{\mathcal{S}} L\phi^2 d\mathcal{S}. \end{aligned}$$

Potom pre ľubovoľnú fixnú hodnotu  $\lambda > 0$  a hodnotu parametra  $\text{Ra}$  spĺňajúcu  $\text{Ra}^{1/2} < R_\lambda^* := \min_t \hat{R}_\lambda$  platí

$$E_\lambda(t) \leq E_\lambda(0) e^{-\xi^2(1-\text{Ra}^{1/2}/R_\lambda^*)t}, \quad (3.23)$$

kde  $E_\lambda(0)$  je počiatočná energia poruchy a  $\xi^2 := \min\{a^2, b^2\}$ . Navyše, ak  $\text{Ra}^{1/2} < R_\lambda^*$   $\forall t$ , tak potom  $E_\lambda \rightarrow 0$  pre  $t \rightarrow \infty$  a teda základný stav je globálne stabilný.

*Dôkaz.* Platí

$$\begin{aligned} E_\lambda &= \frac{1}{2} \int_{\mathcal{V}} \left( \frac{1}{\text{Pr}} |\mathbf{u}|^2 + \phi^2 \right) d\mathcal{V} \\ &\leq \frac{1}{a^2} \int_{\mathcal{V}} \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{u} d\mathcal{V} + \frac{1}{b^2} \left( \int_{\mathcal{V}} |\nabla \phi|^2 d\mathcal{V} + \oint_{\mathcal{S}} L\phi^2 d\mathcal{S} \right) \\ &\leq \frac{1}{\xi^2} D. \end{aligned}$$

Na základe nerovnosti (3.21) potom dostaneme

$$\frac{dE_\lambda}{dt} \leq - \left( 1 - \frac{\text{Ra}^{1/2}}{\hat{R}_\lambda} \right) \xi^2 E_\lambda \leq - \left( 1 - \frac{\text{Ra}^{1/2}}{R_\lambda^*} \right) \xi^2 E_\lambda,$$

z čoho integrovaním dostaneme nerovnosť (3.23).  $\square$

*Poznámka:* Konštanty  $a^2$  a  $b^2$  (za predpokladu, že existujú — otázka ich existencie je riešená v Joseph 1976a) možno nájsť riešením nasledovných dvoch variačných úloh

$$\begin{aligned} \frac{2\text{Pr}}{a^2} &:= \max_{(\mathbf{u}, \phi)^T \in H} \frac{\int_{\mathcal{V}} |\mathbf{u}|^2 d\mathcal{V}}{\int_{\mathcal{V}} \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{u} d\mathcal{V}}, \\ \frac{2}{b^2} &:= \max_{(\mathbf{u}, \phi)^T \in H} \frac{\int_{\mathcal{V}} \phi^2 d\mathcal{V}}{\int_{\mathcal{V}} |\nabla \phi|^2 d\mathcal{V} + \oint_{\mathcal{S}} L\phi^2 d\mathcal{S}}. \end{aligned}$$

### Eulerove–Lagrangeove rovnice

Nech  $(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\phi})^T \in H$  je riešením variačnej úlohy (3.22) a nech  $\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_1, \varepsilon_2)^T \in \mathbb{R}^2$  a  $(\boldsymbol{\eta}, \psi)^T \in H \cap \{(\boldsymbol{\eta}, \psi)^T \mid \boldsymbol{\eta} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \mathbf{0} \text{ na } \mathcal{S}, \psi = 0 \text{ na } \mathcal{S}\}$ . Potom platí

$$(\hat{\mathbf{u}} + \varepsilon_1 \boldsymbol{\eta}, \hat{\phi} + \varepsilon_2 \psi)^T \in H, \quad \forall \boldsymbol{\varepsilon} \in \mathbb{R}^2,$$

pričom hodnota  $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{0}$  zodpovedá optimálnej dvojici  $(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\phi})^T$ . Dostávame teda

$$\frac{I_\lambda(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\phi})}{D(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\phi})} = \max_{\boldsymbol{\varepsilon} \in \mathbb{R}^2} \frac{I_\lambda(\hat{\mathbf{u}} + \varepsilon_1 \boldsymbol{\eta}, \hat{\phi} + \varepsilon_2 \psi)}{D(\hat{\mathbf{u}} + \varepsilon_1 \boldsymbol{\eta}, \hat{\phi} + \varepsilon_2 \psi)}.$$

Na základe toho dostávame podmienku

$$0 = \left. \frac{d}{d\varepsilon_1} \frac{I_\lambda(\hat{\mathbf{u}} + \varepsilon_1 \boldsymbol{\eta}, \hat{\phi} + \varepsilon_2 \psi)}{D(\hat{\mathbf{u}} + \varepsilon_1 \boldsymbol{\eta}, \hat{\phi} + \varepsilon_2 \psi)} \right|_{\boldsymbol{\varepsilon}=\mathbf{0}} = \left. \frac{D \frac{d}{d\varepsilon_1} I_\lambda - I_\lambda \frac{d}{d\varepsilon_1} D}{D^2} \right|_{\boldsymbol{\varepsilon}=\mathbf{0}}.$$

Platí

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varepsilon_1} I_\lambda(\hat{\mathbf{u}} + \varepsilon_1 \boldsymbol{\eta}, \hat{\phi} + \varepsilon_2 \psi)|_{\boldsymbol{\varepsilon}=\mathbf{0}} &= \int_{\mathcal{V}} \left( \frac{1}{\lambda^{1/2}} - \lambda^{1/2} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right) \hat{\phi} \hat{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\eta} \, d\mathcal{V}, \\ \frac{d}{d\varepsilon_1} D(\hat{\mathbf{u}} + \varepsilon_1 \boldsymbol{\eta}, \hat{\phi} + \varepsilon_2 \psi)|_{\boldsymbol{\varepsilon}=\mathbf{0}} &= -2 \int_{\mathcal{V}} \nabla^2 \hat{\mathbf{u}} \cdot \boldsymbol{\eta} \, d\mathcal{V}, \end{aligned}$$

a teda z uvedenej podmienky po dosadení a predelení hodnotou  $\hat{D}$  dostaneme

$$0 = \int_{\mathcal{V}} \left[ \left( \frac{1}{\lambda^{1/2}} - \lambda^{1/2} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right) \hat{\phi} \hat{\mathbf{k}} + 2 \frac{\hat{I}_\lambda}{\hat{D}} \nabla^2 \hat{\mathbf{u}} \right] \cdot \boldsymbol{\eta} \, d\mathcal{V},$$

kde  $\hat{I}_\lambda := I_\lambda(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\phi})$ ,  $\hat{D} := D(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\phi})$ . Keďže sú splnené podmienky Lemy A.3.2, existuje funkcia  $\hat{p}$  taká, že

$$\left( \frac{1}{\lambda^{1/2}} - \lambda^{1/2} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right) \hat{\phi} \hat{\mathbf{k}} + 2 \frac{\hat{I}_\lambda}{\hat{D}} \nabla^2 \hat{\mathbf{u}} = -\nabla \hat{p},$$

resp.

$$\frac{\hat{D}}{2\hat{I}_\lambda} \left( \frac{1}{\lambda^{1/2}} - \lambda^{1/2} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right) \hat{\phi} \hat{\mathbf{k}} + \nabla^2 \hat{\mathbf{u}} + \frac{\hat{D}}{2\hat{I}_\lambda} \nabla \hat{p} = 0. \quad (3.24)$$

Ďalej platí

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varepsilon_2} I_\lambda(\hat{\mathbf{u}} + \varepsilon_1 \boldsymbol{\eta}, \hat{\phi} + \varepsilon_2 \psi)|_{\boldsymbol{\varepsilon}=\mathbf{0}} &= \int_{\mathcal{V}} \left( \frac{1}{\lambda^{1/2}} - \lambda^{1/2} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right) \hat{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{k}} \psi \, d\mathcal{V}, \\ \frac{d}{d\varepsilon_2} D(\hat{\mathbf{u}} + \varepsilon_1 \boldsymbol{\eta}, \hat{\phi} + \varepsilon_2 \psi)|_{\boldsymbol{\varepsilon}=\mathbf{0}} &= 2 \int_{\mathcal{V}} \nabla \hat{\phi} \cdot \nabla \psi \, d\mathcal{V} \\ &= 2 \oint_{\mathcal{S}} \psi \nabla \hat{\phi} \cdot \hat{\mathbf{n}} \, d\mathcal{S} - 2 \int_{\mathcal{V}} \psi \nabla^2 \hat{\phi} \, d\mathcal{V} \\ &= -2 \int_{\mathcal{V}} \psi \nabla^2 \hat{\phi} \, d\mathcal{V}, \end{aligned}$$

pričom sme využili identitu (A.1d). Podobne, ako v prípade derivácie podľa  $\varepsilon_1$ , z nutnej podmienky pre extrém dostaneme

$$0 = \int_{\mathcal{V}} \left[ \left( \frac{1}{\lambda^{1/2}} - \lambda^{1/2} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right) \hat{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{k}} + 2 \frac{\hat{I}_\lambda}{\hat{D}} \nabla^2 \hat{\phi} \right] \psi \, d\mathcal{V}.$$

Sú splnené podmienky Lemy A.3.1 a teda

$$\left( \frac{1}{\lambda^{1/2}} - \lambda^{1/2} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right) \hat{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{k}} + 2 \frac{\hat{I}_\lambda}{\hat{D}} \nabla^2 \hat{\phi} = 0.$$

Ak definujeme

$$\hat{R}_\lambda := \frac{\hat{D}}{\hat{I}_\lambda}, \quad \hat{\pi} := \frac{\hat{D}\hat{p}}{2\hat{I}_\lambda},$$

dostaneme Eulerove–Lagrangeove rovnice v tvare

$$\frac{\hat{R}_\lambda}{2} \left( \frac{1}{\lambda^{1/2}} - \lambda^{1/2} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right) \hat{\phi} \hat{\mathbf{k}} + \nabla^2 \hat{\mathbf{u}} + \nabla \hat{\pi} = 0, \quad (3.25a)$$

$$\frac{\hat{R}_\lambda}{2} \left( \frac{1}{\lambda^{1/2}} - \lambda^{1/2} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right) \hat{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{k}} + \nabla^2 \hat{\phi} = 0. \quad (3.25b)$$

Ak je teda dvojica  $(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\phi})^T$  riešením úlohy (3.22), tak potom existuje konštanta  $\hat{R}_\lambda$  a funkcia  $\hat{\pi}$  také, že platia rovnice (3.25a, b), pričom konštanta  $\hat{R}_\lambda$  je rovná optimálnej hodnote funkcionálu v (3.22).

### Kritická hodnota $\hat{R}_\lambda$ ako minimálna vlastná hodnota systému Eulerových–Lagrangeových rovníc

V predchádzajúcej časti sme ukázali, že riešenie úlohy (3.22) je jedným z riešení vlastnohodnotového problému

$$\frac{R_\lambda}{2} \left( \frac{1}{\lambda^{1/2}} - \lambda^{1/2} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right) \phi \hat{\mathbf{k}} + \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \pi = 0, \quad (3.26a)$$

$$\frac{R_\lambda}{2} \left( \frac{1}{\lambda^{1/2}} - \lambda^{1/2} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right) \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{k}} + \nabla^2 \phi = 0, \quad (3.26b)$$

s vlastnou hodnotou  $R_\lambda$ . Ukážeme, že *minimálna* vlastná hodnota tohto systému je rovná hodnote  $\hat{R}_\lambda$  definovanej v (3.22), podobne ako tomu bolo v prípade analýzy globálnej stability Navierových–Stokesových rovníc v časti 3.1.

Nech dvojica  $(\mathbf{u}, \phi)^T$  je ľubovoľným riešením systému (3.26a, b) a nech  $R_\lambda$  je vlastná hodnota prislúchajúca tejto dvojici. Vynásobme rovnicu (3.26a) vektorom  $\mathbf{u}$  a integrujme, využitím vzťahov (A.1b) a (A.1c) dostaneme

$$\frac{R_\lambda}{2} \int_{\mathcal{V}} \left( \frac{1}{\lambda^{1/2}} - \lambda^{1/2} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right) \phi w \, d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}} \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{u} \, d\mathcal{V} = 0. \quad (3.27)$$

Ďalej vynásobme rovnicu (3.26b) funkciou  $\theta$  a integrujme

$$\frac{R_\lambda}{2} \int_{\mathcal{V}} \left( \frac{1}{\lambda^{1/2}} - \lambda^{1/2} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right) \phi w \, d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}} |\nabla \phi|^2 \, d\mathcal{V} - \oint_{\mathcal{S}} L \phi^2 \, d\mathcal{V}, \quad (3.28)$$

pričom sme využili vzťah (A.1d) a hraničnú podmienku (3.18a). Následne sčítaním rovníc (3.27) a (3.28) dostaneme

$$\frac{1}{R_\lambda} = \frac{I_\lambda(\mathbf{u}, \phi)}{D_\lambda(\mathbf{u}, \phi)}, \quad (3.29)$$

a teda prevrátená hodnota vlastnej hodnoty zodpovedajúcej vlastným funkciám  $(\mathbf{u}, \phi)^T$  je rovná hodnote funkcionálu  $I_\lambda/D_\lambda$  prislúchajúcej tejto dvojici. Uvažujme teraz dvojicu  $(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\phi})^T$  predstavujúcu riešenie variačnej úlohy (3.22). Táto dvojica je súčasne vlastnou dvojicou systému (3.26a, b) a pre príslušnú vlastnú hodnotu  $\hat{R}_\lambda$  potom platí

$$\frac{1}{\hat{R}_\lambda} = \frac{I_\lambda(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\phi})}{D_\lambda(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\phi})} \geq \frac{I_\lambda(\mathbf{u}, \phi)}{D_\lambda(\mathbf{u}, \phi)} = \frac{1}{R_\lambda},$$

kde  $(\mathbf{u}, \phi)^T$  je ľubovoľná iná vlastná dvojica s vlastnou hodnotou  $R_\lambda$ . Platí teda

$$\hat{R}_\lambda \leq R_\lambda,$$

t.j.  $\hat{R}_\lambda$  je minimálnou vlastnou hodnotou systému (3.26a, b).

### 3.2.4 Problém optimálnej hranice stability

**Optimálna voľba hranice stability pre  $\lambda = \lambda(t)$**

Uvedená variačná úloha určuje hodnotu  $\hat{R}_\lambda(t) \equiv \hat{R}(\lambda, t)$  pre každú dvojicu  $(\lambda, t)^T$ . Keďže, pre fixný čas  $t$ , je tok stabilný len v prípade  $\text{Ra}^{1/2} < \hat{R}(\lambda, t)$ , je našim cieľom zvoliť hodnotu parametra  $\lambda$  tak, aby hranica stability bola čo najlepšia možná — t.j.  $\hat{R}(\lambda, t)$  čo možno najväčšie. Optimálnu hranicu stability preto definujeme vzťahom

$$\tilde{R}(t) := \max_{\lambda(t) > 0, t = \text{fix.}} \hat{R}(\lambda, t).$$

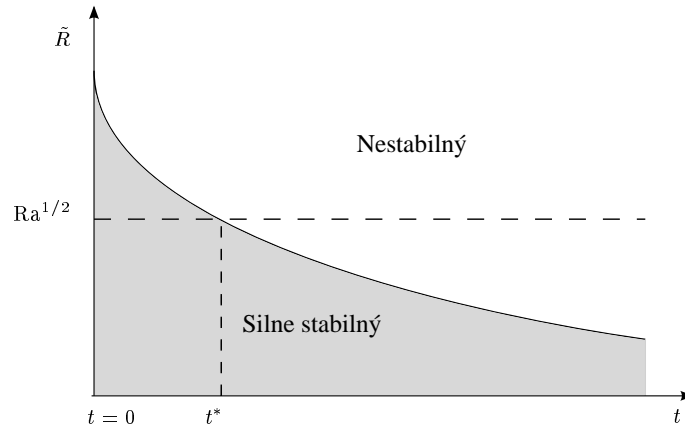
Pre ľubovoľný fixný čas  $t > 0$  tak dostávame optimálnu hodnotu  $\tilde{R}(t)$  ale aj optimálnu hodnotu  $\tilde{\lambda} = \tilde{\lambda}(t)$ . Tu však nastáva problém z toho dôvodu, že pri odvodzovaní identity (3.20) sme nepredpokladali časovú závislosť parametra  $\lambda$ . Ak predpokladáme, že platí

$$\frac{d\tilde{\lambda}}{dt} \leq 0,$$

potom máme

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} \left( \frac{1}{\text{Pr}} |\mathbf{u}|^2 + \tilde{\lambda} \text{Ra} \theta^2 \right) d\mathcal{V} = \underbrace{\frac{dK}{dt} + \tilde{\lambda} \text{Ra} \frac{d\Theta}{dt}}_{dE_{\tilde{\lambda}}/dt} + \text{Ra} \Theta \frac{d\tilde{\lambda}}{dt} \leq \frac{dE_{\tilde{\lambda}}}{dt} < 0,$$

a teda máme zabezpečené, že rýchlosť zmeny celkovej energie kvapalných elementov je ohraničená výrazom  $dE_{\tilde{\lambda}}/dt$  (ktorý predpokladal, že  $\tilde{\lambda} = \text{const.}$ , pozri (3.20)), a teda ohraničená výrazom  $-(1 - \text{Ra}^{1/2}/\hat{R}_{\tilde{\lambda}})D$  (pravá strana nerovnosti (3.21)).

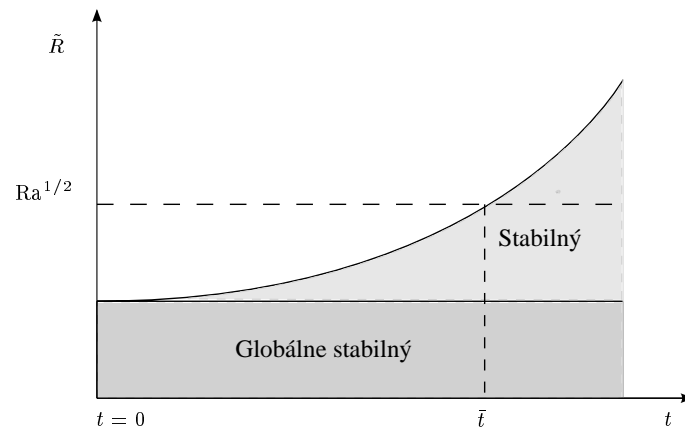


**Obrázok 3.1:** Prípád klesajúcej optimálnej hranice stability. Vo vyfarbenej oblasti energia poruchy exponenciálne klesá.

### Interpretácia možných tvarov hranice stability

V tejto časti sa zameriame na interpretáciu optimálnej hranice stability  $[t, \tilde{R}(t)]^T$  v závislosti od toho, či je táto hranica rastúcou alebo klesajúcou funkciou času. Na obrázku 3.1 je zobrazený prípad, keď  $\tilde{R}(t)$  v čase klesá. Pre zvolenú fixnú hodnotu  $Ra^{1/2}$  tak vieme určiť čas  $t^*$  taký, že  $Ra^{1/2} > \tilde{R}(t)$  pre  $\forall t > t^*$ . Hodnota  $t^*$  teda predstavuje časový okamih, po prekročení ktorého už možno očakávať vznik nestabilit.

V prípade rastúcej hranice stability (obrázok 3.2) vieme zase určiť časový okamih  $\bar{t}$ , po prekročení ktorého energia ľubovoľne veľkej poruchy začne exponenciálne klesať, t.j.  $Ra^{1/2} < \tilde{R}(t)$  pre  $\forall t > \bar{t}$ .



**Obrázok 3.2:** Prípád rastúcej optimálnej hranice stability. Vo vyfarbenej oblasti energia poruchy exponenciálne klesá, pričom oblasť pod horizontálnou čiarou predstavuje oblasť globálnej stability danej Vetou 3.2.1.

# Kapitola 4

## Difúzne tuhnutie dvojrozmerného binárneho systému z rovinnej hranice

### 4.1 Fázový diagram binárneho systému

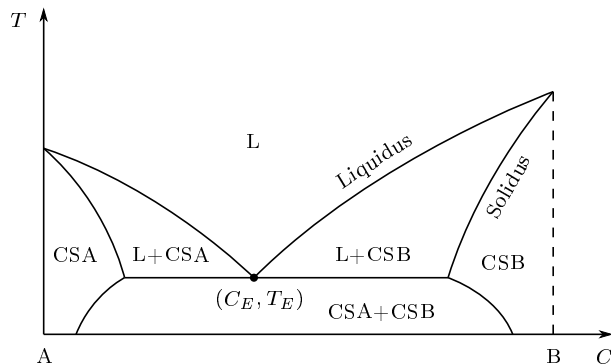
Základom pre štúdium dynamiky tuhnutia binárnych systémov je *rovnovážny fázový diagram*, špecifikujúci možné stavy, v akých sa daný systém môže nachádzať, v závislosti od teploty  $T$  a koncentrácie  $C$  (v hmotnostnom % látky B). Skutočnosť, že ide o rovnovážny fázový diagram (t.j. uvažovaný binárny systém je v termodynamickej rovnováhe), znamená, že pri danej koncentrácii sa teplota v danom bode systému v čase nemení. Typický rovnovážny diagram je znázornený na Obrázku 4.1. Stav systému pri daných hodnotách  $C$  a  $T$  je daný oblasťou vo fázovom diagrame, v ktorej sa bod  $(C, T)^T$  nachádza. Fázový diagram uvedený na Obrázku 4.1 zahŕňa väčšinu binárnych systémov objavujúcich sa v praxi: väčšinu vodných roztokov solí a veľké množstvo kovových zliatin.

Súčasťou fázového diagramu sú dve významné hranice:

- (i) krivka *liquidus*,  $T = T_L(C)$  alebo  $C = C_L(T)$ , oddeľuje oblasť, v ktorej je systém v kvapalnej fáze (L) od oblasti, v ktorej popri sebe koexistuje tuhá a kvapalná fáza (L+CSA alebo L+CSB).
- (ii) krivka *solidus*,  $T = T_C(C)$  alebo  $C = C_S(T)$ , oddeľuje oblasti L+CSA a L+CSB od oblasti, v ktorej je systém kompletne v tuhej fáze.

Krivka *liquidus* reprezentuje teplotu tuhnutia ako funkciu koncentrácie (pod krivkou *liquidus* je už v systéme prítomná aj tuhá fáza), podobne, krivka *solidus* predstavuje teplotu pri ktorej dochádza k čiastočnému roztaveniu tuhej fázy. Obe krivky sa pretínajú v *eutektickom bode*  $(C_E, T_E)^T$ .

Na Obrázku 4.1 vidíme, že pre  $C \in \langle 0, C_E \rangle$  je krivka *liquidus* klesajúca a pre  $C \in \langle C_E, 1 \rangle$  rastúca. Znamená to, že v oblasti  $C \leq C_E$  je teplota tuhnutia najvyššia, ak je v systéme na začiatku prítomná len zložka A (t.j.  $C = 0$ ); pridávaním zložky B do systému sa teplota tuhnutia znižuje. Po prekročení hodnoty  $C = C_E$  sa ďalším pridávaním zložky B teplota tuhnutia binárneho systému zvyšuje, pričom v oblasti  $C \geq C_E$  sa jej maximum dosahuje, keď je v systéme prítomná len zložka B (t.j. pre  $C = 1$ ). Eutektická teplota  $T = T_E$  tak predstavuje najnižšiu možnú

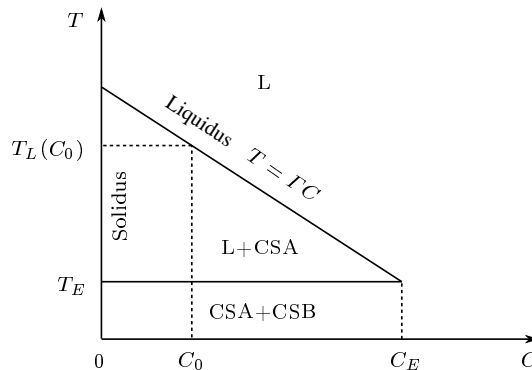


**Obrázok 4.1:** Typický rovnovážny fázový diagram pre binárny systém zložený z dvoch zložiek A a B. Jednotlivé oblasti v diagrame určujú stav, v ktorom sa systém nachádza pri danej teplote  $T$  a koncentrácii  $C$ : CSA — tvrdý roztok, v ktorom sú molekuly zložky B začlenené do kryštalickej mriežky zložky A; CSB — tvrdý roztok, v ktorom sú molekuly zložky A začlenené do kryštalickej mriežky zložky B; CSA+CSB — kompozitná tuhá fáza, v ktorej sú kryštalické zrná CSA roztrúsené v zrnách CSB. Eutektický bod  $(C_E, T_E)$  je bodom, v ktorom sa krivka liquidus pretína s krivkou solidus.

teplotu, pri akej ešte možno binárny systém (pri hodnote koncentrácie  $C = C_E$ ) udržať (úplne) v kvapalnej fáze. Navyše platí, že systém sa môže nachádzať práve v jednej z oblastí  $C \leq C_E$ ,  $C \geq C_E$  v závislosti od počiatkovej koncentrácie  $C_0$  (t.j. systém s počiatkovou hodnotou  $C_0 \leq C_E$  nemôže v žiadnom okamihu prejsť do oblasti  $C \geq C_E$ ), a teda na základe predošlých pozorovaní je teplota tuhnutia binárneho systému vždy nižšia ako teplota tuhnutia jeho jednotlivých zložiek.

V prípade, že je systém v rovnováhe a bod  $(C, T)^T$  leží v oblasti koexistencie tuhej a kvapalnej fázy (t.j. oblasť L+CSA alebo L+CSB), tak potom tuhá časť binárneho systému má koncentráciu rovnú  $C_S(T)$  a kvapalná časť koncentráciu  $C_L(T)$ . Pri modelovaní tuhnutia binárnych systémov je dôležitý predpoklad, že sa systém počas tuhnutia nachádza vždy blízko ekvilibria. Z toho dôvodu je na fázových rozhraniach tuhá fáza/kvapalná fáza teplota vždy spojitá, jej hodnotu na rozhraní budeme označovať  $T_h$ , kým koncentrácia je nespojitá so skokom s hodnoty  $C_L(T)$  v kvapalnej fáze na hodnotu  $C_S(T)$  v tuhej fáze. V dôsledku uvedenej nespojitosti koncentrácie na fázovom rozhraní dochádza k vylučovaniu jednej zo zložiek binárneho systému do kvapalnej fázy nad rozhraním, a teda koncentrácia tejto zložky sa nad fázovým rozhraním zvyšuje.

Tuhá fáza tvoriaca sa pri teplote  $T$  má koncentráciu danú krivkou *solidus*, t.j.  $C = C_S(T)$ . Krivka *solidus* sa štandardne vyjadruje v tvare  $C_S(T) = k_D C_L(T)$ , kde  $k_D \in (0, 1)$  je tzv. *koefficient distribúcie (segregácie)*.



**Obrázok 4.2:** Lineárna aproximácia fázového diagramu použitá v našom modeli tuhnutia binárneho systému.

## 4.2 Matematický model difúzneho tuhnutia binárneho systému

### 4.2.1 Idealizovaný fázový diagram

V našej práci budeme uvažovať idealizovaný fázový diagram (Obrázok 4.2). Krivka *liquidus* je v ňom daná lineárnym vzťahom

$$T_L(C) = -\Gamma C, \quad \Gamma \geq 0, \quad C \leq C_E. \quad (4.1)$$

Predpokladáme pritom (bez ujmy na všeobecnosti), že pre počiatočnú hodnotu koncentrácie platí  $C_0 \leq C_E$ . Krivku *solidus* aproximujeme priamkou  $C_S = 0$  (voľba  $k_D = 0$ ), a teda uvažujeme tuhú fázu tvorenú len zložkou A<sup>1</sup>. To znamená, že v kvapalnej fáze dochádza k rastu hodnoty  $C$  (koncentrácie zložky B) smerom k fázovému rozhraniu tuhá fáza/kvapalná fáza (pri tvorbe tuhej fázy tvorenej výlučne zložkou A sa do kvapalnej fázy nad rozhraním vylučuje zložka B).

### 4.2.2 Formulácia úlohy s voľnou hranicou

Pristúpme teraz k formulácii samotnému matematickému modelu tuhnutia binárneho systému. Uvažujme dvojrozmernú *polonekonečnú* oblasť

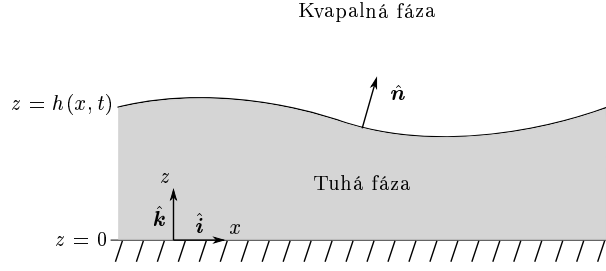
$$x \in \mathbb{R}, \quad z \geq 0$$

vyplnenú binárnym systémom (kompletne v kvapalnej fáze), pričom počiatočná koncentrácia zložky B je  $C = C_0 < C_E$ . V čase  $t = 0$  teplotu na hranici  $z = 0$  náhle znížime (a následne udržujeme) na teplotu  $T = T_B \in (T_E, T_L(C_0))$ . Následkom toho dochádza k tuhnutiu daného binárneho systému — v ľubovoľnom čase  $t > 0$  sa v systéme nachádza tuhá fáza ohraničená zospodu hranicou  $z = 0$  a zhora kvapalnou fázou, pričom rozhranie medzi tuhú a kvapalnou fázou je vo všeobecnosti funkciou premenných  $x$  a  $t$ , t.j.  $z$ -ové súradnice bodov rozhrania sú dané vzťahom

$$z = h(x, t).$$

<sup>1</sup>Uvedená situácia zodpovedá takým parametrom kryštalickej mriežky zložky A, keď nedochádza k začleneniu molekúl zložky B do tejto mriežky.





**Obrázok 4.3:** Rozhranie medzi kvapalnou a tuhú fázou v premenných  $(x, z)^T$  v prípade dvojrozmerného difúzneho tuhnutia binárneho systému;  $\hat{\mathbf{n}}$  je jednotkový vektor normály k fázovému rozhraniu orientovaný do kvapalnej fázy,  $\hat{\mathbf{i}} := (1, 0)^T$  a  $\hat{\mathbf{k}} := (0, 1)^T$ .

Uvedená situácia je znázornená na Obrázku 4.3.

Teplotné pole  $T = T(x, z, t)$  v kvapalnej a tuhej fáze a koncentračné pole  $C = C(x, z, t)$  v kvapalnej fáze (v tuhej fáze uvažujeme  $C = 0$ ) sa riadia nasledovným systémom *difúzných rovníc*

$$z < h(x, t) : \quad \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa_s \nabla^2 T, \quad (4.2a)$$

$$z > h(x, t) : \quad \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa_l \nabla^2 T, \quad (4.2b)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \nabla^2 C \quad (4.2c)$$

spolu s hraničnými podmienkami

$$T|_{z=0} = T_B, \quad \forall t > 0, \quad (4.3a)$$

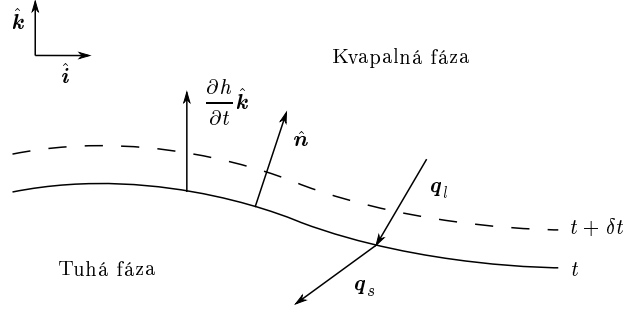
$$T \rightarrow T_\infty \quad \text{pre } z \rightarrow \infty \quad \text{alebo } t \rightarrow 0, \quad (4.3b)$$

$$C \rightarrow C_0 \quad \text{pre } z \rightarrow \infty \quad \text{alebo } t \rightarrow 0. \quad (4.3c)$$

*Poznámka:* Difúzne konštanty  $\kappa_s, \kappa_l$  sú definované vzťahom  $\kappa_i := k/(\rho C_{pi})$ ,  $i = s, l$ , kde  $\rho_i$  je hustota,  $C_{pi}$  je tepelná kapacita a  $k$  je tepelná vodivosť.

Problém tuhnutia binárneho systému je problémom s voľnou hranicou (voľnou hranicou je tu fázové rozhranie  $z = h(x, t)$ ), pričom táto hranica je tiež súčasťou riešenia. Z toho dôvodu je potrebné zadať podmienky pre hodnoty riešenia na tejto hranici.

Odvodíme najskôr podmienku vyjadrujúcu *zákon zachovania tepla na fázovom rozhraní* (tzv. *Stefanova podmienka*). V procese tuhnutia dochádza k začleňovaniu náhodne sa pohybujúcich molekúl do kryštalickej mriežky vznikajúcej tuhej fázy, a teda k znižovaniu ich entropie (neusporiadanosti). Dôsledkom toho je uvoľňovanie tepla (tzv. *latentné teplo*) na fázovom rozhraní, pričom nutnou podmienkou toho, aby tuhnutie systému pokračovalo ďalej, je transport tohto tepla smerom od rozhrania. Definujme *lokálnu rýchlosť tuhnutia*  $V_n$  ako rýchlosť pohybu rozhrania (presnejšie jej



**Obrázok 4.4:** Schématické znázornenie zákona zachovania tepla na fázovom rozhraní.

veľkosť) v smere normálovom k rozhraniu<sup>2</sup>

$$V_n := \frac{\partial h}{\partial t} \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{n}},$$

kde  $\hat{\mathbf{k}} := (0, 1)^T$  a  $\hat{\mathbf{n}}$  je jednotkový vektor normály k rozhraniu smerujúci do kvapalnej fázy, definovaný vzťahom

$$\hat{\mathbf{n}} := \frac{\nabla(z-h)}{|\nabla(z-h)|} \Big|_{z=h} = \frac{1}{[1 + (\partial h / \partial x)^2]^{1/2}} \left( -\frac{\partial h}{\partial x}, 1 \right)^T.$$

Ďalej označme  $L$  latentné teplo uvoľnené na jednotku hmotnosti. Potom latentné teplo uvoľnené za čas  $\delta t$  na jednotku plochy rozhrania (v našom dvojrozmernom prípade na jednotku dĺžky) je rovné

$$\rho_s L V_n \delta t,$$

pričom výraz  $\rho_s V_n L$  predstavuje rýchlosť uvoľňovania latentného tepla na jednotku plochy (dĺžky) rozhrania. Lokálna rýchlosť toku tepla<sup>3</sup> v tuhej resp. kvapalnej fáze je podľa *Fourierovho zákona* rovná

$$\mathbf{q}_i = -k_i \nabla T, \quad k_i > 0, \quad i = s, l, \quad [\mathbf{q}_i] = \text{J m}^{-2} \text{s}^{-1}, \quad (4.4)$$

kde  $k_i$ ,  $i = s, l$  je *koefficient vedenia tepla* v tuhej, resp. kvapalnej fáze. Keďže teplota na fázovom rozhraní rastie v smere osi  $z$ , z (4.4) vyplýva, že na rozhraní je vektor  $\mathbf{q}_i$  orientovaný vždy smerom do tuhej fázy (Obrázok 4.4). Množstvo tepla (na jednotku plochy) privedené na rozhranie z kvapalnej fázy za čas  $\delta t$  je potom rovné hodnote  $-\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{q}_l|_{z=h+\delta t}$  (kolmý priemet vektora  $\mathbf{q}_l \delta t$  na vektor  $-\hat{\mathbf{n}}$ ). Analogicky, množstvo tepla (na jednotku plochy) odvedené za čas  $\delta t$  z rozhrania do tuhej fázy je rovné  $-\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{q}_s|_{z=h-\delta t}$ . Avšak podľa zákona zachovania energie na rozhraní musí byť teplo

<sup>2</sup>Výraz  $(\partial h / \partial t) \hat{\mathbf{k}}$  predstavuje lokálnu rýchlosť pohybu rozhrania v smere osi  $z$  (rýchlosť pohybu  $z$ -ovej súradnice rozhrania pre fixné  $x$ );  $V_n$  potom predstavuje kolmý priemet tejto rýchlosti do smeru daného vektorom  $\hat{\mathbf{n}}$ .

<sup>3</sup>Je potrebné odlíšiť tok tepla v zmysle vektora  $\mathbf{q}$  (vektor toku tepla v smere  $-\nabla T$ ) od toku tepla v zmysle množstva tepla (skalárna veličina) pretečeného plochou za jednotku času (t.j.  $-\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{q}$ ).

odvedené z rozhrania rovné súčtu tepla privedeného na rozhranie a latentného tepla uvoľneného pri tuhnutí kvapalnej fázy, a teda musí platiť

$$-\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{q}_s|_{z=h^-} \delta t = -\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{q}_l|_{z=h^+} \delta t + \rho_s L V_n \delta t.$$

Dostávame tak *Stefanovu podmienku* vyjadrujúcu zákon zachovania energie na fázovom rozhraní

$$\rho_s L V_n = \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{q}_l|_{z=h^+} - \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{q}_s|_{z=h^-},$$

resp.

$$\rho_s L \frac{\partial h}{\partial t} \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{n}} = k_s \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla T|_{z=h^-} - k_l \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla T|_{z=h^+}. \quad (4.5)$$

Podmienku pre koncentračné pole  $C$  na rozhraní dostaneme zo *zákona zachovania hmoty na rozhraní* na základe analogických úvah ako pri odvodení podmienok pre teplotné pole. Pre *lokálnu rýchlosť difúzie hmoty*  $\mathbf{J}$  platí *Fickov zákon*

$$\mathbf{J} := -D \nabla C, \quad [\mathbf{J}] = \text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}.$$

Uvedený vzťah vyjadruje skutočnosť, že (lokálne) rýchlosť difúzie hmoty je úmerná záporne vzatému gradientu koncentrácie (t.j. difúzia hmoty prebieha v smere koncentračného spádu). Potom pre množstvo hmoty (zložky B), ktoré prejde jednotkou plochy rozhrania za čas  $\delta t$  je rovné  $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}|_{z=h^+} \delta t$ . Na druhej strane, množstvo zložky B na jednotku plochy vylúčené pri tvorbe tuhej fázy za čas  $\delta t$  je rovné

$$C|_{z=h^+} \frac{\partial h}{\partial t} \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{k}} \delta t.$$

Zo zákona zachovania hmoty na rozhraní však nutne vyplýva rovnosť

$$C|_{z=h^+} \frac{\partial h}{\partial t} \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{k}} \delta t = \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}|_{z=h^+} \delta t,$$

a teda dostávame hľadanú podmienku pre koncentračné pole na fázovom rozhraní

$$C|_{z=h^+} \frac{\partial h}{\partial t} \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{k}} = -D \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla C|_{z=h^+}. \quad (4.6)$$

### 4.3 Transformácia rovníc do bezrozmernej formy

Uvedené rovnice popisujúce tuhnutie binárneho systému sú *rozmerné*. Fyzikálne rozmery jednotlivých premenných a konštánt sú nasledovné:

$$\begin{aligned} [T] &= \text{K}, \\ [C] &= 1, \\ [t] &= \text{s}, \\ [h] &= [\mathbf{x}] = \text{m}, \\ [\kappa_s] &= [\kappa_l] = [D] = \text{m}^2 \text{s}^{-1}. \end{aligned}$$

Zavedieme nasledovnú transformáciu:

$$\begin{aligned} T &\mapsto \theta := \frac{T - T_h}{T_\infty - T_h}, \\ t &\mapsto \frac{l^2}{\kappa_l} t, \\ \mathbf{x} &\mapsto l\mathbf{x}, \end{aligned}$$

kde veličiny na pravej strane sú bezrozmerné,  $l$  predstavuje vhodne zvolenú dĺžkovú skálu. Hodnota  $T_h$  predstavuje (rozmernú) teplotu fázového rozhrania. Dostaneme tak nasledovný bezrozmerný tvar rovníc (4.2a-c)

$$z < h(x, t) : \quad \frac{\partial \theta}{\partial t} = \bar{\kappa} \nabla^2 \theta, \quad (4.7a)$$

$$z > h(x, t) : \quad \frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla^2 \theta, \quad (4.7b)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \gamma_l \nabla^2 C, \quad (4.7c)$$

kde  $\bar{\kappa} := \kappa_s / \kappa_l$  a  $\gamma_l := D / \kappa_l$ . Hraničné podmienky potom vyzerajú nasledovne

$$\theta|_{z=0} = \theta_B := \frac{T_B - T_h}{T_\infty - T_h}, \quad \forall t > 0, \quad (4.8a)$$

$$C \rightarrow C_0 \quad \text{pre } z \rightarrow \infty \quad \text{alebo } t \rightarrow 0, \quad (4.8b)$$

$$\theta \rightarrow 1 \quad \text{pre } z \rightarrow \infty \quad \text{alebo } t \rightarrow 0. \quad (4.8c)$$

a podmienky na fázovom rozhraní

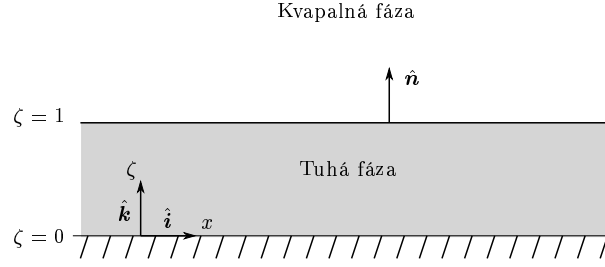
$$\begin{aligned} K \frac{\partial h}{\partial t} \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{n}} &= k_{sl} \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla \theta|_{z=h^-} - \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla \theta|_{z=h^+}, \\ C|_{z=h^+} \frac{\partial h}{\partial t} \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{k}} &= -\gamma_l \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla C|_{z=h^+}, \\ \theta|_{z=h} &= 0, \end{aligned}$$

kde  $K := (\rho_s L \kappa_l) / (\Delta T k_l)$  a  $k_{sl} := k_s / k_l$ .

## 4.4 Transformácia oblasti s pohyblivou hranicou na oblasť s fixnou hranicou

Vyššie uvedená formulácia modelu difúzneho tuhnutia binárneho systému predstavuje problém s pohyblivou hranicou, a teda jednotlivé oblasti (tuhá fáza  $z < h(x, t)$  a kvapalná fáza  $z > h(x, t)$ ), v ktorých sú príslušné rovnice definované, sú časovo závislé. Za účelom prevedenia na problém s pevnou hranicou definujeme nasledovnú transformáciu vertikálnej priestorovej premennej

$$z \mapsto \zeta := \frac{z}{h(x, t)}, \quad (4.10)$$



**Obrázok 4.5:** Rozhranie medzi kvapalnou a tuhú fázou v transformovaných premenných  $(x, \zeta)^T$ .

a teda pozícií fázového rozhrania zodpovedá hodnota  $\zeta = 1$ . Situácia je zobrazená na Obrázku 4.5.

V ďalšom budeme pre lepšiu prehľadnosť používať nasledovné označenia pre funkcie transformovaných závislých premenných:

$$\begin{aligned} \theta(x, \zeta, t) &:= \theta(x, z, t)|_{z=h(x,t)\zeta}, \\ \left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)_\zeta &:= \frac{\partial}{\partial t}\theta(x, \zeta, t), \quad \left(\frac{\partial\theta}{\partial x}\right)_\zeta := \frac{\partial}{\partial x}\theta(x, \zeta, t), \\ \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2}\right)_\zeta &:= \frac{\partial^2}{\partial x^2}\theta(x, \zeta, t), \quad \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x\partial\zeta}\right)_\zeta := \frac{\partial}{\partial t}\theta(x, \zeta, t). \end{aligned}$$

Dosadením vzťahov (A.4a-f) a analogických vzťahov pre  $C = C(x, \zeta, t)$  do rovníc (4.2a-c) dostaneme pre tuhú fázu  $\zeta < 1$  rovnice

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)_\zeta &= \frac{1}{h} \frac{\partial h}{\partial t} \zeta \frac{\partial\theta}{\partial\zeta} + \bar{\kappa} \left\{ \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2}\right)_\zeta + \frac{1}{h^2} \left[ \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2 + 1 \right] \frac{\partial^2\theta}{\partial\zeta^2} \right. \\ &\quad \left. - \frac{2}{h} \frac{\partial h}{\partial x} \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x\partial\zeta}\right)_\zeta - \left[ \frac{1}{h} \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{2}{h^2} \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2 \right] \frac{\partial\theta}{\partial\zeta} \right\}. \end{aligned} \quad (4.11a)$$

a pre kvapalnú fázu  $\zeta > 1$  rovnice

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)_\zeta &= \frac{1}{h} \frac{\partial h}{\partial t} \zeta \frac{\partial\theta}{\partial\zeta} + \left\{ \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2}\right)_\zeta + \frac{1}{h^2} \left[ \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2 + 1 \right] \frac{\partial^2\theta}{\partial\zeta^2} \right. \\ &\quad \left. - \frac{2}{h} \frac{\partial h}{\partial x} \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x\partial\zeta}\right)_\zeta - \left[ \frac{1}{h} \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{2}{h^2} \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2 \right] \frac{\partial\theta}{\partial\zeta} \right\}, \end{aligned} \quad (4.11b)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)_\zeta &= \frac{1}{h} \frac{\partial h}{\partial t} \zeta \frac{\partial C}{\partial\zeta} + \gamma \left\{ \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right)_\zeta + \frac{1}{h^2} \left[ \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2 + 1 \right] \frac{\partial^2 C}{\partial\zeta^2} \right. \\ &\quad \left. - \frac{2}{h} \frac{\partial h}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x\partial\zeta}\right)_\zeta - \left[ \frac{1}{h} \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{2}{h^2} \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2 \right] \frac{\partial C}{\partial\zeta} \right\} \end{aligned} \quad (4.11c)$$

V ďalšom texte už budeme uvažovať funkcie  $\theta$  a  $C$  výlučne ako funkcie premenných  $x, \zeta$  a  $t$  a preto budeme všade vynechávať značenie  $(\dots)_\zeta$ .

Transformované hraničné podmienky majú nasledovnú formu

$$\theta|_{\zeta=0} = \theta_B, \quad \forall t > 0, \quad (4.12a)$$

$$\theta \rightarrow 1 \quad \text{ak} \quad \zeta \rightarrow \infty \quad \text{alebo} \quad t \rightarrow 0, \quad (4.12b)$$

$$C \rightarrow C_0 \quad \text{ak} \quad \zeta \rightarrow \infty \quad \text{alebo} \quad t \rightarrow 0. \quad (4.12c)$$

Zostáva ešte odvodiť tvar podmienok na (fixovanom) rozhraní  $\zeta = 1$ . Platí

$$\nabla(z-h)|_{z=h} = \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial \zeta} \right)^T (h\zeta - h)|_{\zeta=1} = \left[ (\zeta - 1) \frac{\partial h}{\partial x}, 1 \right]^T \Big|_{\zeta=1} = (0, 1)^T,$$

a teda pre vektor  $\hat{\mathbf{n}}$  vyjadrený v premenných  $(x, \zeta)^T$  platí  $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{k}}$ . Ďalej pripomeňme, že

$$\nabla\theta = \left( \frac{\partial\theta}{\partial x} - \frac{1}{h} \frac{\partial\theta}{\partial \zeta} \frac{\partial h}{\partial x}, \frac{1}{h} \frac{\partial\theta}{\partial \zeta} \right)^T, \quad \text{analogicky pre } C,$$

a teda z (4.5) a (4.6) dostávame nasledovný tvar podmienok na rozhraní  $\zeta = 1$

$$K \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{1}{h} \left( k_{sl} \frac{\partial\theta}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=1^-} - \frac{\partial\theta}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=1^+} \right), \quad (4.13a)$$

$$C|_{\zeta=1^+} \frac{\partial h}{\partial t} = -\gamma_l \frac{1}{h} \frac{\partial C}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=1^+}, \quad (4.13b)$$

$$\theta|_{\zeta=1} = 0. \quad (4.13c)$$

## 4.5 Jednorozmerný základný stav pre problém difúzneho tuhnutia binárneho systému

### 4.5.1 Bezrozmerné rovnice pre jednorozmerný základný stav v pôvodných a transformovaných premenných

Budeme uvažovať jednorozmerný základný stav (v smere osi  $z$ ) s rovinným rozhraním  $z = \bar{h}(t)$  medzi tuhou a kvapalnu fázou. Polia charakterizujúce tento základný stav budeme označovať prúžkom. Systém rovníc v premenných  $(z, t)^T$  vyzerá nasledovne

$$z < \bar{h}(t) : \quad \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} = \bar{\kappa} \frac{\partial^2 \bar{\theta}}{\partial z^2}, \quad (4.14a)$$

$$z > \bar{h}(t) : \quad \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} = \frac{\partial^2 \bar{\theta}}{\partial z^2}, \quad (4.14b)$$

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \gamma_l \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2} \quad (4.14c)$$

spolu s hraničnými podmienkami

$$\bar{\theta}|_{z=0} = \theta_B, \quad \forall t > 0, \quad (4.15a)$$

$$\bar{C} \rightarrow C_0 \quad \text{ak} \quad z \rightarrow \infty \quad \text{alebo} \quad t \rightarrow 0, \quad (4.15b)$$

$$\bar{\theta} \rightarrow 1 \quad \text{ak} \quad z \rightarrow \infty \quad \text{alebo} \quad t \rightarrow 0. \quad (4.15c)$$

a podmienkami na voľnom rozhraní  $z = h(t)$

$$K \frac{d\bar{h}}{dt} = k_{sl} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \Big|_{z=\bar{h}^-} - \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \Big|_{z=\bar{h}^+}, \quad (4.16a)$$

$$\bar{C} \Big|_{z=\bar{h}^+} \frac{d\bar{h}}{dt} = -\gamma_l \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \Big|_{z=\bar{h}^+}, \quad (4.16b)$$

$$\theta \Big|_{z=\bar{h}} = 0. \quad (4.16c)$$

Transformácia na fixnú oblasť má v tomto prípade nasledovný tvar (pozri (4.10))

$$z \mapsto \zeta := \frac{z}{\bar{h}(t)},$$

a teda z rovníc (4.11a–c) dostaneme transformované rovnice pre kvapalnú a tuhú fázu

$$\zeta < 1 : \quad \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} = \frac{1}{\bar{h}} \frac{d\bar{h}}{dt} \zeta \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial \zeta} + \bar{\kappa} \frac{1}{\bar{h}^2} \frac{\partial^2 \bar{\theta}}{\partial \zeta^2}, \quad (4.17a)$$

$$\zeta > 1 : \quad \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} = \frac{1}{\bar{h}} \frac{d\bar{h}}{dt} \zeta \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial \zeta} + \frac{1}{\bar{h}^2} \frac{\partial^2 \bar{\theta}}{\partial \zeta^2}, \quad (4.17b)$$

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \frac{1}{\bar{h}} \frac{d\bar{h}}{dt} \zeta \frac{\partial \bar{C}}{\partial \zeta} + \gamma_l \frac{1}{\bar{h}^2} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial \zeta^2} \quad (4.17c)$$

s hraničnými podmienkami

$$\bar{\theta} \Big|_{\zeta=0} = \theta_B, \quad \forall t > 0, \quad (4.18a)$$

$$\bar{C} \rightarrow C_0 \quad \text{ak} \quad \zeta \rightarrow \infty \quad \text{alebo} \quad t \rightarrow 0, \quad (4.18b)$$

$$\bar{\theta} \rightarrow 1 \quad \text{ak} \quad \zeta \rightarrow \infty \quad \text{alebo} \quad t \rightarrow 0. \quad (4.18c)$$

a podmienkami na voľnom rozhraní  $\zeta = 1$

$$K \frac{d\bar{h}}{dt} = \frac{1}{\bar{h}} \left( k_{sl} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=1^-} - \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=1^+} \right), \quad (4.19a)$$

$$\bar{C} \Big|_{\zeta=1^+} \frac{d\bar{h}}{dt} = -\gamma_l \frac{1}{\bar{h}} \frac{\partial \bar{C}}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=1^+}, \quad (4.19b)$$

$$\theta \Big|_{\zeta=1} = 0. \quad (4.19c)$$

### 4.5.2 Analytické riešenie transformovaných bezrozmerných rovníc

V tejto časti odvodíme explicitný tvar riešenia rovníc (4.17a–c). Budeme hľadať riešenie, ktoré je funkciou len premennej  $\zeta$ , t.j.  $\bar{\theta} = \bar{\theta}(\zeta)$ ,  $\bar{C} = \bar{C}(\zeta)$ . Pre takéto riešenie platí  $\partial \bar{C} / \partial t = 0$ ,  $\partial \bar{\theta} / \partial t = 0$ , a teda musí spĺňať systém *obyčajných* diferenciálnych rovníc

$$\zeta < 1 : \quad 0 = \frac{1}{\bar{h}} \frac{d\bar{h}}{dt} \zeta \frac{d\bar{\theta}}{d\zeta} + \bar{\kappa} \frac{1}{\bar{h}^2} \frac{d^2 \bar{\theta}}{d\zeta^2},$$

$$\begin{aligned}\zeta > 1 : \quad 0 &= \frac{1}{\bar{h}} \frac{d\bar{h}}{dt} \zeta \frac{d\bar{\theta}}{d\zeta} + \frac{1}{\bar{h}^2} \frac{d^2\bar{\theta}}{d\zeta^2}, \\ 0 &= \frac{1}{\bar{h}} \frac{d\bar{h}}{dt} \zeta \frac{d\bar{C}}{d\zeta} + \gamma_l \frac{1}{\bar{h}^2} \frac{d^2\bar{C}}{d\zeta^2}.\end{aligned}$$

Využitím vzťahu

$$\bar{h} \frac{d\bar{h}}{dt} \equiv \frac{1}{2} \frac{d\bar{h}^2}{dt}$$

možno tieto rovnice prepísať do tvaru

$$\zeta < 1 : \quad 0 = \frac{1}{2} \frac{d\bar{h}^2}{dt} \zeta \frac{d\bar{\theta}}{d\zeta^2} + \bar{\kappa} \frac{d^2\bar{\theta}}{d\zeta^2}, \quad (4.20a)$$

$$\zeta > 1 : \quad 0 = \frac{1}{2} \frac{d\bar{h}^2}{dt} \zeta \frac{d\bar{\theta}}{d\zeta} + \frac{d^2\bar{\theta}}{d\zeta^2}, \quad (4.20b)$$

$$0 = \frac{1}{2} \frac{d\bar{h}^2}{dt} \zeta \frac{d\bar{C}}{d\zeta} + \gamma_l \frac{d^2\bar{C}}{d\zeta^2}, \quad (4.20c)$$

podobne podmienky (4.19a, b) prejdú na tvar

$$\frac{K}{2} \frac{d\bar{h}^2}{dt} = k_{sl} \left. \frac{d\bar{\theta}}{d\zeta} \right|_{\zeta=1-} - \left. \frac{d\bar{\theta}}{d\zeta} \right|_{\zeta=1+}, \quad (4.21a)$$

$$\bar{C}|_{\zeta=1+} \frac{d\bar{h}^2}{dt} = -\gamma_l \left. \frac{d\bar{C}}{d\zeta} \right|_{\zeta=1+}. \quad (4.21b)$$

### Tvar funkcie $\bar{h}(t)$

Keďže funkcie  $\bar{\theta}$  a  $\bar{C}$  nezávisia od  $t$ , pravé strany rovníc (4.21a, b) sú konštantné v čase a teda platí

$$\frac{d\bar{h}^2}{dt} = \text{const.}$$

Z toho vyplýva, že  $\bar{h}(t)$  má tvar  $\bar{h}(t) = (At)^{1/2}$  (musí totiž platiť  $\bar{h}(0) = 0$ ), kde  $A \in \mathbb{R}^+$  je konštanta. My budeme túto konštantu hľadať v špeciálnom tvare  $A = 4\lambda^2\gamma_l$ , t.j.

$$\bar{h}(t) = 2\lambda(\gamma_l t)^{1/2}, \quad \text{resp.} \quad \frac{d\bar{h}^2}{dt} = 4\gamma_l\lambda^2. \quad (4.22)$$

### Funkcie $\bar{\theta}(\zeta)$ a $\bar{C}(\zeta)$

Zavedením substitúcie  $g := d\bar{\theta}/d\zeta$  a  $f := d\bar{C}/d\zeta$  a využitím (4.22) transformujeme rovnice (4.20a-c) na obyčajné diferenciálne rovnice 1. rádu

$$\zeta < 1 : \quad \bar{\kappa} \frac{dg}{d\zeta} + 2\gamma_l\lambda^2\zeta f = 0,$$

$$\zeta > 1 : \quad \frac{dg}{d\zeta} + 2\gamma_l\lambda^2\zeta g = 0,$$

$$\frac{df}{d\zeta} + 2\lambda^2\zeta f = 0.$$



Riešením týchto rovníc a spätnou substitúciou dostaneme

$$\begin{aligned}\zeta < 1: \quad \bar{\theta} &= \theta_B + B_1 \int_0^\zeta e^{-\gamma_s(\lambda y)^2} dy, \\ \zeta > 1: \quad \bar{\theta} &= 1 - B_2 \int_\zeta^\infty e^{-\gamma_l(\lambda y)^2} dy, \\ \bar{C} &= C_0 - B_3 \int_\zeta^\infty e^{-(\lambda y)^2} dy,\end{aligned}$$

kde  $B_1$ ,  $B_2$  a  $B_3$  sú neznámeme konštanty a  $\gamma_s := D/\kappa_s$ . Jednoduchou substitúciou možno uvedené riešenia upraviť na tvar

$$\begin{aligned}\zeta < 1: \quad \bar{\theta} &= \theta_B + \frac{B_1 \pi^{1/2}}{2\gamma_s^{1/2} \lambda} \operatorname{erf}(\gamma_s^{1/2} \lambda \zeta), \\ \zeta > 1: \quad \bar{\theta} &= 1 - \frac{B_2 \pi^{1/2}}{2\gamma_l^{1/2} \lambda} \operatorname{erfc}(\gamma_l^{1/2} \lambda \zeta), \\ \bar{C} &= C_0 - \frac{B_3 \pi^{1/2}}{2\lambda} \operatorname{erfc}(\lambda \zeta),\end{aligned}$$

kde

$$\begin{aligned}\operatorname{erf}(y) &:= \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^y e^{-s^2} ds, \\ \operatorname{erfc}(y) &:= 1 - \operatorname{erf}(y) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_y^\infty e^{-s^2} ds.\end{aligned}$$

Na určenie neznámych konštánt  $B_1$  a  $B_2$  využijeme podmienku  $\bar{\theta}|_{\zeta=1^-} = 0 = \bar{\theta}|_{\zeta=1^+}$  vyjadrujúcu spojitosť teploty na rozhraní, t.j.

$$\theta_B + \frac{B_1 \pi^{1/2}}{2\gamma_s^{1/2} \lambda} \operatorname{erf}(\gamma_s^{1/2} \lambda) = 0 = 1 - \frac{B_2 \pi^{1/2}}{2\gamma_l^{1/2} \lambda} \operatorname{erfc}(\gamma_l^{1/2} \lambda).$$

Bezrozmerná teplota  $\bar{\theta}$  má potom nasledovný tvar

$$\begin{aligned}\zeta < 1: \quad \bar{\theta} &= \theta_B \left[ 1 - \frac{\operatorname{erf}(\gamma_s^{1/2} \lambda \zeta)}{\operatorname{erf}(\gamma_s^{1/2} \lambda)} \right], \\ \zeta > 1: \quad \bar{\theta} &= 1 - \frac{\operatorname{erfc}(\gamma_l^{1/2} \lambda \zeta)}{\operatorname{erfc}(\gamma_l^{1/2} \lambda)}.\end{aligned}$$

Ďalej, ak označíme  $C_h := \bar{C}|_{\zeta^+}$  hodnotu koncentrácie na fázovom rozhraní, dostaneme

$$C_0 - \frac{B_3 \pi^{1/2}}{2\lambda} \operatorname{erfc}(\lambda \zeta) = C_h,$$

z čoho možno určiť konštantu  $B_3$ . Pre funkciu  $\bar{C}$  tak dostávame formulu

$$\zeta > 1: \quad \bar{C} = C_0 - (C_0 - C_h) \frac{\operatorname{erfc}(\lambda \zeta)}{\operatorname{erfc}(\lambda)}.$$

V práve odvodených vzťahoch zostávajú neznámymi konštanty  $\lambda$  a  $C_h$ . Na ich určenie využijeme hraničné podmienky (4.21a, b).

**Určenie konštánt  $\lambda$  a  $C_h$** 

Na základe vyššie odvodených vzťahov pre funkciu  $\bar{\theta}$  platí

$$\begin{aligned} \left. \frac{d\bar{\theta}}{d\zeta} \right|_{\zeta=1-} &= -\frac{2\theta_B}{\pi^{1/2} \operatorname{erf}(\gamma_s^{1/2} \lambda)} \frac{d}{d\zeta} \int_0^{\gamma_s^{1/2} \lambda \zeta} e^{-y^2} dy \Big|_{\zeta=1-} \\ &= -\frac{2\theta_B \gamma_s^{1/2} \lambda}{\pi^{1/2} \operatorname{erf}(\gamma_s^{1/2} \lambda)} e^{-(\gamma_s^{1/2} \lambda \zeta)^2} \Big|_{\zeta=1-} = -\frac{2\theta_B \gamma_s^{1/2} \lambda}{\pi^{1/2} e^{(\gamma_s^{1/2} \lambda)^2} \operatorname{erf}(\gamma_s^{1/2} \lambda)}, \\ \left. \frac{d\bar{\theta}}{d\zeta} \right|_{\zeta=1+} &= -\frac{2}{\pi^{1/2} \operatorname{erfc}(\gamma_l^{1/2} \lambda)} \frac{d}{d\zeta} \int_{\gamma_l^{1/2} \lambda \zeta}^{\infty} e^{-y^2} dy \Big|_{\zeta=1+} \\ &= \frac{2\gamma_l^{1/2} \lambda}{\pi^{1/2} \operatorname{erfc}(\gamma_l^{1/2} \lambda)} e^{-(\gamma_l^{1/2} \lambda \zeta)^2} \Big|_{\zeta=1+} = \frac{2\gamma_l^{1/2} \lambda}{\pi^{1/2} e^{(\gamma_l^{1/2} \lambda)^2} \operatorname{erfc}(\gamma_l^{1/2} \lambda)}. \end{aligned}$$

Dosadením týchto vzťahov do podmienky (4.21a) dostaneme po algebraických úpravách *nelineárnu algebraickú rovnicu*, ktorej riešením je hľadaná konštanta  $\lambda$

$$\frac{k_{sl} \theta_B \beta}{P(\gamma_s^{1/2} \lambda)} + \frac{1}{R(\gamma_l^{1/2} \lambda)} + K = 0, \quad (4.23)$$

kde  $\beta := \gamma_s / \gamma_l$  a funkcie  $P$  a  $R$  sú definované nasledovne

$$P(y) := \pi^{1/2} y e^{y^2} \operatorname{erf}(y), \quad R(y) := \pi^{1/2} y e^{y^2} \operatorname{erfc}(y).$$

Hodnotu  $C_h$  určíme z podmienky (4.21b). Platí

$$\begin{aligned} \left. \frac{d\bar{C}}{d\zeta} \right|_{\zeta=1+} &= \frac{2(C_h - C_0)}{\pi^{1/2} \operatorname{erfc}(\lambda)} \frac{d}{d\zeta} \int_{\lambda \zeta}^{\infty} e^{-y^2} dy \Big|_{\zeta=1+} \\ &= \frac{2(C_h - C_0) \lambda}{\pi^{1/2} \operatorname{erfc}(\lambda)} e^{-(\lambda \zeta)^2} \Big|_{\zeta=1+} = \frac{2(C_h - C_0) \lambda}{R(\lambda)}. \end{aligned}$$

Dosadením do (4.21b) dostaneme

$$C_h = \frac{C_0}{1 - \gamma_l R(\lambda)}. \quad (4.24)$$

**4.5.3 Numerická reprodukcia základného stavu**

Cieľom tejto časti je odvodiť numerickú schému na riešenie rovníc (4.20a-c). Zmyslom numerickej reprodukcie riešenia týchto rovníc je otestovať náš numerický prístup (spôsob diskretizácie diferenciálnych rovníc) skôr, ako pristúpime k numerickejmu riešeniu dvojrozmerného problému (4.11a-c).

Pri numerickejmu riešení rovníc pre jednorozmerný základný stav využijeme skutočnosť, že riešenie týchto rovníc je stacionárnym riešením rovníc (4.17a-c), a teda ľubovoľné riešenie rovníc (4.17a-c) konverguje pre  $t \rightarrow \infty$  k tomuto stacionárnemu riešeniu. Preto budeme numerickejmu riešiť pôvodný, nestacionárny systém a ako

aproximáciu stacionárneho riešenia vezmeme hodnoty nestacionárneho riešenia pre „dostatočne veľkú“ hodnotu  $t$ .

Definujeme časovo–priestorovú sieť

$$\begin{aligned}\zeta_i &:= (i-1)\Delta\zeta, & i = 1, \dots, M+1, \\ t_n &:= (n-1)\Delta t, & n = 1, \dots, Q+1,\end{aligned}$$

pričom uzly  $i = 1, \dots, N$  zodpovedajú tuhej fáze, uzol  $i = N+1$  fázovému rozhraniu a uzly  $i = N+2, \dots, M+1$  kvapalnej fáze. Dĺžka priestorového kroku je definovaná ako  $\Delta\zeta := 1/N$ . Hodnoty numerického riešenia budeme značiť nasledovne

$$\begin{aligned}\theta(\zeta_i, t_n) &\approx \theta_i^n, & C(\zeta_i, t_n) &\approx C_i^n, \\ h(t_n) &\approx h^n.\end{aligned}$$

Pri výpočte použijeme implicitnú schému, t.j. rovnice (4.17a–c) vyjadríme v časovom uzle  $n+1$  a na aproximáciu časovej derivácie použijeme spätnú diferenciu

$$\left. \frac{\partial\theta}{\partial t} \right|_{(\zeta_i, t_{n+1})} = \frac{\theta_i^{n+1} - \theta_i^n}{\Delta t} + O(\Delta t).$$

Priestorové derivácie aproximujeme pomocou diferencii presnosti  $O(\Delta\zeta^2)$

$$\begin{aligned}\left. \frac{\partial\theta}{\partial\zeta} \right|_{(\zeta_i, t_{n+1})} &= \frac{\theta_{i+1}^{n+1} - \theta_{i-1}^{n+1}}{2\Delta\zeta} + O(\Delta\zeta^2), \\ \left. \frac{\partial^2\theta}{\partial\zeta^2} \right|_{(\zeta_i, t_{n+1})} &= \frac{\theta_{i+1}^{n+1} - 2\theta_i^{n+1} + \theta_{i-1}^{n+1}}{(\Delta\zeta)^2} + O(\Delta\zeta^2).\end{aligned}$$

Analogicky aproximujeme aj časové a priestorové derivácie funkcií  $C$  a  $h^2$ .

Diskretizovať budeme rovnice (4.17a–c) upravené na nasledovný tvar

$$\zeta < 1 : \quad h^2 \frac{\partial\theta}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{dh^2}{dt} \zeta \frac{\partial\theta}{\partial\zeta} + \bar{\kappa} \frac{\partial^2\theta}{\partial\zeta^2}, \quad (4.25a)$$

$$\zeta > 1 : \quad h^2 \frac{\partial\theta}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{dh^2}{dt} \zeta \frac{\partial\theta}{\partial\zeta} + \frac{\partial^2\theta}{\partial\zeta^2}, \quad (4.25b)$$

$$h^2 \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{dh^2}{dt} \zeta \frac{\partial C}{\partial\zeta} + \gamma \frac{\partial^2 C}{\partial\zeta^2}. \quad (4.25c)$$

Nahradením jednotlivých derivácií diferenciami dostaneme numerickú schému v nasledovnom tvare:

$i = 2, \dots, N :$

$$\begin{aligned}(h^{n+1})^2 \theta_i^n &= \left\{ \frac{i-1}{4} [(h^{n+1})^2 - (h^n)^2] - \bar{\kappa} \mu_2 \right\} \theta_{i-1}^{n+1} + [2\bar{\kappa} \mu_2 + (h^{n+1})^2] \theta_i^{n+1} \\ &\quad - \left\{ \frac{i-1}{4} [(h^{n+1})^2 - (h^n)^2] + \bar{\kappa} \mu_2 \right\} \theta_{i+1}^{n+1},\end{aligned} \quad (4.26a)$$

$i = N+2, \dots, M :$

$$(h^{n+1})^2 \theta_i^n = \left\{ \frac{i-1}{4} [(h^{n+1})^2 - (h^n)^2] - \mu_2 \right\} \theta_{i-1}^{n+1} + [2\mu_2 + (h^{n+1})^2] \theta_i^{n+1}$$

$$- \left\{ \frac{i-1}{4} [(h^{n+1})^2 - (h^n)^2] + \mu_2 \right\} \theta_{i+1}^{n+1}, \quad (4.26b)$$

$$(h^{n+1})^2 C_i^n = \left\{ \frac{i-1}{4} [(h^{n+1})^2 - (h^n)^2] - \gamma_l \mu_2 \right\} C_{i-1}^{n+1} + [2\gamma_l \mu_2 + (h^{n+1})^2] C_i^{n+1} \\ - \left\{ \frac{i-1}{4} [(h^{n+1})^2 - (h^n)^2] + \gamma_l \mu_2 \right\} C_{i+1}^{n+1}, \quad (4.26c)$$

kde  $\mu_2 := \Delta t / (\Delta \zeta)^2$ . Hraničné hodnoty zvolíme nasledovne

$$\theta_1^n = \theta_B, \quad \theta_{N+1}^n = 0, \quad \theta_{M+1}^n = 1, \\ C_{N+1}^n = C_h, \quad C_{M+1}^n = C_0.$$

Podmienku (4.21a) vyjaríme v  $n$ -tom časovom uzle a na časovú diskretizáciu použijeme doprednú diferenciu

$$\left. \frac{dh^2}{dt} \right|_{t_n} \approx \frac{(h^{n+1})^2 - (h^n)^2}{\Delta t}.$$

Na aproximáciu jednostranných derivácií použijeme spätnú resp. doprednú diferenciu presnosti  $O(\Delta \zeta^2)$

$$\left. \frac{d\theta}{d\zeta} \right|_{\zeta=1-} \approx \frac{\theta_{N-1}^n - 4\theta_N^n + 3\theta_{N+1}^n}{2\Delta \zeta} = \frac{\theta_{N-1}^n - 4\theta_N^n}{2\Delta \zeta}, \\ \left. \frac{d\theta}{d\zeta} \right|_{\zeta=1+} \approx \frac{-3\theta_{N+1}^n + 4\theta_{N+2}^n - \theta_{N+3}^n}{2\Delta \zeta} = \frac{4\theta_{N+2}^n - \theta_{N+3}^n}{2\Delta \zeta}.$$

Rovnica pre  $(h^{n+1})^2$  potom vyzerá nasledovne

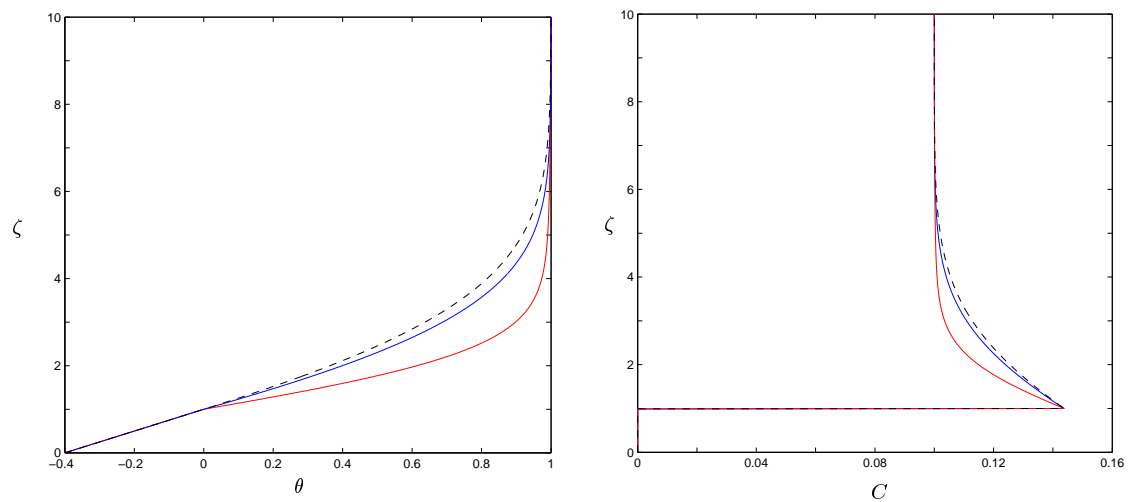
$$(h^{n+1})^2 = (h^n)^2 + \frac{\mu_1}{K} [k_{sl}(\theta_{N-1}^n - 4\theta_N^n) + \theta_{N+3}^n - 4\theta_{N+2}^n], \quad (4.27)$$

kde  $\mu_1 := \Delta t / \Delta \zeta$ .

Pri numerickej reprodukcii riešenia sme použili nasledovné hodnoty jednotlivých fyzikálnych parametrov modelu

$$k_s = 5.3 \times 10^{-3} \text{ J K}^{-1} \text{ m}^{-1} \text{ s}^{-1}, \quad k_l = 5.3 \times 10^{-3} \text{ J K}^{-1} \text{ m}^{-1} \text{ s}^{-1}, \\ k_{sl} = 4.0769, \\ \rho_s = 0.916 \text{ kg m}^{-3}, \\ \kappa_s = 0.0121 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}, \quad \kappa_l = 0.0013 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}, \quad D = 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}, \\ L = 80 \text{ J kg}^{-1}, \\ \theta_B = -0.4, \\ C_0 = 0.1, \\ \Delta T = 8.6,$$

a hodnoty priestorového, resp. časového kroku  $\Delta \zeta = 10^{-3}$  a  $\Delta t = 10^{-4}$ . Na Obrázku 4.6 je zobrazená konvergencia nestacionárneho riešenia k jednorozmernému základnému stavu.



**Obrázok 4.6:** Zobrazenie konvergencie nestacionárneho riešenia k jednorozmernému základnému stavu (prerušovaná čiara) pre  $n = 50$  (červená) a  $n = 500$  (modrá). Teplotný profil je zobrazený vľavo, koncentračný profil vpravo.

# Kapitola 5

## Analýza globálnej stability fázového rozhrania

### 5.1 Analytická analýza globálnej stability aplikáciou metódy energie

Jedným s pôvodných cieľov tejto práce bola analytická analýza globálnej stability fázového rozhrania kvapalná fáza/tuhá fáza prostredníctvom adaptácie metódy energie. Hlavná idea energetických metód spočíva v odvodení a analýze vhodných obyčajno-diferenciálnych rovníc (prípadne nerovníc) pre rôzne typy energií. V najjednoduchších a typických problémoch bez fázovej premeny energetické funkcionály, definované cez formálne procedúry, zodpovedajú kinetickej a potenciálnej energii systému.

Fázovú transformáciu medzi tuhú a kvapalnou fázou možno popísať modifikáciou obvyklých podmienok medzi nemiešateľnými fázami. Avšak okrem toho je na fázovom rozhraní generované latentné teplo, ktoré je difúziou odvádzané smerom od rozhrania. Navyše je nevyhnutné popísať termodynamický stav fázového rozhrania, ktorý je často založený na predpoklade lokálnej termodynamickej rovnováhy. Tieto fakty majú za následok, že definícia vhodných energetických funkcionálov pre metódu energie musí byť kvalitatívne odlišná od definície v prípade bez fázovej premeny. Otázka vhodnej definície energetických funkcionálov so zahrnutím voľného rozhrania je stále otvorená a budeme sa jej venovať v budúcnosti.

### 5.2 Numerická analýza globálnej stability

#### 5.2.1 Odvodenie implicitnej schémy

V súčasnosti nie je známe explicitné riešenie plného (dvojrozmerného) problému difúzneho tuhnutia binárneho systému popísaného rovnicami (4.11). V tejto časti diplomovej práce sa zameriame na odvodenie konečno-diferenčnej schémy na riešenie tohto problému. Odvodenú schému následne použijeme na simuláciu vývoja porušeného fázového rozhrania, resp. porušeného teplotného a koncentračného poľa.

Systém rovníc (4.11) najskôr upravíme pomocou vzťahov  $2h\partial h/\partial t = \partial h^2/\partial t$  a  $2h\partial h/\partial x = \partial h^2/\partial x$  do nasledovného tvaru

$$\zeta < 1 : \quad h^2 \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial h^2}{\partial t} \zeta \frac{\partial \theta}{\partial \zeta} + \bar{\kappa} \left\{ h^2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \left[ \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + 1 \right] \frac{\partial^2 \theta}{\partial \zeta^2} - \frac{\partial h^2}{\partial x} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x \partial \zeta} - \left[ h \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + 2 \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 \right] \frac{\partial \theta}{\partial \zeta} \right\}, \quad (5.1a)$$

$$\zeta > 1 : \quad h^2 \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial h^2}{\partial t} \zeta \frac{\partial \theta}{\partial \zeta} + h^2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \left[ \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + 1 \right] \frac{\partial^2 \theta}{\partial \zeta^2} - \frac{\partial h^2}{\partial x} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x \partial \zeta} - \left[ h \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + 2 \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 \right] \frac{\partial \theta}{\partial \zeta}, \quad (5.1b)$$

$$h^2 \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial h^2}{\partial t} \zeta \frac{\partial C}{\partial \zeta} + \bar{\gamma}_l \left\{ h^2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \left[ \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + 1 \right] \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^2} - \frac{\partial h^2}{\partial x} \frac{\partial^2 C}{\partial x \partial \zeta} - \left[ h \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + 2 \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 \right] \frac{\partial C}{\partial \zeta} \right\} \quad (5.1c)$$

s podmienkami na rozhraní

$$\frac{K}{2} \frac{\partial h^2}{\partial t} = k_{sl} \frac{\partial \theta}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=1^-} - \frac{\partial \theta}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=1^+}, \quad (5.2a)$$

$$\frac{1}{2} C \Big|_{\zeta=1^+} \frac{\partial h^2}{\partial t} = -\gamma_l \frac{\partial C}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=1^+}, \quad (5.2b)$$

$$\theta \Big|_{\zeta=1} = 0 \quad (5.2c)$$

a hraničnými podmienkami

$$\theta \Big|_{\zeta=0} = \theta_B, \quad \forall t > 0, \quad (5.3a)$$

$$\theta \rightarrow 1 \quad \text{ak} \quad \zeta \rightarrow \infty \quad \text{alebo} \quad t \rightarrow 0, \quad (5.3b)$$

$$C \rightarrow C_0 \quad \text{ak} \quad \zeta \rightarrow \infty \quad \text{alebo} \quad t \rightarrow 0. \quad (5.3c)$$

Definujme trojrozmernú časopriestorovú sieť (konečnú v priestorových premenných)

$$t_n := t_0 + (n-1)\Delta t, \quad n = 1, \dots, Q+1$$

$$x_i := (i-1)\Delta x, \quad i = 1, \dots, S+1$$

$$\zeta_j := (j-1)\Delta \zeta, \quad j = 1, \dots, N+1 \quad (\text{tuhá fáza})$$

$$j = N+2, \dots, M+1 \quad (\text{kvapalná fáza}).$$

a označme

$$\theta_{i,j}^n := \theta(x_i, y_j, t_n), \quad C_{i,j}^n := C(x_i, y_j, t_n), \quad h_i^n := h(x_i, t_n).$$

V ďalšom zvolíme rovnaký priestorový krok v smere  $x$  aj v smere  $\zeta$ , teda  $\Delta x = \Delta \zeta$ . Rovnice (5.1a–c) vyjadríme v uzle  $(x_i, \zeta_j, t_{n+1})$ . Na aproximáciu časových derivácií použijeme spätné diferencie presnosti  $O(\Delta t)$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \theta}{\partial t} \right|_{(x_i, \zeta_j, t_{n+1})} &\approx \frac{\theta_{i,j}^{n+1} - \theta_{i,j}^n}{\Delta t}, & \left. \frac{\partial C}{\partial t} \right|_{(x_i, \zeta_j, t_{n+1})} &\approx \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^n}{\Delta t}, \\ \left. \frac{\partial h^2}{\partial t} \right|_{(x_i, t_{n+1})} &\approx \frac{(h_i^{n+1})^2 - (h_i^n)^2}{\Delta t}. \end{aligned}$$

Priestorové derivácie aproximujeme pomocou diferencií presnosti  $O(\Delta \zeta^2)$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial h}{\partial x} \right|_{(x_i, t_{n+1})} &\approx \frac{h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1}}{2\Delta \zeta}, & \left. \frac{\partial h^2}{\partial x} \right|_{(x_i, t_{n+1})} &\approx \frac{(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2}{2\Delta \zeta}, \\ \left. \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \right|_{(x_i, \zeta_j, t_{n+1})} &\approx \frac{\theta_{i+1,j}^{n+1} - 2\theta_{i,j}^{n+1} + \theta_{i-1,j}^{n+1}}{(\Delta \zeta)^2}, \\ \left. \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right|_{(x_i, t_{n+1})} &\approx \frac{h_{i+1}^{n+1} - 2h_i^{n+1} + h_{i-1}^{n+1}}{(\Delta \zeta)^2}, \\ \left. \frac{\partial \theta}{\partial \zeta} \right|_{(x_i, \zeta_j, t_{n+1})} &\approx \frac{\theta_{i,j+1}^{n+1} - \theta_{i,j-1}^{n+1}}{2\Delta \zeta}, \\ \left. \frac{\partial^2 \theta}{\partial \zeta^2} \right|_{(x_i, \zeta_j, t_{n+1})} &\approx \frac{\theta_{i,j+1}^{n+1} - 2\theta_{i,j}^{n+1} + \theta_{i,j-1}^{n+1}}{(\Delta \zeta)^2}, \\ \left. \frac{\partial^2 \theta}{\partial x \partial \zeta} \right|_{(x_i, \zeta_j, t_{n+1})} &\approx \frac{\theta_{i,j+1}^{n+1} - \theta_{i-1,j+1}^{n+1} + \theta_{i+1,j}^{n+1} - 2\theta_{i,j}^{n+1} + \theta_{i-1,j}^{n+1} - \theta_{i+1,j-1}^{n+1} + \theta_{i,j-1}^{n+1}}{2(\Delta \zeta)^2}. \end{aligned}$$

Dostaneme tak *lineárnu implicitnú schému* pre teplotné a koncentračné polia, ktorú možno napísať v nasledovnom tvare:

$i = 1, \dots, S; j = 2, \dots, N; n = 1, \dots, Q + 1$ :

$$\begin{aligned} (h_i^{n+1})^2 \theta_{i,j}^n &= \left\{ \frac{j-1}{4} [(h_i^{n+1})^2 - (h_i^n)^2] - \bar{\kappa} \mu_2 \left[ \frac{(h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1})^2}{4(\Delta \zeta)^2} + 1 \right] \right. \\ &\quad + \frac{1}{4} \bar{\kappa} \mu_3 [(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \bar{\kappa} \mu_3 [h_i^{n+1} (h_{i+1}^{n+1} - 2h_i^{n+1} + h_{i-1}^{n+1}) + h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1}] \right\} \theta_{i,j-1}^{n+1} \\ &\quad - \frac{1}{4} \bar{\kappa} \mu_3 [(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \theta_{i+1,j-1}^{n+1} \\ &\quad - \left\{ \bar{\kappa} \mu_2 (h_i^{n+1})^2 - \frac{1}{4} \bar{\kappa} \mu_3 [(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \right\} \theta_{i-1,j}^{n+1} \\ &\quad + \left\{ (1 + 2\bar{\kappa} \mu_2) (h_i^{n+1})^2 + 2\bar{\kappa} \mu_2 \left[ \frac{(h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1})^2}{4(\Delta \zeta)^2} + 1 \right] \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \bar{\kappa} \mu_3 [(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \right\} \theta_{i,j}^{n+1} \\ &\quad - \left\{ \bar{\kappa} \mu_2 (h_i^{n+1})^2 - \frac{1}{4} \bar{\kappa} \mu_3 [(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \right\} \theta_{i+1,j}^{n+1} \\ &\quad - \frac{1}{4} \bar{\kappa} \mu_3 [(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \theta_{i-1,j+1}^{n+1} \\ &\quad - \left\{ \frac{j-1}{4} [(h_i^{n+1})^2 - (h_i^n)^2] + \bar{\kappa} \mu_2 \left[ \frac{(h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1})^2}{4(\Delta \zeta)^2} + 1 \right] \right. \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{4}\bar{\kappa}\mu_3[(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \\
& -\frac{1}{2}\bar{\kappa}\mu_3[h_i^{n+1}(h_{i+1}^{n+1} - 2h_i^{n+1} + h_{i-1}^{n+1}) + h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1}] \} \theta_{i,j+1}^{n+1} \quad (5.4a)
\end{aligned}$$

$i = 1, \dots, S; j = N + 2, \dots, M; n = 1, \dots, Q + 1:$

$$\begin{aligned}
(h_i^{n+1})^2 \theta_{i,j}^n &= \left\{ \frac{j-1}{4} [(h_i^{n+1})^2 - (h_i^n)^2] - \mu_2 \left[ \frac{(h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] \right. \\
&+ \frac{1}{4}\mu_3[(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \\
&- \frac{1}{2}\mu_3[h_i^{n+1}(h_{i+1}^{n+1} - 2h_i^{n+1} + h_{i-1}^{n+1}) + h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1}] \} \theta_{i,j-1}^{n+1} \\
&- \frac{1}{4}\mu_3 [(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \theta_{i+1,j-1}^{n+1} \\
&- \left\{ \mu_2(h_i^{n+1})^2 - \frac{1}{4}\mu_3[(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \right\} \theta_{i-1,j}^{n+1} \\
&+ \left\{ (1 + 2\mu_2)(h_i^{n+1})^2 + 2\mu_2 \left[ \frac{(h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] \right. \\
&- \frac{1}{2}\mu_3[(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \} \theta_{i,j}^{n+1} \\
&- \left\{ \mu_2(h_i^{n+1})^2 - \frac{1}{4}\mu_3[(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \right\} \theta_{i+1,j}^{n+1} \\
&- \frac{1}{4}\mu_3 [(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \theta_{i-1,j+1}^{n+1} \\
&- \left\{ \frac{j-1}{4} [(h_i^{n+1})^2 - (h_i^n)^2] + \mu_2 \left[ \frac{(h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] \right. \\
&- \frac{1}{4}\mu_3[(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \\
&- \left. \left. \frac{1}{2}\mu_3[h_i^{n+1}(h_{i+1}^{n+1} - 2h_i^{n+1} + h_{i-1}^{n+1}) + h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1}] \right\} \theta_{i,j+1}^{n+1} \quad (5.4b)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(h_i^{n+1})^2 C_{i,j}^m &= \left\{ \frac{j-1}{4} [(h_i^{n+1})^2 - (h_i^n)^2] - \gamma\mu_2 \left[ \frac{(h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] \right. \\
&+ \frac{1}{4}\gamma\mu_3[(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \\
&- \frac{1}{2}\gamma\mu_3[h_i^{n+1}(h_{i+1}^{n+1} - 2h_i^{n+1} + h_{i-1}^{n+1}) + h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1}] \} C_{i,j-1}^{m+1} \\
&- \frac{1}{4}\gamma\mu_3 [(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] C_{i+1,j-1}^{m+1} \\
&- \left\{ \gamma\mu_2(h_i^{n+1})^2 - \frac{1}{4}\gamma\mu_3[(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \right\} C_{i-1,j}^{m+1} \\
&+ \left\{ (1 + 2\gamma\mu_2)(h_i^{n+1})^2 + 2\gamma\mu_2 \left[ \frac{(h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] \right. \\
&- \frac{1}{2}\gamma\mu_3[(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \} C_{i,j}^{m+1} \\
&- \left\{ \gamma\mu_2(h_i^{n+1})^2 - \frac{1}{4}\gamma\mu_3[(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \right\} C_{i+1,j}^{m+1} \\
&- \frac{1}{4}\gamma\mu_3 [(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] C_{i-1,j+1}^{m+1} \\
&- \left\{ \frac{j-1}{4} [(h_i^{n+1})^2 - (h_i^n)^2] + \gamma\mu_2 \left[ \frac{(h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] \right. \\
&- \frac{1}{4}\gamma\mu_3[(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \\
&- \left. \left. \frac{1}{2}\gamma\mu_3[h_i^{n+1}(h_{i+1}^{n+1} - 2h_i^{n+1} + h_{i-1}^{n+1}) + h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1}] \right\} C_{i,j+1}^{m+1}, \quad (5.4c)
\end{aligned}$$

kde  $\mu_i := \Delta t / (\Delta\zeta)^i$ . Z hraničných podmienok ďalej pre  $i = 1, \dots, S + 1$  a  $n = 1, \dots, Q + 1$  vyplýva

$$\theta_{i,1}^n = \theta_B, \quad \theta_{i,N+1}^n = 0, \quad \theta_{i,M+1}^n = 1.$$

Rovnice (5.2a, b) sme vyjadrili v uzle  $(x_i, \zeta_j, t_n)$ , na časovú deriváciu sme použili doprednú diferenciu a jednostranné derivácie na fázovom rozhraní sme aproximovali rovnako ako pri numerickej reprodukcii základného stavu v 4. kapitole:

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial \zeta} \right|_{\zeta=1^-} \approx \frac{\theta_{i,N-1}^n - 4\theta_{i,N}^n}{2\Delta\zeta},$$

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial \zeta} \right|_{\zeta=1^+} \approx \frac{4\theta_{i,N+2}^n - \theta_{i,N+3}^n}{2\Delta\zeta},$$

analogicky pre funkciu  $C$ . Pre  $i = 1, \dots, S+1$  tak dostaneme rovnicu pre pohyb fázového rozhrania dávajúcu do súvisu neznámu hodnotu  $h_i^{n+1}$  so známou hodnotou  $h_i^n$  z predchádzajúceho časového okamihu

$$(h_i^{n+1})^2 = (h_i^n)^2 + \frac{\mu_1}{K} [k_{st}(\theta_{i,N-1}^n - 4\theta_{i,N}^n) + \theta_{i,N+3}^n - 4\theta_{i,N+2}^n],$$

a podobne rovnicu pre hodnoty  $C_{i,N+1}^n$  koncentrácie na rozhraní (treba si uvedomiť, že hodnota koncentrácie na rozhraní nie je dopredu známa — je teda tiež súčasťou numerickeho riešenia)

$$3\gamma_l\mu_1 C_{i,N+1}^{n+1} - 4\gamma_l\mu_1 C_{i,N+2}^{n+1} + \gamma_l\mu_1 C_{i,N+3}^{n+1} = C_{i,N+1}^n [(h_i^{n+1})^2 - (h_i^n)^2].$$

Pri praktickej realizácii numerickeho výpočtu riešenia predpokladáme, že záujmová oblasť je v smere  $x$  konečná. Avšak samotný model tuhnutia binárneho systému predpokladá oblasť nekonečnú v smere  $x$ . Preto predpokladáme, že konečná oblasť, v ktorej systém diferenciálnych rovníc riešime, sa v smere  $x$  *periodicky* „opakuje“. K existujúcim hraničným podmienkam preto pridáme podmienku, ktorá tento periodický priebeh zaručuje

$$h_{S+1}^n = h_1^n, \quad n = 1, \dots, Q.$$

### 5.2.2 Programová realizácia

Samotný algoritmus numerickeho výpočtu možno schematicky zapísať nasledovne:

1. Pre  $n = 1$  definujeme počiatočnú iteráciu  $h_i^1$ ,  $\theta_{i,j}^1$  a  $C_{i,j}^1 \forall i, j$
2. Pre  $\forall i$  vypočítame hodnotu  $h_i^{n+1}$  v novej časovej vrstve pomocou hodnoty  $h_i^n$  zo starej časovej vrstvy
3. Vypočítame hodnoty riešenia  $\theta_{i,j}^{n+1}$  a  $C_{i,j}^{n+1}$  v novej časovej vrstve
4. Zvolíme  $n := n + 1$  a prejdeme do bodu 2.

Hodnoty  $\theta_{i,j}^{n+1}$  z novej časovej vrstvy dostaneme riešením lineárneho systému rovníc  $\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\xi} = \mathbf{b}$ . V prípade tuhej fázy má matica  $\mathbf{A}$  blokovo diagonálny tvar

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{D} & \mathbf{U}^2 & \mathbf{0} & \dots & \dots & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{L}^3 & \mathbf{D} & \mathbf{U}^3 & \mathbf{0} & \dots & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{L}^4 & \mathbf{D} & \mathbf{U}^4 & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{L}^5 & \mathbf{D} & \mathbf{U}^5 & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots & \mathbf{D} & \mathbf{U}^{N-1} \\ \mathbf{0} & \dots & \dots & \dots & \dots & \mathbf{L}^N & \mathbf{D} \end{pmatrix}.$$

kde matica  $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{S \times S}$  je definovaná nasledovne:

- hlavná diagonála

$$\begin{aligned} D_{11} &:= (1 + 2\bar{\kappa}\mu_2)(h_1^{n+1})^2 + 2\bar{\kappa}\mu_2 \left[ \frac{(h_2^{n+1} - h_S^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] - \frac{1}{2}\bar{\kappa}\mu_3 [(h_2^{n+1})^2 - (h_S^{n+1})^2], \\ D_{ii} &:= (1 + 2\bar{\kappa}\mu_2)(h_i^{n+1})^2 + 2\bar{\kappa}\mu_2 \left[ \frac{(h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] - \frac{1}{2}\bar{\kappa}\mu_3 [(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2], \\ & \quad i = 2, \dots, S-1, \\ D_{SS} &:= (1 + 2\bar{\kappa}\mu_2)(h_S^{n+1})^2 + 2\bar{\kappa}\mu_2 \left[ \frac{(h_1^{n+1} - h_{S-1}^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] - \frac{1}{2}\bar{\kappa}\mu_3 [(h_1^{n+1})^2 - (h_{S-1}^{n+1})^2] \end{aligned}$$

- dolná diagonála

$$\begin{aligned} D_{i,i-1} &:= -\bar{\kappa}\mu_2(h_i^{n+1})^2 + \frac{1}{4}\bar{\kappa}\mu_3[(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2], \quad i = 2, \dots, S-1, \\ D_{S,S-1} &:= -\bar{\kappa}\mu_2(h_S^{n+1})^2 + \frac{1}{4}\bar{\kappa}\mu_3[(h_1^{n+1})^2 - (h_{S-1}^{n+1})^2] \end{aligned}$$

- horná diagonála

$$\begin{aligned} D_{1,2} &:= -\bar{\kappa}\mu_2(h_1^{n+1})^2 + \frac{1}{4}\bar{\kappa}\mu_3[(h_2^{n+1})^2 - (h_S^{n+1})^2], \\ D_{i,i-1} &:= -\bar{\kappa}\mu_2(h_i^{n+1})^2 + \frac{1}{4}\bar{\kappa}\mu_3[(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2], \quad i = 2, \dots, S-1 \end{aligned}$$

- mimodiagonálne prvky

$$\begin{aligned} D_{1,S} &= -\bar{\kappa}\mu_2(h_1^{n+1})^2 + \frac{1}{4}\bar{\kappa}\mu_3[(h_2^{n+1})^2 - (h_S^{n+1})^2], \\ D_{S,1} &= -\bar{\kappa}\mu_2(h_S^{n+1})^2 + \frac{1}{4}\bar{\kappa}\mu_3[(h_1^{n+1})^2 - (h_{S-1}^{n+1})^2] \end{aligned}$$

matica  $\mathbf{L}^j \in \mathbb{R}^{S \times S}$ ,  $j = 3, \dots, N$ :

- hlavná diagonála

$$\begin{aligned} L_{1,1}^j &= \frac{j-1}{4}[(h_1^{n+1})^2 - (h_1^n)^2] - \bar{\kappa}\mu_2 \left[ \frac{(h_2^{n+1} - h_S^{n+1})^2}{4\Delta\zeta^2} + 1 \right] + \frac{1}{4}\bar{\kappa}\mu_3[(h_2^{n+1})^2 - (h_S^{n+1})^2] \\ & \quad - \frac{1}{2}\bar{\kappa}\mu_3[h_1^{n+1}(h_2^{n+1} - 2h_1^{n+1} + h_S^{n+1}) + h_2^{n+1} - h_S^{n+1}], \\ L_{i,i}^j &= \frac{j-1}{4}[(h_i^{n+1})^2 - (h_i^n)^2] - \bar{\kappa}\mu_2 \left[ \frac{(h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1})^2}{4\Delta\zeta^2} + 1 \right] + \frac{1}{4}\bar{\kappa}\mu_3[(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \\ & \quad - \frac{1}{2}\bar{\kappa}\mu_3[h_i^{n+1}(h_{i+1}^{n+1} - 2h_i^{n+1} + h_{i-1}^{n+1}) + h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1}], \quad i = 2, \dots, S-1, \\ L_{S,S}^j &= \frac{j-1}{4}[(h_S^{n+1})^2 - (h_S^n)^2] - \bar{\kappa}\mu_2 \left[ \frac{(h_1^{n+1} - h_{S-1}^{n+1})^2}{4\Delta\zeta^2} + 1 \right] + \frac{1}{4}\bar{\kappa}\mu_3[(h_1^{n+1})^2 - (h_{S-1}^{n+1})^2] \\ & \quad - \frac{1}{2}\bar{\kappa}\mu_3[h_S^{n+1}(h_1^{n+1} - 2h_S^{n+1} + h_{S-1}^{n+1}) + h_1^{n+1} - h_{S-1}^{n+1}], \end{aligned}$$

- horná diagonála

$$\begin{aligned} L_{1,2}^j &:= -\frac{1}{4}\bar{\kappa}\mu_3[(h_2^{n+1})^2 - (h_S^{n+1})^2], \\ L_{i,i+1}^j &:= -\frac{1}{4}\bar{\kappa}\mu_3[(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \end{aligned}$$

- mimodiagonálne prvky

$$L_{S,1}^j := -\frac{1}{4}\bar{\kappa}\mu_3[(h_1^{n+1})^2 - (h_{S-1}^{n+1})^2]$$

matica  $\mathbf{U}^j \in \mathbb{R}^{S \times S}$ ,  $j = 2, \dots, N-1$ :

- hlavná diagonála

$$\begin{aligned} U_{1,1}^j &= -\left\{ \frac{j-1}{4}[(h_1^{n+1})^2 - (h_1^n)^2] + \bar{\kappa}\mu_2 \left[ \frac{(h_2^{n+1} - h_S^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] - \frac{1}{4}\bar{\kappa}\mu_3[(h_2^{n+1})^2 - (h_S^{n+1})^2] \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2}\bar{\kappa}\mu_3[h_1^{n+1}(h_2^{n+1} - 2h_1^{n+1} + h_S^{n+1}) + h_2^{n+1} - h_S^{n+1}] \right\}, \\ U_{i,i}^j &= -\left\{ \frac{j-1}{4}[(h_i^{n+1})^2 - (h_i^n)^2] + \bar{\kappa}\mu_2 \left[ \frac{(h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] - \frac{1}{4}\bar{\kappa}\mu_3[(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2] \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2}\bar{\kappa}\mu_3[h_i^{n+1}(h_{i+1}^{n+1} - 2h_i^{n+1} + h_{i-1}^{n+1}) + h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1}] \right\}, \quad i = 2, \dots, S-1, \\ U_{S,S}^j &= -\left\{ \frac{j-1}{4}[(h_S^{n+1})^2 - (h_S^n)^2] + \bar{\kappa}\mu_2 \left[ \frac{(h_1^{n+1} - h_{S-1}^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] - \frac{1}{4}\bar{\kappa}\mu_3[(h_1^{n+1})^2 - (h_{S-1}^{n+1})^2] \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2}\bar{\kappa}\mu_3[h_S^{n+1}(h_1^{n+1} - 2h_S^{n+1} + h_{S-1}^{n+1}) + h_1^{n+1} - h_{S-1}^{n+1}] \right\}, \end{aligned}$$

- dolná diagonála

$$\begin{aligned} U_{i,i-1}^j &:= -\frac{1}{4}\bar{\kappa}\mu_3[(h_{i+1}^{n+1})^2 - (h_{i-1}^{n+1})^2], \quad i = 2, \dots, S-1 \\ U_{S,S-1}^j &:= -\frac{1}{4}\bar{\kappa}\mu_3[(h_1^{n+1})^2 - (h_{S-1}^{n+1})^2] \end{aligned}$$

- mimodiagonálne prvky

$$U_{1,S}^j := -\frac{1}{4}\bar{\kappa}\mu_3[(h_2^{n+1})^2 - (h_S^{n+1})^2]$$

Pravá strana  $\mathbf{b} = (b_{1,2}, \dots, b_{S,2}, b_{1,3}, \dots, b_{S,3}, \dots, b_{1,N}, \dots, b_{S,N})^T$  je definovaná nasledovne

$$\begin{aligned} b_{1,2} &:= (h_1^{n+1})^2\theta_{1,2}^n + \left\{ -\frac{1}{4}[(h_1^{n+1})^2 - (h_1^n)^2] + \bar{\kappa}\mu_2 \left[ \frac{(h_2^{n+1} - h_S^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2}\bar{\kappa}\mu_3[h_1^{n+1}(h_2^{n+1} - 2h_1^{n+1} + h_S^{n+1}) + h_2^{n+1} - h_S^{n+1}] \right\}\theta_B \\ b_{i,2} &:= (h_i^{n+1})^2\theta_{i,2}^n + \left\{ -\frac{1}{4}[(h_i^{n+1})^2 - (h_i^n)^2] + \bar{\kappa}\mu_2 \left[ \frac{(h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2}\bar{\kappa}\mu_3[h_i^{n+1}(h_{i+1}^{n+1} - 2h_i^{n+1} + h_{i-1}^{n+1}) + h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1}] \right\}\theta_B, \quad i = 2, \dots, S-1 \\ b_{S,2} &:= (h_S^{n+1})^2\theta_{S,2}^n + \left\{ -\frac{1}{4}[(h_S^{n+1})^2 - (h_S^n)^2] + \bar{\kappa}\mu_2 \left[ \frac{(h_1^{n+1} - h_{S-1}^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2}\bar{\kappa}\mu_3[h_S^{n+1}(h_1^{n+1} - 2h_S^{n+1} + h_{S-1}^{n+1}) + h_1^{n+1} - h_{S-1}^{n+1}] \right\}\theta_B, \\ b_{i,j} &:= (h_i^{n+1})^2\theta_{i,j}^n, \quad i = 1, \dots, S, \quad j = 3, \dots, N. \end{aligned}$$

V prípade kvapalnej fázy vyzerá matica  $\mathbf{A}$  pre teplotné pole nasledovne

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{D} & \mathbf{U}^{N+2} & \mathbf{0} & \dots & \dots & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{L}^{N+3} & \mathbf{D} & \mathbf{U}^{N+3} & \mathbf{0} & \dots & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{L}^{N+4} & \mathbf{D} & \mathbf{U}^{N+4} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{L}^{N+5} & \mathbf{D} & \mathbf{U}^{N+5} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \mathbf{D} & \mathbf{U}^{M-1} \\ \mathbf{0} & \dots & \dots & \dots & \dots & \mathbf{L}^M & \mathbf{D} \end{pmatrix},$$

pričom matice  $\mathbf{L}^j$ ,  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{U}^j \in \mathbb{R}^{S \times S}$  sú definované rovnako ako v prípade tuhej fázy s tým rozdielom, že v kvapalnej fáze položíme  $\bar{\kappa} \equiv 1$ . Pravá strana  $\mathbf{b}$  vyzerá nasledovne

$$\begin{aligned} b_{i,j} &:= (h_i^{n+1})^2 \theta_{i,j}^n, \quad i = 1, \dots, S, \quad j = N+2, \dots, M-1, \\ b_{1,M} &:= (h_1^{n+1})^2 \theta_{1,M}^n + \frac{M-1}{4} [(h_1^{n+1})^2 - (h_1^n)^2] + \mu_2 \left[ \frac{(h_2^{n+1} - h_S^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] \\ &\quad - \frac{1}{2} \mu_3 [h_1^{n+1} (h_2^{n+1} - 2h_1^{n+1} + h_S^{n+1}) + h_2^{n+1} - h_S^{n+1}], \\ b_{i,M} &:= (h_i^{n+1})^2 \theta_{i,M}^n + \frac{M-1}{4} [(h_i^{n+1})^2 - (h_i^n)^2] + \mu_2 \left[ \frac{(h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] \\ &\quad - \frac{1}{2} \mu_3 [h_i^{n+1} (h_{i+1}^{n+1} - 2h_i^{n+1} + h_{i-1}^{n+1}) + h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1}], \quad i = 2, \dots, S-1, \\ b_{S,M} &:= (h_S^{n+1})^2 \theta_{S,M}^n + \frac{M-1}{4} [(h_S^{n+1})^2 - (h_S^n)^2] + \mu_2 \left[ \frac{(h_1^{n+1} - h_{S-1}^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] \\ &\quad - \frac{1}{2} \mu_3 [h_S^{n+1} (h_1^{n+1} - 2h_S^{n+1} + h_{S-1}^{n+1}) + h_1^{n+1} - h_{S-1}^{n+1}]. \end{aligned}$$

Matica  $\mathbf{A}$  pre koncentračné pole vyzerá nasledovne

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{P}_1 & \mathbf{P}_2 & \mathbf{P}_3 & \mathbf{0} & \dots & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{L}^{N+2} & \mathbf{D} & \mathbf{U}^{N+2} & \mathbf{0} & \dots & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{L}^{N+3} & \mathbf{D} & \mathbf{U}^{N+3} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{L}^{N+4} & \mathbf{D} & \mathbf{U}^{N+4} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \mathbf{D} & \mathbf{U}^{M-1} \\ \mathbf{0} & \dots & \dots & \dots & \dots & \mathbf{L}^M & \mathbf{D} \end{pmatrix},$$

pričom matice  $\mathbf{L}^j$ ,  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{U}^j \in \mathbb{R}^{S \times S}$  sú definované identicky ako príslušné matice pre tuhú fázu; v prípade koncentračného poľa všade namiesto hodnoty  $\bar{\kappa}$  použijeme hodnotu  $\gamma_l$ . Matice  $\mathbf{P}_1$ ,  $\mathbf{P}_2$ ,  $\mathbf{P}_3 \in \mathbb{R}^{S \times S}$  sú definované nasledovne

$$\mathbf{P}_1 := 3\gamma_l \mu_1 \mathbf{I}_S, \quad \mathbf{P}_2 := -4\gamma_l \mu_1 \mathbf{I}_S, \quad \mathbf{P}_3 := \gamma_l \mu_1 \mathbf{I}_S.$$

Pravá strana  $\mathbf{b}$

$$\begin{aligned} b_{i,1} &:= C_{i,N+1}^n [(h_i^{n+1})^2 - (h_i^n)^2], \quad i = 1, \dots, S, \\ b_{i,j} &:= (h_i^{n+1})^2 C_{i,j}^n, \quad i = 1, \dots, S, \quad j = 2, \dots, M-1 \\ b_{1,M} &:= (h_1^{n+1})^2 C_{1,M}^n + \left\{ \frac{M-1}{4} [(h_1^{n+1})^2 - (h_1^n)^2] + \mu_2 \left[ \frac{(h_2^{n+1} - h_S^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2}\mu_3[h_1^{n+1}(h_2^{n+1} - 2h_1^{n+1} + h_S^{n+1}) + h_2^{n+1} - h_S^{n+1}] \Big\} C_0, \\
b_{i,M} := & (h_i^{n+1})^2 C_{i,M}^n + \left\{ \frac{M-1}{4} [(h_i^{n+1})^2 - (h_i^n)^2] + \mu_2 \left[ \frac{(h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] \right. \\
& \left. -\frac{1}{2}\mu_3[h_i^{n+1}(h_{i+1}^{n+1} - 2h_i^{n+1} + h_{i-1}^{n+1}) + h_{i+1}^{n+1} - h_{i-1}^{n+1}] \right\} C_0, \quad i = 2, \dots, S-1, \\
b_{S,M} := & (h_S^{n+1})^2 C_{S,M}^n + \left\{ \frac{M-1}{4} [(h_S^{n+1})^2 - (h_S^n)^2] + \mu_2 \left[ \frac{(h_1^{n+1} - h_{S-1}^{n+1})^2}{4(\Delta\zeta)^2} + 1 \right] \right. \\
& \left. -\frac{1}{2}\mu_3[h_S^{n+1}(h_1^{n+1} - 2h_S^{n+1} + h_{S-1}^{n+1}) + h_1^{n+1} - h_{S-1}^{n+1}] \right\} C_0
\end{aligned}$$

### 5.2.3 Numerické simulácie

V tejto časti uvedieme výsledky našich numerických simulácií. Systém (5.1) sme riešili v konečnej oblasti  $(x, \zeta) \in \langle 0, 1 \rangle \times \langle 0, 7 \rangle$ , veľkosť priestorového kroku bola  $\Delta\zeta = 10^{-2}$  a veľkosť časového kroku  $\Delta t = 10^{-4}$ . Predmetom nášho záujmu bolo simulovať vývoj porušeného fázového rozhrania a jednotlivých polí, pričom za základný stav sme vzali riešenie pre jednorozmerný základný stav odvodené na konci 4. kapitoly — t.j. pre fixnú hodnotu  $x$  je priebeh teploty a koncentrácie daný týmto riešením. Skúmané poruchy boli dvojakého druhu: počiatočná porucha rozhrania (teplotné a koncentračné pole sú neporušené) a počiatočná porucha teplotného poľa (fázové rozhranie a koncentračné pole sú neporušené). V oboch prípadoch boli použité hodnoty fyzikálnych parametrov modelu rovnaké ako hodnoty použité pri numerických výpočtoch na konci 4. kapitoly.

**Vývoj v prípade počiatočnej poruchy rozhrania** V tomto prípade mala testovaná porucha fázového rozhrania tvar  $0.001 \sin(4\pi x)$ , a teda počiatočný tvar rozhrania bol

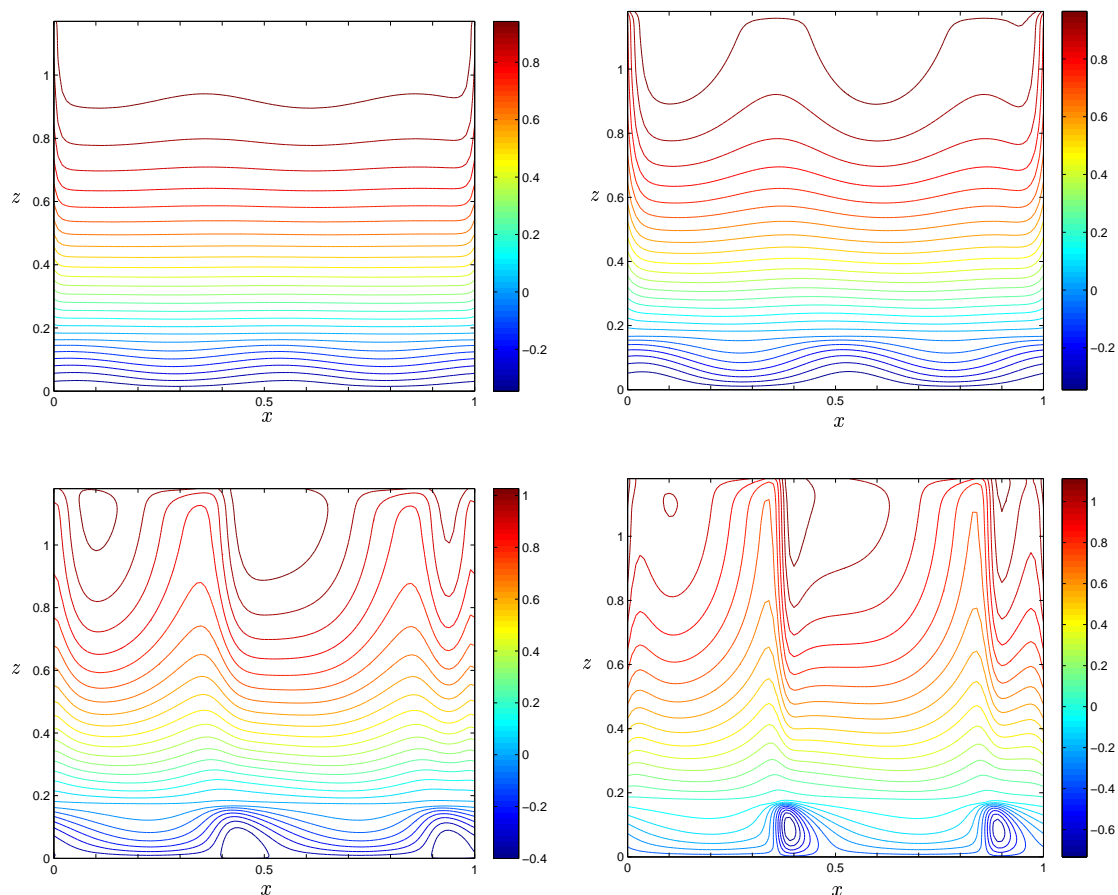
$$h(x, t_0) = \bar{h}(t_0) + 0.001 \sin(4\pi x),$$

kde  $\bar{h}(t_0)$  je pozícia rozhrania v čase  $t_0$  zodpovedajúca jednorozmernému základnému stavu. Na Obrázku 5.1 sú zobrazené izočiarly teplotného poľa v pôvodných premenných<sup>1</sup>  $x$  a  $z$  pre vybrané časové iterácie. Izočiarly pre časovú iteráciu  $n = 1$  boli tvorené rovnobežnými horizontálnymi čiarami. Vzdialenosť izočiarly je úmerná veľkosti teplotného gradientu: čím sú izočiarly hustejšie, tým je teplotný gradient v danej oblasti väčší. Navyše, smer tepelného toku je úmerný záporne vzatému teplotnému gradientu, a teda vektor tepelného toku je kolmý na izočiarly a smeruje k izočiare s menšou teplotou.

Prekvapivý je priebeh izočiarly v kvapalnej fáze: kým v tuhej fáze majú izočiarly vrámci intervalu  $x \in \langle 0, 1 \rangle$  periodický priebeh, izočiarly v kvapalnej fáze periodický priebeh nevykazujú. Táto asymetria je prekvapivá preto, lebo samotná porucha bola periodická. Uvedenú poruchu sme navyše zvolili tak, že pri periodickom opakovaní bunky  $(x, \zeta) \in \langle 0, 1 \rangle \times \langle 0, 7 \rangle$  sa porucha v smere  $x$  hladko „napája“<sup>2</sup>, t.j. derivácia poruchy podľa  $x$  v bode  $x = 0$  je rovnaká ako derivácia v  $x = 1$ . Túto vlastnosť

<sup>1</sup>Zobrazenie riešenia v pôvodných premenných možno pre fixné  $x$  a  $t$  zrealizovať preškálovaním osi  $\zeta$  funkciou  $h(x, t)$ .

<sup>2</sup>Uvedená asymetria v kvapalnej fáze sa objavuje aj pri zobrazení izočiarly riešenia v premenných  $x$  a  $\zeta$ , dôvodom jej vzniku teda nie je transformácia  $(x, \zeta) \mapsto (x, z)$ .

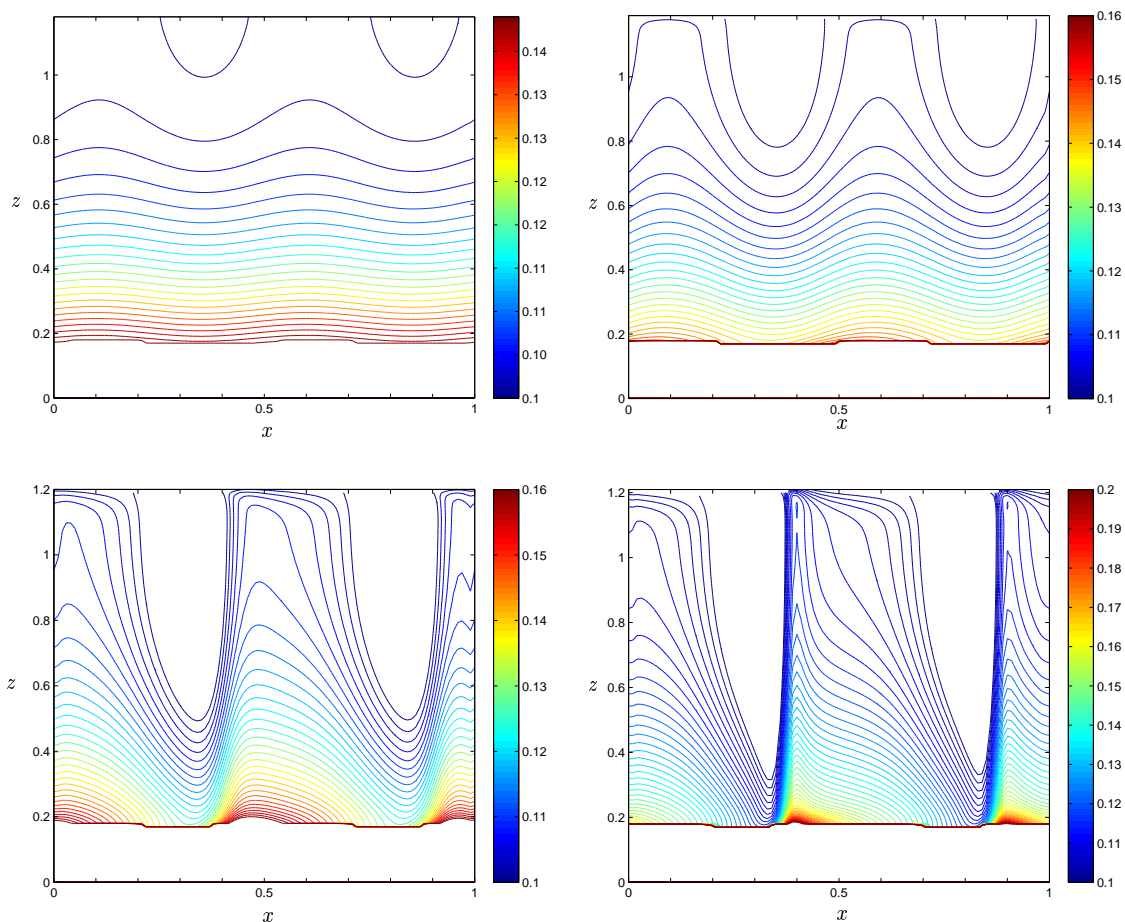


**Obrázok 5.1:** Izočiary teplotného poľa zobrazené pre časové iterácie  $n = 2$ ,  $n = 5$ ,  $n = 14$  a  $n = 18$  (v smere zľava doprava, zhora nadol) pre prípad počiatočnej poruchy rozhrania.

majú následne aj izočiary v tuhej fáze, nie však izočiary v kvapalnej fáze. Ďalším zaujímavým javom je tvorba lokálnych miním teplotného poľa v tuhej fáze. Každé z týchto miním zodpovedá prítomnosti teplotného toku smerujúceho práve do daného minima.

Na Obrázku 5.2 sú zobrazené izočiary koncentračného poľa v tých istých časových iteráciách aké sme použili pri zobrazení izočiari teplotného poľa. Rovnako ako v prípade teplotného poľa, aj tu oblasti so zhrnutými izočiarami zodpovedajú oblastiam, kde je koncentračný gradient veľký. Smer difúzie rozpustenej zložky je daný normálou k izočiare smerujúcou k izočiare s menšou hodnotou koncentrácie.

Na Obrázku 5.3 je zobrazený počiatočný tvar fázového rozhrania a následne jeho tvar v časovej iterácii  $n = 19$ . Vidíme, že rozhranie vo všeobecnosti postupuje smerom nahor, avšak jeho amplitúda (rozdiel medzi minimálnou a maximálnou výškou) sa zväčšuje. Navyše je tu tendencia k vzniku tzv. hrotov (miest, kde funkcia  $h(x, t)$  nie je diferencovateľná) a kolmých stien, čo má v nasledujúcich časových iteráciách za následok zlyhanie numerickej schémy (k zlyhaniu došlo v 20. iterácii). Uvedený jav by mohol signalizovať vznik komplikovanejších štruktúr (dendritov) v neskorších časových okamihoch vývoja fázového rozhrania. Tento vývoj však nemožno simulovať



**Obrázok 5.2:** Izočiary koncentračného poľa zobrazené pre časové iterácie  $n = 2$ ,  $n = 5$ ,  $n = 14$  a  $n = 18$  (v smere zľava doprava, zhora nadol) pre prípad počiatočnej poruchy rozhrania.

prostredníctvom nami odvodenej konečno-diferenčnej schémy.

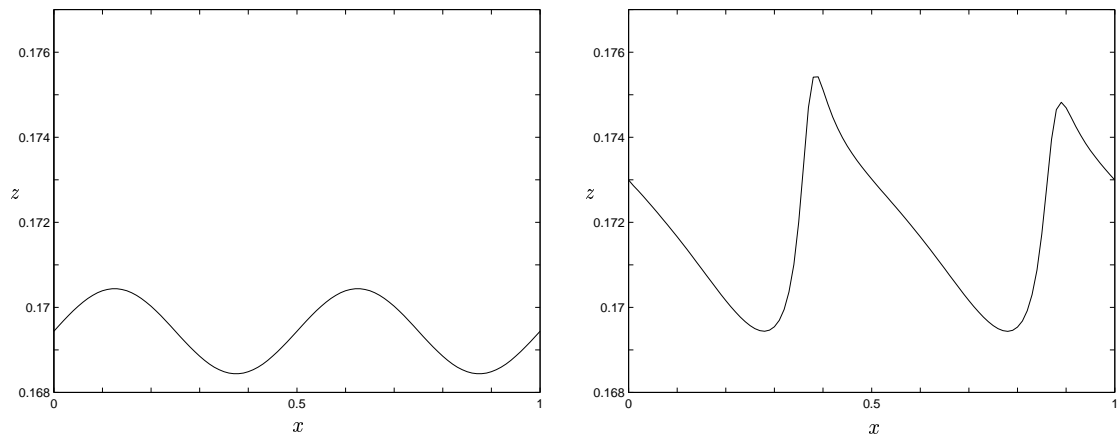
**Vývoj v prípade počiatočnej poruchy teplotného poľa** V tomto prípade sme opäť aplikovali periodickú poruchu, tentokrát na teplotné pole, pričom fázové rozhranie a koncentračné pole zostali neporušené. Tvar porušeného teplotného poľa v počiatočnej iterácii vyzeral nasledovne

$$\theta(x, \zeta, t_0) = \bar{\theta}(\zeta) + 0.001 \sin(4\pi x),$$

t.j. porucha bola konštantná v smere  $\zeta$ . Na Obrázku 5.4 sú zobrazené izočiary teplotného poľa pre niekoľko vybraných časových iterácií. Keďže príslušné numerické výpočty boli časovo náročné, podarilo sa nám zrealizovať len prvých 46 iterácií; k zlyhaniu numerickej schémy pritom nedošlo. Podobne ako v predchádzajúcom prípade, aj tu sa ukazujú podobné problémy s priebehom izočiari v kvapalnej fáze.

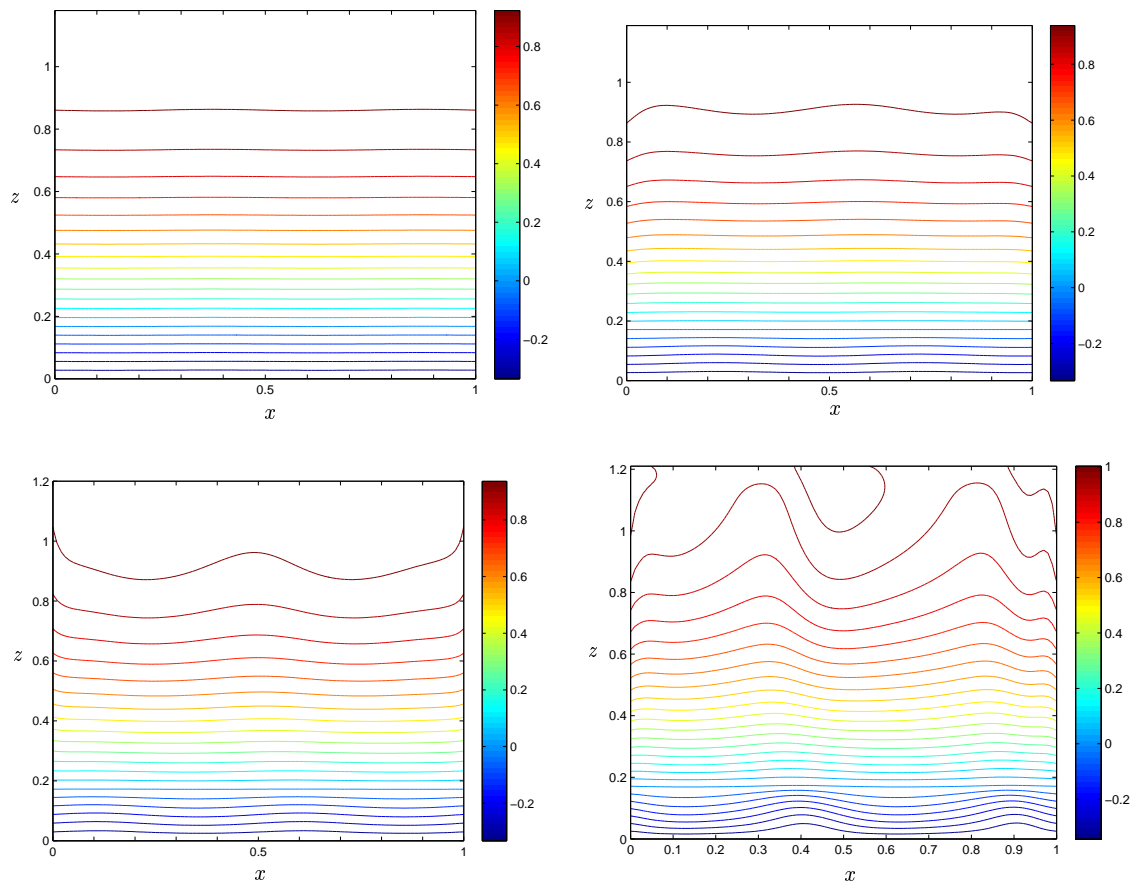
Na Obrázku 5.5 sú zobrazené izočiary koncentračného poľa a na Obrázku 5.6 je porovnanie polôh rozhrania v iterácii  $n = 2$  a v iterácii  $n = 49$ . Vidíme, že rozhranie



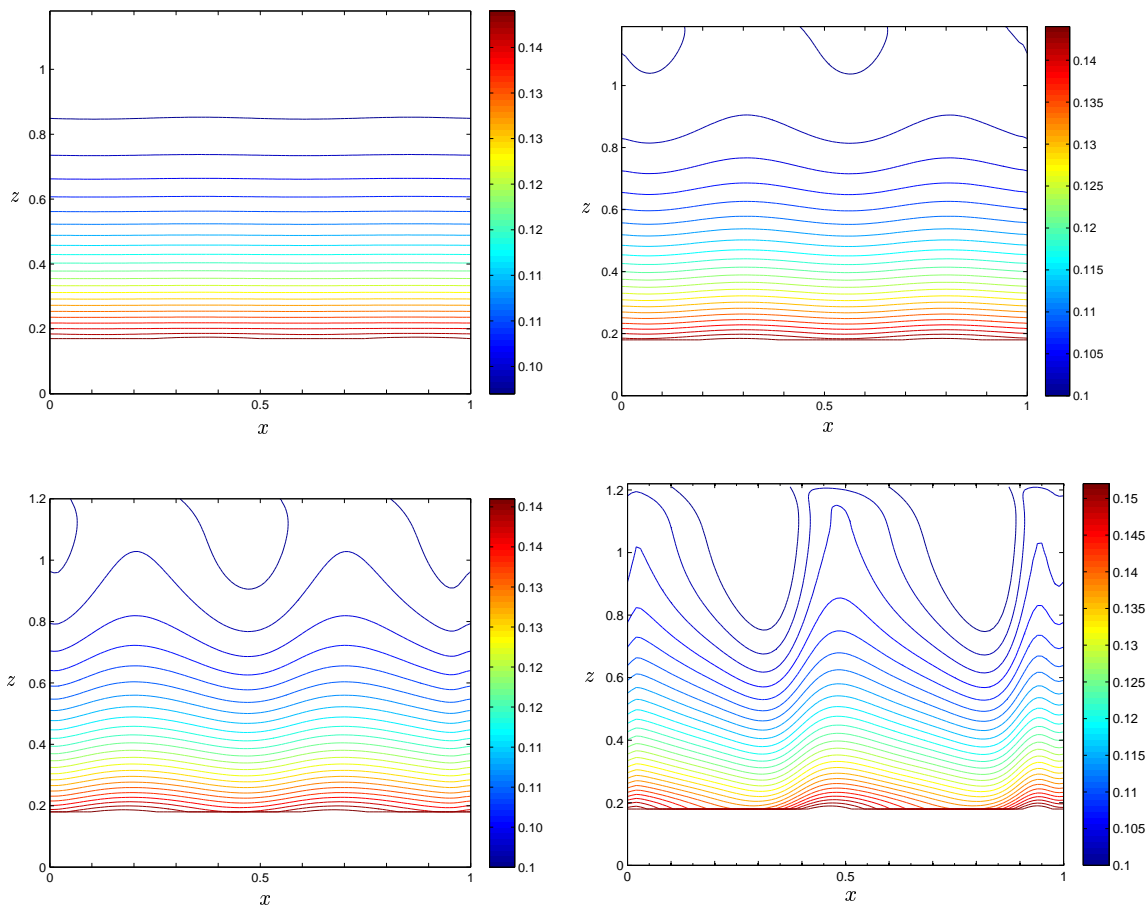


**Obrázok 5.3:** Počiatočný tvar fázového rozhrania (vľavo) a tvar rozhrania v časovej iterácii  $n = 19$  pre prípad počiatočnej poruchy rozhrania.

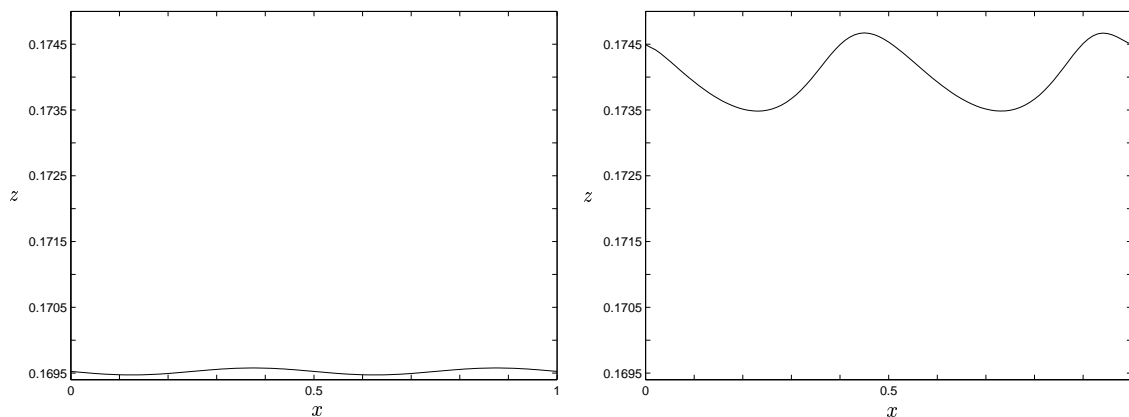
propaguje smerom nahor, pričom sa zvyšuje amplitúda medzi najnižším a najvyšším bodom.



**Obrázok 5.4:** Izočiary teplotného poľa zobrazené pre časové iterácie  $n = 1$ ,  $n = 13$ ,  $n = 31$  a  $n = 49$  (v smere zľava doprava, zhora nadol) pre prípad počiatočnej poruchy teplotného poľa.



**Obrázok 5.5:** Izočiary koncentračného poľa zobrazené pre časové iterácie  $n = 2$ ,  $n = 13$ ,  $n = 31$  a  $n = 49$  (v smere zľava doprava, zhora nadol) pre prípad počiatkovej poruchy teplotného poľa.



**Obrázok 5.6:** Počiatkový tvar fázového rozhrania (vľavo) a tvar rozhrania v časovej iterácii  $n = 49$  pre prípad počiatkovej poruchy teplotného poľa.

# Záver

Podarilo sa nám odvodiť lineárnu implicitnú schému na riešenie dvojrozmerného problému difúzneho tuhnutia binárneho systému. Keďže ide o problém v polonekonečnej oblasti, pri praktickom výpočte bolo potrebné obmedziť sa na konečnú oblasť — v smere osi  $x$  sme predpokladali periodický priebeh, v smere osi  $\zeta$  bolo potrebné aproximovať hodnotu riešenia pre „veľké“ hodnoty  $\zeta$  limitnou hodnotou v nekonečne a tým sa zbaviť problému s polonekonečnosťou v tomto smere. Uvedená skutočnosť môže byť jedným z dôvodov, prečo numerické simulácie nedávajú výsledky v úplnom súlade s očakávaním. Ďalšie možné vylepšenie by mohlo spočívať v odvodení implicitnej schémy využívajúcej nasledovnú diskretizáciu rovnice pre pohyb fázového rozhrania

$$(h_i^{n+1})^2 = (h_i^n)^2 + \frac{\mu_1}{K} [k_{sl}(\theta_{i,N-1}^{n+1} - 4\theta_{i,N}^{n+1}) + \theta_{i,N+3}^{n+1} - 4\theta_{i,N+2}^{n+1}].$$

Uvedený prístup bol použitý v práci Emms (1993). Praktická aplikácia takejto schémy však bude výpočtovo náročnejšia.

# Literatúra

- [1] CRANK, J. 1984 *Free and Moving Boundary Problems*, Oxford University Press.
- [2] DUDIS, J. J., DAVIS S. H. 1971 Energy stability of the buoyancy boundary layer. *J. Fluid Mech.* **47**, 381–403.
- [3] EMMS, P. W. 1993 *Compositional Convection and Freckle Formation in the Solidification of Binary Alloys (dissertation thesis)*. St. Peter's College, Oxford.
- [4] GUBA, P. 2000 *Nelineárna konvekcia v rotujúcej dendritickej zóne (dizertačná práca)*. Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK v Bratislave.
- [5] GUBA, P. 2001 On the finite-amplitude steady convection in rotating mushy layer. *J. Fluid Mech.* **437**, 337–365.
- [6] GUBA, P. & BOĎA, J. 1998 The effect of uniform rotation on convective instability of a mushy layer during binary alloys solidification. *Studia Geoph. et Geod.* **42**, 289–296.
- [7] GUBA, P. & WORSTER, M. G. 2006a Nonlinear oscillatory convection in mushy layer. *J. Fluid Mech.* **553**, 419–443.
- [8] GUBA, P. & WORSTER, M. G. 2006b Free convection in laterally solidifying mushy region. *J. Fluid Mech.* **558**, 69–78.
- [9] GUBA, P. & WORSTER, M. G. 2010 Interactions between steady and oscillatory convection in mushy layers. *J. Fluid Mech.* **645**, 411–434.
- [10] HOMSY, G. M. 1973 Global stability of time-dependent flows: impulsively heated or cooled fluid layers. *J. Fluid Mech.* **60**, 129–139.
- [11] HUPPERT, H. E. 1990 The fluid mechanics of solidification. *J. Fluid Mech.* **212**, 209–240.
- [12] JOSEPH, D. D. 1965 On the stability of the Boussinesq equations. *Arch. Rational Mech. Anal.* **20**, 59–71.
- [13] JOSEPH, D. D. 1966 On the stability of the Boussinesq equations by the method of energy. *Arch. Rational Mech. Anal.* **22**, 163–184.
- [14] JOSEPH, D. D. 1976a *Stability of Fluid Motions I*, Springer–Verlag.

- 
- [15] JOSEPH, D. D. 1976*b* *Stability of Fluid Motions II*, Springer-Verlag.
- [16] JOSEPH, D. D. & SHIR C. C. 1966 Subcritical convective instability (Part 1. Fluid layers) *J. Fluid Mech.* **26**, 753–768.
- [17] SERRIN, J. 1959 On the stability of viscous fluid motions. *Arch. Rational Mech. Anal.* **3**, 1–13.
- [18] ŠIMKANIN, J., HEJDA, P., SAXONBERGOVÁ-JANKOVIČOVÁ, D. 2010 Convection in rotating non-uniformly stratified spherical fluid shells in dependence on Ekman and Prandtl numbers. *Physics of the Earth and Planetary Interiors* **178**, 39–47.
- [19] ŠIMKANIN, J., HEJDA, P., 2009 Control volume method for hydromagnetic dynamos in rotating spherical shells: Testing the code against the numerical dynamo benchmark. *Studia Geoph. et Geod.* **53**, 99–110.
- [20] WORSTER, M. G. 1986 Solidification of an alloy from a cooled boundary. *J. Fluid Mech.* **167**, 481–501.
- [21] WORSTER, M. G. 1991 Natural convection in a mushy layer. *J. Fluid Mech.* **224**, 335–359.
- [22] WORSTER, M. G. 2000 Solidification of Fluids. In *Perspectives in Fluid Dynamics* (ed. G. K. Batchelor & H. K. Moffat & M. G. Woster), 393–446, Cambridge University Press.

# Appendix A

## A.1 Integrálne identity

Nech  $\mathcal{V}$  je jednoducho súvislá, ohraničená oblasť s hladkou hranicou  $\mathcal{S}$ . Nech  $\hat{\mathbf{n}}$  je vektor vonkajšej normály k  $\mathcal{S}$  a nech  $\theta$ ,  $\eta$ ,  $\mathbf{u}$  a  $\mathbf{v}$  sú dostatočne hladké funkcie. Potom platí

$$\int_{\mathcal{V}} \theta \frac{\partial \eta}{\partial x_i} dV = \oint_{\mathcal{S}} \theta \eta n_i dS - \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \theta}{\partial x_i} \eta dV, \quad (\text{A.1a})$$

$$\int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \nabla \theta dV = \oint_{\mathcal{S}} \theta \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS - \int_{\mathcal{V}} \theta \nabla \cdot \mathbf{u} dV, \quad (\text{A.1b})$$

$$\int_{\mathcal{V}} \mathbf{v} \cdot \nabla^2 \mathbf{u} dV = \oint_{\mathcal{S}} \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS - \int_{\mathcal{V}} \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{v} dV, \quad (\text{A.1c})$$

$$\int_{\mathcal{V}} \eta \nabla^2 \theta dV = \oint_{\mathcal{S}} \eta \nabla \theta \cdot \hat{\mathbf{n}} dS - \int_{\mathcal{V}} \nabla \theta \cdot \nabla \eta dV, \quad (\text{A.1d})$$

$$\int_{\mathcal{V}} \theta \nabla \theta \cdot \mathbf{u} dV = \oint_{\mathcal{S}} \theta^2 \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS - \int_{\mathcal{V}} \theta^2 \nabla \cdot \mathbf{u} dV. \quad (\text{A.1e})$$

Identita (A.1a) sa nazýva *Greenova formula* pre viacrozmernú integráciu per partes.

## A.2 Reynoldsova transportná veta

Reynoldsova transportná veta sa zaoberá časovou zmenou (deriváciou) integrálu skalárnej resp. vektorovej funkcie po konečnej oblasti deformovanej vplyvom toku. Nech  $G = G(\mathbf{x}, t)$  je hladká funkcia (pre naše potreby uvažujeme skalárnu funkciu) definovaná v časovo závislej oblasti  $\mathcal{V}(t)$  a nech  $\mathbf{u}$  predstavuje rýchlosť toku. Potom pre časovú deriváciu integrálu (samotný integrál je funkciou času  $t$ ) funkcie  $G$  po oblasti  $\mathcal{V}(t)$  platí

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}(t)} G d\mathcal{V} = \int_{\mathcal{V}(t)} \left( \frac{\partial G}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)G + G \nabla \cdot \mathbf{u} \right) d\mathcal{V}. \quad (\text{A.2})$$

Ak navyše uvažujeme nestlačiteľný tok, t.j.  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ , spĺňajúci podmienku  $\mathbf{u} = \mathbf{0}$  na  $\mathcal{S}$ , tak potom z identity

$$\int_{\mathcal{V}} (\mathbf{u} \cdot \nabla)G d\mathcal{V} = \int_{\mathcal{V}} \nabla G \cdot \mathbf{u} d\mathcal{V} = 0$$

dostávame nasledovný špeciálny prípad Reynoldsovej transportnej vety

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}(t)} G \, d\mathcal{V} = \int_{\mathcal{V}(t)} \frac{\partial G}{\partial t} \, d\mathcal{V}. \quad (\text{A.3})$$

### A.3 Základné lemy variačného počtu

**Lema A.3.1.** *Nech  $f \in C(\mathcal{V})$  je funkcia s vlastnosťou*

$$\int_{\mathcal{V}} f \psi \, d\mathcal{V} = 0$$

pre všetky funkcie  $\psi \in C^2(\mathcal{V})$  také, že  $\psi = 0$  na  $S$ . Potom  $f \equiv 0$  vo  $\mathcal{V}$ .

**Lema A.3.2.** *Nech  $\mathbf{f} \in C^1(\mathcal{V})$  je vektorové pole s vlastnosťou*

$$\int_{\mathcal{V}} \mathbf{f} \cdot \boldsymbol{\eta} \, d\mathcal{V} = 0$$

pre všetky vektorové polia  $\boldsymbol{\eta} \in C^3(\mathcal{V})$  také, že  $\nabla \cdot \boldsymbol{\eta} = 0$  vo  $\mathcal{V}$  a  $\boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{n} = 0$  na  $S$ . Potom existuje funkcia  $p$  taká, že

$$\mathbf{f} = -\nabla p.$$

### A.4 Transformácia na pevnú oblasť

Definujme transformáciu vertikálnej priestorovej premennej

$$z \mapsto \zeta := \frac{z}{h(x, t)}$$

a označme

$$\begin{aligned} \theta(x, \zeta, t) &:= \theta(x, z, t)|_{z=h(x,t)\zeta}, \\ \left(\frac{\partial \theta}{\partial t}\right)_{\zeta} &:= \frac{\partial}{\partial t} \theta(x, \zeta, t), \quad \left(\frac{\partial \theta}{\partial x}\right)_{\zeta} := \frac{\partial}{\partial x} \theta(x, \zeta, t), \\ \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2}\right)_{\zeta} &:= \frac{\partial^2}{\partial x^2} \theta(x, \zeta, t), \quad \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x \partial \zeta}\right)_{\zeta} := \frac{\partial}{\partial t} \theta(x, \zeta, t). \end{aligned}$$

Potom platia nasledovné vzťahy medzi parciálnymi deriváciami podľa nových a pôvodných premenných:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \zeta} = \frac{\partial \theta}{\partial z} h \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{1}{h} \frac{\partial \theta}{\partial \zeta}, \quad (\text{A.4a})$$

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial \zeta^2} = \frac{\partial}{\partial \zeta} \left( \frac{\partial \theta}{\partial z} h \right) = \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} h^2 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} = \frac{1}{h^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \zeta^2}, \quad (\text{A.4b})$$



$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial\theta}{\partial x}\right)_\zeta &= \frac{\partial\theta}{\partial x} + \frac{\partial\theta}{\partial z} \frac{\partial h}{\partial x} \\
&= \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{1}{h} \frac{\partial\theta}{\partial\zeta} \frac{\partial h}{\partial x} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial\theta}{\partial x} = \left(\frac{\partial\theta}{\partial x}\right)_\zeta - \frac{1}{h} \frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial\theta}{\partial\zeta}, \tag{A.4c}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x\partial\zeta}\right)_\zeta &= \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)_\zeta \left(\frac{\partial\theta}{\partial z} h\right) \\
&= \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x\partial z} + \frac{\partial^2\theta}{\partial z^2} \frac{\partial h}{\partial x}\right) h + \frac{\partial\theta}{\partial z} \frac{\partial h}{\partial x} \\
&= \frac{\partial^2\theta}{\partial x\partial z} h + \frac{1}{h} \frac{\partial^2\theta}{\partial\zeta^2} \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{1}{h} \frac{\partial\theta}{\partial\zeta} \frac{\partial h}{\partial x} \\
&\Rightarrow \quad \frac{\partial^2\theta}{\partial x\partial z} = \frac{1}{h} \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x\partial\zeta}\right)_\zeta - \frac{1}{h^2} \frac{\partial h}{\partial x} \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial\zeta^2} - \frac{\partial\theta}{\partial\zeta}\right), \tag{A.4d}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2}\right)_\zeta &= \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)_\zeta \left(\frac{\partial\theta}{\partial x} + \frac{\partial\theta}{\partial z} \frac{\partial h}{\partial x}\right) \\
&= \frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\theta}{\partial x\partial z} \frac{\partial h}{\partial x} + \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x\partial z} + \frac{\partial^2\theta}{\partial z^2} \frac{\partial h}{\partial x}\right) + \frac{\partial\theta}{\partial z} \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \\
&= \frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} + \left[\frac{1}{h} \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x\partial\zeta}\right)_\zeta - \frac{1}{h^2} \frac{\partial h}{\partial x} \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial\zeta^2} - \frac{\partial\theta}{\partial\zeta}\right)\right] \frac{\partial h}{\partial x} \\
&\quad + \left[\frac{1}{h} \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x\partial\eta}\right)_\zeta - \frac{1}{h^2} \frac{\partial h}{\partial x} \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial\zeta^2} - \frac{\partial\theta}{\partial\zeta}\right) + \frac{1}{h^2} \frac{\partial^2\theta}{\partial\zeta^2} \frac{\partial h}{\partial x}\right] + \frac{1}{h} \frac{\partial\theta}{\partial\zeta} \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \\
&= \frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} + \frac{2}{h} \frac{\partial h}{\partial x} \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x\partial\zeta}\right)_\zeta - \frac{1}{h^2} \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2 \frac{\partial^2\theta}{\partial\zeta^2} \\
&\quad + \left[\frac{1}{h} \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{2}{h^2} \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2\right] \frac{\partial\theta}{\partial\zeta} \\
&\Rightarrow \quad \frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} = \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2}\right)_\zeta - \frac{2}{h} \frac{\partial h}{\partial x} \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x\partial\zeta}\right)_\zeta + \frac{1}{h^2} \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2 \frac{\partial^2\theta}{\partial\zeta^2} \\
&\quad - \left[\frac{1}{h} \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{2}{h^2} \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2\right] \frac{\partial\theta}{\partial\zeta}, \tag{A.4e}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)_\zeta &= \frac{\partial\theta}{\partial t} + \zeta \frac{\partial h}{\partial t} \frac{\partial\theta}{\partial z} = \frac{\partial\theta}{\partial t} + \zeta \frac{1}{h} \frac{\partial h}{\partial t} \frac{\partial\theta}{\partial\zeta} \\
&\Rightarrow \quad \frac{\partial\theta}{\partial t} = \left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)_\zeta - \zeta \frac{1}{h} \frac{\partial h}{\partial t} \frac{\partial\theta}{\partial\zeta}. \tag{A.4f}
\end{aligned}$$

# Appendix B

## B.1 Zdrojové kódy v jazyku Matlab

### B.1.1 Numerické riešenie dvojrozmerného problému difúzneho tuhnutia binárneho systému

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%      DEFINOVANIE CASOVO PRIESTOROVEJ SIETE:
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
N=100;
M=700;          %M>N
S=100;
delta_zeta=1/N;
Q=3;
delta_t=0.0001;

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%      FYZIKALNE PARAMETRE VYSTUPUJUCE V MODELI:
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

global rho_s ;
global ks kl ksl;
global L;
global kappa_s kappa_l kappa_hat D;
global gamma_l gamma_s;
global bbeta;
global K;

global lambda;

ks=5.3*10^(-3);
kl=1.3*10^(-3);
ksl=ks/kl;
rho_s=0.916;

kappa_s = 0.0121;
kappa_l = 0.0013;
kappa_hat=kappa_s/kappa_l;
D=0.001;
```

```

gamma_l=D/kappa_l;
gamma_s=D/kappa_s;
bbeta=gamma_s/gamma_l;
L=80.0;

theta_B=-0.4;
CO=0.1;
Delta_T=8.6;

K=(rho_s*L*kappa_l)/(Delta_T*kl);

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%   EXPLICITNE RIESENIE PRE JEDNOROZMERNY ZAKLADNY STAV:
%           theta_bar(j,n), C_bar(j,n), h_bar(i,n)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

t0=0.1;
lambda=GetLambda(theta_B,Delta_T);

%hodnoty priestorovej a casovej premennej
for n=1:(Q+1)
    t(n,1)=t0 + (n-1)*delta_t;
end
for i=1:(S+1)
    x(i,1)=(i-1)*delta_zeta;
end
for j=1:(M+1)
    zeta(j,1)=(j-1)*delta_zeta;
end

for j=1:(M+1)
    theta_bar(1,j) = Theta_Bar(zeta(j,1),theta_B);
end
for i=2:(S+1)
    theta_bar(i,:) = theta_bar(1,:);
end

for j=1:(M+1-N)
    C_bar(1,j) = C_Bar(zeta(j+N,1),CO);
end
for i=2:(S+1)
    C_bar(i,:) = C_bar(1,:);
end

%bezrozmerna pozicia rozhrania v case t0 - zakladny stav
h_bar(:,1) = ones(S+1,1)*2*lambda*(gamma_l*t(1,1))^(1/2);

%bezrozmerna pozicia rozhrania v case t0 - porusený stav

```

```

h_perturb(:,1) = h_bar(:,1) + 0.001*sin(4*pi*x);

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%                               VYPOCET theta(i,j,n), C(i,j,n), h_(i,n)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

mu1 = delta_t/delta_zeta;
mu2 = delta_t/(delta_zeta^2);
mu3 = delta_t/(delta_zeta^3);

%-----
%                               POCIATOCNA ITERACIA
%-----

theta(:,:,1) = theta_bar;
%[Zt,X]=meshgrid(zeta,x);
%theta(:,:,1) = theta_bar + 0.001*sin(4*pi*X)
C(:,:,1) = C_bar;
h(:,1) = h_bar(:,1); %h_perturb(:,1); % h_bar(:,1)

%povodna premenna Z
for i=1:(S+1)
    z(i,:,1) = zeta(:,1)*h(i,1);
end

% matice vystupujuce pri vypocte koncentracneho pola C
D_interface1 = sparse(3*gamma_l*mu1*diag(ones(S,1)));
D_interface2 = sparse(-4*gamma_l*mu1*diag(ones(S,1)));
D_interface3 = sparse(gamma_l*mu1*diag(ones(S,1)));

for n=1:Q
%-----
%                               VYPOCET h(:,n+1)
%-----
    for i=1:S
        pom = h(i,n)^2 + (mu1/K)* ...
            ( ksl*( theta(i,N-1,n) - 4*theta(i,N,n) ) ...
              + theta(i,N+3,n) - 4*theta(i,N+2,n) );
        h(i,n+1)=sqrt(pom);
    end

    h(S+1,n+1) = h(1,n+1); %periodicky priebeh fazoveho
                           %rozhrania

    for i=1:(S+1)
        z(i,:,n+1) = zeta(:,1)'.*h(i,n+1);
    end
end

```

```

%-----
%      VYPOCET theta(:, :, n+1) V SOLID (zeta < 1, i = 2, ..., N)
%-----

%konštrukcia blokovo trojdiagonálnej matice A
D_diag(1) = ( 1 + 2*kappa_hat*mu2 ) * h(1, n+1)^2 ...
            + 2*kappa_hat*mu2 * ( ( h(2, n+1) - h(S, n+1) )^2 ) ...
            / (4*delta_zeta^2) + 1) ...
            - 0.5*kappa_hat*mu3 * ( h(2, n+1)^2 - h(S, n+1)^2 );
D_diag(2:(S-1)) = ( 1 + 2*kappa_hat*mu2 ) * ...
                 h(2:(S-1), n+1).^2 ...
                 + 2*kappa_hat*mu2 * ...
                 ( ( h(3:S, n+1) - h(1:(S-2), n+1) )^2 ) ...
                 / (4*delta_zeta^2) + 1 ) ...
                 - 0.5*kappa_hat*mu3 * ...
                 ( h(3:S, n+1).^2 - h(1:(S-2), n+1).^2 );
D_diag(S) = ( 1 + 2*kappa_hat*mu2 ) * h(S, n+1)^2 ...
            + 2*kappa_hat*mu2 * ...
            ( ( h(1, n+1) - h(S-1, n+1) )^2 ) ...
            / (4*delta_zeta^2) + 1 ) ...
            - 0.5*kappa_hat*mu3 * ( h(1, n+1)^2 - h(S-1, n+1)^2 );

D_lower(1:(S-2)) = - kappa_hat*mu2 * h(2:(S-1), n+1).^2 ...
                  + 0.25*kappa_hat*mu3 * ...
                  ( h(3:S, n+1).^2 - h(1:(S-2), n+1).^2 );
D_lower(S-1) = - kappa_hat*mu2 * h(S, n+1)^2 ...
               + 0.25*kappa_hat*mu3 * ...
               ( h(1, n+1)^2 - h(S-1, n+1)^2 );

D_upper(1) = - kappa_hat*mu2 * h(1, n+1)^2 ...
             + 0.25*kappa_hat*mu3 * ...
             ( h(2, n+1)^2 - h(S, n+1)^2 );
D_upper(2:(S-1)) = - kappa_hat*mu2 * h(2:(S-1), n+1).^2 ...
                   + 0.25*kappa_hat*mu3 * ...
                   ( h(3:S, n+1).^2 - h(1:(S-2), n+1).^2 );

DD = sparse(diag(D_lower, -1)) ...
      + sparse(diag(D_diag, 0) + diag(D_lower, 1));
DD(1, S) = - kappa_hat*mu2 * h(1, n+1)^2 ...
           + 0.25*kappa_hat*mu3 * ( h(2, n+1)^2 - h(S, n+1)^2 );
DD(S, 1) = - kappa_hat*mu2 * h(S, n+1)^2 ...
           + 0.25*kappa_hat*mu3 * ( h(1, n+1)^2 - h(S-1, n+1)^2 );
for j = 3:N
    L_diag(1) = 0.25*(j-1) * ( h(1, n+1)^2 - h(1, n)^2 ) ...
                - kappa_hat*mu2 * ( ( h(2, n+1) - h(S, n+1) )^2 ) ...
                / (4*delta_zeta^2) + 1 ) ...
                + 0.25*kappa_hat*mu3 * ...
                ( h(2, n+1)^2 - h(S, n+1)^2 ) ...

```

```

        - 0.5*kappa_hat*mu3*...
        ( h(1,n+1)*(h(2,n+1)-2*h(1,n+1)+h(S,n+1))...
        + h(2,n+1)-h(S,n+1) );
L_diag(2:(S-1)) = 0.25*(j-1)* ...
        ( h(2:(S-1),n+1).^2 - h(2:(S-1),n).^2 )...
        - kappa_hat*mu2* ...
        ( ((h(3:S,n+1)-h(1:(S-2),n+1)).^2)...
        /(4*delta_zeta^2) + 1) ...
        + 0.25*kappa_hat*mu3*...
        ( h(3:S,n+1).^2 - h(1:(S-2),n+1).^2 ) ...
        - 0.5*kappa_hat*mu3*...
        ( h(2:(S-1),n+1).* ...
        (h(3:S,n+1)-2*h(2:(S-1),n+1)+h(1:(S-2),n+1))...
        + h(3:S,n+1)-h(1:(S-2),n+1) );
L_diag(S) = 0.25*(j-1)*( h(S,n+1)^2 - h(S,n)^2 ) ...
        - kappa_hat*mu2*( ((h(1,n+1)-h(S-1,n+1))^2)...
        /(4*delta_zeta^2) + 1) ...
        + 0.25*kappa_hat*mu3* ...
        ( h(1,n+1)^2 - h(S-1,n+1)^2 ) ...
        - 0.5*kappa_hat*mu3*...
        ( h(S,n+1)*(h(1,n+1)-2*h(S,n+1)+h(S-1,n+1))...
        + h(1,n+1)-h(S-1,n+1) );

L_upper(1) = - 0.25*kappa_hat*mu3* ...
        (h(2,n+1)^2 - h(S,n+1)^2);
L_upper(2:(S-1)) = - 0.25*kappa_hat*mu3* ...
        (h(3:S,n+1).^2 - h(1:(S-2),n+1).^2);

LL(:, :, j) = diag(L_diag, 0) + diag(L_upper, 1);
LL(S, 1, j) = - 0.25*kappa_hat*mu3* ...
        (h(1,n+1)^2 - h(S-1,n+1)^2);
end

for j=2:(N-1)
    U_diag(1) = - 0.25*(j-1)*( h(1,n+1)^2 - h(1,n)^2 ) ...
        - kappa_hat*mu2*...
        ( ((h(2,n+1)-h(S,n+1))^2)/(4*delta_zeta^2) + 1) ...
        + 0.25*kappa_hat*mu3*( h(2,n+1)^2 - h(S,n+1)^2 ) ...
        + 0.5*kappa_hat*mu3*...
        ( h(1,n+1)*(h(2,n+1)-2*h(1,n+1)+h(S,n+1)) ...
        + h(2,n+1)-h(S,n+1) );
    U_diag(2:(S-1)) = - 0.25*(j-1)* ...
        ( h(2:(S-1),n+1).^2 - h(2:(S-1),n).^2 ) ...
        - kappa_hat*mu2*( ((h(3:S,n+1)-h(1:(S-2),n+1)).^2)...
        /(4*delta_zeta^2) + 1) ...
        + 0.25*kappa_hat*mu3*...
        ( h(3:S,n+1).^2 - h(1:(S-2),n+1).^2 ) ...
        + 0.5*kappa_hat*mu3* ...

```

```

        ( h(2:(S-1),n+1).*...
        (h(3:S,n+1)-2*h(2:(S-1),n+1)+h(1:(S-2),n+1))...
          + h(3:S,n+1)-h(1:(S-2),n+1) );
U_diag(S) = - 0.25*(j-1)*( h(S,n+1)^2 - h(S,n)^2 ) ...
- kappa_hat*mu2* ...
  ( ((h(1,n+1)-h(S-1,n+1))^2) ...
    / (4*delta_zeta^2) + 1) ...
+ 0.25*kappa_hat*mu3*...
  ( h(1,n+1)^2 - h(S-1,n+1)^2 ) ...
+ 0.5*kappa_hat*mu3*...
  ( h(S,n+1)*(h(1,n+1)-2*h(S,n+1)+h(S-1,n+1))...
  + h(1,n+1)-h(S-1,n+1) );

U_lower(1:(S-2))= - 0.25*kappa_hat*mu3*(h(3:S,n+1).^2 ...
- h(1:(S-2),n+1).^2);
U_lower(S-1) = - 0.25*kappa_hat*mu3* ...
  (h(1,n+1)^2 - h(S-1,n+1)^2);

UU(:,:,j) = diag(U_lower, -1) + diag(U_diag,0);
UU(1,S,j) = - 0.25*kappa_hat*mu3* ...
  (h(2,n+1)^2 - h(S,n+1)^2);
end

A=sparse([DD,UU(:,:,2),sparse(zeros(S,(N-1)*S-2*S))]);
pom=sparse([LL(:,:,3),DD,UU(:,:,3), ...
  sparse(zeros(S,(N-1)*S-3*S))]);
A=[A;pom];
for j=4:(N-2)
  pom=sparse([zeros(S,(j-3)*S),LL(:,:,j),DD,UU(:,:,j),...
    sparse(zeros(S,(N-1)*S-j*S))]);
  A=[A;pom];
end
pom=sparse([sparse(zeros(S,(N-1)*S-3*S)), ...
  LL(:,:,N-1),DD,UU(:,:,N-1)]);
A=[A;pom];
pom=sparse([sparse(zeros(S,(N-1)*S-2*S)),LL(:,:,N),DD]);
A=[A;pom];

%konštrukcia pravej strany b
b(1,1) = h(1,n+1)^2*theta(1,2,n)...
  + (- 0.25*( h(1,n+1)^2 - h(1,n)^2)...
  + kappa_hat*mu2*( (h(2,n+1) - h(S,n+1))^2 ...
    / (4*delta_zeta^2) + 1)...
  + 0.5*kappa_hat*mu3* ...
    (h(1,n+1)*(h(2,n+1) - 2*h(1,n+1) + h(S,n+1))...
    + h(2,n+1) - h(S,n+1) ) *theta_B;
for i=2:(S-1)
  b(i,1) = h(i,n+1)^2*theta(i,2,n)...

```

```

        + ( - 0.25*( h(i,n+1)^2 - h(i,n)^2)...
        + kappa_hat*mu2*( (h(i+1,n+1) - h(i-1,n+1))^2 ...
          / (4*delta_zeta^2) + 1)...
        + 0.5*kappa_hat*mu3*...
        (h(i,n+1)*(h(i+1,n+1) - 2*h(i,n+1) + h(i-1,n+1))...
          + h(i+1,n+1) - h(i-1,n+1))*theta_B;
    end
    b(S,1) = h(S,n+1)^2*theta(S,2,n)...
            + ( - 0.25*( h(S,n+1)^2 - h(S,n)^2)...
            + kappa_hat*mu2*...
              ( (h(1,n+1) - h(S-1,n+1))^2 ...
                / (4*delta_zeta^2) + 1)...
            + 0.5*kappa_hat*mu3*...
            (h(S,n+1)*( h(1,n+1) - 2*h(S,n+1) + h(S-1,n+1) )...
              + h(1,n+1) - h(S-1,n+1) ) *theta_B;
    for j=3:N
        for i=1:S
            b((j-2)*S + i,1) = h(i,n+1)^2*theta(i,j,n);
        end
    end
end

sol=(A\b)';
theta(:,1,n+1) = theta_B*ones(S+1,1);
                    %teplota na ochladenej hranici

for j=2:N
    for i=1:S
        theta(i,j,n+1) = sol((j-2)*S + i);
    end
end
theta(S+1,2:N,n+1) = theta(1,2:N,n+1);
                    %periodicky priebeh teploty v x-smere

clear A;
clear b;

%-----
%      VYPOCET theta(j+1,:) V LIQUID (zeta>1, i=N+2,...,M)
%-----

D_diag(1) = ( 1 + 2*mu2 ) * h(1,n+1)^2 ...
            + 2*mu2 * ( ( h(2,n+1) - h(S,n+1) ) ^2 ) ...
              / (4*delta_zeta^2) + 1 ) ...
            - 0.5*mu3 * ( h(2,n+1)^2 - h(S,n+1)^2 );
D_diag(2:(S-1)) = ( 1 + 2*mu2 ) * h(2:(S-1),n+1).^2 ...
                 + 2*mu2 * ( ( h(3:S,n+1) - h(1:(S-2),n+1) ) .^2 ) ...
                   / (4*delta_zeta^2) + 1 ) ...
                 - 0.5*mu3 * ( h(3:S,n+1).^2 - h(1:(S-2),n+1).^2 );
D_diag(S) = ( 1 + 2*mu2 ) * h(S,n+1)^2 ...
            + 2*mu2 * ( ( h(1,n+1) - h(S-1,n+1) ) ^2 ) ...

```



```

/(4*delta_zeta^2) + 1 ) ...
- 0.5*mu3*( h(1,n+1)^2 - h(S-1,n+1)^2 );

D_lower(1:(S-2)) = - mu2*h(2:(S-1),n+1).^2 ...
+ 0.25*mu3*( h(3:S,n+1).^2 - h(1:(S-2),n+1).^2 );
D_lower(S-1) = - mu2*h(S,n+1)^2 ...
+ 0.25*mu3*( h(1,n+1)^2 - h(S-1,n+1)^2 );

D_upper(1) = - mu2*h(1,n+1)^2 ...
+ 0.25*mu3*( h(2,n+1)^2 - h(S,n+1)^2 );
D_upper(2:(S-1)) = - mu2*h(2:(S-1),n+1).^2 ...
+ 0.25*mu3*( h(3:S,n+1).^2 - h(1:(S-2),n+1).^2 );

DD = sparse(diag(D_lower,-1)) + sparse(diag(D_diag,0) ...
+ diag(D_lower,1));
DD(1,S) = - mu2*h(1,n+1)^2 ...
+ 0.25*mu3*( h(2,n+1)^2 - h(S,n+1)^2 );
DD(S,1) = - mu2*h(S,n+1)^2 ...
+ 0.25*mu3*( h(1,n+1)^2 - h(S-1,n+1)^2 );

for j=(N+3):M
L_diag(1) = 0.25*(j-1)*( h(1,n+1)^2 - h(1,n)^2 ) ...
- mu2*( ((h(2,n+1)-h(S,n+1))^2) ...
/(4*delta_zeta^2) + 1) ...
+ 0.25*mu3*( h(2,n+1)^2 - h(S,n+1)^2 ) ...
- 0.25*mu3* ...
( h(1,n+1)*(h(2,n+1)-2*h(1,n+1)+h(S,n+1)) ...
+ h(2,n+1)-h(S,n+1) );
L_diag(2:(S-1)) = 0.25*(j-1)* ...
( h(2:(S-1),n+1).^2 - h(2:(S-1),n).^2 )...
- mu2*( ((h(3:S,n+1)-h(1:(S-2),n+1)).^2) ...
/(4*delta_zeta^2) + 1)...
+ 0.25*mu3*(h(3:S,n+1).^2 - h(1:(S-2),n+1).^2) ...
- 0.5*mu3* ...
( h(2:(S-1),n+1).*...
(h(3:S,n+1)-2*h(2:(S-1),n+1)+h(1:(S-2),n+1)) ...
+ h(3:S,n+1)-h(1:(S-2),n+1) );
L_diag(S) = 0.25*(j-1)*( h(S,n+1)^2 - h(S,n)^2 ) ...
- mu2*( ((h(1,n+1)-h(S-1,n+1))^2) ...
/(4*delta_zeta^2) + 1)...
+ 0.25*mu3*( h(1,n+1)^2 - h(S-1,n+1)^2 ) ...
- 0.5*mu3* ...
(h(S,n+1)*(h(1,n+1)-2*h(S,n+1)+h(S-1,n+1)) ...
+ h(1,n+1)-h(S-1,n+1) );

L_upper(1) = - 0.25*mu3*(h(2,n+1)^2 - h(S,n+1)^2);
L_upper(2:(S-1)) = - 0.25*mu3* ...
(h(3:S,n+1).^2 - h(1:(S-2),n+1).^2);

```

```

LL(:, :, j) = diag(L_diag, 0) + diag(L_upper, 1);
LL(S, 1, j) = - 0.25*mu3*(h(1, n+1)^2 - h(S-1, n+1)^2);
end

for j=(N+2):(M-1)
    U_diag(1) = - 0.25*(j-1)*( h(1, n+1)^2 - h(1, n)^2 ) ...
                - mu2*( ((h(2, n+1)-h(S, n+1))^2) ...
                        /(4*delta_zeta^2) + 1) ...
                + 0.25*mu3*( h(2, n+1)^2 - h(S, n+1)^2 ) ...
                + 0.5*mu3* ...
                ( h(1, n+1)*(h(2, n+1)-2*h(1, n+1)+h(S, n+1))...
                  + h(2, n+1)-h(S, n+1) );
    U_diag(2:(S-1)) = - 0.25*(j-1)*...
                    (h(2:(S-1), n+1).^2 - h(2:(S-1), n).^2)...
                    - mu2*( ((h(3:S, n+1)-h(1:(S-2), n+1)).^2)...
                            /(4*delta_zeta^2) + 1) ...
                    + 0.25*mu3* ...
                    ( h(3:S, n+1).^2 - h(1:(S-2), n+1).^2 ) ...
                    + 0.5*mu3* ...
                    ( h(2:(S-1), n+1).*...
                      (h(3:S, n+1)-2*h(2:(S-1), n+1)+h(1:(S-2), n+1)) ...
                      + h(3:S, n+1)-h(1:(S-2), n+1) );
    U_diag(S) = - 0.25*(j-1)*( h(S, n+1)^2 - h(S, n)^2 ) ...
                - mu2*( ((h(1, n+1)-h(S-1, n+1))^2) ...
                        /(4*delta_zeta^2) + 1) ...
                + 0.25*mu3*( h(1, n+1)^2 - h(S-1, n+1)^2 ) ...
                + 0.5*mu3* ...
                ( h(S, n+1)*(h(1, n+1)-2*h(S, n+1)+h(S-1, n+1)) ...
                  + h(1, n+1)-h(S-1, n+1) );

    U_lower(1:(S-2)) = - 0.25*mu3* ...
                    (h(3:S, n+1).^2 - h(1:(S-2), n+1).^2);
    U_lower(S-1) = - 0.25*mu3* ...
                    (h(1, n+1)^2 - h(S-1, n+1)^2);

    UU(:, :, j) = diag(U_lower, -1) + diag(U_diag, 0);
    UU(1, S, j) = - 0.25*mu3*(h(2, n+1)^2 - h(S, n+1)^2);
end

A=sparse([DD, UU(:, :, N+2), ...
          sparse(zeros(S, (M-N-1)*S-2*S))]);
pom=sparse([LL(:, :, N+3), DD, UU(:, :, N+3), ...
           sparse(zeros(S, (M-N-1)*S-3*S))]);
A=[A; pom];
for j=4:(M-N-2)
    pom=sparse([zeros(S, (j-3)*S), LL(:, :, N+j), DD, ...
               UU(:, :, N+j), zeros(S, (M-N-1)*S-j*S)]);

```

```

    A=[A;pom];
end
pom=sparse([sparse(zeros(S,(M-N-1)*S-3*S)), ...
           LL(:, :, M-1), DD, UU(:, :, M-1)]);
A=[A;pom];
pom=sparse([sparse(zeros(S,(M-N-1)*S-2*S)), LL(:, :, M), DD]);
A=[A;pom];

%konštrukcia pravej strany b
for j=(N+2):(M-1)
    for i=1:S
        b((j-N-2)*S + i,1) = h(i,n+1)^2*theta(i,j,n);
    end
end
b((M-N-2)*S + 1,1) = h(1,n+1)^2*theta(1,M,n)...
    + 0.25*(M-1)*( h(1,n+1)^2 - h(1,n)^2)...
    + mu2*( (h(2,n+1) - h(S,n+1))^2 ...
    / (4*delta_zeta^2) + 1) ...
    - 0.5*mu3* ...
    (h(1,n+1)*(h(2,n+1) - 2*h(1,n+1) + h(S,n+1)) ...
    + h(2,n+1) - h(S,n+1));
for i=2:(S-1)
    b((M-N-2)*S + i,1) = h(i,n+1)^2*theta(i,M,n)...
    + 0.25*(M-1)*( h(i,n+1)^2 - h(i,n)^2)...
    + mu2*( (h(i+1,n+1) - h(i-1,n+1))^2 ...
    / (4*delta_zeta^2) + 1)...
    - 0.5*mu3*(h(i,n+1)* ...
    (h(i+1,n+1) - 2*h(i,n+1) + h(i-1,n+1)) ...
    + h(i+1,n+1) - h(i-1,n+1));
end
b((M-N-2)*S + S,1) = h(S,n+1)^2*theta(S,M,n)...
    + 0.25*(M-1)*( h(S,n+1)^2 - h(S,n)^2)...
    + mu2*( (h(1,n+1) - h(S-1,n+1))^2 ...
    / (4*delta_zeta^2) + 1)...
    - 0.5*mu3*...
    (h(S,n+1)*(h(1,n+1) - 2*h(S,n+1) + h(S-1,n+1))...
    + h(1,n+1) - h(S-1,n+1));

sol=(A\b)';
theta(:,N+1,n+1) = zeros(S+1,1);    %teplota na fazovom
                                     %rozhrani
for j=(N+2):M
    for i=1:S
        theta(i,j,n+1) = sol((j-N-2)*S + i);
    end
end
theta(:,M+1,n+1) = ones(S+1,1);    %teplota v zeta=infty
theta(S+1,(N+2):M,n+1) = theta(1,(N+2):M,n+1);

```

```

                                %periodicky priebeh teploty v x-smere
clear A;
clear b;

%-----
%                                VYPOCET C(i,j,n) V LIQUID
%-----

%konštrukcia blokovo trojdiagonálnej matice A

D_diag(1) = ( 1 + 2*gamma_l*mu2 )*h(1,n+1)^2 ...
            + 2*gamma_l*mu2*( ( ( h(2,n+1) - h(S,n+1) ) ^2) ...
            / (4*delta_zeta^2) + 1 ) ...
            - 0.5*gamma_l*mu3*( h(2,n+1)^2 - h(S,n+1)^2 );
D_diag(2:(S-1)) = ( 1 + 2*gamma_l*mu2 ) ...
                 *h(2:(S-1),n+1).^2 ...
                 + 2*gamma_l*mu2 ...
                 ( ( ( h(3:S,n+1) - h(1:(S-2),n+1) ) .^2) ...
                 / (4*delta_zeta^2) + 1 ) ...
                 - 0.5*gamma_l*mu3* ...
                 ( h(3:S,n+1).^2 - h(1:(S-2),n+1).^2 );
D_diag(S) = ( 1 + 2*gamma_l*mu2 )*h(S,n+1)^2 ...
            + 2*gamma_l*mu2*( ( ( h(1,n+1) - h(S-1,n+1) ) ^2) ...
            / (4*delta_zeta^2) + 1 ) ...
            - 0.5*gamma_l*mu3*( h(1,n+1)^2 - h(S-1,n+1)^2 );

D_lower(1:(S-2)) = - gamma_l*mu2*h(2:(S-1),n+1).^2 ...
                  + 0.25*gamma_l*mu3* ...
                  ( h(3:S,n+1).^2 - h(1:(S-2),n+1).^2 );
D_lower(S-1) = - gamma_l*mu2*h(S,n+1)^2 ...
                + 0.25*gamma_l*mu3*( h(1,n+1)^2 - h(S-1,n+1)^2 );

D_upper(1) = - gamma_l*mu2*h(1,n+1)^2 ...
              + 0.25*gamma_l*mu3*( h(2,n+1)^2 - h(S,n+1)^2 );
D_upper(2:(S-1)) = - gamma_l*mu2*h(2:(S-1),n+1).^2 ...
                    + 0.25*gamma_l*mu3* ...
                    ( h(3:S,n+1).^2 - h(1:(S-2),n+1).^2 );

DD = sparse(diag(D_lower,-1)) + sparse(diag(D_diag,0) ...
    + diag(D_lower,1));
DD(1,S) = - gamma_l*mu2*h(1,n+1)^2 ...
           + 0.25*gamma_l*mu3*( h(2,n+1)^2 - h(S,n+1)^2 );
DD(S,1) = - gamma_l*mu2*h(S,n+1)^2 ...
           + 0.25*gamma_l*mu3*( h(1,n+1)^2 - h(S-1,n+1)^2 );
for j=2:(M-N)
    L_diag(1) = 0.25*(N+j-1)*( h(1,n+1)^2 - h(1,n)^2 ) ...
               - gamma_l*mu2*( (h(2,n+1)-h(S,n+1))^2 ) ...
               / (4*delta_zeta^2) + 1 ) ...

```

```

+ 0.25*gamma_l*mu3*( h(2,n+1)^2 - h(S,n+1)^2 ) ...
- 0.5*gamma_l*mu3* ...
  ( h(1,n+1)*(h(2,n+1)-2*h(1,n+1)+h(S,n+1)) ...
    + h(2,n+1)-h(S,n+1) );
L_diag(2:(S-1)) = 0.25*(N+j-1)* ...
  (h(2:(S-1),n+1).^2 - h(2:(S-1),n).^2)...
- gamma_l*mu2* ...
  (((h(3:S,n+1)-h(1:(S-2),n+1)).^2)...
  /(4*delta_zeta^2) + 1) ...
+ 0.25*gamma_l*mu3* ...
  (h(3:S,n+1).^2 - h(1:(S-2),n+1).^2)...
- 0.5*gamma_l*mu3*(h(2:(S-1),n+1).*...
(h(3:S,n+1)-2*h(2:(S-1),n+1)+h(1:(S-2),n+1)) ...
+ h(3:S,n+1)-h(1:(S-2),n+1) );
L_diag(S) = 0.25*(N+j-1)*( h(S,n+1)^2 - h(S,n)^2 ) ...
- gamma_l*mu2*( ((h(1,n+1)-h(S-1,n+1))^2)...
  /(4*delta_zeta^2) + 1) ...
+ 0.25*gamma_l*mu3* ...
  ( h(1,n+1)^2 - h(S-1,n+1)^2 ) ...
- 0.5*gamma_l*mu3*( h(S,n+1).*...
  (h(1,n+1)-2*h(S,n+1)+h(S-1,n+1)) ...
  + h(1,n+1)-h(S-1,n+1) );

L_upper(1) = - 0.25*gamma_l*mu3* ...
  (h(2,n+1)^2 - h(S,n+1)^2);
L_upper(2:(S-1)) = - 0.25*gamma_l*mu3*...
  (h(3:S,n+1).^2 - h(1:(S-2),n+1).^2);

LL(:, :, j) = diag(L_diag,0) + diag(L_upper,1);
LL(S,1,j) = - 0.25*gamma_l*mu3*(h(1,n+1)^2 - h(S-1,n+1)^2);
end

for j=2:(M-N-1)
  U_diag(1) = - 0.25*(N+j-1)*( h(1,n+1)^2 - h(1,n)^2 ) ...
  - gamma_l*mu2* ...
  (((h(2,n+1)-h(S,n+1))^2)/(4*delta_zeta^2) + 1)...
+ 0.25*gamma_l*mu3*( h(2,n+1)^2 - h(S,n+1)^2 ) ...
+ 0.5*gamma_l*mu3* ...
  (h(1,n+1)*(h(2,n+1)-2*h(1,n+1)+h(S,n+1)) ...
    + h(2,n+1)-h(S,n+1) );
  U_diag(2:(S-1)) = - 0.25*(N+j-1)...
    *(h(2:(S-1),n+1).^2 - h(2:(S-1),n).^2) ...
  - gamma_l*mu2*( ((h(3:S,n+1)-h(1:(S-2),n+1)).^2)...
    /(4*delta_zeta^2) + 1) ...
  + 0.25*gamma_l*mu3*...
    ( h(3:S,n+1).^2 - h(1:(S-2),n+1).^2 ) ...
  + 0.5*gamma_l*mu3* ...
    ( h(2:(S-1),n+1).*...

```

```

        (h(3:S,n+1)-2*h(2:(S-1),n+1)+h(1:(S-2),n+1)) ...
        + h(3:S,n+1)-h(1:(S-2),n+1) );
U_diag(S) = - 0.25*(N+j-1)*( h(S,n+1)^2 - h(S,n)^2 ) ...
- gamma_1*mu2*( ((h(1,n+1)-h(S-1,n+1))^2)...
/(4*delta_zeta^2) + 1) ...
+ 0.25*gamma_1*mu3*( h(1,n+1)^2 - h(S-1,n+1)^2 )
...
+ 0.5*gamma_1*mu3*( h(S,n+1)*...
(h(1,n+1)-2*h(S,n+1)+h(S-1,n+1)) ...
+ h(1,n+1)-h(S-1,n+1) );

U_lower(1:(S-2)) = - 0.25*gamma_1*mu3*...
(h(3:S,n+1).^2 - h(1:(S-2),n+1).^2);
U_lower(S-1) = - 0.25*gamma_1*mu3* ...
(h(1,n+1)^2 - h(S-1,n+1)^2);

UU(:, :, j) = diag(U_lower, -1) + diag(U_diag, 0);
UU(1, S, j) = - 0.25*gamma_1*mu3*(h(2,n+1)^2 - h(S,n+1)^2);
end

% pocet S-rozmernych blokov v riadku = M-N
A=sparse([D_interface1,D_interface2,D_interface3,...
sparse(zeros(S,(M-N-3)*S))]);
pom=sparse([LL(:, :, 2),DD,UU(:, :, 2),sparse(zeros(S,(M-N-3)*S))
]);
A=[A;pom];
for j=3:(M-N-2)
    pom=sparse([zeros(S,(j-2)*S),LL(:, :, j),DD,UU(:, :, j),...
sparse(zeros(S,(M-N-1-j)*S))]);
    A=[A;pom];
end
pom=sparse([sparse(zeros(S,(M-N-3)*S)),LL(:, :, M-N-1),DD, ...
UU(:, :, M-N-1)]);
A=[A;pom];
pom=sparse([sparse(zeros(S,(M-N-2)*S)),LL(:, :, M-N),DD]);
A=[A;pom];

%konštrukcia pravej strany b
b(1:S,1) = C(1:S,1,n).*(h(1:S,n+1).^2 - h(1:S,n).^2);
for j=2:(M-N-1)
    b((j-1)*S + [1:S],1) = C(1:S,j,n).*h(1:S,n+1).^2;
end
b((M-N-1)*S + 1,1) = C(1,M-N,n)*h(1,n+1)^2 ...
+ (0.25*(M-1)*( h(1,n+1)^2 - h(1,n)^2)...
+ gamma_1*mu2*( (h(2,n+1) - h(S,n+1))^2 ...
/(4*delta_zeta^2) + 1)...
- 0.5*gamma_1*mu3*(h(1,n+1)*...
(h(2,n+1) - 2*h(1,n+1) + h(S,n+1)) ...

```

```

                                + h(2,n+1) - h(S,n+1))) * C0;
for i=2:(S-1)
    b((M-N-1)*S + i,1) = C(i,M-N,n)*h(i,n+1)^2 ...
        + (0.25*(M-1)*( h(i,n+1)^2 - h(i,n)^2)...
        + gamma_l*mu2*( (h(i+1,n+1) - h(i-1,n+1))^2 ...
            /(4*delta_zeta^2) + 1)...
        - 0.5*gamma_l*mu3*(h(i,n+1)*...
            (h(i+1,n+1) - 2*h(i,n+1) + h(i-1,n+1)) ...
            + h(i+1,n+1) - h(i-1,n+1))) * C0;
end
b((M-N-1)*S + S,1) = C(S,M-N,n)*h(S,n+1)^2 ...
    + (0.25*(M-1)*( h(S,n+1)^2 - h(S,n)^2)...
    + gamma_l*mu2*( (h(1,n+1) - h(S-1,n+1))^2 ...
        /(4*delta_zeta^2) + 1)...
    - 0.5*gamma_l*mu3*(h(S,n+1)*...
        (h(1,n+1) - 2*h(S,n+1) + h(S-1,n+1)) ...
        + h(1,n+1) - h(S-1,n+1))) * C0;

sol=(A\b)';
for j=1:(M-N)
    for i=1:S
        C(i,j,n+1) = sol((j-1)*S + i);
    end
end
C(:,M+1-N,n+1) = C0*ones(S+1,1);
                                %koncentracia pre zeta=infty
C(S+1,1:(M-N),n+1) = C(1,1:(M-N),n+1);
                                %periodicky priebeh teploty v x-smere

clear A;
clear b;

end

```

### B.1.2 Explicitné riešenie pre jednorozmerný základný stav (podprogramy využité pri riešení dvojrozmerného problému)

Teplota  $\bar{\theta}$

```

function pom=Theta_Bar(zeta,theta_B)

global gamma_s gamma_l lambda ;

if zeta<=1
    pom = theta_B - theta_B*erf(sqrt(gamma_s)*lambda*zeta) ...
        /erf(sqrt(gamma_s)*lambda);
else
    pom = 1 - ( 1-erf(sqrt(gamma_l)*lambda*zeta) ) ...
        /( 1-erf(sqrt(gamma_l)*lambda) );
end

```

end

### Koncentrácia $\bar{C}$

```
function pom=C_SelfSim_NonD(zeta,C0)

global lambda;

Ch = C_h(C0,lambda);

if zeta<1
    pom=0;
else
    pom = C0 + (Ch-C0)*( 1-erf(lambda*zeta) )/( 1-erf(lambda) );
end
```

```
function pom=C_h(C0,lambda)
    global gamma_l;
    pom=C0/( 1 - gamma_l*R(lambda) );
end
```

```
function r=R(x)
    r = sqrt(pi)*x*exp(x^2)*(1-erf(x));
end
```

end

### Výpočet parametra $\lambda$

```
function lambda=GetLambda(theta_B,delta_T)

x0=0.2;
lambda=fzero(@lambda_fun,x0);

function l_fun = lambda_fun(lambda)
    global ksl bbeta gamma_s gamma_l K;
    l_fun = K + ksl*theta_B*bbeta/P(sqrt(gamma_s)*lambda) ...
        + 1/R(sqrt(gamma_l)*lambda);
end

function p=P(x)
    p = sqrt(pi)*x*exp(x^2)*erf(x);
end

function r=R(x)
    r = sqrt(pi)*x*exp(x^2)*(1-erf(x));
end
```

end