

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY



Statická stabilita trojzložkových systémov

DIPLOMOVÁ PRÁCA

2015

Martin HURBAN

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

Statická stabilita trojzložkových systémov

DIPLOMOVÁ PRÁCA

Študijný program: Ekonomická a finančná matematika
Študijný odbor: 1114, Aplikovaná matematika
Školiace pracovisko: Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Vedúci práce: doc. RNDr. Peter Guba, PhD.



ZADANIE ZÁVEREČNEJ PRÁCE

- Meno a priezvisko študenta:** Bc. Martin Hurban
Študijný program: ekonomická a finančná matematika (Jednoodborové štúdium, magisterský II. st., denná forma)
Študijný odbor: 9.1.9. aplikovaná matematika
Typ záverečnej práce: diplomová
Jazyk záverečnej práce: slovenský
Sekundárny jazyk: anglický
- Názov:** Statická stabilita trojzložkových systémov
Static stability of three-component systems
- Cieľ:** Cieľom práce je analýza topológie neutrálnych stabilitných kriviek a interpretácia výsledkov v zmysle konvektívno-difúzných nestabilit v reaktívnych pórovitých prostrediach.
- Vedúci:** doc. RNDr. Peter Guba, PhD.
Katedra: FMFI.KAMŠ - Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Vedúci katedry: prof. RNDr. Daniel Ševčovič, CSc.
Dátum zadania: 29.01.2014
- Dátum schválenia:** 10.02.2014
prof. RNDr. Daniel Ševčovič, CSc.
garant študijného programu

.....
študent

.....
vedúci práce

Pod'akovanie Touto cestou sa chcem poďakovať svojmu vedúcemu diplomovej práce doc. RNDr. Peter Guba, PhD, za ochotu, pomoc, vedenie a odborné aj štylistické rady, ktoré mi veľmi pomohli pri, snáď, zrozumiteľnom, spísaní tejto práce. Ďakujem aj Márii Mészárosovej za farebné obrázky a kontrolu zdrojových kódov. Ďakujem aj svojej rodine a priateľom za ich trpezlivosť a podporu.

Abstrakt v štátnom jazyku

HURBAN, Martin: Statická stabilita trojzložkových systémov, Univerzita Komenského v Bratislave, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky; školiteľ: doc. RNDr. Peter Guba, PhD., Bratislava, 2015, 52 s.

V našej práci analyzujeme proces tuhnutia ternárnych zmesí prostredníctvom rovníc riadiacich tuhnutie v primárnej dendritickej vrstve. Uvádzame parametrické redukcie vedúce k explicitnému riešeniu jednorozmerného základného stavu riadiacich rovníc. Zaoberáme sa redukiami pri nenulovej makroskopickej rýchlosti tuhnutia. V práci identifikujeme niektoré vlastnosti koncentračných polí zodpovedné za statickú nestabilitu základného stavu. Pri istých redukciách uvádzame explicitný tvar staticky neutrálne stabilných kriviek v priestore okrajových hodnôt.

Kľúčové slová: ternárne zmesi, statická stabilita, tuhnutie, dendritická zóna, konvekcia, vztlaková sila

Abstract

HURBAN, Martin: Static stability of three-component systems, Comenius University in Bratislava, Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Department of Applied Mathematics and Statistics; Supervisor: doc. RNDr. Peter Guba, PhD., Bratislava, 2015, 52 p.

We analyze a model for the primary solidification of a three component alloy. We identify a number of parametric reductions of the underlying differential system, allowing explicit solutions for the non-convecting one-dimensional base state of the system. Of particular interest are the cases with a finite rate of macroscopic solidification. We identify some local properties of the concentration fields, important from the viewpoint of static stability of the system. For some reductions we determine explicit formulae for the static stability boundaries in the parameter space of initial liquid compositions.

Keywords: ternary alloy, static stability, solidification, mushy layer, convection, buoyancy

Obsah

Úvod	7
1 Ideálna trojzložková dendritická vrstva s konvekciou	9
1.1 Zbezrozmernenie	10
1.1.1 Alternatívny prístup	11
1.2 Základný stav	11
1.3 Numerické riešenie pre základný stav	12
2 Analytické riešenia pre základný stav	13
2.1 Prípád nulovej rýchlosti makroskopického tuhnutia	13
2.2 Prípád s väzbou medzi počiatočnou pevnou fázou a difúziou prímiesí	14
2.3 Prípád bez uvoľňovania prímiesí	16
2.4 Prípád úplného uvoľňovania prímiesí	17
2.5 Prípád s uvoľňovaním latentného tepla	20
2.6 Prípád s úplným uvoľňovaním prímiesí a s nulovou relatívnou vodivosťou	24
2.7 Prípád rovnakej rýchlosti uvoľňovania prímiesí	28
2.7.1 Degenerovaný prípad	31
2.8 Prípád rovnakej rýchlosti uvoľňovania prímiesí s nulovou relatívnou vodivosťou	35
2.8.1 Degenerovaný prípad	38
2.9 Prípád bez uvoľňovania prímiesí pri všeobecnej tepelnej vodivosti a kapacite	40
2.10 Prípád väzby difúzie a začiatočnej koncentrácie zmesi	42
3 Statická stabilita základného stavu	45
3.1 Tvar regiónu statickej stability pre prípad 2.4	46
3.2 Tvar regiónu statickej stability pre prípad 2.6	46
Záver	49
Zoznam použitej literatúry	50
Prehľad zobrazených riešení základných stavov	52

Úvod

Štúdium tuhnutia viaczožkových zmesí vnáša pohľad do mnohých oblastí ľudského poznania, či už ide o metódy odlievania súčiastok v metalurgii, popis pohybov zemského jadra alebo správanie sa vrchných vrstiev oceánov.

Tuhnutie viaczožkových zmesí je pomerne zložitý proces, ktorého všetky aspekty ešte nie sú známe. Počas tohto procesu vzniká medzi tuhou a kvapalnou fázou dendritická vrstva, a práve táto vrstva je zodpovedná za nehomogénnu štruktúru vznikajúcej tuhej fázy. V tejto pórovitej vrstve dochádza k redistribúcii tepla medzi tuhou a kvapalnou fázou, uvoľňovaniu skupenského tepla ako aj k difúzii prímiesí. Objektom skúmania sú podmienky potrebné pre vznik prúdenia v tejto vrstve, pretože práve typ a intezita prúdenia výrazne určujú finálnu makrosegregáciu tuhej fázy.

Pre vznik konvektívnych tokov v kvapaline je hnacím motorom vztlaková sila. Takéto prúdenie môže vznikáť napríklad ak vrchná vrstva kvapaliny je hustejšia ako spodná, čo môže byť spôsobené buď teplotným alebo koncentračným gradientom. Príkladom konvektívneho prúdenia poháňaného teplotným gradientom je ohrev vody zo spodnej hranice, kde teplejšia a teda menej hustá voda je pod vrstvou studenej vody. Situácie, kedy je hustejšia kvapalina nad redšou, nazývame staticky nestabilné a ku konvekčii dôjde v momente, kedy vztlaková sila prekoná viskóznú a iné odporové sily v kvapaline. Konvektívne prúdenie môže v prítomnosti viacerých difúzných polí vznikáť i za staticky stabilných podmienok, t.j. keď hustota v kvapaline klesá s výškou. Tento fenomén sa nazýva dvoj-difúzne prúdenie a prúdenie vzniká vďaka rôznej rýchlosti difúzie dvoch polí. Príkladom z prostredia oceánografie je prísun čistej a studenej vody z ľadovca do mora. Viac sa možno dočítať v [10].

Vztlakovou silou poháňané prúdenie je často prítomné v systémoch, kde prebieha fázová zmena. Takéto systémy môžu zahŕňať okrem kvapalnej zložky rôzny počet prímiesí. Systém s jednou prímiesou sa nazýva binárna zmes. Je známe, že počas tuhnutia binárnych zmesí vzniká pórovitá dendritická vrstva tvorená z dobre vyvinutých kryštálov. Tuhnutie binárnych zmesí je analyzované napr. v prácach [15], [16].

Konvektívne prúdenie môže vzniknúť v dendritickej vrstve, pretože sú v nej prítomné teplotné a koncentračné gradienty.

V dendritickej zóne je vďaka relatívne vysokému pomeru povrchu a objemu kryš-

tálov udržiavaná termodynamická rovnováha. Dôsledkom toho je väzba teplotného a koncentračných polí prostredníctvom krivky liquidus ternárneho fázového diagramu. Preto sú v modeloch tuhnutia zmesí teplotné a koncentračné pole lineárne zviazané, čím v binárnych zmesiach nie je splnená nutná podmienka vzniku dvoj-difúzneho prúdenia. V binárnych zmesiach je však mnoho zaujímavých otázok k štúdiu, z ktorých niektoré sú rozoberané v [5], [6], [7], [13], [14].

Okrem skúmania binárnych zmesí sú podnety z industriálnej sféry pre ďalší rozvoj v oblasti správania sa konvektívneho prúdenia v ternárnych zmesiach. Numerické simulácie týkajúce sa finálnej makrosegregácie zliatin boli urobené v prácach [11], [12]. Tieto práce boli zamerané na kvantitatívne presné predikcie priebehu tuhnutia a makrosegregácie zliatin.

Laboratórne experimenty týkajúce sa trojzložkových vodných roztokov v prácach [2], [4] odhalili nové skutočnosti o procese tuhnutia ternárnych roztokov, konkrétne formovanie dvoch typov dendritických vrstiev - primárnej a sekundárnej. Model uvedený v [3], ktorého špeciálny prípad je model tuhnutia binárnych zmesí popísaný v [14], predstavuje možnosť skúmať podmienky pre vznik konvektívneho prúdenia v primárnej dendritickej vrstve. Tento model zahŕňa difúzny aj konvektívny prenos tepla a prímiesí, viazaný cez podmienku termodynamической rovnováhy. Pre tento model bola v [14] vykonaná analýza lineárnej stability základného stavu (stavu bez prúdenia) a pre špeciálny prípad bolo získané analytické riešenie, ktoré osvetľuje príčiny vzniku konvektívnych prúdení v ternárnej zmesi.

Model z [3] je ďalej analyzovaný v [9], kde je skúmaná istá limita, ktorá vykazuje nové módy nestability základného stavu, vznikajúce pri rozdielnych rýchlostiach vylučovania prímiesí a ich počiatočných koncentrácií.

Cieľom tejto práce je analýza základného stavu modelu pre primárnu dendritickú vrstvu popísanú v [3] a [9]. Naším cieľom je taktiež skúmanie vplyvu parametrov na statickú stabilitu základného stavu prostredníctvom analytických a numerických riešení základného stavu.

1 Ideálna trojzložková dendritická vrstva s konvekciou

Budeme sa zaoberať modelom pre trojzložkovú dendritickú vrstvu, ktorej riadiace rovnice sú popísané v [3, str. 313]. Model popisuje oblasť medzi dvoma pozíciami $\tilde{z} = V't'$ a $\tilde{z} = H' + V't'$, ktorá sa pohybuje v čase t' danou konštantnou rýchlosťou V' . O hrúbke dendritickej vrstvy H' predpokladáme, že je konštantná. Hustota kvapaliny spĺňa

$$\rho' = \rho^R [1 - \alpha (T' - T'_R) - \alpha_1 (C'_1 - C'_{1R}) - \alpha_2 (C'_2 - C'_{2R})], \quad (1)$$

kde α a α_j ($j = 1, 2$) sú koeficienty tepelnej a koncentračnej rozťažnosti a R označuje referenčný stav. Riadiace rovnice [3, 2.2] pre teplotu T' , koncentrácie C'_1 a C'_2 , podiel pevnej časti ϕ , tlak p' a Darcyho rýchlosť \mathbf{u}' v sústave pohybujúcej sa zároveň s rozhraním $z' = \tilde{z} - V't'$ sú

$$\bar{c}(\phi) \left(\frac{\partial T'}{\partial t'} - V' \frac{\partial T'}{\partial z'} + \mathbf{u}' \cdot \nabla T' \right) = \nabla \cdot (\bar{k}(\phi) \nabla T') + L_v \left(\frac{\partial \phi}{\partial t'} - V' \frac{\partial \phi}{\partial z'} \right), \quad (2a)$$

$$(1 - \phi) \left(\frac{\partial C'_j}{\partial t'} - V' \frac{\partial C'_j}{\partial z'} \right) + \mathbf{u}' \cdot \nabla C'_j = \nabla \cdot (\bar{D}_j(\phi) \nabla C'_j) + (1 - k_j) C'_j \left(\frac{\partial \phi}{\partial t'} - V' \frac{\partial \phi}{\partial z'} \right),$$

$$\text{pre } j = 1, 2, \quad (2b)$$

$$T' = T'_0 + m'_1 C'_1 + m'_2 C'_2, \quad (2c)$$

$$\mathbf{u}' = -\frac{\Pi'(\phi)}{\mu} \left(\nabla p' + \rho' g \hat{k} \right), \quad (2d)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}' = 0, \quad (2e)$$

kde $\bar{c}(\phi) = \phi c_s + (1 - \phi) c_l$ je efektívne špecifické teplo dendritickej vrstvy; c_s a c_l sú merná tepelná kapacita pevnej a kvapalnej fázy; $\bar{k}(\phi) = \phi k_s + (1 - \phi) k_l$ je efektívna tepelná vodivosť dendritickej vrstvy; k_s a k_l sú tepelné vodivosti pevnej a kvapalnej fázy; $\bar{D}_j = (1 - \phi) D_j$ je \bar{D}_j difuzivita prímiesy j v dendritickej zóne a D_j je difuzivita prímiesy j v kvapalnej fáze zóny; T'_0 je teplota topenia čistého materiálu; $\Pi'(\phi)$ je permeabilita dendritickej vrstvy; μ je viskozita kvapalnej zložky; g je gravitačné zrýchlenie; a \hat{k} je jednotkový vektor v smere osi z' . Predpokladáme, že segregáčné koeficienty k_j a sklony plochy liquidus sú konštantné. Vo všeobecnom prípade by tieto rovnice záviseli od dynamiky kvapalnej zóny. V tomto modeli je však cieľom izolovať dynamiku v primárnej dendritickej vrstvy, a preto predpokladáme, že koncentračné polia zostávajú na

ploche liquidus mimo kotektických alebo eutektických bodov fázového diagramu. Preto sú hraničné podmienky nasledovné:

$$T'(H') = T'_{top}, C'_1(H') = C'_{1top}, \phi(H') = \phi_0, \mathbf{u}'(H') \cdot \hat{\mathbf{k}} = 0, \quad (3)$$

$$T'(0) = T'_{bot}, C'_1(0) = C'_{1bot}, \mathbf{u}'(0) \cdot \hat{\mathbf{k}} = 0, \quad (4)$$

kde T'_{bot} , T'_{top} , C'_{1bot} , C'_{1top} a ϕ_0 sú dané konštanty.

1.1 Zbezrozmernenie

Podobne ako v [3] vyššie uvedené rovnice upravíme do bezrozmerného tvaru, z ktorého bude ľahšie vidieť matematickú štruktúru rovníc. Dĺžky preškálujeme hrúbkou dendritickej vrstvy H' , čas pomocou H'^2/κ , kde $\kappa = k_l/c_l$ je merná tepelná vodivosť a rýchlosť κ/H' . Bezrozmerná teplota a koncentrácie sú definované vzťahmi

$$T = \frac{T' - T'_{bot}}{\Delta T}, C_j = \frac{C'_j}{\Delta C_j}, \quad (5)$$

kde $\Delta T = T'_{top} - T'_{bot}$ a $\Delta C_j = C'_{jtop} - C'_{jbot}$ pre $j = 1, 2$. Bezrozmerný tlak zavedieme v tvare

$$p = \frac{\Pi_0}{\kappa\mu} (p' + \rho^R g z'), \quad (6)$$

kde Π_0 je permeabilita referenčného stavu. Bezrozmerné riadiace rovnice majú tvar:

$$c(\phi) \left(\frac{\partial T}{\partial t} - V \frac{\partial T}{\partial z} + \mathbf{u} \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (k(\phi) \nabla T) + S \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} - V \frac{\partial \phi}{\partial z} \right), \quad (7a)$$

$$(1 - \phi) \left(\frac{\partial C_j}{\partial t} - V \frac{\partial C_j}{\partial z} \right) + \mathbf{u} \cdot \nabla C_j = Le_j \nabla \cdot [(1 - \phi) \nabla C_j] + (1 - k_j) C_j \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} - V \frac{\partial \phi}{\partial z} \right),$$

$$\text{pre } j = 1, 2, \quad (7b)$$

$$T = T_0 + m_1 C_1 + m_2 C_2, \quad (7c)$$

$$\mathbf{u} = -\Pi(\phi) \left(\nabla p + \Delta \rho \hat{\mathbf{k}} \right), \quad (7d)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (7e)$$

kde $c(\phi) = (c_s/c_l) + 1 - \phi$, $k(\phi) = (k_s/k_l) + 1 - \phi$, $\Pi(\phi) = \Pi'(\phi)/\Pi_0$ a $\Delta \rho$ predstavuje zmenu hustoty v závislosti od teploty a koncentrácií

$$\Delta \rho = -Ra(T - T^R) - Ra_1(C_1 - C_1^R) - Ra_2(C_2 - C_2^R). \quad (8)$$

Bezrozmerné parametre vystupujúce v rovniciach majú tvar:

$$V = \frac{V'H'}{\kappa}, S = \frac{L_v}{c_l \Delta T}, Le_j = \frac{\kappa}{D_j}, T_0 = \frac{T'_0 - T'_{bot}}{\Delta T}, T^R = \frac{T'_R - T'_{bot}}{\Delta T} \quad (9)$$

$$Ra = \frac{\alpha \Delta T g \Pi_0 H'}{\kappa \nu}, Ra_j = \frac{\alpha_j \Delta C_j g \Pi_0 H'}{\kappa \nu}, m_j = \frac{m'_j \Delta C_j}{\Delta T}, C_j^R = \frac{C'_{jR}}{\Delta C_j}, \quad (10)$$

pre $j = 1, 2$, kde $\nu = \mu/\rho^R$. Vďaka väzbe $\Delta T = m'_1 \Delta C_1 + m'_2 \Delta C_2$ v bezrozmernom tvare platí $m_1 + m_2 = 1$. Bezrozmerné hraničné podmienky nadobúdajú formu:

$$T(1) = 1, C_1(1) = C_{1top}, \phi(1) = \phi_0, \mathbf{u}(1) \cdot \hat{\mathbf{k}} = 0, \quad (11)$$

$$T(0) = 0, C_1(0) = C_{1bot}, \mathbf{u}(0) \cdot \hat{\mathbf{k}} = 0, \quad (12)$$

kde $C_{1bot} = C'_{1bot}/\Delta C_1$. Všimnite si, že namiesto podmienok pre T možno ekvivalentne naložiť podmienky $C_2(0) = C_{2bot}$ a $C_2(1) = C_{2top} = C_{2bot} + 1$, kde $C_{2bot} = -(T_0 + m_1 C_{1bot})/m_2$.

1.1.1 Alternatívny prístup

Rovnakými rovnicami ako v [3, str. 313], ktorých formu preberáme v tejto práci sa zaoberá aj [9, str. 638], avšak s rozdielnymi definíciami bezrozmerných premenných, aby bolo možné porovnať naše výsledky s výsledkami prác [3] a [9] uvedieme transformačné vzťahy $T_A = T_G + 1$, $C_{jA} = C_{jG} + 1 + C_{jbot}$, pre $j = 1, 2$. V limite analyzovanej v [9] je rýchlosť makroskopického tuhnutia V označená ako δ , pre pomer merných tepelných kapacít tuhej a kvapalnej fázy $c_s/c_l = 1$, taktiež pre pomer tepelných vodivostí tuhej a kvapalnej fázy $k_s/k_l = 1$. Permeabilita prostredia $\Pi(\phi)$ je v [9] zavedená cez $\Pi(\phi) = 1/K(\phi)$ a pri výpočtoch sa uvažuje Taylorov rozvoj funkcie $K(\phi)$ polynomiálneho typu $K(\phi) = (1 - \phi)^p$.

1.2 Základný stav

Podobne ako v [3] a [9] základným stavom budeme nazývať stabilné, jednorozmerné riešenie systému (7) bez konvekcie ($\mathbf{u} = 0$). Rovnice základného stavu majú tvar:

$$-c(\phi)V \frac{dT}{dz} = \frac{d}{dz} \left[k(\phi) \frac{dT}{dz} \right] - VS \frac{d\phi}{dz}, \quad (13a)$$

$$-V(1 - \phi) \frac{dC_j}{dz} = \frac{1}{Le_j} \frac{d}{dz} \left[(1 - \phi) \frac{dC_j}{dz} \right] - V(1 - k_j) C_j \frac{d\phi}{dz}, \text{ pre } j = 1, 2, \quad (13b)$$

$$T = T_0 + m_1 C_1 + m_2 C_2 \quad (13c)$$

a hraničné podmienky $C_1(0) = C_{1bot}$, $C_2(0) = C_{2bot}$, $C_1(1) = C_{1bot} + 1$, $C_2(1) = C_{2bot} + 1$ a $\phi(1) = \phi_0$.

1.3 Numerické riešenie pre základný stav

Numerické riešenie rovníc (13) získame podobne ako v [3] metódou streľby. rovnice najskôr transformujeme na systém piatich nelineárnych diferenciálnych rovníc prvého rádu s neznámymi ϕ , C_1 , C_2 , Q_1 a Q_2 , kde $Q_j = (1 - \phi) \frac{dC_j}{dz}$, pre $j = 1, 2$. Tieto rovnice majú tvar:

$$\frac{d\phi}{dz} = \frac{V [m_1 Le_1 Q_1 + m_2 Le_2 Q_2 - (c(\phi)/k(\phi)) (m_1 Q_1 + m_2 Q_2)]}{V [m_1 Le_1 (1 - k_1) C_1 + m_2 Le_2 (1 - k_2) C_2] - f}, \quad (14a)$$

$$\frac{dQ_1}{dz} = -V Le_1 Q_1 + V Le_1 (1 - k_1) C_1 \frac{d\phi}{dz}, \quad (14b)$$

$$\frac{dQ_2}{dz} = -V Le_2 Q_2 + V Le_2 (1 - k_2) C_2 \frac{d\phi}{dz}, \quad (14c)$$

$$\frac{dC_1}{dz} = \frac{Q_1}{1 - \phi}, \quad (14d)$$

$$\frac{dC_2}{dz} = \frac{Q_2}{1 - \phi}, \quad (14e)$$

kde

$$f = -\frac{m_1 Q_1 + m_2 Q_2}{1 - \phi} + \frac{VS(1 - \phi)}{k(\phi)} - \frac{1}{k(\phi)} \frac{dk}{d\phi} (m_1 Q_1 + m_2 Q_2).$$

Metóda streľby bude štartovať z počiatočných hodnôt $C_1(1) = C_{1bot} + 1$, $C_2(1) = C_{2bot} + 1$, $\phi(1) = \phi_0$, $Q_1(1) = Q_{1top}$ a $Q_2(1) = Q_{2top}$. Hodnoty Q_{1top} a Q_{2top} sú neznáme a budú určené iteratívne tak, aby boli splnené podmienky $C_1(0) = C_{1bot}$, $C_2(0) = C_{2bot}$. Výpočty sme implementovali v programovacom prostredí Matlab. Pre integrovanie systému diferenciálnych rovníc sme podľa potreby použili funkcie `ode23s`, `ode45`, `ode113` a `ode23tb`. Aby sme mohli použiť vyššie špecifikované funkcie so štartovacím bodom 0 je potrebná transformácia systému z intervalu $z \in [0; 1]$ na $\varsigma \in [0; 1]$, čo zodpovedá substitúcii $z = 1 - \varsigma$. Pre určenie hodnôt Q_{1top} a Q_{2top} používame funkciu `fsolve`. V nasledujúcej kapitole sa nachádzajú analytické riešenia [14], pri rôznych parametrických redukciách a ich porovnania s numericky získaným riešením.

2 Analytické riešenia pre základný stav

Podobne ako v predchádzajúcej kapitole uvažujeme jednorozmerné riešenia s nulovou rýchlosťou. Zodpovedajúce riadiace rovnice majú 9 parametrov a 3 nezávislé hraničné podmienky. Dôležité je poznamenať, že uvažovaný model pre ternárne zmesi sa stáva modelom pre efektívne binárne zmesi, ak je splnená jedna z nasledujúcich množín podmienok:

- $Le_1 = Le_2, k_1 = k_2$ a $m_2 Ra_1 = m_1 Ra_2$
- $Le_1 = Le_2, k_1 = k_2$ a $C_{1bot} = C_{2bot}$.

V tejto kapitole uvedieme analytické riešenia, ktoré možno získať pri redukciách v parametrickom priestore. Vzájomná poloha niekoľkých prípadov v parametrickom priestore (pre nenulovú rýchlosť makroskopického tuhnutia) je uvedená v tabuľke 1.

Tabuľka 1: Prehľad prípadov pri nenulovom V

$Le_1 = Le_2 = Le, S = 0$	$k_1 = k_2 = 1$	$k_1 = k_2 = 0$	$k_1 = k_2 = k$
$k_s/k_l = c_s/c_l = 0$	riešenie neexistuje	Prípád 2.6	Prípád 2.8
$k_s/k_l = c_s/c_l = 1$	Prípád 2.3	Prípád 2.4	Prípád 2.7

2.1 Prípád nulovej rýchlosti makroskopického tuhnutia

Lineárna stabilita základného stavu v tomto prípade bola študovaná v [3, str. 323]. Explicitné riešenie poruchových rovníc v tomto špeciálnom prípade bolo možné nájsť možné a teda aj predpis neutrálne stabilných kriviek. Riešenie základného stavu je závislé iba na hraničných podmienkach ϕ_0, C_{1bot} a C_{2bot} a má tvar:

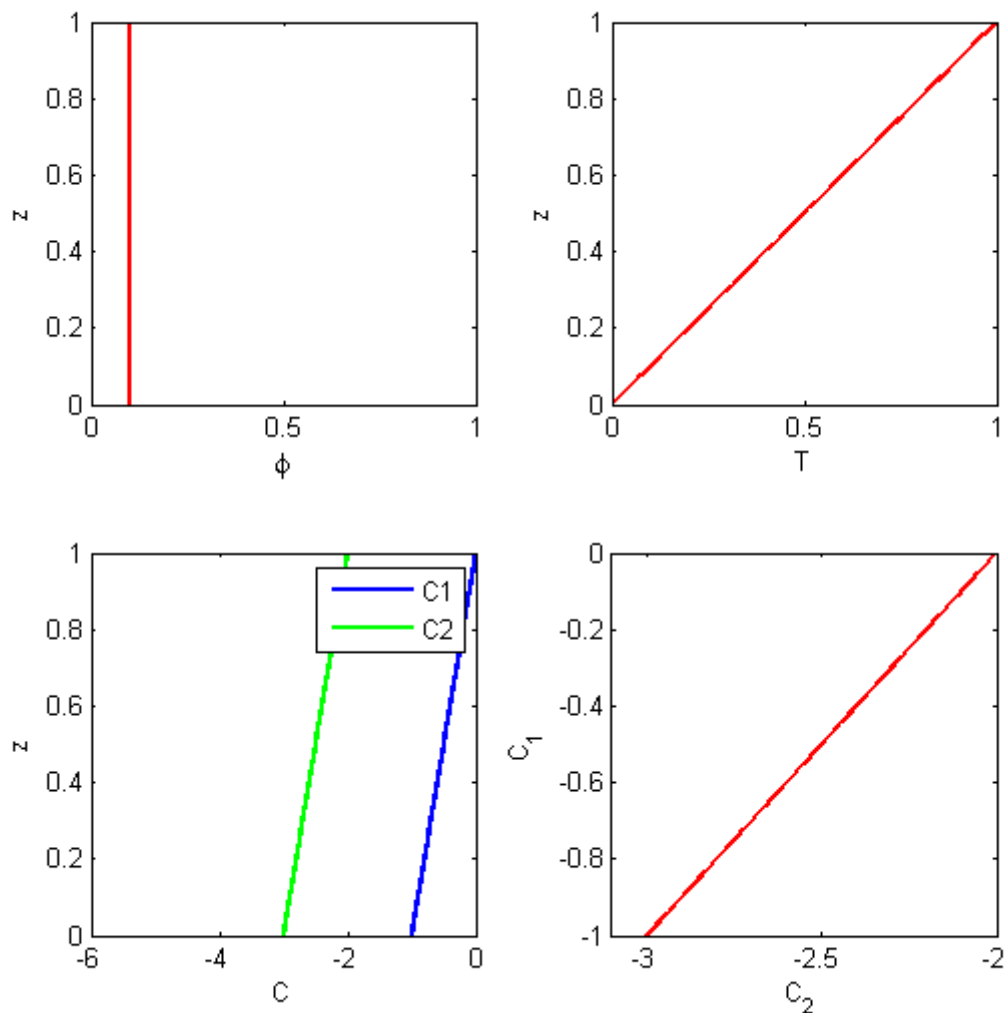
$$\phi(z) = \phi_0, \quad (15a)$$

$$C_1(z) = z + C_{1bot}, \quad (15b)$$

$$C_2(z) = z + C_{2bot}. \quad (15c)$$

Na obrázku 1 sa nachádza typický priebeh základného stavu hodnoty parametrov $V = 0, Le_1 = Le_2 = 0, k_1 = k_2 = 1, S = 0, k_s/k_l = c_s/c_l = 1$ a okrajové podmienky $C_{1bot} = -1, C_{2bot} = -3$ a $\phi_0 = 0.1$.

Obr. 1: Riešenie pri nulovej rýchlosti makroskopického tuhnutia ($V = 0$)



2.2 Prípád s väzbou medzi počiatočnou pevnou fázou a difúziou prímiesí

Tento prípad poskytuje explicitné riešenie systému rovníc pri nenulovej hodnote parametra V a pri väzbách $Le_1 = Le_2 \equiv Le$ a $\frac{c(\phi)}{k(\phi)} = Le$. Riešenie je závislé iba od hraničných hodnôt podmienok ϕ_0 , C_{1bot} , C_{2bot} a parametrov Le a V pri spomínanej

väzbe.

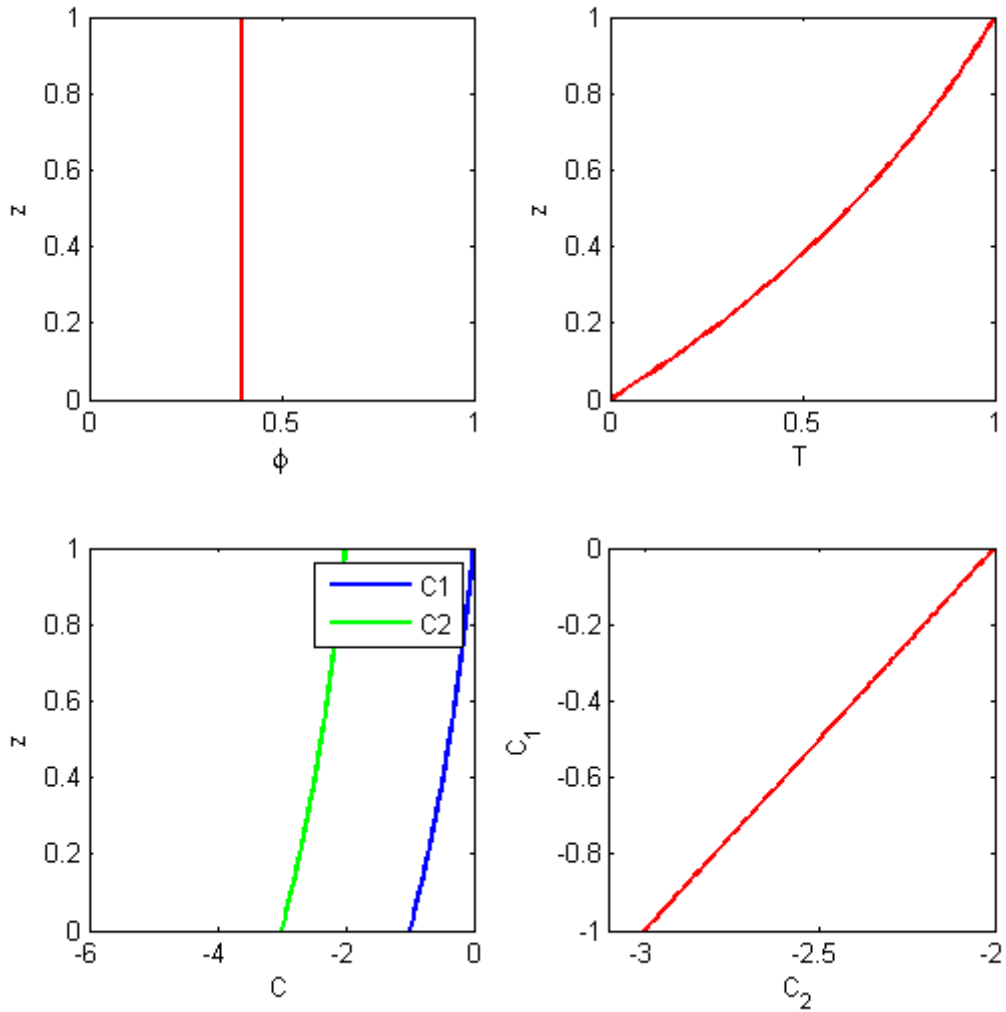
$$\phi(z) = \phi_0, \quad (16a)$$

$$C_1(z) = \frac{e^{-LeVz} - 1}{e^{-LeV} - 1} + C_{1bot}, \quad (16b)$$

$$C_2(z) = \frac{e^{-LeVz} - 1}{e^{-LeV} - 1} + C_{2bot}. \quad (16c)$$

Na obrázku 2 sa nachádza typický priebeh základného stavu. Hodnoty parametrov sú $V = 0.2$, $Le_1 = Le_2 = 5$, $k_1 = k_2 = 0$, $S = 0$, $k_s/k_l = c_s/c_l = 6$ a okrajové podmienky sú $C_{1bot} = -1$, $C_{2bot} = -3$ a $\phi_0 = 0.4$.

Obr. 2: Prípád väzby počiatočnej pevnej zložky a difúzie



Na rozdiel od obrázku 1 je priebeh funkcií C_1 a C_2 nelineárny, funkcia ϕ však zostáva konštantná.

2.3 Prípád bez uvoľňovania prímiesí

Tento prípad predstavuje explicitné riešenie systému ODR pri nenulovej hodnote parametra V , a pri väzbách $Le_1 = Le_2 = Le$, $S = 0$, $k_1 = k_2 = 1$, $c_s/c_l = k_s/k_l = 1$. Riešenie je parametrizované cez okrajové hodnoty ϕ_0 , C_{1bot} , C_{2bot} , a Le a V . Redukovaný systém rovníc pre tento prípad má tvar:

$$\frac{d\phi}{dz} = V(Le - 1)(1 - \phi), \quad (17a)$$

$$\frac{dQ_j}{dz} = -VLeQ_j, \quad j = 1, 2, \quad (17b)$$

$$\frac{dC_j}{dz} = \frac{Q_j}{1 - \phi}, \quad j = 1, 2, \quad (17c)$$

s hraničnými podmienkami $C_1(0) = C_{1bot}$, $C_2(0) = C_{2bot}$, $C_1(1) = C_{1bot} + 1$, $C_2(1) = C_{2bot} + 1$ a $\phi(1) = \phi_0$. Rovnice (17a, b) predstavujú tri nezávislé lineárne diferenciálne rovnice, ktorých všeobecné riešenia majú tvar

$$1 - \phi(z) = c_1 e^{-V(Le-1)z}, \quad (18a)$$

$$Q_1(z) = c_2 e^{-VLez}, \quad (18b)$$

$$Q_2(z) = c_3 e^{-VLez}, \quad (18c)$$

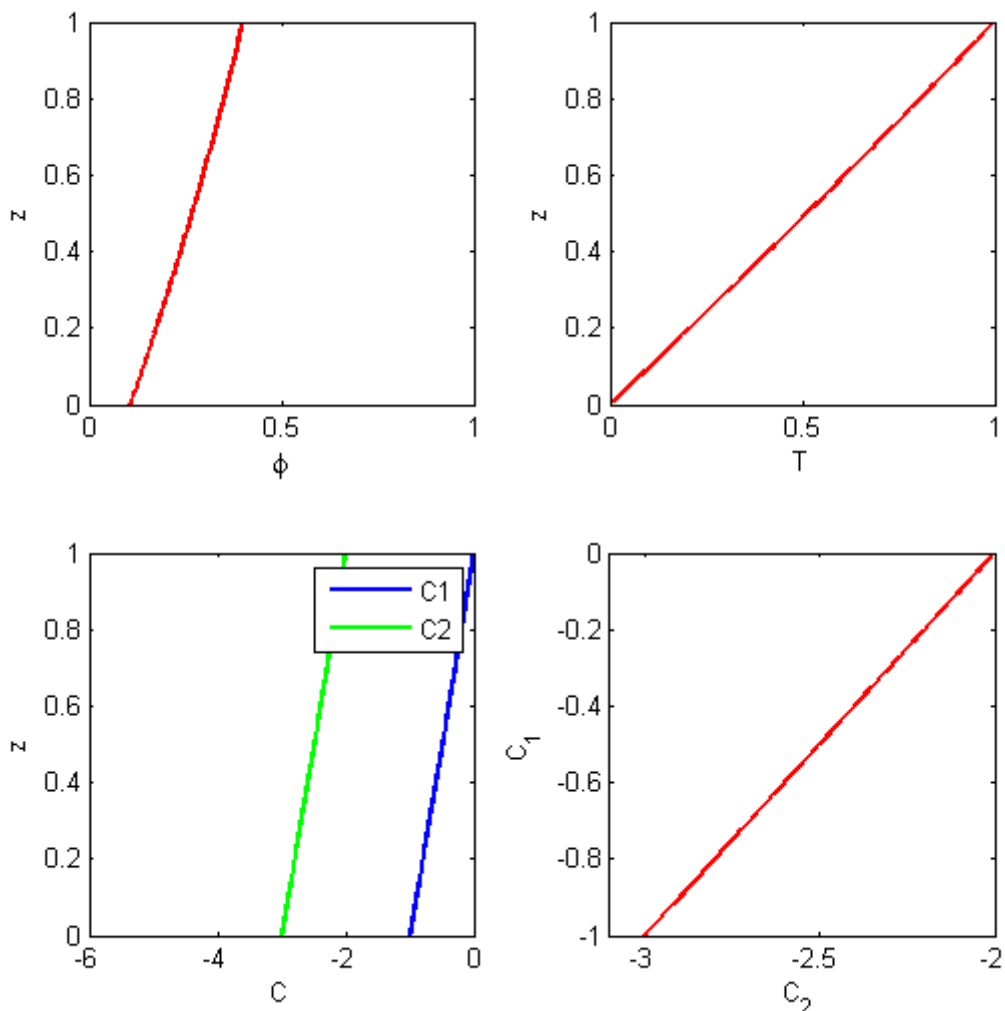
kde c_1 , c_2 a c_3 sú konštanty. Dosadením (18a, b, c) do (17c) a následným integrovaním získame všeobecné riešenie $C_1(z)$ a $C_2(z)$. Po aplikácii hraničných podmienok získame riešenie redukovaných rovníc v tvare:

$$\phi(z) = 1 - (1 - \phi_0) e^{V(Le-1)(1-z)}, \quad (19a)$$

$$C_j(z) = \frac{e^{-Vz} - 1}{e^{-V} - 1} + C_{jbot} \text{ pre } j = 1, 2. \quad (19b)$$

Na obrázku 3 sa nachádza typický priebeh základného stavu. Hodnoty parametrov sú $V = 0.1$, $Le_1 = Le_2 = 5$, $k_1 = k_2 = 1$, $S = 0$, $k_s/k_l = c_s/c_l = 1$ a hraničných podmienok $C_{1bot} = -1$, $C_{2bot} = -3$ a $\phi = 0.4$.

Obr. 3: Prípád bez uvoľňovania prímiesí



Narozdiel od prípadov 2.1 a 2.2 pole ϕ nie je konštantné ale monotónne rastie s výškou z . Takéto správanie je neočakávané nezodpovedá konvenčnej situácii známej z binárneho prípadu. Taktiež platí, že ϕ zotrvá v intervale $[0, 1]$ len ak platí $Le < 1 - \frac{\ln(1-\phi_0)}{V}$. Vo všetkých nasledujúcich prípadoch budú prípustné aj parametrické režimy s klesajúcim ϕ .

2.4 Prípád úplného uvoľňovania prímiesí

Tento prípad zodpovedá situácii $V \neq 0$, s väzbami $Le_1 = Le_2 \equiv Le$, $S = 0$, $k_1 = k_2 = 0$ a $c_s/c_l = k_s/k_l = 1$. Riešenie je závislé len od počiatočných podmienok ϕ_0 , C_{1bot} , C_{2bot}

a parametrov m_1 , Le a V . Redukovaný systém rovníc má tvar:

$$\frac{d\phi}{dz} = \frac{V(Le-1)(1-\phi)(m_1Q_1+m_2Q_2)}{m_1Q_1+m_2Q_2+VLe(m_1C_1+m_2C_2)(1-\phi)}, \quad (20a)$$

$$\frac{dQ_j}{dz} = -VLeQ_j + VLeC_j \frac{d\phi}{dz}, \quad j = 1, 2, \quad (20b)$$

$$\frac{dC_j}{dz} = \frac{Q_j}{1-\phi}, \quad j = 1, 2. \quad (20c)$$

s okrajovými podmienkami $C_1(0) = C_{1bot}$, $C_2(0) = C_{2bot}$, $C_1(1) = C_{1bot} + 1$, $C_2(1) = C_{2bot} + 1$ a $\phi(1) = \phi_0$. Riešenie možno získať nasledovným postupom:

1. Definujeme zložené premenné $C := 2(m_1C_1 + m_2C_2)$ a $Q := 2(m_1Q_1 + m_2Q_2)$, a parameter $C_{bot} := 2(m_1C_{1bot} + m_2C_{2bot})$;
2. Vyriešime systém rovníc pre neznáme ϕ , C a Q ;
3. Vypočítame C_1 a C_2 využitím známej funkcie ϕ .

Rovnice v nových premenných majú tvar

$$\frac{d\phi}{dz} = \frac{V(Le-1)(1-\phi)Q}{Q + VLeC(1-\phi)}, \quad (21a)$$

$$\frac{dQ}{dz} = -VLeQ + VLeC \frac{d\phi}{dz}, \quad (21b)$$

$$\frac{dC}{dz} = \frac{Q}{1-\phi}, \quad (21c)$$

kde rovnica (21b) vznikla súčtom rovníc (20b) pre $j = 1$ a 2 a rovnica (21c) vznikla súčtom rovníc (20c) pre $j = 1$ a 2 . Okrajové podmienky majú tvar $C(0) = 2(m_1C_{1bot} + m_2C_{2bot})$, $C(1) = 2(m_1C_{1bot} + m_2C_{2bot}) + 2$ a $\phi(1) = \phi_0$.

Z rovnice (21c) vyjadríme Q a dosadíme do rovnice (21b), čím získame vzťah

$$\frac{dQ}{dz} = -VLe \frac{dC}{dz} (1-\phi) + VLeC \frac{d\phi}{dz}. \quad (22)$$

Integrovaním tejto rovnice máme

$$Q = -VLe(1-\phi)C + c_1, \quad (23)$$

kde c_1 je integračná konštanta. Pomocou rovnice (23) a vzťahu $Q = \frac{dC}{dz}(1-\phi)$ vyjadrenom z (21c) do (21a) získame rovnicu

$$\frac{d\phi}{dz} = \frac{V(Le-1)(1-\phi)^2 \frac{dC}{dz}}{c_1}, \quad (24)$$

ktorej integráciou máme

$$\frac{1}{1-\phi} = \frac{V(Le-1)}{c_1}C + c_2, \quad (25)$$

kde c_2 je integračná konštanta. Kombináciou rovníc (21c), (23) a (25) získame lineárnu diferenciálnu rovnicu s konštantnou nehomogenitou

$$\frac{dC}{dz} = \frac{-VLe(1-\phi)C + c_1}{(1-\phi)} = -VLeC + \frac{c_1}{1-\phi} = -VC + c_1c_2, \quad (26)$$

pre C s riešením:

$$C(z) = c_3e^{-Vz} - c_1c_2, \quad (27)$$

kde c_3 je integračná konštanta. Pomocou vzťahu medzi C a ϕ možno vyjadriť všeobecné riešenie ϕ v tvare

$$\phi(z) = 1 - \frac{c_1}{V(Le-1)c_3e^{-Vz} - c_1c_2}. \quad (28)$$

S využitím okrajových podmienok možno dopočítať hodnoty c_1 , c_2 a c_3 . Funkcia ϕ , o ktorú máme najväčší záujem, má tvar:

$$\phi(z) = 1 - (1-\phi_0) \frac{\frac{2}{e^{-V}-1} \left(1 - \frac{Le-1}{Le}e^{-V}\right) - C_{bot}}{\frac{2}{e^{-V}-1} \left(1 - \frac{Le-1}{Le}e^{-Vz}\right) - C_{bot}}. \quad (29)$$

Teraz možno využiť explicitný predpis pre ϕ a dopočítať C_1 a C_2 . Uvedieme len postup pre C_1 , pretože postup pre C_2 je analogický. Pomocou rovníc (20b) a (20c) možno vyjadriť vzťah medzi C_1 a Q_1 .

$$Q_1 = -VLe(1-\phi)C_1 + c_1, \quad (30)$$

kde c_1 je integračná konštanta. Po dosadení do rovnice (20c) a využitím vzťahu pre ϕ máme rovnicu:

$$\frac{dC_1}{dz} = -VLeC_1 + \frac{c_1 \left(\frac{2}{e^{-V}-1} \left(1 - \frac{Le-1}{Le}e^{-Vz}\right) - C_{bot} \right)}{(1-\phi_0) \left(\frac{2}{e^{-V}-1} \left(1 - \frac{Le-1}{Le}e^{-V}\right) - C_{bot} \right)}. \quad (31)$$

s riešením

$$\phi(z) = 1 - (1-\phi_0) \frac{\frac{2}{e^{-V}-1} \left(1 - \frac{Le-1}{Le}e^{-V}\right) - C_{bot}}{\frac{2}{e^{-V}-1} \left(1 - \frac{Le-1}{Le}e^{-Vz}\right) - C_{bot}}, \quad (32a)$$

$$C_1(z) = \alpha_1 e^{-LeVz} + \beta_1 \left(C_{bot} + 2 \frac{e^{-Vz} - 1}{e^{-V} - 1} \right), \quad (32b)$$

$$C_2(z) = \alpha_2 e^{-LeVz} + \beta_2 \left(C_{bot} + 2 \frac{e^{-Vz} - 1}{e^{-V} - 1} \right), \quad (32c)$$

kde

$$\alpha_j = \frac{2C_{jbot} - C_{bot}}{C_{bot}(1 - e^{-LeV}) + 2}, \quad j = 1, 2,$$

$$\beta_j = \frac{C_{jbot}(1 - e^{-LeV}) + 1}{C_{bot}(1 - e^{-LeV}) + 2}, \quad j = 1, 2.$$

Tieto vzťahy platia pre všetky hodnoty okrajových koncentrácií okrem intervalu $C_{bot} \in [-2(1 - \frac{Le-1}{Le}e^{-V}) / (1 - e^{-V}); \frac{-2}{Le} / (1 - e^{-V})]$. Pre limitný prípad kedy $Le \gg 0$ má neprípustný interval limitný tvar $[-2; 0]$.

V limite $V \rightarrow 0$ sa tento prípad redukuje na prípad 2.1, vo všeobecnosti to tak byť nemusí. Funkcia ϕ je pre všetky parametrické režimi klesajúca s výškou z . Na obrázku 4 je znázornený typický priebeh základného stavu, pre hodnoty parametrov $V = 0.1$, $Le_1 = Le_2 = 100$, $k_1 = k_2 = 0$, $S = 0$, $k_s/k_l = c_s/c_l = 1$, $m_1 = m_2 = 0.5$ a hraničné podmienky $C_{1bot} = -1$, $C_{2bot} = -3$ a $\phi_0 = 0.1$. Numerické riešenie sme získali pomocou funkcie `ode45`, pri tolerancii 10^{-3} . Metóda `ode45`, založená na algoritme Dormanda a Princea, ktorý predstavuje modifikovanú Runge-Kutta metódu 4. rádu s adaptívnou dĺžkou kroku.

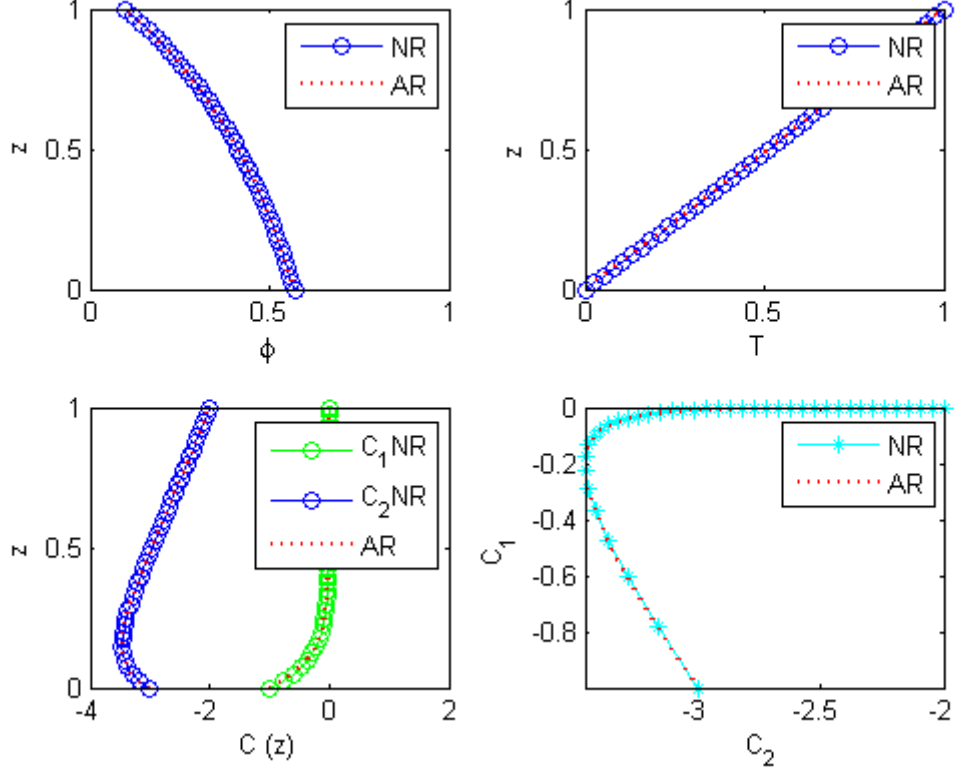
Nemonotónny priebeh C_2 indikuje formovanie koncentračných hraničných vrstiev pri spodnej hranici primárnej zóny. Vidíme, že priebeh ϕ , C_1 a C_2 je silne nelineárny. Nemonotónnosť koncentračného poľa staticky destabilizuje základný stav. Pre tento prípad možno získať explicitný predpis pre také hraničné hodnoty C_{1bot} a C_{2bot} , pre ktoré je priebeh C_1 , resp. C_2 nemonotónny. Podrobnejšie sa tejto téme budeme venovať v kapitole 3.

Na obrázku 5 sa nachádza priebeh rozdielu medzi explicitným riešením (32a) a numerickým riešením. Poznamenávame, že oblasť koncentračných hraničných vrstiev je zaťažovaná najväčšou numerickou chybou.

2.5 Prípad s uvoľňovaním latentného tepla

Tento prípad predstavuje riešenie základného stavu pri *nenulovom* S a *nenulovom* V , pri parametrických obmedzeniach: $k_s/k_l = c_s/c_l = 0$, $k_1 = k_2 = 1$, $m_1 = 0.5$ a $Le_1 =$

Obr. 4: Prípád úplného uvoľňovania prímiesí



$Le_2 = Le$. Parametre V , Le a S a okrajové podmienky C_{jbot} sú voľné. Redukovaný systém rovníc má tvar:

$$\frac{d\phi}{dz} = \frac{-(Le-1)}{2S} (Q_1 + Q_2) \quad (33a)$$

$$\frac{dQ_j}{dz} = -VLeQ_j, \quad j = 1, 2, \quad (33b)$$

$$\frac{dC_j}{dz} = \frac{Q_j}{1-\phi}, \quad j = 1, 2, \quad (33c)$$

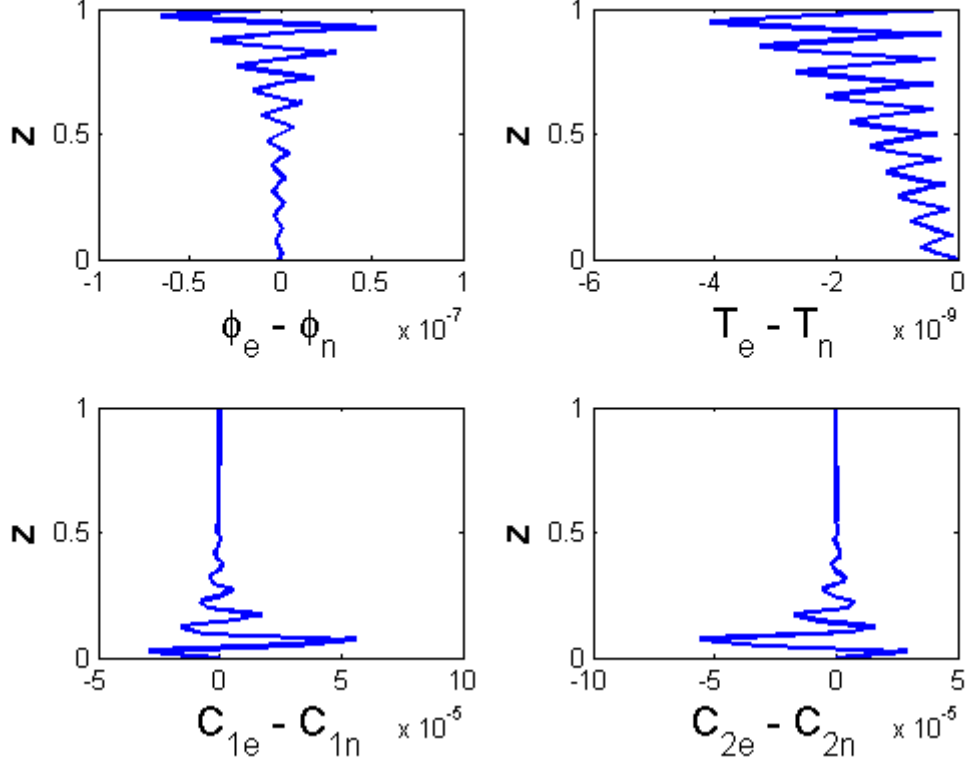
s okrajovými podmienkami $C_1(0) = C_{1bot}$, $C_2(0) = C_{2bot}$, $C_1(1) = C_{1bot} + 1$, $C_2(1) = C_{2bot} + 1$ a $\phi(1) = \phi_0$. Riešenie redukovaných rovníc možno získať nasledovne: Rovnice (33b) sú lineárne homogénne rovnice s riešeniami:

$$Q_j = c_j e^{-LeVz}, \quad \text{pre } j = 1, 2, \quad (34a)$$

kde c_1 a c_2 sú integračné konštanty. Integrovaním rovnice (33a) potom dostávame:

$$\phi(z) = \frac{(Le-1)(c_1 + c_2)}{2SLeV} e^{-LeVz} + c_3. \quad (35)$$

Obr. 5: Rozloženie chyby numerického riešenia



Dosadením vzťahov pre Q_1 , Q_2 a ϕ do rovnice (33c), a následnou integráciou máme

$$C_1(z) = \frac{2c_1S}{(Le-1)(c_1+c_2)} \ln \left[1 - c_3 - \frac{(Le-1)(c_1+c_2)}{2SLeV} e^{-LeVz} \right] + c_4, \quad (36a)$$

$$C_2(z) = \frac{2c_2S}{(Le-1)(c_1+c_2)} \ln \left[1 - c_3 - \frac{(Le-1)(c_1+c_2)}{2SLeV} e^{-LeVz} \right] + c_5, \quad (36b)$$

kde c_4 a c_5 sú integračné konštanty. Využitím okrajových podmienok možno dourčiť hodnoty konštant $c_1 - c_5$. Riešenie napokon nadobúda tvar:

$$\phi(z) = \phi_0 + (1 - \phi_0) \gamma \frac{e^{-LeVz} - e^{-LeV}}{1 - e^{-LeV}}, \quad (37a)$$

$$C_1(z) = C_{1bot} + 1 + \frac{S}{Le-1} \ln \left[1 - \gamma \frac{e^{-LeVz} - e^{-LeV}}{1 - e^{-LeV}} \right], \quad (37b)$$

$$C_2(z) = C_{2bot} + 1 + \frac{S}{Le-1} \ln \left[1 - \gamma \frac{e^{-LeVz} - e^{-LeV}}{1 - e^{-LeV}} \right]. \quad (37c)$$

Poznamenávame, že parameter $\gamma \equiv 1 - e^{-\frac{(Le-1)}{S}}$ nadobúda hodnoty z intervalu $(0; 1)$ a ϕ má vlastnosť $0 < \phi(z) < 1$ pre $Le > 1$

Navyše možno získať nasledujúce užitočné vlastnosti:

$$\lim_{S \rightarrow \infty} \phi(z) = \phi_0,$$

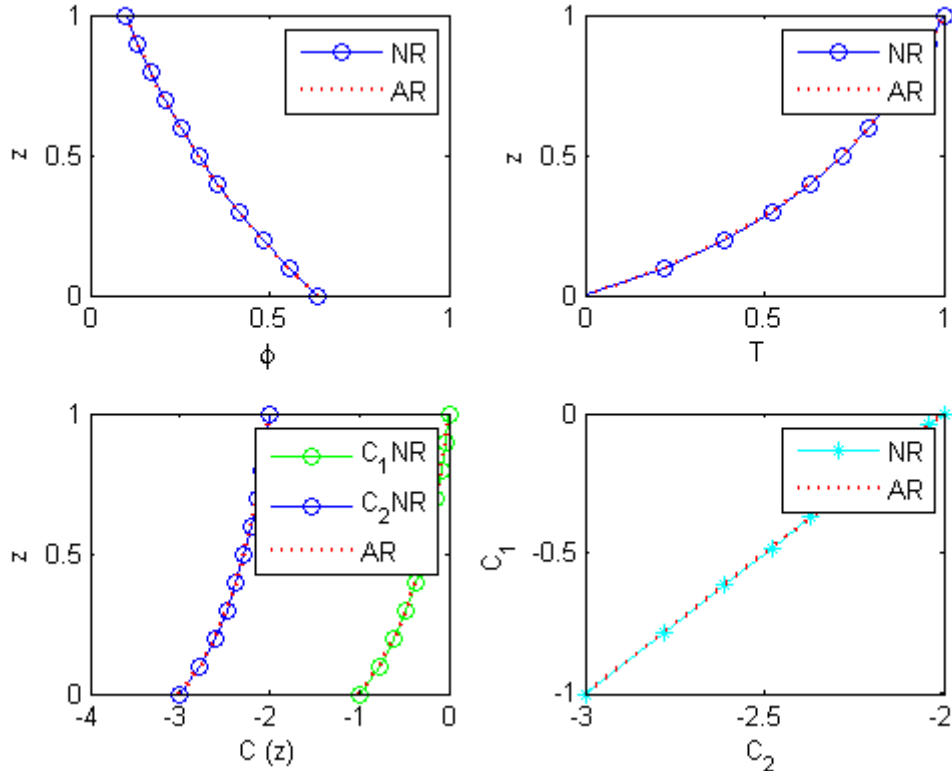
$$\lim_{S \rightarrow \infty} C_j(z) = C_{jbot} + \frac{1 - e^{-LeVz}}{1 - e^{-LeV}} , \text{ pre } j = 1, 2$$

$$\lim_{V \rightarrow 0} \phi(z) = \phi_0 + (1 - \phi_0) \gamma (1 - z) ,$$

$$\lim_{V \rightarrow 0} C_j(z) = C_{jbot} + 1 + \frac{S}{Le - 1} \ln [1 - \gamma (1 - z)] , \text{ pre } j = 1, 2.$$

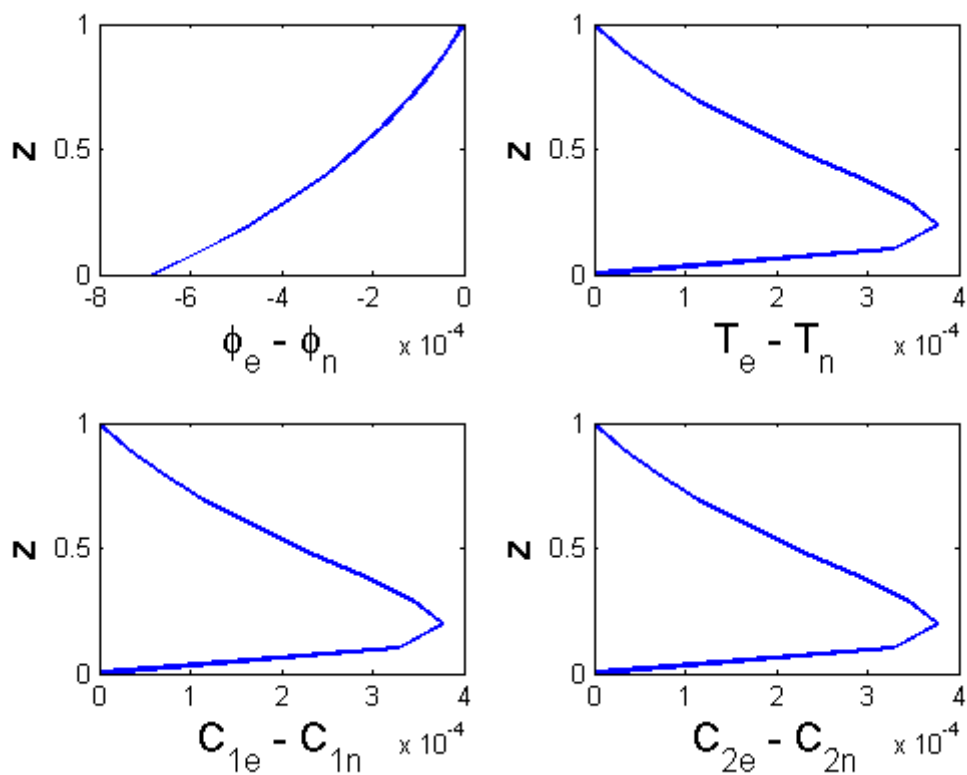
Prvá limita sa redukuje na riešenie prípadu 2.2, avšak druhá limita vedie k odlišnému priebehu základného stavu ako v prípade 2.1, kde $V = 0$. Na obrázku 6 sa nachádza priebeh pre hodnoty $V = 0.1$, $Le_1 = Le_2 = 10$, $k_1 = k_2 = 1$, $S = 10$, $k_s/k_l = c_s/c_l = 0$ a okrajové podmienky $C_{1bot} = -1$, $C_{2bot} = -3$ a $\phi = 0.1$. Numerické riešenie bolo získané pomocou metódy `ode23s`, s toleranciou 10^{-3} . Metóda `ode23s` je založená na tzv. modifikovanej Rosenbrockovej formule druhého rádu. Táto metóda je vhodná pre tzv. 'stiff' problémy s formovaním hraničných vrstiev, i tak nám metóda umožňuje získať numericky stabilné riešenia len pre pomerne nízke hodnoty parametra Le .

Obr. 6: Prípad s uvoľňovaním latentného tepla



Funkcia ϕ ostáva konvexná nezávisle v celom tomto parametrickom režime a so vzrastajúcim S konverguje k limitnému prípadu t.j. ku $\phi = \phi_0$.

Obr. 7: Rozloženie chyby numerického riešenia



2.6 Prípád s úplným uvoľňovaním prímiesí a s nulovou relatívnou vodivosťou

Tento prípad predstavuje riešenie základného stavu pri $V \neq 0$ a väzbe $Le_1 = Le_2 = Le$. Ostatné parametre sú fixované na hodnotách: $k_s/k_l = c_s/c_l = 0$, $k_1 = k_2 = 0$, a $S = 0$.

Redukovaný systém rovníc má tvar:

$$\frac{d\phi}{dz} = \frac{Le - 1}{Le} \frac{m_1 Q_1 + m_2 Q_2}{m_1 C_1 + m_2 C_2}, \quad (38a)$$

$$\frac{dQ_j}{dz} = -VLeQ_j + VLeC_j \frac{d\phi}{dz}, \quad j = 1, 2 \quad (38b)$$

$$\frac{dC_j}{dz} = \frac{Q_j}{1 - \phi}, \quad j = 1, 2, \quad (38c)$$

s okrajovými podmienkami $C_1(0) = C_{1bot}$, $C_2(0) = C_{2bot}$, $C_1(1) = C_{1bot} + 1$, $C_2(1) = C_{2bot} + 1$ a $\phi(1) = \phi_0$. Riešenie možno získať podobným postupom ako pre prípad 2.4, pomocou prepisu na agregovaný tvar rovníc:

$$\frac{d\phi}{dz} = \frac{Le - 1}{Le} \frac{Q}{C}, \quad (39a)$$

$$\frac{dQ}{dz} = -VLeQ + VLeC \frac{d\phi}{dz}, \quad (39b)$$

$$\frac{dC}{dz} = \frac{Q}{1 - \phi}. \quad (39c)$$

Elimináciou $\frac{d\phi}{dz}$ z (39b) pomocou (39a) máme:

$$\frac{dQ}{dz} = -VQ \quad (40)$$

a teda

$$Q(z) = c_1 e^{-Vz}. \quad (41)$$

Vzťah medzi ϕ a C získame použitím (39a,c):

$$\frac{1}{1 - \phi} \frac{d\phi}{dz} = \frac{Le - 1}{LeC} \frac{dC}{dz} \quad (42)$$

Integrovaním a následnými úpravami dostaneme:

$$\phi = 1 - (1 - \phi_0) \left(\frac{C}{C_{bot} + 2} \right)^{-\frac{Le-1}{Le}}. \quad (43)$$

Teraz možno dosadením rovníc (41) a (43) do (39c) a následným integrovaním určiť $C(z)$ v tvare

$$\left(\frac{C}{C_{bot} + 2} \right)^{\frac{1}{Le}} = \frac{-c_1 e^{-Vz}}{LeV(1 - \phi_0)(C_{bot} + 2)} + c_3. \quad (44)$$

S využitím okrajových podmienok a vzťahu (42) možno získať predpis pre ϕ :

$$\phi(z) = 1 + (\phi_0 - 1) \left(\frac{e^{-Vz} - e^{-V}}{1 - e^{-V}} \left[\left(\frac{C_{bot}}{C_{bot} + 2} \right)^{\frac{1}{Le}} - 1 \right] + 1 \right)^{1-Le}. \quad (45)$$

So známou funkciou $\phi(z)$ možno opustiť agregované rovnice a vrátiť sa k pôvodnému redukovanému systému. Budeme pracovať len s rovnicami (38b, d); pre druhé dve je postup analogický (symetria).

Z rovnice (38c) vyjadríme Q_1 a dosadíme do rovnice (38b), čím získame vzťah:

$$\frac{dQ_1}{dz} = -VLe \frac{dC_1}{dz} (1 - \phi) + VLeC_1 \frac{d\phi}{dz}. \quad (46)$$

Po integrácii:

$$Q_1 = -VLe(1 - \phi)C_1 + c_1, \quad (47)$$

kde c_1 je integračná konštanta. Použitím (47) a (45) v (38c) získame :

$$\frac{dC_1}{dz} = -VLeC_1 + \frac{c_1}{1 - \phi_0} \left(\frac{e^{-Vz} - e^{-V}}{1 - e^{-V}} \left[\left(\frac{C_{bot}}{C_{bot} + 2} \right)^{\frac{1}{Le}} - 1 \right] + 1 \right)^{-(Le-1)}, \quad (48)$$

čo je lineárna diferenciálna rovnica s nekonštantnou nehomogenitou. Metódou variácie konštánt a aplikáciou hraničných podmienok možno získať riešenie v tvare:

$$\begin{aligned} \phi(z) &= 1 + (\phi_0 - 1) \delta(z)^{-(Le-1)}, \\ C_1(z) &= \frac{(2C_{1bot} - C_{bot}) e^{-LeVz} + (C_{bot} + 2) [C_{1bot} (1 - e^{-LeV}) + 1]}{C_{bot} (1 - e^{-LeV}) + 2} \delta(z)^{Le}, \\ C_2(z) &= \frac{(2C_{2bot} - C_{bot}) e^{-LeVz} + (C_{bot} + 2) [C_{2bot} (1 - e^{-LeV}) + 1]}{C_{bot} (1 - e^{-LeV}) + 2} \delta(z)^{Le}, \end{aligned} \quad (49)$$

kde

$$\delta(z) \equiv \frac{e^{-Vz} - e^{-V}}{1 - e^{-V}} \left[\left(\frac{C_{bot}}{C_{bot} + 2} \right)^{\frac{1}{Le}} - 1 \right] + 1,$$

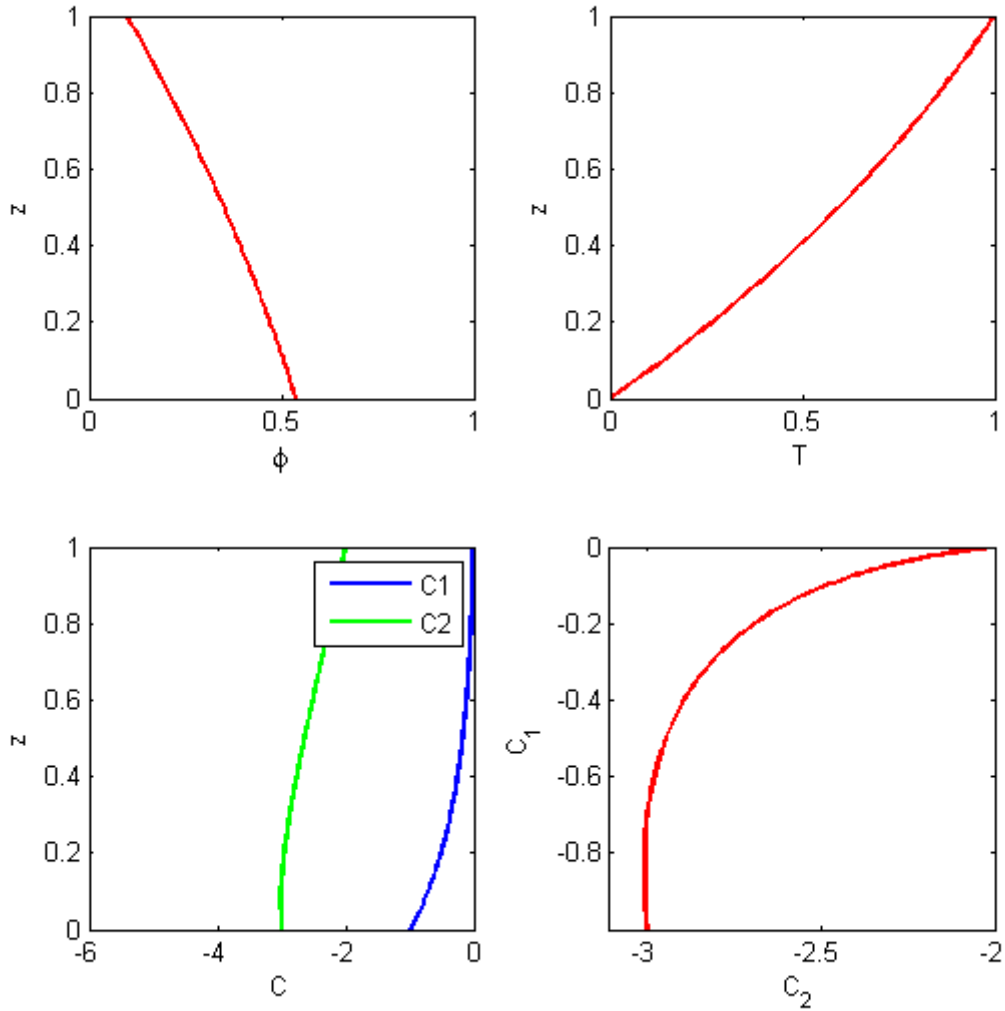
a

$$C_{bot} = 2(m_1 C_{1bot} + m_2 C_{2bot}).$$

Tieto vzťahy platia pre všetky hraničné koncentrácie C_{bot} okrem intervalu $[-2; 0]$, pre ktorý neexistuje riešenie.

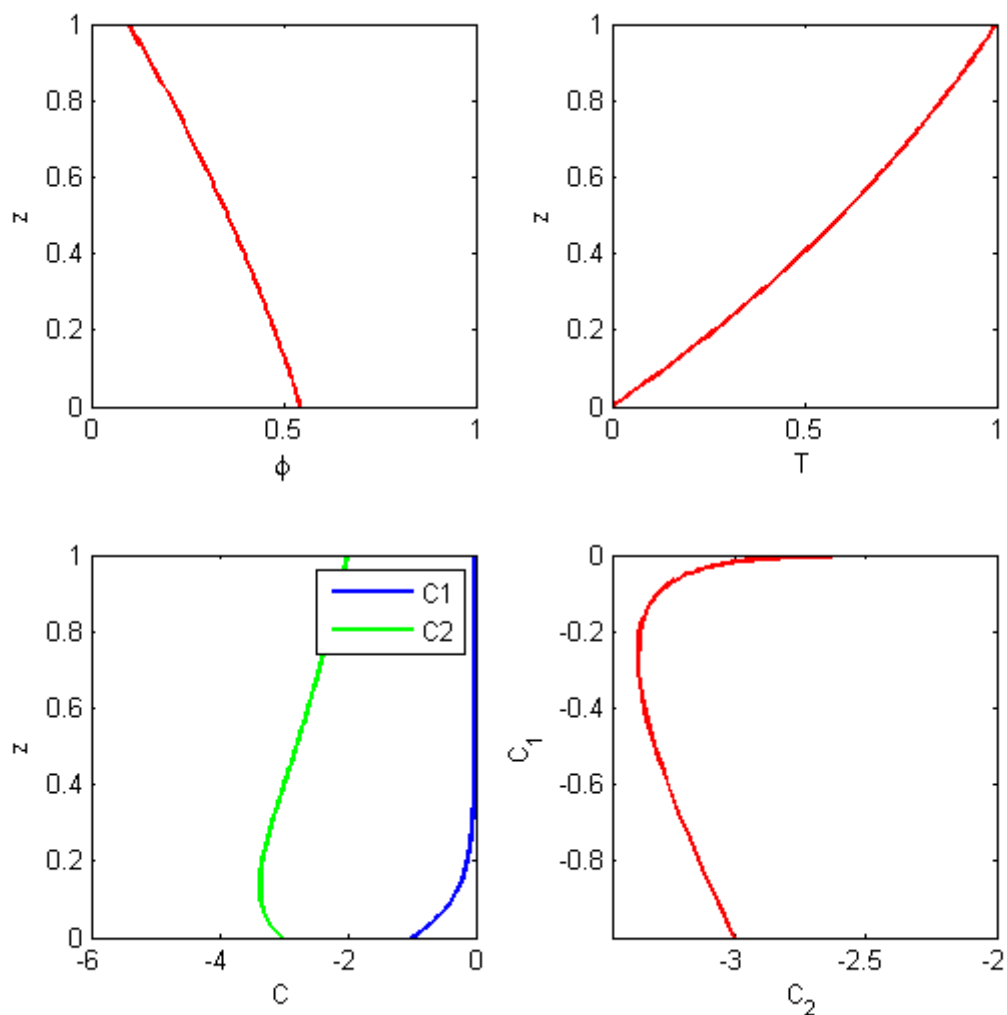
Na obrázkoch 8 a 9 sa nachádza typický priebeh základného stavu. Hodnoty parametrov sú $V = 0.1$, $Le_1 = Le_2 = 30$ a 100 , $k_1 = k_2 = 0$, $S = 0$, $k_s/k_l = c_s/c_l = 0$ a okrajové podmienky $C_{1bot} = -1$, $C_{2bot} = -3$ a $\phi_0 = 0.1$.

Obr. 8: Prípád s úplným uvoľňovaním prímiesí a s nulovou relatívnou vodivosťou $Le = 30$



Na obrázkoch 8 a 9 si možno všimnúť, že so zmenou Le sa mení monotónnosť a C_2 . Podobne ako v prípade 2.4 vznikajú koncentračné hraničné vrstvy pri spodnom okraji zóny. Nemonotónnosť koncentračného poľa opäť staticky destabilizuje základný stav. Pre tento prípad možno získať pomerne jednoduchý implicitný predpis pre hraničné hodnoty C_{1bot} a C_{2bot} , pre ktoré je priebeh C_1 resp. C_2 nemonotónny.

Obr. 9: Prípád s úplným uvoľňovaním prímiesí a s nulovou relatívnou vodivosťou $Le = 100$



2.7 Prípád rovnakej rýchlosti uvoľňovania prímiesí

Tento prípad predstavuje riešenie základného stavu pri $V \neq 0$ a väzbách $Le_1 = Le_2 \equiv Le$, $k_1 = k_2 \equiv k$. Taktiež je nutná podmienka $1 \neq Le(1 - k)$. Tento prípad je rozšírením prípadu 2.4, keďže sme odstránili väzbu $k_1 = k_2 = 0$. Podmienky : $k_s/k_l = c_s/c_l = 1$, $k_1 = k_2 = k$, a $S = 0$. Voľné parametre sú V , Le , k , m_1 a okrajové podmienky.

Redukovaný systém rovníc pre tento prípad má tvar:

$$\frac{d\phi}{dz} = \frac{V(Le-1)(1-\phi)(m_1Q_1 + m_2Q_2)}{m_1Q_1 + m_2Q_2 + VLe(1-k)(1-\phi)(m_1C_1 + m_2C_2)}, \quad (50a)$$

$$\frac{dQ_j}{dz} = -VLeQ_j + VLe(1-k)C_j \frac{d\phi}{dz}, \quad j = 1, 2 \quad (50b)$$

$$\frac{dC_j}{dz} = \frac{Q_j}{1-\phi}, \quad j = 1, 2 \quad (50c)$$

s okrajovými podmienkami $C_1(0) = C_{1bot}$, $C_2(0) = C_{2bot}$, $C_1(1) = C_{1bot} + 1$, $C_2(1) = C_{2bot} + 1$ a $\phi(1) = \phi_0$.

Agregovaný systém rovníc vznikne zavedením $C := 2(m_1C_1 + m_2C_2)$ a $Q := 2(m_1Q_1 + m_2Q_2)$ a má tvar:

$$\frac{d\phi}{dz} = \frac{V(Le-1)(1-\phi)Q}{Q + VLe(1-k)(1-\phi)C}, \quad (51a)$$

$$\frac{dQ}{dz} = -VLeQ + VLe(1-k)C \frac{d\phi}{dz}, \quad (51b)$$

$$\frac{dC}{dz} = \frac{Q}{1-\phi}, \quad (51c)$$

s okrajovými podmienkami $C(0) = 2(m_1C_{1bot} + m_2C_{2bot}) = C_{bot}$, $C(1) = C_{bot} + 2$ a $\phi(1) = \phi_0$.

Úpravami (51a) a (51b) možno získať rovnicu pre Q a ϕ :

$$\frac{1}{Q} \frac{dQ}{dz} = -V - \frac{1}{1-\phi} \frac{d\phi}{dz}. \quad (52)$$

Integrovaním a dosadením do (51c) máme riešenie pre C v tvare:

$$C(z) = 2 \frac{e^{-Vz} - 1}{e^{-V} - 1} + C_{bot}. \quad (53)$$

Použitím (51a) a integrovaním získame riešenie pre ϕ :

$$\phi(z) = 1 - (1 - \phi_0) \left[\frac{e^{-V}(Le(1-k) - 1) + \eta(1-k)Le}{e^{-Vz}(Le(1-k) - 1) + \eta(1-k)Le} \right]^\gamma, \quad (54)$$

kde $\gamma = \frac{Le-1}{1-Le(1-k)}$ a $\eta = (e^{-V} - 1)C_{bot}/2 - 1$.

Pre určenie C_1 a C_2 použijeme rovnicu (60) uvádzanú nižšie. Tvar tejto rovnice je rovnaký ako v kapitole 2.8, s modifikovaným koeficientom $-\frac{1}{1-\phi} \frac{d\phi}{dz}$ v tvare:

$$-\frac{1}{1-\phi} \frac{d\phi}{dz} = \gamma \frac{-V\omega e^{-Vz}}{1 + \omega e^{-Vz}}, \quad (55)$$

kde $\omega = \frac{Le(1-k)-1}{\eta Le(1-k)}$.

Pomocou substitúcie $C_1(z) = C_1(\xi)$, kde $\xi = 1 + \omega e^{-Vz}$ môžeme rovnicu (60) transformovať na nasledovný tvar:

$$\frac{d^2 C_1}{d\xi^2} \xi(1-\xi) + \frac{dC_1}{d\xi} [\gamma - \xi(1 - Le + \gamma)] - C_1 [-(1-k)Le\gamma] = 0. \quad (56)$$

Zisťujeme, že $C_1(\xi)$ je riešením hypergeometrickej diferenciálnej rovnice s parametrami $a = -1$, $b = Le(1-k)\gamma$ a $c = \gamma$. Riešenie má tvar:

$$\phi(z) = 1 - (1 - \phi_0) \left[\frac{e^{-V}(Le(1-k)-1) + \eta(1-k)Le}{e^{-Vz}(Le(1-k)-1) + \eta(1-k)Le} \right]^\gamma,$$

$$C_1(\xi) = \alpha_1 {}_2F_1(-1, Le(1-k)\gamma, \gamma, \xi) + \beta_1(\xi)^{1-\gamma} {}_2F_1(-\gamma, 2 - Le, 2 - \gamma, \xi),$$

$$C_2(\xi) = \alpha_2 {}_2F_1(-1, Le(1-k)\gamma, \gamma, \xi) + \beta_2(\xi)^{Le} {}_2F_1(-\gamma, 2 - Le, 2 - \gamma, \xi),$$

kde

$$\xi = 1 + \omega e^{-Vz}, \quad \omega = \frac{Le(1-k)-1}{\eta Le(1-k)}, \quad \eta = (e^{-V} - 1) C_{bot}/2 - 1,$$

$$C_{bot} = 2(m_1 C_{1bot} + m_2 C_{2bot}).$$

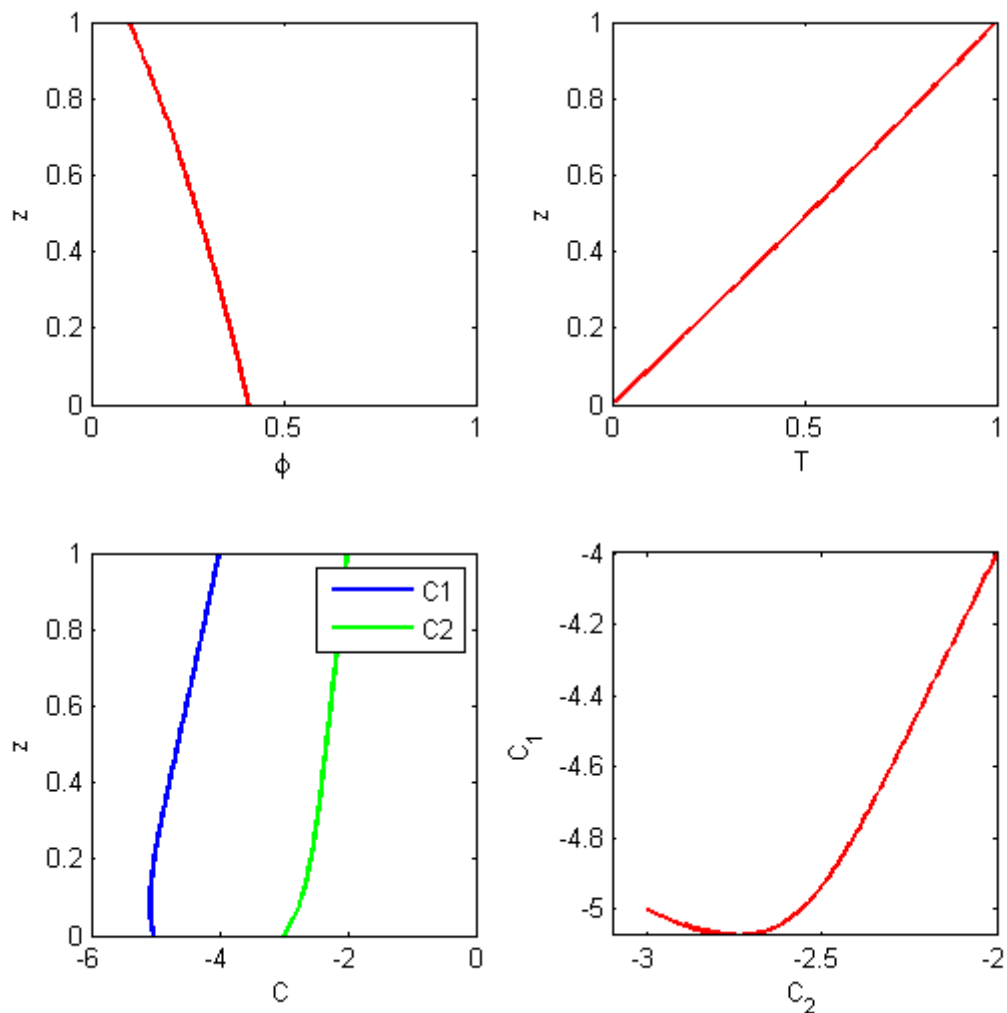
Konštanty α_1 , α_2 , β_1 a β_2 sú riešeniami 4 lineárnych rovníc, ktoré plynú z okrajových podmienok pre C_1 a C_2 . Horeuvedené vzťahy reprezentujú fyzikálne riešenie okrem parametrického režimu:

$$C_{bot} \in \left[\frac{2}{e^{-V}-1} \left(1 - e^{-V} \frac{Le(1-k)-1}{Le(1-k)} \right); \frac{2}{e^{-V}-1} \left(1 - \frac{Le(1-k)-1}{Le(1-k)} \right) \right].$$

Pre $Le \gg 0$ sa tento interval redukuje na $[-2; 0]$.

Na obrázkoch 10 a 11 je zobrazený základný stav, pre hodnoty parametrov sú $V = 0.1$, $Le_1 = Le_2 = 100$, $k_1 = k_2 = 0.3$ a 1 , $S = 0$, $k_s/k_l = c_s/c_l = 1$, $m_1 = 0.5$ a okrajové podmienky $C_{1bot} = -1$, $C_{2bot} = -3$ a $\phi = 0.1$. Obrázky 12 a 13 zobrazujú priebeh základného stavu pri rôznych sklonoch plochy liquidus. Hodnoty parametrov sú $V = 0.1$, $Le_1 = Le_2 = 100$, $k_1 = k_2 = 0.3$, $S = 0$, $k_s/k_l = c_s/c_l = 1$, $m_1 = 0.1$ a 0.9 a hodnoty hraničných podmienok sú $C_{1bot} = -1$, $C_{2bot} = -3$ a $\phi = 0.1$.

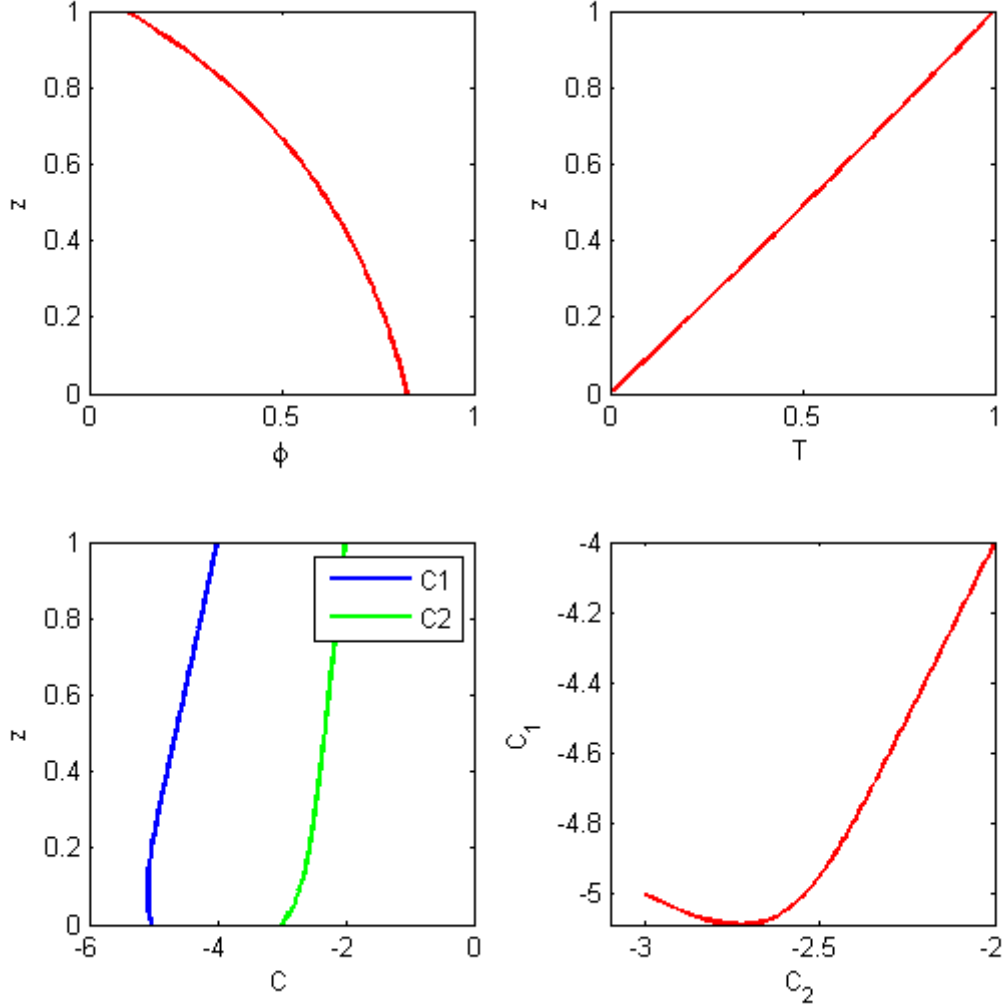
Obr. 10: Prípád rovnakej rýchlosti uvoľňovania prímiesí $k = 0.3$



2.7.1 Degenerovaný prípad

Špeciálny (degenerovaný) prípad nastáva, ak parametre Le a k spĺňajú väzbu $Le(1 - k) = 1$. Funkcie C_1 a C_2 spĺňajú tzv. rozšírenú konfluenčnú hypergeometrickú rovnicu. Riešenie možno získať podobne ako pre hlavnú vetvu pomocou agregovaných rovníc a následnou úpravou rovnice pre C_1 , ktorá je v tomto prípade zovšeobecnená degenerovaná hypergeometrická rovnica, alebo inak (Extended confluent hypergeometric equation):

Obr. 11: Prípád rovnakej rýchlosti uvoľňovania prímiesí $k = 0.8$



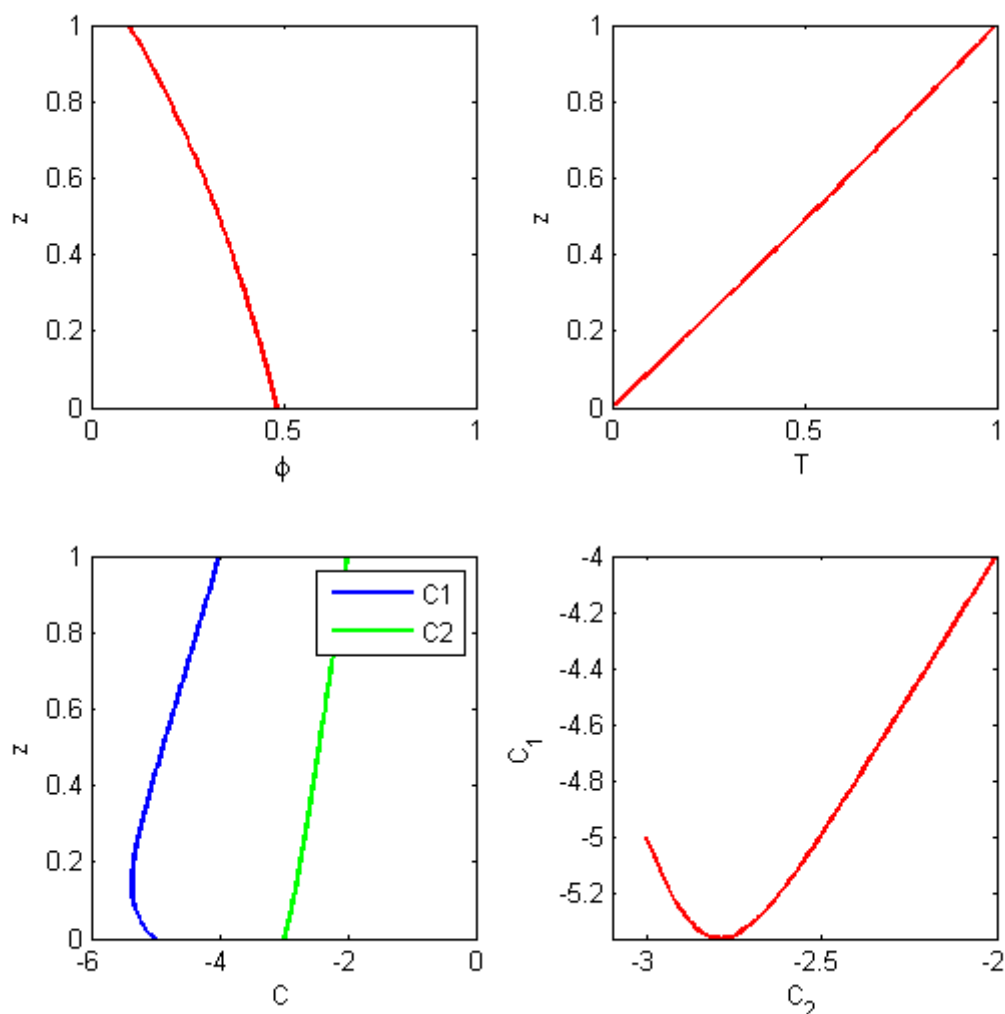
$$\begin{aligned}\phi(z) &= 1 - (1 - \phi_0) e^{\gamma e^{-Vz}}, \\ C_1(z) &= e^{\gamma e^{-Vz}} [\alpha_1 M(2 - Le, 1 - Le, \gamma e^{-Vz}) + \beta_1 U(2 - Le, 1 - Le, \gamma e^{-Vz})], \\ C_2(z) &= e^{\gamma e^{-Vz}} [\alpha_2 M(2 - Le, 1 - Le, \gamma e^{-Vz}) + \beta_2 U(2 - Le, 1 - Le, \gamma e^{-Vz})],\end{aligned}$$

kde konštanty

$$\begin{aligned}\gamma &= \frac{Le - 1}{(e^{-V} - 1) C_{bot}/2 - 1}, \\ C_{bot} &= 2(m_1 C_{1bot} + m_2 C_{2bot}).\end{aligned}$$

Konštanty α_1 , α_2 , β_1 a β_2 sú riešeniami 4 lineárnych rovníc, ktoré pramenia z okrajových podmienok pre C_1 a C_2 v bodoch 0 a 1. $M(a, b, z)$ predstavuje Kummerovu funkciu

Obr. 12: Prípád rovnakej rýchlosti uvoľňovania prímiesí pri rôznych sklonoch liquidusu $m_1 = 0.1$

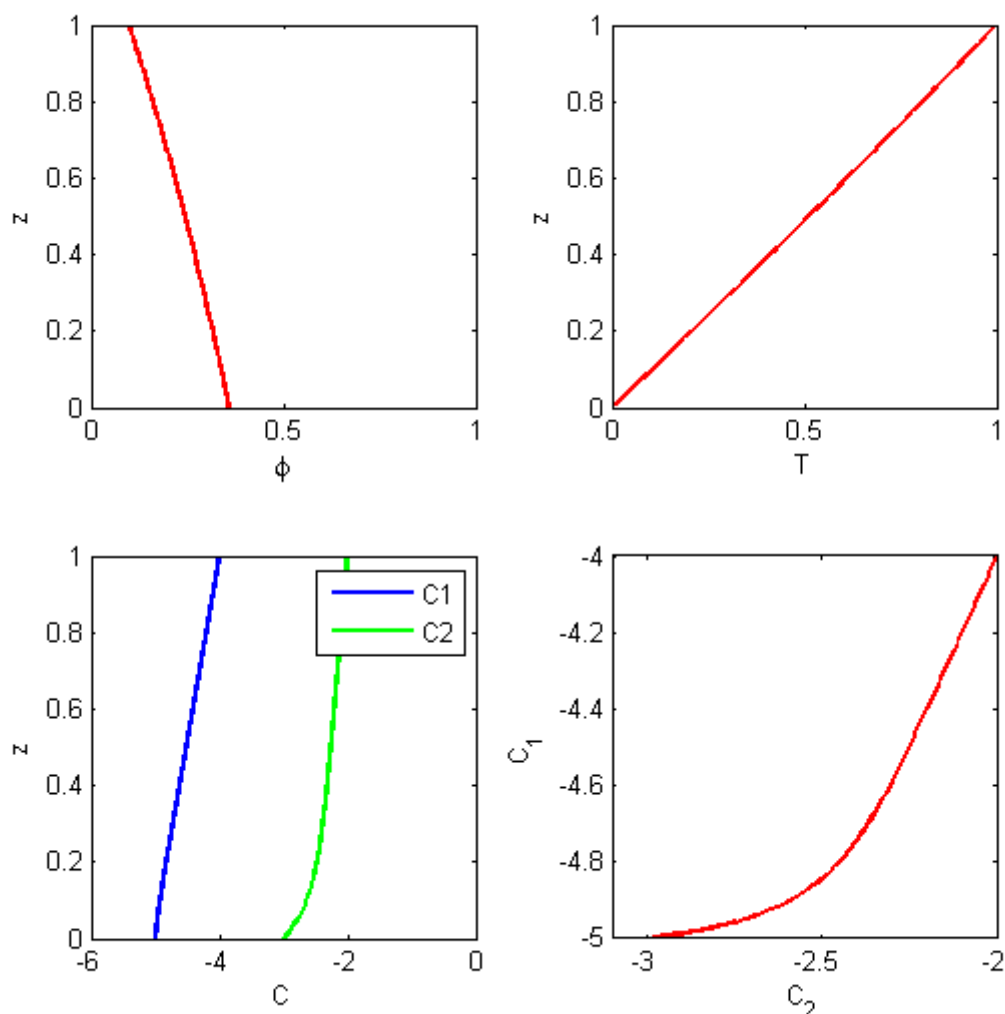


1.rádu definovanú ako $M(a, b, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^{(n)} z^n}{b^{(n)} n!}$, kde $a^{(n)} = a(a+1)(a+2)\dots(a+n-1)$ je stúpajúci faktoriál. Táto funkcia je nie je definovaná pre $b = 0, -1, -2, \dots$, teda pre nekladné celé čísla. Keďže $b = 1 - Le$, neprípustné sú všetky celočíselné hodnoty Le . $U(a, b, z)$ predstavuje Tricomioho confluentnú hypergeometrickú funkciu definovanú prostredníctvom Kummerovej funkcie:

$$U(a, b, z) = \frac{\Gamma(1-b)}{\Gamma(a-b+1)} M(a, b, z) + \frac{\Gamma(b-1)}{\Gamma(a)} z^{1-b} M(a-b+1, 2-b, z).$$

Viac informácií o spomínaných funkciách možno nájsť [1, kapitola 13]. Pre výpočet hodnôt funkcií $M(a, b, z)$ a $U(a, b, z)$ sme použili Matlabovské funkcie `hypergeom` a

Obr. 13: Prípád rovnakej rýchlosti uvoľňovania prímiesí pri rôznych sklonoch liquidusu $m_1 = 0.9$

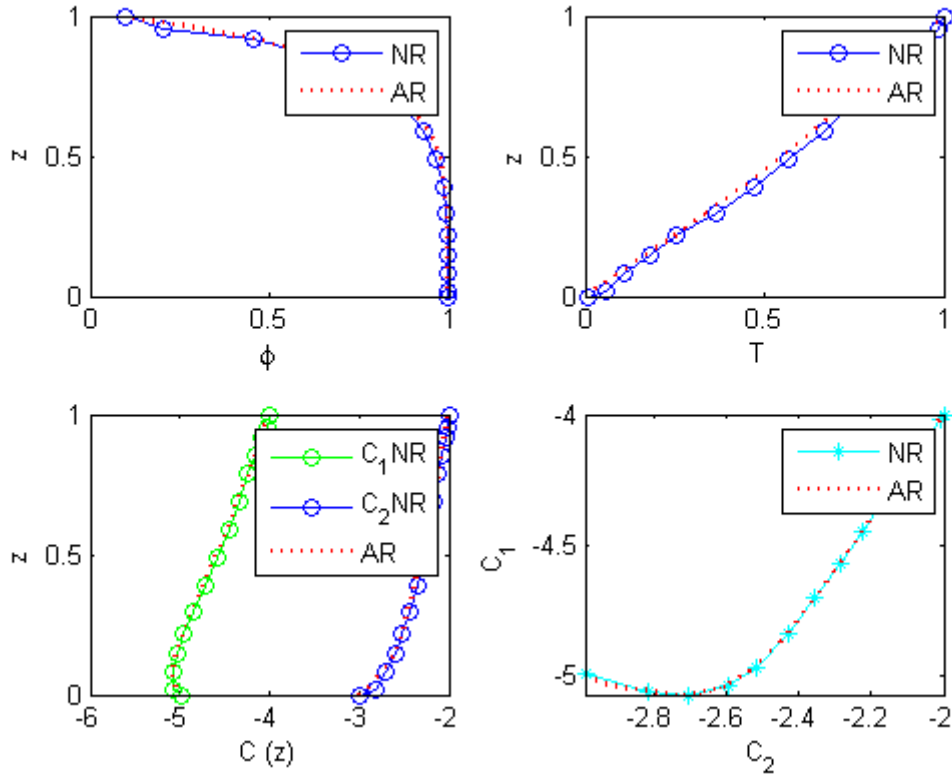


KummerU.

Riešenie pre funkciu ϕ môže byť rastúce i klesajúce, pričom fyzikálne zaujímavý prípad je ten, kde ϕ je klesajúce. Takáto situácia nastáva, keď $-C_{bot} < 2/(1 - e^{-V})$. Napríklad hodnotu $V = 0.1$ platí, že ϕ je klesajúce keď $-C_{bot} < -21$.

Na obrázku 18 sa nachádza priebeh základného stavu pre hodnoty parametrov $V = 0.4$, $Le_1 = Le_2 = 8.5$, $k_1 = k_2 = 15/17$, $S = 0$, $k_s/k_l = c_s/c_l = 1$, $m_1 = 0.5$ a okrajové podmienky $C_{1bot} = -5$, $C_{2bot} = -3$ a $\phi = 0.1$. Numerické riešenie sme získali funkciou `ode23s` v Matlabe, pri tolerancii 10^{-3} . Funkcia `ode23s` je založená na modifikovanej Rosenbrockovej formule druhého rádu.

Obr. 14: Degenerovaný prípad

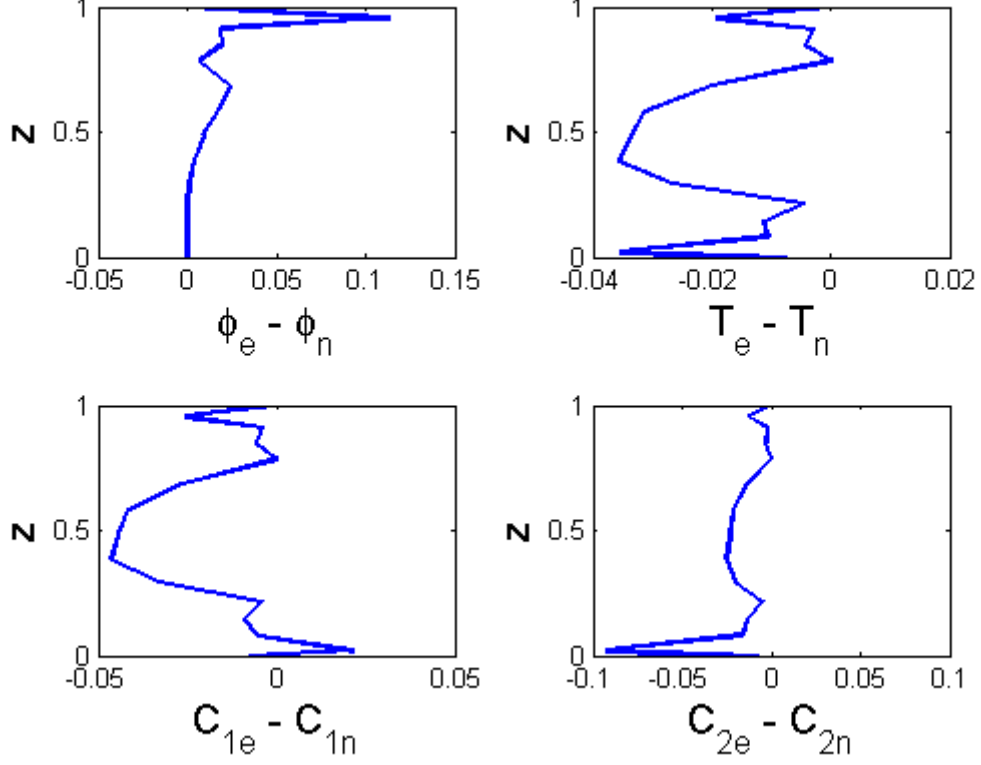


V tomto prípade je numerické riešenie zaťažné relatívne veľkou chybou v porovnaní s predchádzajúcimi prípadmi, ako vidieť na obr. 15

2.8 Prípad rovnakej rýchlosti uvoľňovania prímiesí s nulovou relatívnou vodivosťou

Tento prípad predstavuje riešenie základného stavu pri $V \neq 0$ a väzbách $Le_1 = Le_2 \equiv Le$, $k_1 = k_2 \equiv k$. Navyše je potrebné redpokladať $1 \neq Lek$. Tento prípad je rozšírením prípadu 2.6, keďže je uvoľnená podmienka $k_1 = k_2 = 0$. Ďalšie podmienky sú $k_s/k_l = c_s/c_l = 0$, $k_1 = k_2 = k$ a $S = 0$. Parametre V , Le , k , m_1 a okrajové podmienky C_{jbot} su

Obr. 15: porovnanie numerického a analytického riešenia



voľné. Systém rovníc má tvar:

$$\frac{d\phi}{dz} = \frac{Le - 1}{Le(1-k)} \frac{m_1 Q_1 + m_2 Q_2}{m_1 C_1 + m_2 C_2}, \quad (57a)$$

$$\frac{dQ_j}{dz} = -VLeQ_j + VLe(1-k)C_1 \frac{d\phi}{dz}, \quad j = 1, 2 \quad (57b)$$

$$\frac{dC_j}{dz} = \frac{Q_j}{1-\phi}, \quad j = 1, 2 \quad (57c)$$

so všeobecnými okrajovými podmienkami uvažovanými v kapitole 2.6 Postupom uvádzaným v kapitole 2.6 získame

$$\phi(z) = 1 + (\phi_0 - 1) \left(\frac{e^{-Vz} - e^{-V}}{e^{-V} - 1} \left[1 - \left(\frac{C_{bot} + 2}{C_{bot}} \right)^{\frac{Le k - 1}{Le(1-k)}} \right] + 1 \right)^{\frac{1-Le}{1-Le k}}. \quad (58)$$

Pri hľadaní riešenia pre C_1 začneme úpravou rovnice (7b), ktorá má pri našej redukcii tvar:

$$-V(1-\phi) \frac{dC_1}{dz} = \frac{1}{Le} \frac{d}{dz} \left[(1-\phi) \frac{dC_1}{dz} \right] - V(1-k) \frac{d\phi}{dz} C_1. \quad (59)$$

Túto rovnicu možno previesť na hypergeometrický tvar indentifikovať hodnoty jej parametrov. Upravíme ju do kanonického tvaru a po úpravách dostaneme:

$$\frac{d^2 C_1}{dz^2} + \frac{dC_1}{dz} \left[VLe - \frac{1}{1-\phi} \frac{d\phi}{dz} \right] + C_1 \left[-VLe(1-k) \frac{1}{1-\phi} \frac{d\phi}{dz} \right] = 0. \quad (60)$$

Výraz obsahujúci ϕ má známy tvar:

$$-\frac{1}{1-\phi} \frac{d\phi}{dz} = \frac{(1-Le)V}{1-Le k} \frac{\omega e^{-Vz}}{1-\omega e^{-Vz}}, \quad (61)$$

kde $\omega = \frac{\eta}{\eta e^{-V} + 1 - e^{-V}}$ a $\eta = 1 - \left(\frac{C_{bot} + 2}{C_{bot}} \right)^{\frac{Le k - 1}{Le(1-k)}}$. Pomocou substitúcie $C_1(z) = C_1(\xi)$, kde $\xi = \omega e^{-Vz}$, rovnicu (60) transformujeme do tvaru:

$$\frac{d^2 C_1}{d\xi^2} \xi(1-\xi) + \frac{dC_1}{d\xi} \left[1 - Le - \xi \left(1 - Le + \frac{1-Le}{1-Le k} \right) \right] - C_1 \left[\frac{Le(Le-1)(1-k)}{1-Le k} \right] = 0. \quad (62)$$

Porovnaním s hypergeometrickou rovnicou:

$$\frac{d^2 w}{du^2} u(1-u) + \frac{dw}{du} [c - u(1+a+b)] - aby = 0, \quad (63)$$

možno indentifikovať $a = c = Le - 1$ a $b = \frac{Le(1-k)}{Le k - 1}$. Spätnou substitúciou substitúciou z ξ do z dostaneme výsledné riešenie v tvare:

$$\phi(z) = 1 + (\phi_0 - 1) \left(\frac{e^{-Vz} - e^{-V}}{e^{-V} - 1} \left[1 - \left(\frac{C_{bot} + 2}{C_{bot}} \right)^{\frac{Le k - 1}{Le(1-k)}} \right] + 1 \right)^{\frac{1-Le}{1-Le k}}$$

$$C_1(\xi) = \alpha_1 {}_2F_1(a, b, a, \xi) + \beta_1 (\xi)^{Le} {}_2F_1(1, b - a + 1, 2 - a, \xi),$$

$$C_2(\xi) = \alpha_2 {}_2F_1(a, b, a, \xi) + \beta_2 (\xi)^{Le} {}_2F_1(1, b - a + 1, 2 - a, \xi).$$

Horeuvedené vzťahy platia pre prirodzené počiatkové podmienky okrem prípadu $C_{bot} \in [-2; 0]$, kde fyzikálne prípustné riešenie neexistuje.

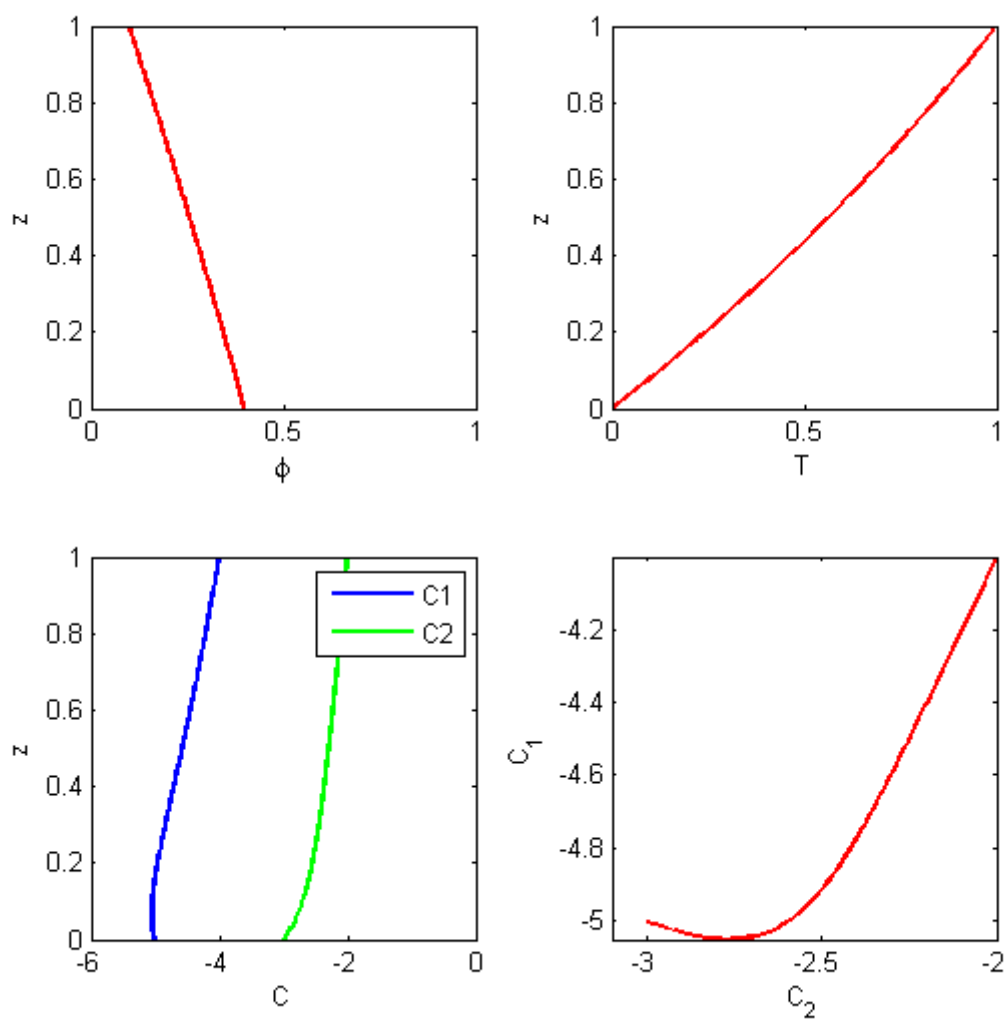
Konštanty α_1 , α_2 , β_1 a β_2 sú riešeniami 4 lineárnych rovníc, ktoré vzniknú po dosadení okrajových podmienok pre funkcie C_1 a C_2 v bodoch 0 a 1. ${}_2F_1$ predstavuje gausovu hypergeometrickú funkciu, ktorá je definovaná nasledovne: ${}_2F_1(a, b, c, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n (b)_n}{(c)_n} \frac{z^n}{n!}$, kde $(a)_n$ je stúpajúci faktoriál. Parametre, v ktorých je počítaná hypergeometrická funkcia, umožňujú ďalšie zjednodušenie, avšak nie do triedy elementárnych funkcií.

Horeuvedené vzťahy platia pre počiatkové podmienky okrem prípadu $C_{bot} \in [-2; 0]$,

kde riešenie neexistuje.

Na obrázkoch 16 a 17 je uvedený profil základného stavu pre parametre $V = 0.1$, $Le_1 = Le_2 = 100$, $k_1 = k_2 = 0.3$ a 0.8 , $S = 0$, $k_s/k_l = c_s/c_l = 0$ a $C_{1bot} = -1$, $C_{2bot} = -3$ a $\phi_0 = 0.1$.

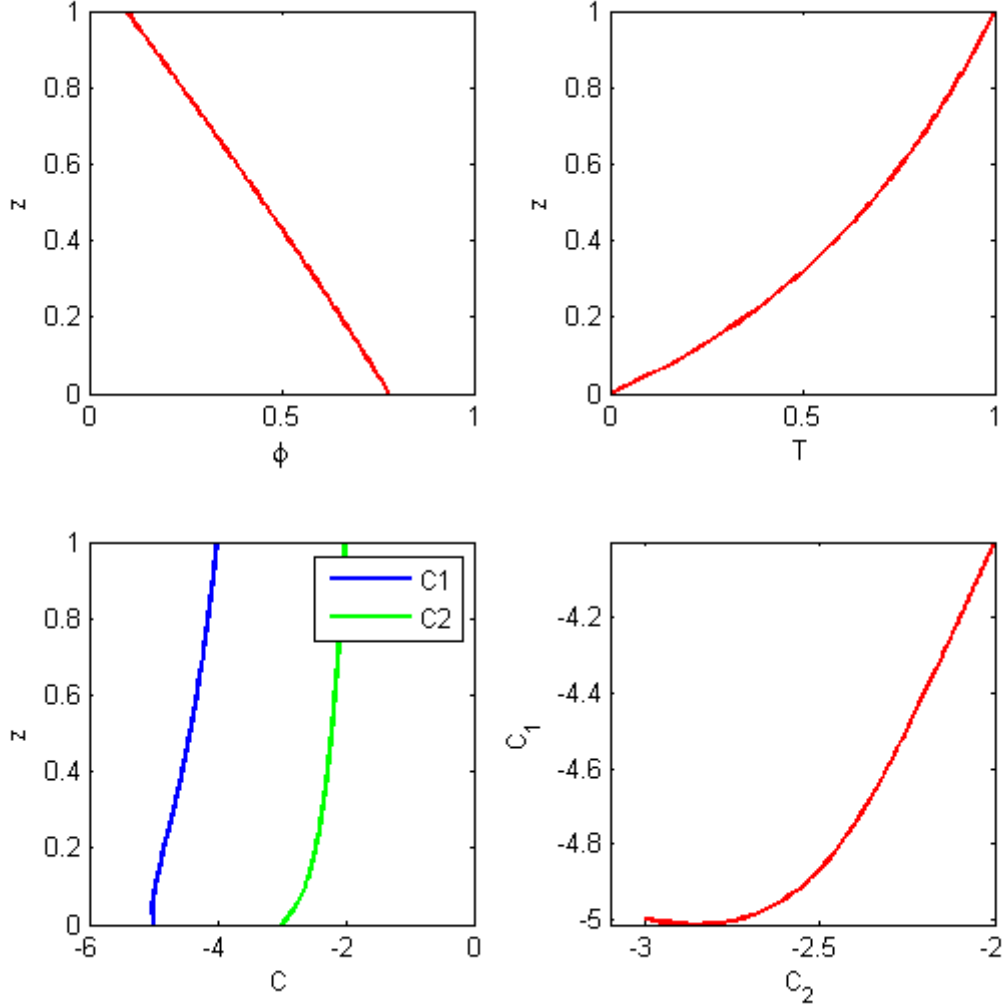
Obr. 16: Prípád rovnakej rýchlosti uvoľňovania prímiesi $k = 0.3$



2.8.1 Degenerovaný prípad

Špeciálnym prípad nastáva ak parametre Le a k spĺňajú väzbu $Lek = 1$, pričom ostatné väzby sa nezmenili.

Obr. 17: Prípád rovnakej rýchlosti uvoľňovania prímiesí $k = 0.8$



Riešenie možno získať analogickým spôsobom ako pre hlavnú vetvu zavedením agregovaných rovníc. Rovnice pre C_1 je v tomto prípade konfluentná hypergeometrická rovnica prípadne Kummerova rovnica alebo degenerovaná hypergeometrická rovnica. Pomocou vzťahov z [1, kapitola 13] možno riešenie vyjadriť v jednoduchšom tvare:

$$\phi(z) = 1 + (\phi_0 - 1) \left(\frac{C_{bot}}{C_{bot} + 2} \right)^{\frac{e^{-V} - e^{-Vz}}{1 - e^{-V}}},$$

$$C_j(z) = \left(\frac{C_{bot}}{C_{bot} + 2} \right)^{\frac{e^{-Vz}}{1 - e^{-V}}} \left[\alpha_j + \beta_j \Gamma \left(Le, \frac{e^{-Vz}}{1 - e^{-V}} \ln \left(\frac{C_{bot}}{C_{bot} + 2} \right) \right) \right], \text{ pre } j = 1, 2,$$
(64)

kde

$$C_{bot} = 2(m_1 C_{1bot} + m_2 C_{2bot}).$$

Konštanty α_1 , α_2 , β_1 a β_2 možno určiť pomocou okrajových podmienok pre C_1 a C_2 . $\Gamma(s, x)$ predstavuje neúplnú gama funkciu definovanú ako $\Gamma(s, x) = \int_x^\infty t^{s-1} e^{-t} dt$. Pre výpočet hodnôt funkcie Γ , sme použili funkciu `gammainc` implementovanú v Matlabe.

Analýzou týchto vzťahov opäť zisťujeme, že fyzikálne prípustné riešenia musia ležať mimo intervalu $C_{bot} \in [-2; 0]$.

Na obrázku 18 sa nachádza možný priebeh základného stavu, hodnoty parametrov sú $V = 0.1$, $Le_1 = Le_2 = 30$, $k_1 = k_2 = 1/30$, $S = 0$, $k_s/k_l = c_s/c_l = 0$, $m_1 = 0.5$ a hodnoty okrajových podmienok sú $C_{1bot} = -1$, $C_{2bot} = -3$ a $\phi_0 = 0.1$.

2.9 Prípád bez uvoľňovania prímiesí pri všeobecnej tepelnej vodivosti a kapacite

Uvažujeme prípad s nenulovou rýchlosťou makroskopického tuhnutia, $V \neq 0$, pri väzbách $Le_1 = Le_2 \equiv Le$, $S = 0$, $k_1 \equiv k_2 = 1$. Predpokladáme, že platí $Le k_{sl} - Le - c_{sl} + 1 \neq 0$. Poznnamenávame, že riešenie je závislé od počiatočných podmienok ϕ_0 , C_{1bot} , C_{2bot} a parametrov $k_s/k_l \equiv k_{sl}$, $c_s/c_l \equiv c_{sl}$, Le a V . Redukovaný systém rovníc má tvar:

$$\frac{d\phi}{dz} = \frac{V}{k_{sl}} (1 - \phi) [(Le k_{sl} - Le - c_{sl} + 1) \phi + Le - 1], \quad (65a)$$

$$\frac{dQ_j}{dz} = -V Le Q_j \quad j = 1, 2, \quad (65b)$$

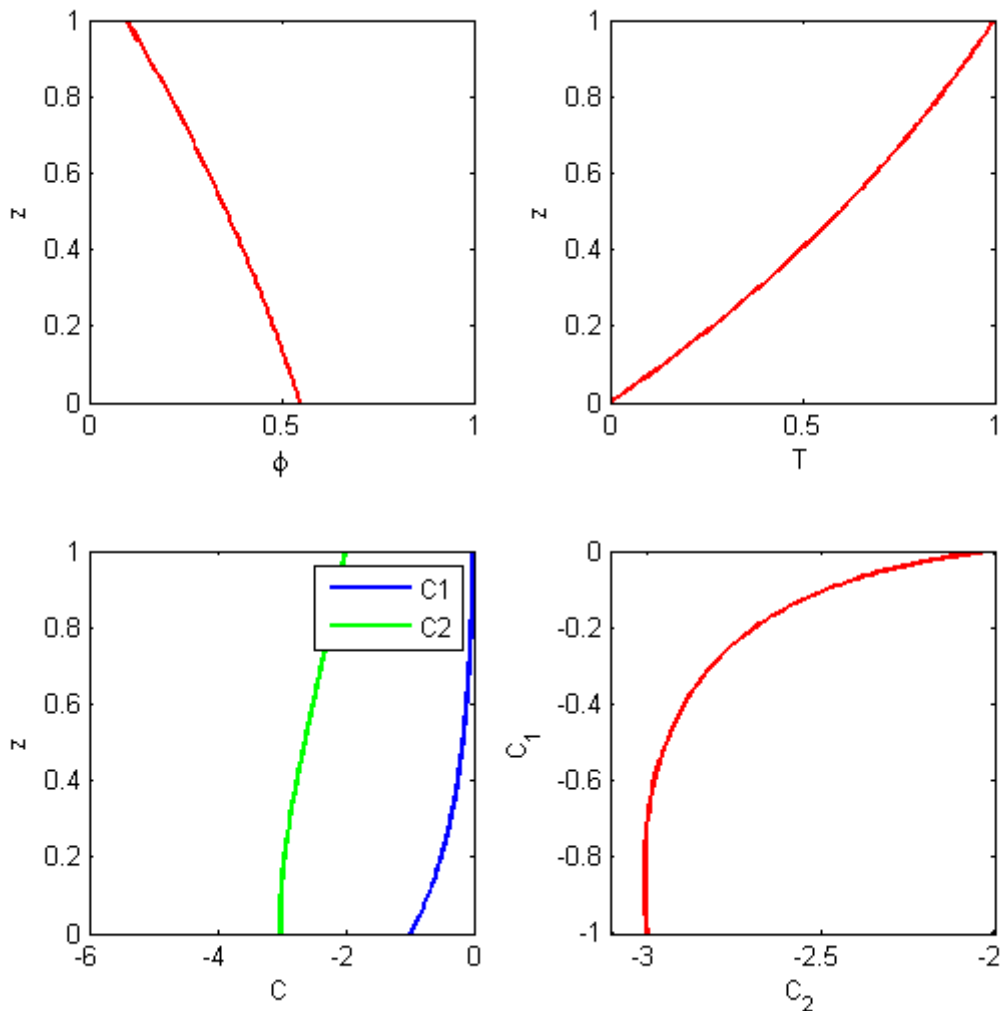
$$\frac{dC_j}{dz} = \frac{Q_j}{1 - \phi} \quad j = 1, 2, \quad (65c)$$

s okrajovými podmienkami uvedenými v napr. 2.1.

Riešenie rovnice (65a) možno získať separáciou, a následnou integráciou pri podmienke $\phi(1) = \phi_0$.

$$\phi(z) = 1 - \frac{c_{sl} - Le k_{sl}}{\frac{(Le k_{sl} - Le - c_{sl} + 1) \phi_0 + Le - 1}{(1 - \phi_0)} e^{\gamma(z-1)} + (Le k_{sl} - Le - c_{sl} + 1)}, \quad (66)$$

Obr. 18: Degenerovaný prípad



kde $\gamma \equiv \frac{(Le k_{sl} - c_{sl})V}{k_{sl}}$. Následnou integráciou rovníc (65b) a (65c) možno získať riešenia pre C_1 a C_2 .

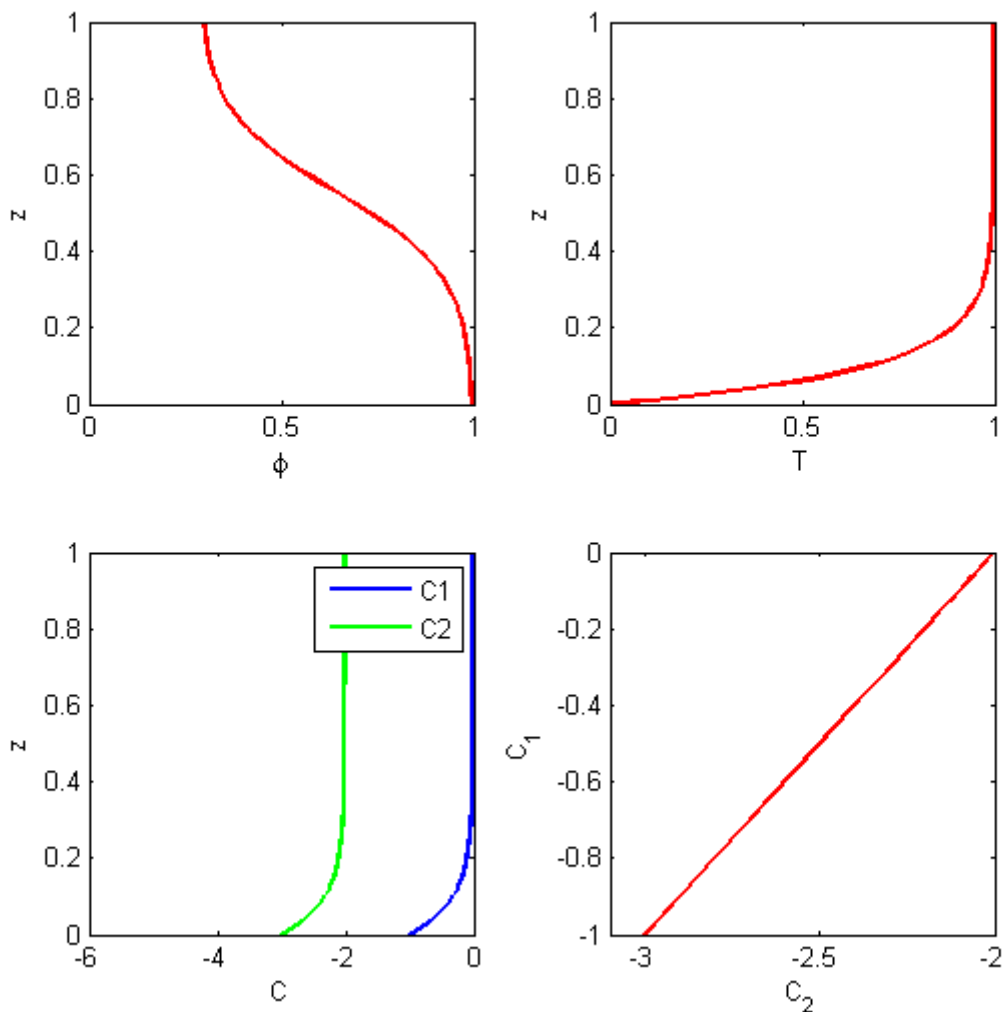
$$C_j(z) = \alpha_j \left[\frac{e^{-\gamma} (Le k_{sl} - Le - c_{sl} + 1) \phi_0 + Le - 1}{(\gamma - LeV) (\phi_0 - 1)} e^{(\gamma - LeV)z} - e^{-LeVz} \right] - \alpha_j \left[\frac{Le k_{sl} Le - c_{sl} + 1}{LeV} \right] + \beta_j, \text{ pre } j = 1, 2.$$

Konštanty α_1 , α_2 , β_1 a β_2 sú riešeniami 4 lineárnych rovníc, ktoré vzniknú uplatnením okrajových podmienok pre funkcie C_1 a C_2 v bodoch 0 a 1. Na obrázku 19 sa nachádza možný priebeh základného stavu pre hodnoty parametrov $V = 0.5$, $Le_1 = Le_2 = 4$, $k_1 = k_2 = 1$, $S = 0$, $k_s/k_l = 0.4$, $c_s/c_l = 9$ a okrajových podmienok $C_{1bot} = -1$, $C_{2bot} = -3$ a $\phi_0 = 0.3$.

Riešenie pre funkciu ϕ má fyzikálne želanú vlastnosť, klesajúcosť za predpokladu

$$(Le k_{sl} - Le - c_{sl} + 1) \phi_0 > Le - 1.$$

Obr. 19: Prípád bez uvoľňovania prímiesí pri všeobecnej tepelnej vodivosti a kapacite



2.10 Prípád väzby difúzie a začiatocnej koncentrácie zmesi

Tento prípád predstavuje explicitné riešenie jednorozmerného základného stavu pri nenulovej rýchlosti makroskopického tuhnutia, $V \neq 0$, a pri väzbách $Le_1 = Le_2 \equiv Le$, $k_1 \equiv k_2 = 0$, $c_{sl} = 1$ a najmä $e^{-VLe} = \frac{C_{bot}+2}{C_{bot}}$. Tento špeciálny prípád je významný tým,

že umožňuje kvalitatívne pochopenie vzájomnej interakcie uvoľňovania skupenského tepla S a pomeru teplotných vodivostí tuhej a kvapalnej fázy k_{sl} . Redukovaný systém rovníc bez uplatnenia väzby $e^{-VLe} = \frac{C_{bot}+2}{C_{bot}}$ má tvar:

$$\frac{d\phi}{dz} = \frac{-V [Le (k_{sl} - 1) \phi - 1] (m_1 Q_1 + m_2 Q_2)}{VS (1 - \phi) - (k_{sl} - 1) (m_1 Q_1 + m_2 Q_2)}, \quad (67a)$$

$$\frac{dQ_j}{dz} = -VLeQ_j + VLeC_j \frac{d\phi}{dz} \quad j = 1, 2, \quad (67b)$$

$$\frac{dC_j}{dz} = \frac{Q_j}{1 - \phi} \quad j = 1, 2, \quad (67c)$$

s okrajovými podmienkami $C_1(0) = C_{1bot}$, $C_2(0) = C_{2bot}$, $C_1(1) = C_{1bot} + 1$, $C_2(1) = C_{2bot} + 1$ a $\phi(1) = \phi_0$.

Agregovaním rovníc ako bolo ukázané v prípade 2.4 a použitím väzby $e^{-VLe} = \frac{C_{bot}+2}{C_{bot}}$ získame predpisy

$$Q(z) = -VLe(1 - \phi)C, \quad (68a)$$

$$C(z) = C_{bot}e^{-VLez}. \quad (68b)$$

Dosadením týchto vzťahov do [67a] získame

$$\frac{d\phi}{dz} = \frac{V}{k_{sl} - 1} \frac{[Le (k_{sl} - 1) \phi - 1] e^{-VLez}}{\gamma + e^{-VLez}}, \quad (69)$$

čo je separovateľná diferenciálna rovnica pre ϕ a konštanta $\gamma = \frac{2S}{(k_{sl}-1)LeC_{bot}}$. Po jej integrovaní a aplikovaní počiatočnej podmienky získavame:

$$\phi(z) = -\frac{Le - 1}{Le(k_{sl} - 1)} + \left[\phi_0 + \frac{Le - 1}{Le(k_{sl} - 1)} \right] \frac{\gamma + e^{-VLe}}{\gamma + e^{-VLez}}. \quad (70)$$

Pre vyjadrenie C_1 budeme vychádzať [7b] v tomto prípade má tvar:

$$\frac{d^2C_1}{dz^2} + \left[VLe - \frac{1}{1 - \phi} \frac{d\phi}{dz} \right] \frac{dC_1}{dz} - VLe \frac{1}{1 - \phi} \frac{d\phi}{dz} = 0. \quad (71)$$

Pretože ϕ už poznáme ide o lineárnu diferenciálnu rovnicu 2 rádu. Prvé partikulárne riešenie je $C_{1part} = e^{-VLez}$. Celkové riešenie získame pomocou Ábelovej identity. Riešenie rovnice možno bez znalosti ϕ upraviť na tvar:

$$C_1(z) = e^{-VLez} \left(\bar{\alpha}_1 + \bar{\beta}_1 \int \frac{e^{VLez}}{1 - \phi} dz \right). \quad (72)$$

Po dosadení ϕ do predošlého predpisu a integrácii získavame C_1 postup pre C_2 je analogický.

$$\phi(z) = -\frac{Le-1}{Le(k_{sl}-1)} + \left[\phi_0 + \frac{Le-1}{Le(k_{sl}-1)} \right] \frac{\gamma + e^{-VLe}}{\gamma + e^{-VLez}},$$

$$C_1(z) = \alpha_1 e^{-VLez} + \beta_1 \left\{ \frac{\theta\gamma}{\left[\phi_0 + \frac{Le-1}{(k_{sl}-1)Le} \right] (\gamma + e^{-VLe})} + e^{-VLez} \ln \left[1 + \frac{Le-1}{Le(k_{sl}-1)} - \theta e^{LeVz} \right] \right\},$$

$$C_2(z) = \alpha_2 e^{-VLez} + \beta_2 \left\{ \frac{\theta\gamma}{\left[\phi_0 + \frac{Le-1}{(k_{sl}-1)Le} \right] (\gamma + e^{-VLe})} + e^{-VLez} \ln \left[1 + \frac{Le-1}{Le(k_{sl}-1)} - \theta e^{LeVz} \right] \right\},$$

kde

$$\gamma \equiv \frac{2S}{(-1)LeC_{bot}},$$

$$\theta \equiv (\gamma + e^{-VLe}) \left[\phi_0 + \frac{Le-1}{Le(k_{sl}-1)} \right] - \left[1 - \frac{1-Le}{Le(k_{sl}-1)} \right] \gamma.$$

Konštanty α_1 , α_2 , β_1 a β_2 získame aplikáciou okrajových podmienok. Na obrázku 20 je zobrazený základný stav pri hodnotách parametrov $V = 0.05$, $Le_1 = Le_2 = 20 \ln(2)$, $k_1 = k_2 = 0$, $S = 30$, $k_s/k_l = 1.5$ a okrajových podmienok $C_{1bot} = -1$, $C_{2bot} = -3$ a $\phi_0 = 0.1$.

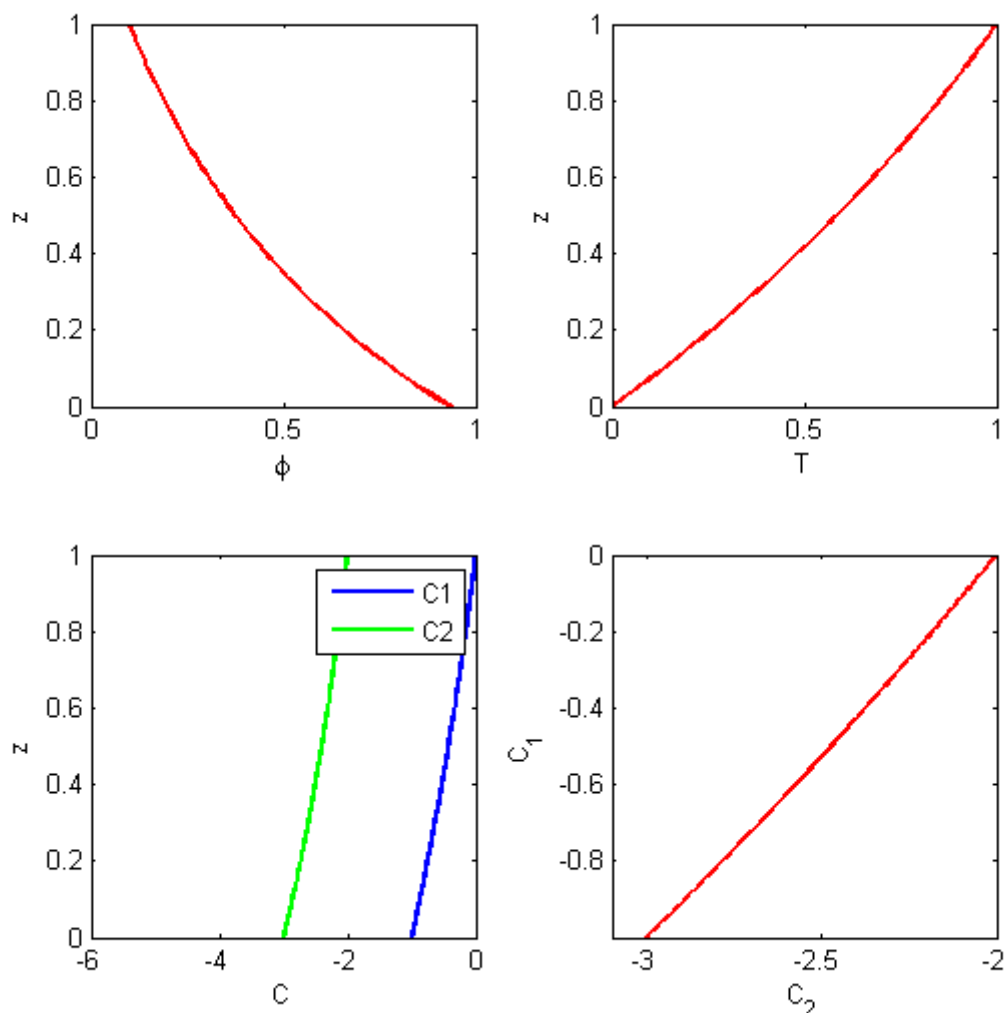
Riešenie je definované pre všetky hodnoty parametrov okrem prípadu, kedy súčasne platí

$$[k_{sl} > 1] \text{ a } \left[\frac{2S}{(k_{sl}-1)Le} \in [-(C_{bot}+2); -C_{bot}] \right].$$

Navyše ϕ je klesajúce a zároveň konvexné v dvoch rozdielnych separátnych prípadoch

- $[k_{sl} < 1]$ a $\left[Le > \frac{1}{\phi_0(k_{sl}-1)+1} \right]$
- $[k_{sl} > 1]$ a $\left[-C_{bot} < \frac{2S}{(k_{sl}-1)Le} \right]$.

Obr. 20: Prípád väzby difúzie a počiatočného zloženia zmesi



3 Statická stabilita základného stavu

Základný stav definujeme ako staticky stabilný pokiaľ, hustota kvapaliny klesá s výškou (pozri [3], [9]). V predchádzajúcej kapitole sa vyskytovali prípady, kedy bol základný stav pre všetky hodnoty hraničných podmienok C_{jbot} staticky stabilný. Existujú však hodnoty C_{jbot} , pri ktorých sa základný stav stáva staticky nestabilný. Pre niektoré prípady analyzované v kapitole 2 možno získať neutrálne stabilné krivky, ktoré oddeľujú staticky stabilnú a staticky nestabilnú oblasť. Tvar neutrálne stabilných kriviek sme určili pre prípady 2.4 a 2.6, ktoré boli analyzované v kapitole 2. Statická stabilita základného stavu je určená krivkami v parametrickom priestore (C_{1bot}, C_{2bot}) pozdĺž,

ktorých je $\frac{dC_j}{dz}|_{z=0} = 0$, pre $j = 1, 2$. Tvar týchto kriviek možno získať numericky. Pre určenie explicitných tvarov využijeme riešenie C_1 a C_2 uvádzané v predchádzajúcej kapitole.

3.1 Tvar regiónu statickej stability pre prípad 2.4

Prípustné hodnoty okrajových hodnôt C_{1bot} a C_{2bot} ležia v treťom kvadrante, s výnimkou časti, v ktorej základný stav nie je definovaný (porovnaj kap. 2.4). Horná hranica staticky stabilnej oblasti je daná výrazom: $C_{1bot} = \frac{C_{2bot}(e^{-LeV} + m_1Le(1-e^{-V}) - 1) - 1}{m_1Le(1-e^{-V})}$.

Dolná hranica je $C_{1bot} = \frac{1 + m_2Le(1-e^{-V})C_{2bot}}{e^{-LeV} + m_2Le(1-e^{-V}) - 1}$.

Na obrázku 21 sú zobrazené hranice oblasti statickej stability v parametrickom priestore C_{1bot} , C_{2bot} , pre hodnoty $Le = 100$, $V = 0.1$ a $m_1 = 0.7$. V oranžovej alebo v červenej oblasti je koncentrácia prímiesí staticky stabilne stratifikovaná, v tmavo oranžovej oblasti je C_1 nemonotónne, v žltej oblasti je C_2 nemonotónne a preto je základný stav v oboch prípadoch staticky nestabilný. Čierna oblasť je množina okrajových hodnôt (C_{1bot}, C_{2bot}) , v ktorej rovnice pre základný stav nemajú riešenie. Z explicitného vyjadrenia marginálnych hodnôt C_{jbot} možno povedať, že rast Le zväčšuje oblasť statickej nestability v priestore C_{1bot} , C_{2bot} , efekt parametra V je opačný. Pre hodnoty parametra $m_1 = 0.5$ je staticky stabilná oblasť symetrická, vo všetkých ostatných prípadoch je staticky stabilná oblasť asymetrická.

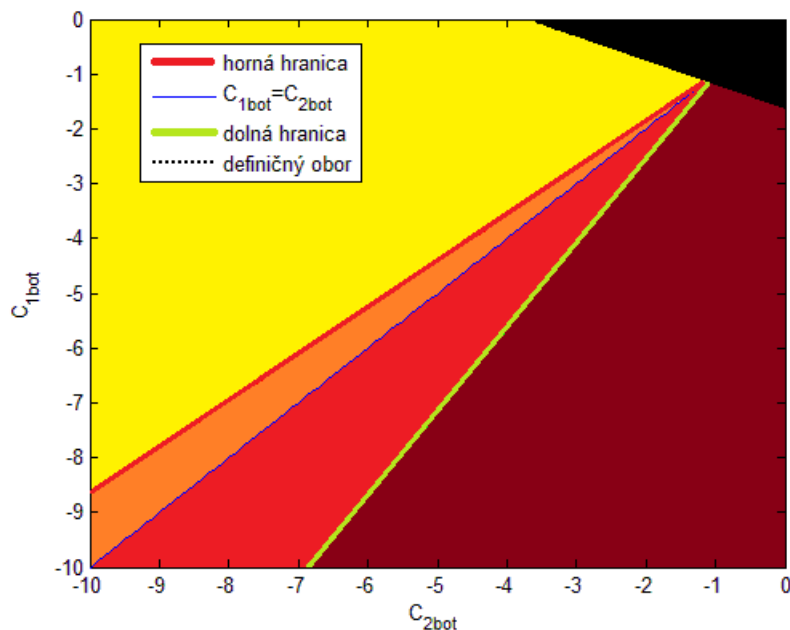
Typické hodnoty parametra Le sú dosť veľké a naopak parametra V relatívne malé. V takom prípade $V \rightarrow 0$, kde $Le = \bar{L}e/V$ a $\bar{L}e = O(1)$ nadobúdajú hranice staticky stabilnej oblasti:

$$C_{1bot} = \frac{1 + m_2\bar{L}eC_{2bot}}{e^{\bar{L}e} + m_2\bar{L}e - 1}, \quad C_{2bot} = \frac{1 + m_1\bar{L}eC_{1bot}}{e^{\bar{L}e} + m_1\bar{L}e - 1}. \quad (73)$$

3.2 Tvar regiónu statickej stability pre prípad 2.6

Predpis pre krivky zodpovedajúce hraniciam statickej stability, je v tomto prípade implicitný. Numericky možno tvar týchto kriviek získať pomocou nasledujúceho algoritmu v troch krokoch:

Obr. 21: Oblasť statickej stability pre základný stav pre prípad 2.4



1. diskretizácia C_{bot} ;
2. výpočet C_{1bot} z nižšie uvedeného vzťahu pre tvar hranice;
3. výpočet $C_{2bot} = \frac{C_{bot} - 2m_1 C_{1bot}}{2m_2}$.

Druhú krivku možno získať analogicky.

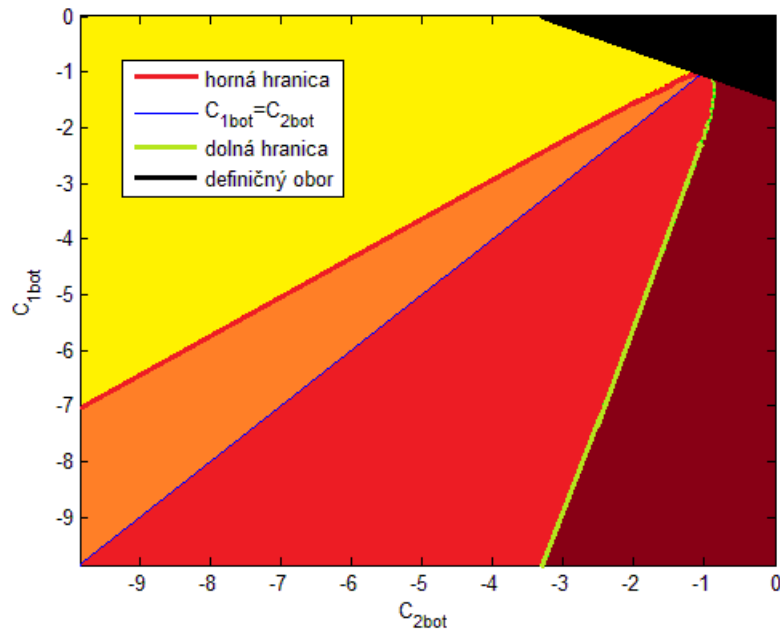
V tomto prípade hranice statickej stability v priestore C_{1bot} vs C_{2bot} sú:

$$C_{jbot} = \frac{C_{bot} \left(1 + \frac{\left(\frac{C_{bot}+2}{C_{bot}} \right)^{1/Le} - 1}{1-e^{-V}} \right)}{2 - \frac{1-e^{-LeV}}{1-e^{-V}} C_{bot} \left(\left(\frac{C_{bot}+2}{C_{bot}} \right)^{1/Le} - 1 \right)}, \text{ kde } j = 1, 2.$$

Analýzou týchto nelineárnych výrazov (v premennej Le) zisťujeme, že staticky stabilný región zaniká (redukuje sa na priamku $C_{1bot} = C_{2bot}$) v limite $Le \rightarrow \infty$. Na obrázku 22 sú zobrazené staticky neutrálne stabilné krivky v priestore počiatkových koncentrácií C_{1bot} , C_{2bot} , pre parametre: $Le = 50$, $V = 0.1$ a $m_1 = 0.7$. V oranžovej a červenej oblasti je koncentrácia prímies staticky stabilne stratifikovaná, v tmavo oranžovej oblasti je C_1 nemonotónne, v žltej oblasti je C_2 nemonotónne a preto je základný stav v oboch prípadoch staticky nestabilný. Čierna oblasť je množina zodpovedajúca

okrajovým hodnotám, v ktorej rovnice pre základný stav nemajú fyzikálne prípustné riešenie. Vďaka explicitnému vyjadreniu hraničných hodnôt možno povedať, že stúpajúce Le zväčšuje plochu staticky nestabilných regiónov v priestore C_{1bot} , C_{2bot} , opačne pôsobí V . Parameter m_1 je zodpovedný za asymetriu staticky stabilnej oblasti.

Obr. 22: Oblasť statickej stability pre základný stav z prípadu 2.6



Záver

V našej práci sme uviedli model popisujúci správanie primárnej dendritickej zóny, ktorý bol sformulovaný a ďalej skúmaný v [3] a [9]. Analyzovali sme rovnice pre jednorozmerný základný stav spomínaného modelu. Narozdiel od analytického riešenia pre špeciálny prípad v [3], kde bola rýchlosť makroskopického tuhnutia nulová, my sme sa venovali parametrickým redukciami pri nenulovej rýchlosti makroskopického tuhnutia.

V niekoľkých prípadoch sa nám podarilo získať explicitné formuly pre riešenia základného stavu. Pri tejto analýze sme odhalili zaujímavé vlastnosti poľa pevnej zložky ϕ , ktoré je klesajúce a lokalizované v intervale $[0,1]$ len za netriviálnych podmienok. Táto vlastnosť bola prítomná pri parametrických redukciami popísaných v 2.9 a 2.10.

Podarilo sa nám identifikovať oblasť hodnôt okrajových podmienok, kde riešenie pre základný stav neexistuje. Táto oblasť je zväčša situovaná v intervale $C_{bot} \in [-2,0]$. Takéto správanie základného stavu sme zistili v prípadoch 2.4, 2.6, 2.7, 2.8, a v prípade 2.10.

Pomocou explicitného riešenia získaného v prípadoch 2.5 a 2.10 sa nám podarilo zachytiť vplyv veľkého Stefanovho čísla S . Platí $\lim_{S \rightarrow \infty} \phi(z) = \phi_0$.

Určili sme niekoľko prípadov, kedy základný stav nemusí byť staticky stabilný ale vďaka nemonotónnosti jedného z koncentračných polí dochádza k vytváraniu hraničných vrstiev pri spodnom okraji dendritickej vrstvy. Tento druh správania základného stavu bol prítomný v prípadoch 2.4, 2.6, 2.7, 2.8.

V kapitole 3 sme popísali tvar staticky neutrálne stabilných kriviek pre prípady 2.4 a 2.6, tým sme klasifikovali množinu okrajových hodnôt (C_{1bot}, C_{2bot}) do niekoľkých oblastí. Taktiež sa nám podarilo identifikovať vplyv parametrov Le , V a m_1 na statickú stabilitu príslušného základného stavu.

Zistenia z našich analýz sme verifikovali pomocou strieľacej metódy. Porovnanie analytických a numerických výsledkov ukazuje, že rovnice pre základný stav sú pre mnohé parametrické režimy stiff úlohou.

Zoznam použitej literatúry

- [1] Abramowitz, M., Stegun, A. I., 1965 Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables. New York: Dover
- [2] Aitta, A., Huppert, H. E., Worster, M. G., 2001 Diffusion-controlled solidification of a ternary melt from cooled boundary. *J. Fluid Mech.* 432, 201–217.
- [3] Anderson, D. M., McFadden, G. B., Coriell, S. R., Murray B. T., 2010 Convective instabilities during the solidification of an ideal ternary alloy in a mushy layer. *J. Fluid Mech.* 647, 309–333.
- [4] Bloomfield, L. J., Huppert, H. E., 2003 Solidification and convection of ternary solution cooled from side. *J. Fluid Mech.* 489, 269–299.
- [5] Guba, P., 2001 On the finite-amplitude steady convection in rotating mushy layers. *J. Fluid Mech.* 437, 337–365.
- [6] Guba, P., Worster, M. G., 2004 Nonlinear oscillatory convection in mushy layers. In *Mechanics of 21st Century – ICTAM04 Proceedings*. Institute of Theoretical Geophysics, DAMTP, Centre for Mathematical Sciences, University of Cambridge, Wilberforce Road, Cambridge.
- [7] Guba, P., Worster, M. G., 2006 Nonlinear oscillatory convection in mushy layers. *J. Fluid Mech.* 553, 419–443.
- [8] Guba, P., Worster M. G., 2010 Interactions between steady and oscillatory convection in mushy layers. *J. Fluid Mech.* 645, 411–434.
- [9] Guba, P., Anderson, D. M., 2014 Diffusive and phase change instabilities in a ternary mushy layer. *J. Fluid Mech.* 760, 634–669.
- [10] Ruddick, B., Gargett, A. E., 2003. Oceanic double-diffusion: introduction. *Progr. Oceanogr.* 56 (3-4), 381–393.,

- [11] Schneider, M. C., Beckermann, C., 1995 Formation of macrosegregation by multicomponent thermosolutal convection during the solidification of steel, *Metall. Mat. Trans. A26*, 2373–2388,
- [12] Schneider, M. C., Gu, J. P., Beckermann, C., Boettinger, W. J. Katner, U. R. 1997 Modeling of micro- an mackrosegregation and freckle formation in single-crystal nickel-base superalloy directional solidification, *Metall. Mat. Trans. A28*, 1517–1531,
- [13] Worster, M. G., 1992 Instabilities of liquid and mushy regions during solidification of alloys, *J. Fluid Mech.* 237, 649–669.
- [14] Worster, M. G., 1992 The dynamics of mushy layers, *Interactive Dynamics of Convection and Solidification* pp.113–138, Kluwer.
- [15] Worster, M. G., 1997 Convection in mushy layers, *J. Fluid Mech.* 29, 91–122.
- [16] Worster, M. G., 2000 Solidification of fluids, *Perspectives in Fluid Dynamics*, pp.393–446, Cambridge University Press.

Prehľad zobrazených riešení základných stavov

Prehľad zobrazených priebehov základného stavu, hodnoty parametrov ktoré neovplyvňujú priebeh základného stavu zobrazeného na obrázku sú označené Na

Obr. č.	m_1	V	Le_1	Le_2	k_1	k_2	S	$\frac{c_s}{c_l}$	$\frac{k_s}{k_l}$	ϕ_0	C_{1bot}	C_{2bot}
1	Na	0	Na	Na	Na	Na	Na	Na	Na	0.1	-1	-3
2	Na	0.2	5	5	Na	Na	Na	6	0	0.4	-1	-3
3	Na	0.1	5	5	1	1	0	1	1	0.4	-1	-3
4	0.5	0.1	100	100	0	0	0	1	1	0.1	-1	-3
6	Na	0.1	10	10	1	1	10	0	0	0.1	-1	-3
8	0.5	0.1	30	30	0	0	0	0	0	0.1	-1	-3
9	0.5	0.1	100	100	0	0	0	0	0	0.1	-1	-3
10	0.5	0.1	100	100	0.3	0.3	0	1	1	0.1	-5	-3
11	0.5	0.1	100	100	0.8	0.8	0	1	1	0.1	-5	-3
12	0.1	0.1	100	100	0.3	0.3	0	1	1	0.1	-5	-3
13	0.9	0.1	100	100	0.3	0.3	0	1	1	0.1	-5	-3
14	0.5	0.4	8.5	8.5	$\frac{15}{17}$	$\frac{15}{17}$	0	1	1	0.1	-5	-3
16	0.5	0.1	100	100	0.3	0.3	0	0	0	0.1	-5	-3
17	0.5	0.1	100	100	0.8	0.8	0	0	0	0.1	-5	-3
18	0.5	0.1	30	30	$\frac{1}{30}$	$\frac{1}{30}$	0	0	0	0.1	-1	-3
19	Na	0.5	4	4	1	1	0	0.4	9	0.3	-1	-3
20	0.5	$\frac{1}{20}$	$20 \ln 2$	$20 \ln 2$	0	0	30	1	1.5	0.1	-1	-3