UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY



STEFANOVA ÚLOHA S KINETICKÝM PODCHLADENÍM

DIPLOMOVÁ PRÁCA

Bc. Miroslava VIDOVÁ

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

STEFANOVA ÚLOHA S KINETICKÝM PODCHLADENÍM

DIPLOMOVÁ PRÁCA

Ekonomicko-finančná matematika a modelovanie
1114 Aplikovaná matematika
Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Mgr. Juraj Kyselica, PhD.

Bc. Miroslava VIDOVÁ





Univerzita Komenského v Bratislave Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

ZADANIE ZÁVEREČNEJ PRÁCE

Meno a priezvisko študenta: Študijný program:		Bc. Miroslava Vidová		
		ekonomicko-finančná matematika a modelovanie		
<u> </u>		(Jednoodborové štúdium, magisterský II. st., denná forma)		
Študijný odbo	or:	aplikovaná matematika		
Typ záverečno	ej práce:	diplomová slovenský		
Jazyk závereč	énej práce:			
Sekundárny jazyk:		anglický		
Názov:	Stefanova úlol Stefan problem	a s kinetickým podchladením. with kinetic undercooling		
Ciel':	Cieľom práce rozhrania v p riešenia budú	om práce bude numerická simulácia vývoja teploty a polohy fázového rania v podchladenom tuhnúcom jednozložkovom systéme. Numerické nia budú porovnané s aproximatívnymi analytickými riešeniami.		
Vedúci: Katedra: Vedúci katedı	Mgr. Jur FMFI.K y: prof. RN	j Kyselica, PhD. MŠ - Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky Dr. Daniel Ševčovič, CSc.		
Dátum zadan	ia: 26.01.20	.7		
Dátum schvál	enia: 27.01.20	7 prof. RNDr. Daniel Ševčovič, CSc. garant študijného programu		

študent

vedúci práce

Poďakovanie Ďakujem môjmu vedúcemu diplomovej práce, Mgr. Jurajovi Kyselicovi, PhD., za jeho trpezlivosť, ochotu a snahu zodpovedať všetky moje otázky. Ďakujem mu za čas, ktorý mi venoval, a tiež za všetky rady, pripomienky a nápady, ktoré mi pri písaní práce pomáhali.

Abstrakt v štátnom jazyku

VIDOVÁ, Miroslava: Stefanova úloha s kinetickým podchladením [Diplomová práca], Univerzita Komenského v Bratislave, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky; školiteľ: Mgr. Juraj Kyselica, PhD., Bratislava, 2018, 52 s.

V práci sa zaoberáme matematickým modelom tuhnutia podchladenej jednozložkovej kvapaliny pozostávajúcim z parciálnych diferenciálnych rovníc a voľnej hranice, kde vedúcou rovnicou je rovnica vedenia tepla. Cieľom je numerická simulácia vývoja teploty a polohy fázového rozhrania a porovnanie získaných riešení s aproximatívnymi analytickými (asymptotickými) riešeniami. Venujeme sa modelom na polonekonečnej a konečnej oblasti — predpoklady a podmienky vysvetlíme, niektoré aj odvodíme a modely vyjadríme v matematickom tvare. Prevedieme ich na bezrozmerný tvar a využitím transformácie z voľnej na fixovanú hranicu nájdeme analytické riešenie modelu bez kinetickej rovnice, a pre model s kinetickou rovnicou odvodíme jeho asymptotické riešenia. Tento model riešime aj numericky pomocou nášho programu v prostredí Matlab — vykonáme niekoľko simulácií a získané výsledky porovnáme s aproximatívnymi analytickými riešeniami, čo pokladáme za prínos našej práce, a zároveň splnenie stanovených cieľov.

Kľúčové slová: fázová premena, parciálne diferenciálne rovnice, rovnica vedenia tepla, úloha s pohyblivou hranicou, kinetická rovnica

Abstract

VIDOVÁ, Miroslava: Stefan problem with kinetic undercooling [Master Thesis], Comenius University in Bratislava, Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Department of Applied Mathematics and Statistics; Supervisor: Mgr. Juraj Kyselica, PhD., Bratislava, 2018, 52 p.

This study describes and investigates the mathematical model of solidification of subcooled single-component liquid consisting of partial differential equations and a free boundary where the leading equation is the heat conduction equation. The aim is numerical simulation of the temperature and position of the phase interface and comparison of the obtained results/observations with approximate analytical (asymptotic) solutions. We focus on the models of the semiinfinite and the finite area — assumptions and conditions will be explained, several of them will be deduced and the models will be expressed in mathematical form. We turn them into a dimensionless form and using the transformation from free to fixed boundary, we find the analytical solution of the model without the kinetic equation, and for the model with the kinetic equation we derive its asymptotic solutions. We also solve this model numerically using our program in Matlab environment — we perform some simulations and compare the obtained results with the approximate analytical solutions, which we consider to be the contribution of our work, while meeting the stated goals.

Keywords: phase transformation, partial differential equations, heat conduction equation, free boundary problem, kinetic equation

Obsah

Ú	Ĵvod		
1	Ste	fanova úloha	11
	1.1	Základný model	11
	1.2	Model s kinetickým podchladením na polonekon. oblasti	14
	1.3	Model s kinetickým podchladením na konečnej oblasti	16
	1.4	Zbezrozmernenie modelov	17
2	\mathbf{Rie}	šenia na polonekonečnej oblasti	20
	2.1	Analytické riešenie základného modelu	20
	2.2	Asymptotické riešenia modelu s kinet. podchladením $\ \ . \ . \ . \ . \ .$	23
3	Úlo	ha na konečnej oblasti	26
	3.1	Asymptotické riešenia modelu s kinet. podchladením	26
	3.2	Limitné riešenia pre malé hodnoty Stefanovho čísla	30
	3.3	Porovnanie so základným modelom	30
4	Nu	merické riešenia	34
	4.1	Numerická schéma	34
	4.2	Programová realizácia	37
	4.3	Numerické výsledky	38
Zá	iver		49
Li	terat	úra	51
Pı	ríloh	a A	52

Úvod

Pracovníci v oblasti prírodných a technických vied často experimentálne zisťujú alebo overujú vlastnosti látok — tuhých, kvapalných či plynných. Ich zistenia potom využívame v každodennom živote, a zvyčajne si to ani neuvedomujeme. Vďaka ich poznatkom napríklad vieme, aké materiály sú pre ich odolnosť voči vlhkosti či chladu vhodné na použitie v stavebníctve, pri akej teplote dochádza vo vysokej peci k taveniu surového železa, alebo aj to, že po vdýchnutí malého množstva hélia budeme mať vysoký a piskľavý hlas. Viac či menej dôležité poznatky pramenia z vedeckej práce. Tá sa však vo väčšej miere než experimentmi, zaoberá predikciami alebo modelovaním. Predpoveď počasia, odhad brzdnej dráhy vozidla, či v dnešnej dobe, pre niekoho neexistujúce, no väčšine strach naháňajúce, často spomínané globálne otepľovanie. Záplavy sú jednou z prírodných katastrof, ktoré vedci v dôsledku globálneho otepľovania predpovedajú. Ohrozené je Holandsko, Londýn... Na rozdiel od mnohých médií, nechceme vzbudzovať v čitateľovi paniku, a preto uvedieme, že modelovať tak zložitý problém, akým je topenie ľadovcov, a tým spôsobený nárast vodnej hladiny, znamená predikovať stav atmosféry, zmenu teploty oceánov, činnosť biosféry, hlavne činnosť samotného človeka atď., na najbližšie desiatky či stovky rokov. To je možné len po mnohých zjednodušeniach, a výsledky získané z príliš zjednodušeného modelu nemôžeme považovať za smerodajné.

V našej práci sa preto zaoberáme modelom odrážajúcim skutočnú situáciu, resp. situáciu, ktorú môžeme dosiahnuť pri vykonávaní experimentu za určitých podmienok. Nepôjde o globálne otepľovanie, ale skôr o "odtepľovanie". Budeme skúmať situáciu, keď sa kvapalná fáza mení na tuhú, a nie naopak, ako to je v prípade topenia ľadovcov. Slovami matematickej fyziky — čitateľovi predstavíme matematický model tuhnutia podchladenej jednozložkovej kvapaliny pozostávajúci z parciálnych diferenciálnych rovníc a voľnej hranice tvoriacej rozhranie kvapalnej a tuhej fázy [2], [4], [7], [10]. Úlohy zaoberajúce sa fázovými premenami a rýchlosťou rastu fázového rozhrania sa označujú spoločným názvom *Stefanove úlohy*. Kľúčovým parametrom určujúcim rýchlosť tuhnutia (rýchlosť pohybu fázového rozhrania) je tzv. *Stefanovo číslo* — pomer latentného tepla (tepla, ktoré musíme odobrať kvapalnej fáze ochladenej na teplotu tuhnutia, aby došlo k fázovej premene) a tepla odovzdaného okoliu. V klasickej Stefanovej úlohe popisujúcej fázovú premenu čistej kvapaliny predpokladáme, že systém

Úvod

je v termodynamickej rovnováhe: teplota fázového rozhrania je rovná teplote tuhnutia, pričom rýchlost pohybu rozhrania je určená zákonom zachovania tepla na rozhraní (*Stefanova podmienka*). Poloha fázového rozhrania je v takom prípade úmerná druhej odmocnine času. Nevýhodou uvedeného riešenia je nekonečná rýchlosť rastu rozhrania v počiatočnom časovom okamihu, čo nie je fyzikálne realistickým výsledkom. Problém môžeme vyriešiť uvoľnením predpokladu termodynamickej rovnováhy na rozhraní: namiesto predpokladu, že teplota na rozhraní je rovná teplote tuhnutia, predpokladáme, že táto teplota je nižšia ako teplota tuhnutia. Fázová premena v počiatočných okamihoch je tak riadená termodynamickou nerovnováhou na rozhraní, t. j. rýchlosť rastu rozhrania je funkciou rozdielu medzi teplotou rozhrania a teplotou tuhnutia. To má za následok konečné hodnoty rýchlosti rastu rozhrania v počiatočnom čase.

Cieľom diplomovej práce je numerická simulácia vývoja teploty a polohy fázového rozhrania v uvedenom systéme a porovnanie numerických výsledkov s aproximatívnymi analytickými riešeniami. Pred numerickou simuláciou a nájdením aproximatívnych analytických riešení musíme model vhodne upraviť a transformovať. Pri hľadaní numerických riešení ovplyvní naša voľba niektorých parametrov vstupujúcich do modelu riešenie, preto numerické simulácie vykonáme pre viaceré možnosti hodnôt parametrov.

V prvej kapitole uvedieme základné poznatky o Stefanovej úlohe a odvodíme Stefanovu podmienku, ktorá do modelu vstupuje. Následne v matematickom tvare zapíšeme základný model na polonekonečnej oblasti a model s kinetickým podchladením na polonekonečnej aj konečnej oblasti, a budeme ich názorne ilustrovať obrázkami. Uvedené modely tiež transformujeme na bezrozmerný tvar. V [4] je skúmaný Stefanov problém s podchladenou kvapalnou fázou a nelineárnym vzťahom medzi rýchlosťou rastu fázového rozhrania a podchladením. Tento nelineárny vzťah bol odvodený pomocou metód štatistickej fyziky a pre malé hodnoty podchladenia ho môžeme aproximovať lineárnym vzťahom, ktorý predstavuje kinetickú rovnicu použitú v našej práci. V tejto kapitole vychádzame hlavne z [2], [4], [7], [9] a [10].

Druhú kapitolu venujeme hľadaniu riešení na polonekonečnej oblasti — pre základný model vypočítame analytické riešenie, a pre model s kinetickým podchladením odvodíme jeho aproximatívne (asymptoptické) analytické riešenie. Pred hľadaním riešení oba modely transformujeme na fixovanú hranicu. Riešenia budú rôzne podľa toho, či budeme uvažovať veľké, alebo malé Stefanovo číslo [2], [9], [12].

Úlohou s kinetickým podchladením na konečnej oblasti sa budeme zaoberať v tretej kapitole. Transformujeme ju na fixovanú hranicu, odvodíme jej asymptotické riešenie a uvedieme podmienky, pre ktoré toto riešenie existuje. Okrem toho nájdeme aj limitné riešenia pre malé hodnoty Stefanovho čísla [8]. V závere tejto časti porovnáme získané výsledky s riešeniami základného modelu, ktorý predtým prevedieme na konečnú oblasť.

V štvrtej kapitole vykonáme numerické experimenty pre model s kinetickým pod-

$\acute{U}vod$

chladením. Definujeme časopriestorovú sieť, v uzloch ktorej budeme vyčísľovať numerické riešenie. Uvedený model napokon diskretizujeme [10], aby sme pomocou *metódy* konečných diferencií [1] a nášho programu v prostredí Matlab našli numerické riešenia pre rôznu voľbu parametrov vstupujúcich do modelu.

Kapitola 1

Stefanova úloha

Josef Stefan bol slovinský fyzik žijúci v 19. storočí, ktorý sa vo svojom výskume venoval, okrem iného, aj rýchlosti rastu vrstvy ľadu na vodnej hladine. Pojmom Stefanova úloha, alebo tiež Stefanov problém, označujeme úlohy zaoberajúce sa fázovými premenami. Najčastejšie ich nájdeme v modeloch matematickej fyziky. Sú to úlohy s voľnou hranicou, kde vedúcou rovnicou je rovnica vedenia tepla. Ich charakteristickým znakom je, že hranice oblasti riešenia nie sú vopred známe a sú súčasťou riešenia. Nelinearita týchto úloh spôsobuje problémy pri hľadaní analytických riešení, často sa musíme uspokojiť len s numerickými alebo aproximatívnymi analytickými riešeniami [5], [10]. V tejto kapitole oboznámime čitateľa s formuláciou základného a rozšíreného Stefanovho modelu s kinetickým podchladením na polonekonečnej a konečnej oblasti. Analytickým a numerickým riešením týchto problémov sa zaoberáme v ďalších kapitolách.

1.1 Základný model

Najskôr budeme uvažovať model s kvapalinou v polonekonečnej oblasti $0 \leq z < \infty$ podchladenou na teplotu T_{∞} a izotermálnou tuhou fázou s teplotou T_m (teplota tuhnutia), pričom $T_{\infty} < T_m$. Tento model nazveme základným modelom a ilustrujeme ho na Obr. 1.1.

Stefanova úloha je založená na poznatkoch z termodynamiky a dynamiky fázových premien. Pred uvedením matematického vyjadrenia základného modelu uvedieme dôležité pojmy, ktoré sa v danom probléme vyskytujú.

Podstatnou súčasťou modelu je Stefanova podmienka. Tá modeluje pohyb fázového rozhrania v čase pri fázovej premene a vyjadruje zákon zachovania energie na rozhraní. Platí, že za čas Δt sa fázové rozhranie posunie približne o $\dot{h}\Delta t$, kde \dot{h} predstavuje okamžitú rýchlosť pohybu rozhrania, ktorá je definovaná ako $\dot{h} = \frac{dh}{dt}$. Na úseku dĺžky $\dot{h}\Delta t$ dôjde k fázovej premene. Teplo, ktoré sa pri tom uvoľní, môžeme vyjadriť

$$Q_{lat} = \rho L \frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}t} \Delta t, \qquad (1.1)$$



Obr. 1.1: Základný model v čase t, kde z = h(t) predstavuje fázové rozhranie.

kde L je merné latentné teplo, čiže množstvo tepla, ktoré musíme odobrať 1 kilogramu látky, aby pri teplote tuhnutia/tavenia prešla do inej fázy.

Jean Baptiste Joseph Fourier v roku 1811 na základe experimentov zistil závislosť medzi hustotou tepelného toku q a gradientom teploty ∇T , ktorú môžeme napísať ako

$$q = -k\nabla T(x,t),\tag{1.2}$$

kde k je súčiniteľ tepelnej vodivosti.

Ak poznáme teplotné pole T v kvapalnej fáze, teplo z nej privedené na fázové rozhranie zapíšeme v jednorozmernom prípade podľa (1.2) nasledujúcim spôsobom:

$$q = -k \frac{\partial T(z,t)}{\partial z} \Big|_{z=h^+}.$$
(1.3)

Na odvodenie Stefanovej podmienky využijeme zákon zachovania energie [6]. Ak neuvažujeme teplo dodané z externých zdrojov, môžeme tento zákon napísať $\dot{E} = \dot{E}_{in} - \dot{E}_{out}$, kde \dot{E} predstavuje zmenu vnútornej energie, \dot{E}_{in} zmenu energie dodanej do systému a \dot{E}_{out} naopak, energiu odobranú zo systému. V našom základnom modeli je však tuhá fáza izotermálna, čo znamená, že tok tepla z tuhej fázy smerom k rozhraniu je nulový, teda $\dot{E}_{out} = 0$. Dosadením (1.1) a (1.3) dostávame

$$\rho L \frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}t} \Delta t = \left. -k \frac{\partial T(z,t)}{\partial z} \right|_{h^+} \Delta t,$$

a predelením nenulovým
 Δt získame Stefanovu podmienku

$$\rho L \frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}t} = -k \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=h^+}.$$
(1.4)

Stefanova podmienka (1.4) medzi sebou prepája dve neznáme funkcie — polohu fázového rozhrania v čase a rozloženie teploty v kvapalnej fáze.

Pri zostavovaní základného modelu sme okrem predpokladu izotermálnosti tuhej fázy a zanedbania tepla dodaného z externých zdrojov, ktoré sme popísali vyššie, prijali aj ďalšie predpoklady a zjednodušenia:

- hustotu ρ považujeme za rovnakú pre kvapalnú aj tuhú fázu,
- na fázovom rozhraní uvažujeme konštantnú teplotu T_m teplotou tuhnutia,
- predpokladáme tiež konštantné merné latentné teplo L,
- neuvažujeme vonkajšie vplyvy, napr. gravitačné, chemické.

Keďže uvažujeme izotermálnu tuhú fázu, vedenie tepla prebieha len v kvapaline, čiže rovnica vedenia tepla platí pre oblasť $h \leq z < \infty$. Pre teplotnú difuzivitu κ platí

$$\kappa = \frac{k}{\rho C},$$

kde ${\cal C}$ je merná tepelná kapacita.

V čase t = 0 je celá oblasť $0 \le z < \infty$ vyplnená kvapalinou, ktorá je podchladená na teplotu T_{∞} , čo zobrazujeme na Obr. 1.2.



Obr. 1.2: Zobrazenie základného modelu v čase t = 0.

Podchladenie kvapaliny v základnom modeli spôsobí fázovú premenu a obe fázy sú v čase t > 0 od seba oddelené rovinným fázovým rozhraním, ktoré je funkciou času, označujeme h = h(t). Ako vidieť na Obr. 1.1, teplota fázového rozhrania je rovná T_m .

Podmienky, predpoklady a zjednodušenia popísané vyššie môžeme zapísať nasledujúcim matematickým modelom:

• vedenie tepla:

$$\frac{\partial T(z,t)}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T(z,t)}{\partial z^2}, \ h < z < \infty,$$
(1.5)

• podmienky na rozhraní:

$$T(h,t) = T_m, (1.6a)$$

$$\rho L \frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}t} = -k \frac{\partial T(z,t)}{\partial z} \bigg|_{z=h^+}, \qquad (1.6b)$$

počiatočné podmienky

$$h(0) = 0,$$

 $T(0,0) = T_m,$ (1.7)
 $T(z,0) = T_{\infty}, h \le z < \infty.$

Ako sme už uviedli, neznámou je aj funkcia h = h(t), čiže ide o úlohu s pohyblivou hranicou.

1.2 Model s kinetickým podchladením na polonekonečnej oblasti

Aby dochádzalo k tuhnutiu kvapaliny, na fázovom rozhraní musí byť v skutočnosti nižšia teplota ako je teplota tuhnutia T_m , pretože teplota tuhnutia (topenia) je taká teplota, pri ktorej môžu existovať kvapalná aj pevná fáza bez toho, aby u nich dochádzalo k zmene fázy [2].

V modeli s kinetickým podchladením preto na rozhraní uvažujeme teplotu T_I , pre ktorú platí $T_I < T_m$, a zároveň je táto teplota súčasťou riešenia. Vďaka pridaniu neznámej teploty T_I potrebujeme ďalšiu rovnicu, pomocou ktorej T_I určíme. Pre jednoduchosť budeme predpokladať, že súčiniteľ tepelnej vodivosti k v tuhej fáze je malý, a teda vedenie tepla v tuhej fáze môžeme zanedbať [2]. Takúto úlohu nazveme modelom s kinetickým podchladením a znázorňujeme ho na Obr. 1.3.

Čo zmeníme, je okrajová podmienka pre z = h(t), kde budeme vyžadovať teplotu T_I a do modelu pridáme kinetickú rovnicu v tvare

$$\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}t} = G(T_m - T_I),\tag{1.8}$$



Obr. 1.3: Grafická interpretácia modelu s kinetickým podchladením na polonekonečnej oblasti v čase t.

kde G predstavuje kinetický koeficient, ktorý je konštantný [11]. Kinetická rovnica hovorí, že rýchlost rastu fázového rozhrania je úmerná rozdielu medzi teplotou tuhnutia T_m a teplotou na rozhraní T_I . Zdôraznime ešte, že T_I je funkciou t.

Keď zohľadníme zmenu okrajovej podmienky, a do základného modelu pridáme kinetickú rovnicu (1.8) s tým, že ostatné predpoklady zo základného modelu nezmeníme, dostaneme model s kinetickým podchladením na polonekonečnej oblasti [8]:

• vedenie tepla:

$$\frac{\partial T(z,t)}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T(z,t)}{\partial z^2}, \ h < z < \infty, \tag{1.9}$$

• Stefanova podmienka:

$$\rho L \frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}t} = -k \frac{\partial T(z,t)}{\partial z} \bigg|_{z=h^+},\tag{1.10}$$

• počiatočné podmienky

$$h(0) = 0,$$
 (1.11a)

$$T(z,0) = f(z),$$
 (1.11b)

okrajové podmienky

 $T(h,t) = T_I(t), \tag{1.12a}$

$$T(\infty, t) = T_{\infty}, \tag{1.12b}$$

• kinetická rovnica

$$\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}t} = G(T_m - T_I),\tag{1.13}$$

kde funkciu f(z) upresníme v poslednej podkapitole tejto časti našej práce.

1.3 Model s kinetickým podchladením na konečnej oblasti

Keďže cieľom našej práce je numerická simulácia vývoja teploty a polohy fázového rozhrania, a numerické výpočty môžu prebiehať iba na konečnej oblasti, v tejto časti uvádzame formuláciu modelu s kinetickým podchladením na konečnej oblasti, t. j. na h < z < H. Uvedený model ilustrujeme na Obr. 1.4.



Obr. 1.4: Grafická interpretácia modelu s kinetickým podchladením na konečnej oblasti v čase t.

Prepísaním modelu (1.9)–(1.13) na konečnú oblasť získame:

• vedenie tepla:

$$\frac{\partial T(z,t)}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T(z,t)}{\partial z^2}, \ h < z < H,$$
(1.14)

• Stefanova podmienka:

$$\rho L \frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}t} = -k \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=h^+},\tag{1.15}$$

počiatočné podmienky

$$h(0) = 0, (1.16a)$$

$$T(z,0) = f(z),$$
 (1.16b)

- okrajové podmienky
- $T(h,t) = T_I(t), \tag{1.17a}$

$$T(H,t) = T_{\infty},\tag{1.17b}$$

• kinetická rovnica

$$\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}t} = G(T_m - T_I),\tag{1.18}$$

kde funkcia f(z) je zhodná s f(z) uvedenou v podmienke (1.11b).

1.4 Zbezrozmernenie modelov

Úlohy matematickej fyziky sú väčšinou uvádzané v bezrozmernom vyjadrení s cieľom znížiť počet nezávislých parametrov [5]. Preto aj my prevedieme modely z predchádzajúcich podkapitol na ich bezrozmerné tvary. To znamená, že musíme transformovať tieto veličiny:

- teplota T, [T] = K,
- čas t, [t] = s,
- súradnicová os z, [z] = m.

Nasledujúce transformácie

$$\theta(\tilde{z},\tilde{t}) = \frac{T(z,t) - T_m}{\Delta T}, \qquad \qquad \tilde{t} = \frac{\kappa t}{l^2}, \qquad \qquad \tilde{z} = \frac{z}{l}, \qquad (1.19)$$

kde $\Delta T = T_m - T_\infty$ a l je fiktívna dĺžková škála, využijeme na zbezrozmernenie rovníc základného modelu. Symbolom "~" označíme bezrozmerné veličiny.

Transformácie jednotlivých členov rovnice vedenia tepla:

$$\begin{split} \frac{\partial T}{\partial t} &= \Delta T \frac{\partial \theta(\tilde{z},\tilde{t})}{\partial \tilde{t}} \frac{\mathrm{d}\tilde{t}}{\mathrm{d}t} = \frac{\Delta T \kappa}{l^2} \frac{\partial \theta(\tilde{z},\tilde{t})}{\partial \tilde{t}},\\ \frac{\partial T}{\partial z} &= \Delta T \frac{\partial \theta(\tilde{z},\tilde{t})}{\partial \tilde{z}} \frac{\mathrm{d}\tilde{z}}{\mathrm{d}z} = \frac{\Delta T}{l} \frac{\partial \theta(\tilde{z},\tilde{t})}{\partial \tilde{z}},\\ \frac{\partial^2 T}{\partial^2 z} &= \frac{\Delta T}{l} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\partial \theta(\tilde{z},\tilde{t})}{\partial \tilde{z}} \right] = \frac{\Delta T}{l^2} \frac{\partial^2 \theta(\tilde{z},\tilde{t})}{\partial \tilde{z}^2}. \end{split}$$

Bezrozmerný tvar rovnice vedenia tepla po dosadení:

$$\frac{\partial \theta(\tilde{z}, \tilde{t})}{\partial \tilde{t}} = \frac{\partial^2 \theta(\tilde{z}, \tilde{t})}{\partial \tilde{z}^2}.$$
(1.20)

Ďalej označme $h(t) = l\nu(\tilde{t})$ pre bezrozmerné $\nu,$ z toho vyplýva

$$\frac{dh(t)}{dt} = l \frac{\mathrm{d}\nu(t)}{\mathrm{d}\tilde{t}} \frac{\mathrm{d}\tilde{t}}{\mathrm{d}t} = \frac{\kappa}{l} \frac{\mathrm{d}\nu(t)}{\mathrm{d}\tilde{t}}.$$
(1.21)

Zavedieme bezrozmerný parameter S, Stefanovo číslo, definovaný vzťahom

$$S = \frac{L}{\Delta TC},$$

čo spolu s (1.21) dosadíme do (1.6b) a dostaneme bezrozmernú Stefanovu podmienku:

$$S\frac{\mathrm{d}\nu}{\mathrm{d}\tilde{t}} = -\left.\frac{\partial\theta(\tilde{z},\tilde{t})}{\partial\tilde{z}}\right|_{\tilde{z}=\nu^{+}}.$$
(1.22)

Využitím (1.20) a (1.22) môžeme bezrozmerný základný model zapísať takto:

• vedenie tepla:

$$\frac{\partial \theta(\tilde{z}, \tilde{t})}{\partial \tilde{t}} = \frac{\partial^2 \theta(\tilde{z}, \tilde{t})}{\partial \tilde{z}^2}, \ \nu < \tilde{z} < \infty,$$
(1.23)

• podmienky na rozhraní:

$$\theta(\nu, \tilde{t}) = 0, \tag{1.24a}$$

$$S\frac{\mathrm{d}\nu}{\mathrm{d}\tilde{t}} = -\left.\frac{\partial\theta(\tilde{z},\tilde{t})}{\partial\tilde{z}}\right|_{\tilde{z}=\nu^{+}},\tag{1.24b}$$

• počiatočné podmienky

$$\nu(0) = 0,
\theta(0,0) = 0,
\theta(\tilde{z},0) = -1, \ \nu < \tilde{z} < \infty.$$
(1.25)

Teraz prevedieme na bezrozmerný tvar aj model s kinetickým podchladením na polonekonečnej oblasti, opäť využijeme transformácie (1.19).

Bezrozmerný model s kinetickým podchladením na polonekonečnej oblasti vyjadríme v tvare:

• vedenie tepla:

$$\frac{\partial \theta(\tilde{z}, \tilde{t})}{\partial \tilde{t}} = \frac{\partial^2 \theta(\tilde{z}, \tilde{t})}{\partial \tilde{z}^2}, \ \nu < \tilde{z} < \infty,$$
(1.26)

• Stefanova podmienka:

$$S\frac{\mathrm{d}\nu}{\mathrm{d}\tilde{t}} = -\left.\frac{\partial\theta(\tilde{z},\tilde{t})}{\partial\tilde{z}}\right|_{\tilde{z}=\nu^{+}},\tag{1.27}$$

• počiatočné podmienky

 $\nu(0) = 0, \tag{1.28a}$

$$\theta(\tilde{z},0) = j(\tilde{z}), \tag{1.28b}$$

• okrajové podmienky

$$\theta(\nu, \tilde{t}) = \frac{T_I - T_m}{\Delta T} \equiv \theta_I, \qquad (1.29a)$$

$$\theta(\infty, \tilde{t}) = -1, \tag{1.29b}$$

• kinetická rovnica

$$\frac{\mathrm{d}\nu}{\mathrm{d}\tilde{t}} = -\mathcal{G}\theta_I,\tag{1.30}$$

kde $\mathcal{G} = \frac{G\Delta Tl}{\kappa}$ a funkciu $j(\tilde{z})$ špecifikujeme v nasledujúcich kapitolách, a teda funkciu f(z), ktorú sme zaviedli počiatočnou podmienkou (1.11b), môžeme neskôr v prípade potreby vyjadriť práve pomocou $j(\tilde{z})$.

Pre model s kinetickým podchladením na konečnej oblasti volíme transformácie veličín t a z takto:

$$\tilde{t} = \frac{\kappa t}{H^2}, \qquad \qquad \tilde{z} = \frac{z}{H},$$
(1.31)

a označíme $h(t) = H\nu(\tilde{t})$ pre bezrozmerné ν .

Použitím týchto transformácii na (1.14)–(1.18) získame bezrozmerný model s kinetickým podchladením na konečnej oblasti v tvare:

• vedenie tepla:

$$\frac{\partial \theta(\tilde{z}, \tilde{t})}{\partial \tilde{t}} = \frac{\partial^2 \theta(\tilde{z}, \tilde{t})}{\partial \tilde{z}^2}, \ \nu < \tilde{z} < 1,$$
(1.32)

• Stefanova podmienka:

$$S\frac{\mathrm{d}\nu}{\mathrm{d}\tilde{t}} = -\left.\frac{\partial\theta(\tilde{z},\tilde{t})}{\partial\tilde{z}}\right|_{\tilde{z}=\nu^{+}},\tag{1.33}$$

• počiatočné podmienky

$$\nu(0) = 0, \tag{1.34a}$$

$$\theta(\tilde{z}, 0) = j(\tilde{z}), \tag{1.34b}$$

okrajové podmienky

$$\theta(\nu, \tilde{t}) = \theta_I, \tag{1.35a}$$

$$\theta(1,\tilde{t}) = -1,\tag{1.35b}$$

• kinetická rovnica

$$\frac{\mathrm{d}\nu}{\mathrm{d}\tilde{t}} = -\mathcal{G}\theta_I,\tag{1.36}$$

kde $\mathcal{G} = \frac{G\Delta TH}{\kappa}$ a funkcia $j(\tilde{z})$ je zhodná s $j(\tilde{z})$ uvedenou v podmienke (1.28b).

V nasledujúcej časti našej práce kvôli prehľadnosti nahradíme symboly \tilde{z} a \tilde{t} symbolmi z a t, pričom z a t budú odteraz reprezentovať bezrozmerné veličiny.

Ďalšie kapitoly venujeme hľadaniu riešení — analytických, asymptotických a numerických — uvedených zbezrozmernených Stefanových problémov.

Kapitola 2

Riešenia na polonekonečnej oblasti

V tejto časti našej práce nájdeme analytické riešenie základného modelu z predchádzajúcej kapitoly. Pre model s kinetickým podchladením na polonekonečnej oblasti neexistujú analytické riešenia pre všeobecné hodnoty S — pre $S \rightarrow \infty$ však možno nahliadnuť, že riešenia sú blízke riešeniam základného modelu, a pre S < 1 môžeme nájsť riešenie v tvare postupnej vlny, existujúce pre špeciálny tvar počiatočných podmienok. V tejto kapitole uvedené riešenia odvodíme — ide o prehľadovú kapitolu, v ktorej čerpáme z [2], [3] a [9].

2.1 Analytické riešenie základného modelu

V predchádzajúcej kapitole sme základný model (1.5)-(1.7) previedli na bezrozmerný tvar (1.23)-(1.25). Ten teraz budeme riešiť analyticky. Hľadanie analytického riešenia nám však komplikuje jedna z charakteristík Stefanovej úlohy, ktorú sme uviedli na začiatku — ide o úlohu s voľnou hranicou. Tá sa prejavuje v podmienke (1.24a), ktorá je určená na hranici závislej od času. Vhodne zvolenou transformáciou uvedenou v [2] však celý problém môžeme transformovať na úlohu s fixovanou hranicou, a následne ju analyticky vyriešiť.

Použijeme transformáciu $\theta(z,t) \mapsto \theta(\eta)$, kde

$$\eta \equiv \frac{z}{2\sqrt{t}}$$
 a $\nu(t) = 2\lambda\sqrt{t}.$ (2.1)

Model môžeme po transformácii prepísať takto:

• vedenie tepla:

$$\theta''(\eta) = -2\eta \theta'(\eta), \ \lambda \le \eta < \infty, \tag{2.2}$$

• Stefanova podmienka:

$$-2\lambda S = \theta'(\lambda), \tag{2.3}$$

• okrajové podmienky

$$\theta(\lambda) = 0, \tag{2.4a}$$

$$\theta(\infty) = -1. \tag{2.4b}$$

Predtým, ako začneme uvedený model riešiť analyticky, uvedieme definície chybovej a doplnkovej chybovej funkcie, ktoré pri riešení využijeme:

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{x} e^{-t^{2}} \mathrm{d}t,$$
$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{x}^{\infty} e^{-t^{2}} \mathrm{d}t.$$
(2.5)

Nasleduje analytické riešenie zbezrozmerneného základného modelu transformovaného na fixovanú hranicu. Integrovaním obyčajnej diferenciálnej rovnice (2.2) získame

$$\theta'(\eta) = \theta'(\lambda) e^{-\eta^2 + \lambda^2},$$

a túto rovnicu ďalej integrujeme, čím dostaneme

$$\theta(\eta) - \theta(\lambda) = \theta'(\lambda) \int_{\lambda}^{\eta} e^{-s^2 + \lambda^2} ds.$$

Po dosadení okrajovej podmienky (2.4a) máme

$$\theta(\eta) = \theta'(\lambda) \int_{\lambda}^{\eta} e^{-s^2 + \lambda^2} ds, \qquad (2.6)$$

a teraz do (2.6) dosadíme ďalšiu okrajovú podmienku (2.4b):

$$-1 = \theta'(\lambda) \int_{\lambda}^{\infty} e^{-s^2 + \lambda^2} ds,$$

z ktorej môžeme pomocou (2.5) vyjadriť

$$\theta'(\lambda) = \frac{-\mathrm{e}^{-\lambda^2}}{\frac{\sqrt{\pi}}{2}\mathrm{erfc}(\lambda)}.$$
(2.7)

Dosadíme (2.7) do (2.6) a počítame aj s využitím vzťahu medzi chybovou a doplnkovou chybovou funkciou (2.5):

$$\theta(\eta) = \frac{\operatorname{erfc}(\eta)}{\operatorname{erfc}(\lambda)} - 1, \qquad (2.8)$$

čím sme získali analytické riešenie zbezrozmerneného základného modelu transformovaného na fixovanú hranicu (2.2)–(2.4b). Zderivujme teraz (2.8) a dosaďme do (2.3), čím po úpravách dostaneme

$$S = \frac{1}{\sqrt{\pi}\lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erfc}(\lambda)}.$$
(2.9)

Funkcia $\sqrt{\pi}\lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erfc}(\lambda)$ je rastúca $\forall \lambda$. Navyše, pre veľké hodnoty λ podľa [9] platí

$$\operatorname{erfc}(\lambda) \sim \frac{\mathrm{e}^{-\lambda^2}}{\lambda\sqrt{\pi}}, \text{ pre } \lambda \to \infty,$$

a teda $\sqrt{\pi}\lambda e^{\lambda^2} \mathrm{erfc}(\lambda) \to 1$ pr
e $\lambda \to \infty.$ Po dosađení do (2.9) získame

 $S \to 1^+$, pre $\lambda \to \infty$.

Situáciu ilustrujeme na Obr. 2.1, na ktorom zobrazujeme numerické riešenie algebraickej rovnice (2.9).



Obr. 2.1: Numerické riešenie rovnice (2.9) — zelená krivka, asymptota riešenia — červená krivka.

Tým sme ukázali, že ak $S \to 1^+ \Rightarrow \lambda \to \infty$. To znamená, že riešenia rovnice (2.9) existujú len pre S > 1. Situáciu ilustrujeme na 2.1. Neexistencia riešení pre S < 1je spôsobená podmienkou základného modelu (1.6a), ktorou sme zapísali predpoklad toho, že teplota na rozhraní je rovná teplote topenia (tuhnutia). Tento predpoklad je vyjadrením termodynamickej rovnováhy na rozhraní. Termodynamická rovnováha však nastáva len pri dostatočne pomalom raste fázového rozhrania, t. j. pri veľkých hodnotách S, kedy rozvinutím (2.9) do Taylorovho radu platí

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{\pi}S} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{S}\right). \tag{2.10}$$

Pre menšie hodnoty S musíme brať do úvahy termodynamickú nerovnováhu na rozhraní, t. j. rozdiel $T_m - T_I$. Tento problém rieši model s kinetickou rovnicou.

2.2 Asymptotické riešenia modelu s kinetickým podchladením

V predchádzajúcej kapitole sme naznačili, že model (1.9)-(1.13), resp. jeho bezrozmerná podoba (1.26)-(1.30), už nemá analytické riešenie. Kvôli tomu pristúpime k hľadaniu aproximatívnych analytických riešení pre veľké a malé hodnoty Stefanovho čísla.

V prípade $S \to \infty$ predpokladáme, že pre člen na pravej strane podmienky na rozhraní (1.27) platí [2]:

$$-\left.\frac{\partial\theta}{\partial z}\right|_{z=\nu^+} = O(1) \text{ pre } S \to \infty.$$

Z uvedeného vyplýva

$$\frac{d\nu}{dt} = O(S^{-1}) \to 0, \qquad (2.11)$$

čo znamená, že rozhranie rastie pomaly. Dosadením (2.11) do kinetickej rovnice (1.30) dostaneme $\theta_I = O(S^{-1}) \rightarrow 0$, a využitím (1.29a) a (1.30) môžeme vyjadriť

$$\frac{T_I - T_m}{\Delta T} = O(S^{-1}) \Rightarrow T_I \to T_m \text{ pre } S \to \infty.$$
(2.12)

Tým sme ukázali, že pre veľké Stefanove čísla sú riešenia vo vedúcom ráde asymptoticky ekvivalentné riešeniam základného modelu, t. j. modelu s $T_I = T_m$, ktorého analytické riešenie (2.8) sme odvodili v predchádzajúcej podkapitole.

Ešte doplníme — pre S > 1 platí, že analytické riešenia modelu s kinetickým podchladením (1.9)–(1.13) konvergujú k riešeniu základného modelu (2.8) pre $t \to \infty$. [12]

Pozrime sa teraz na situáciu, keď S < 1. V tomto prípade nájdeme asymptotické riešenie, ktoré platí pre $t \to \infty$ [4], [9], takže v modeli nebudú vystupovať počiatočné podmienky. Budeme predpokladať $\theta_I = konšt.$, čo môžeme označiť ako $-\theta_I = V$. Kinetickú rovnicu teda zapíšeme $\frac{d\nu}{dt} = \mathcal{G}V$, z čoho dostávame $\nu(t) = \mathcal{G}Vt + C_0$. Dosadením (1.28a) vypočítame $C_0 = 0$, čiže platí

$$\nu(t) = \mathcal{G}Vt. \tag{2.13}$$

Aj teraz nám, tak ako v predchádzajúcej podkapitole, hranica závislá od času komplikuje hľadanie analytického riešenia. Preto problém transformujeme na úlohu s fixovanou hranicou pomocou transformácie $\theta(z,t) \rightarrow \theta(\eta)$, kde $\eta = z - \mathcal{G}Vt$. Pre $z = \nu(t)$ po dosadení (2.13) platí $\eta = 0$. Z definície η vyplýva, že riešenie bude v tvare postupnej vlny pohybujúcej sa rýchlosťou $\mathcal{G}V$. Transformovaný model zapíšeme v tvare:

• vedenie tepla:

$$-\mathcal{G}V\theta'(\eta) = \theta''(\eta), \ 0 \le \eta < \infty, \tag{2.14}$$

• Stefanova podmienka

$$S\mathcal{G}V = -\theta'(\eta)|_{\eta=0},\tag{2.15}$$

• okrajové podmienky

 $\theta(0) \equiv \theta_I, \tag{2.16a}$

$$\theta(\infty) = -1, \tag{2.16b}$$

• kinetická rovnica

$$V = -\theta_I. \tag{2.17}$$

Integrujeme obyčajnú diferenciálnu rovnicu (2.14) a dostaneme

$$-\mathcal{G}V\theta(\eta) + \mathcal{G}V\theta(0) = \theta'(\eta) - \theta'(0),$$

dosadením (2.15) a (2.16a) a preskupením členov získame $\theta'(\eta) = -\mathcal{G}V\theta - S\mathcal{G}V + \mathcal{G}V\theta_I$. Metódou variácie konštánt dostaneme

$$\theta(\eta) = C_2 e^{-\mathcal{G}V\eta} + \int_0^{\eta} e^{-\mathcal{G}V(\eta-s)} (\theta_I - S) \mathcal{G}V ds$$

$$= C_2 e^{-\mathcal{G}V\eta} - e^{-\mathcal{G}V\eta} (\theta_I - S) \mathcal{G}V \int_0^{\eta} e^{\mathcal{G}Vs} ds$$

$$= C_2 e^{-\mathcal{G}V\eta} - e^{-\mathcal{G}V\eta} (e^{\mathcal{G}V\eta} - 1) (\theta_I - S)$$

$$= e^{-\mathcal{G}V\eta} (C_2 + \theta_I - S) - 1.$$

(2.18)

Využitím podmienky (2.16a) dostaneme $\theta(0) = \theta_I = C_2 + \theta_I - S - 1 \Rightarrow C_2 = S + 1$, čo dosadíme do (2.18), a teda

$$\theta(\eta) = e^{-\mathcal{G}V\eta} (1+\theta_I) - 1.$$
(2.19)

Neznámu hodnotu θ_{I} určíme pomocou podmienky (2.15). Z (2.19) dostaneme

$$S\mathcal{G}V = \mathcal{G}V(1+\theta_I),$$

čiže

$$\theta_I = S - 1. \tag{2.20}$$

Z podmienky (2.17) určíme V = 1 - S, a teda môžeme riešenie bezrozmerného modelu s kinetickým podchladením transformovaným na fixovanú hranicu pre S < 1, využitím vzťahov (2.13) a (2.18), zapísať v tvare:

$$\nu(t) = \mathcal{G}(1-S)t,
\theta(\eta) = Se^{-\mathcal{G}(1-S)\eta} - 1, \ \eta = z - \nu(t).$$
(2.21)

Všimnime si, že riešenie má fyzikálny zmysel skutočne len pre S < 1 (t. j. pre $\theta_I < 0$).

Ešte doplníme, že na základe (2.20) pre $S \to 0$ platí $\theta_I \to -1$, čo môžeme prostredníctvom (2.16a) vyjadriť

$$T_I \to T_\infty,$$

čiže pre veľmi malé Stefanovo číslo je neznáma teplota T_I na rozhraní blízka teplote T_{∞} , na ktorú je v našom modeli podchladená kvapalná fáza.

Kapitola 3 Úloha na konečnej oblasti

V tejto časti našej práce sa zameriame na nájdenie asymptotických riešení modelu s kinetickým podchladením na konečnej oblasti (1.14)-(1.18), resp. jeho bezrozmerného vyjadrenia (1.32)-(1.36). Pri hľadaní riešení aproximujeme teplotu v kvapalnej fáze, ktorá je určená rovnicou vedenia tepla, lineárnou funkciou — myšlienka tejto aproximácie je vysvetlená v [2] pre základný model na konečnej oblasti. Ten v tejto kapitole odvodíme, nájdeme jeho riešenie a porovnáme ho s nájdeným riešením pre model s kinetickým podchladením — naším prínosom je aplikácia uvedenej aproximácie na tento model. Okrem toho nájdeme aj jeho limitné riešenia pre malé hodnoty Stefanovho čísla. Prítomnosť ohraničenej oblasti má jeden dôležitý dôsledok — existenciu kritického času, v ktorom celý systém zamrzne.

3.1 Asymptotické riešenia modelu s kinetickým podchladením

Pri hľadaní asymptotických riešení na konečnej oblasti sa opäť pozrieme na dva prípady — pre $S \rightarrow 0$ a pre $S \rightarrow \infty$. Podmienka určená na hranici závislej od času (1.12a) nám komplikuje hľadanie riešenia, preto aj teraz úlohu transformujeme z problému s voľnou hranicou (1.26)–(1.30) na úlohu s hranicou fixovanou.

Na fixovanie voľnej hranice volíme transformáciu

$$z \to \zeta = \frac{1-z}{1-\nu(t)}.\tag{3.1}$$

Ide o transformáciu uvedenú v [10]. Táto transformácia transformuje interval $\langle \nu; 1 \rangle$ na interval $\langle 0; 1 \rangle$, pričom $z = \nu(t)$ sa zobrazí na $\zeta = 1$ a z = 1 sa zobrazí na $\zeta = 0$.

Najskôr uvádzame parciálne derivácie $\frac{\partial \zeta(z,t)}{\partial t}$ a $\frac{\partial \zeta(z,t)}{\partial z}$, ktoré budú neskôr vystupovať

v transformovanej rovnici vedenia tepla a podmienke na rozhraní:

$$\frac{\partial \zeta(z,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1-z}{1-\nu(t)} \right] = \frac{d\nu(t)}{dt} \frac{1-z}{[1-\nu(t)]^2} = \frac{d\nu(t)}{dt} \frac{\zeta(z,t)}{1-\nu(t)},$$
$$\frac{\partial \zeta(z,t)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{1-z}{1-\nu(t)} \right] = -\frac{1}{1-\nu(t)}.$$

Kvôli prehľadnosti budeme funkciu $\zeta(z,t)$ uvádzať v nasledujúcom texte už bez argumentov. Pre jednoduchosť značenia budeme funkciu teploty označovať rovnakým symbolom aj po transformácii, t. j. $\theta(\zeta, t)$.

Transformácie jednotlivých členov rovnice vedenia tepla:

$$\frac{\partial \theta(z,t)}{\partial t} = \frac{\partial \theta(\zeta,t)}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{\partial \theta(\zeta,t)}{\partial t} = \frac{\partial \theta(\zeta,t)}{\partial \zeta} \frac{d\nu(t)}{dt} \frac{\zeta}{1-\nu(t)} + \frac{\partial \theta(\zeta,t)}{\partial t},$$
$$\frac{\partial \theta(z,t)}{\partial z} = \frac{\partial \theta(\zeta,t)}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial z} = -\frac{\partial \theta(\zeta,t)}{\partial \zeta} \frac{1}{1-\nu(t)},$$
$$\frac{\partial^2 \theta(z,t)}{\partial z^2} = -\frac{1}{1-\nu(t)} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\theta(\zeta,t)}{\partial \zeta} \right] = \frac{\partial^2 \theta(\zeta,t)}{\partial \zeta^2} \frac{1}{[1-\nu(t)]^2}.$$

Bezrozmerný tvar rovnice vedenia tepla po dosadení:

$$\frac{\partial\theta(\zeta,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2\theta(\zeta,t)}{\partial\zeta^2} \frac{1}{[1-\nu(t)]^2} - \frac{\partial\theta(\zeta,t)}{\partial\zeta} \frac{\mathrm{d}\nu(t)}{\mathrm{d}t} \frac{\zeta}{1-\nu(t)}.$$
(3.2)

Teraz môžeme použitím (3.2) a transformovaním Stefanovej podmienky (1.27) napísať model s kinetickým podchladením transformovaný na fixovanú hranicu v tvare:

• vedenie tepla:

$$[1-\nu(t)]^2 \frac{\partial\theta(\zeta,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2\theta(\zeta,t)}{\partial\zeta^2} - \zeta[1-\nu(t)]\frac{\partial\theta(\zeta,t)}{\partial\zeta}\frac{\mathrm{d}\nu(t)}{\mathrm{d}t}, \ 0 < \zeta < 1,$$
(3.3)

• Stefanova podmienka

$$[1 - \nu(t)]S\frac{\mathrm{d}\nu(t)}{\mathrm{d}t} = \left.\frac{\partial\theta(\zeta, t)}{\partial\zeta}\right|_{\zeta=1^{-}},\tag{3.4}$$

• počiatočné podmienky

 $\nu(0) = 0, \tag{3.5a}$

$$\theta(\zeta, 0) = j(\zeta), \tag{3.5b}$$

• okrajové podmienky

$$\theta(1,t) = \theta_I(t), \tag{3.6a}$$

$$\theta(0,t) = -1,\tag{3.6b}$$

• kinetická rovnica

$$\frac{\mathrm{d}\nu(t)}{\mathrm{d}t} = -\mathcal{G}\theta_I. \tag{3.7}$$

Hľadanie aproximatívnych riešení modelu (3.3)–(3.7) rozdelíme, ako v predchádzajúcej časti, na dva prípady — pre $S \to \infty$ a $S \to 0$. Zavedieme konštantu t_c predstavujúcu kritický čas, v ktorom celý systém v dôsledku neustáleho ochladzovania zamrzne. Platí:

$$\nu(t_c) = 1, \tag{3.8a}$$

$$\theta_I(t_c) = -1. \tag{3.8b}$$

Uvedené podmienky vyjadrujú skutočnosť, že v čase $t = t_c$ fázové rozhranie dosiahlo hornú hranicu, a že teplota na fázovom rozhraní je rovná teplote hornej hranice. Pripomeňme, že v modeli na polonekonečnej oblasti platí $t_c = \infty$.

Pre $S \to \infty$ aproximujeme funkciu $\theta(\zeta, t)$ lineárnou funkciou tak, aby spĺňala podmienky (3.6a) a (3.6b). Pre veľké hodnoty S totiž prebieha vedenie tepla oveľa rýchlejšie ako fázová premena (rast rozhrania), preto je teplota v kvapalnej fáze v každom okamihu približne rovná stacionárnemu riešeniu rovnice vedenia tepla na konečnej oblasti, t. j. lineárnej funkcii. Z tohto dôvodu je aproximácia lineárnou funkciou zmysluplná. Volíme:

$$\theta(\zeta, t) = -1 + (1 + \theta_I)\zeta, \tag{3.9}$$

čiže funkcia $j(\zeta)$, ktorú sme uviedli v podmienke (3.5b), bude mať tvar:

$$j(\zeta) = -1 + [1 + \theta_I(0)]\zeta.$$

Zderivovaním (3.9) podľa ζ môžeme Stefanovu podmienku (3.4) napísať v tvare

$$[1 - \nu(t)]S\frac{\mathrm{d}\nu(t)}{\mathrm{d}t} = 1 + \theta_I, \qquad (3.10)$$

a dosadiť do nej (3.7), čím dostaneme

$$-[1-\nu(t)]S\mathcal{G}\theta_I = 1+\theta_I, \qquad (3.11)$$

a po úpravách s využitím počiatočnej podmienky (3.5a) získame

$$\theta_I(0) = -\frac{1}{1 + \mathcal{G}S}.\tag{3.12}$$

Rovnicu (3.10) môžeme využiť aj na určenie hodnoty t_c integrovaním nasledujúcim spôsobom:

$$S\int_{0}^{t_{c}} \frac{\mathrm{d}\nu(t)}{\mathrm{d}t} \mathrm{d}t - S\int_{0}^{t_{c}} \frac{\mathrm{d}\nu(t)}{\mathrm{d}t}\nu(t)\mathrm{d}t = \int_{0}^{t_{c}} (1+\theta_{I})\mathrm{d}t, \qquad (3.13)$$

kde $\int_{0}^{t_c} \theta_I dt$ získame integrovaním (3.7), a po dosadení do (3.13) a úpravách, použijúc (3.5a) a (3.8a), dostávame

$$t_c = \frac{1}{2}S + \frac{1}{\mathcal{G}}.$$
 (3.14)

Ďalšími krokmi odvodíme tvar funkcie $\nu(t)$. Opäť dosadíme (3.7) do (3.10) za θ_I a získame

$$[1 - \nu(t)]S\frac{\mathrm{d}\nu(t)}{\mathrm{d}t} = 1 - \frac{\mathrm{d}\nu(t)}{\mathrm{d}t}\frac{1}{\mathcal{G}},$$

a počítame ďalej

$$S\int_{0}^{t} \frac{\mathrm{d}\nu(t)}{\mathrm{d}t} \mathrm{d}t - S\int_{0}^{t} \frac{\mathrm{d}\nu(t)}{\mathrm{d}t}\nu(t)\mathrm{d}t = \int_{0}^{t} \left[1 - \frac{\mathrm{d}\nu(t)}{\mathrm{d}t}\frac{1}{\mathcal{G}}\right]\mathrm{d}t.$$

Po úpravách a dosadení (3.5a) a (3.8a) môžeme zapísať

$$\nu(t)^2 - 2\nu(t)\left(1 + \frac{1}{\mathcal{G}S}\right) + \frac{2t}{S} = 0,$$

čiže

$$\nu(t)_{1,2} = 1 + \frac{1}{\mathcal{G}S} \pm \sqrt{\left(1 - \frac{1}{\mathcal{G}S}\right)^2 - \frac{2t}{S}}.$$

Vhodným pripočítaním a odpočítaním t_c pod odmocninou a využitím vzťahu (3.14) dostávame

$$\nu(t)_{1,2} = 1 + \frac{1}{\mathcal{G}S} \pm \sqrt{\frac{1}{\mathcal{G}S} \left[\frac{1}{\mathcal{G}S} - 2\mathcal{G}(t - t_c)\right]}.$$
(3.15)

Aby (3.15) spĺňala podmienku (3.8a), musí platiť

$$\nu(t) = 1 + \frac{1}{\mathcal{G}S} - \frac{1}{\mathcal{G}S}\sqrt{1 - 2\mathcal{G}^2 S(t - t_c)},$$
(3.16)

čím sme odvodili tvar funkcie $\nu(t)$ na konečnej oblasti v prípade lineárnej počiatočnej teploty. Zderivovaním (3.16) a následným dosadením do kinetickej rovnice (3.7) získame

$$\theta_I(t) = -\frac{1}{\sqrt{1 - 2\mathcal{G}^2 S(t - t_c)}}.$$
(3.17)

Pre úplnosť ešte uvádzame tvar funkcie $\theta(\zeta, t)$ (3.9) po dosadení (3.17):

$$\theta(\zeta, t) = -1 + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 - 2\mathcal{G}^2 S(t - t_c)}}\right)\zeta.$$
 (3.18)

Treba však zdôrazniť, že (3.18) nie je presným riešením rovnice (3.3) — pre $S \to \infty$ sme rovnicu vedenia tepla v kvapalnej fáze nahradili lineárnym teplotným profilom.

V prípade $S \to 0$ prebieha fázová premena rýchlejšie než proces vedenia tepla, a preto nemôžeme očakávať, že teplota v kvapalnej fáze bude v každom časovom okamihu blízka lineárnemu profilu tak, ako pre $S \to \infty$. Vzťahy (3.16)–(3.18) však platia pre akúkoľvek kladnú hodnotu S za predpokladu, že teplota v kvapalnej fáze je lineárnou funkciou premennej ζ . V prípade, ak $S \to 0$ a počiatočná teplota je lineárna — daná vzťahom (3.18) pre t = 0 — porovnaním numerických riešení s (3.18) zistíme v záverečnej kapitole našej práce veľmi dobrú zhodu riešení.

3.2 Limitné riešenia pre malé hodnoty Stefanovho čísla

Nájdime teraz riešenia modelu s kinetickým podchladením na konečnej oblasti za predpokladu (3.9) pre hraničnú hodnotu Stefanovho čísla, a to pre $S \rightarrow 0$.

Rozvinutím (3.17) do Taylorovho radu prvého rádu v bode S = 0 získame

$$\theta_I(t;S) \approx -1 + \mathcal{G}S(1 - \mathcal{G}t) + \mathcal{O}(S), \qquad (3.19)$$

kde pre t_c sme využili vzťah (3.14). Po dosadení (3.19) do (3.11), zanedbaní člena $\mathcal{O}(S) \to 0$ a úpravách, dostaneme funkciu $\nu(t; S)$ pre malé S v tvare

$$\nu(t;S) \approx \frac{-\mathcal{G}t+1}{-1-\mathcal{G}^2St+\mathcal{G}S} + 1.$$

Jej Taylorov rozvoj v bode S = 0 potom môžeme zapísať

$$\nu(t;S) \approx \mathcal{G}t - \mathcal{G}(1 - \mathcal{G}t)^2 S + \mathcal{O}(S).$$
(3.20)

Aproximáciu (3.9) môžeme potom pre malé S zapísať nasledujúcim spôsobom:

$$\theta(\zeta, t; S) \approx -1 + \mathcal{G}S(1 - \mathcal{G}t)\zeta.$$

3.3 Porovnanie so základným modelom

V prvej kapitole sme okrem modelu s kinetickým podchladením, ktorému venujeme najväčšiu časť našej práce, uviedli aj model (1.5)–(1.7), resp. jeho bezrozmernú podobu (1.23)–(1.25) a nazvali sme ho základným — neobsahuje kinetickú rovnicu, lebo platí $\theta_I = 0$, t. j. teplota na rozhraní je rovná teplote tuhnutia. Porovnajme teraz riešenia modelu s kinetickým podchladením na konečnej oblasti s týmto modelom.

Preveďme najskôr bezrozmernú podobu základného modelu (1.23)–(1.25) na konečnú oblasť, t. j. urobme transformáciu (3.1). Získame základný model na konečnej oblasti v tvare

• vedenie tepla:

$$[1-\nu(t)]^2 \frac{\partial\theta(\zeta,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2\theta(\zeta,t)}{\partial\zeta^2} - \zeta[1-\nu(t)]\frac{\partial\theta(\zeta,t)}{\partial\zeta}\frac{\mathrm{d}\nu(t)}{\mathrm{d}t}, \ 0 < \zeta < 1, \quad (3.21)$$

• podmienky na rozhraní

$$\theta(1,t) = 0, \tag{3.22a}$$

$$[1 - \nu(t)]S\frac{\mathrm{d}\nu(t)}{\mathrm{d}t} = \left.\frac{\partial\theta(\zeta, t)}{\partial\zeta}\right|_{\zeta=1^{-}},\tag{3.22b}$$

• počiatočné podmienky

$$\nu(0) = 0, \tag{3.23}$$

$$\theta(1,0) = 0, \theta(\zeta,0) = -1, \ 0 \le \zeta < 1.$$
(3.24)

Keďže pri hľadaní asymptotického riešenia sme v prvej časti tejto kapitoly vychádzali z predpokladu linearity teploty vo všetkých časových okamihoch (3.9), s touto podmienkou musíme pracovať aj pri hľadaní riešenia základného modelu, aby porovnanie riešení bolo zmysluplné. Pre základný model, ako sme už uviedli, platí $\theta_I = 0$, takže po dosadení do (3.9) získame

$$\theta(\zeta, t) = \zeta - 1 \implies \frac{\partial \theta(\zeta, t)}{\partial \zeta} = 1.$$

Dosadením do (3.22b):

$$S\frac{\mathrm{d}\nu(t)}{\mathrm{d}t}[1-\nu(t)] = 1,$$

a následným vyriešením uvedenej diferenciálnej rovnice máme

$$\nu(t) = 1 - \left(1 - \frac{2t}{S}\right)^{\frac{1}{2}}.$$
(3.25)

Všimnime si, že (3.25) spĺňa počiatočnú podmienku (3.23). Aby (3.25) bolo riešením na konečnej oblasti, musí spĺňať aj podmienku (3.8a). Využitím tejto podmienky môžeme vyjadriť kritický čas t_c , v ktorom celý systém základného modelu na konečnej oblasti zamrzne, nasledujúcim spôsobom:

$$t_c = \frac{S}{2}.\tag{3.26}$$

Po úpravách môžeme (3.25) zapísať v tvare

$$\nu(t) = 1 - \sqrt{\frac{2}{S}(t_c - t)},\tag{3.27}$$

čím sme odvodili riešenie základného modelu na konečnej oblasti za predpokladu lineárnej teploty vo všetkých časových okamihoch.

Porovnajme teraz asymptotické riešenie modelu s kinetickým podchladením (3.16) s riešením základného modelu (3.27) — pripomeňme, že obe riešenia existujú na konečnej oblasti a za predpokladu (3.9). Na Obr. 3.1 zobrazujeme obe uvedené riešenia v spoločnom grafe. Pre úplnosť dodajme, že riešenia sme vykreslili pre S = 10.



Obr. 3.1: Porovnanie funkcií rastu fázového rozhrania $\nu(t)$ pre S = 10 — asymptotické riešenie (3.16) (zelená krivka) vs. riešenie základného modelu (3.27) (modrá krivka) — s vyznačenou hodnotou kritického času $t_c = 5$ základného modelu.

Z Obr. 3.1 vidíme pomerne dobrú zhodu medzi obomi riešeniami. V čom sa jasne líšia, je kritický čas t_c , v ktorom celý systém zamrzne, t. j. je splnená podmienka (3.8a) — vidíme, že celý systém základného modelu zamrzne skôr. Pre t_c prislúchajúce asymptotickému riešeniu platí vzťah (3.14), a po dosadení hodnôt, ktoré uvádzame v štvrtej kapitole, vypočítame $t_c = 5,1053$. Hodnotu t_c , pre riešenie základného modelu, sme uviedli priamo do Obr. 3.1 — vyčíslime ju pomocou (3.26) $\Rightarrow t_c = 5$. Pripomeňme, že t_c je bezrozmernou časovou hodnotou.

Rovnakým spôsobom môžeme porovnať riešenia pre $S = 10^{-2}$. Na Obr. 3.2 vykresľujeme výsledky oboch riešení — ako vidíme, tie sa výrazne líšia, a rozchádzajú sa už pre malé hodnoty t.

Nezhoda medzi riešeniami, zobrazená na Obr. 3.2, je spôsobená veľkým rozdielom medzi jednotlivými kritickými časmi t_c , prislúchajúcimi asymptotickému riešeniu modelu s kinetickým podchladením a riešeniu základného modelu na konečnej oblasti.



Obr. 3.2: Porovnanie funkcií rastu fázového rozhrania $\nu(t)$ pre $S = 10^{-2}$ — asymptotické riešenie (3.16) (zelená krivka) vs. riešenie základného modelu (3.27) (modrá krivka) — s vyznačenou hodnotou kritického času $t_c = 0,005$ základného modelu.

Hodnotu t_c pre riešenie základného modelu uvádzame priamo v grafe — $t_c = 0,005$, a pre asymptotické riešenie ju pomocou (3.14) vyčíslime na $t_c = 0,1103$.

Pozrime sa aj na prípad S = 1, ktorý ilustrujeme na Obr. 3.3. Zhoda medzi obomi riešeniami je lepšia ako v prípade $S = 10^{-2}$, ale nie tak dobrá ako pre S = 10.



Obr. 3.3: Porovnanie funkcií rastu fázového rozhrania $\nu(t)$ pre S = 1 — asymptotické riešenie (3.16) (zelená krivka) vs. riešenie základného modelu (3.27) (modrá krivka) — s vyznačenou hodnotou kritického času $t_c = 0, 5$ základného modelu.

Vidíme, že $t_c = 0, 5$ pre riešenie základného modelu, a pre asymptotické riešenie na základe (3.14) platí $t_c = 0,6053$.

Z uvedených porovnaní vyplýva, že na konečnej oblasti sú riešenia základného modelu v dobrej zhode s riešeniami modelu s kinetickým podchladením v prípade veľkých hodnôt Stefanovho čísla *S*.

Kapitola 4

Numerické riešenia

V predchádzajúcej kapitole sme našli približné riešenia modelu s kinetickým podchladením (1.14)–(1.18), resp. jeho bezrozmernej formulácie (1.32)–(1.36), na konečnej oblasti. Ako sme už uviedli, tento problém nemá explicitné riešenie, a preto v tejto časti našej práce budeme nami zvolenou numerickou metódou hľadať jeho numerické riešenia pre rôzne voľby parametrov, ktoré do modelu vstupujú. Nakoľko ide o úlohu s voľnou hranicou danou podmienkou (1.17a), resp. pre bezrozmerný tvar je voľná hranica daná podmienkou (1.35a), aj v tejto kapitole budeme pracovať s modelom transformovaným na fixovanú hranicu (3.3)–(3.7).

4.1 Numerická schéma

Problém (3.3)–(3.7) sme sa rozhodli numericky riešiť metódou konečných diferencií. To znamená, že našou nasledujúcou úlohou je nahradenie diferenciálnych rovníc systémom diferenčných rovníc. Numerické riešenie vyčíslime v diskretizačných uzloch diskrétnej časopriestorovej siete, od hustoty ktorej bude závisieť presnosť riešenia. Odchýlky v riešení budú ovplyvnené aj voľbou parametrov vstupujúcich do modelu.

Spomínanú časopriestorovú sieť definujeme nasledujúcim spôsobom: označme počet deliacich bodov intervalu (0,1) prislúchajúceho premennej ζ ako $M \in \mathbb{N}$ a počet deliacich bodov časového intervalu (0, τ) premennej t ako $Q \in \mathbb{N}$. Potom platí

$$\Delta \zeta = \frac{1}{M}$$
 a $\Delta t = \frac{\tau}{Q}.$

Časopriestorovú sieť pre rovnicu (3.3) môžeme potom definovať nasledujúcim spôsobom:

$$\zeta_i = (i-1)\Delta\zeta, \ i = 1, 2, \dots, M+1,$$

 $t_j = (j-1)\Delta t, \ j = 1, 2, \dots, Q+1.$

Hodnotu numerického riešenia budeme v uzle (i, j) označovať $\theta(\zeta_i, t_j) \approx \theta_i^j$ a polohu fázového rozhrania $\nu(t_j) \approx \nu^j$. Časopriestorovú sieť zobrazujeme na Obr. 4.1.



Obr. 4.1: Ilustrácia časopriestorovej siete, v ktorej je naznačený aj výpočet teploty θ v novej časovej vrstve.

Na presnosť numerických riešení vplýva aj spôsob, akým aproximujeme derivácie v diferenciálnych rovniciach. Štandardne sa na aproximáciu používajú dopredné, spätné alebo centrálne diferencie [1]. My sme sa rozhodli na diskretizáciu rovnice vedenia tepla použiť nasledujúce typy [8]:

• pre časovú deriváciu použijeme spätnú diferenciu presnosti $O(\Delta t)$:

$$\frac{\partial \theta(\zeta_i, t_j)}{\partial t} \approx \frac{\theta_i^j - \theta_i^{j-1}}{\Delta t} \qquad \qquad \text{a} \qquad \qquad \frac{\mathrm{d}\nu(t_j)}{\mathrm{d}t} \approx \frac{\nu^j - \nu^{j-1}}{\Delta t},$$

• pre priestorovú deriváciu prvého rádu centrálnu diferenciu presnosti $O(\Delta \zeta^2)$:

$$\frac{\partial \theta(\zeta_i, t_j)}{\partial \zeta} \approx \frac{\theta_{i+1}^j - \theta_{i-1}^j}{2\Delta \zeta},$$

• pre priestorovú deriváciu druhého rádu diferenciu presnosti $O(\Delta \zeta^2)$:

$$\frac{\partial^2 \theta(\zeta_i, t_j)}{\partial \zeta^2} \approx \frac{\theta_{i+1}^j - 2\theta_i^j + \theta_{i-1}^j}{\Delta \zeta^2}$$

Nahradením derivácií v rovnici vedenia tepla (3.3) diferenciami získavame:

$$(1-\nu^{j})^{2}\frac{\theta_{i}^{j}-\theta_{i}^{j-1}}{\Delta t} = \frac{\theta_{i+1}^{j}-2\theta_{i}^{j}+\theta_{i-1}^{j}}{\Delta\zeta^{2}} - (1-\nu^{j})\frac{\theta_{i+1}^{j}-\theta_{i-1}^{j}}{2\Delta\zeta}\zeta_{i}\frac{\nu^{j}-\nu^{j-1}}{\Delta t}.$$
 (4.1)

Použime teraz vzťah $\frac{\zeta_i}{\Delta \zeta} = i - 1$, ktorý vyplýva z definície časopriestorovej siete, a označme $\mu = \frac{\Delta t}{\Delta \zeta^2}$. Po dosadení do (4.1) a úpravách odvodíme

$$(1-\nu^{j})^{2}\theta_{i}^{j-1} = \theta_{i-1}^{j} \left[-\mu - \frac{(i-1)(1-\nu^{j})(\nu^{j}-\nu^{j-1})}{2} \right] + \theta_{i}^{j} \left[(1-\nu^{j})^{2} + 2\mu \right] - \theta_{i+1}^{j} \left[\mu - \frac{(i-1)(1-\nu^{j})(\nu^{j}-\nu^{j-1})}{2} \right].$$

$$(4.2)$$

Skrátene môžeme diferenčnú rovnicu (4.2) vyjadriť v tvare

$$(1 - \nu^j)^2 \theta_i^{j-1} = L_{i-1}^j \theta_{i-1}^j + D_{i-1}^j \theta_i^j + U_{i-1}^j \theta_{i+1}^j,$$
(4.3)

kde:

$$\begin{split} L_{i-1}^{j} &= -\mu - \frac{(i-1)(1-\nu^{j})(\nu^{j}-\nu^{j-1})}{2}, \\ D_{i-1}^{j} &= (1-\nu^{j})^{2} + 2\mu, \\ U_{i-1}^{j} &= -\mu + \frac{(i-1)(1-\nu^{j})(\nu^{j}-\nu^{j-1})}{2}. \end{split}$$

Využitím okrajovej podmienky (3.6b) získame $\theta_1^j = -1 \Rightarrow \theta_2^{j-1} = -L_1^j + D_1^j \theta_2^j + U_1^j \theta_3^j$. Dosadenie druhej okrajovej podmienky (3.6a) do numerickej schémy nám nepomôže, pretože θ_I je v modeli súčasťou hľadaného riešenia, preto zatiaľ len označíme $\theta_I = \theta_{M+1}^j$.

V ďalšej časti vykonáme diskretizáciu podmienky na rozhraní (3.4) a z dostupných podmienok modelu vyjadríme $\theta_I = \theta_{M+1}^j$ tak, aby sme ju mohli využiť v numerickej schéme.

V rovnici (3.4) použijeme na nahradenie jednosmernej derivácie spätnú diferenciu presnosti $O(\Delta\zeta^2)$ v tvare

$$\left. \frac{\partial \theta(\zeta, t)}{\partial \zeta} \right|_{\zeta = 1^{-}} \approx \frac{\theta_{M-1}^{j} - 4\theta_{M}^{j} + 3\theta_{M+1}^{j}}{2\Delta \zeta}$$

na aproximáci
u $\frac{\mathrm{d}\nu(t)}{dt}$ použijeme rovnakú diferenciu ako pri diskretizácii rovnice vedenia tepla. Dosadením získame

$$S\frac{\nu^{j} - \nu^{j-1}}{\Delta t} = \frac{1}{1 - \nu^{j}} \frac{\theta_{M-1}^{j} - 4\theta_{M}^{j} + 3\theta_{M+1}^{j}}{2\Delta\zeta}.$$
(4.4)

Diskretizovanú kinetickú rovnicu (3.7) môžeme zapísať v tvare

$$\frac{\nu^j - \nu^{j-1}}{\Delta t} = -\mathcal{G}\theta_{M+1}^{j-1},$$

a dosadiť do (4.4), čím dostávame

$$-\mathcal{G}S\theta_{M+1}^{j-1} = \frac{1}{1-\nu^{j}} \frac{\theta_{M-1}^{j} - 4\theta_{M}^{j} + 3\theta_{M+1}^{j}}{2\Delta\zeta},$$

a po úpravách

$$\theta_{M-1}^{j} - 4\theta_{M}^{j} + 3\theta_{M+1}^{j} = -2\Delta\zeta \mathcal{G}S(1-\nu^{j})\theta_{M+1}^{j-1}.$$
(4.5)

Teraz môžeme diferenčnú rovnicu (4.3) spolu s (4.5) zapísať v maticovom tvare

$$\begin{pmatrix} D_{1}^{j} & U_{1}^{j} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ L_{2}^{j} & D_{2}^{j} & U_{2}^{j} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & L_{3}^{j} & D_{3}^{j} & U_{3}^{j} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & L_{M-1}^{j} & D_{M-1}^{j} & U_{M-1}^{j} \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & -4 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \theta_{2}^{j} \\ \theta_{3}^{j} \\ \vdots \\ \vdots \\ \theta_{M}^{j} \\ \theta_{M+1}^{j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1-\nu^{j})^{2}\theta_{2}^{j-1} + L_{1}^{j} \\ (1-\nu^{j})^{2}\theta_{3}^{j-1} \\ \vdots \\ \vdots \\ (1-\nu^{j})^{2}\theta_{M}^{j-1} \\ -2\Delta\zeta\mathcal{G}S(1-\nu^{j})\theta_{M+1}^{j-1} \end{pmatrix}.$$

$$(4.6)$$

Zápis (4.6) predstavuje implicitnú numerickú schému pre rovnicu (3.3) [1].

4.2 Programová realizácia

Numerickú schému, ktorú sme odvodili a popísali v predchádzajúcej podkapitole, sme naprogramovali v prostredí *Matlab*.

Pred samotným vytvorením algoritmu na riešenie systému rovníc (4.6), sme v našom programe definovali fyzikálne parametre vstupujúce do modelu (1.9)–(1.13). Uvádzame ich v Tabuľke 4.1. Čitateľa upozorňujeme, že uvedené veličiny sú rozmerné a kvôli prehľadnosti uvádzame ich zápis tak, ako v prvých podkapitolách prvej kapitoly.

Názov parametra	Označenie	Veľkosť	Jednotka
teplota topenia	T_m	0	°C
teplota, na ktorú je kvapalina podchladená	T_{∞}	-1	$^{\circ}\mathrm{C}$
kinetický koeficient	G	10^{-4}	${\rm m~s^{-1}~K^{-1}}$
merná tepelná kapacita	C	4180	$\rm J~kg^{-1}~K^{-1}$
merné latentné teplo	L	334000	$\rm J~kg^{-1}$
súčiniteľ tepelnej vodivosti	k	2,2	$\mathrm{W}~\mathrm{m}^{-1}~\mathrm{K}^{-1}$
hustota vody	ρ	1000	${\rm kg}~{\rm m}^{-3}$

Tabuľka 4.1: Fyzikálne parametre vstupujúce do modelu.

Pre úplnosť uvádzame aj ďalšie veličiny, ktoré sú súčasťou nášho modelu. Tie závisia od voľby parametrov uvedených v Tabuľke 4.1.

V Tabuľke 4.3 čitateľa oboznamujeme aj s ďalšími parametrami, ktoré sme využili pri tvorbe časopriestorovej siete, alebo slúžili na nahradenie ∞ kvôli tomu, že numerické výpočty môžu prebiehať len na konečnej oblasti.

Po definovaní fyzikálnych veličín a ďalších potrebných parametrov vstupujúcich do modelu, prichádzame k hlavnej časti programu, v ktorej v dvoch *for cykloch*, predstavujúcich časopriestorovú sieť, počítame riešenie sústavy (4.6). Rozhodli sme sa, že

Názov parametra	Označenie a spôsob výpočtu	Veľkosť	Jednotka
rozdiel teplôt	$\Delta T = T_m - T_\infty$	1	°C
teplotná difuzivita	$\kappa = rac{k}{C ho}$	$5,75.10^{-7}$	$\mathrm{m}^2~\mathrm{s}^{-1}$

Tabuľka 4.2: Parametre vstupujúce do modelu závisiace od voľby niektorých fyzikálnych parametrov uvedených v Tabuľke 4.1.

Názov parametra	Označenie	Hodnota
ohraničenie priestorovej premennej z	Н	0,05
ohraničenie časovej premennej t	au	8
počet deliacich bodov priestorovej premennej ζ	M	300
počet deliacich bodov časového intervalu $(o; \tau)$	Q	80000
dĺžka priestorového kroku	$\Delta \zeta$	$\frac{1}{300}$
dĺžka časového kroku	Δt	10^{-4}

Tabuľka 4.3: Ďalšie parametre vstupujúce do m	odelu.
---	--------

počiatočné hodnoty $\theta(\zeta, 0)$, resp. $\theta_I(0)$, určíme podľa získaných asymptotických výsledkov (3.9), resp. (3.12). Počiatočnú hodnotu $\nu(0)$ použijeme z podmienky (3.5a).

Keďže podľa (3.3) platí $0 < \zeta < 1 \Rightarrow 0 < \nu(t) < 1$ pre t > 0, v programe sme museli pridať podmienku, ktorou sa výpočet ukončí, ak $\nu(t) > 1$ pre t > 0. Ak taká situácia nastane, vieme numericky určiť aj približnú hodnotu kritického času t_c , od ktorého bude celý systém tvorený len pevnou fázou. Zdôraznime však, že pre numerické riešenie neplatí $\nu(t_c) = 1$, ale platí

$$\nu(t_c) \le 1 \land \nu(t_c + \Delta t) > 1, \tag{4.7}$$

resp. numerický výpočet sa pre $t>t_c$ ukončí.

Numerické výsledky získané pomocou nášho programu uvádzame v nasledujúcej podkapitole. Zdrojový kód sa nachádza v prílohách.

4.3 Numerické výsledky

Predchádzajúcu kapitolu sme venovali odvodeniu asymptotických riešení na konečnej oblasti pre veľké a malé hodnoty S. Keďže cieľom našej práce je ich porovnanie s numerickými riešeniami, numerickú simuláciu vývoja teploty a polohy fázového rozhrania sme sa rozhodli vykonať pre rôzne hodnoty S, a to konkrétne pre $S = 10^{-2}$, S = 1a S = 10. Okrem porovnania riešení sa pozrieme aj na rozdiel hodnôt kritického času t_c , v ktorom celý systém zamrzne — vypočítaného analyticky (3.14) a získaného numericky. Skúmajme najskôr rozdiely medzi riešeniami pre S = 10. V tomto prípade prebieha proces vedenia tepla rýchlejšie ako fázová premena, čiže očakávame pomalý rast fázového rozhrania. Aby v programovej realizácii došlo k zmrznutiu systému, t. j. aby sa dosiahol čas t_c , musíme vhodne zvoliť ohraničenie časového intervalu, ktoré reprezentuje parameter τ . Dosadením parametrov uvedených v Tab. 4.1, Tab. 4.2 a Tab. 4.3 do vzťahu (3.14) pre prípad S = 10 získame analytickú hodnotu kritického času $t_c = 5,1053$ — pripomeňme, že ide o zbezrozmernenú časovú hodnotu. Tým môžeme odôvodniť našu voľbu τ v Tab. 4.3, čiže sme pre istotu zvolili väčšiu hodnotu než analytické t_c .

Vykreslením numerického riešenia pre $\nu(t)$ a jeho porovnaním s asymptotickým riešením na Obr. 4.2 zbadáme pomerne dobrú zhodu medzi obomi riešeniami.



Obr. 4.2: Porovnanie funkcií rastu fázového rozhrania $\nu(t)$ pre S = 10 — numerické riešenie (zelená krivka) vs. asymptotické riešenie (3.16) (modrá krivka) — s vyznačenou hodnotou kritického času $t_c = 4,9454$ prislúchajúcou numerickému riešeniu, pre ktorú platí (4.7).

Už vieme, že asymptotické riešenie — modrá krivka — dosiahne hodnotu 1 v čase $t_c = 5,1053$. Do grafu sme vyznačili aj numerickú hodnotu $t_c = 4,9454$, čiže v programovej realizácii celý systém zamrzne skôr. Práve to je najväčším rozdielom medzi obomi riešeniami. Všimnime si, že začiatok priebehu majú krivky veľmi podobný — je to dôsledkom toho, že $\frac{d\nu(t)}{dt}$ v čase t = 0 je v asymptotickom aj numerickom riešení zvolená rovnako.

Na základe porovnania riešení $\nu(t)$ očakávame, aj vzhľadom na spoločnú počiatočnú podmienku (3.12) pre asymptotické aj numerické riešenie, podobne dobrú zhodu riešení funkcie $\theta_I(t)$. Najväčší rozdiel medzi riešeniami bude opäť v hodnote numerického t_c , kde pre numerické riešenie platí

$$\theta_I(t_c) \ge -1 \land \theta_I(t_c + \Delta t) < -1,$$

resp. numerický výpočet sa pre $t > t_c$ ukončí. Obe riešenia sme vykreslili do jedného grafu a reprezentuje ho Obr. 4.3.



Obr. 4.3: Porovnanie funkcií teploty na fázovom rozhraní $\theta_I(t)$ pre S = 10 — numerické riešenie (zelená krivka) vs. asymptotické riešenie (3.17) (modrá krivka) — s vyznačenou hodnotou kritického času $t_c = 4,9454$ prislúchajúcou numerickému riešeniu.

Keďže numerické riešenie existuje len do času $t_c = 4,9454$ vyznačenom na Obr. 4.3, uvedený graf už nezachytáva situáciu, keď pre asymptotické riešenie platí $\theta_I(t_c) = -1$, kde, ako sme už uviedli, analytické $t_c = 5,1053$. Medzi obomi riešeniami vidíme veľmi dobrú zhodu priebehu $\theta_I(t)$, rozchádzajú sa len kvôli rozdielnym hodnotám kritického času t_c .

Pozrime sa teraz na rozdiely medzi asymptotickými a numerickými riešeniami pre $S = 10^{-2}$. Pri malých hodnotách Stefanovho čísla prebieha fázová premena rýchlejšie ako proces vedenia tepla. Pre obe riešenia preto očakávame menšie hodnoty t_c , čiže voľba τ uvedená v Tab. 4.3 určite neohrozí dosiahnutie zmrznutia celého systému v programovej realizácii. Hodnotu kritického času pre asymptotické riešenie získame dosadením do (3.14), ako sme už popísali pre prípad S = 10, kde jediný rozdiel je práve v hodnote S — teraz $S = 10^{-2}$, a získame $t_c = 0, 1103$.

Aj teraz do spoločného grafu, zobrazeného na Obr. 4.4, zakreslíme numerické aj asymptotické riešenie $\nu(t)$. Vidíme prakticky úplnú zhodu medzi obomi riešeniami.

Ak by sme v programovej realizácii nezvolili pre čas t = 0 lineárnu teplotu podľa (3.18), nemohli by sme očakávať, že teplota v kvapalnej fáze počas krátkeho času potrebného na fázovú premenu, daného malým S, bude blízka lineárnemu profilu. Ten bol predpokladom pre nájdenie asymptotických riešení v predchádzajúcej kapitole $\forall t$. To znamená, že numerické a asymptotické riešenia by boli od seba veľmi odlišné — aby sme sa tejto situácii vyhli, pre t = 0 sme v našom programe zaviedli spomenutú podmienku (3.18). Okrem toho je $\theta_I(0)$ na základe (3.12) pre malé S blízka -1, t. j. teplota



Obr. 4.4: Porovnanie funkcií polohy fázového rozhrania $\nu(t)$ pre $S = 10^{-2}$ — numerické riešenie (zelená krivka) vs. asymptotické riešenie (3.16) (modrá krivka) — s vyznačenou hodnotou kritického času $t_c = 0,1102$ prislúchajúcou numerickému riešeniu, pre ktorú platí (4.7).

v kvapalnej fáze je vo všetkých časových okamihoch pri odvodzovaní asymptotického aj hľadaní numerického riešenia málo odlišná od -1. Z tohto dôvodu má funkcia $\nu(t)$ v oboch prípadoch využitím (3.7) približne nasledujúci tvar:

$$\frac{\mathrm{d}\nu(t)}{\mathrm{d}t} = -\mathcal{G}\theta_I \approx -\mathcal{G}(-1) = \mathcal{G},\tag{4.8}$$

a teda $\nu(t) \approx \mathcal{G}t$, a to je dôvodom, prečo pre malé S vychádza veľmi dobrá zhoda medzi numerickým a asymptotickým riešením.

Veľmi dobrú zhodu oboch riešení aj pre funkciu $\theta_I(t)$ ilustrujeme na Obr. 4.5. Citateľa upozorňujeme na fakt, že horizontálnu os, reprezentujúcu zbezrozmernený čas t, znázorňujeme cez bod -1 na vertikálnej osi, reprezentujúcu funkciu θ_I . Ako sme vyššie uviedli, hodnoty θ_I očakávame pre obe riešenia blízke $-1 \forall t$, a zobrazenie horizontálnej osi klasickým spôsobom cez bod 0 na vertikálnej osi by viedlo k neprehľadnému grafu, v ktorom by sa zdalo, že obe riešenia sú identické.

Rozdiel medzi analytickým a numerickým t_c je v absolútnej hodnote rovný 10^{-4} , preto na tomto grafe nie je taký rozdiel medzi riešeniami v numerickom t_c , ako to bolo v prípade S = 10 na Obr. 4.3.

Porovnajme teraz numerické a asymptotické riešenie pre S = 1. Z matematického hľadiska nám totiž nič nebráni vyčísliť numerické riešenie pre akúkoľvek hodnotu parametra S. V tomto prípade však nemôžeme očakávať dobrú zhodu medzi riešeniami, nakoľko pri hľadaní asymptotického riešenia sme predpokladali (3.9) — lineárnu teplotu $\forall t$. Ako sme už uviedli v predchádzajúcej kapitole, tento predpoklad je zmysluplným pre $S \to \infty$, čiže vtedy môžeme očakávať podobnosť numerických a asymptotických výsledkov, resp. ak ho použijeme aj pre $S \to 0$, vďaka (4.8) sú obe riešenia takmer



Obr. 4.5: Porovnanie funkcií teploty na fázovom rozhraní $\theta_I(t)$ pre $S = 10^{-2}$ — numerické riešenie (zelená krivka) vs. asymptotické riešenie (3.17) (modrá krivka) — s vyznačenou hodnotou kritického času $t_c = 0,1102$ prislúchajúcou numerickému riešeniu.

identické. To znamená, že pri inej voľbe hodnoty parametra S, v našom prípade S = 1, budú výsledky numerického a asymptotického riešenia odlišné.

Pozrime sa najskôr riešenia $\nu(t)$ — pre S = 1 ich ilustrujeme na Obr. 4.6. Ako sme očakávali, krivky reprezentujúce numerické a asymptotické výsledky sa nezhodujú.



Obr. 4.6: Porovnanie funkcií polohy fázového rozhrania $\nu(t)$ pre S = 1 — numerické riešenie (zelená krivka) vs. asymptotické riešenie (3.16) (modrá krivka) — s vyznačenou hodnotou kritického času $t_c = 05022$ prislúchajúcou numerickému riešeniu, pre ktorú platí (4.7).

Nezhoda medzi riešeniami nás neprekvapuje, nakoľko z matematického hľadiska ide o riešenia dvoch rôznych úloh — numerické riešenie pracuje s úlohou s lineárnou počiatočnou teplotou, kde (3.9) platí len pre t = 0, a v ďalších časových okamihoch je teplota daná rovnicou vedenia tepla, pričom asymptotické riešenie sme odvodili s predpokladom platnosti lineárnej teploty (3.9) $\forall t$. Na základe Obr. 4.6 môžeme nahliadnuť, že celý systém zamrzne v programovacej realizácii skôr, kde pre kritický čas platí $t_c = 0,5022$. Dosadením do (3.14) dostaneme $t_c = 0,6053$ — vidíme, že aj rozdiel medzi týmito časmi je omnoho väčší než v prípade S = 10 a $S = 10^{-2}$.

Podobný výsledok, t. j. odlišné výsledky numerického a asymptotického riešenia môžeme pozorovať aj na Obr. 4.7, na ktorom zobrazujeme priebeh funkcie $\theta_I(t)$ pre numerické aj asymptotické riešenie.



Obr. 4.7: Porovnanie funkcií teploty na fázovom rozhraní $\theta_I(t)$ pre S = 1 — numerické riešenie (zelená krivka) vs. asymptotické riešenie (3.17) (modrá krivka) — s vyznačenou hodnotou kritického času $t_c = 0,5022$ prislúchajúcou numerickému riešeniu.

Nezhoda riešení $\theta_I(t)$ zobrazená na Obr. 4.7 súvisí s rôznymi hodnotami funkcie $\nu(t)$ v prípade numerického a asymptotického riešenia, a platí pre ňu odôvodnenie, ktoré sme uviedli práve pri vysvetlení odlišných riešení $\nu(t)$ v tejto časti našej práce.

Zaujímavé numerické riešenia získame voľbou $\theta(\zeta, 0) \equiv -1$, čiže podmienku (3.12) nahradíme $\theta_I(0) = -1$. Sledujme, ako sa pre $S = 10^{-2}$, S = 1 a S = 10 mení priebeh $\nu(t)$ — Obr. 4.8 a $\theta_I(t)$ — Obr. 4.9. Čitateľa upozorňujeme na fakt, že v grafe $\theta_I(t)$ pre $S = 10^{-2}$ horizontálnu os, reprezentujúcu zbezrozmernený čas t, znázorňujeme cez bod -1 na vertikálnej osi, reprezentujúcu funkciu θ_I .

Všimnime si, že θ_I nie je identicky rovná -1, ako by sme mohli očakávať na základe asymptotických riešení odvodených v tretej kapitole. Tie sú však podmienené predpokladom lineárneho profilu $\theta(\zeta, t) \forall t$ a voľbou počiatočnej hodnoty teploty na rozhraní v tvare (3.12). Vidíme, že $\theta_I(t)$ najskôr rastie z hodnoty -1 — čím väčšie S, tým prudší nárast — a potom klesá späť k hodnote -1.

Uvedený efekt môže súvisieť s uvoľňovaním latentného tepla na fázovom rozhraní: množstvo uvoľneného tepla je úmerné hodnote Stefanovho čísla, na jeho odvedenie z fázového rozhrania do kvapalnej fázy je potrebný nenulový teplotný gradient na fázovom rozhraní, a teda hodnota $\theta_I(t)$ rôzna od -1. V prípade, ak uvažujeme lineárny tep-



Obr. 4.8: Porovnanie numerických riešení pre $S = 10^{-2}$, S = 1 a S = 10 pre funkciu $\nu(t)$ pri voľbe $\theta(\zeta, 0) = -1$ a $\theta_I(0) = -1$. V každom grafe sme vyznačili numericky získanú hodnotu kritického času t_c , pre ktorý platí (4.7).



Obr. 4.9: Porovnanie numerických riešení pre $S = 10^{-2}$, S = 1 a S = 10 pre funkciu $\theta_I(t)$ pri voľbe $\theta(\zeta, 0) = -1$ a $\theta_I(0) = -1$. V každom grafe sme vyznačili numericky získanú hodnotu kritického času t_c , pre ktorý platí (4.7).

lotný profil v kvapalnej fáze namiesto rovnice vedenia tepla, je predpoklad $\theta_I(0) = -1$ (teplota v kvapalnej fáze identicky rovná -1) ekvivalentný predpokladu S = 0 — pri fázovej premene nedochádza k uvoľňovaniu latentného tepla, a teda nenulový gradient teploty v kvapalnej fáze nie je potrebný.

Numerickú simuláciu vývoja teploty a polohy fázového rozhrania sme sa rozhodli vykonať aj pre voľbu počiatočnej lineárnej teploty v tvare (3.9) a počiatočnú teplotu na rozhraní $\theta_I(0) = 0$. Výsledok našich simulácii pre $S = 10^{-2}$, S = 1 a S = 10 ilustrujeme pre $\nu(t)$ na Obr. 4.10, a pre $\theta_I(t)$ na Obr. 4.11. Zdôraznime, že v tomto prípade nemá zmysel porovnávať numerické výsledky s asymptotickými riešeniami odvodenými v predchádzajúcej kapitole, nakoľko tie platia len pri voľbe $\theta_I(0)$ v tvare (3.12).

Na Obr. 4.10 pozorujeme rozdielny priebeh funkcie polohy fázového rozhrania, relatívne dobrá zhoda s predchádzajúcou simuláciou nastáva v prípade, ak S = 10. Kvôli odlišným podmienkam na teplotu fázového rozhrania v počiatočnom čase — teraz $\theta_I(0) = 0$, v predchádzajúcej simulácii $\theta_I(0) = -1$, nás veľké rozdiely medzi Obr. 4.9 a Obr. 4.11 neprekvapujú. Vidíme, že $\theta_I(t)$ v dôsledku neustáleho ochladzovania systému klesá k hodnote -1. Rozdiely v riešeniach sa prejavujú aj v rôznych hodnotách kritického času t_c , ktorý sme do všetkých grafov vyznačili.



Obr. 4.10: Porovnanie numerických riešení pre $S = 10^{-2}$, S = 1 a S = 10 funkciu $\nu(t)$ pri voľbe lineárnej $\theta(\zeta, 0)$ v tvare (3.9) a $\theta_I(0) = 0$. V každom grafe sme vyznačili numericky získanú hodnotu kritického času t_c , pre ktorý platí (4.7).



Obr. 4.11: Porovnanie numerických riešení pre $S = 10^{-2}$, S = 1 a S = 10 funkciu $\theta_I(t)$ pri voľbe lineárnej $\theta(\zeta, 0)$ v tvare (3.9) a $\theta_I(0) = 0$. V každom grafe sme vyznačili numericky získanú hodnotu kritického času t_c , pre ktorý platí (4.7).

Záver

Cieľom diplomovej práce bola numerická simulácia vývoja teploty a polohy fázového rozhrania Stefanovej úlohy s podchladenou kvapalnou fázou. Čitateľa sme oboznámili so základným modelom a s modelom s kinetickým podchladením, uviedli sme potrebné úpravy a transformácie pre nájdenie analytických aj numerických riešení. Našli sme analytické aj asymptotické riešenia, a numerickými experimentmi sme získali viacero numerických výsledkov, ktoré sme znázornili graficky. Ďalším cieľom bolo porovnanie získaných numerických výsledkov s aproximatívnymi analytickými riešeniami. Porovnanie sme vykonali pre rôzne voľby Stefanovho čísla použitím špeciálnych počiatočných podmienok v našej programovej realizácii, vďaka ktorým bolo porovnanie zmysluplným. Vychádzali sme najmä z prác [2], [4], [9], [10].

Prvú kapitolu sme venovali zhrnutiu poznatkov o Stefanovej úlohe, uviedli sme odvodenie Stefanovej podmienky a uvedené modely sme zapísali v matematickom vyjadrení — základný na polonekonečnej oblasti (1.5)–(1.7), model s kinetickým podchladením na polonekonečnej oblasti (1.9)–(1.13) a model s kinetickým podchladením na konečnej oblasti (1.14)–(1.18). V závere kapitoly sme všetky previedli na bezrozmerný tvar. Okrem toho sme ich názorne ilustrovali prehľadnými obrázkami.

Analytickým riešením základného modelu a nájdením aproximatívnych analytických riešení modelu s kinetickým podchladením na polonekonečnej oblasti sme sa zaoberali v druhej kapitole. Základný model sme transformovali z problému s voľnou hranicou na problém s hranicou fixovanou, čo nám umožnilo nájsť jeho analytické riešenie (2.8). Nakoľko model s kinetickým podchladením analytické riešenie nemá, zapísali sme spôsob, akým môžeme nájsť aproximatívne (asymptotické) analytické riešenia. Tie sme pre prípad $S \to \infty$, resp. S < 1 uviedli — (2.12), resp. (2.21) — kde v druhom prípade sme na nájdenie aproximatívneho riešenia opäť vykonali transformáciu na fixovanú hranicu.

V tretej kapitole sme hľadali asymptotické riešenie úlohy s kinetickým podchladením na konečnej oblasti. Transformovali sme ju na úlohu s fixovanou hranicou a matematicky zapísali (3.3)–(3.7). Zaviedli sme konštantu t_c predstavujúcu kritický čas, v ktorom celý systém v dôsledku neustáleho ochladzovania zamrzne, a zapísali ďalšie podmienky, ktoré musí asymptotické riešenie spĺňať — (3.8a) a (3.8b). Hľadanie riešení sme rozdelili na prípady $S \to \infty$ a $S \to 0$. Odôvodnili sme zmysluplnosť apro-

Záver

ximácie teploty lineárnou funkciou a odvodili asymptotické riešenia (3.16)–(3.18). Prínosom našej práce je aplikovanie uvedenej aproximácie na model s kinetickou rovnicou. Uviedli sme aj limitné riešenia pre malé hodnoty Stefanovho čísla. Ďalej sme asymptotické riešenie porovnali s riešením základného modelu na konečnej oblasti (3.27), ktoré sme v tejto časti vypočítali. Obe riešenia sme porovnali graficky pre rôzne voľby Stefonovho čísla.

Záverečná kapitola obsahuje numerické experimenty na modeli s kinetickým podchladením, ktoré sme vykonali. Keďže sme numerické riešenia hľadali pomocou metódy konečných diferencií, v tejto časti sme definovali časopriestorovú sieť, v uzloch ktorej sme riešenia vyčísľovali, a ilustrovali sme ju na Obr. 4.1 Vykonali sme potrebné diskretizácie derivácií a odvodili sme systém diferenčných rovníc, ktorý sme zapísali maticovo, a získali sme tak implicitnú numerickú schému (4.6). Vytvorili sme program v prostredí *Matlab* a pomocou neho sme vykonali numerické simulácie pre rôzne voľby parametra S a počiatočné podmienky modelu. Získané výsledky sme prehľadne graficky znázornili: Obr. 4.2 — Obr. 4.11, a pri špeciálnej voľbe počiatočných podmienok aj porovnali s asymptotickými riešeniami, ktoré sme odvodili v tretej kapitole. To považujeme za prínos našej práce a splnenie stanovených cieľov — numericky simulovať vývoj teploty a polohy fázového rozhrania v podchladenom tuhnúcom jednozložkovom systéme a porovnať numerické riešenia s aproximatívnymi analytickými riešeniami.

Literatúra

- [1] Babušíková, J.: Prednášky z numerického modelovania, FMFI UK, Bratislava, 2017
- [2] Batchelor, G. K., Moffatt, H. K., Worster, M. G.: Perspectives in Fluid Dynamics - A Collective Introduction to Current Research, Cambridge University Press, Cambridge, 2000
- [3] Dewynne, J. N. a kol.: Asymptotic behaviour of solutions to the Stefan problem with a kinetic condition at the free boundary. Journal of the Australian Mathematical Society, Series B 31 (1989), 81-96
- [4] Font, F., Mitchell, S. L., Myers, T. G.: One-dimensional solidification of supercooled melts. International Journal of Heat and Mass Transfer, 62 (2013), 411-421
- [5] Guba, P.: Prednášky zo základných princípov modelovania v prírodných a technických vedách, FMFI UK, Bratislava, 2016
- [6] Jiji, L. M.: Heat Conduction, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin, 2009
- [7] Kyselica, J.: Nelineárna konvekcia pri fázovej premene. Dizertačná práca, FMFI UK, Bratislava, 2014
- [8] Kyselica J.: osobná konzultácia, FMFI UK, Bratislava, 2017-2018
- [9] Meyer, C.: Solidification of Fluids, poznámky k prednáškam, Harvard University, Harvard, 2013, dostupné na internete (8.1.2018): people.seas.harvard.edu/~colinrmeyer/Solidification%20of%20Fluids%20Notes.pdf
- [10] Papranec, L.: Numerické riešenie jednorozmerného Stefanovho problému na konečnej oblasti. Bakalárska práca, FMFI UK, Bratislava, 2011
- [11] Umantsev, A.: Motion of a plane front during crystallization. Soviet physics, crystallography, 30 (1) (1985), 87-91
- [12] Umantsev, A., Vinogradov, V., Borisov, V.: Mathematical model of growth of dendrites in a supercooled melt. Soviet physics, crystallography, 30 (3) (1985), 262-265

Príloha A

Zdrojový kód v prostredí Matlab.

```
% - - - - definovanie fyzikalnych velicin - - - -
 RT_m = 0;
 RT inf = -1;
 deltaRT = RT_m - RT_inf;
 G = 10^{(-4)};
 C = 4180;
 L = 334000;
 S = 10;
 k = 2.2;
 rho = 1000;
 kappa = k/(C * rho);
 RH = 0.05;
 tau = 8;
 % - - - - zbezrozmernenie - - - -
 T_m = 0;
 T_inf = -1;
 g = RH*G*deltaRT / kappa;
 % - - - - definovanie casopriestorovej siete - - - -
 M = 300;
 Q = 80000;
 deltazeta = 1 / M;
 deltat = tau / Q;
 mu = deltat / (deltazeta^2);
 % - - - - definovanie pociatocnych stavov - - - -
 mat = zeros(M,M);
 nu = zeros(0+1,1);
 theta = - \text{ ones}(M+1, O+1);
 prav = zeros(M+1,1);
 Qmax = Q;
 % z asymptotickeho riesenia
 theta(M+1,1) = 1 / (- S * g - 1);
theta(1:M,1) = - 1 + (1 + theta(M+1,1)) * linspace(0, 1-1/M, M);
 % - - - - - vypocet - - - -
[for j = 2:(Q+1)
   nu(j) = nu(j-1) - deltat * g * theta(M+1,j-1);
   if nu(j) > 1
      Qmax = j-1;
      break
   end
     for i = 2:(M+1)
       L(i-1) = -mu - (((i - 1) * (1 - nu(j)) * (nu(j) - nu(j-1))) / 2);
       D(i-1) = (1 - nu(j))^2 + 2 * mu;
       U(i-1) = -mu + (((i - 1) * (1 - nu(j)) * (nu(j) - nu(j-1))) / 2);
       if i == 2 mat(i-1,i-1:i) = [D(i-1), U(i-1)];
       elseif i == M+1 mat(i-1,i-3:i-1) = [1, -4, 3];
       else mat(i-1,i-2:i) = [L(i-1), D(i-1), U(i-1)];
       end
    end
   prav(:) = theta(:,j-1) * (1 - nu(j))^2;
  prav(2) = theta(2,j-1) * (1 - nu(j)) ^2 + L(1);
prav(M+1) = - g * theta(M+1,j-1) * S * (1 - nu(j)) * 2 * deltazeta;
theta(2:M+1,j) = mat \ prav(2:M+1);
 end
```

Obr. 4.12: Naša programová realizácia na riešenie (4.6).