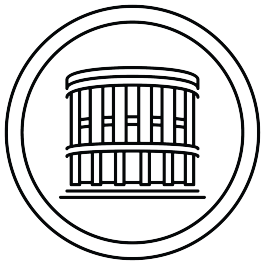
UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY



NUMERICKÁ SIMULÁCIA FÁZOVEJ ZMENY METÓDOU ENTALPIE

DIPLOMOVÁ PRÁCA

2024 Bc. Juliána JAVORSKÁ

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

NUMERICKÁ SIMULÁCIA FÁZOVEJ ZMENY METÓDOU ENTALPIE

DIPLOMOVÁ PRÁCA

Študijný program:	Ekonomicko-finančná matematika a modelovanie
Študijný odbor:	Matematika
Školiace pracovisko:	Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Vedúci práce:	doc. RNDr. Peter Guba, PhD.

Bratislava 2024 **Bc. Juliána JAVORSKÁ**





Univerzita Komenského v Bratislave
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

ZADANIE ZÁVEREČNEJ PRÁCE

Meno a priezvisko študenta: Bc. Juliána Javorská
Študijný program: ekonomicko-finančná matematika a modelovanie (Jednoodborové štúdium, magisterský II. st., denná forma)
Študijný odbor: matematika
Typ záverečnej práce: diplomová
Jazyk záverečnej práce: slovenský
Sekundárny jazyk: anglický

Názov: Numerická simulácia fázovej zmeny metódou entalpie
Numerical simulation of phase-change processes by enthalpy method

Anotácia: Stefanova úloha. Metóda entalpie. Konečno-objemová diskretizácia.

Cieľ: Voľné hranice sú súčasťou matematických modelov chemických reakcií, fázových zmien alebo oceňovania opcií. Cieľom práce je naštudovať a implementovať algoritmus metódy entalpie pre úlohy s voľnou hranicou.

Vedúci: doc. RNDr. Peter Guba, PhD.
Katedra: FMFI.KAMŠ - Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Vedúci katedry: prof. RNDr. Marek Fila, DrSc.

Dátum zadania: 10.01.2023

Dátum schválenia: 11.01.2023 prof. RNDr. Daniel Ševčovič, DrSc.
garant študijného programu

.....
študent

.....
vedúci práce

Poďakovanie Touto cestou by som sa chcela poďakovať svojmu vedúcemu diplomovej práce Doc. RNDr. Petrovi Gubovi, PhD. za jeho motiváciu, povzbudenie, ochotu, trpezlivosť a odborné rady, ktoré mi pomohli pri písaní tejto práce.

Abstrakt

JAVORSKÁ, Juliána: Numerická simulácia fázovej zmeny metódou entalpie [Diplomová práca], Univerzita Komenského v Bratislave, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky; vedúci práce: doc. RNDr. Peter Guba, PhD., Bratislava, 2024, 47 s.

V práci sa zaoberáme matematickým modelom pre popis fázovej premeny jednozložkových materiálov (Stefanova úloha). Model pozostáva z parciálnych diferenciálnych rovníc difúzneho typu pre kvapalnú a pevnú fázu a obyčajnej diferenciálnej rovnice pre fázové rozhranie. Model preformulujeme v termínoch novej závislej premennej, ktorá reprezentuje vnútornú energiu systému (entalpiu). Entalpická formulácia je výhodná z pohľadu numerickej implementácie, pretože sa vyhýba potrebe explicitne sledovať polohu fázového rozhrania. Získané numerické riešenia pre vývoj teploty v oboch fázach a polohy fázového rozhrania porovnáme so sebepodobnými riešeniami, ktoré sú známe pre jednofázový polonekonečný prípad bez advekcie tepla.

Kľúčové slová: úloha s voľnou hranicou, rovnica vedenia tepla, Stefanova úloha, metóda entalpie, numerické metódy.

Abstract

JAVORSKÁ, Juliána: Numerical simulation of phase-change processes by enthalpy method [Master Thesis], Comenius University in Bratislava, Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Department of Applied Mathematics and Statistics; Supervisor: doc. RNDr. Peter Guba, PhD., Bratislava, 2024, 47 p.

In this thesis, we consider a mathematical model for the phase transformation of single-component materials (Stefan problem). The model consists of diffusion-type partial differential equations for the liquid and solid phases and an ordinary differential equation for the phase interface. We reformulate the model in terms of a new dependent variable that represents an internal energy of the system (enthalpy). The enthalpy formulation is advantageous from the viewpoint of numerical implementation as it avoids the need to explicitly track the position of the phase interface. We compare the obtained numerical solutions for the evolution of temperature in both phases and the position of the phase interface with self-similar solutions known for the single-phase semi-infinite case without heat advection.

Keywords: free boundary problem, heat equation, Stefan problem, enthalpy method, numerical methods.

Obsah

Úvod **8**

1 Entalpická formulácia: spojitý prípad **10**

1.1 Entalpia 10

1.2 Vzťah T vs. H 11

2 Entalpická formulácia: Diskrétny prípad **14**

2.1 Metóda konečných objemov 14

2.2 Diskrétna aproximácia tepelného toku 16

3 Difúzia tepla (bez fázovej premeny) **20**

3.1 Podobnostné riešenie 20

3.2 Entalpická formulácia difúzie 21

3.3 Numerická implementácia 25

4 Problém jednostrannej fázovej premeny **29**

4.1 Podobnostné riešenie: Rozmerný tvar 29

4.2 Podobnostné riešenie: Bezrozmerný tvar 31

4.3 Entalpická formulácia: Rozmerný tvar 32

4.4 Entalpická formulácia: Bezrozmerný tvar 33

4.5 Numerická implementácia 36

4.5.1 Zmena parametra S 41

4.5.2 Zmena koeficientu $k(\Phi)$ 43

Záver **46**

Zoznam použitej literatúry **47**

Úvod

Úlohy s voľnou hranicou sa vyskytujú v rôznych oblastiach, ako je napríklad prenos tepla s fázovou zmenou, chemické reakcie alebo modelovanie finančných javov ako americké opcie. Tieto problémy zahŕňajú modelovanie javov, kde hranice medzi rôznymi fázami alebo regiónmi nie sú vopred určené a vyvíjajú sa v priebehu času. Špeciálnym druhom úlohy s voľnou hranicou pre parciálne diferenciálne rovnice je v matematike Stefanov problém [7]. Na konci 19. storočia, Josef Stefan sformuloval úlohu, v ktorej skúmal teplotný profil a vývoj hranice medzi tuhnúcou vodou a ľadom [1]. Tento model pozostáva z parciálnych diferenciálnych rovníc pre kvapalnú a pevnú fázu a obyčajnej diferenciálnej rovnice pre fázové rozhranie.

Analytické riešenie Stefanovych problémov je obmedzené iba na jednoduché geometrie a polonekonečné oblasti. V závislosti od formulácie Stefanovej úlohy a okrajových podmienok môže byť analytické riešenie navyše veľmi komplikované a náročné na vyčíslenie. Pokiaľ ide o numerický prístup, existuje niekoľko schém na riešenie úloh tohto typu. Prvý typ predstavujú tzv. front-tracking metódy/schémy, ktoré však nie je jednoduché implementovať, najmä pokiaľ je potrebné sledovať polohu fázového rozhrania. Druhý typ predstavujú tzv. entalpické metódy, pri ktorých sledovanie vývoja polohy fázového rozhrania nie je relevantné [7].

Cieľom diplomovej práce je naštudovať a implementovať algoritmus metódy entalpie pre úlohy s voľnou hranicou. Budeme sa zaoberať konštrukciou a numerickým riešením matematického modelu pre popis fázovej premeny jednozložkového materiálu na konečnej jednorozmernej oblasti. V úvode prvej kapitoly preformulujeme rovnicu vedenia tepla tak, aby bola vyjadrená pomocou entalpie a tepelného toku, čo predstavuje prvý krok k odvodeniu entalpickej metódy. V druhej kapitole metódou konečných objemov odvodíme diskrétny prípad entalpickej metódy, nevyhnutný pre numerickú implementáciu. Priestorovú oblasť aproximujeme množstvom „konečných objemov“, pričom čas sa bude meniť v diskrétnych krokoch [1]. Tretia kapitola sa zaoberá difúznym vedením tepla, v ktorom nedochádza k zmene fázy. Na tomto zjednodušenom modeli si vysvetlíme základné princípy, ktoré neskôr budeme aplikovať v zložitejšom prípade so zmenou fázy. Pre difúznu úlohu najskôr predstavíme jej sebepodobné riešenie, a následne získame numerické riešenie metódou entalpie. Podobnostné a entalpické riešenie v bezrozmernom tvare kvantitatívne

porovnáme.

V záverečnej kapitole odvodíme a implementujeme algoritmus metódy entalpie pre úlohu s voľnou hranicou, tzv. jednostranný Stefanov problém. Numerické riešenie získané metódou entalpie porovnáme s príslušným sebepodobným riešením. Analyzujeme tiež citlivosť riešenia na bezrozmerných parametroch úlohy (Stefanovo číslo S a fázovo - závislá tepelná vodivosť $k = k(\Phi)$).

1 Entalpická formulácia: spojitý prípad

Typický Stefanov problém sa zaoberá vývojom hranice medzi dvoma fázami materiálu, ktorý prechádza fázovou zmenou. Základné fyzikálne pojmy a veličiny, ktoré sú kľúčové pre formuláciu úloh Stefanovho typu, základné mechanické vlastnosti tekutín, vlastnosti fázového diagramu ako aj matematickú formuláciu jednorozmerného Stefanovho problému (fázová premena jednozložkového materiálu – tuhnutie vody na ľad) na polonekonečnej oblasti sme odvodili v [5]. V tejto kapitole plynule nadviažeme na koniec bakalárskej práce, kde sme predstavili reformuláciu Stefanovej úlohy v termínoch entalpie, umožňujúcej lepšiu numerickú implementáciu. Tento spôsob formulácie je výhodný, pretože sa vyhýba explicitnému sledovaniu polohy fázového rozhrania. V tejto kapitole budeme postupovať podľa [4]. Všetky premenné v tejto časti sú uvedené v rozmernom tvare.

1.1 Entalpia

V prvej podkapitole zo štandardnej rovnice vedenia tepla odvodíme tzv. primitívny tvar rovnice vedenia tepla vyjadrený pomocou entalpie H a tepelného toku Q.
Štandardný tvar rovnice vedenia tepla je daný rovnicou

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T, \tag{1.1}$$

kde $\kappa = k/\rho C$ predstavuje teplotnú difuzivitu. V jednorozmernom prípade, ktorým sa v tejto práci zaoberáme má táto rovnica tvar

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, \tag{1.2}$$

kde k je tepelná vodivosť predstavujúca mieru schopnosti materiálu viesť teplo, špecifické teplo C predstavuje množstvo tepelnej energie potrebné na zvýšenie teploty jednotkovej hmotnosti materiálu o 1°C bez zmeny fázy a ρ je hustota materiálu.

Z Fourierovho zákona vieme, že ak sú časti materiálu udržiavané pri rôznych teplotách, tepelný tok $\vec{q}$ smeruje vždy v smere záporného teplotného gradientu, t.j z oblasti s vyššou teplotou do oblasti s nižšou teplotou

$$\vec{q} = -k \nabla T. \tag{1.3}$$

Na základe predchádzajúcej rovnice odvodíme vzťah pre objemový tepelný tok Q v jednorozmere

$$Q = -k\frac{\partial T}{\partial z}. \tag{1.4}$$

Objemovú entalpiu H definujeme ako množstvo entalpie v jednotkovom objeme v tvare

$$H = \rho C T. \tag{1.5}$$

Pomocou rovníc (1.4) a (1.5) následne upravíme rovnicu (1.2) na tvar

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial Q}{\partial z}. \tag{1.6}$$

Táto rovnica predstavuje primitívny tvar rovnice vedenia tepla vyjadrený v termínoch entalpie H a tepelného toku Q.

1.2 Vzťah T vs. H

Na to, aby sme vedeli určiť množstvo entalpie, je potrebné predpísať vzťah medzi teplotou T a entalpiou H v jednotlivých fázach. V termínoch entalpie definujeme nasledovné fázy

$$H(z,t) \leq -\rho_S L, \qquad \text{pevná fáza,} \tag{1.7}$$

$$-\rho_S L < H(z,t) < 0, \qquad \text{dvojfázová oblasť,} \tag{1.8}$$

$$0 \leq H(z,t), \qquad \text{kvapalná fáza,} \tag{1.9}$$

kde ρ_S predstavuje hustotu pevnej fázy a L predstavuje latentné teplo. Nulovú hodnotu entalpie sme zvolili tak, aby zodpovedala teplote tuhnutia kvapalnej fázy T_f. Pre jednozložkový systém je táto teplota konštantná.

V dvojfázovej oblasti podiel pevnej fázy ϕ určíme vzťahom

$$\phi = -\frac{H(z,t)}{\rho_S L}, \qquad -\rho_S L < H(z,t) < 0, \tag{1.10}$$

pričom v pevnej a kvapalnej fáze platí

$$\phi = 1, \qquad H(z,t) \leq -\rho_S L, \tag{1.11}$$

$$\phi = 0, \qquad 0 \leq H(z,t). \tag{1.12}$$

Entalpiu H pre tuhú fázu, dvojfázovú oblasť a pre kvapalnú fázu môžeme vyjadriť nasledovne

$$H(z,t) = \begin{cases} \displaystyle\int_{T_f}^{T(z,t)} \rho_S C_S(T')\,\mathrm{d}T' - \rho_S L, & T(z,t) < T_f, \\ -\rho_S L\phi, & T(z,t) = T_f, \\ \displaystyle\int_{T_f}^{T(z,t)} \rho_L C_L(T')\,\mathrm{d}T', & T(z,t) > T_f, \end{cases} \tag{1.13}$$

kde ρ_S a ρ_L predstavujú hustotu pevnej fázy a kvapaliny a C_S a C_L predstavujú mernú tepelnú kapacitu pevnej fázy a kvapaliny. Za predpokladu, že sú parametre C_S a C_L nezávislé od teploty T, potom pre pevnú fázu platí

$$H(z,t) = \rho_S C_S \int_{T_f}^{T(z,t)} \mathrm{d}T' - \rho_S L = \rho_S C_S \Big[T(z,t) - T_f\Big] - \rho_S L, \quad T(z,t) < T_f, \tag{1.14}$$

z čoho pre teplotu T v pevnej fáze plynie

$$T(z,t) = T_f + \frac{H(z,t) + \rho_S L}{\rho_S C_S}, \quad H(z,t) \leq -\rho_S L. \tag{1.15}$$

Pre kvapalnú fázu platí

$$H(z,t) = \rho_L C_L \int_{T_f}^{T(z,t)} \mathrm{d}T' = \rho_L C_L \Big[T(z,t) - T_f\Big], \quad T(z,t) > T_f, \tag{1.16}$$

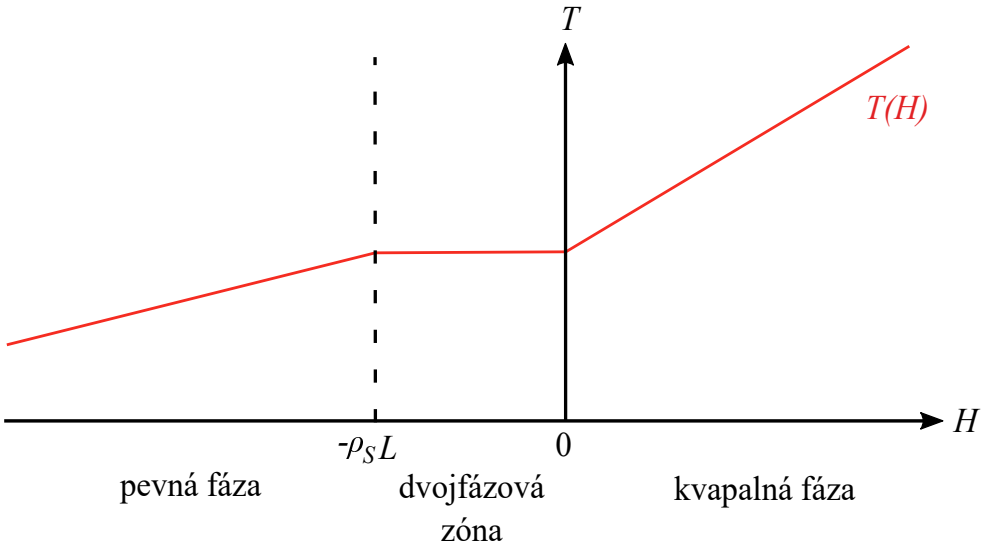
z čoho pre teplotu T v kvapalnej fáze plynie

$$T(z,t) = T_f + \frac{H(z,t)}{\rho_L C_L}, \quad 0 \leq H(z,t). \tag{1.17}$$

Teplotu T v tuhej fáze, dvojfázovej oblasti a v kvapalnej fáze môžeme vyjadriť nasledujúcimi vzťahmi

$$T(z,t) = \begin{cases} T_f + \dfrac{H(z,t) + \rho_S L}{\rho_S C_S}, & H(z,t) \leq -\rho_S L, \\ T_f, & -\rho_S L < H(z,t) < 0, \\ T_f + \dfrac{H(z,t)}{\rho_L C_L}, & 0 \leq H(z,t), \end{cases} \tag{1.18}$$

ktoré ilustruje Obr. 1.

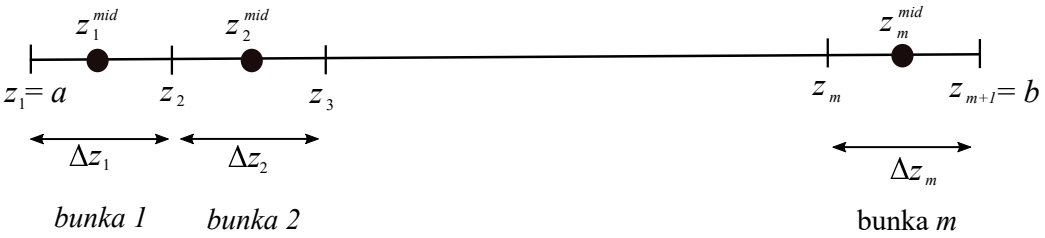


Obr. 1: Teplotné pole T v závislosti od entalpie H.

2 Entalpická formulácia: Diskrétny prípad

2.1 Metóda konečných objemov

V prvom kroku diskretizujeme priestorovú oblasť $a < z < b$. Definujme hranice buniek $z_1, z_2, \ldots, z_m, z_{m+1}$, pričom $z_1 = a$ a $z_{m+1} = b$ predstavujú hranice oblasti (Obr. 2). Oblasť ďalej rozdelíme na m buniek, pričom každá z nich má veľkosť $\Delta z_j = z_{j+1} - z_j$. Bunky nemusia byť rovnakej veľkosti, teda platí $\Delta z_i \neq \Delta z_j$, $(i \neq j)$. Stredové body každej z buniek nazveme uzly $z_j^{mid} = z_j + \frac{1}{2}\Delta z_j$. Taktiež ani uzly nemusia byť nevyhnutne v rovnakej vzdialenosti.



Obr. 2: Diskretizácia oblasti $a < z < b$.

V ďalšom kroku diskretizujeme časovú oblasť $t_{init} < t < t_{end}$ deliacimi bodmi

$$t^1, t^2, \ldots, t^n, t^{n+1}, \tag{2.1}$$

pričom

$$t^1 = t_{init}, \qquad t^{n+1} = t_{end}. \tag{2.2}$$

Hodnoty entalpie H v uzlových bodoch budeme označovať

$$H(z_j^{mid}, t^k) = H_j^k, \qquad j = 1, \ldots, m, \;\; k = 1, \ldots, n+1. \tag{2.3}$$

Rovnicu (1.6) integrujeme cez objem $V_j = A\Delta z_j$, kde A predstavuje veľkosť prierezovej plochy, a následne cez časový interval $[t^k, t^{k+1}]$. Pre ľavú stranu rovnice platí

$$\int_{t^k}^{t^{k+1}} \int_{V_j} \frac{\partial H}{\partial t} \,\mathrm{d}t\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z = \int_{t^k}^{t^{k+1}} \frac{\partial}{\partial t}\Big(A \int_{z_j}^{z_{j+1}} H\, dz\Big)\,\mathrm{d}t = A \int_{t^k}^{t^{k+1}} \frac{\partial}{\partial t} \int_{z_j}^{z_{j+1}} H\,\mathrm{d}z. \tag{2.4}$$

Pre pravú stranu rovnice platí

$$\int_{t^k}^{t^{k+1}} \int_{V_j} \frac{\partial Q}{\partial z} \,\mathrm{d}t\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z = A \int_{t^k}^{t^{k+1}} \int_{z_j}^{z_{j+1}} \frac{\partial Q}{\partial z} \,\mathrm{d}z\,\mathrm{d}t. \tag{2.5}$$

Pre jednorozmerný prípad, ktorým sa zaoberáme v tejto práci, využitím rovníc (2.4) a (2.5) môžno zapísať rovnicu (1.6) nasledovne

$$\int_{t^k}^{t^{k+1}} \frac{\partial}{\partial t} \int_{z_j}^{z_{j+1}} H \,\mathrm{d}z = -\int_{t^k}^{t^{k+1}} \int_{z_j}^{z_{j+1}} \frac{\partial Q}{\partial z} \,\mathrm{d}z \,\mathrm{d}t. \tag{2.6}$$

Predpokladajme, že Δz_j je dostatočne malé na to, aby sme mohli entalpiu H vnútri Δz_j aproximovať hodnotou $H(z_j^{mid}, t)$ v stredovom bode z_j^{mid}, z čoho pre ľavú stranu rovnice (2.6) plynie

$$\begin{aligned} \int_{t^k}^{t^{k+1}} \frac{\partial}{\partial t} \int_{z_j}^{z_{j+1}} H(z,t) \,\mathrm{d}z \doteq \int_{t^k}^{t^{k+1}} \frac{\partial}{\partial t} \Big[H_j(t) \Delta z_j \Big] \,\mathrm{d}t = \Big[H_j(t^{k+1}) - H_j(t^k) \Big] \Delta z_j = \\ = (H_j^{k+1} - H_j^k) \Delta z_j, \end{aligned} \tag{2.7}$$

kde

$$H_j(t) \equiv H(z_j^{mid}, t). \tag{2.8}$$

Pravú stranu rovnice (2.6) upravíme podobne

$$\int_{t^k}^{t^{k+1}} \int_{z_j}^{z_{j+1}} \frac{\partial Q}{\partial z} \,\mathrm{d}z \,\mathrm{d}t = \int_{t^k}^{t^{k+1}} \Big[Q_{j+1}(t) - Q_j(t) \Big] \,\mathrm{d}t, \tag{2.9}$$

z čoho dostávame ekvivalentný zápis rovnice (2.6)

$$\Big[H_j(t^{k+1}) - H_j(t^k) \Big] \Delta z_j = \Big[Q_{j+1}(t) - Q_j(t) \Big] \,\mathrm{d}t, \tag{2.10}$$

kde

$$Q_j(t) \equiv Q(z_j, t). \tag{2.11}$$

Diskrétny tepelný tok definujeme na hraniciach buniek, zatiaľ čo diskrétnu entalpiu definujeme v uzloch (Obr. 3).

Predpokladajme, že Δt^k je dostatočne malé na to, aby $Q_{j+1}(t)$ a $Q_j(t)$ mohli byť aproximované ako konštanty. Našim cieľom je odvodiť explicitnú numerickú schému, preto budeme aproximovať hodnotu $Q(t)$ v čase $t = t^k$, takže

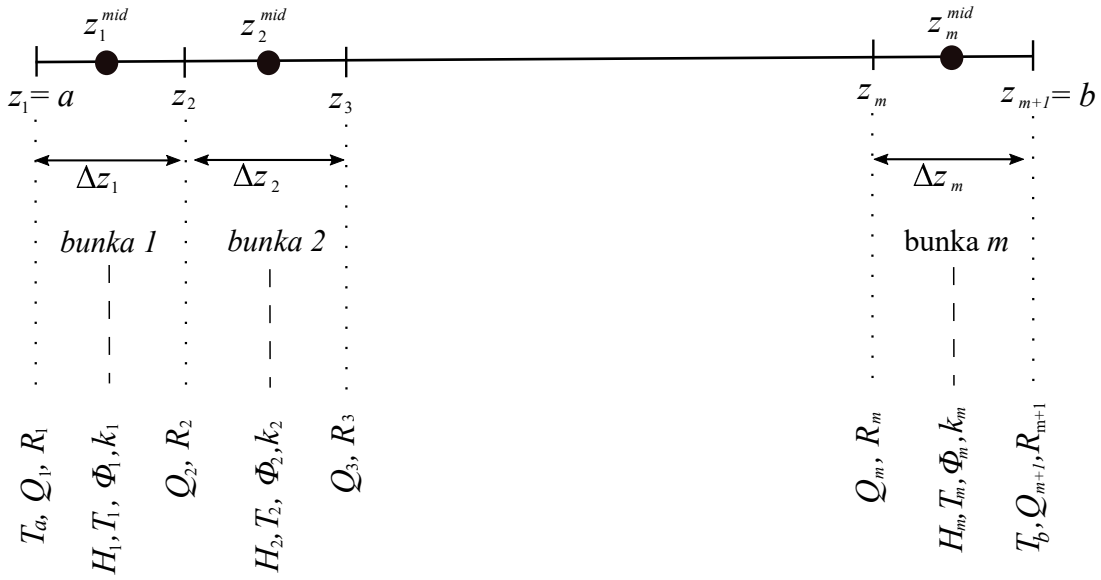
$$-\int_{t^k}^{t^{k+1}} \Big[Q_{j+1}(t) - Q_j(t) \Big] \,\mathrm{d}t \doteq -\Big[Q_{j+1}(t^k) - Q_j(t^k) \Big] \Delta t^k = -(Q_{j+1}^k - Q_j^k) \Delta t^k, \tag{2.12}$$

z čoho plynie

$$(H_j^{k+1} - H_j^k) \Delta z_j = -(Q_{j+1}^k - Q_j^k) \Delta t^k. \tag{2.13}$$

Napokon odvodíme explicitný vzťah pre H_j^{k+1}

$$H_j^{k+1} = H_j^k - (Q_{j+1}^k - Q_j^k) \frac{\Delta t^k}{\Delta z_i}. \tag{2.14}$$



Obr. 3: Ilustrácia k zavedeniu diskrétnych premenných T_j, H_j, Q_j, ϕ_j a diskrétnych parametrov R_j a k_j.

2.2 Diskrétna aproximácia tepelného toku

V ďalšej časti odvodíme vzťah pre diskrétny tepelný tok Q_{j+1}^k, ktorý budeme pre zjednodušenie označovať ako Q_{j+1}. Budeme predpokladať, že tepelný tok je čisto kondukčný a zároveň zanedbáme možnosť prúdenia. Odvodíme vzťah medzi Q_{j+1} a T_j, T_{j+1}.

Definujeme $T_{j+\frac{1}{2}}$ ako pomocnú premennú určujúcu teplotu na deliacich bodoch mriežky medzi bunkami j a $(j+1)$ (Obr. 4). Pre aproximáciu tepelného toku Q_{j+1} v bode z_j budeme rozlišovať medzi dolnou bunkou j a hornou bunkou $(j+1)$

$$Q_{j+1}^{lower} = -k_j \frac{T_{j+\frac{1}{2}} - T_j}{\frac{1}{2}\Delta z_j}, \;\; Q_{j+1}^{upper} = -k_{j+1} \frac{T_{j+1} - T_{j+\frac{1}{2}}}{\frac{1}{2}\Delta z_{j+1}}. \tag{2.15}$$

Pre zachovanie tepla musí platiť

$$Q_{j+1}^{lower} = Q_{j+1}^{upper} = Q_{j+1}, \tag{2.16}$$

alebo

$$-k_j \frac{T_{j+\frac{1}{2}} - T_j}{\frac{1}{2}\Delta z_j} = Q_{j+1} = -k_{j+1} \frac{T_{j+1} - T_{j+\frac{1}{2}}}{\frac{1}{2}\Delta z_{j+1}}. \tag{2.17}$$

Riešime prvú rovnicu pre $T_{j+\frac{1}{2}} - T_j$ a druhú pre $T_{j+1} - T_{j+\frac{1}{2}}$, následne ich sčítame a elimináciou $T_{j+\frac{1}{2}}$ získavame nasledujúci tvar

$$T_{j+1} - T_j = -Q_{j+1}\left(\frac{1}{2}\frac{\Delta z_j}{k_j} + \frac{1}{2}\frac{\Delta z_{j+1}}{k_{j+1}}\right), \tag{2.18}$$

z ktorého plynie riešenie pre Q_{j+1}

$$Q^k_{j+1} = -\frac{T^k_{j+1} - T^k_j}{R^k_{j+1}}, \tag{2.19}$$

kde

$$R^k_{j+1} = \frac{1}{2}\frac{\Delta z_j}{k_j} + \frac{1}{2}\frac{\Delta z_{j+1}}{k_{j+1}}. \tag{2.20}$$

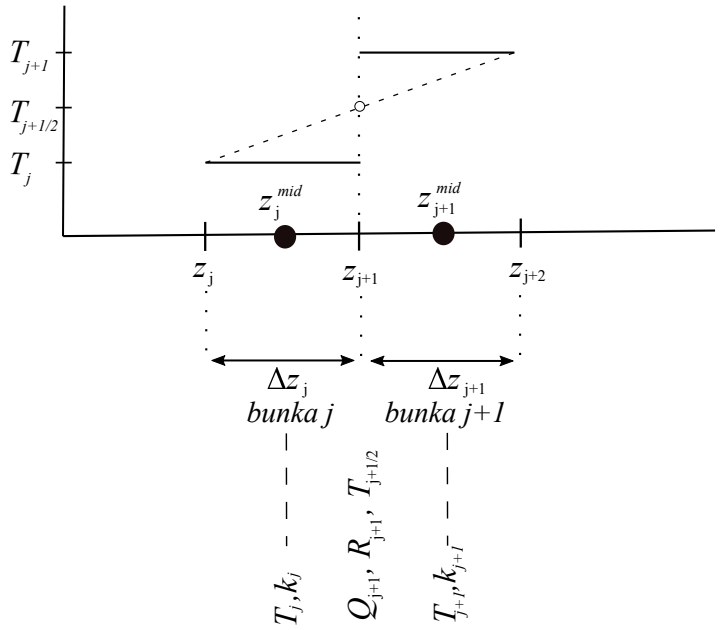
Rovnice (2.19) a (2.20) následne pretransformujeme pre j

$$Q^k_j = -\frac{T^k_j - T^k_{j-1}}{R^k_j}, \quad j = 2, \ldots, m, \tag{2.21}$$

kde

$$R^k_j = \frac{1}{2}\frac{\Delta z_{j-1}}{k_{j-1}} + \frac{1}{2}\frac{\Delta z_j}{k_j}, \quad j = 2, \ldots, m. \tag{2.22}$$

R_j predstavuje tepelnú vodivosť medzi bunkami $(j-1)$ a j. Hodnota diskrétnej tepelnej vodivosti k_j je daná vzťahom $k_j = k\big[T(z^{mid}_j, t^k)\big]$.



Obr. 4: Ilustrácia k zavedeniu pomocnej premennej $T_{j+\frac{1}{2}}$.

Rovnica (2.21) platí iba pre vnútorné body, preto musíme ešte špecifikovať tepelný tok na hraniciach, teda Q_1 pre $z = z_1$ a Q_{m+1} pre $z = z_{m+1}$. Pokiaľ máme na hranici predpísaný tepelný tok (Neumannovu podmienku), potom hodnoty Q_1 alebo Q_{m+1} sú definované priamo okrajovou podmienkou

$$Q_1 \equiv Q_a, \quad Q_{m+1} \equiv Q_b. \tag{2.23}$$

Pokiaľ máme na hranici predpísanú teplotu (Dirichletova podmienka), tak pre ľavý okrajový bod platí

$$Q_1 = -\frac{T_1 - T_a}{R_1}, \qquad R_1 = \frac{1}{2}\frac{\Delta z_1}{k_1}, \qquad \text{pre } z = z_1 = a, \tag{2.24}$$

a podobne pre pravý okrajový bod

$$Q_{m+1} = -\frac{T_b - T_m}{R_m}, \qquad R_m = \frac{1}{2}\frac{\Delta z_m}{k_m}, \qquad \text{pre } z = z_m = b. \tag{2.25}$$

Diskrétnu entalpickú formuláciu uzavrieme predpísaním vzťahu medzi teplotou T_j^k a entalpiou H_j^k. Jednotlivé fázy v diskrétnom prípade definujeme nasledovne:

$$H_j^k \leq -\rho_S L, \qquad \text{pevná fáza}, \tag{2.26}$$

$$-\rho_S L < H_j^k < 0, \qquad \text{dvojfázová oblasť}, \tag{2.27}$$

$$0 \leq H_j^k, \qquad \text{kvapalná fáza}. \tag{2.28}$$

Individuálna bunka obsahuje v danom čase iba kvapalnú látku ak $H_j^k \geq 0$, iba pevnú látku ak $H_j^k \leq -\rho_S L$, a čiastočne pevnú a čiastočne kvapalnú látku ak $-\rho_S L < H_j^k < 0$. V bunke j dvojfázovej oblasti, je podiel pevnej fázy určený vzťahom

$$\phi_j^k = -\frac{H_j^k}{\rho_S L}, \qquad -\rho_S L < H_j^k < 0. \tag{2.29}$$

Pričom v pevnej a kvapalnej fáze platí

$$\phi_j^k = 1, \qquad H_j^k \leq -\rho_S L, \tag{2.30}$$

$$\phi_j^k = 0, \qquad 0 \leq H_j^k. \tag{2.31}$$

Priestorové rozloženie tuhej, kvapalnej a dvojfázovej oblasti možno určiť z numerického riešenia pre entalpiu. V jednozložkovom systéme s konštantnou teplotou tuhnutia očakávame, že dvojfázová oblasť bude prítomná iba v jednej bunke mriežky – na fázovom rozhraní (problém morfologickej stability uvažovaný v [4]).

Teplotu T_j^k v závislosti od entalpie H_j^k v tuhej fáze, na fázovom rozhraní a v kvapalnej fáze môžeme vyjadriť nasledovne

$$T_j^k = \begin{cases} T_f + \dfrac{H_j^k + \rho_S L}{\rho_S C_S}, & H_j^k \leq -\rho_S L, \\ T_f, & -\rho_S L < H_j^k < 0, \\ T_f + \dfrac{H_j^k}{\rho_L C_L}, & 0 \leq H_j^k. \end{cases} \tag{2.32}$$

3 Difúzia tepla (bez fázovej premeny)

Ako sme predstavili v [5], existujú tri spôsoby prenosu tepla: kondukcia (nedochádza k prenosu hmoty), konvekcia (k prenosu tepla dochádza v dôsledku pohybu látky – napr. v tekutine) a žiarenie (napr. elektromagnetické žiarenie). V tejto časti sa zameriavame výlučne na prenos tepla kondukciou. Priblížime výpočty pre jednoduchý prípad prenosu tepla bez zmeny fázy - difúziu. Predstavíme ako v tomto prípade vyzerá sebepodobné riešenie, sebepodobné riešenie v bezrozmernom tvare a odvodíme entalpickú formuláciu v rozmernom a neskôr aj bezrozmernom tvare, pričom budeme vychádzať z [4]. V tejto kapitole budeme premenné označené * považovať za rozmerné premenné, ktoré následne zbezrozmerníme.

Uvažujme kvapalinu s rovnomernou teplotou T^*_∞ pre $z^* > 0$. Na hranici $z^* = 0$ zafixujeme teplotu na T^*_B pre $t^* \geq 0$. Teplota pre $t^* > 0$ a $z^* \longrightarrow \infty$ je rovná T^*_∞. S týmito okrajovými podmienkami riešime rovnicu tepla

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} = \kappa^* \frac{\partial^2 T^*}{\partial (z^*)^2}, \tag{3.1}$$

kde $\kappa^* = k^*/\rho^* C^*$.

3.1 Podobnostné riešenie

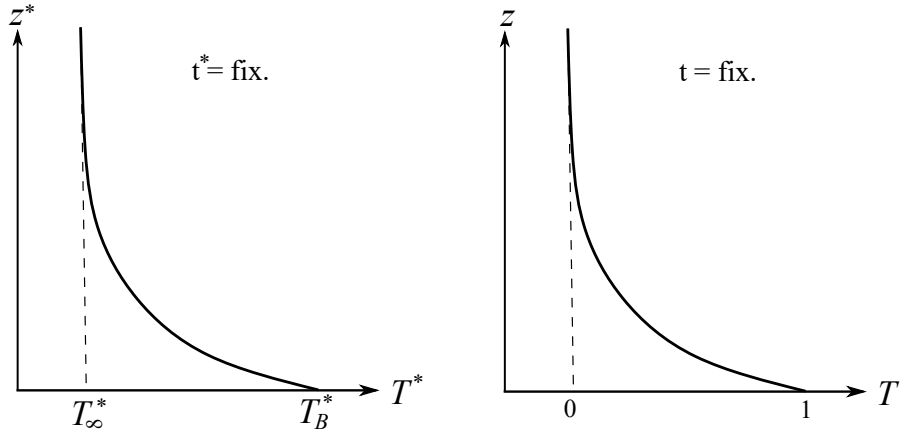
Rovnica vedenia tepla (3.1) sa vzhľadom na počiatočné a okrajové podmienky dá riešiť rôznymi spôsobmi, ako napríklad Fourierove transformácie, LaPlaceove transformácie, separácia premenných, Greenova funkcia, podobnostné riešenie či numerické metódy. V jednorozmernom prípade, s danými okrajovými podmienkami je daný problém možné riešiť sebepodobným riešením rovnice (3.1). Riešením daného problému je podľa [3] nasledujúca rovnica

$$T^*(\eta) = T^*[\eta(z^*, t^*)] = T^*_B - (T^*_B - T^*_\infty)\,\mathrm{erf}(\eta), \qquad \eta(z^*, t^*) = \frac{z^*}{2(\kappa^* t^*)^{1/2}}, \tag{3.2}$$

kde error funkcia je definovaná nasledovne

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-s^2}\, ds. \tag{3.3}$$

Rovnicu (3.2) v nasledujúcich krokoch zbezrozmerníme (Obr. 5). Ako prvé zavedieme dĺžkovú škálu l^* a časovú škálu $(l^*)^2/\kappa^*$, pričom premenné t^*, z^* a T^* sú rozmerné a platí



Obr. 5: Difúzia v čase $t^* > 0$ (rozmerné vľavo, bezrozmerné vpravo)

$$z = \frac{z^*}{l^*}, \qquad t = \frac{t^*}{(l^*)^2/\kappa^*}, \qquad T(z,t) = \frac{T^*(z^*,t^*) - T^*_\infty}{\Delta T^*}, \tag{3.4}$$

kde $\Delta T^* = T^*_B - T^*_\infty$. Potom

$$\eta(z^*,t^*) = \frac{z^*}{2(\kappa^* t^*)^{1/2}} = \frac{l^* z}{2\left(\kappa^* \frac{t(l^*)^2}{\kappa^*}\right)^{1/2}} = \frac{z}{2t^{1/2}}. \tag{3.5}$$

Od rovnice (3.2) následne odčítame T^*_∞ a predelíme ju ΔT^*, čím dostávame rovnicu

$$\frac{T^*(\eta) - T^*_\infty}{\Delta T^*} = \frac{T^*_B - T^*_\infty}{\Delta T^*} - \frac{\Delta T^*}{\Delta T^*}\,\mathrm{erf}(\eta), \tag{3.6}$$

z ktorej odvodíme bezrozmernú formu

$$T(\eta) = T[\eta(z,t)] = 1 - \mathrm{erf}(\eta), \qquad \eta = \frac{z}{2t^{1/2}}. \tag{3.7}$$

3.2 Entalpická formulácia difúzie

Entalpická formulácia je výhodná najmä pri implementácii úloh so zmenou fázy (úlohy s voľnou hranicou). Ako prvé však aplikujeme entalpickú formuláciu na prípad difúzie (bez zmeny fázy) na priestorovej oblasti $a < z^* < b$. Znamená to teda, že jediná prítomná fáza bude kvapalná a dvojfázová oblasť ako aj pevná fáza sa v tomto modeli vyskytovať nebudú. Na to, aby sme vedeli vhodne porovnať sebepodobné riešenie a entalpické, potrebujeme toto riešenie taktiež zbezrozmerniť. Ako prvé zadefinujeme značenie konštantných teplôt na hraniciach, aby zodpovedalo značeniu v podobnostnom riešení odvodenom v predchádzajúcej podkapitole

$$T_f^* = T_\infty^*, \tag{3.8}$$

$$T_a^* = T_B^*, \tag{3.9}$$

$$T_b^* = T_\infty^*. \tag{3.10}$$

Ako v predchádzajúcej časti, aj tentokrát zavedieme dĺžkovú škálu l^* a časovú škálu $(l^*)^2/\kappa^*$. Máme nezávislé premenné

$$z = \frac{z^*}{l^*}, \qquad t = \frac{t^*}{(l^*)^2/\kappa^*}, \tag{3.11}$$

a závislé premenné, pre ktoré potrebujeme odvodiť jednotlivé škály a posuny.

1. T^*: definujeme posun $T_f^* = T_\infty^*$ a škálu

$$\Delta T^* = T_B^* - T_\infty^*. \tag{3.12}$$

2. H^*: definujeme škálu na základe rovnice (1.5)

$$\Delta H^* = \rho^* C^* \Delta T^*. \tag{3.13}$$

3. Q^*: z rovnice (1.4) definujeme škálu

$$\Delta Q^* = k^* \frac{\Delta T^*}{l^*}. \tag{3.14}$$

4. R^*: definujeme škálu

$$\Delta R^* = \frac{\Delta T^*}{\Delta Q^*} = \frac{l^*}{k^*}. \tag{3.15}$$

Pre bezrozmerné závislé premenné z rovníc (3.12) - (3.15) platí

$$T(z,t) = \frac{T^*(z^*,t^*) - T_\infty^*}{\Delta T^*}, \tag{3.16}$$

$$H(z,t) = \frac{H^*(z^*,t^*)}{\Delta H^*}, \tag{3.17}$$

$$Q(z,t) = \frac{Q^*(z^*,t^*)}{\Delta Q^*}, \tag{3.18}$$

$$R = \frac{R^*}{\Delta R^*}. \tag{3.19}$$

V nasledujúcich krokoch zbezrozmerníme diskrétne premenné. Ako prvé odvodíme bezrozmerný tepelný tok Q_1 a Q_{m+1} v okrajových bodoch $z^* = z_1^* = a$ a $z^* = z_{m+1}^* = b$. Z rovnice (2.24) pre rozmerné Q_1^* platí

$$Q_1^* = -\frac{T_1^* - T_a^*}{R_1^*}, \qquad R_1^* = \frac{1}{2}\frac{\Delta z_1^*}{k_1^*}, \qquad \text{v bode } z^* = z_1^* = a^*. \tag{3.20}$$

Potom využitím rovníc (3.14) a (3.15) platí

$$\Delta Q^* Q_1 = -\left[\frac{T_1^* - T_\infty^*}{\Delta T^*} - \frac{T_a^* - T_\infty^*}{\Delta T^*}\right]\frac{\Delta R^*}{R_1^*}\frac{\Delta T^*}{\Delta R^*} = -[T_1 - T_a]\frac{1}{R_1}\Delta Q^*, \tag{3.21}$$

z čoho po úprave vyplýva

$$Q_1 = -\frac{T_1 - T_a}{R_1}, \qquad R_1 = \frac{1}{2}\Delta z_1, \qquad \text{v bode } z = z_1 = a. \tag{3.22}$$

Ďalej podobne z rovnice (2.25) pre Q_{m+1}^* platí

$$Q_{m+1}^* = -\frac{T_b^* - T_m^*}{R_m^*}, \qquad R_m^* = \frac{1}{2}\frac{\Delta z_m^*}{k_m^*}, \qquad \text{v bode } z^* = z_{m+1}^* = b^*. \tag{3.23}$$

Ako v rovnici (3.21) odvodíme analogicky pre Q_{m+1}

$$Q_{m+1} = -\frac{T_b - T_m}{R_m}, \qquad R_m = \frac{1}{2}\Delta z_m, \qquad \text{v bode } z = z_{m+1} = b. \tag{3.24}$$

Všeobecne pre Q_j^* z rovnice (2.21) platí

$$Q_j^* = -\frac{T_j^* - T_{j-1}^*}{R_j^*}, \qquad R_j^* = \frac{1}{2}\frac{\Delta z_{j-1}^*}{k_{j-1}^*} + \frac{1}{2}\frac{\Delta z_j^*}{k_j^*}. \tag{3.25}$$

Predchádzajúcu rovnicu môžeme taktiež zapísať v tvare

$$Q_j^* = -\frac{T_j^* - T_f^* - (T_{j-1}^* - T_f^*)}{R_j^*}, \qquad R_j^* = \Delta R^* R_j = \frac{l^*}{k^*}\left[\frac{1}{2}\Delta z_{j-1} + \frac{1}{2}\Delta z_j\right]. \tag{3.26}$$

Následne využitím rovníc (3.14) a (3.15) dostávame výsledok

$$Q_j = -\frac{T_j - T_{j-1}}{R_j}, \qquad R_j = \frac{1}{2}\frac{\Delta z_{j-1}}{k_{j-1}} + \frac{1}{2}\frac{\Delta z_j}{k_j}, \quad j = 2, \ldots, m. \tag{3.27}$$

Pre rozmernú entalpiu z rovnice (2.14) platí

$$H_j^{(k+1)^*} = H_j^{k^*} - (Q_{j+1}^{k^*} - Q_j^{k^*})\frac{\Delta t^{k^*}}{\Delta z_j^*}, \tag{3.28}$$

čo môžeme zapísať taktiež nasledovne

$$\Delta H^* H_j^{k+1} = \Delta H^* H_j^k - \Delta Q^* \frac{(l^*)^2/\kappa^*}{l^*}(Q_{j+1}^k - Q_j^k)\frac{\Delta t^k}{\Delta z_j}, \tag{3.29}$$

a upraviť do bezrozmerného tvaru

$$H_j^{k+1} = H_j^k - (Q_{j+1}^k - Q_j^k)\frac{\Delta t^k}{\Delta z_j}. \tag{3.30}$$

Keďže máme iba kvapalnú fázu tak pre teplotu z (1.18) platí

$$T_j^{k^*} = T_f^* + \frac{H_j^{k^*}}{\rho^* C^*}, \qquad \text{ak } 0 \leq H_j^{k^*}. \tag{3.31}$$

Po odčítaní T_f^* a následnom predelení ΔT^* rovnice (3.31) dostávame konečný bezrozmerný tvar

$$T_j^k = H_j^k, \qquad 0 \leq H_j^k, \tag{3.32}$$

$$\Phi_j^k = 0, \qquad 0 \leq H_j^k. \tag{3.33}$$

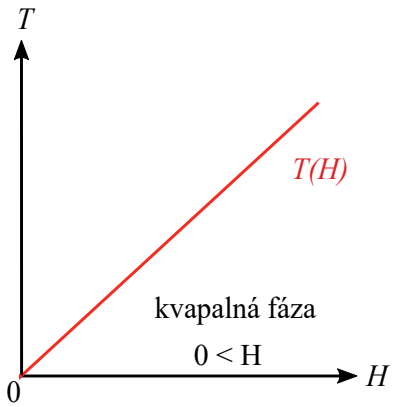
Pre teplotu T_a na hranici platí

$$T_a = \frac{T_a^* - T_\infty^*}{\Delta T^*}, \qquad \Delta T^* = T_B^* - T_\infty^*, \tag{3.34}$$

keďže sme zvolili $T_a^* = T_B^*$, platí $T_a = 1$. Analogicky odvodíme pre teplotu T_b

$$T_b = \frac{T_b^* - T_\infty^*}{\Delta T^*}, \qquad \Delta T^* = T_B^* - T_\infty^*, \tag{3.35}$$

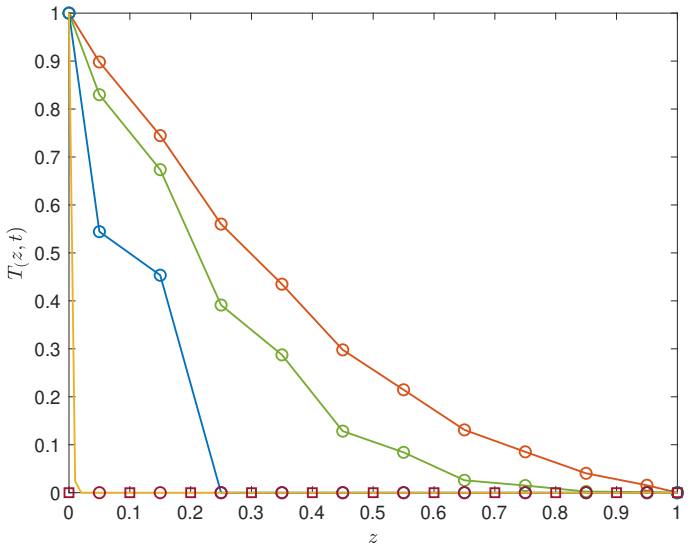
keďže sme zvolili $T_b^* = T_\infty^*$, platí $T_b = 0$.



Obr. 6: Teplotné pole T v závislosti od entalpie H pre prípad difúzie tepla v kvapaline.

3.3 Numerická implementácia

V tejto podkapitole uvažujeme vstupné rozmerné parametre $T_a^* = 1$, $T_b^* = 0$, $k^* = 1$, $\rho^* = 1$ a $C^* = 1$. Numerickú schému difúzie tepla v kvapaline metódou entalpie z predchádzajúcej podkapitoly sme aplikovali v systéme MATLAB. Priestorové delenie (hranice buniek a stredové body buniek) pre $m = 10$ a počiatočný teplotný profil $T_{init}(z)$ v čase $t_{init} = 0{,}001$, teplotný profil v čase $t_1 = 0{,}01$, $t_2 = 0{,}05$ a $t_3 = 0{,}1$ sú zobrazené na Obr. 7.



Obr. 7: Hranice buniek (červené štvorce), stredové body buniek (červené kruhy), počiatočný teplotný profil T_{init} vypočítaný zo sebepodobného riešenia pre $t_{init} = 0{,}001$ (žltá), teplotný profil v čase $t_1 = 0{,}01$ (modrá), $t_2 = 0{,}05$ (zelená) a $t_3 = 0{,}1$ (oranžová) pre $m = 10$.

Čerpajúc z [1] počet deliacich bodov časovej oblasti $n(m)$ počítame z nasledujúcej podmienky stability

$$\Delta t^k \leq \frac{1}{2} \frac{(\min \Delta z)^2}{(\max \alpha^k)}, \tag{3.36}$$

kde $\min \Delta z = \min_{j=1,2,\ldots,m} \Delta z_j$ a

$$\max \alpha^k = \max \left\{ \frac{k_L^*(T_j^k)}{\rho^* C^*}, \frac{k_S^*(T_j^k)}{\rho^* C^*} \right\}. \tag{3.37}$$

Za predpokladu zadefinovania konštantných parametrov na začiatku kapitoly a predpokladu rovnomerného priestorového delenia $\Delta z_1 = \Delta z_2 = \cdots = \Delta z_m$ po dosadení dostá-

vame

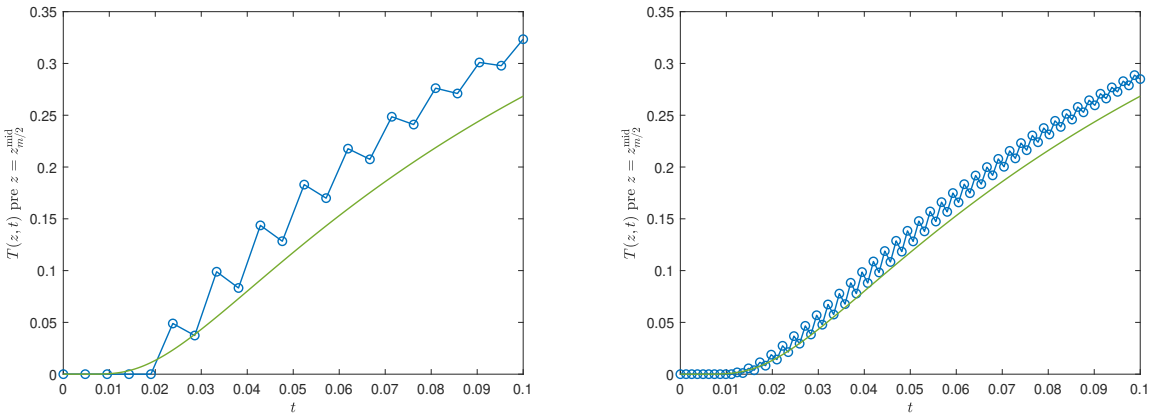
$$n \leq 2\left(\frac{m}{b-a}\right)^2 (t_{end} - t_{init}), \tag{3.38}$$

z čoho určíme počet deliacich bodov časovej oblasti $n(m)$ nasledovne

$$n = \left\lceil 2\left(\frac{m}{b-a}\right)^2 (t_{end} - t_{init}) \right\rceil + 1, \tag{3.39}$$

kde funkcia $\lceil x \rceil$ zaokrúhli dané číslo nahor na najbližšie celé číslo.

V ďalšom kroku sme sa rozhodli porovnať entalpické a podobnostné (presné) riešenie vzhľadom na priestorové delenie. Na Obr. 8 môžeme sledovať porovnanie numerického riešenia metódou entalpie a podobnostného riešenia, pre rôzne m a $n(m)$.

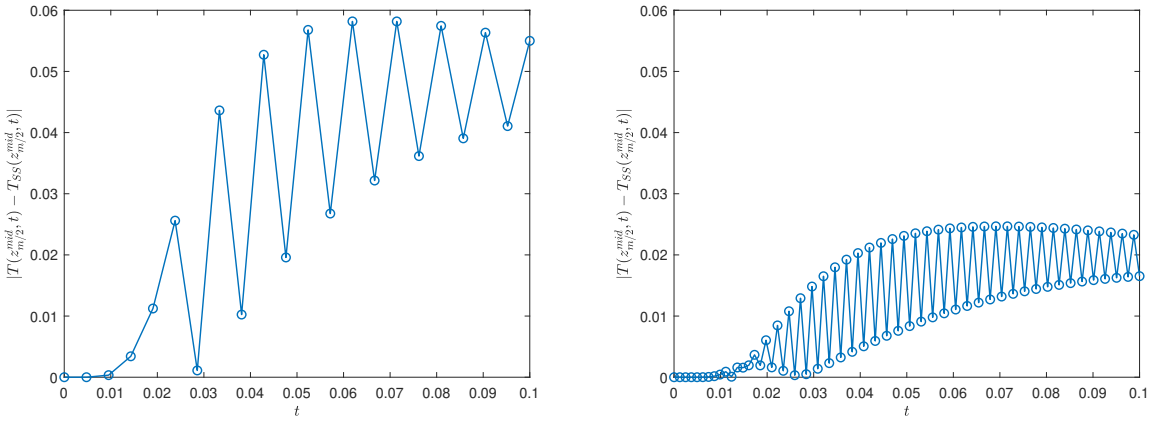


(a) m=10, n=21. **(b)** m=20, n=81.

Obr. 8: Časový vývoj teploty v bode $z = z^{mid}_{m/2}$ - sebepodobné riešenie (zelená) vs. numerické riešenie (modrá) v závislosti od počtu buniek m.

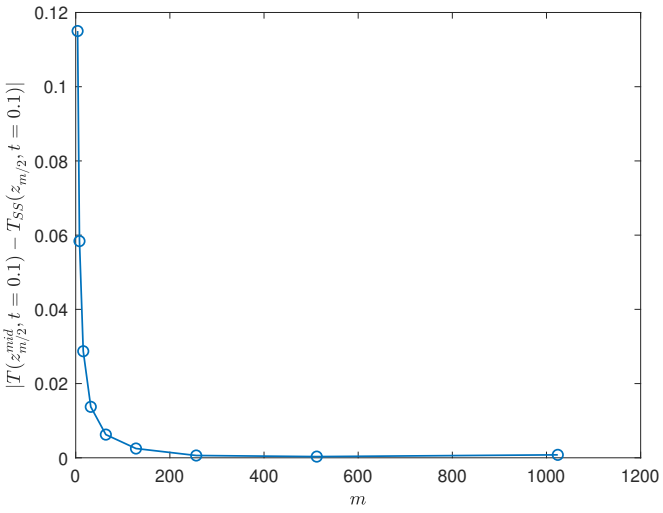
Na Obr. 9 sme následne zobrazili absolútnu chybu numerického riešenia $|T(z^{mid}_{m/2}, t) - T_{SS}(z^{mid}_{m/2}, t)|$ v bode $z = z^{mid}_{m/2}$, pre rôzne časy t, kde $T_{SS}(z,t)$ je podobnostné riešenie.

V nasledujúcom kroku sme zafixovali počet deliacich bodov časovej oblasti n a v každom kroku zdvojnásobili počet deliacich bodov priestorovej oblasti m. Na Obr. 10 sledujeme, že pri zväčšovaní počtu deliacich bodov m sa chyba $e_m = |T(z^{mid}_{m/2}, t = 0{,}1) - T_{SS}(z^{mid}_{m/2}, t = 0{,}1)|$ v bode $z = z^{mid}_{m/2}$ a vo fixnom $t = 0{,}1$, zmenšuje, resp. entalpické riešenie konverguje k podobnostnému riešeniu, čo vyplýva z definície konečno-objemovej diskretizácie tejto úlohy.



(a) m=10, n=21. **(b)** m=20, n=81.

Obr. 9: Časový vývoj chyby $|T(z^{mid}_{m/2},t) - T_{SS}(z^{mid}_{m/2},t)|$ numerického riešenia v bode $z = z^{mid}_{m/2}$, kde $T_{SS}(z,t)$ je podobnostné riešenie.



Obr. 10: Postupnosť $e_m = |T(z^{mid}_{m/2}, t = 0{,}1) - T_{SS}(z^{mid}_{m/2}, t = 0{,}1)|$ pre fixné $n = 209\,696$ a rôzny rôzny počet deliacich bodov priestorovej oblasti m.

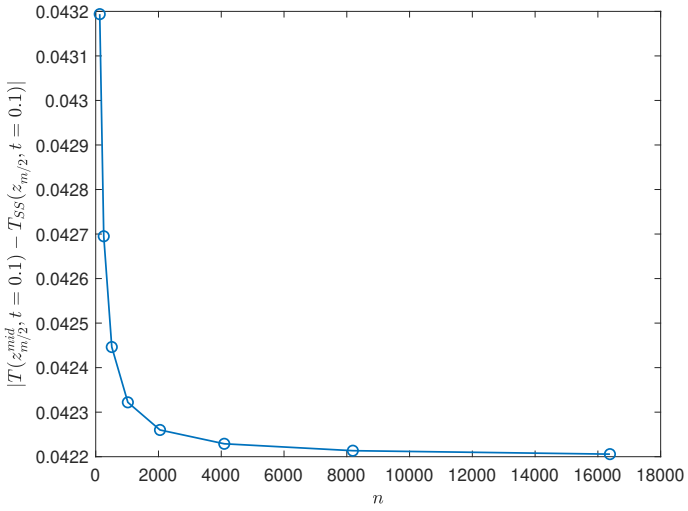
Ďalej sme zafixovali počet deliacich bodov priestorovej oblasti m, a sledovali vývoj chyby vzhľadom na počet deliacich bodov časovej oblasti n, ktorý sme v každom kroku zdvojnásobili. Následne sme určili rád konvergencie entalpickej metódy r. Čerpajúc z [8] počítame experimentálny rád konvergencie ako

$$r_n^{exp} = \frac{\ln\left(\frac{e_{n+1}-e_n}{e_n-e_{n-1}}\right)}{\ln\left(\frac{e_n-e_{n-1}}{e_{n-1}-e_{n-2}}\right)}, \tag{3.40}$$

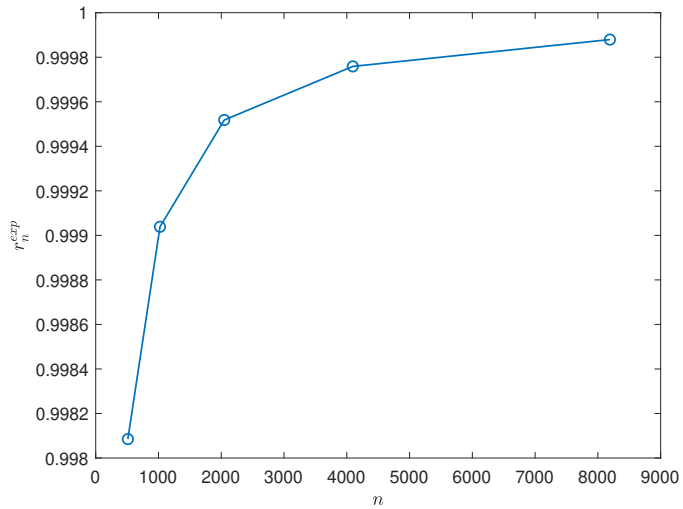
kde $e_n = |T(z^{mid}_{m/2}, t_n = 0{,}1) - T_{SS}(z^{mid}_{m/2}, t = 0{,}1)|$ je postupnosť zobrazená na Obr. 11. Následne rád konvergencie entalpickej metódy určíme ako limitu

$$\lim_{n\to\infty} r^{exp}_n = r. \tag{3.41}$$

Na Obr. 12 sledujeme konvergenciu experimentálneho rádu konvergencie k $r = 1$, čo znamená, že entalpická metóda konverguje lineárne.



Obr. 11: Postupnosť $e_n = |T(z^{mid}_{m/2}, t = 0{,}1) - T_{SS}(z^{mid}_{m/2}, t = 0{,}1)|$ pre fixný počet deliacich bodov priestorovej oblasti $m = 10$ v závislosti od počtu deliacich bodov časovej oblasti n.



Obr. 12: Experimentálny rád konvergencie r^{exp}_n entalpickej metódy.

4 Problém jednostrannej fázovej premeny

Josef Stefan (1835–1893) bol slovinský fyzik a matematik. V roku 1963 sa stal profesorom fyziky na Viedenskej univerzite, kde publikoval množstvo prác o vedení tepla či tuhnutí vody na ľad [2]. Na jeho počesť sa úlohy s voľnou hranicou nazývajú Stefanovými úlohami. Typický Stefanov problém sa zaoberá vývojom hranice medzi dvoma fázami materiálu, ktorý prechádza fázovou zmenou. Na riešenie problémov, kedy dochádza k fázovej zmene, v dôsledku čoho sa pohybuje hranica medzi dvoma fázami materiálu, sa zvyčajne používa Stefanova podmienka, ktorá pomáha pri výpočte polohy fázového rozhrania [6]. Metóda entalpie je výnimočná tým, že polohu fázového rozhrania nebude potrebné počítať zo Stefanovej podmienky. V tejto kapitole sa budeme zaoberať príkladom Stefanovho problému - jednostrannej solidifikácie, pričom budeme predpokladať, že teplota sa v čase mení iba v pevnej fáze a teplota v kvapalnej fáze je konštantná a rovná teplote topenia T_f^*. Aj v tejto kapitole budeme premenné označené * považovať za rozmerné premenné.

4.1 Podobnostné riešenie: Rozmerný tvar

Úlohy s voľnou hranicou sú vo všeobecnosti analyticky riešiteľné iba v niekoľkých prípadoch. Keďže ich nelinearita spôsobuje pri riešení značné komplikácie, analytické riešenie Stefanovho problému (napríklad jednostrannej solidifikácie) vieme nájsť iba pre niektoré úlohy na polonekonečnej oblasti.

Ako v [4], uvažujeme polonekonečnú oblasť $z^* > 0$, ktorá je v čase $t^* = 0$ vyplnená tekutinou teploty T_∞^*, ktorá je rovná teplote tuhnutia T_f^*. V čase $t^* = 0$ hranicu $z^* = 0$ náhle ochladíme na teplotu $T_B^* < T_f^*$. Keďže teplota hranice je nižšia ako teplota tuhnutia, začne sa na nej vytvárať vrstva pevnej fázy – dochádza k solidifikácii a poloha fázového rozhrania sa začne posúvať smerom nahor (Obr. 13). Označme $z^* = h^*(t^*)$ ako polohu fázového rozhrania medzi kvapalnou a pevnou fázou. Neznáme funkcie, ktoré v modeli vystupujú, sú rozloženie teploty a poloha fázového rozhrania v čase. Predpokladajme

$$\rho^{S^*} = \rho^{L^*} \equiv \rho^*, \tag{4.1}$$

$$C^{S^*} = C^{L^*} \equiv C^*, \tag{4.2}$$

$$k^{S^*} = k^{L^*} \equiv k^*, \tag{4.3}$$

$$\kappa^{S^*} = \kappa^{L^*} = \kappa^* \equiv \frac{k^*}{\rho^* C^*}. \tag{4.4}$$

Pre teploty v pevnej a kvapalnej fáze platí

$$\frac{\partial T^{S^*}}{\partial t^*} = \kappa^* \frac{\partial^2 T^{S^*}}{\partial (z^*)^2}, \qquad 0 < z^* < h^*(t^*), \tag{4.5}$$

$$\frac{\partial T^{L^*}}{\partial t^*} = T_f^*, \qquad z^* > h^*(t^*). \tag{4.6}$$

Podmienky na rozhraní a okrajové podmienky sú

$$T^{S^*} = T_B^*, \qquad z^* = 0, \tag{4.7}$$

$$T^{S^*} = T^{L^*} = T_f^*, \qquad z^* = h^*(t^*), \tag{4.8}$$

$$\rho^* L^* \frac{\mathrm{d}h^*}{\mathrm{d}t^*} = k^* \frac{\partial T^{S^*}}{\partial z^*}\bigg|_{h^*(t^*)^-} - k^* \frac{\partial T^{L^*}}{\partial z^*}\bigg|_{h^*(t^*)^+}, \qquad z^* = h^*(t^*), \tag{4.9}$$

$$T^{L^*} = T_f^*, \qquad z^* \to \infty. \tag{4.10}$$

Rozmerné sebepodobné riešenie predchádzajúceho problému je podľa [3] pre teplotu v tuhej fáze

$$T^{S^*}(z^*, t^*) = T_B^* + (T_f^* - T_B^*) \frac{\mathrm{erf}(\eta(z^*, t^*))}{\mathrm{erf}(\lambda)}, \tag{4.11}$$

pre teplotu v kvapalnej fáze

$$T^{L^*} = T_f^*, \tag{4.12}$$

a na hranici

$$h^*(t^*) = 2\lambda(\kappa^* t^*)^{1/2}. \tag{4.13}$$

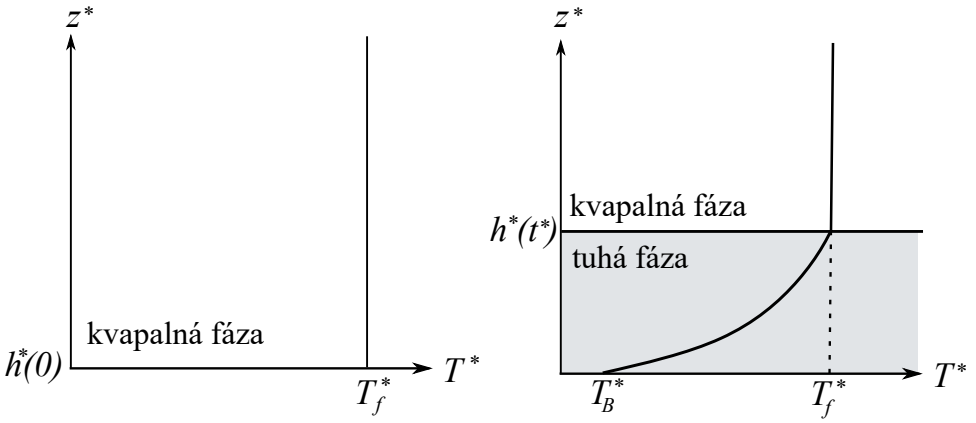
λ je riešením transcendentnej algebrickej rovnice

$$\sqrt{\pi}\lambda \mathrm{e}^{\lambda^2} \,\mathrm{erf}(\lambda) = \frac{1}{S}, \tag{4.14}$$

kde S predstavuje bezrozmerné Stefanovo číslo

$$S = \frac{L^*}{C^* \Delta T^*}, \qquad \Delta T^* = T_f^* - T_B^*, \tag{4.15}$$

a error funkciu $\mathrm{erf}(x)$ definujeme v rovnici (3.3).



Obr. 13: Jednostranný Stefanov problém na polonekonečnej oblasti v čase $t^* = 0$ (vľavo) a v čase $t^* > 0$ (vpravo).

4.2 Podobnostné riešenie: Bezrozmerný tvar

V tejto podkapitole zbezrozmerníme sebepodobné riešenie jednostranného Stefanovho problému na polonekonečnej oblasti. V prvom kroku opäť zavedieme dĺžkovú škálu l^* a časovú škálu $(l^*)^2/\kappa^*$. Máme nezávislé premenné

$$z = \frac{z^*}{l^*}, \qquad t = \frac{t^*}{(l^*)^2/\kappa^*}, \tag{4.16}$$

a závislé premenné

$$T^S(z,t) = \frac{T^{S^*}(z^*,t^*) - T_f^*}{\Delta T^*}, \qquad \Delta T^* \equiv T_f^* - T_B^*, \tag{4.17}$$

$$T^L(z,t) = \frac{T^{L^*}(z^*,t^*) - T_f^*}{\Delta T^*} \equiv 0, \tag{4.18}$$

$$h(t) = \frac{h^*(t^*)}{l^*}. \tag{4.19}$$

Potom platí

$$\eta(z^*,t^*) = \frac{z^*}{2\sqrt{\kappa^* t}} = \frac{l^* z}{2(\kappa^* \frac{t(l^*)^2}{\kappa^*})^{1/2}} = \frac{z}{2t^{1/2}}. \tag{4.20}$$

Následne od rozmernej rovnice (4.11) odčítame T_f^* a predelíme ju ΔT^*

$$\frac{T^{S^*} - T_f^*}{\Delta T^*} = -\frac{T_f^* - T_B^*}{\Delta T^*} + \frac{T_f^* - T_B^*}{\Delta T^*}\frac{\mathrm{erf}(\eta)}{\mathrm{erf}(\lambda)}, \tag{4.21}$$

čím sa dostávame k bezrozmernému riešeniu pre teplotu v kvapalnej fáze

$$T^S = T^S[\eta(z,t)] = -1 + \frac{\mathrm{erf}(\eta)}{\mathrm{erf}(\lambda)}. \tag{4.22}$$

Následne zbezrozmerníme taktiež polohu hranice h

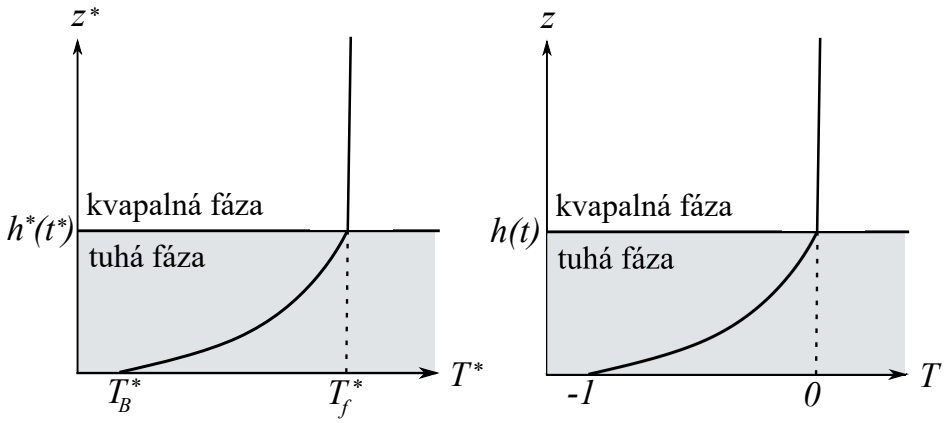
$$h^*(t^*) = 2\lambda(\kappa^* t^*)^{1/2}, \tag{4.23}$$

$$l^* h^*(t^*) = 2\lambda\left(\kappa^* \frac{t(l^*)^2}{\kappa^*}\right)^{1/2}. \tag{4.24}$$

Po úpravách dostávame bezrozmerné riešenie pre polohu fázového rozhrania

$$h(t) = 2\lambda t^{1/2}, \tag{4.25}$$

kde λ rieši rovnicu (4.14).



Obr. 14: Jednostranný Stefanov problém v čase $t^* > 0$ (rozmerné vľavo, bezrozmerné vpravo).

4.3 Entalpická formulácia: Rozmerný tvar

Ako sme spomínali v predošlej kapitole, najväčšou výhodou entalpickej formulácie je jej numerická implementácia pri úlohe so zmenou fázy, pretože sa vyhýba potrebe explicitne sledovať polohu fázového rozhrania. V tejto podkapitole sa pozrieme na entalpickú formuláciu v prípade jednostranného problému solidifikácie, ktorú následne pre potreby porovnania so sebepodobným riešením taktiež zbezrozmerníme. Ako prvé zadefinujeme značenie konštantných teplôt na hraniciach, aby zodpovedalo značeniu v podobnostnom riešení odvodenom v predchádzajúcej podkapitole

$$T_a^* = T_B^*, \tag{4.26}$$

$$T_b^* = T_f^*. \tag{4.27}$$

Ako v predchádzajúcej časti, aj tentokrát zavedieme dĺžkovú škálu l^* a časovú škálu $(l^*)^2/\kappa^*$. Máme nezávislé premenné

$$z = \frac{z^*}{l^*}, \qquad t = \frac{t^*}{(l^*)^2/\kappa^*}, \tag{4.28}$$

a závislé premenné, pre ktoré opäť definujeme posuny a škály. Pre premenné H^*, Q^* a R^* platia predpoklady ako v rovniciach (3.13), (3.14) a (3.15). Pre teplotu T^* definujeme posun T_f^* a škálu

$$\Delta T^* = T_f^* - T_B. \tag{4.29}$$

Pre bezrozmerné nezávislé premenné teda platí

$$T(z,t) = \frac{T^*(z^*,t^*) - T_f^*}{\Delta T^*}, \tag{4.30}$$

$$H(z,t) = \frac{H^*(z^*,t^*)}{\Delta H^*}, \tag{4.31}$$

$$Q(z,t) = \frac{Q^*(z^*,t^*)}{\Delta Q^*}, \tag{4.32}$$

$$R = \frac{R^*}{\Delta R^*}. \tag{4.33}$$

4.4 Entalpická formulácia: Bezrozmerný tvar

V tejto podkapitole odvodíme rovnice pre diskrétnu bezrozmernú entalpickú formuláciu jednostrannej solidifikácie, pričom predpokladáme, že teplota v čase sa mení iba v pevnej fáze a teplota v kvapalnej fáze ostáva konštantná – rovná teplote tuhnutia T_f^*. Ako prvé odvodíme rovnice pre bezrozmerný tepelný tok Q_1 a Q_{m+1} v okrajových bodoch $z^* = z_1^* = a$ a $z^* = z_{m+1}^* = b$. Z rovnice (2.24) pre Q_1^* platí

$$Q_1^* = -\frac{T_1^* - T_a^*}{R_1^*}, \qquad R_1^* = \frac{1}{2}\frac{\Delta z_1^*}{k_1^*}, \qquad \text{v bode } z^* = z_1^* = a^*. \tag{4.34}$$

Potom využitím rovníc (3.14) a (3.15) platí

$$\Delta Q^* Q_1 = -\left[\frac{T_1^* - T_{f^*}}{\Delta T^*} - \frac{T_a^* - T_{f^*}}{\Delta T^*}\right]\frac{\Delta R^*}{R_1^*}\frac{\Delta T^*}{\Delta R^*} = -[T_1 - T_a]\frac{1}{R_1}\Delta Q^*, \tag{4.35}$$

z čoho po úpravách pre Q_1 vyplýva

$$Q_1 = -\frac{T_1 - T_a}{R_1}, \qquad R_1 = \frac{1}{2}\Delta z_1, \qquad \text{v bode } z = z_1 = a. \tag{4.36}$$

Ďalej platí

$$Q_{m+1}^* = -\frac{T_b^* - T_m^*}{R_m^*}, \qquad R_m^* = \frac{1}{2}\frac{\Delta z_m^*}{k_m^*}, \qquad \text{v bode } z^* = z_{m+1}^* = b^*. \tag{4.37}$$

Analogicky pre Q_{m+1}

$$Q_{m+1} = -\frac{T_b - T_m}{R_m}, \qquad R_m = \frac{1}{2}\Delta z_m, \qquad \text{v bode } z = z_{m+1} = b. \tag{4.38}$$

Všeobecne pre Q_j platí

$$Q_j = -\frac{T_j - T_{j-1}}{R_j}, \qquad R_j = \frac{1}{2}(\Delta z_{j-1} + \Delta z_j), \qquad (j = 2 : m). \tag{4.39}$$

Rovnice (4.36), (4.38) a (4.39) sú definované v čase t^k nasledovne

$$Q_1^k = -\frac{T_1^k + 1}{R_1^k}, \qquad Q_{m+1}^k = -\frac{T_m^k}{R_m^k}, \qquad Q_j^k = -\frac{T_j^k - T_{j-1}^k}{R_j^k}. \tag{4.40}$$

Pre rozmernú entalpiu z rovnice (2.14) platí

$$H_j^{(k+1)^*} = H_j^{k^*} - (Q_{j+1}^{k^*} - Q_j^{k^*})\frac{\Delta t^{k^*}}{\Delta z_j^*}, \tag{4.41}$$

čo môžeme ako v predchádzajúcej kapitole zapísať taktiež nasledovne

$$\Delta H^* H_j^{k+1} = \Delta H^* H_j^k - \Delta Q^* \frac{(l^*)^2/\kappa^*}{l^*}(Q_{j+1}^k - Q_j^k)\frac{\Delta t^k}{\Delta z_j}, \tag{4.42}$$

a upraviť do bezrozmerného tvaru

$$H_j^{(k+1)} = H_j^k - (Q_{j+1}^k - Q_j^k)\frac{\Delta t^k}{\Delta z_j}. \tag{4.43}$$

Využitím rovnice (1.18) odvodíme ako prvé teplotu v pevnej fáze

$$T_j^{k^*} = T_f^* + \frac{1}{\rho_S^* C_S^*} H_j^{k^*} + \frac{\rho_S^* L^*}{\rho_S^* C_S^*}, \qquad \text{ak } H_j^{k^*} \le -\rho_S^* L^*, \tag{4.44}$$

$$\frac{T_j^{k^*} - T_f^*}{\Delta T^*} = \frac{1}{\rho^* C^* \Delta T^*}\Delta H^* \frac{H_j^{k^*}}{\Delta H^*} + \frac{\rho^* L^*}{\rho^* C^* \Delta T^*}, \qquad \text{ak } \frac{H_j^{k^*}}{\Delta H^*} \le -\frac{\rho^* L^*}{\Delta H^*}, \tag{4.45}$$

$$T_j^k = H_j^k + S, \qquad \text{ak } H_j^k \le S, \tag{4.46}$$

následne teplotu v dvojfázovej oblasti

$$T_j^{k^*} = T_f^*, \qquad \text{ak } -\rho_S^* L^* < H_j^{k^*} < 0, \tag{4.47}$$

$$\frac{T_j^{k^*} - T_f^*}{\Delta T^*} = 0, \qquad \text{ak } -\frac{\rho^* L^*}{\Delta H^*} < \frac{H_j^{k^*}}{\Delta H^*} < 0, \tag{4.48}$$

$$T_j^k = 0, \qquad \text{ak } -S < H_j^k < 0, \tag{4.49}$$

a nakoniec analogicky pre teplotu v kvapalnej fáze

$$T_j^{k^*} = T_f^* + \frac{H_j^{k^*}}{\rho_S^* C_S^*}, \qquad \text{ak } 0 \le H_j^{k^*}, \tag{4.50}$$

$$T_j^k = H_j^k, \qquad \text{ak } 0 \le H_j^k. \tag{4.51}$$

Pre bezrozmernú teplotu v pevnej fáze, v dvojfázovej oblasti a v kvapalnej fáze teda platia rovnice

$$T_j^k = \begin{cases} H_j^k + S, & H_j^k \leq -S, & \text{pevná fáza,} \\ 0, & -S < H_j^k < 0, & \text{dvojfázová oblasť,} \\ H_j^k, & 0 \leq H_j^k, & \text{kvapalná fáza,} \end{cases} \tag{4.52}$$

ktoré ilustrujeme na Obr. 15. Pre teplotu T_a na hranici platí

$$T_a = \frac{T_a^* - T_f^*}{\Delta T^*}, \qquad \Delta T^* = T_f^* - T_B^*, \tag{4.53}$$

keďže sme zvolili $T_a^* = T_B^*$, platí $T_a = -1$. Analogicky odvodíme pre teplotu T_b

$$T_b = \frac{T_b^* - T_f^*}{\Delta T^*}, \qquad \Delta T^* = T_f^* - T_B^*, \tag{4.54}$$

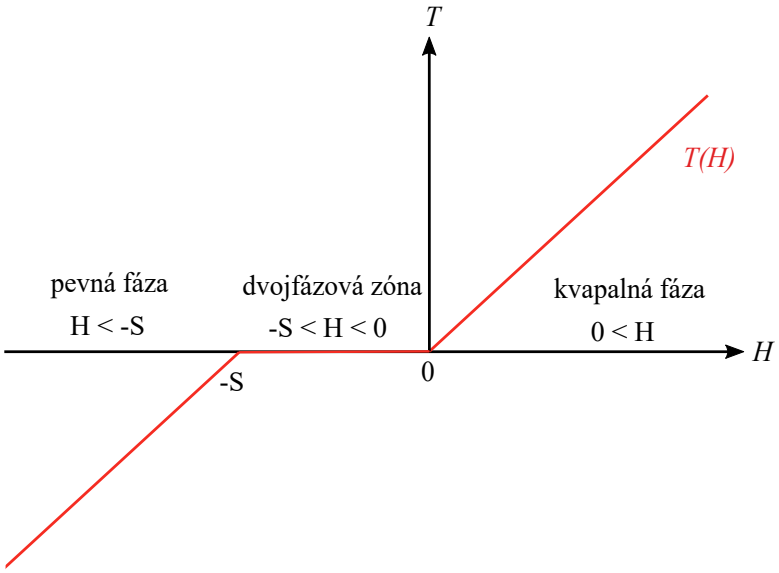
keďže sme zvolili $T_b^* = T_f^*$, platí $T_b = 0$.

Pre Φ_j^k, ktoré určuje podiel pevnej fázy v dvojfázovej oblasti platí

$$\Phi_j^k = -\frac{H_j^{k^*}}{\rho_S^* L^*} = -\frac{H_j^{k^*}}{\Delta H^*}\frac{\Delta H^*}{\rho^* L^*} = H_j^k \frac{1}{S}. \tag{4.55}$$

Vo všeobecnosti teda pre Φ_j^k platí

$$\Phi_j^k = \begin{cases} 1, & H_j^k \leq -S, & \text{pevná fáza,} \\ -\dfrac{1}{S} H_j^k, & -S < H_j^k < 0, & \text{dvojfázová oblasť,} \\ 0, & 0 \leq H_j^k, & \text{kvapalná fáza.} \end{cases} \tag{4.56}$$

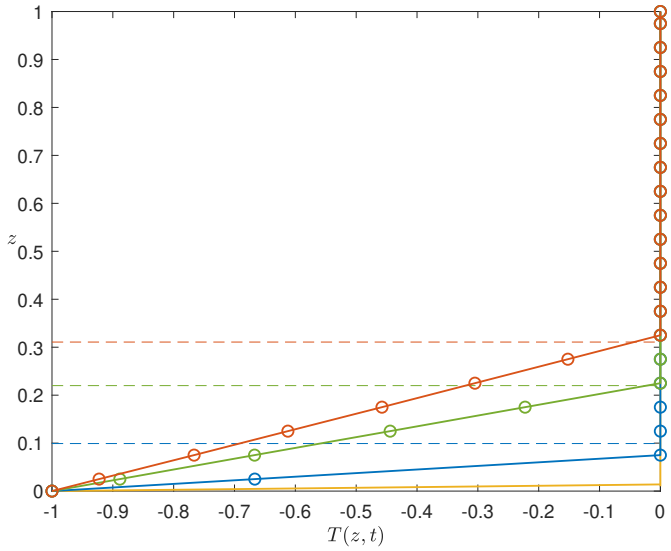


Obr. 15: Teplotné pole T v závislosti od entalpie H.

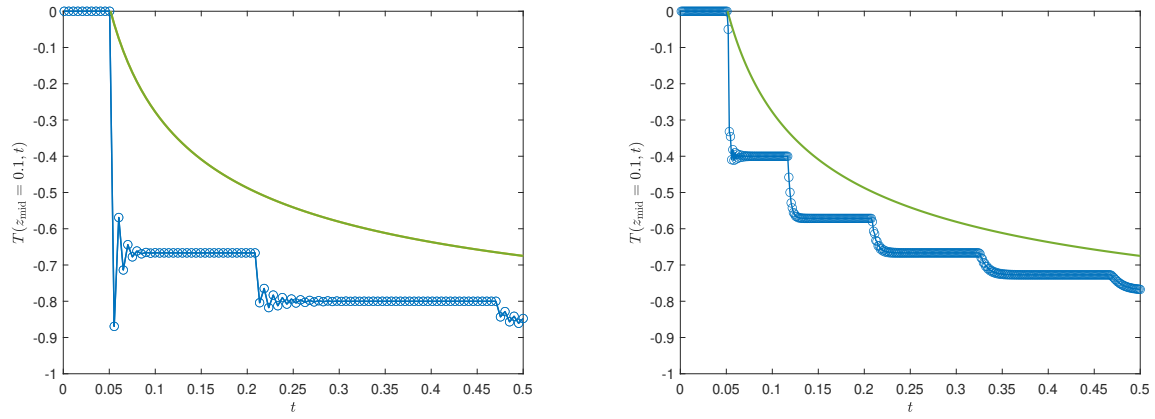
4.5 Numerická implementácia

V tejto podkapitole pracujeme v kóde so vstupnými parametrami $T_a^* = -1$, $T_b^* = 0$, $k_L^* = 1$, $k_S^* = 1$, $k_{LS} = k_L/k_S$, $\rho^* = 1$, $C^* = 1$ a $S = 10$. Ako prvé sme na Obr. 16 porovnali teplotný profil v rôznych časoch t_{init} (počiatočná hodnota vypočítaná zo sebepodobného riešenia), $t_1 = 0{,}05$, $t_2 = 0{,}25$ a $t_2 = 0{,}5$ pre $m = 20$. Taktiež sme zobrazili polohu fázového rozhrania vypočítanú zo sebepodobného riešenia. So zväčšovaním času sledujeme ako sa fázové rozhranie posúva smerom nahor.

Na Obr. 17 sme porovnali entalpické a podobnostné (presné) riešenie časového vývoja teploty v bode $z = 0{,}1$ pre rôzny počet deliacich bodov priestorovej oblasti m. Delenie časovej oblasti $n(m)$ sme aj v tomto prípade určili zo vzorca (3.39). Podľa [1] je „schodiskový“ tvar pre entalpickú metódu charakteristický. Fázové rozhranie sa v priebehu času pohybuje v rámci priestorovej oblasti. Teplota v bunke, v ktorej sa aktuálne nachádza fázové rozhranie, je pevne stanovená na teplotu tuhnutia kvapaliny T_f^*. Následne, keď sa rozhranie presunie do ďalšej bunky, dôjde ku skokovej zmene teploty. Trvanie každého takéhoto „kroku“ je závislé od času, počas ktorého fázové rozhranie zostáva v jednotlivej bunke priestorovej oblasti, a preto čím jemnejšie delíme priestorovú sieť (zväčšujeme m), tým kratšie sú tieto „kroky“ [1].



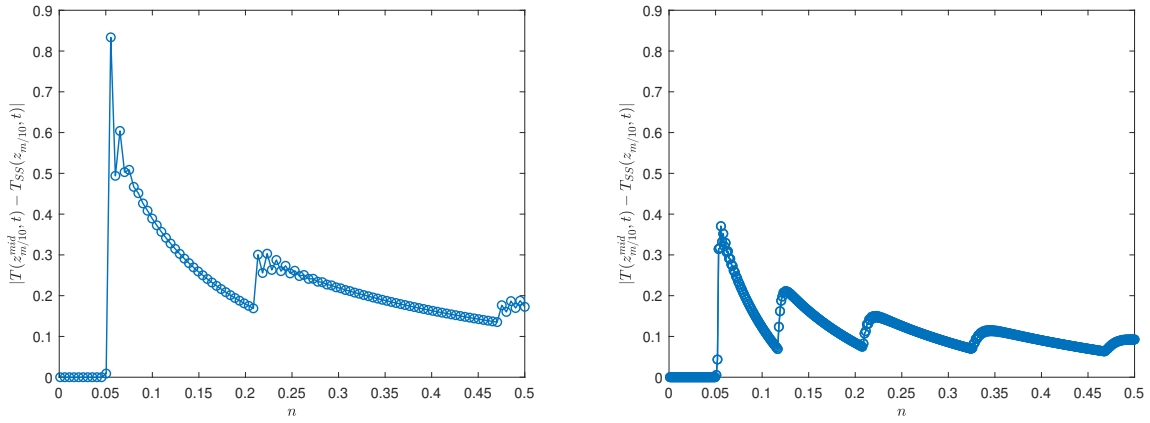
Obr. 16: Teplotný profil pre $m = 20$ ako funkcia z v časoch t_{init} – počiatočná hodnota vypočítaná zo sebepodobného riešenia (žltá), $t_1 = 0{,}05$ (modrá), $t_2 = 0{,}25$ (zelená), $t_3 = 0{,}5$ (oranžová), hranica $h(t)$ vypočítaná zo sebepodobného riešenia je zobrazená prerušovanou čiarou.



(a) m=10, n=101. **(b)** m=20, n=401.

Obr. 17: Časový vývoj teploty v bode $z = z^{mid}_{m/10}$ - sebepodobné riešenie (zelená) vs. numerické riešenie (modrá) v závislosti od počtu buniek m.

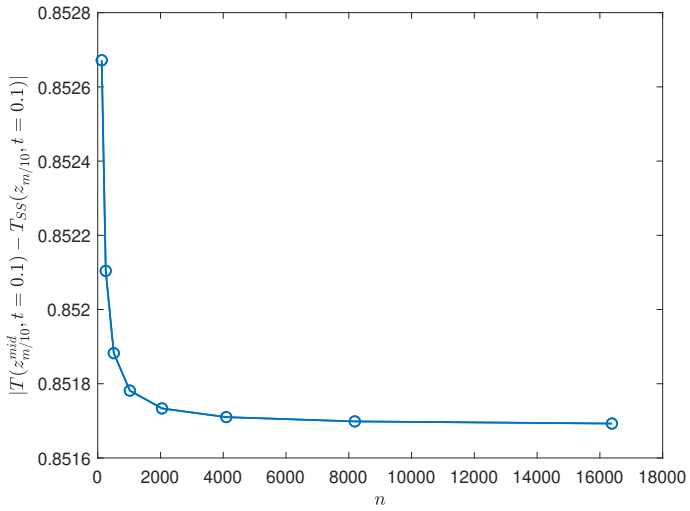
Ako môžeme vidieť na Obr. 17, so zvyšovaním m, narastá počet „skokov“ teploty na danom časovom intervale, skracuje sa dĺžka „kroku“, počas ktorého je teplota konštantná a súčasne je riešenie presnejšie (v porovnaní s podobnostným riešením). To sledujeme aj na Obr. 18, ktorý zobrazuje časový vývoj absolútnej chyby $|T(z^{mid}_{m/10}, t) - T_{SS}(z^{mid}_{m/10}, t)|$ v bode $z = z^{mid}_{m/10}$ kde $T_{SS}(z, t)$ je podobnostné riešenie.



(a) m=10, n=101. **(b)** m=20, n=401.

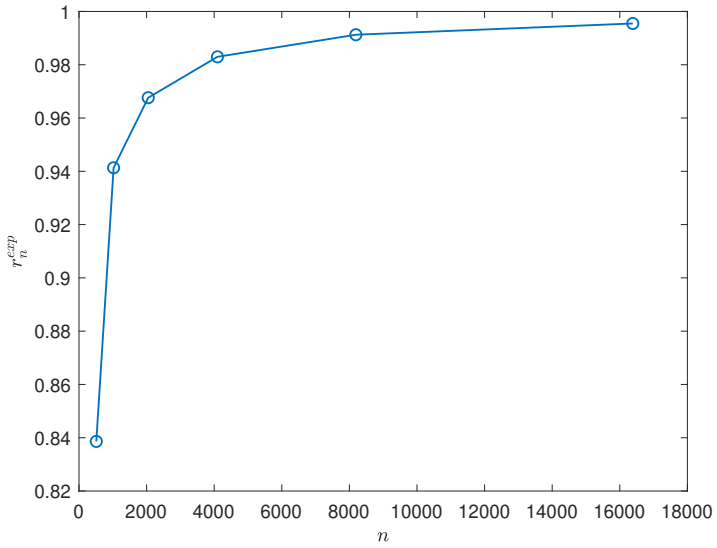
Obr. 18: Časový vývoj chyby $|T(z^{mid}_{m/10},t)-T_{SS}(z^{mid}_{m/10},t)|$ numerického riešenia v bode $z = z^{mid}_{m/10}$, kde $T_{SS}(z,t)$ je podobnostné riešenie.

V nasledujúcom kroku nás opäť zaujímala konvergencia daného riešenia, a teda či problém konverguje k presnému riešeniu aj prípade úlohy s voľnou hranicou. Zafixovali sme počet deliacich bodov priestorovej oblasti m, a sledovali vývoj chyby vzhľadom na počet deliacich bodov časovej oblasti n, ktorý sme v každom kroku zdvojnásobili. Na Obr. 19 je zobrazená postupnosť $e_n = |T(z^{mid}_{m/10}, t = 0{,}1) - T_{SS}(z^{mid}_{m/10}, t = 0{,}1)|$ pre fixný počet deliacich bodov priestorovej oblasti $m = 10$ v závislosti od počtu deliacich bodov časovej oblasti n. Sledujeme, že so zvyšovaním n sa chyba zmenšuje.



Obr. 19: Postupnosť $e_n = |T(z^{mid}_{m/2}, t = 0{,}1) - T_{SS}(z^{mid}_{m/2}, t = 0{,}1)|$ pre fixný počet deliacich bodov priestorovej oblasti $m = 10$ v závislosti od počtu deliacich bodov časovej oblasti n.

Opäť počítame experimentálny rád konvergencie r_n^{exp} na základe rovnice (3.40) a rád konvergencie entalpickej metódy na základe rovnice (3.41), kde opäť sledujeme, že r_n^{exp} konverguje k $r = 1$ a teda entalpická metóda konverguje lineárne.



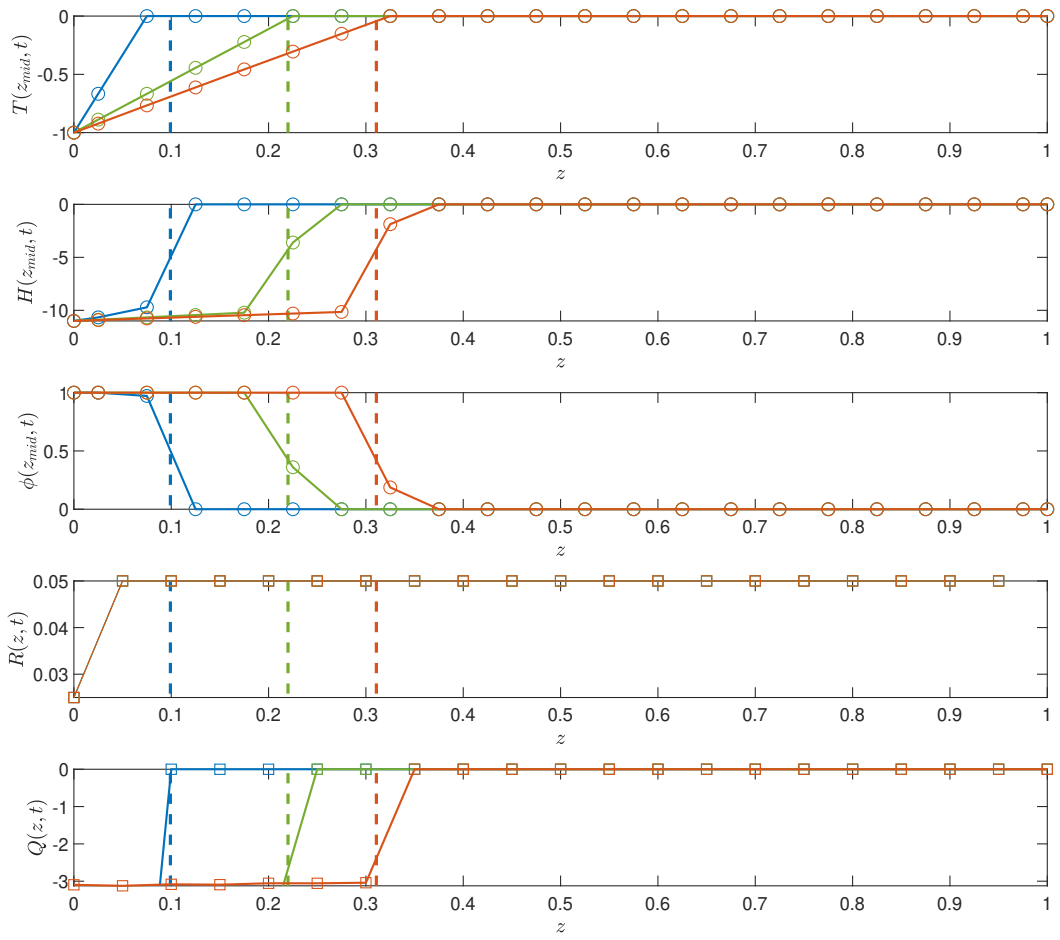
Obr. 20: Experimentálny rád konvergencie r_n^{exp} entalpickej metódy.

Obr. 21 zobrazuje $T(z_{mid}, t)$, $H(z_{mid}, t)$, $\phi(z_{mid}, t)$, a $R(z, t)$ a $Q(z, t)$ v čase $t_1 = 0{,}05$, $t_2 = 0{,}25$ a $t_3 = 0{,}5$ ako aj polohu fázového rozhrania v týchto časoch vypočítanú zo sebepodobného riešenia. Premenné $T(z_{mid}, t)$, $H(z_{mid}, t)$ a $\phi(z_{mid}, t)$ sú definované v uzloch, zatiaľ čo premenné $R(z, t)$ a $Q(z, t)$ sú definované na hraniciach buniek.

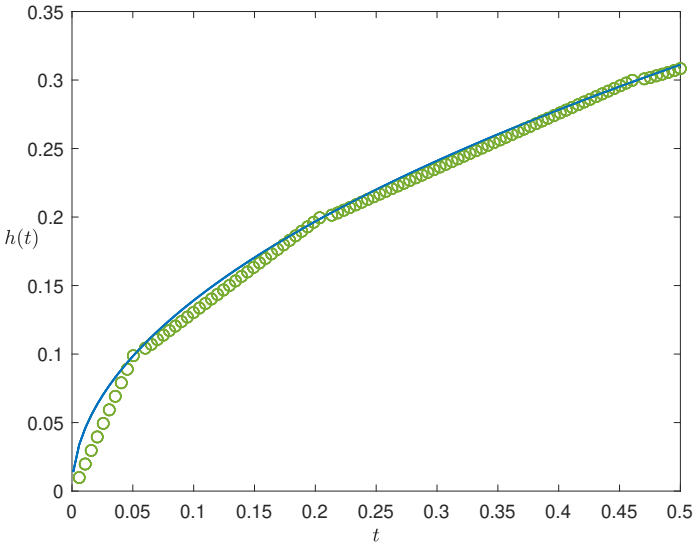
Poloha fázového rozhrania nie je vôbec zahrnutá vo výpočtoch pomocou entalpickej metódy, čo predstavuje jej podstatnú výhodu. Keďže náš model pripúšťa ostré rozhranie potom by v každom časovom kroku mala existovať jedna bunka dvojfázovej oblasti, v ktorej sa dané fázové rozhranie nachádza [1]. Ak je v čase t_k uzol dvojfázovej oblasti j-tým uzlom, potom vieme polohu fázového rozhrania $h(t^k)$ v čase t^k vypočítať podľa [1] nasledovne

$$h(t^k) = z_j + \phi_j^k \Delta z_j. \tag{4.57}$$

Na Obr. 22 pozorujeme porovnanie vývoja polohy fázového rozhrania sebepodobným (presným) riešením a numerickým riešením rovnice (4.57).



Obr. 21: $T(z_{mid},t)$, $H(z_{mid},t)$, $\phi(z_{mid},t)$, a $R(z,t)$ a $Q(z,t)$ v čase $t_1 = 0{,}05$ (modrá), $t_2 = 0{,}25$ (zelená) a v čase $t_3 = 0{,}5$ (oranžová) definované v uzloch (kruh) a na hraniciach buniek (štvorec), pre $m = 20$. Prerušovaná čiara predstavuje polohu fázového rozhrania vypočítanú zo sebepodobného riešenia.



Obr. 22: Časový vývoj polohy fázového rozhrania $h(t)$ - presné riešenie (modrá), entalpické riešenie (zelená) pre $m = 10$ a $n = 101$.

4.5.1 Zmena parametra S

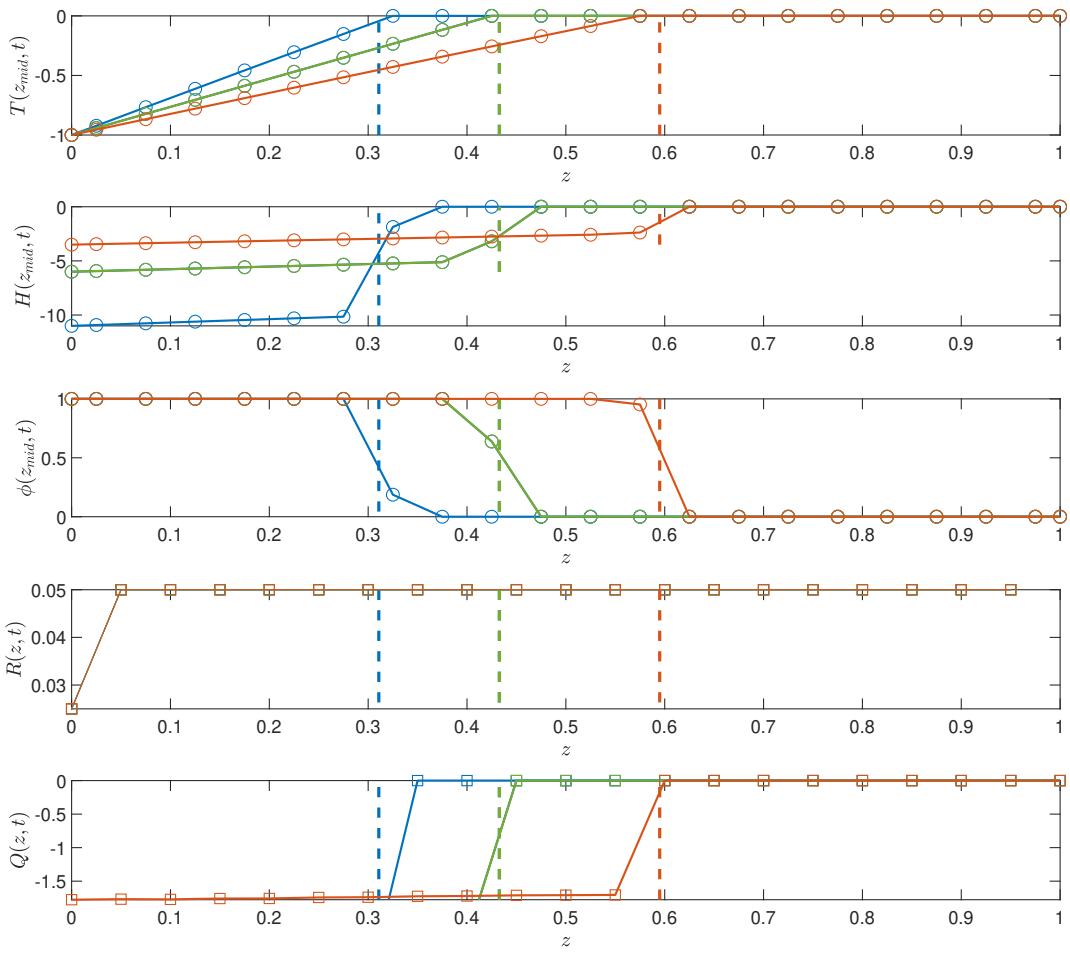
V bakalárskej práci [5] sme odvodili rovnicu pre neznámu hodnotu rýchlosti fázového rozhrania λ v sebepodobnom riešení a taktiež sme skúmali závislosť λ na kontrolných parametroch. Sledovali sme rýchlosť postupu fázového rozhrania λ vzhľadom na bezrozmerný parameter S^{-1}. Pozorovali sme, že λ je monotónne rastúca funkcia S^{-1}, pričom platí

$$\frac{1}{S} = \frac{C^* \Delta T^*}{L^*}, \tag{4.58}$$

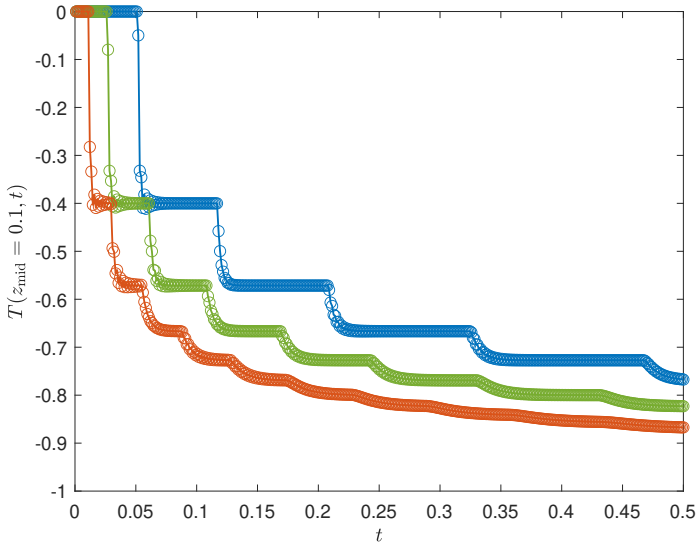
kde $\Delta T^* = T_f^* - T_B^*$. Zvyšovanie rýchlosti fázového rozhrania docielime napríklad znižovaním latentného tepla L alebo zmenou teploty T_B^*. Na čím menšiu hodnotu ochladíme hranicu $z^* = 0$, tým rýchlejší postup fázového rozhrania budeme môcť sledovať.

Na Obr. 23 môžeme sledovať, ako sa menia $T(z_{mid}, t)$, $H(z_{mid}, t)$, $\phi(z_{mid}, t)$, a $R(z, t)$ a $Q(z, t)$ v zafixovanom čase $t = 0{,}5$ pre rôzne hodnoty parametra S^{-1}. Na Obr. 24 sledujeme časový vývoj teploty v bode $z = 0{,}1$ pre rôzne hodnoty parametra S^{-1}. Ako sme písali v predchádzajúcej podkapitole, keď sa rozhranie presunie do ďalšej bunky, dôjde ku skokovitej úprave teploty. Trvanie každého takéhoto „kroku“ je závislé od času, počas ktorého fázové rozhranie zostáva v jednotlivej bunke priestorovej oblasti. So zväčšovaním

hodnoty S^{-1} sa zvyšuje rýchlosť fázového rozhrania a tým skracuje čas, počas ktorého fázové rozhranie zostáva v jednotlivej bunke.



Obr. 23: $T(z_{mid},t)$, $H(z_{mid},t)$, $\phi(z_{mid},t)$, a $R(z,t)$ a $Q(z,t)$ v čase $t = 0{,}5$ pre $S^{-1} = \frac{1}{10}$ (modrá), $S^{-1} = \frac{1}{5}$ (zelená) a $S^{-1} = \frac{1}{2{,}5}$ (oranžová) definované v uzloch (kruh) a na hraniciach buniek (štvorec), pre $m = 20$. Prerušovaná čiara predstavuje polohu fázového rozhrania vypočítanú zo sebepodobného riešenia.



Obr. 24: Časový vývoj teploty v bode $z = 0{,}1$ pre $m = 20$ a $S^{-1} = \frac{1}{10}$ (modrá), $S^{-1} = \frac{1}{5}$ (zelená) a $S^{-1} = \frac{1}{2{,}5}$ (oranžová).

4.5.2 Zmena koeficientu $k(\Phi)$

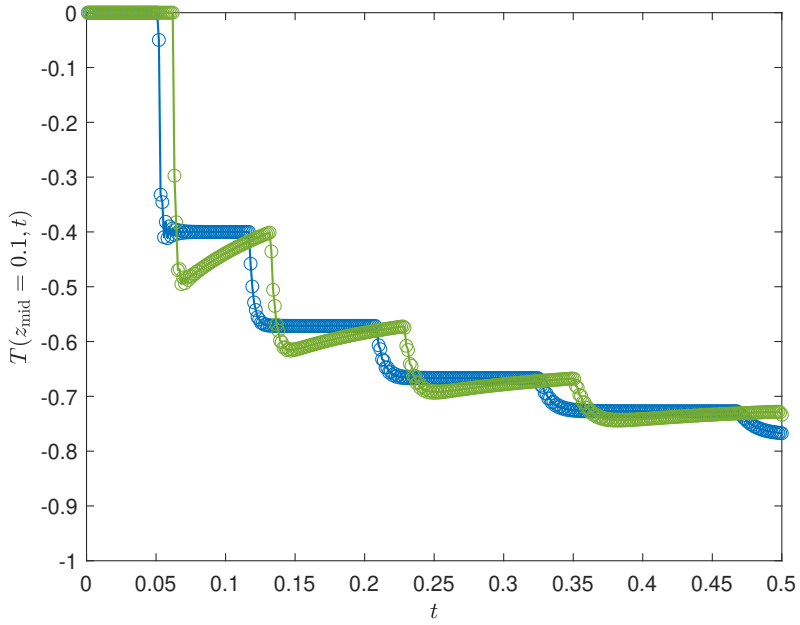
Klasický Stefanov problém sa zaoberá konštantnými tepelnými veličinami, ako je napríklad tepelná vodivosť a špecifické teplo. V predchádzajúcich kapitolách sme pracovali s predpokladom $k^{S^*} = k^{L^*} = k^*$, a teda, že koeficient tepelnej vodivosti je v pevnej ako aj v kvapalnej fáze rovnaký – miera schopnosti viesť teplo je v oboch fázach rovnaká. Najnovší výskum však pracuje s realistickejšími modelmi, v ktorých sú tieto parametre závislé od teploty [6]. V nasledujúcej podkapitole sa pozrieme na to, ako sa numerický výpočet metódou entalpie zmení za predpokladu, že $k^{S^*} \neq k^{L^*}$ – tepelná vodivosť je závislá od fázy a je daná vzťahom

$$k^*(\Phi) = (1 - \Phi)k^{L^*} + \Phi k^{S^*}. \tag{4.59}$$

Nech k^{S^*} je škála, ktorou predelíme (4.59). Potom pre tepelnú vodivosť v bezrozmernom tvare platí

$$k(\Phi) = (1 - \Phi)k^{LS} + \Phi, \quad k^{LS} = \frac{k^{L^*}}{k^{S^*}}. \tag{4.60}$$

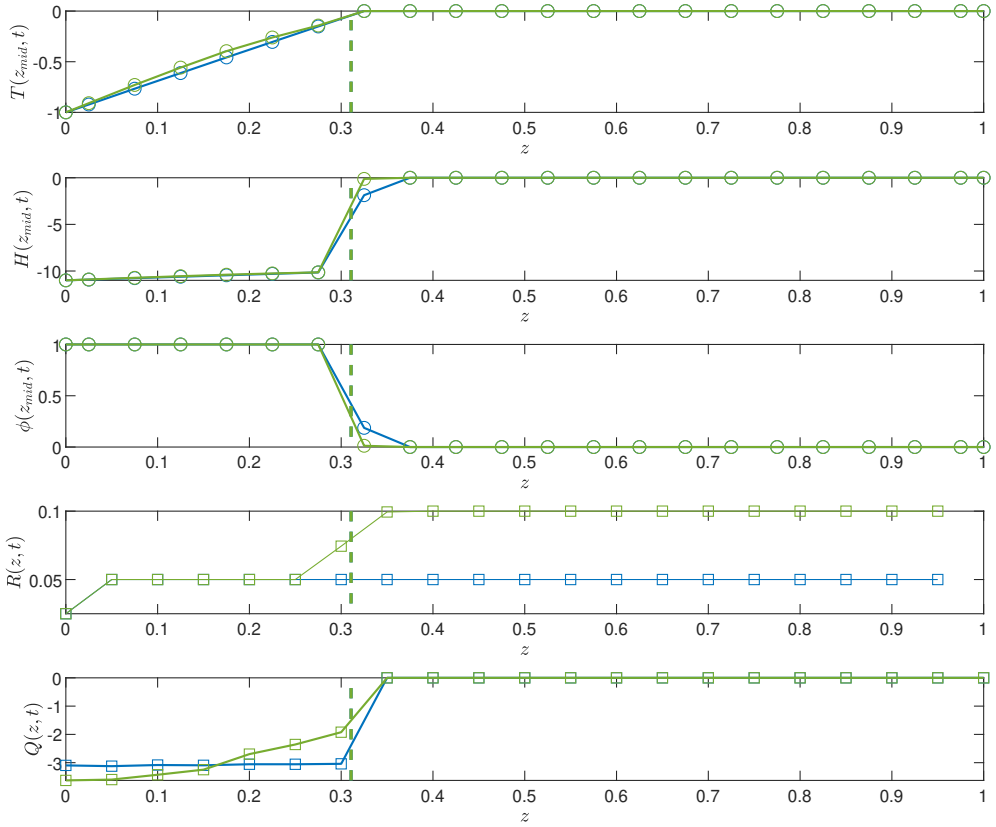
Na Obr. 25 môžeme pozorovať, ako sa zmení časový vývoj teploty pokiaľ zmeníme koeficient k^{LS}.



Obr. 25: Numerické riešenie - Časový vývoj teploty v bode $z = 0{,}1$ pre $m = 20$, $k^{LS} = 1$ (modrá) a $k^{LS} = \frac{1}{2}$ (zelená).

Nemonotónny priebeh „schodov“ vo vývoji teplotného poľa v pevnej fáze je dôsledkom závislosti „priemernej“ teplotnej vodivosti k, od fázovej premennej Φ. $k(\Phi)$ predstavujú „priemernú“ alebo „efektívnu“ tepelnú vodivosť dvojfázového prostredia. Priemerná hodnota k cez každý „schod“ je v každom časovom okamihu väčšia ako v prípade $k^{LS} = 1$ resp. $k^{L^*} = k^{S^*}$, čo reflektuje skutočnosť, že pre $k^{LS} = \frac{1}{2}$ je tepelná vodivosť v pevnej fáze dvakrát vyššia ako v kvapalnej fáze.

Následne sme na Obr. 26 zobrazili, ako sa správajú premenné $T(z_{mid}, t)$, $H(z_{mid}, t)$, $\phi(z_{mid}, t)$, $R(z, t)$ a $Q(z, t)$ pre $m = 20$ v čase $t = 0{,}5$, pre konštantné k a pre $k(\Phi)$.



Obr. 26: $T(z_{mid},t)$, $H(z_{mid},t)$, $\phi(z_{mid},t)$, a $R(z,t)$ a $Q(z,t)$ v čase $t = 0{,}5$ pre $k^{ls} = 1$ (modrá) a $k^{ls} = 0{,}5$ (zelená) definované v uzloch (kruh) a na hraniciach buniek (štvorec), pre $m = 20$. Prerušovaná čiara predstavuje polohu fázového rozhrania vypočítanú zo sebepodobného riešenia.

Záver

V diplomovej práci sme sa zaoberali odvodením a numerickou implementáciou entalpickej metódy pre úlohy s voľnou hranicou. Typickým príkladom takejto úlohy je premena kvapalnej fázy na pevnú fázu. Tento problém predstavuje klasickú Stefanovu úlohu, kde hranica medzi dvoma fázami nie je vopred určená, alebo je riadená obyčajnou diferenciálnou rovnicou (tzv. Stefanovou podmienkou) na danom fázovom rozhraní. Úlohu sme riešili aplikáciou numerickej entalpickej metódy, ktorá obchádza potrebu sledovať vývoj fázového rozhrania.

V prvej kapitole sme plynule nadviazali na našu bakalársku [5], v ktorej sme predstavili základné pojmy a veličiny nevyhnutné pre formuláciu úloh Stefanovho typu, niektoré vlastnosti tekutín a vlastnosti fázového diagramu, ako aj matematickú formuláciu jednorozmerného Stefanovho problému na polonekonečnej oblasti. Rovnicu vedenia tepla sme preformulovali pomocou entalpie a tepelného toku. Predpísali sme konštitučný vzťah medzi teplotou a entalpiou v rôznych fázach (pevnej, kvapalnej ako aj dvojfázovej oblasti), ktorý je nevyhnutný na to, aby sme mohli určiť množstvo entalpie v systéme.

V druhej kapitole sme odvodili diskrétnu formu entalpickej metódy, ktorá je založená na priestorovej diskretizácii pomocou konečných objemov. V priestorovej oblasti sme zaviedli bunky, (alebo konečné objemy), hranice buniek a stredové body buniek. Odvodili sme diskrétnu aproximáciu pre tepelný tok na hraniciach buniek a teplotu a entalpiu v stredoch buniek.

V tretej kapitole sme sa venovali difúznemu transportu tepla bez zmeny fázy. Tento prípad sme zvolili pre vysvetlenie základných princípov entalpickej formulácie a jej porovnanie s podobnostnými riešeniami.

V záverečnej časti diplomovej práce sme odvodili a implementovali algoritmus metódy entalpie pre tzv. jednostranný Stefanov problém, kde sa teplota v čase mení iba v pevnej fáze a teplota v kvapalnej fáze je konštantná. Analyzovali sme správanie entalpického riešenia pri zmene kontrolných parametrov systému – Stefanovho čísla S a koeficientu $k(\Phi)$. Porovnali sme entalpické a podobnostné riešenie a analyzovali sme chybu entalpickej metódy a experimentálny rád konvergencie s konečným rádom konvergencie.

Zoznam použitej literatúry

[1] Alexiades, V., Solomon, A. D.: *Mathematical Modeling of Melting and Freezing Processes*, Taylor Francis, USA, 1993.

[2] Baehr, H. D., Stephan, K.: *Heat and Mass Transfer*, Springer, Nemecko, 2011.

[3] Crank, J.: *The Mathematics of Diffusion*, Oxford University Press, 1987.

[4] Guba, P.: *Princípy matematického modelovania v prírodných a technických vedách*, skriptá, FMFI UK, 2021.

[5] Javorská J.: *Numerické riešenie úloh s voľnou hranicou*, Bakalárska práca FMFI UK, Bratislava, 2022.

[6] Khanfer, A., Bougoffa, L.: *A Stefan problem with nonlinear thermal conductivity*, Mathematical Methods in the Applied Sciences, 46(4), 4602-4611, 2023.

[7] Nasrudin, F. S. M., Mahadi, S.: *Enthalpy method for one dimensional heat conduction*, International Journal of Engineering and Technology, 7(14), 9-12, 2018.

[8] Schatzman, M.: *Numerical analysis: a mathematical introduction*, Clarendon Press, Oxford, 2002.