UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY



METÓDA ENTALPIE PRE SIMULÁCIU FÁZOVEJ ZMENY PODCHLADENÝCH SYSTÉMOV

Diplomová práca

Bratislava, 2026 **Bc. Matúš Košút**

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

METÓDA ENTALPIE PRE SIMULÁCIU FÁZOVEJ ZMENY PODCHLADENÝCH SYSTÉMOV

Diplomová práca

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

Bratislava, 2026 **Bc. Matúš Košút**



88102559

Univerzita Komenského v Bratislave
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

ZADANIE ZÁVEREČNEJ PRÁCE

Meno a priezvisko študenta:	Bc. Matúš Košút
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: Metóda entalpie pre simuláciu fázovej zmeny podchladených systémov
An enthalpy method for simulating the solidification of supercooled systems

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

Vedúci:	doc. RNDr. Peter Guba, PhD.
Katedra:	FMFI.KAMŠ - Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Vedúci katedry:	doc. Mgr. Igor Melicherčík, PhD.
Dátum zadania:	13.01.2025

Dátum schválenia: 15.01.2025

prof. RNDr. Daniel Ševčovič, DrSc.
garant študijného programu

.....
študent

.....
vedúci práce

Čestné vyhlásenie

Pri príprave tejto práce boli použité nástroje UI ChatGPT-5.4 za účelom formálnej úpravy textu. Za správnosť výslednej podoby textu zodpovedá autor.

V Bratislave, dňa 4.5.2026

Bc. Matúš Košút

Poďakovanie: Touto cestou by som sa chcel v prvom rade poďakovať svojmu školiteľovi Doc. RNDr. Petrovi Gubovi, PhD. za jeho cenné odborné rady, ochotu a trpezlivosť pri písaní diplomovej práce. Taktiež aj rodine a kamarátom, ktorí ma podporujú v mojom štúdiu.

Abstrakt

KOŠÚT, Matúš: Metóda entalpie pre simuláciu fázovej zmeny podchladených systémov [Diplomová práca], Univerzita Komenského v Bratislave, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky; vedúci práce: doc. RNDr. Peter Guba, PhD., 2026, 63 s.

V práci sa zaoberáme modelom pre simuláciu fázovej premeny jednozložkových materiálov (Stefanova úloha). Model formulujeme v termínoch závislej premennej entalpie, čo umožňuje zahrnúť latentné teplo priamo do energetickej bilancie a vyhnúť sa potrebe explicitného sledovania polohy fázového rozhrania. Entalpickú formuláciu odvádzame v spojitom tvare a následne ju diskretizujeme pomocou metódy konečných objemov. Zaoberáme sa jednostranným Stefanovým problémom, v ktorom sa teplota vyvíja výlučne v pevnej fáze, a dvojstranným Stefanovým problémom, v ktorom sa teplo šíri v oboch fázach s rozdielnymi materiálovými vlastnosťami. Analyzujeme vplyv bezrozmerných parametrov Stefanovho čísla, pomeru tepelných kapacít β a pomeru tepelných vodivostí λ na správanie riešenia. Získané numerické výsledky polohy fázového rozhrania porovnávame so sebepodobnými analytickými riešeniami pre polonekonečné oblasti.

Kľúčové slová: metóda entalpie, Stefanova úloha, rovnica vedenia tepla, metóda konečných objemov

Abstract

KOŠÚT, Matúš: An entalphy method for simulating the solidification of supercooled systems [Master thesis], Comenius University in Bratislava, Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Department of Applied Mathematics and Statistics; thesis supervisor: doc. RNDr. Peter Guba, PhD.,2026, 63 p.

In this work, we consider a model for simulating phase change in single-component materials (Stefan problem). The model is formulated in terms of the dependent variable enthalpy, which allows latent heat to be incorporated directly into the energy balance and avoids the need to explicitly track the position of the phase interface. The enthalpy formulation is derived in continuous form and subsequently discretized using the finite volume method. We consider the one-sided Stefan problem, in which the temperature evolves exclusively in the solid phase, and the two-sided Stefan problem, in which heat propagates in both phases with distinct material properties. We analyze the influence of the dimensionless parameters the Stefan number, the ratio of heat capacities β, and the ratio of thermal conductivities λ on the behavior of the solution. The obtained numerical results for the position of the phase interface are compared with self-similar analytical solutions for semi-infinite domains.

Keywords: enthalpy method, Stefan problem, heat conduction equation, finite volume methods

Obsah

Úvod **9**

1 Entalpický prístup v spojitom prípade **11**

1.1 Definícia entalpie 11

1.2 Rovnica vedenia tepla v entalpickom tvare 11

2 Vzťah teploty T a entalpie H **13**

3 Entalpický prístup v diskrétnom prípade **15**

3.1 Metóda konečných objemov 15

3.2 Diskrétna aproximácia tepelného toku 18

4 Difúzia tepla **21**

4.1 Entalpická formulácia 21

4.1.1 Sumár bezrozmerných diskrétnych rovníc 24

4.2 Numerická implementácia entalpického algoritmu 24

5 Jednostranný prípad s fázovou zmenou **25**

5.1 Entalpická formulácia: Rozmerný tvar 26

5.2 Entalpická formulácia: Bezrozmerný tvar 26

5.3 Numerická implementácia 29

6 Dvojstranný prípad s fázovou zmenou **30**

6.1 Entalpická formulácia: Rozmerný tvar 31

6.2 Entalpická formulácia: Bezrozmerný tvar 32

6.3 Vzťah k modelu pre jednostranný prípad s fázovou zmenou 35

6.4 Numerická implementácia 36

Záver **41**

Zoznam použitej literatúry **43**

A Numerická implementácia jednostranného problému bez fázovej zmeny **44**

B Numerická implementácia jednostranného problému s fázovou zmenou **47**

C Numerická implementácia dvojstranného problému s fázovou zmenou **55**

Úvod

Úlohy s voľnou hranicou predstavujú významnú triedu problémov v aplikovanej matematike, fyzike a technických vedách [2]. Vyskytujú sa najmä pri modelovaní procesov, v ktorých dochádza k zmene skupenstva látky, ako napríklad pri tuhnutí kovov, topení ľadu atď. Charakteristickým znakom týchto javov je existencia fázového rozhrania, ktorého poloha nie je vopred známa, ale je súčasťou riešenia a vyvíja sa v čase. Matematickým opisom takýchto procesov je Stefanov problém, ktorý patrí medzi klasické úlohy s voľnou hranicou.

Analytické riešenia Stefanových úloh sú známe iba pre špeciálne prípady s jednoduchou geometriou a okrajovými podmienkami. V praktických aplikáciách je preto nevyhnutné využívať numerické metódy. Tradičné prístupy, založené na explicitnom sledovaní fázového rozhrania, sú často výpočtovo náročné a implementačne komplikované. Alternatívou je entalpická metóda, ktorá umožňuje zahrnúť latentné teplo priamo do formulácie problému a tým eliminovať potrebu explicitného určovania polohy rozhrania [7], [8]. V reálnych aplikáciách však môže byť štruktúra rozhrania zložitejšia a často zahŕňa vznik prechodných vrstiev s pevnou aj kvapalnou fázov, ktoré ovplyvňujú dynamiku fázovej premeny [2].

Entalpický prístup poskytuje jednotnú formuláciu pre všetky fázy materiálu a umožňuje efektívne riešenie úloh so zmenou fázy [7]. Tento prístup je obzvlášť vhodný pre simuláciu podchladených systémov, kde môže dochádzať k rýchlej a nelineárnej dynamike fázového rozhrania. Významnou výhodou je aj možnosť prirodzenej implementácie do numerických schém, ako je metóda konečných objemov uvažovaná v [1] a [8], ktorá je vhodná pre zachovanie zákonov bilancie energie.

Cieľom tejto diplomovej práce je naštudovať, odvodiť a numericky implementovať entalpickú metódu pre simuláciu fázovej zmeny v jednozložkových systémoch. Práca sa zameriava na formuláciu matematického modelu vedenia tepla v entalpickom tvare, jeho diskretizáciu pomocou metódy konečných objemov a následnú numerickú implementáciu. Osobitná pozornosť je venovaná bezrozmernému tvaru rovníc a analýze bezrozmerných parametrov, ako sú Stefanovo číslo a parametre charakterizujúce materiálové vlastnosti.

V práci najskôr predstavíme entalpický prístup v spojitom prípade a odvodíme základné vzťahy medzi teplotou a entalpiou. Následne prejdeme k diskrétnemu modelu založenému na metóde konečných objemov, ktorý tvorí základ numerickej implementácie. Na zjednodušenom modeli difúzie tepla bez zmeny fázy overíme správnosť numerickej schémy. V ďalšej časti sa budeme zaoberať jednostranným Stefanovým problémom, kde dochádza k zmene fázy len v jednej oblasti, a následne rozšírime model na všeobecnejší dvojstranný prípad, v ktorom sa teplo šíri v oboch fázach. V závere práce analyzujeme vplyv bezrozmerných parametrov na správanie riešenia a porovnávame numerické výsledky s referenčnými analytickými riešeniami.

1 Entalpický prístup v spojitom prípade

Pri riešení tepelných úloh zahŕňajúcich fázovú premenu sa často využíva entalpická formulácia, ktorá eliminuje potrebu explicitného sledovania polohy fázového rozhrania. Používa sa napríklad pri simulácii tuhnutia kovov, topenia ľadu, odparovania kvapalín a ďalších oblastiach (pozri napr. [1], [3]). Hlavná výhoda tejto formulácie je schopnosť zahŕňať latentné teplo priamo do energetickej bilancie.

1.1 Definícia entalpie

Entalpia H je termodynamická stavová veličina definovaná v tvare

$$H = U + pV, \tag{1.1}$$

kde U je vnútorná energia, p je tlak a V je objem systému. V špecifickom prípade materiálov s fázovými prechodmi, ktorými sa zaoberá aj táto práca, sa často používa definícia, ktorá zahŕňa aj latentné teplo (podľa [7]):

$$H = \rho C T + \rho L \phi, \tag{1.2}$$

kde ρ je hustota materiálu, C je merná tepelná kapacita, T je aktuálna teplota, L označuje latentné teplo a ϕ vyjadruje podiel látky v tuhom stave. Tento vzťah umožňuje jednoduché spojenie medzi teplotným a fázovým stavom systému. V realistických situáciách môže byť entalpia závislá od ďalších stavových premenných, ako je tlak alebo koncentrácia.

1.2 Rovnica vedenia tepla v entalpickom tvare

V tejto časti si vyjadríme pomocou entalpie H a tepelného toku Q rovnicu vedenia tepla

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k}{\rho C} \nabla^2 T. \tag{1.3}$$

V jednorozmernom prípade, uvažovanom v tejto práci, má rovnica (1.3) tvar

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, \tag{1.4}$$

kde C označuje špecifické teplo, k je tepelná vodivosť a ρ je hustota materiálu. Podľa Fourierovho zákona (pozri napr. [3]) má tepelný tok $\boldsymbol{Q}$ opačný smer ako teplotný gradient, teda

$$\boldsymbol{Q} = -k \nabla T. \tag{1.5}$$

V jednorozmernom prípade pre objemový tepelný tok platí

$$Q = -k \frac{\partial T}{\partial z}. \tag{1.6}$$

Vzťah medzi objemovou entalpiou a teplotou v jednotkovom objeme možno vyjadriť v tvare

$$H = \rho C T. \tag{1.7}$$

Rovnicu (1.4) možno pomocou rovníc (1.6) a (1.7) upraviť do tvaru:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial Q}{\partial z}. \tag{1.8}$$

Rovnica (1.8) predstavuje tzv. primitívny tvar rovnice vedenia tepla vyjadrenej v termínoch entalpie H a tepelného toku Q.

2 Vzťah teploty T a entalpie H

Termodynamický systém sa môže nachádzať v troch odlišných fázach: pevnej, kvapalnej alebo prechodnej fáze. Tieto fázy sú definované nasledovne:

$$\begin{aligned} H(z,t) &\leq -\rho_S L, \quad \text{pevná fáza,} \\ -\rho_S L &< H(z,t) < 0, \quad \text{prechodná fáza,} \\ 0 &\leq H(z,t), \quad \text{kvapalná fáza,} \end{aligned} \tag{2.1}$$

kde ρ_S reprezentuje hustotu materiálu v pevnej fáze a L je latentné teplo. Nulová hodnota entalpie zodpovedá teplote tuhnutia kvapalnej fázy, ktorú budeme označovať T_f. V jednozložkovom systéme, ktorý uvažujeme v tejto práci, je T_f konštantná . V ďalšom kroku určíme podiel pevnej zložky ϕ v jednotlivých fázach:

$$\begin{aligned} \phi &= 1, \quad \text{pre pevnú fázu,} \\ \phi &= -\frac{H(z,t)}{\rho_S L}, \quad \text{pre prechodnú fázu,} \\ \phi &= 0, \quad \text{pre kvapalnú fázu.} \end{aligned} \tag{2.2}$$

Následne môžeme entalpiu pre jednotlivé fázy vyjadriť v tvare:

$$H(z,t) = \begin{cases} \int_{T'}^{T(z,t)} \rho_S C_S(T')dT' - \rho_S L, & T(z,t) < T_f, \\ -\rho_S L, & T(z,t) = T_f, \\ \int_{T'}^{T(z,t)} \rho_L C_L(T')dT', & T(z,t) > T_f. \end{cases} \tag{2.3}$$

Kde C_S je merná tepelná kapacita pevnej fázy, C_L je merná tepelná kapacita kvapalnej fázy, ρ_S je hustota materiálu v pevnej fáze a ρ_L reprezentuje hustotu materiálu v kvapalnej fáze. Predpokladáme, že C_S nezávisí od teploty T, preto pre pevnú fázu platí

$$H(z,t) = \rho_S C_S \int_{T(z,t)}^{T_f} dT' - \rho_S L = \rho_S C_S[T(z,t) - T_f] - \rho_S L, \quad T(z,t) < T_f. \tag{2.4}$$

Z rovnice (2.4) môžeme teplotu T vyjadriť v tvare

$$T(z,t) = T_f + \frac{H(z,t) + \rho_S L}{\rho_S C_S}, \quad H(z,t) \leq -\rho_S L. \tag{2.5}$$

Podobne pre kvapalnú fázu

$$T(z,t) = T_f + \frac{H(z,t)}{\rho_L C_L}, \quad 0 \leq H(z,t). \tag{2.6}$$

Spolu teda vzťah medzi teplotou a entalpiou v rôznych fázach systému možno vyjadriť v tvare

$$T(z,t) = \begin{cases} T_f + \frac{H(z,t)+\rho_S L}{\rho_S C_S}, & H(z,t) \leq -\rho_S L, \\ T_f, & -\rho_S L < H(z,t) < 0, \\ T_f + \frac{H(z,t)}{\rho_L C_L}, & 0 \leq H(z,t). \end{cases} \tag{2.7}$$

3 Entalpický prístup v diskrétnom prípade

3.1 Metóda konečných objemov

Spôsobom ako v [8] pri spracovaní oblasti medzi hodnotami a a b na osi z. Oblasť rozdelíme na menšie bunky, kde si označíme body, ktoré ohraničujú tieto bunky, ako

$$z_1, z_2, \ldots, z_{m+1}, \tag{3.1}$$

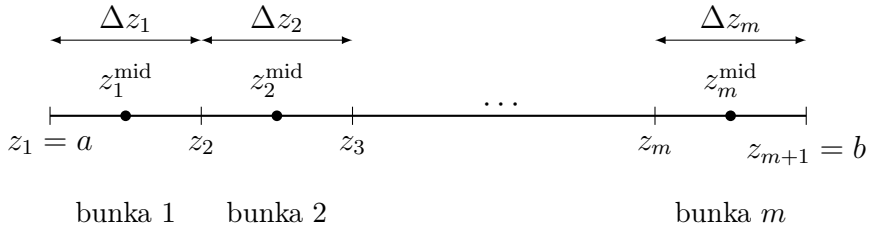
pričom $z_1 = a$ a $z_{m+1} = b$. Oblasť [a,b] rozčleníme na m častí. Pričom veľkosť každej podoblasti (bunky) označíme

$$\Delta z_j = z_{j+1} - z_j. \tag{3.2}$$

Bunky môžu mať rôznu veľkosť, t.j. $\Delta z_i \neq \Delta z_j \quad i \neq j$. Pre každú bunku určíme reprezentatívny bod - uzol, ktorý sa nachádza v jej strede:

$$z^{mid} = z_j + \frac{1}{2}\Delta z_j. \tag{3.3}$$

Priestorovú diskretizáciu zobrazuje obr. 1.



Obr. 1: Priestorová diskretizácia

Uzly nemusia byť rozložené rovnomerne. Vzdialenosti medzi nimi môžu byť rôzne a odvíjajú sa od rozmerov jednotlivých buniek. Ďalším krokom je diskretizácia časovej oblasti $t^{start} < t < t^{end}$, pomocou dielacich bodov

$$t^1, t^2, \ldots, t^{n+1}, \tag{3.4}$$

pričom $t^1 = t^{start}$ a $t^{n+1} = t^{end}$. Hodnoty entalpie H v jednotlivých uzloch označujeme ako

$$H\left(z^{mid}, t^k\right) = H_j^k, \quad j = 1, \ldots, m, \quad k = 1, \ldots, n+1. \tag{3.5}$$

Rovnicu (1.8) integrujeme cez objem $V_j = A\Delta z_j$, kde A je konštantná veľkosť priereзovej plochy v rovine (x, y), a cez časový interval $[t^k, t^{k+1}]$. Ľavá strana rovnice sa dá zapísať ako

$$\int_{t^k}^{t^{k+1}} \int_{V_j} \frac{\partial H}{\partial t}\, dt\, dx\, dy\, dz = \int_{t^k}^{t^{k+1}} \frac{\partial}{\partial t}\left(A \int_{z_j}^{z_{j+1}} H\, dz \right) dt = A \int_{t^k}^{t^{k+1}} \frac{\partial}{\partial t} \int_{z_j}^{z_{j+1}} H\, dz. \tag{3.6}$$

Pravá strana rovnice (3.6) sa dá upraviť na tvar

$$\int_{t^k}^{t^{k+1}} \int_{V_j} \frac{\partial Q}{\partial z}\, dt\, dx\, dy\, dz = A \int_{t^k}^{t^{k+1}} \int_{z_j}^{z_{j+1}} \frac{\partial Q}{\partial z}\, dz\, dt. \tag{3.7}$$

Pre jednorozmerný prípad možeme rovnicu (1.8) napísať pomocou vyššie uvedených výrazov ako

$$\int_{t^k}^{t^{k+1}} \frac{\partial}{\partial t} \int_{z_j}^{z_{j+1}} H\, dz = - \int_{t^k}^{t^{k+1}} \int_{z_j}^{z_{j+1}} \frac{\partial Q}{\partial z}\, dz\, dt. \tag{3.8}$$

Predpokladajme, že rozmer Δz_j je natoľko malý, že hodnotu funkcie H v rámci tejto oblasti môžeme považovať za približne konštantnú. Túto hodnotu potom nahradíme funkčnou hodnotou $H(z_j^{mid}, t)$, teda hodnotou v uzle danej bunky. Potom

$$\int_{z_j}^{z_{j+1}} H\, dz \approx H_j(t)\Delta z_j \tag{3.9}$$

a ľavú stranu rovnice (3.8) môžeme upraviť na tvar

$$\int_{t^k}^{t^{k+1}} \frac{\partial}{\partial t} H_j(t)\, \Delta z_j\, dt = \left[H_j(t^{k+1}) - H_j(t^k)\right] \Delta z_j = \left(H_j^{k+1} - H_j^k\right) \Delta z_j, \tag{3.10}$$

pričom

$$H_j(t) \equiv H(z_j^{mid}, t). \tag{3.11}$$

Podobným spôsobom upravíme aj pravú stranu rovnice (3.8):

$$\int_{t^k}^{t^{k+1}} \int_{z_j}^{z_{j+1}} \frac{\partial Q}{\partial z}\, dz\, dt = \int_{t^k}^{t^{k+1}} \left[Q_{j+1}(t) - Q_j(t)\right]\, dt \tag{3.12}$$

Z tohto sa dostávame k tvaru

$$[H_j(t^{k+1}) - H_j(t^k)]\Delta z_j = -[Q_{j+1}(t) - Q_j(t)]\, dt, \tag{3.13}$$

kde

$$Q_j(t) \equiv Q(z_j, t). \tag{3.14}$$

Predpokladáme, že Δt^k sú dostatočne malé na to, aby sme mohli tepelný tok Q aproximovať konštantou:

$$-\int_{t^k}^{t^{k+1}} \left[Q_{j+1}(t) - Q_j(t)\right] \, dt \approx -\left[Q_{j+1}(t^k) - Q_j(t^k)\right] \Delta t^k = -\left(Q_j^{k+1} - Q_j^k\right) \Delta t^k, \tag{3.15}$$

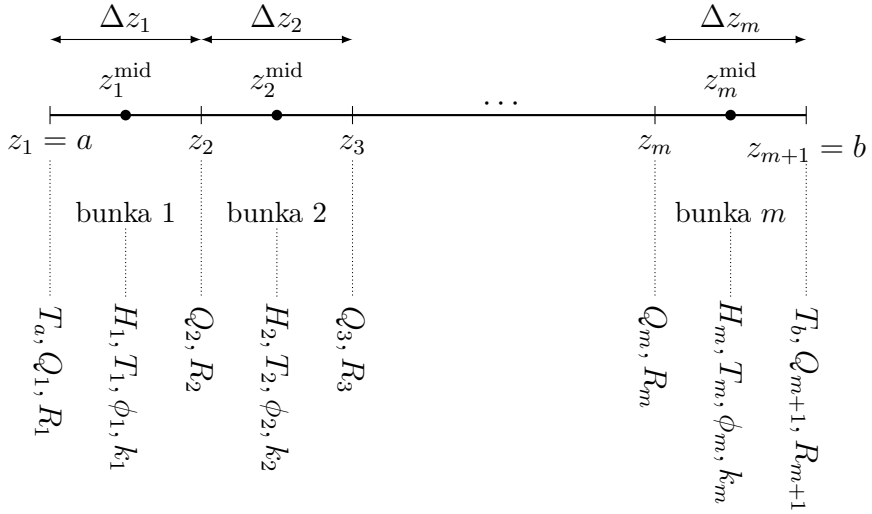
z čoho máme

$$\left(H_j^{k+1} - H_j^k\right) \Delta z_j = -\left(Q_j^{k+1} - Q_j^k\right) \Delta t_k. \tag{3.16}$$

Pre entalpiu H_j^{k+1} teda platí vzťah

$$H_j^{k+1} = H_j^k - \left(Q_j^{k+1} - Q_j^k\right) \frac{\Delta t^k}{\Delta z_i}. \tag{3.17}$$

Entalpiu v tomto prípade definujeme v uzloch, zatiaľ čo tepelný tok na hraniciach buniek, ako je znázornené na obr. 2. V literatúre sa vyskytujú aj pokročilejšie formulácie entalpickej metódy, napríklad implicitné prístupy založené na iteratívnej aktualizácii fázového indikátora (tzv. flag updates), ktoré umožňujú stabilnejšie riešenie nelineárnych úloh s fázovou zmenou (pozri [6]).



Obr. 2: Schéma pre zavedenie parametrov R_j a k_j a premenných H_j, T_j, Q_j, ϕ_j.

3.2 Diskrétna aproximácia tepelného toku

V tejto časti sa budeme zaoberať vzťahom pre diskrétny tepelný tok v čase $j+1$, ktorý pre zjednodušenie označíme ako Q_{j+1}. Predpokladáme, že ide výhradne o vedenie tepla kondukciou, pričom zanedbávame akékoľvek prúdenie. Cieľom je vyjadriť vzťah medzi tepelným tokom Q_{j+1} a teplotami v časových krokoch T_j a T_{j+1}. Definujeme pomocnú premennú $T_{j+\frac{1}{2}}$, ktorá reprezentuje teplotu v deliacom bode mriežky medzi bunkami j a $j+1$. Pri aproximácii tepelného toku Q_{j+1} v bode z_j budeme rozlišovať medzi dolnou bunkou j a hornou bunkou $j+1$

$$Q_{j+1}^{\text{lower}} = -k_j \frac{T_{j+\frac{1}{2}} - T_j}{\frac{1}{2}\Delta z_j}, \quad Q_{j+1}^{\text{upper}} = -k_{j+1} \frac{T_{j+1} - T_{j+\frac{1}{2}}}{\frac{1}{2}\Delta z_{j+1}}. \tag{3.18}$$

Zachovanie tepla vyjadruje vzťah

$$-k_j \frac{T_{j+\frac{1}{2}} - T_j}{\frac{1}{2}\Delta z_j} = Q_{j+1} = -k_{j+1} \frac{T_{j+1} - T_{j+\frac{1}{2}}}{\frac{1}{2}\Delta z_{j+1}}. \tag{3.19}$$

Riešením prvej rovnice pre výraz $T_{j+\frac{1}{2}} - T_j$ a riešením druhej rovnice pre výraz $T_{j+1} - T_{j+\frac{1}{2}}$, z čoho sa dostávame k výsledku

$$T_{j+1} - T_j = -Q_{j+1} \left(\frac{1}{2} \frac{\Delta z_j}{k_j} + \frac{1}{2} \frac{\Delta z_{j+1}}{k_{j+1}} \right), \tag{3.20}$$

odkiaľ

$$Q_{j+1}^k = -\frac{T_{j+1}^k - T_j^k}{R_{j+1}^k}, \tag{3.21}$$

kde

$$R_{j+1}^k = \frac{1}{2} \frac{\Delta z_j}{k_j} + \frac{1}{2} \frac{\Delta z_{j+1}}{k_{j+1}}. \tag{3.22}$$

Rovnice (3.22) a (3.21) upravíme pre priestorový index j do tvaru

$$Q_j^k = -\frac{T_j^k - T_{j-1}^k}{R_j^k}, \quad j = 2, \ldots, m \tag{3.23}$$

a

$$R_j^k = \frac{1}{2} \frac{\Delta z_{j-1}}{k_{j-1}} + \frac{1}{2} \frac{\Delta z_j}{k_j}, \quad j = 2, \ldots, m. \tag{3.24}$$

Veličina R_j predstavuje tepelný odpor medzi bunkami $j-1$ a j. Diskrétna hodnota tepelnej vodivosti k_j sa určuje podľa vzťahu:

$$k_j = k\left(T(z_j^{\text{mid}}, t^k)\right) \tag{3.25}$$

kde z_j^{mid} označuje polohu stredu medzi bunkami a t^k je aktuálny časový krok. Rovnice (3.23) a (3.24) avšak platia len pre body vo vnútri, je potrebné zadefinovať tepelný Q tok pre body na hraniciach pre Q_1 kde $z = z_j$ a Q_{m+1} kde $z = z_{m+1}$. Pokiaľ máme Neumanovú podmienku, a to, že na hranici je predpísaný tepelný tok, potom pre hodnoty platí, že sú definované okrajovou podmienkou

$$Q_1 \equiv Q_a, \quad Q_{m+1} \equiv Q_b. \tag{3.26}$$

Ak však máme Dirichletovú podmienku, čo znamená že na hranici máme predpísanú teplotu, tak pre okrajový bod na ľavej strane platí

$$Q_1 = -\frac{T_1 - T_a}{R_1}, \quad R_1 = \frac{1}{2}\frac{\Delta z_1}{k_1}, \quad \text{pre } z = a = z_1, \tag{3.27}$$

a pre okrajový bod na pravej strane platí

$$Q_{m+1} = -\frac{T_b - T_m}{R_m}, \quad R_m = \frac{1}{2}\frac{\Delta z_m}{k_m}, \quad \text{pre } z = b = z_m. \tag{3.28}$$

V nasledujúcej časti predpíšeme vzťah medzi teplotou T_j^k a entalpiou H_j^k. Podobne ako v spojitom prípade definujeme fázy

$$\begin{aligned} H_j^k &\leq -\rho_S L, \quad \text{pevná fáza,} \\ -\rho_S L < H_j^k &< 0, \quad \text{prechodná fáza,} \\ 0 &\leq H_j^k, \quad \text{kvapalná fáza.} \end{aligned} \tag{3.29}$$

Jednotlivé bunky obsahujú iba kvapalnú látku ak $0 \leq H_j^k$, len pevnú ak $H_j^k \leq -\rho_S L$ a v prípade, že platí $-\rho_S L < H_j^k < 0$ bunka obsahuje aj kvapalnú aj pevnú časť látky, v tomto prípade definujeme pomer pevnej časti látky v prechodnej fáze ako

$$\phi_j^k = -\frac{H_j^k}{\rho_S L}, \tag{3.30}$$

v kvapalnej fáze platí $\phi_j^k = 0$ a v pevnej že $\phi_j^k = 1$.

Priestorové rozloženie pevnej, kvapalnej a prechodnej oblasti sa dá určiť analýzou numerického riešenia pre entalpiu. V prípade jednozložkového systému s konštantnou teplotou tuhnutia predpokladáme, že prechodná oblasť sa objaví iba v jednej bunke, ktorá zodpovedá aktuálnej polohe fázového rozhrania. Vzťah teploty T_j^k a entalpie H_j^k v jednotlivých fázach môžeme vyjadriť ako:

$$T_j^k = \begin{cases} T_f + \frac{H_j^k + \rho_S L}{\rho_S C_S}, & \text{pre } H_j^k \leq -\rho_S L, \\ T_f, & \text{pre } -\rho_S L < H_j^k < 0, \\ T_f + \frac{H_j^k}{\rho_L C_L}, & \text{pre } 0 \leq H_j^k. \end{cases} \tag{3.31}$$

4 Difúzia tepla

V nasledujúcej časti sa zameriame na prenos tepla kondukciou. Prevedieme numerickú simuláciu prenosu tepla v prípade, keď nedochádza k zmene fázy. Rozmernú formuláciu úlohy prevedieme do bezrozmerného tvaru. Na ich odlíšenie budeme používať horný index *, ktorý bude označovať rozmerné premenné. Uvažujme kvapalné prostredie, ktoré má pred začiatkom experimentu homogénnu teplotu T^*_∞ v oblasti $z^* > 0$. V okamihu $t^* = 0$ na ľavom okraji oblasti náhle zmeníme teplotu na hodnotu T^*_B. Pre $t^* > 0$ a dostatočne veľké vzdialenosti z^* zostáva teplota prostredia rovná T^*_∞. Popísanú úlohu môžeme formulovať pomocou rovnice vedenia tepla s hraničnými podmienkami

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} = \kappa^* \frac{\partial^2 T^*}{\partial z^{*2}}, \tag{4.1}$$

$$T^*_a = T^*_B, \quad T^*_b = T^*_\infty \tag{4.2}$$

kde $\kappa^* = k^*/\rho^* C^*$ označuje teplotnú difuzivitu materiálu.

4.1 Entalpická formulácia

Entalpickú formuláciu najskôr aplikujeme na prípad difúzie tepla bez fázovej zmeny na priestorovej oblasti $a^* < z^* < b^*$. V tejto podkapitole používame prístup ako v minuloročnej diplomovej práci (pozri [5]). V tomto modeli sa bude nachádzať len kvapalná fáza, pevná ani prechodná sa v ňom nevyskytujú. V prvom kroku model zbezrozmerníme. Zavedieme dĺžkovú škálu l^* a časovú škálu l^{*2}/κ^*. Nezávislé, bezrozmerné premenné definujeme v tvare

$$z = \frac{z^*}{l^*}, \qquad t = \frac{t^* \kappa^*}{l^{*2}}. \tag{4.3}$$

Pre jednootlivé závislé premenné zavedieme škály a posuny v nasledovnom tvare.

1. **Teplota T^*:**

$$\text{posun: } T^* = T^*_\infty, \qquad \text{škála: } \Delta T^* \equiv T^*_B - T^*_\infty. \tag{4.4}$$

2. **Entalpia H^*:** Pomocou rovnice (1.7) zavedieme škálu:

$$\Delta H^* \equiv \rho^* C^* \Delta T^* \tag{4.5}$$

3. **Tepelný tok Q^*:** Pomocou rovnice (1.6) zavedieme škálu:

$$\Delta Q^* \equiv \frac{k^* \Delta T^*}{l^*}. \tag{4.6}$$

4. **Tepelný odpor R^*:** Uvažujeme škálu:

$$\Delta R^* \equiv \frac{\Delta T^*}{\Delta Q^*} \equiv \frac{l^*}{k^*}. \tag{4.7}$$

Bezrozmerné závislé premenné potom možno zadefinovať nasledovne:

$$T = \frac{T^* - T^*_\infty}{\Delta T^*}, \quad H = \frac{H^*}{\Delta H^*}, \quad Q = \frac{Q^*}{\Delta Q^*}, \quad R = \frac{R^*}{\Delta R^*}. \tag{4.8}$$

V ďalšom kroku pristúpime k zbezrozmerneniu diskrétnych premenných zavedených v kap. 3. Najskôr odvodíme bezrozmerné tepelné toky Q_1 a Q_{m+1}, ktoré sú definované v okrajových bodoch oblasti $z^* = z^*_1 = a^*$ a $z^* = z^*_{m+1} = b^*$. Z rovnice (3.27) máme

$$Q^*_1 = -\frac{T^*_1 - T^*_a}{R^*_1}, \quad \text{kde} \quad R^*_1 = \frac{\Delta z^*_1}{2\, k^*_1}, \qquad \text{v bode } z^* = z^*_1 = a^*. \tag{4.9}$$

Využitím rovníc (4.6) a (4.7) môžeme rovnicu (4.9) prepísať na

$$\begin{gathered} Q_1 = -\frac{T_1 - T_a}{R_1}, \quad \text{kde} \quad R_1 = \frac{1}{2}\,\Delta z_1, \\ T_1 \equiv \frac{T^*_1 - T^*_\infty}{\Delta T^*}, \quad T_a \equiv \frac{T^*_a - T^*_\infty}{\Delta T^*}, \quad \text{v bode } z = z_1 = a. \end{gathered} \tag{4.10}$$

Podobne pomocou rovnice (3.28) pre Q^*_{m+1} platí

$$Q^*_{m+1} = -\frac{T^*_b - T^*_m}{R^*_m}, \quad \text{kde} \quad R^*_m \equiv \frac{\Delta z^*_m}{2\, k^*_m}, \qquad \text{v bode } z^* = z^*_{m+1} = b^*. \tag{4.11}$$

Analogicky ako pre rovnicu (4.10) môžeme (4.11) prepísať na

$$Q_{m+1} = -\frac{T_b - T_m}{R_m}, \quad \text{kde} \quad R_m \equiv \frac{1}{2}\,\Delta z_m,$$
$$T_b \equiv \frac{T_b^* - T_\infty^*}{\Delta T^*}, \quad T_m \equiv \frac{T_m^* - T_\infty^*}{\Delta T^*}, \quad \text{v bode } z = z_{m+1} = b. \tag{4.12}$$

Pre tepelný tok Q_j^* v ľubovoľnom vnútornom bode z rovnice (3.23) platí

$$Q_j^* = -\frac{T_j^* - T_{j-1}^*}{R_j^*}, \qquad R_j^* = \frac{\Delta z_{j-1}^*}{2\,k_{j-1}^*} + \frac{\Delta z_j^*}{2\,k_j^*}. \tag{4.13}$$

Pomocou rovníc (4.6) a (4.7) možeme rovnicu (4.13) prepísať do bezrozmerného tvaru

$$Q_j = -\frac{T_j - T_{j-1}}{R_j}, \quad \text{kde} \quad R_j = \frac{\Delta z_{j-1}}{2\,k_{j-1}} + \frac{\Delta z_j}{2\,k_j}, \tag{4.14}$$

a pre teplotu určíme

$$T_j \equiv \frac{T_j^* - T_\infty^*}{\Delta T^*}, \quad j = 2, \ldots, m. \tag{4.15}$$

Z rovnice (3.17) pre rozmernú entalpiu platí

$$H_j^{(k+1)*} = H_j^{k*} - \left(Q_{j+1}^{k*} - Q_j^{k*}\right) \frac{\Delta t^{k*}}{\Delta z_j^*}. \tag{4.16}$$

Prechodom do bezrozmerných veličín máme

$$H_j^{k+1} = H_j^k - \left(Q_{j+1}^k - Q_j^k\right) \frac{\Delta t^k}{\Delta z_j}. \tag{4.17}$$

V jednostrannom modeli však vystupuje iba kvapalná fáza, preto pre teplotu z rovnice (2.7) platí:

$$T_j^{k*} = T_f^* + \frac{H_j^{k*}}{\rho^* C^*}, \qquad \text{pre } 0 \le H_j^{k*}. \tag{4.18}$$

Konečný bezrozmerný tvar dostávame po odčítaní T_f^* a následnom predelení rovnice (4.18)

$$\begin{aligned} T_j^k &= H_j^k, \quad 0 \le H_j^k, \\ \Phi_j^k &= 0, \quad 0 \le H_j^k. \end{aligned} \tag{4.19}$$

Keďže sme zvolili $T_a^* = T_B^*$ a $T_b^* = T_\infty^*$, tak platí $T_a = 1$ a $T_b = 0$.

4.1.1 Sumár bezrozmerných diskrétnych rovníc

Teplota T

$$T = \frac{T^* - T_\infty^*}{\Delta T^*}, \qquad \Delta T^* \equiv T_B^* - T_\infty^*. \tag{4.20}$$

Entalpia H

$$H = \frac{H^*}{\Delta H} \qquad \Delta H^* \equiv \rho^* C^* \Delta T^*. \tag{4.21}$$

Tepelný tok Q

$$Q = \frac{Q^*}{\Delta Q^*}, \qquad \Delta Q^* \equiv \frac{k^* \Delta T^*}{l^*}. \tag{4.22}$$

Tepelný odpor

$$R = \frac{R^*}{\Delta R^*}, \qquad \Delta R \equiv \frac{l^*}{k^*}. \tag{4.23}$$

Diskrétny tepelný tok Q na mriežke

$$Q_j = -\frac{T_j - T_{j-1}}{R_j}, \quad \text{kde} \quad R_j = \frac{\Delta z_{j-1}}{2\,k_{j-1}} + \frac{\Delta z_j}{2\,k_j}. \tag{4.24}$$

Diskrétna entalpia na mriežke:

$$H_j^{k+1} = H_j^k - \frac{\Delta t}{\Delta z}\left(Q_{j+1}^k - Q_j^k\right). \tag{4.25}$$

4.2 Numerická implementácia entalpického algoritmu

Pre vstupné parametre $k^* = 1,\ \rho^* = 1$ a $C^* = 1$, rovnica (4.1) nadobúda tvar

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}. \tag{4.26}$$

Na rovnicu (4.26) aplikujeme explicitnú metódu konečných objemov (FVM) v jazyku `Python`, ktorej implementácia je uvedená v prílohe A. Vzhľadom na vynechanie fázovej zmeny je entalpia totožná s teplotou ($H = T$). Na hraniciach oblasti boli uplatnené podmienky, ktoré sme odvodili v podkapitole 4.1:

$$T_a = T(0,t) = 1, \qquad T_b = T(1,t) = 0. \tag{4.27}$$

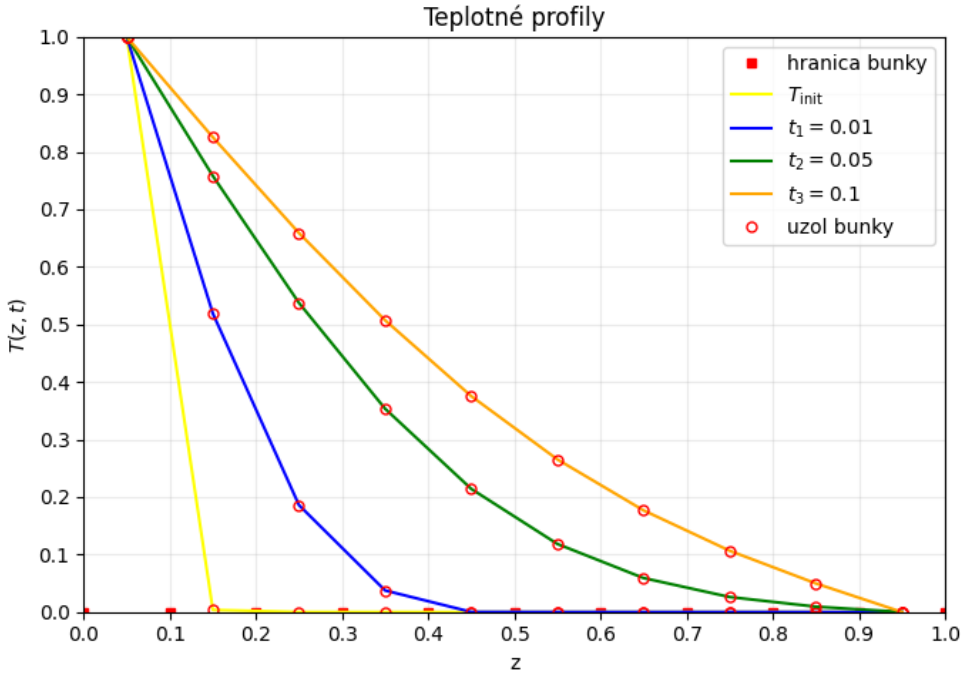
Počiatočný profil teploty bol definovaný ako prechod medzi týmito hodnotami pre malý čas $t_{\text{init}} = 10^{-3}$. Výpočet bol vykonaný na mriežke s $m = 10$ bunkami. Stabilita schémy je zabezpečená splnením podmienky CFL (Courant–Friedrichs–Lewy)

$$\Delta t \leq \frac{1}{2}(\Delta z)^2. \tag{4.28}$$

Implementovaná numerická schéma postupne v čase aktualizuje hodnoty entalpie (teploty) v jednotlivých bunkách podľa vzťahu

$$H_j^{k+1} = H_j^k - \frac{\Delta t}{\Delta z}(Q_{j+1}^k - Q_j^k), \qquad Q_j^k = -\frac{T_j^k - T_{j-1}^k}{R_j}. \tag{4.29}$$

Pre rovnomernú mriežku s konštantnou tepelnou vodivosťou platí $R_j = \Delta z$. obr. 3 zobrazuje teplotné profily v čase $t_1 = 0,01, t_2 = 0,05$ a $t_3 = 0,1$.



Obr. 3: Teplotné profily v jednotlivých časoch spoločne s počiatočným teplotným profilom T_{init}.

5 Jednostranný prípad s fázovou zmenou

V predchádzajúcej podkapitole sme prezentovali entalpickú formuláciu pre jednorozmerné vedenie tepla v prípade, že sa v modeli nevyskytuje fázová zmena. Tento

model sme použili najmä na overenie numerickej schémy metódy konečných objemov, keď entalpia je priamo rovná teplote ($H = T$).

V nasledujúcej časti túto formuláciu rozšírime na prípad, kedy sa už v modeli vyskytuje fázová zmena, podobne ako v práci [5]. Budeme uvažovať jednostranný Stefanov problém, v ktorom dochádza k zmene fázy, a to konkrétne z kvapalnej na pevnú. Tento jav sa nazýva aj solidifikácia. V jednostrannom probléme predpokladáme, že teplota sa mení v čase len v pevnej fáze a teplota v kvapalnej je konštantná a rovná teplote topenia T_f^*.

5.1 Entalpická formulácia: Rozmerný tvar

Entalpická formulácia je pri problémoch so zmenou fázy veľmi praktická, pretože pri jej použití nemusíme priamo určovať polohu fázového rozhrania. V tejto časti sa zameriame na aplikáciu entalpickej formulácie na jednorozmerný model solidifikácie a následne zavedieme jeho bezrozmerný tvar podobne ako v modeli v kapitole 4.1. Zavedieme dĺžkovú škálu l^* a časovú škálu l^{*2}/κ a nezávislé premenné z a t v rovnakom tvare ako (4.3). Pre premenné H^*, R^* a Q^* platia rovnaké výrazy ako v (4.5), (4.6) a (4.7). Pre premennú T^* definujeme posun T_f^* a škálu $\Delta T^* \equiv T_f^* - T_a$. Pre bezrozmerné premenné potom platí

$$T(z,t) = \frac{T^*(z^*,t^*) - T_f^*}{\Delta T^*} \tag{5.1}$$

$$H(z,t) = \frac{H^*(z^*,t^*)}{\Delta H^*}. \tag{5.2}$$

$$R = \frac{R^*}{\Delta R^*}. \tag{5.3}$$

$$Q(z,t) = \frac{Q^*(z^*,t^*)}{\Delta Q^*}. \tag{5.4}$$

5.2 Entalpická formulácia: Bezrozmerný tvar

V tejto podkapitole zostavíme rovnice bezrozmernej entalpickej formulácie v diskrétnom tvare pre prípad jednostrannej solidifikácie. Budeme pritom vychádzať z predpokladu, že teplota sa v čase mení iba v pevnej fáze, zatiaľ čo v kvapalnej fáze zostáva konštantná a je rovná teplote tuhnutia T_f^*. Z kap 4.1 vieme že pre tepelný tok Q_1 v

okrajovom bode $z^* = z_1^* = a$ platí

$$Q_1 = -\frac{T_1 - T_a}{R_1}, \qquad R_1 = \frac{1}{2}\,\Delta z_1, \qquad \text{v bode } z = z_1 = a. \tag{5.5}$$

Analogicky pre Q_{m+1} v okrajovom bode $z^* = z_{m+1}^* = b$ platí

$$Q_{m+1} = -\frac{T_b - T_m}{R_m}, \qquad R_m = \frac{1}{2}\,\Delta z_m, \qquad \text{v bode } z = z_{m+1} = b. \tag{5.6}$$

Pre Q_j všeobecne platí

$$Q_j = -\frac{T_j - T_{j-1}}{R_j}, \qquad R_j = \frac{1}{2}\,(\Delta z_{j-1} + \Delta z_j), \qquad j = 2, \ldots, m. \tag{5.7}$$

V ľubovoľnom časovom okamihu t^k majú rovnice (5.5), (5.6) a (5.7) tvar

$$Q_1^k = -\frac{T_1^k + 1}{R_1}, \qquad Q_{m+1}^k = \frac{T_m^k}{R_m}, \qquad Q_j^k = -\frac{T_j^k - T_{j-1}^k}{R_j}. \tag{5.8}$$

Bezrozmerná entalpia má rovnako ako v kap. 4.1 tvar

$$H_j^{(k+1)} = H_j^k - \left(Q_{j+1}^k - Q_j^k\right) \frac{\Delta t^k}{\Delta z_j}. \tag{5.9}$$

Predpokladáme, že pevná a kvapalná fáza majú rovnaké materiálové parametre:

$$\rho_S^* = \rho_L^* \equiv \rho^*, \tag{5.10}$$

$$C_S^* = C_L^* \equiv C^*, \tag{5.11}$$

$$k_S^* = k_L^* \equiv k^*, \tag{5.12}$$

$$\kappa^{S*} = \kappa^{L*} = \kappa^* \equiv \frac{k^*}{\rho^* C^*}. \tag{5.13}$$

Pomocou rovnice (2.7) pre teplotu v pevnej fáze platí

$$T_j^k = H_j^k + S, \quad \text{ak} \quad -S < H_j^k < 0. \tag{5.14}$$

Kde $S = L^*/(C^*\Delta T^*)$ je bezrozmerné Stefanovo číslo. Podobne pre teplotu v prechodnej fáze

$$T_j^k = 0, \quad \text{ak} \quad -S < H_j^k < 0. \tag{5.15}$$

Pre teplotu v kvapalnej fáze

$$T_j^k = H_j^k, \quad \text{ak} \quad 0 \leq H_j^k. \tag{5.16}$$

Spolu

$$T_j^k = \begin{cases} H_j^k + S, & H_j^k \leq -S, \qquad \text{pevná fáza,} \\ 0, & -S < H_j^k < 0, \qquad \text{prechodná fáza,} \\ H_j^k, & 0 \leq H_j^k, \qquad \text{kvapalná fáza.} \end{cases} \tag{5.17}$$

Pre teplotu T na hraniciach platí

$$T_a = \frac{T_a^* - T_f^*}{\Delta T^*}, \qquad T_b = \frac{T_b^* - T_f^*}{\Delta T^*}, \qquad \text{kde} \quad \Delta T^* \equiv T_f^* - T_a^*. \tag{5.18}$$

Odkiaľ máme, že teplota na ľavom okraji $T_a = -1$, čo sa týka teploty na okraji T_b, ako sme spomínali vyššie tak teplota po fázovej zmene v kvapalnej fáze sa je konštantná a rovná T_f^*, takže bude rovná T_f^* aj na konci mriežky. Z čoho vyplýva $T_b^* = T_f^*$ takže $T_b = 0$. Pre funkciu ϕ_j^k, určujúcu podiel pevnej fázy v prechodnej fáze, platí

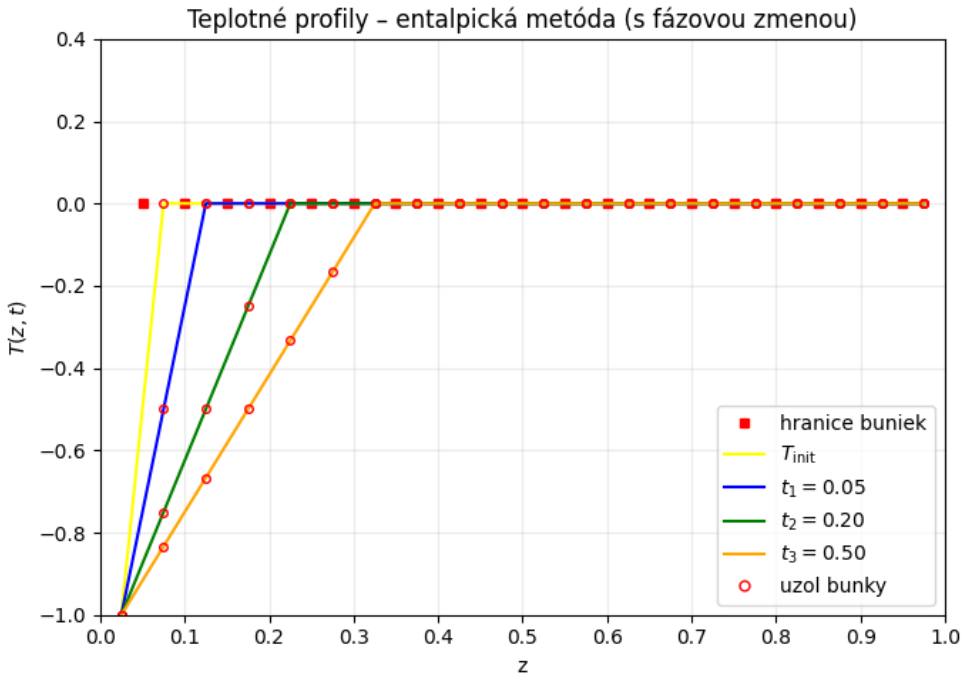
$$\phi_j^k = -\frac{H_j^{k*}}{\rho_S^* L^*} = -\frac{H_j^{k*}}{\Delta H^*}\frac{\Delta H^*}{\rho^* L^*} = -H_j^k \frac{1}{S}.$$

Vzťah v každej fáze môžeme teda zapísať

$$\phi_j^k = \begin{cases} 1, & H_j^k \leq -S, \qquad \text{pevná fáza,} \\ -\dfrac{1}{S} H_j^k, & -S < H_j^k < 0, \qquad \text{prechodná fáza,} \\ 0, & 0 \leq H_j^k, \qquad \text{kvapalná fáza.} \end{cases} \tag{5.19}$$

5.3 Numerická implementácia

Numerickú implementáciu sme realizovali v jazyku `Python` (pozri príloha B. Vstupné parametre sú $T_a = -1, T_b = 0, k_S = k_L = 1, \rho = 1, C = 1$ a $S = 10$. Aj v tomto prípade stabilitu riešenia zabezpečuje CFL podmienka podľa vzťahu (4.28). Numerická schéma postupne v čase aktualizuje hodnoty entalpie v jednotlivých bunkách podľa vzťahu (5.9), z ktorých následne vyjadrí teplotu a fázovú funkciu ϕ. Výstup z tejto numerickej implementácie je zobrazený na obr. 4. Vidíme, že čím dlhší je čas v ktorom vykresľujeme teplotný profil, tým sa hranica fázoveho rozhrania posúva k pravému okraju. To znamená, že väčšia časť materiálu je v pevnej fáze.



Obr. 4: Teplotné profily v jednotlivých časoch spoločne s počiatočným teplotným profilom T_{init}.

Na obr. 5 je znázornený časový vývoj polohy fázového rozhrania $h(t)$. Poloha rozhrania bola určená z numerického riešenia entalpickej formulácie Stefanovho problému (príloha B). Poloha rozhrania je rastúca funkcia času. To znamená, že pevná fáza sa postupne rozširuje. Na začiatku procesu je posun rýchlejší, čo súvisí s veľkým teplotným gradientom v blízkosti ľavej hranice oblasti. S rastúcim časom sa však tento gradient zmenšuje a rýchlosť pohybu fázového rozhrania sa postupne spomaľuje. Podľa [4] je takýto charakter správania typický pre Stefanove úlohy, kde analytické riešenia pre po-

lonekonečné oblasti ukazujú, že poloha rozhrania je asymptoticky úmerná odmocnine z času

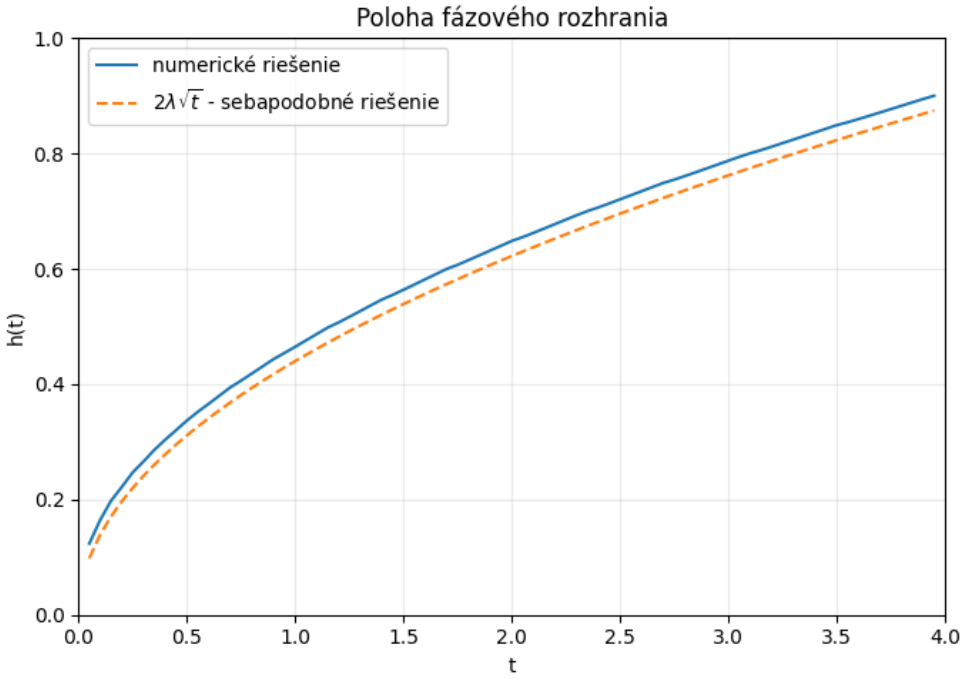
$$h(t) \sim \sqrt{t}. \tag{5.20}$$

Pre porovnanie bola do obr. 5 pridaná aj referenčná krivka analytického riešenia Stefanovho problému, ktorá má tvar

$$h(t) = 2\lambda\sqrt{t}. \tag{5.21}$$

Konštanta λ bola určená numerickým riešením transcendentnej rovnice

$$\sqrt{\pi}\lambda e^{\lambda^2}\,\mathrm{erf}(\lambda) = \frac{1}{S}. \tag{5.22}$$



Obr. 5: Poloha fázového rozhrania spoločne s referenčnou krivkou sebapodobného riešenia.

6 Dvojstranný prípad s fázovou zmenou

V kap. 5 sme sa zaoberali jednostranným Stefanovým problémom, v ktorom sme predpokladali, že kvapalná fáza má teplotu topenia T_f^* a teplota sa vyvíja iba v pevnej

fáze. Tento predpoklad viedol k výraznému zjednodušeniu modelu, keďže vedenie tepla v kvapalnej fáze sa explicitne neuvažuje a dynamika rozhrania je určovaná výlučne tepelným tokom v pevnej fáze.

V mnohých praktických situáciách sa však teplo šíri v oboch fázach a teplota kvapaliny sa môže významne líšiť od T_f^*. V takom prípade je potrebné uvažovať tzv. dvojstranný Stefanov problém.

6.1 Entalpická formulácia: Rozmerný tvar

V tejto časti sformulujeme dvojstranný Stefanov problém v rozmernom tvare. Na rozdiel od jednostranného prípadu sa teplo šíri v pevnej aj kvapalnej fáze. Predpokladáme, že hustota materiálu je konštantná a rovnaká v oboch fázach

$$\rho_S^* = \rho_L^*, \tag{6.1}$$

avšak merná tepelná kapacita a tepelná vodivosť v pevnej a kvapalnej fáze sú rôzne

$$C_S^* \neq C_L^*, \qquad k_S^* \neq k_L^*. \tag{6.2}$$

Rozmernú entalpiu na jednotku objemu definujeme vzťahom

$$H^*(T^*, \phi) = \rho^* C^*(\phi)\,(T^* - T_f^*) + \rho^* L^* \phi, \tag{6.3}$$

kde T_f^* je teplota pri ktorej dochádza k fázovému prechodu a

$$C^*(\phi) = \begin{cases} C_S^*, & \phi = 1, \\ \phi C_S^* + (1-\phi) C_L^*, & 0 < \phi < 1, \\ C_L^*, & \phi = 0. \end{cases} \tag{6.4}$$

$$k^*(\phi) = \begin{cases} k_S^*, & \phi = 1, \\ \phi k_S^* + (1-\phi) k_L^*, & 0 < \phi < 1, \\ k_L^*, & \phi = 0. \end{cases} \tag{6.5}$$

Rovnica vedenia tepla v entalpickom tvare má jednotný tvar pre obe fázy

$$\frac{\partial H^*}{\partial t^*} = \frac{\partial}{\partial z^*}\left(k^*(\phi)\frac{\partial T^*}{\partial z^*}\right). \tag{6.6}$$

Rovnica (6.6) platí na celej oblasti $a^* \leq z^* \leq b^*$ bez potreby explicitného určovania polohy rozhrania medzi fázami. Okrajové podmienky volíme Dirichletovho typu

$$T^*(a^*, t^*) = T_a^*, \qquad T^*(b^*, t^*) = T_b^*, \tag{6.7}$$

pričom uvažujeme

$$T_a^* < T_f^*, \qquad T_b^* > T_f^*. \tag{6.8}$$

Počiatočný stav je daný teplotným profilom

$$T^*(z^*, 0) = T_0^*(z^*), \tag{6.9}$$

6.2 Entalpická formulácia: Bezrozmerný tvar

Materiálové parametre kvapalnej fázy použijeme ako referenčné. Rozdiely medzi pevnou a kvapalnou fázou vyjadríme bezrozmernými pomermi tepelných vodivostí a kapacít. Rovnako ako v kap. 5, použijeme dĺžkovú škálu l^* a časovú škálu $(l^*)^2/\kappa_L^*$ a zavedieme bezrozmerné premenné v tvare (4.3). Pre premenné H^*, R^* a Q^* platia vzťahy (4.5), (4.6) a (4.7). Pre premennú T^* definujeme posun T_f^* a škálu

$$\Delta T^* = T_f^* - T_a^*. \tag{6.10}$$

Na základe definície bezrozmernej teploty môžeme určiť bezrozmerné okrajové podmienky. Pre ľavý okraj oblasti platí

$$T_a = \frac{T_a^* - T_f^*}{\Delta T^*}. \tag{6.11}$$

Po dosadení $\Delta T^* = T_f^* - T_a^*$ dostávame $T_a = -1$. Analogicky pre pravý okraj oblasti dostávame

$$T_b = \frac{T_b^* - T_f^*}{\Delta T^*} = \frac{T_b^* - T_f^*}{T_f^* - T_a^*}. \tag{6.12}$$

Hodnota T_b teda vo všeobecnosti závisí od zvolenej teploty na pravom okraji T_b^*. V numerickej implementácii budeme pre jednoduchosť uvažovať symetrickú voľbu okrajových teplôt vzhľadom na teplotu tuhnutia, teda

$$T_a = -1, \qquad T_b = 1. \tag{6.13}$$

Bezrozmerné závislé premenné definujeme v tvare

$$T(z,t) = \frac{T^*(z^*,t^*) - T_f^*}{\Delta T^*}, \tag{6.14}$$

$$H(z,t) = \frac{H^*(z^*,t^*)}{\rho^* C_L^* \Delta T^*}, \tag{6.15}$$

$$R = \frac{R^*}{l^*/k_L^*}, \tag{6.16}$$

$$Q(z,t) = \frac{Q^*(z^*,t^*)}{k_L^* \Delta T^*/l^*}. \tag{6.17}$$

Pri zavedení referenčnej difuzivity kvapalnej fázy $\kappa_L^* = k_L^*/(\rho^* C_L^*)$ a škály entalpie $\rho^* C_L^* \Delta T^*$ sa všetky materiálové parametre vyjadria vzhľadom na vlastnosti kvapalnej fázy.

$$\rho = \frac{\rho_S^*}{\rho_L^*}, \tag{6.18}$$

Vyjadruje pomer hustôt materiálu v pevnej a kvapalnej fáze, avšak na začiatku kap. 6, predpokladáme, že tieto hustoty sú rovnaké. Preto parameter $\rho = 1$.

$$\beta = \frac{C_S^*}{C_L^*} \tag{6.19}$$

vyjadruje pomer tepelných kapacít pevnej a kvapalnej fázy, a určuje sklon vzťahu medzi teplotou a entalpiou v pevnej oblasti.

$$\lambda = \frac{k_S^*}{k_L^*} \tag{6.20}$$

je pomer tepelných vodivostí oboch fáz a určuje rozdiel v schopnosti vedenia tepla v pevnej a kvapalnej oblasti. Analogicky ako v kap. 5.2 pre tepelné toky vo vnútorných

bodoch $j = 2, \ldots, m$ máme vzťahy

$$Q_j^k = -\frac{T_j^k - T_{j-1}^k}{R_j^k}, \tag{6.21}$$

kde

$$R_j^k = \frac{\Delta z_{j-1}}{2\, k_{j-1}^k} + \frac{\Delta z_j}{2\, k_j^k}. \tag{6.22}$$

Pre okrajové body majú distkrétne toky tvar

$$Q_1^k = -\frac{T_1^k - T_a}{R_1^k}, \qquad Q_{m+1}^k = -\frac{T_b - T_m^k}{R_m^k}. \tag{6.23}$$

Diskrétna entalpická rovnica má rovnaký tvar ako v kap. 5,

$$H_j^{k+1} = H_j^k - \frac{\Delta t^k}{\Delta z_j}\left(Q_{j+1}^k - Q_j^k\right). \tag{6.24}$$

V kvapalnej fáze ($\phi = 0$) z rovnice (6.3) dostávame

$$H^* = \rho^* C_L^* \left(T^* - T_f^*\right). \tag{6.25}$$

Po zavedení bezrozmerných premenných (6.14) a (6.15) v kvapalnej fáze platí

$$H = T, \tag{6.26}$$

Bezrozmerný vzťah medzi teplotou a entalpiou môžeme vyjadriť v tvare

$$T_j^k = \begin{cases} \dfrac{H_j^k + S}{\beta}, & H_j^k \le -S, \quad \text{pevná fáza,} \\ 0, & -S < H_j^k < 0, \quad \text{prechodná fáza,} \\ H_j^k, & 0 \le H_j^k, \quad \text{kvapalná fáza.} \end{cases} \tag{6.27}$$

Podiel pevnej fázy je daný vzťahom ako v kap. 5

$$\phi_j^k = \begin{cases} 1, & H_j^k \leq -S, \quad \text{pevná fáza,} \\ -\dfrac{H_j^k}{S}, & -S < H_j^k < 0, \quad \text{prechodná fáza,} \\ 0, & 0 \leq H_j^k. \quad \text{kvapalná fáza.} \end{cases} \tag{6.28}$$

Bezrozmerná tepelná vodivosť, ktorá vystupuje v bezrozmernom odpore R_j^k, je

$$k_j^k = \begin{cases} \lambda, & \phi_j^k = 1, \quad \text{pevná fáza,} \\ \phi_j^k \lambda + (1 - \phi_j^k), & 0 < \phi_j^k < 1, \quad \text{prechodná fáza,} \\ 1, & \phi_j^k = 0. \quad \text{kvapalná fáza.} \end{cases} \tag{6.29}$$

6.3 Vzťah k modelu pre jednostranný prípad s fázovou zmenou

V tejto časti ukážeme, že dvojstranný model v kap. 6.2 predstavuje zovšeobecnenie modelu z kapitoly 5. Ak zvolíme

$$\beta = 1, \qquad \lambda = 1, \tag{6.30}$$

teda

$$C_S^* = C_L^*, \qquad k_S^* = k_L^*, \tag{6.31}$$

bezrozmerný vzťah medzi teplotou a entalpiou sa zjednoduší na

$$T_j^k = \begin{cases} H_j^k + S, & H_j^k \leq -S, \quad \text{tuhá fáza} \\ 0, & -S < H_j^k < 0, \quad \text{prechodná fáza} \\ H_j^k, & 0 \leq H_j^k, \quad \text{kvapalná fáza} \end{cases} \tag{6.32}$$

a bezrozmerná tepelná vodivosť nadobudne hodnotu

$$k_j^k \equiv 1. \tag{6.33}$$

V tomto prípade sa teda model redukuje na model uvažovaný v kapitole 5.

6.4 Numerická implementácia

V tomto prípade sme numerické výpočty a vizualizáciu výsledkov realizovali v jazyku `Python` (pozri príloha C). Vstupné parametre sú $T_a = -1, T_b = 1, \beta = 2, \lambda = 1$, $\rho = 1$ a $S = 10$. Počet buniek sme v dvojstrannom prípade zvýšili 1,5-násobne oproti jednostrannému prípadu, pretože rýchlosť projekcie fázoveho rozhrania je v dvojstrannom prípade pomalšia. V pevnej fáze platí vzťah medzi entalpiou a teplotou

$$T = \frac{H + S}{\beta}. \tag{6.34}$$

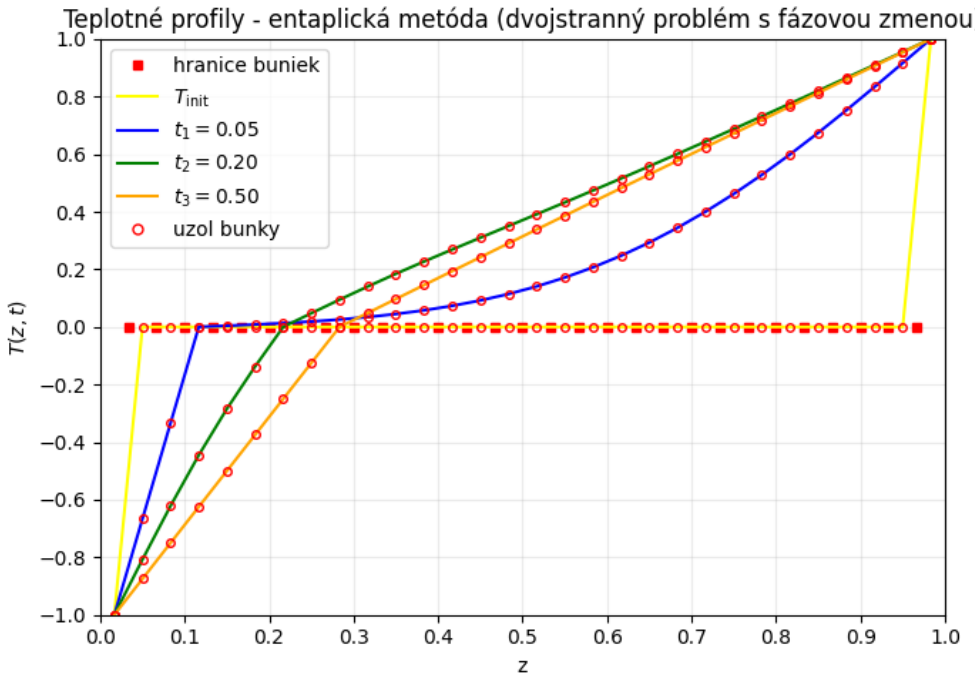
Po dosadení vzťahu (6.34) do vzťahu $\partial/\partial z \left(k_S \partial T/\partial z\right)$ a využití definície bezrozmerného parametra $\lambda = k_S^*/k_L^*$ dostávame

$$k_S \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\lambda}{\beta} \frac{\partial H}{\partial z}, \tag{6.35}$$

z čoho vyplýva, že efektívny koeficient pri druhých deriváciách entalpie je λ/β. Keďže použitá časová schéma je explicitná, časový krok musí spĺňať stabilitnú podmienku pre difúzny operátor. V dvojstrannom modeli je bezrozmerná difuzivita v kvapalnej fáze rovná 1, zatiaľ čo v pevnej fáze nadobúda hodnotu λ/β. Preto sa časový krok volí v tvare

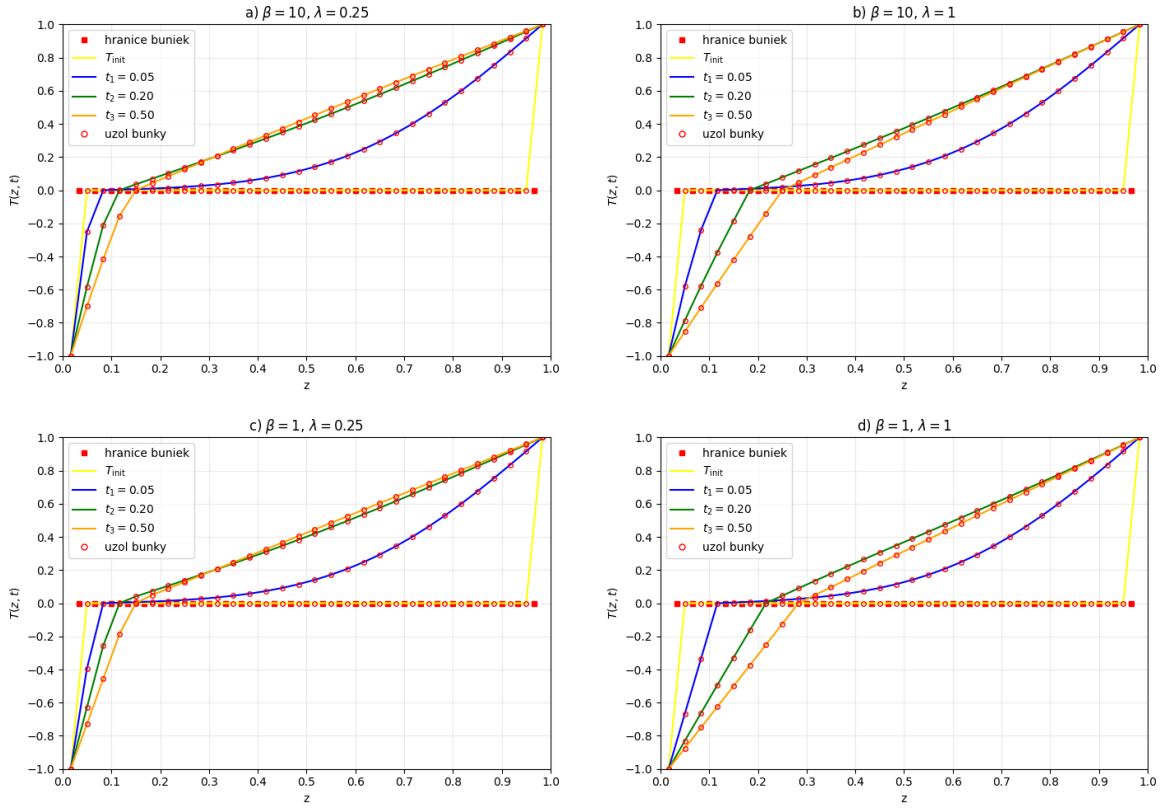
$$\Delta t \leq \frac{1}{2} \frac{\Delta z^2}{\max\left(1, \lambda/\beta\right)}. \tag{6.36}$$

Pri $\lambda = 1$ a $\beta = 1$ sa podmienka redukuje na tvar použitý v kap. 5. Na obr. 6 sú znázornené teplotné profily v jednotlivých časoch. S rastúcim časom sa oblasť so zápornou teplotou postupne rozširuje smerom k pravému okraju, čo znamená, že sa v materiáli zväčšuje podiel látky v pevnej fáze. Hranica fázového rozhrania sa posúva doprava, čo zodpovedá postupujúcemu tuhnutiu od ľavej steny. Na rozdiel od jednostranného modelu je teplota nehomogénna v oboch fázach materiálu, pričom rozdielne materiálové vlastnosti sú zohľadnené prostredníctvom parametrov β a λ.



Obr. 6: Teplotné profily v jednotlivých časoch spoločne s počiatočným teplotným profilom T_{init}.

Pre porovnanie sme zobrazili výsledky numerickej implementácie pre rôzne hodnoty parametrov λ a β (pozri obr. 7), ktorý nám ukazuje správanie algoritmu v rôznych prípadoch. Grafy vedľa seba porovnávajú dve rôzne hodnoty λ zatiaľ, čo zachovávajú rovnakú hodnotu parametra β. Grafy pod sebou naopak porovnávajú dve rôzne hodnoty parametra β, pričom zachovávajú rovnakú hodnotu parametra λ. Vidíme, že graf citlivejšie reaguje na zmenu parametra λ, kde sú zmeny viditeľné už na prvý pohľad. Z rovnice (6.20) môžeme interpretovať, že navýšenie hodnoty parametra λ znamená navýšenie hodnoty tepelnej vodivostí v pevnej fáze oproti tepelnej vodivostí v kvapalnej fáze, čo vidíme aj na grafe, keďže na grafe b) vidíme, že fázové rozhranie sa nachádza bližšie k pravému okraju ako na grafe a), čiže v modeli sa nachádza viac látky v pevnej fáze. To taktiež platí pri provnaní obrázkov d) a c). Zmena parametra β podľa rovnice (6.19) znamená zvýšenie tepelnej kapacity v pevnej fáze oproti tepelenej kapacite v kvapalnej fáze. Zvýšenie parametra β znamená, že pevná fáza absorbuje viac tepla, zatiaľ čo menšia hodnota tohto parametra znamená, že absorbuje menej tepla a tým pádom sa zohrieva rýchlejšie. Toto na grafoch nie je viditeľné na prvý pohľad avšak pri detajlnejšom pohľade vidíme, že v prípade väčšej hodnoty parametra β je časť látky v pevnej fáze mierne menšia v porovnaní s modelom s nižšou hodnotou parametra β.



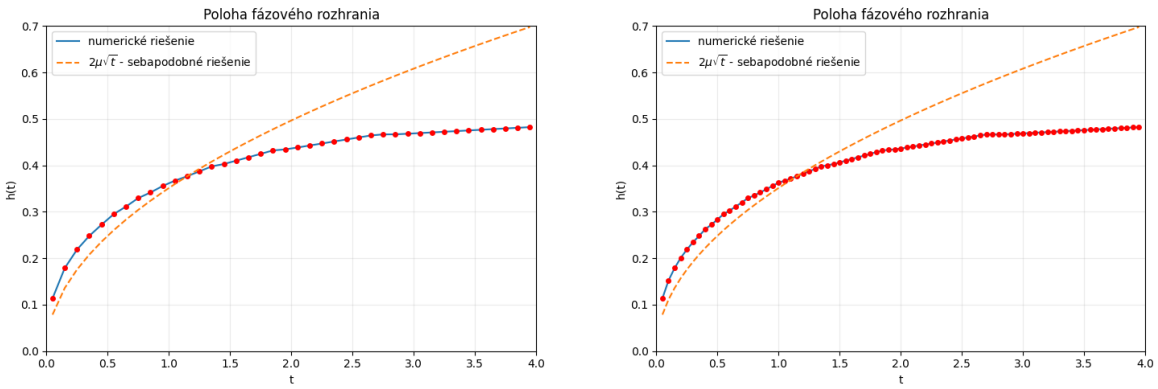
Obr. 7: Porovnanie teplotných profilov pre rôzne hodnoty parametrov α a β.

Graf polohy fázového rozhrania, zobrazený na obr. 8, pre dva prípady s jemnejšou a hrubšou mriežkou zodpovedá rovnakým parametrom ako na obr. 6. Časový vývoj polohy fázového rozhrania vykazuje schodovitý charakter, ktorý je typický pre entalpické formulácie (pozri [1]). Poloha fázového rozhrania sa v každom časovom kroku určuje z bunky, ktorá obsahuje prechodnú fázu, preto sa pri hrubšej mriežke môžu objaviť mierne zlomy alebo efektívne konštantné úseky. Rovnako ako aj v kap. 5, sme do obr. 8 pridali referenčnú krivku analytického riešenia dvojstranného problému, ktorá má podľa [1] tvar:

$$h(t) = 2\mu\sqrt{t} \tag{6.37}$$

Parameter μ je určený riešením transcendentnej rovnice, ktorá závisí od bezrozmerných parametrov S, β a λ, pričom zohľadňuje rozdielne tepelné vlastnosti pevnej a kvapalnej fázy.

$$\frac{1}{\mathrm{e}^{\mu^2}\ \mathrm{erf}(\mu)} - \frac{\beta}{\sqrt{\frac{\beta}{\lambda}}\,\mathrm{e}^{\frac{\beta}{\lambda}\mu^2}\ \mathrm{erfc}\left(\sqrt{\frac{\beta}{\lambda}}\,\mu\right)} = S\,\mu\sqrt{\pi}. \tag{6.38}$$



Obr. 8: Poloha fázového rozhrania.

Z porovnania numerického riešenia s referenčnou krivkou $h(t) = 2\mu\sqrt{(t)}$ je vidieť, že pre krátke časy sa poloha fázového rozhrania správa v súlade so samopodobným riešením klasického dvojstranného Stefanovho problému. Pre dlhšie časy sa však numerické riešenie od tejto krivky odchyľuje a postupne sa približuje k ustálenej hodnote. Tento jav je spôsobený tým, že sebapodobné riešenie $h(t) = 2\mu\sqrt{(t)}$ zodpovedá prípadu poloneobmedzenej oblasti, kde sa vplyv vzdialenej hranice neuplatňuje. Z obr. 8 je vidieť, že poloha fázového rozhrania sa s rastúcim časom postupne približuje k ustálenej hodnote. To naznačuje, že systém sa postupne blíži k ustálenému stavu, v ktorom sa poloha rozhrania mení už len veľmi pomaly a tepelný tok z pevnej fázy je vyrovnaný tepelnému toku z kvapalnej fázy. V tomto stave môžeme v každej fáze uvažovať približne stacionárny teplotný profil. V pevnej fáze na intervale $(0, h_\infty)$ sa teplota mení z hodnoty T_a na teplotu fázovej zmeny, ktorá má v bezrozmernom tvare hodnotu 0. Zodpovedajúci gradient teploty možno preto aproximovať vzťahom

$$\frac{\partial T_S}{\partial z} \approx \frac{0 - T_a}{h_\infty} = -\frac{T_a}{h_\infty}. \tag{6.39}$$

Analogicky, v kvapalnej fáze na intervale $(h_\infty, 1)$ rastie teplota z hodnoty 0 na hodnotu T_b, takže

$$\frac{\partial T_L}{\partial z} \approx \frac{T_b - 0}{1 - h_\infty} = \frac{T_b}{1 - h_\infty}. \tag{6.40}$$

V ustálenom stave sa musia tepelné toky vedené z oboch strán rozhrania rovnať. V

rozmernom tvare teda platí podmienka

$$-k_S^* \frac{T_a}{h_\infty} = k_L^* \frac{T_b}{1 - h_\infty}. \tag{6.41}$$

Po vydelení vzťahu vodivosťou k_L^* a po zavedení bezrozmerného parametra λ dostávame rovnicu

$$\lambda - \frac{T_a}{h_\infty} = \frac{T_b}{1 - h_\infty}. \tag{6.42}$$

Pre okrajové podmienky použité v implementácií, teda $T_a = -1$ a $T_b = 1$, pre rovnovážnu polohu fázového rozhrania h_∞ vyplýva vzťah

$$h_\infty = \frac{\lambda}{1 + \lambda}. \tag{6.43}$$

Pre hodnotu parametra $\lambda = 1$, použitú v numerickej implementácií, dostávame $h_\infty = \frac{1}{2} = 0.5$. Táto hodnota je v dobrej zhode s numerickým výsledkom.

Záver

V diplomovej práci sme formulovali a numericky implementovali entalpickú metódu pre úlohy so zmenou fázy. Zamerali sme sa na modelovanie úloh Stefanovho typu, ktoré opisujú prechod medzi kvapalnou a pevnou fázou pri neznámej, časovo sa vyvíjajúcej polohe fázového rozhrania. Na ich riešenie sme použili entalpickú formuláciu, ktorá zahŕňa latentné teplo priamo do energetickej bilancie a eliminuje potrebu explicitného sledovania rozhrania.

V úvodnej časti práce sme zaviedli základné pojmy a uviedli spojitú formuláciu modelu vedenia tepla v entalpickom tvare. Následne sme stanovili vzťah medzi teplotou a entalpiou v jednotlivých fázach, vrátane prechodnej fázy, čo umožňuje jednoznačne určiť stav systému iba na základe entalpie.

V ďalšej časti sme formulovali problém diskrétne pomocou metódy konečných objemov. Zaviedli sme priestorovú a časovú diskretizáciu, definovali tepelné toky na hraniciach buniek a odvodili diskrétnu entalpickú rovnicu ako základ numerickej schémy.

Následne sme analyzovali difúziu tepla bez zmeny fázy, kde sme overili správnosť implementovanej numerickej metódy. Tento model slúžil ako referenčný prípad, v ktorom je entalpia priamo úmerná teplote.

V ďalšej časti práce sme sa venovali jednostrannému Stefanovmu problému, kde sa teplota mení iba v pevnej fáze, zatiaľ čo kvapalná fáza zostáva na teplote tuhnutia. Implementovali sme entalpický algoritmus a analyzovali sme časový vývoj teplotného poľa a polohy fázového rozhrania. Numerické výsledky potvrdili očakávané správanie riešenia.

V poslednej časti sme rozšírili model na dvojstranný Stefanov problém, v ktorom sa teplo šíri v oboch fázach. Zaviedli sme bezrozmerné parametre charakterizujúce pomer tepelných kapacít a vodivostí a analyzovali sme ich vplyv na priebeh riešenia. Ukázali sme, že parameter λ má výrazný vplyv na polohu fázového rozhrania, zatiaľ čo parameter β ovplyvňuje dynamiku systému menej výrazne. Numerické riešenia sme porovnali s analytickými sebapodobnými riešeniami a interpretovali sme odchýlky spôsobené konečnou veľkosťou oblasti.

Získané výsledky potvrdzujú, že entalpická metóda predstavuje efektívny nástroj

na numerické riešenie úloh so zmenou fázy [7]. Výhodou tejto metódy je jej schopnosť pracovať s pevnou mriežkou bez potreby explicitného sledovania fázového rozhrania, čo výrazne zjednodušuje implementáciu. Na druhej strane presnosť riešenia závisí od jemnosti mriežky, čo sa prejavuje najmä pri určovaní polohy rozhrania.

Zoznam použitej literatúry

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

[2] Anderson, D. M., Guba, P.: *Convective phenomena in mushy layers*, Annual Review of Fluid Mechanics, 52, 93–119, Annual Reviews 2020.

[3] Çengel, Y. A., Ghajar, A. J.: *Heat and Mass Transfer: Fundamentals and Applications*, McGraw-Hill, 2015.

[4] Crank, J.: *The Mathematics of Diffusion, 2nd edition*, Oxford University Press, Oxford, 1975.

[5] Javorská, J. : *Numerická simulácia fázovej zmeny metódou entalpie*, diplomová práca, FMFI UK, Bratislava, 2024.

[6] Swaminathan, C. R., Voller, V. R.: *A new implicit formulation of the enthalpy method using flag updates*, Numerical Heat Transfer, Part B, 21, 233–244, 1992.

[7] Swaminathan, C. R., Voller, V. R.: *A general enthalpy method for modeling solidification processes*, International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, 3, 233–244, 1993.

[8] Voller, V. R., Swaminathan, C. R., Thomas, B. G.: *Fixed grid techniques for phase change problems: A review*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 30, 875–898, 1990.

A Numerická implementácia jednostranného problému bez fázovej zmeny

```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# FVM explicit: T = H (bez fazovej zmeny)
def run_until_times(m=10, Ta=1.0, Tb=0.0,
                    t_init=1e-3, times=(0.01, 0.05, 0.1), cfl_safety=0.95):
    # priestorova mriezka
    z_faces = np.linspace(0.0, 1.0, m + 1)
    z_mid   = 0.5 * (z_faces[:-1] + z_faces[1:])
    dz = z_faces[1] - z_faces[0] # rovnica (3.2)

    # cfl podmienka
    dt_cfl = 0.5 * dz * dz * cfl_safety # rovnica (4.28)
    # prechod
    width = 2.0 * np.sqrt(t_init)  # charakteristicka sirka prechodu
    H = np.exp(- (z_mid / width) ** 2)
    H = Tb + (Ta - Tb) * H
    H[0], H[-1] = Ta, Tb

    def flux(Tmid):
        Q = np.empty(m + 1)
        R_left, R_right, R_face = 0.5 * dz, 0.5 * dz, dz
        # okraje
        Q[0]   = -(Tmid[0]   - Ta) / R_left # rovnica (4.10)
        Q[1:m] = -(Tmid[1:]  - Tmid[:-1]) / R_face # rovnica (4.14)
        Q[m]   = -(Tb        - Tmid[-1]) / R_right # rovnica (4.12)
        return Q

    profiles = []
    times = tuple(sorted(times))
    t_cur = 0.0
```

```
32
33      # pociatocny profil
34      T_init = H.copy()
35
36      for t_target in times:
37          nsteps = int(np.ceil((t_target - t_cur) / dt_cfl))
38          nsteps = max(nsteps, 1)
39          dt = (t_target - t_cur) / nsteps
40          # FVM krok
41          for _ in range(nsteps):
42              T = H
43              T[0], T[-1] = Ta, Tb
44              Q = flux(T)
45              # FVM update v stredoch buniek
46              H -= (dt / dz) * (Q[1:] - Q[:-1]) # rovnica (4.17)
47              H[0], H[-1] = Ta, Tb
48
49          profiles.append(H.copy())
50          t_cur = t_target
51
52      return z_faces, z_mid, T_init, profiles, times
53
54
55  if __name__ == "__main__":
56      m = 10
57      times = (0.01, 0.05, 0.1)
58      zf, zm, T0, Ts, ts = run_until_times(m=m, t_init=1e-3, times=times)
59
60      # kreslenie
61      plt.figure(figsize=(7, 5))
62
63      # hranice buniek
64      plt.plot(zf, np.zeros_like(zf), "s", ms=5, mfc="none", mec="red",
        ↪  label="hranice buniek")
```

```
65
66      # pociatocny profil
67      plt.plot(zm, T0, "-", color="yellow", label=r"$T_{\rm init}$")
68      plt.plot(zm, T0, "o", mfc="none", mec="red", ms=5)
69
70      # profily v case t1,t2,t3
71      colors = ["blue", "green", "orange"]
72      labels = [rf"$t_1={ts[0]:.2f}$",
73                rf"$t_2={ts[1]:.2f}$",
74                rf"$t_3={ts[2]:.1f}$"]
75
76      for Tprof, c, lab in zip(Ts, colors, labels):
77          plt.plot(zm, Tprof, "-", color=c, label=lab)
78          plt.plot(zm, Tprof, "o", mfc="none", mec="red", ms=5)
79
80      plt.xlabel("z")
81      plt.ylabel(r"$T(z,t)$")
82      plt.title("Teplotné profily")
83      plt.xlim(0, 1)
84      plt.ylim(0, 1)
85      plt.xticks(np.arange(0.0, 1.01, 0.1))
86      plt.yticks(np.arange(0.0, 1.01, 0.1))
87      plt.grid(True, alpha=0.25)
88      plt.legend()
89      plt.tight_layout()
90      plt.show()
```

B Numerická implementácia jednostranného problému s fázovou zmenou

```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.optimize import fsolve
from scipy.special import erf

#  H, T, phi vztahy

def enthalpy_to_state(H, S):

    H = np.asarray(H, dtype=float)
    T = np.empty_like(H)
    phi = np.empty_like(H)

    solid = H <= -S
    liquid = H >= 0.0        # rovnica (5.17)
    mush   = (~solid) & (~liquid)

    T[solid]   = H[solid] + S # rovnica (5.17) a (5.19)
    phi[solid] = 1.0

    T[liquid]   = H[liquid]  # rovnica (5.17) a (5.19)
    phi[liquid] = 0.0

    T[mush]   = 0.0   # rovnica (5.17) a (5.19)
    phi[mush] = -H[mush] / S

    return T, phi


def temperature_to_enthalpy(T, S):

```

```
32      T = np.asarray(T, dtype=float)
33      H = np.empty_like(T)
34
35      liquid = T >= 0.0
36      solid  = T < 0.0
37      H[liquid] = T[liquid]
38      H[solid]  = T[solid] - S
39
40      return H
41
42  # pozicia interface
43  def interface_position(H, S, z_faces):
44      _, phi = enthalpy_to_state(H, S)
45      m = len(H)
46
47      mush = np.where((phi > 0.0) & (phi < 1.0))[0]
48      solid = np.where(phi >= 1.0)[0]
49
50      # Ak existuje prechodova bunka, rozhranie je v nej
51      if len(mush) > 0:
52          j = mush[0]
53          dz = z_faces[j+1] - z_faces[j]
54          h = z_faces[j] + phi[j] * dz
55          return h
56
57      # rozhranie na pravy okraj poslednej bunky
58      if len(solid) > 0:
59          j = solid[-1]
60          return z_faces[j+1]
61
62      # Ak neprislo k zmene fazy
63      return z_faces[0]
64
65  # FVM pre entalpiu
```

```
66
67  def run_until_times(
68      m=20,
69      Ta=-1.0,           # rovnica (5.18)
70      Tb=0.0,            # rovnica (5.18)
71      S=10.0,             # Stefanovo cislo
72      times=(0.05, 0.20, 0.5), # casy
73      cfl_safety=0.95,
74  ):
75      # mriezka rovnako ako bez zmeny fazy
76      z_faces = np.linspace(0.0, 1.0, m + 1)
77      z_mid   = 0.5 * (z_faces[:-1] + z_faces[1:])
78      dz = z_faces[1] - z_faces[0] # rovnica (3.2)
79
80      # CFL podmienka
81      dt_cfl = 0.5 * dz * dz * cfl_safety
82
83      # pociatocny stav:
84      H = np.zeros_like(z_mid)
85
86      # okrajova entalpia
87      H[0]  = temperature_to_enthalpy(np.array([Ta]), S)[0]
88      H[-1] = temperature_to_enthalpy(np.array([Tb]), S)[0]
89
90      def flux(Tmid):
91          Q = np.empty(m + 1)
92          R_left, R_right, R_face = 0.5 * dz, 0.5 * dz, dz # rovnica (5.5, 5.6,
            ↪  5.7)
93          Q[0]   = -(Tmid[0]   - Ta)       / R_left
94          Q[1:m] = -(Tmid[1:]  - Tmid[:-1]) / R_face
95          Q[m]   = -(Tb        - Tmid[-1]) / R_right
96          return Q
97
98      profiles_T = []
```

```
    interface_positions = []
    times = tuple(sorted(times))
    t_cur = 0.0

    # pociatocny profil
    T_init, phi_init = enthalpy_to_state(H, S)

    for t_target in times:
        nsteps = int(np.ceil((t_target - t_cur) / dt_cfl))
        nsteps = max(nsteps, 1)
        dt = (t_target - t_cur) / nsteps

        for _ in range(nsteps):
            # H S -> T, phi
            T, phi = enthalpy_to_state(H, S)
            T[0]  = Ta
            T[-1] = Tb
            Q = flux(T)
            # FVM update v stredoch buniek
            H -= (dt / dz) * (Q[1:] - Q[:-1]) # rovnica (4.17)
            # okrajova entalpia
            H[0]  = temperature_to_enthalpy(np.array([Ta]), S)[0]
            H[-1] = temperature_to_enthalpy(np.array([Tb]), S)[0]

        T_out, phi_out = enthalpy_to_state(H, S)
        T_out[0]  = Ta
        T_out[-1] = Tb
        profiles_T.append(T_out.copy())
        h_cur = interface_position(H, S, z_faces)
        interface_positions.append(h_cur)

        t_cur = t_target

    return z_faces, z_mid, T_init, profiles_T, times, interface_positions
```

```
133
134
135 # kreslenie
136
137 if __name__ == "__main__":
138     m = 20
139     times_profiles = (0.05, 0.20, 0.5)
140     S = 10.0
141
142     zf, zm, T0, Ts, ts, hs = run_until_times(
143         m=m,
144         Ta=-1.0,
145         Tb=0.0,
146         S=S,
147         times=times_profiles
148     )
149
150     fig, ax = plt.subplots(figsize=(7, 5))
151
152     ax.plot(
153         zf[1:-1],
154         np.zeros_like(zf[1:-1]),
155         "s",
156         ms=5,
157         mfc="red",
158         mec="red",
159         label="hranice buniek"
160     )
161
162     # pociatocny profil
163     ax.plot(zm, T0, "-", color="yellow", label=r"$T_{\rm init}$")
164     ax.plot(zm, T0, "o", mfc="none", mec="red", ms=4)
165
166     # profily v case t1, t2, t3
```

```
167     colors = ["blue", "green", "orange"]
168     labels = [
169         rf"$t_1={ts[0]:.2f}$",
170         rf"$t_2={ts[1]:.2f}$",
171         rf"$t_3={ts[2]:.2f}$"
172     ]
173 
174     for Tprof, c, lab in zip(Ts, colors, labels):
175         ax.plot(zm, Tprof, "-", color=c, label=lab)
176         ax.plot(zm, Tprof, "o", mfc="none", mec="red", ms=4)
177 
178     ax.set_xlabel("z")
179     ax.set_ylabel(r"$T(z,t)$")
180     ax.set_title("Teplotné profily - entalpická metóda (s fázovou zmenou)")
181     ax.set_xlim(0.0, 1.0)
182     ax.set_ylim(-1.0, 0.4)
183     ax.set_xticks(np.arange(0.0, 1.01, 0.1))
184     ax.set_yticks(np.arange(-1.0, 0.51, 0.2))
185     ax.margins(x=0, y=0)
186     ax.autoscale(False)
187     ax.grid(True, alpha=0.25)
188 
189     from matplotlib.lines import Line2D
190     uzol_proxy = Line2D(
191         [0], [0],
192         marker='o',
193         linestyle='none',
194         markerfacecolor='none',
195         markeredgecolor='red',
196         markersize=5,
197         label="uzol bunky"
198     )
199 
200     handles, labs = ax.get_legend_handles_labels()
```

```
201     handles.append(uzol_proxy)
202     labs.append("uzol bunky")
203     ax.legend(handles, labs)
204
205     fig.tight_layout()
206     plt.show()
207
208     times_interface = np.arange(0.05, 4.0, 0.05)
209     zf2, zm2, T02, Ts2, ts2, hs = run_until_times(
210         m=m,
211         Ta=-1.0,
212         Tb=0.0,
213         S=S,
214         times=times_interface
215     )
216
217     def stefan_eq(lam):
218         return np.sqrt(np.pi) * lam * np.exp(lam**2) * erf(lam) - 1.0 / S
219
220     lam = fsolve(stefan_eq, 0.1)[0]
221     print(lam)
222
223     ts2 = np.array(ts2)
224     hs = np.array(hs)
225     h_ref = 2.0 * lam * np.sqrt(ts2)
226
227     fig, ax = plt.subplots(figsize=(7, 5))
228
229     ax.plot(ts2, hs, "-", label="numerické riešenie")
230     ax.plot(ts2, h_ref, "--", label=r"$2\lambda\sqrt{t}$ - sebapodobné
        ↪  riešenie")
231
232     ax.set_xlabel("t")
233     ax.set_ylabel("h(t)")
```

```
234     ax.set_title("Poloha fázového rozhrania")
235     ax.set_xlim(0.0, 4.0)
236     ax.set_ylim(0.0, 1.0)
237     ax.margins(x=0, y=0)
238     ax.autoscale(False)
239     ax.grid(True, alpha=0.25)
240     ax.legend()
241
242     fig.tight_layout()
243     plt.show()
```

C Numerická implementácia dvojstranného problému s fázovou zmenou

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.optimize import fsolve
from scipy.special import erf, erfc
# zaciatok (6.3)
m=30
Ta=-1.0
Tb=1
S=10
lambda_ = 1
beta = 2
times=(0.05, 0.20, 0.5)
#  H, T, phi vztahy (6.27 6.28)
def enthalpy_to_state(H, S, beta):
    H = np.asarray(H, dtype=float)
    T = np.empty_like(H)
    phi = np.empty_like(H)

    solid = H <= -S
    liquid = H >= 0.0
    mush = (~solid) & (~liquid)

    # pevna faza
    T[solid] = (H[solid] + S) / beta
    phi[solid] = 1.0

    # kvapalna faza
    T[liquid] = H[liquid]
    phi[liquid] = 0.0

    # prechodna faza
```

```
32      T[mush] = 0.0
33      phi[mush] = -H[mush] / S
34
35      return T, phi
36
37
38  def temperature_to_enthalpy(T, S, beta):
39      T = np.asarray(T, dtype=float)
40      H = np.empty_like(T)
41
42      liquid = T >= 0.0
43      solid  = T < 0.0
44      # rovnica (6.27)
45      H[liquid] = T[liquid]
46      H[solid]  = beta * T[solid] - S
47      return H
48  # rovnica (6.29)
49  def conductivity(phi, lambda_):
50      phi = np.asarray(phi, dtype=float)
51      return 1.0 + (lambda_ - 1.0) * phi
52
53  def interface_position(H, S, beta, z_faces):
54      _, phi = enthalpy_to_state(H, S, beta)
55
56      mush = np.where((phi > 0.0) & (phi < 1.0))[0]
57      solid = np.where(phi >= 1.0)[0]
58
59      # ak existuje prechodova bunka, rozhranie je v nej
60      if len(mush) > 0:
61          j = mush[0]
62          dz = z_faces[j+1] - z_faces[j]
63          return z_faces[j] + phi[j] * dz
64
65
```

```
66      # rozhranie na pravy okraj poslednej bunky
67      if len(solid) > 0:
68          j = solid[-1]
69          return z_faces[j+1]
70
71      # ak este nevznikla pevna faza
72      return z_faces[0]
73
74  # FVM pre entalpiu
75
76  def run_until_times(
77      m,
78      Ta,
79      Tb,
80      S,              # Stefanovo cislo
81      lambda_,
82      beta,
83      times, # casy
84      cfl_safety=0.95,
85  ):
86      # mriezka
87      z_faces = np.linspace(0.0, 1.0, m + 1)
88      z_mid   = 0.5 * (z_faces[:-1] + z_faces[1:])
89      dz = z_faces[1] - z_faces[0] # rovnica (3.2)
90
91      # CFL podmienka rovnica (6.36)
92      alpha_max = max(1.0, lambda_ / beta)
93      dt_cfl = 0.5 * dz * dz / alpha_max * cfl_safety
94
95      # pociatocny stav:
96
97      T_init = Tb * np.zeros_like(z_mid)          # rovnica (6.9)
98      H = temperature_to_enthalpy(T_init, S, beta)
99      H[0]  = temperature_to_enthalpy([Ta], S, beta)[0]
```

```
100     H[-1] = temperature_to_enthalpy([Tb], S, beta)[0]
101
102
103     def flux(Tmid, phi, lambda_):
104         k_cells = conductivity(phi, lambda_)
105         Q = np.empty(len(Tmid) + 1)
106
107         # lavy okraj
108         k_face_left = k_cells[0]
109         R_left = 0.5 * dz / k_face_left # rovnica (6.23)
110         Q[0] = -(Tmid[0] - Ta) / R_left
111
112         # vnutorne
113         for j in range(1, len(Tmid)):
114             R_face = 0.5 * dz / k_cells[j-1] + 0.5 * dz / k_cells[j] #
                ↪ rovnica (6.21) a (6.22)
115             Q[j] = -(Tmid[j] - Tmid[j-1]) / R_face # rovnica (6.21)
116
117         # pravy okraj
118         k_face_right = k_cells[-1]
119         R_right = 0.5 * dz / k_face_right # rovnica (6.23)
120         Q[-1] = -(Tb - Tmid[-1]) / R_right
121
122         return Q
123
124     profiles_T = []
125     interface_positions = []
126     times = tuple(sorted(times))
127     t_cur = 0.0
128
129     # pociatocny profil
130     T_init, phi_init = enthalpy_to_state(H, S, beta)
131
132     for t_target in times:
```

```
133         nsteps = int(np.ceil((t_target - t_cur) / dt_cfl))
134         nsteps = max(nsteps, 1)
135         dt = (t_target - t_cur) / nsteps
136 
137         for _ in range(nsteps):
138             # H S -> T, phi
139             T, phi = enthalpy_to_state(H, S, beta)
140             T[0]  = Ta
141             T[-1] = Tb
142             Q = flux(T, phi, lambda_)
143             # FVM update v stredoch buniek
144             H -= (dt / dz) * (Q[1:] - Q[:-1]) # rovnica (6.24)
145             # okrajova entalpia
146             H[0]  = temperature_to_enthalpy(np.array([Ta]), S, beta)[0]
147             H[-1] = temperature_to_enthalpy(np.array([Tb]), S, beta)[0]
148 
149         T_out, phi_out = enthalpy_to_state(H, S, beta)
150         T_out[0]  = Ta
151         T_out[-1] = Tb
152         profiles_T.append(T_out.copy())
153 
154         h_cur = interface_position(H, S, beta, z_faces)
155         interface_positions.append(h_cur)
156 
157         t_cur = t_target
158 
159     return z_faces, z_mid, T_init, profiles_T, times, interface_positions
160 
161 
162 def two_phase_similarity_eq(mu, S, beta, lambda_):
163 
164     nu = np.sqrt(beta / lambda_)
165     # rovnica (6.38)
166     term_liquid = (1.0 / S) / (np.exp(mu**2) * erf(mu))
```

```
167     term_solid = (beta / S) / (nu * np.exp((nu**2) * mu**2) * erfc(nu * mu))
168
169     return term_liquid - term_solid - mu * np.sqrt(np.pi)
170
171
172 def find_mu_two_phase(S, beta, lambda_, guess=0.1):
173     mu = fsolve(two_phase_similarity_eq, guess, args=(S, beta, lambda_))[0]
174     return mu
175
176 # kreslenie
177
178 if __name__ == "__main__":
179
180     zf, zm, T0, Ts, ts, hs = run_until_times(
181         m=m,
182         Ta=Ta,
183         Tb=Tb,
184         S=S,
185         lambda_ = lambda_,
186         beta = beta,
187         times=times
188     )
189
190     fig, ax = plt.subplots(figsize=(7, 5))
191
192     ax.plot(zf[1:-1], np.zeros_like(zf[1:-1]), "s", ms=5, mfc="red",
        ↪ mec="red",
193         label="hranice buniek")
194
195     # pociatocny profil
196     ax.plot(zm, T0, "-", color="yellow", label=r"$T_{\rm init}$")
197     ax.plot(zm, T0, "o", mfc="none", mec="red", ms=4)
198
199     # profily v case t1, t2, t3
```

```
200     colors = ["blue", "green", "orange"]
201     labels = [rf"$t_1={ts[0]:.2f}$",
202           rf"$t_2={ts[1]:.2f}$",
203           rf"$t_3={ts[2]:.2f}$"]
204
205     for Tprof, c, lab in zip(Ts, colors, labels):
206         ax.plot(zm, Tprof, "-", color=c, label=lab)
207         ax.plot(zm, Tprof, "o", mfc="none", mec="red", ms=4)
208
209     ax.set_xlabel("z")
210     ax.set_ylabel(r"$T(z,t)$")
211     ax.set_title("Teplotné profily - entaplická metóda (dvojstranný problém s
        ↪ fázovou zmenou)")
212
213     ax.set_xlim(0.0, 1.0)
214     ax.set_ylim(-1.0, 1.0)
215     ax.set_xticks(np.arange(0.0, 1.01, 0.1))
216     ax.set_yticks(np.arange(-1.0, 1.01, 0.2))
217     ax.margins(x=0, y=0)
218     ax.autoscale(False)
219
220     ax.grid(True, alpha=0.25)
221
222     from matplotlib.lines import Line2D
223     uzol_proxy = Line2D([0], [0], marker='o', linestyle='none',
224                         markerfacecolor='none', markeredgecolor='red',
225                         markersize=5, label="uzol bunky")
226
227     handles, labs = ax.get_legend_handles_labels()
228     handles.append(uzol_proxy)
229     labs.append("uzol bunky")
230     ax.legend(handles, labs)
231
232     fig.tight_layout()
```

```
233     plt.show()
234
235     # fazove rozhranie
236
237     times_interface = np.arange(0.05, 4, 0.1)
238
239     zf2, zm2, T02, Ts2, ts2, hs = run_until_times(
240         m=m,
241         Ta=Ta,
242         Tb=Tb,
243         S=S,
244         lambda_=lambda_,
245         beta=beta,
246         times=times_interface
247     )
248
249     mu = find_mu_two_phase(S, beta, lambda_, guess=0.1)
250
251     ts2 = np.array(ts2)
252     hs = np.array(hs)
253     h_ref = 2.0 * mu * np.sqrt(ts2)
254
255     fig, ax = plt.subplots(figsize=(7, 5))
256
257     ax.plot(ts2, hs, "-", label="numerické riešenie")
258     ax.plot(ts2, hs, "ro", ms=4)
259     ax.plot(ts2, h_ref, "--", label=r"$2\mu\sqrt{t}$ - sebapodobné riešenie")
260
261     ax.set_xlabel("t")
262     ax.set_ylabel("h(t)")
263     ax.set_title("Poloha fázového rozhrania")
264
265     ax.set_xlim(0.0, 4.0)
266     ax.set_ylim(0.0, 0.7)
```

```
267         ax.margins(x=0, y=0)
268         ax.autoscale(False)
269
270         ax.grid(True, alpha=0.25)
271         ax.legend()
272
273         fig.tight_layout()
274         plt.show()
```