



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

SAMOPODOBNE RIEŠENIE PROBLÉMU TUHNUTIA BINÁRNEJ ZMESI

Študentská vedecká konferencia 2009

Juraj Kyselica
(4. ročník)

9.1.9 Aplikovaná matematika
Ekonomická a finančná matematika

Školiteľ: Doc. Mgr. Peter Guba, PhD.

BRATISLAVA 2009

Touto cestou by som sa chcel poďakovať môjmu školiteľovi

Doc. Mgr. Petrovi Gubovi, PhD.

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

Ďakujem.

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

V Bratislave, 22. apríla 2009

.....
Juraj Kyselica

Dátum kompilácie: 17. apríla 2009
Typeset in L^AT_EX

Abstrakt

Práca sa venuje odvodeniu explicitného riešenia pre systém parabolických parciálnych diferenciálnych rovníc (2 rovnice vedenia tepla a 1 rovnica difúzie hmoty) modelujúcich jav tuhnutia binárnej zmesi s podmienkami zachovania predpísanými na voľnej hranici. Ukážeme, ako možno nájsť riešenie tohto systému a rovnako aj pozíciu voľnej hranice v čase pomocou samopodobnej transformácie nezávislých premenných z a t . Odvodíme nelineárnu algebraickú rovnicu, ktorej riešením je konštanta λ jednoznačne charakterizujúca pozíciu voľnej hranice v ľubovoľnom čase $t > 0$. Na záver sa zameriame na skúmanie závislosti riešenia od niektorých parametrov vystupujúcich v modeli.

Kľúčové slová: Fázový diagram, tuhnutie binárnej zmesi, systém parabolických PDR s voľnou hranicou, samopodobná transformácia.

Obsah

1	Úvod	1
2	Formulácia problému	2
2.1	Fázový diagram pre binárnu zmes	2
2.2	Matematická formulácia problému	2
3	Samopodobné riešenie problému	5
3.1	Transformácia systému PDR na systém ODR	5
3.2	Určenie konštánt λ , T_h a C_h	8
3.3	Zhrnutie výsledkov odvodenia	10
4	Parametrická závislosť riešenia: Grafická reprezentácia	13
4.1	Fyzikálna interpretácia parametrov λ , T_0 a T_1	13
4.2	Parametrická závislosť riešenia	13
5	Záver a motivácia pre ďalšie štúdium	17
	Literatúra	18
	Príloha	20

Kapitola 1

Úvod

Cieľom tejto práce je odvodiť riešenie systému parabolických parciálnych diferenciálnych rovníc popisujúcich tuhnutie binárnej zmesi dvoch chemicky odlišných látok. Matematickou komplikáciou v tomto probléme je prítomnosť rovinného rozhrania medzi tuhou a kvapalnou fázou, ktoré je funkciou času. Ide teda o problém s voľnou hranicou – okrem štandardných hraničných podmienok máme aj podmienky na časovo premennej hranici. Popri neznámych funkciách vystupujúcich v samotných parciálnych diferenciálnych rovniciach je súčasťou riešenia aj funkcia reprezentujúca pozíciu voľnej hranice v čase $t > 0$.

Najjednoduchším modelom tuhnutia kvapalnej látky je tzv. *Stefanov problém* (Huppert 1990), kedy uvažujeme len jednozložkový systém (t.j. v modeli nie je prítomná koncentrácia $C(z, t)$) ochladzovaný zdola. Nami uvažovaný model je prevzatý s práce (Worster 1986), príslušné rovnice boli odvodené na základe zákonov zachovania tepla a hmoty. Ide o jednoduchý model, ktorý je východiskom pre komplikovanejší model tzv. *dendritických vrstiev* t.j. vrstiev obsahujúcich tuhú aj kvapalnú fázu (pozri piata kapitola). Tento model je tiež uvedený v práci (Worster 1986). Ďalšie práce v tejto oblasti sa zaoberali rozšírením tohto modelu o tzv. *konvekciu*. Ide o jav, kedy v dendritickej vrstve vzniká tok v dôsledku vylučovania zložky z menšou hustotou (tzv. vztlaková konvekcia). V práci (Guba & Worster 2006 [5]) bola študovaná nelineárna stabilita oscilačnej konvekcie v dvojrozmerných dendritických vrstvách pomocou metód slabo nelineárnej analýzy. Ďalšia časť prác (Guba 2001, Guba & Boďa 1998) sa zaoberala problematikou konvekcie v rotujúcich dendritických vrstvách, práca (Guba & Worster 2006 [4]) sa zasa venovala problému konvekcie v dendritickej vrstve v prípade, že ochladená hranica je vertikálna.

Členenie práce je nasledovné. V druhej kapitole sa zameriame na vysvetlenie základných pojmov týkajúcich sa problematiky tuhnutia binárnych zmesí. Pôjde hlavne o popis lineárnej aproximácie fázového diagramu, ktorá hrá v celom modeli dôležitú úlohu. Okrem toho tu sformulujeme fyzikálny a následne aj matematický problém tuhnutia binárnej zmesi. Tretia kapitola je zameraná na samotné riešenie príslušného systému parciálnych diferenciálnych rovníc pomocou samopodobnej transformácie nezávislých premenných. Následne sa v štvrtej kapitole budeme zaoberať grafickou reprezentáciou závislosti riešenia od niektorých parametrov vystupujúcich v modeli. Piata, záverečná kapitola sa týka zhrnutia výsledkov a uvedenia motivácie pre naše ďalšie štúdium. Na záver v prílohe prikladáme zdrojové kódy v systéme MATLAB.

Kapitola 2

Formulácia problému

2.1 Fázový diagram pre binárnu zmes

Cieľom tejto úvodnej podkapitoly je uviesť základné pojmy týkajúce sa fázového diagramu, ktorý charakterizuje binárnu zmes (t.j. zmes skladajúcu sa z dvoch chemicky odlišných komponent) a jeho fyzikálnu interpretáciu.

Uvažujme systém pozostávajúci z dvoch chemicky odlišných látok A a B, pričom koncentráciu (v hmotnostnom %) látky A označme $C \in \langle 0, 1 \rangle$. Budeme navyše predpokladať, že systém sa nachádza v termodynamickej rovnováhe, a teda teplota T tuhej a kvapalnej fázy je v danom bode systému rovnaká. Potom pre ľubovoľnú dvojicu $(C, T)^T$ fázový diagram jednoznačne určuje fázu, v ktorej sa daný systém nachádza.

V tejto práci budeme používať idealizovaný fázový diagram (obrázok 2.1). Jeho dôležitým prvkom je tzv. krivka *liquidus* daná rovnicou

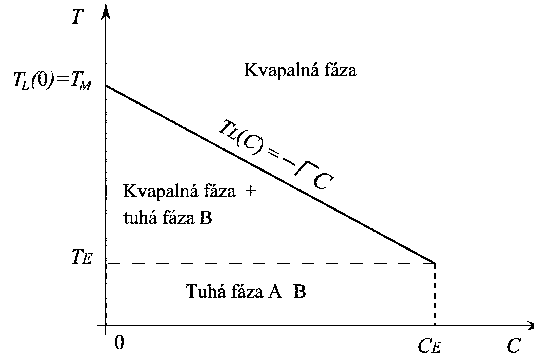
$$T_L(C) = -\Gamma C. \quad (2.1)$$

Táto krivka oddeľuje oblasť, v ktorej je binárna zmes v kvapalnej fáze od oblasti, kedy v systéme súčasne existujú kvapalná aj tuhá fáza (kvapalná fáza + látka B v tuhej fáze). Liquidus teda predstavuje minimálnu teplotu tuhnutia binárnej zmesi ako funkciu koncentrácie C látky A. Pri dosiahnutí liquidus krivky (postupným znižovaním teploty) sa z kvapalnej zmesi začne vylučovať látka B (tuhá fáza), následkom čoho sa v zvyšnej kvapalnej fáze zvýši koncentrácia látky A. Dalším význačným prvkom nami uvažovaného fázového diagramu je priamka $T = T_E$ – tzv. *eutektická teplota* – pod ktorou je v systéme prítomná už iba tuhá fáza, t.j. predstavuje teplotu topenia. Priamka $T = T_E$ pretína krivku liquidus pri koncentrácii $C = C_E$, ktorá predstavuje tzv. *eutektickú koncentráciu* látky A.

2.2 Matematická formulácia problému

Uvažujme polonekonečnú oblasť

$$\{(x, z)^T; z > 0\}, \quad (2.2)$$



Obr. 2.1: Lineárna aproximácia fázového diagramu použitá v našej práci.

vyplnenú kvapalnou binárnou zmesou, pričom počiatočná koncentrácia látky A je $C = C_0 < C_E$ ¹ a počiatočná teplota $T = T_\infty > T_L(C_0)$. V čase $t = 0$ teplotu na hranici $z = 0$ náhle znížime (a následne udržujeme) na teplotu $T_E < T = T_B < T_L(C_0)$, následkom čoho dochádza k tuhnutiu nami uvažovanej binárnej zmesi – v ľubovoľnom čase $t > 0$ sa v systéme nachádza tuhá fáza ohraničená zospodu hranicou $z = 0$ a zhora kvapalnou fázou (obrázok 2.2).

Naším cieľom bude nájsť riešenie systému parciálnych diferenciálnych rovníc popisujúcich tento problém, pričom predpokladáme, že rozhranie medzi tuhú a kvapalnou fázou je dokonale hladké a rovnobežné z hranicou $z = 0$. Neznámymi sú

$T(z, t)$ teplota,

$C(z, t)$ koncentrácia kvapalnej fázy zložky A,

$h(t)$ poloha rozhrania medzi tuhú fázou a kvapalinou,

pričom v tuhej fáze (t.j. pre $z < h(t)$) kladieme $C(z, t) = 0$.

Okrem procesu vedenia tepla uvažujeme prenos rozpustenej látky prostredníctvom molekulárnej difúzie. V tuhej fáze (index s) uvažujeme len prenos tepla, ktorý sa riadi rovnicou

$$\rho_s C_{ps} \frac{\partial T}{\partial t} = k_s \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, \quad z < h(t), \quad (2.3)$$

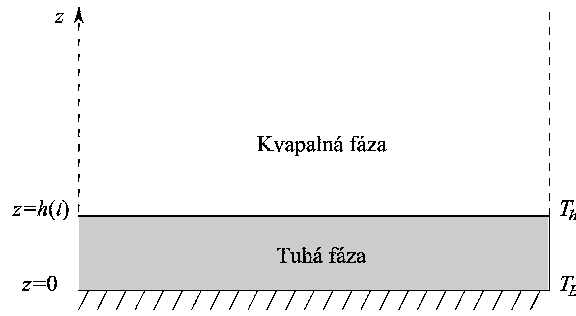
V kvapalnej fáze (index l) uvažujeme nielen prenos tepla, a teda

$$\rho_l C_{pl} \frac{\partial T}{\partial t} = k_l \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, \quad z > h(t), \quad (2.4)$$

ale aj difúziu rozpustenej látky riadiacu sa podľa difúznou rovnicou

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}, \quad z > h(t). \quad (2.5)$$

¹Pre $C_0 < C_E$ sa pri dosiahnutí liquidus krivky začne z kvapalnej zmesi vylučovať látka B v tuhej fáze. V prípade $C_0 > C_E$ je idealizovaná liquidus krivka rastúcou priamkou začínajúcou v bode $(C_E, T_E)^T$ a pri jej dosiahnutí sa z binárnej zmesi začne vylučovať látka A v tuhej fáze. V našom modeli však bez ujmy na všeobecnosti uvažujeme $C_0 < C_E$ a teda vylučovanie látky B.



Obr. 2.2: Tuhnutie binárnej zmesi s rovinným rozhraním medzi tuhú a kvapalnou fázou.

Význam jednotlivých konštánt² je nasledovný:

- ρ hustota,
- C_p tepelná kapacita,
- k tepelná vodivosť,
- D koeficient difúzie rozpustenej látky.

Uvažujeme nasledovné hraničné podmienky

$$T(0, t) = T_B, \quad \forall t > 0, \quad (2.6)$$

$$\begin{aligned} C(z, t) &\rightarrow C_0 \\ T(z, t) &\rightarrow T_\infty \end{aligned} \quad \text{ak } z \rightarrow \infty \text{ alebo } t \rightarrow 0. \quad (2.7)$$

Na voľnom rozhraní $z = h(t)$ budeme navyše požadovať splnenie nasledovných troch podmienok. Prvá podmienka

$$\rho_s L \dot{h} = k_s \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=h^-} - k_l \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=h^+}, \quad (2.8)$$

kde L je konštanta predstavujúca latentné teplo, vyjadruje zákon zachovania tepla na rozhraní (tzv. Stefanova podmienka). Druhá podmienka,

$$C(h^+, t) \dot{h} = -D \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_{z=h^+}, \quad (2.9)$$

vyjadruje zákon zachovania hmoty na rozhraní. Napokon tretia podmienka,

$$T(h, t) = -\Gamma C(h^+, t) \quad (2.10)$$

zase vyjadruje predpoklad, že voľné rozhranie sa v každom čase nachádza blízko rovnovážneho stavu, a teda teplotu $T(h, t)$ na rozhraní možno aproximovať pomocou (2.10).

²Ak definujeme koeficient tepelnej difúzie vztahom $\kappa := k/(\rho C_p)$, tak možno rovnice (2.3), (2.4) napísať v tvare

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa_s \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, \quad z < h(t), \quad \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa_l \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, \quad z > h(t).$$

Kapitola 3

Samopodobné riešenie problému

3.1 Transformácia systému PDR na systém ODR

Systém rovníc (2.3)–(2.10) budeme riešiť nasledujúcou *samopodobnou* transformáciou nezávislých premenných

$$\eta(z, t) := \frac{z}{(4Dt)^{1/2}}, \quad (3.1)$$

pričom pozíciu voľného rozhrania budeme hľadať v tvare

$$h(t) = 2\lambda(Dt)^{1/2}, \quad (3.2)$$

kde λ je neznáma konštanta, ktorú treba určiť. Z (3.1) vyplýva

$$z \leq h(t) \Leftrightarrow \eta \leq \lambda.$$

Funkcie $C(z, t)$ a $T(z, t)$ budeme hľadať v tvare

$$T(z, t) := F(\eta), \quad (3.3)$$

$$C(z, t) := G(\eta). \quad (3.4)$$

Pomocou (3.1) a (3.3) možno derivácie podľa premenných z a t vyjadriť nasledovne:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} &= F'(\eta) \frac{\partial \eta}{\partial t} = -2D \frac{z}{(4Dt)^{3/2}} F'(\eta) = -2D \frac{\eta}{4Dt} F'(\eta), \\ \frac{\partial T}{\partial z} &= \frac{1}{(4Dt)^{1/2}} F'(\eta), \quad \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = \frac{1}{4Dt} F''(\eta). \end{aligned}$$

Dosadením do (2.3) a postupnými algebraickými úpravami dostávame

$$F'' + 2\varepsilon_s^2 \eta F' = 0, \quad \eta < \lambda, \quad (3.5)$$

kde konštanta $\varepsilon_s > 0$ je definovaná vzťahom

$$\varepsilon_s^2 := \frac{D\rho_s C_{ps}}{k_s} = \frac{D}{\kappa_s}.$$

Dostali sme tak *obyčajnú* diferenciálnu rovnicu pre neznámu funkciu $F(\eta)$ na oblasti $\eta < \lambda$. Rovnicu (2.4) možno analogicky transformovať na obyčajnú diferenciálnu rovnicu pre $F(\eta)$ v oblasti $\eta > \lambda$:

$$F'' + 2\varepsilon_l^2 \eta F' = 0, \quad \eta > \lambda, \quad (3.6)$$

kde

$$\varepsilon_l^2 := \frac{D}{\kappa_l}.$$

Derivácie funkcie $C(z, t)$ možno na základe (3.1) a (3.4) napísať v tvare

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -2D \frac{\eta}{4Dt} G'(\eta), \quad \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} = \frac{1}{4Dt} G''(\eta).$$

Dosadením týchto vzťahov do rovnice (2.5) a následnými úpravami dostávame obyčajnú diferenciálnu rovnicu pre funkciu $G(\eta)$ v oblasti $\eta > \lambda$

$$G'' + 2\eta G' = 0, \quad \eta > \lambda. \quad (3.7)$$

Riešme teraz rovnicu (3.5). Označme

$$f := F'.$$

Potom (3.5) prejde na rovnicu

$$f' + 2\varepsilon_s^2 \eta f = 0.$$

Postupnými úpravami dostávame

$$\begin{aligned} \frac{f'}{f} &= -2\varepsilon_s^2 \eta, \\ \ln f &= -\varepsilon_s^2 \eta^2 + K, \quad K \in \mathbb{R}, \\ f(\eta) &= K_1 e^{-\varepsilon_s^2 \eta^2}, \quad \eta < \lambda, \quad K_1 \in \mathbb{R}^+. \end{aligned}$$

Integrovaním a aplikáciou podmienky $F(0) = T(0, t) = T_B$ dostávame

$$F(\eta) - T_B = K_1 \int_0^\eta e^{-\varepsilon_s^2 \xi^2} d\xi, \quad \eta < \lambda.$$

Odvodili sme teda vzťah

$$T(z, t) = T_B + K_1 \int_0^\eta e^{-\varepsilon_s^2 \xi^2} d\xi, \quad z < h. \quad (3.8)$$

Pre funkciu f v oblasti $\eta > \lambda$ dostaneme z rovnice (3.6) podobným spôsobom vzťah

$$f = K_2 e^{-\varepsilon_l^2 \eta^2}, \quad \eta > \lambda, \quad K_2 \in \mathbb{R}^+,$$

z čoho integrovaním a využitím podmienky $F(\infty) = T(\infty, t) = T(z, 0) = T_\infty$ dostaneme

$$T_\infty - F(\eta) = K_2 \int_\eta^\infty e^{-\varepsilon_l^2 \xi^2} d\xi, \quad \eta > \lambda,$$

a teda

$$T(z, t) = T_\infty - K_2 \int_\eta^\infty e^{-\varepsilon_i^2 \xi^2} d\xi, \quad z > h. \quad (3.9)$$

Analogickým riešením rovnice (3.7) dostaneme

$$G(\eta) = K_3 e^{-\eta^2}, \quad \eta > \lambda, \quad K_3 \in \mathbb{R}^+,$$

z čoho integrovaním a využitím podmienky $G(\infty) = C(\infty, t) = C(z, 0) = C_0$ dostaneme

$$C_0 - G(\eta) = K_3 \int_\eta^\infty e^{-\xi^2} d\xi, \quad z > h$$

a teda

$$C(z, t) = C_0 - K_3 \int_\eta^\infty e^{-\xi^2} d\xi, \quad z > h. \quad (3.10)$$

Zostáva už len určiť konštanty K_1 , K_2 a K_3 . Keďže $\eta[h(t), t] = \lambda$, z (3.8) a (3.9) vyplýva

$$T(h^-, t) = T_B + K_1 \int_0^\lambda e^{-\varepsilon_s^2 \xi^2} d\xi, \quad (3.11)$$

$$T(h^+, t) = T_\infty - K_2 \int_\lambda^\infty e^{-\varepsilon_i^2 \xi^2} d\xi. \quad (3.12)$$

Zo spojitosti funkcie $T(z, t)$ na hranici $z = h(t)$ vyplýva

$$T(h^-, t) = T(h^+, t) =: T_h = T_h(\lambda), \quad (3.13)$$

a teda hodnota teploty T_h na hranici je konštantná v čase. Z rovníc (3.11), (3.12) a (3.13) možno vyjadriť konštanty K_1 a K_2

$$K_1 = \frac{T_h - T_B}{\int_0^\lambda e^{-\varepsilon_s^2 \xi^2} d\xi}, \quad K_2 = \frac{T_\infty - T_h}{\int_\lambda^\infty e^{-\varepsilon_i^2 \xi^2} d\xi}.$$

Ďalej platí

$$C(h^+, t) = C_h = C_0 - K_3 \int_\lambda^\infty e^{-\xi^2} d\xi,$$

a teda

$$K_3 = \frac{C_0 - C_h}{\int_\lambda^\infty e^{-\xi^2} d\xi}.$$

Definujme funkcie $\operatorname{erf}(x)$, $\operatorname{erfc}(x)$ predpismi

$$\operatorname{erf}(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\xi^2} d\xi,$$

$$\operatorname{erfc}(x) := 1 - \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-\xi^2} d\xi.$$

Potom platí

$$\int_0^\eta e^{-\varepsilon_s^2 \xi^2} d\xi = \left| \begin{array}{l} y = \varepsilon_s \xi \\ dy = \varepsilon_s d\xi \end{array} \right| = \frac{1}{\varepsilon_s} \int_0^{\varepsilon_s \eta} e^{-y^2} dy = \frac{\sqrt{\pi}}{2\varepsilon_s} \operatorname{erf}(\varepsilon_s \eta),$$

$$\int_\eta^\infty e^{-\varepsilon_l^2 \xi^2} d\xi = \left| \begin{array}{l} y = \varepsilon_l \xi \\ dy = \varepsilon_l d\xi \end{array} \right| = \frac{1}{\varepsilon_l} \int_{\varepsilon_l \eta}^\infty e^{-y^2} dy = \frac{\sqrt{\pi}}{2\varepsilon_l} \operatorname{erfc}(\varepsilon_l \eta),$$

na základe čoho možno konštanty K_1 , K_2 a K_3 zapísať v tvare

$$K_1 = \frac{2\varepsilon_s(T_h - T_B)}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\varepsilon_s \lambda)}, \quad K_2 = \frac{2\varepsilon_l(T_\infty - T_h)}{\sqrt{\pi} \operatorname{erfc}(\varepsilon_l \lambda)},$$

$$K_3 = \frac{2(C_0 - C_h)}{\sqrt{\pi} \operatorname{erfc}(\lambda)}.$$

a funkcie $T(z, t)$ a $C(z, t)$ v tvare

$$T(z, t) = T_B + \frac{(T_h - T_B) \operatorname{erf}(\varepsilon_s \eta)}{\operatorname{erf}(\varepsilon_s \lambda)}, \quad \eta < \lambda, \quad (3.14)$$

$$T(z, t) = T_\infty + \frac{(T_h - T_\infty) \operatorname{erfc}(\varepsilon_l \eta)}{\operatorname{erfc}(\varepsilon_l \lambda)}, \quad \eta > \lambda, \quad (3.15)$$

$$C(z, t) = C_0 + \frac{(C_h - C_0) \operatorname{erfc}(\eta)}{\operatorname{erfc}(\lambda)}, \quad \eta > \lambda. \quad (3.16)$$

Konštanty λ , T_h a C_h určíme na základe podmienok (2.8)–(2.10) definovaných na rozhraní.

3.2 Určenie konštant λ , T_h a C_h

Platí

$$\frac{\partial T}{\partial z} = K_1 e^{-\varepsilon_s^2 \eta^2} \frac{1}{(4Dt)^{1/2}}, \quad z < h,$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = K_2 e^{-\varepsilon_l^2 \eta^2} \frac{1}{(4Dt)^{1/2}}, \quad z > h,$$

a teda

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=h^-} = K_1 e^{-\varepsilon_s^2 \lambda^2} \frac{1}{(4Dt)^{1/2}}, \quad z < h,$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=h^+} = K_2 e^{-\varepsilon_l^2 \lambda^2} \frac{1}{(4Dt)^{1/2}}, \quad z > h.$$

Navyše, z (3.2) pre rýchlosť \dot{h} , s ktorou propaguje voľné rozhranie, platí

$$\dot{h}(t) = \lambda \left(\frac{D}{t} \right)^{1/2}.$$

Po dosadení týchto vzťahov do rovnice (2.8) dostávame

$$2\rho_s LD\lambda = k_s K_1 e^{-\varepsilon_s^2 \lambda^2} - k_l K_2 e^{-\varepsilon_l^2 \lambda^2},$$

$$\rho_s LD = \frac{k_s \varepsilon_s^2 (T_h - T_B)}{\sqrt{\pi} \varepsilon_s \lambda \operatorname{erf}(\varepsilon_s \lambda)} e^{-\varepsilon_s^2 \lambda^2} - \frac{k_l \varepsilon_l^2 (T_\infty - T_h)}{\sqrt{\pi} \varepsilon_l \lambda \operatorname{erfc}(\varepsilon_l \lambda)} e^{-\varepsilon_l^2 \lambda^2},$$

respektíve

$$\rho_s LD = \frac{k_s \varepsilon_s^2 (T_h - T_B)}{P(\varepsilon_s \lambda)} - \frac{k_l \varepsilon_l^2 (T_\infty - T_h)}{R(\varepsilon_l \lambda)}, \quad (3.17)$$

kde

$$P(\lambda) := \sqrt{\pi} \lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda),$$

$$R(\lambda) := \sqrt{\pi} \lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erfc}(\lambda).$$

Platí

$$\frac{\partial C}{\partial z} = \frac{C_0 - C_h}{(Dt)^{1/2} \sqrt{\pi} \operatorname{erfc}(\lambda)} e^{-\eta^2}$$

a teda

$$\left. \frac{\partial C}{\partial z} \right|_{z=h^+} = \frac{C_0 - C_h}{(Dt)^{1/2} \sqrt{\pi} \operatorname{erfc}(\lambda)} e^{-\lambda^2}$$

Dosadením do podmienky (2.9) dostaneme

$$C_h \lambda = \frac{C_h e^{-\lambda^2}}{\sqrt{\pi} \operatorname{erfc}(\lambda)} - \frac{C_0 e^{-\lambda^2}}{\sqrt{\pi} \operatorname{erfc}(\lambda)}$$

z čoho možno konštantu C_h vyjadriť jednoznačne ako funkciu λ v tvare

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

Ďalej, ak označíme

$$C_{fi} := C_h - C_0 = \frac{C_0 R(\lambda)}{1 - R(\lambda)}, \quad (3.18)$$

tak dosadením (3.18) do (2.10) dostávame

$$T_h = -\Gamma[C_0 + C_{fi}(\lambda)] = T_L(C_0) - \Gamma C_{fi}(\lambda). \quad (3.19)$$

Vzťah (3.17) možno pomocou (3.19) napísať v tvare

$$\rho_s LD = \frac{k_s \varepsilon_s^2 (T_L(C_0) - \Gamma C_{fi}(\lambda) - T_B)}{P(\varepsilon_s \lambda)} - \frac{k_l \varepsilon_l^2 (T_\infty - T_L(C_0) + \Gamma C_{fi}(\lambda))}{R(\varepsilon_l \lambda)},$$

z čoho združením členov pri $\Gamma C_{fi}(\lambda)$ a definovaním konštant

$$T_0 := T_\infty - T_L(C_0),$$

$$T_1 := T_L(C_0) - T_B$$

dostaneme

$$\Gamma C_{fi} \left[\frac{k_s \varepsilon_s^2}{P(\varepsilon_s \lambda)} + \frac{k_l \varepsilon_l^2}{R(\varepsilon_l \lambda)} \right] = \frac{k_s \varepsilon_s^2 T_1}{P(\varepsilon_s \lambda)} - \frac{k_l \varepsilon_l^2 T_0}{R(\varepsilon_l \lambda)} - \rho_s L D.$$

Dosadením za ε_l , ε_s a následným zjednodušením dostaneme

$$\Gamma C_{fi} \left[\frac{\rho_s C_{ps}}{P(\varepsilon_s \lambda)} + \frac{\rho_l C_{pl}}{R(\varepsilon_l \lambda)} \right] = \frac{\rho_s C_{ps} T_1}{P(\varepsilon_s \lambda)} - \frac{\rho_l C_{pl} T_0}{R(\varepsilon_l \lambda)} - \rho_s L.$$

Ak predelíme obe strany vzniknutej rovnosti výrazom $\rho_s C_{ps}$ dostaneme

$$\Gamma C_{fi} \left[\frac{1}{P(\varepsilon_s \lambda)} + \frac{\beta}{R(\varepsilon_l \lambda)} \right] = \frac{T_1}{P(\varepsilon_s \lambda)} - \frac{\beta T_0}{R(\varepsilon_l \lambda)} - \frac{L}{C_{ps}},$$

kde bezrozmerná konštanta β je definovaná vzťahom

$$\beta := \frac{\rho_l C_{pl}}{\rho_s C_{ps}}.$$

3.3 Zhrnutie výsledkov odvodenia

Podarilo sa nám nájsť riešenie systému (2.3)–(2.10) v tvare *samopodobných funkcií*

$$\begin{aligned} T(z, t) &= T_B + \frac{(T_h - T_B) \operatorname{erf}(\varepsilon_s \eta)}{\operatorname{erf}(\varepsilon_s \lambda)}, \quad \eta < \lambda, \\ T(z, t) &= T_\infty + \frac{(T_h - T_\infty) \operatorname{erfc}(\varepsilon_l \eta)}{\operatorname{erfc}(\varepsilon_l \lambda)}, \quad \eta > \lambda, \\ C(z, t) &= C_0 + \frac{(C_h - C_0) \operatorname{erfc}(\eta)}{\operatorname{erfc}(\lambda)}, \quad \eta > \lambda, \end{aligned}$$

kde *samopodobná premenná* má tvar

$$\eta(z, t) := \frac{z}{(4Dt)^{1/2}}.$$

Časový vývoj voľného rozhrania je daný vzťahom

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

kde konštanta λ je daná ako koreň nelineárnej algebraickej rovnice

$$\Gamma C_{fi} \left[\frac{1}{P(\varepsilon_s \lambda)} + \frac{\beta}{R(\varepsilon_l \lambda)} \right] = \frac{T_1}{P(\varepsilon_s \lambda)} - \frac{\beta T_0}{R(\varepsilon_l \lambda)} - \frac{L}{C_{ps}}.$$

Konštanty C_h , T_h sú potom dané vzťahmi

$$\begin{aligned} C_h &= \frac{C_0}{1 - R(\lambda)}, \\ T_h &= T_L(C_0) - \Gamma(C_h - C_0). \end{aligned}$$

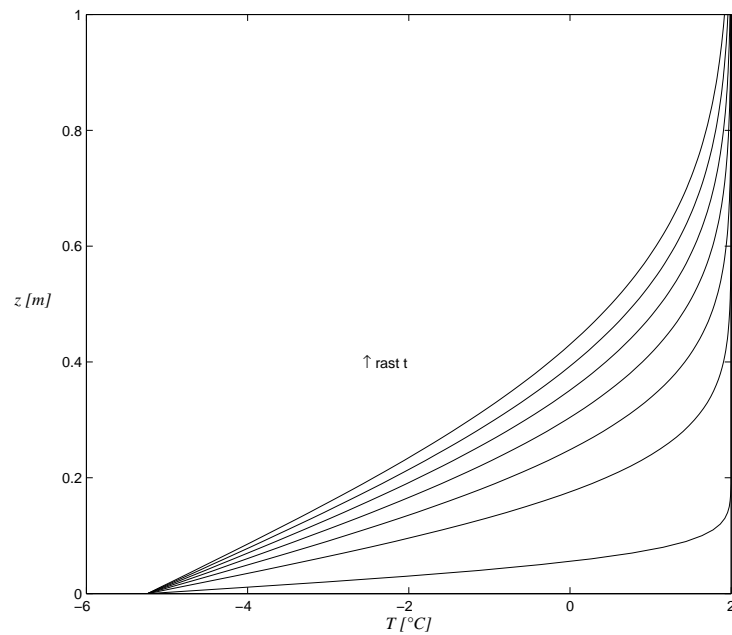
Na obrázku 3.1 je znázornený teplotný profil pre rôzne časy – t.j. grafy funkcie $T(z, t)$ pre fixné hodnoty t , pričom sme zvolili $T_\infty = 2$, $T_B = -5$, $C_0 = 0.02$. Platí

$$\begin{aligned} \eta &\rightarrow 0 \quad \text{pre } t \rightarrow \infty, \forall z > 0, \\ \operatorname{erf}(\varepsilon_s \eta) &\rightarrow \infty \quad \text{pre } \eta \rightarrow 0 \end{aligned}$$

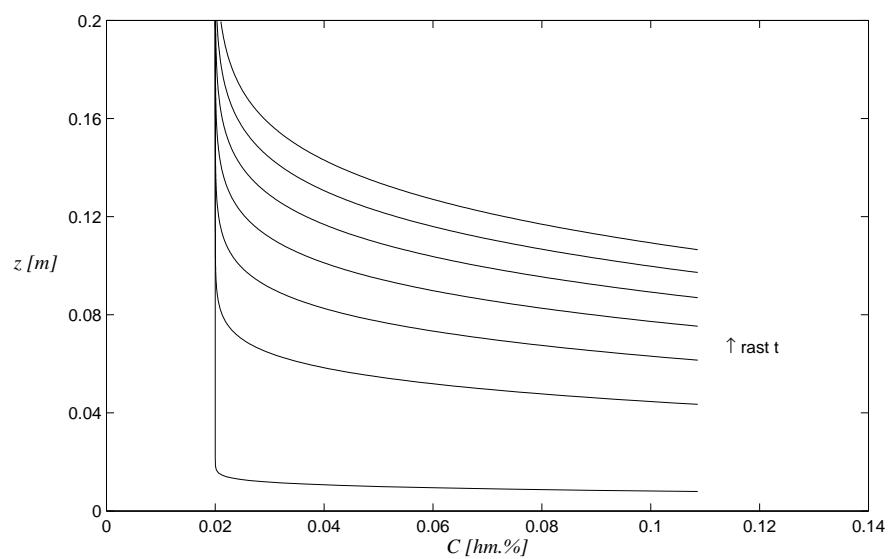
a teda

$$T(z, t) \rightarrow T_B \quad \text{pre } t \rightarrow \infty, \forall z > 0. \quad (3.20)$$

Teplota teda v ľubovoľnom bode $z > 0$ bodovo konverguje k teplote ochladenej hranice $z = 0$. Na obrázku 3.2 je znázornený profil koncentrácie C pre tie isté časy ako v prípade teplotného profilu. Pozícia voľného rozhrania v danom čase t je daná tou hodnotou z , v ktorej sa graf funkcie $C(z, t)$ láme z hodnoty 0 na hodnotu $C_h \neq 0$. Ďalej vidno, že maximálna hodnota C sa dosahuje pre $z = h(t)$ a potom klesá k hodnote T_∞ . Zvýšenie koncentrácie látky A smerom k $z = h(t)$ je spôsobené vylučovaním látky B na hranici a teda podiel A sa v kvapalnej zmesi zvýši.



Obr. 3.1: Vývoj teplotného profilu pre $t = 1, 30, 60, 90, 120, 150$ a 180 [s].



Obr. 3.2: Vývoj profilu koncentrácie C pre $t = 1, 30, 60, 90, 120, 150$ a 180 [s].

Kapitola 4

Parametrická závislosť riešenia: Grafická reprezentácia

4.1 Fyzikálna interpretácia parametrov λ , T_0 a T_1

V tejto kapitole sa zameriame na skúmanie závislosti bezrozmernej hrúbky tuhej fázy λ od hodnôt parametrov C_0 , T_0 a T_1 keďže sú to práve tieto hodnoty, ktoré možno pri experimentoch meniť a tým ovplyvniť vývoj systému. Fyzikálny zmysel konštanty λ a parametrov T_0 , T_1 je nasledovný:

λ charakterizuje bezrozmernú hrúbku vrstvy tuhej fázy, presnejšie je to okamžitá hrúbka tejto vrstvy preškálovaná výrazom $(Dt)^{1/2}$,

T_0 je rozdiel medzi počiatočnou teplotu binárnej zmesi T_∞ a teplotou tuhnutia $T_L(C_0)$, t.j. charakterizuje o koľko je počiatočná teplota vyššia ako teplota tuhnutia,

T_1 je rozdiel medzi teplotou tuhnutia $T_L(C_0)$ a teplotou T_B , na ktorú bola hranica $z = 0$ ochladená, t.j. charakterizuje o koľko je teplota ochladenej hranice nižšia ako teplota tuhnutia danej zmesi.

Pri numerických výpočtoch sme zvolili nasledovné hodnoty jednotlivých fyzikálnych konštánt

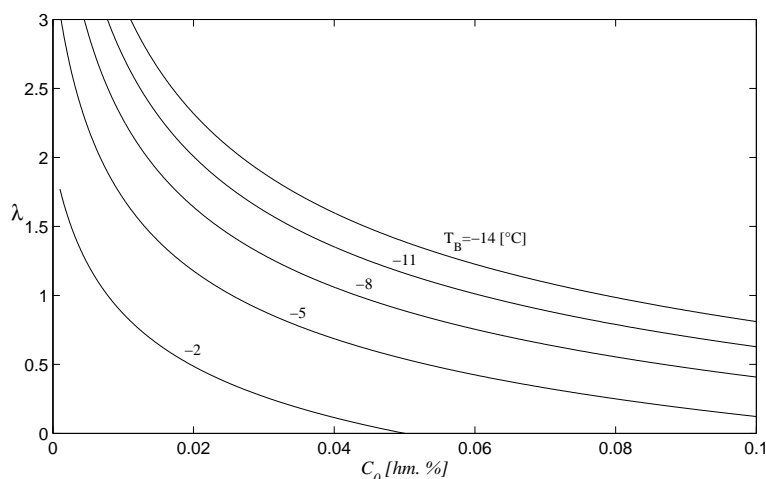
$$\begin{aligned} k_s &= 5.3 \times 10^{-3} \text{ J cm}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}, & k_l &= 1.3 \times 10^{-3} \text{ J cm}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}, \\ C_{ps} &= 0.48 \text{ J g}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}, & C_{pl} &= 1.0 \text{ J g}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}, \\ \rho_s &= 0.916 \text{ g cm}^{-3}, & \rho_l &= 1.0 \text{ g cm}^{-3}, \\ D &= 1.0 \times 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}, & L &= 80 \text{ J g}^{-1}, \\ \Gamma &= 40 \text{ }^\circ\text{C}, \end{aligned}$$

ktoré zodpovedajú binárnej zmesi voda– NaNO_3 .

4.2 Parametrická závislosť riešenia

Závislosť λ od počiatočnej koncentrácie C_0

Na obrázku 4.1 je graficky znázornená závislosť λ od počiatočnej koncentrácie C_0 pre rôzne hodnoty parametra T_B . Vidíme, že ide o klesajúcu závislosť, t.j. pre



Obr. 4.1: Závislosť bezrozsmernej hrúbky tuhej fázy λ od počiatkovej koncentrácie C_0 pre rôzne hodnoty T_B .

väčšiu počiatkovú koncentráciu C_0 látky A bude hrúbka tuhej vrstvy v ľubovoľnom čase $t > 0$ menšia (keďže tuhá vrstva sa tvorí vylučovaním látky B). Ďalej vidno, že pre väčšiu hodnotu teploty T_B sú krivky znázorňujúce závislosť $\lambda = \lambda(C_0)$ posunuté smerom nadol – pre fixné C_0 hrúbka tuhej vrstvy klesá s rastúcou teplotou na hranici $z = 0$.

Závislosť λ od parametra T_1

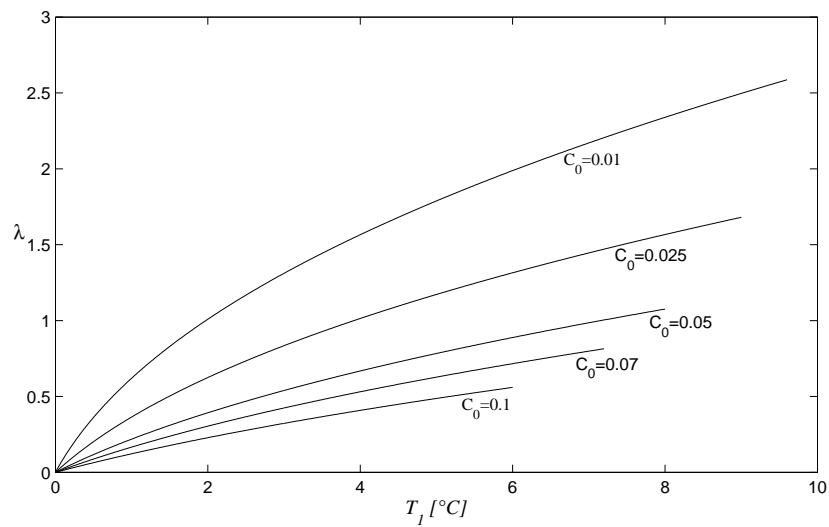
Na obrázku 4.2 je graficky znázornená závislosť λ od rozdielu medzi teplotou tuhnutia $T_L(C_0)$ a teplotou na ochladenej hranici $z = 0$ pre danú hodnotu C_0 . Vidíme, že čím je tento rozdiel väčší (t.j. čím je teplota spodnej hranice $z = 0$ nižšia v porovnaní s teplotou tuhnutia), tým je hrúbka tuhej vrstvy v ľubovoľnom čase $t > 0$ väčšia. Navyše pre väčšie hodnoty počiatkovej koncentrácie C_0 sú krivky $\lambda = \lambda(T_1)$ posunuté smerom nadol.

Závislosť λ od parametra T_0

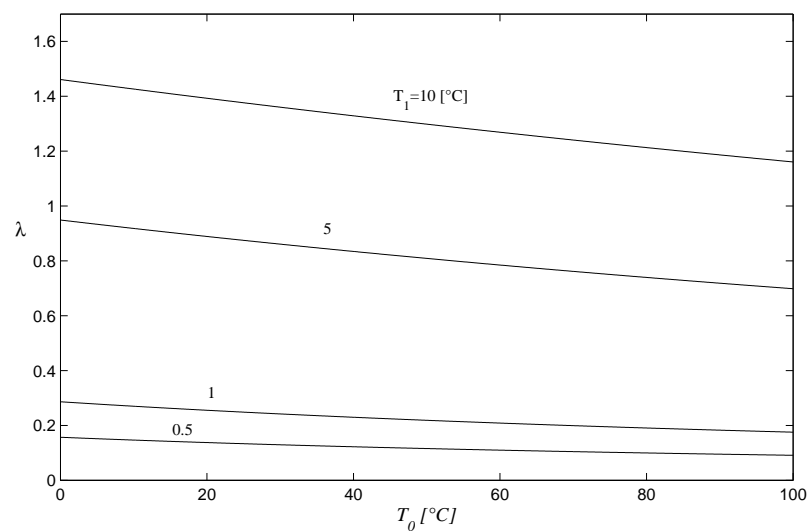
Na obrázku 4.3 je graficky znázornená závislosť λ od rozdielu medzi počiatkovou teplotou T_∞ a teplotou tuhnutia $T_L(C_0)$ pre rôzne hodnoty parametra T_B , pričom sme zvolili $C_0 = 0.04$. Vidno, že táto závislosť je pre fixné hodnoty ostatných parametrov klesajúca, avšak hodnota λ klesá s rastúcou hodnotou T_0 len veľmi pomaly. Z toho vyplýva, že na hrúbku tuhej vrstvy v zvolenom čase $t > 0$ má hodnota T_1 väčší vplyv ako hodnota T_0 .

λ ako funkcia parametrov T_B a C_0

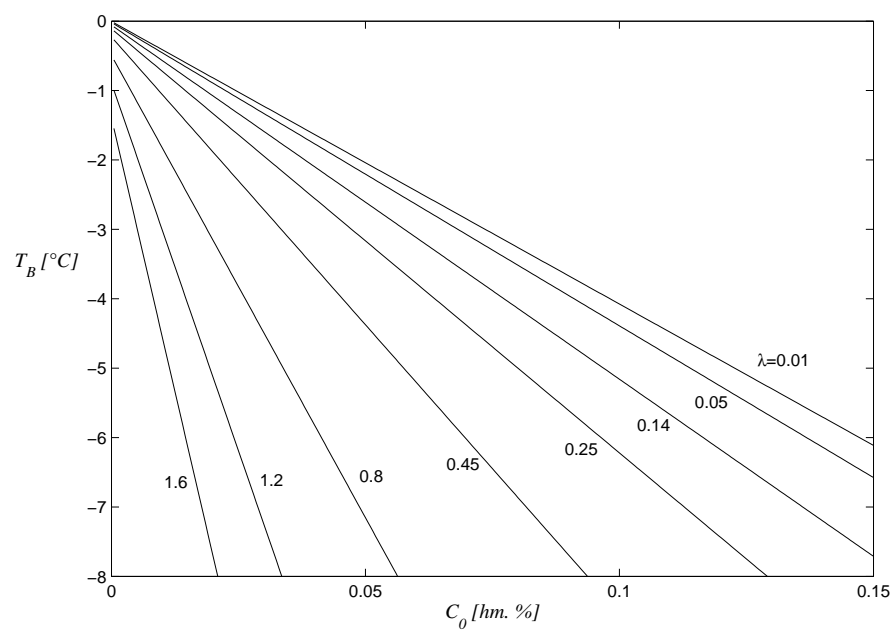
Na obrázku 4.4 sú znázornené izočiary funkcie $\lambda = \lambda(T_B, C_0)$, t.j. body ležiace na jednej izočiare zodpovedajú tej istej hrúbke $h(t)$ tuhej vrstvy v danom čase $t > 0$. Pri výpočte sme zvolili hodnotu $T_\infty = 15$ °C.



Obr. 4.2: Závislosť bezrozmernej hrúbky tuhej fázy λ od parametra T_1 pre rôzne hodnoty C_0 . Pri voľbe intervalu na T_1 -osi treba brať do úvahy interval prípustných T_1 , keďže musí platiť $T_B = T_L(C_0) - T_1 > 0$



Obr. 4.3: Závislosť bezrozmernej hrúbky tuhej fázy λ od parametra T_0 pre rôzne hodnoty parametra T_1 .

Obr. 4.4: Izočiary funkcie $\lambda = \lambda(T_B, C_0)$.

Kapitola 5

Záver a motivácia pre ďalšie štúdium

Podarilo sa nám odvodiť samopodobné riešenie problému tuhnutia binárnej zmesi a numerickým riešením konkrétneho prípadu ukázať jednotlivé parametrické závislosti riešenia od konštánt T_0 , T_1 a C_0 .

Ako sme už spomenuli v úvode, ide o jednoduchý model predpokladajúci dokonale hladké rovinné rozhranie medzi tuhou a kvapalnou fázou. Navyše sme predpokladali, že teplota na tomto voľnom rozhraní je daná krivkou liquidus. Táto podmienka však nehovorí nič o teplote nad rozhraním. Za určitých predpokladov môže nastať situácia, kedy teplota kvapaliny nad voľným rozhraním klesne pod teplotu danú krivkou liquidus, t.j. pod teplotu $T_L(C)$, kde C je koncentrácia v danom bode. Tento jav sa nazýva *koncentračné podchladenie*. V práci (Worster 1986) je ako podmienka pre nastatie koncentračného podchladenia uvedená nasledovná nerovnosť

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=h^+} < -\Gamma \left. \frac{\partial C}{\partial z} \right|_{z=h^+}, \quad (5.1)$$

ktorú možno v prípade nami nájdeného samopodobného riešenia napísať v tvare

$$C_{fi} > \frac{(T_0/\Gamma)\varepsilon_l^2 R(\lambda)}{R(\varepsilon_l \lambda) - \varepsilon_l^2 R(\lambda)}. \quad (5.2)$$

V prípade, že v kvapaline nad voľným rozhraním dochádza ku koncentračnému podchladeniu, je toto rozhranie nestabilné voči malým perturbáciám – t.j. dochádza k rastu perturbácie v čase. To vedie k vzniku *dendritickej vrstvy* spomínanej v úvode tejto práce. V budúcnosti bude cieľom našej ďalšej práce skúmať globálnu stabilitu rovinných rozhraní tuhá fáza/dendritická vrstva a dendritická vrstva/kvapalná fáza pomocou variačných metód.

Literatúra

- [1] Worster, M. G. 1986 Solidification of an alloy from a cooled boundary. *Journal of Fluid Mechanics* **167**, 481–501.
- [2] Guba, P. 2001 On the finite-amplitude steady convection in rotating mushy layers. *Journal of Fluid Mechanics* **437**, 337–365.
- [3] Guba, P. & Boďa, J. 1998 The effect of uniform rotation on convective instability of a mushy layer during binary alloy solidification. *Studia geophysica et geodynamica* **42**, 289–296.
- [4] Guba, P. & Worster, M. G. 2006 Free convection in laterally solidifying mushy regions. *Journal of Fluid Mechanics* **558**, 69–78.
- [5] Guba, P. & Worster, M. G. 2006 Nonlinear oscillatory convection in mushy layers. *Journal of Fluid Mechanics* **553**, 419–443.
- [6] Huppert, H. E. 1990 The fluid mechanics of solidification. *Journal of fluid mechanics* **212**, 209–240.

Príloha

Táto príloha obsahuje výpis zdrojového kódu v systéme MATLAB na výpočet samopodobného riešenia problému tuhnutia binárnej zmesi.

Funkcie $P(\lambda)$, $R(\lambda)$ a $T_L(C)$:

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

```
function r=R(x)
    r = sqrt(pi)*x*exp(x^2)*erfc(x);
```

```
function T=TL(C0,GAMMA)
    T=-GAMMA*C0;
```

Výpočet konštánt C_h , T_h a C_{fi} :

```
function Ch = C_h(C0,lambda)
    Ch = C0/(1-sqrt(pi)*lambda*exp(lambda^2)*erfc(lambda));
```

```
function Th = T_h(C0,lambda,GAMMA)
    Th = TL(C0) - GAMMA*(C_h(C0,lambda)-C0);
```

```
function cfi = Cfi(lambda,C0)
    cfi = (C0*R(lambda))/(1-R(lambda));
```

Numerický výpočet konštanty λ :

```
function lambda=GetLambda(TB,C0)
    x0=0.5;
    lambda=fzero(@lambda_Fn,x0);
    function lFn = lambda_Fn(lambda,GAMMA,beta,eps_l,eps_s,Tinf,Cp_s,L)
        lFn=GAMMA*Cfi(lambda,C0)*(beta/F(eps_l*lambda)+1/G(eps_s*lambda))-...
            ((TL(C0)-TB)/G(eps_s*lambda))-...
            beta*(Tinf-TL(C0))/F(eps_l*lambda)-L/Cp_s);
    end
end
```


Výpočet riešenia $T(z, t)$, $C(z, t)$ a $h(t)$:

```
function sol=T(z,t,lambda,TB,Th,Tinf,eps_s,eps_l,D)
    eta=z./sqrt(4*D*t);
    if eta<lambda
        sol=TB+(Th-TB)*erf(eps_s*eta)/erf(eps_s*lambda);
    else
        sol=Tinf+(Th-Tinf)*erfc(eps_l*eta)/erfc(eps_l*lambda);
    end

function sol=C(z,t,lambda,Ch,C0,D)
    eta=z/sqrt(4*D*t);
    if eta>lambda
        sol=C0+(Ch-C0)*erfc(eta)/erfc(lambda);
    else
        sol=0;
    end

function h=Interface(lambda,t,D)
    h=2*lambda*sqrt(D*t);
```