



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING

ÚSTAV MATEMATIKY

INSTITUTE OF MATHEMATICS

METODA ŘEŠENÍ ÚLOH VEDENÍ TEPLA V MATERIÁLU S FÁZOVOU ZMĚNOU S OBSAHEM NANOČÁSTIC

METHOD FOR THE SOLUTION OF CONDUCTION HEAT TRANSFER IN PHASE CHANGE MATERIAL WITH
NANOPARTICLES

DIPLOMOVÁ PRÁCE

MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Bc. Barbora Kopečková

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

prof. Ing. Miroslav Jícha, CSc.

BRNO 2016

Zadání diplomové práce

Ústav: Ústav matematiky
Studentka: **Bc. Barbora Kopečková**
Studijní program: Aplikované vědy v inženýrství
Studijní obor: Matematické inženýrství
Vedoucí práce: **prof. Ing. Miroslav Jícha, CSc.**
Akademický rok: 2015/16

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č.111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma diplomové práce:

Metoda řešení úloh vedení tepla v materiálu s fázovou změnou s obsahem nanočástic

Stručná charakteristika problematiky úkolu:

Zpracovat metodu pro 2D numerické řešení vedení tepla v materiálu s fázovou změnou s obsahem nanočástic. Řešení bude založeno na metodě konečných objemů.

Cíle diplomové práce:

Vývoj modelu a programu pro řešení 2D teplotního pole při vedení tepla v kartézské souřadné soustavě v materiálu s fázovou přeměnou (tzv. PCM materiál). Model bude vycházet z metody konečných objemů a umožní řešení pro tři typické okrajové podmínky i s vnitřním zdrojem či propadem tepla. Další částí modelu bude implementace nanočástic do materiálu a posouzení jejich vlivu na časově proměnné teplotní pole v PCM materiálu.

Seznam literatury:

M. Jícha: Počítačové modelování úloh vedení tepla a proudění, skripta VUT, 1991

S. V. Patankar: Computation of Conduction and Duct Flow Heat Transfer, Innovative Research, Inc., USA, 1991

Termín odevzdání diplomové práce je stanoven časovým plánem akademického roku 2015/16

V Brně, dne

L. S.

prof. RNDr. Josef Šlapal, CSc.
ředitel ústavu

doc. Ing. Jaroslav Katolický, Ph.D.
děkan fakulty

Abstrakt

Diplomová práce se zabývá problematikou vedení tepla v materiálech s fázovou přeměnou (PCM) a v PCM s obsahem nanočástic. Podrobněji uvádí odvození jak stacionárních, tak i nestacionárních rovnic vedení tepla pro 1D, 2D i 3D případy. Pro řešení těchto rovnic je použita metoda konečných objemů, jejíž princip je zde také důkladně popsán. Cílem práce je vývoj modelu pro 2D řešení teplotního pole při vedení tepla v PCM a posouzení vlivu implementace nanočástic do tohoto materiálu na dané teplotní pole. K vývoji modelu, výpočtům a vykreslení grafů byl použit software MATLAB.

Summary

This master thesis deals with problematic of the heat convection in phase change materials (PCM) and PCM with nanoparticles. The derivation of stationary and non-stationary equations for 1D, 2D and 3D heat convection are described in detail. The finite element volume method is used for solution to these equations, of which principle is described carefully. The aim of this thesis is model development for 2D solution to temperature distribution at heat convection in PCM and influence assessment of nanoparticle implementation into material on given temperature distribution. Software MATLAB was used for model development, solution and plotting graphs.

Klíčová slova

Materiál s fázovou přeměnou (PCM), materiál s fázovou přeměnou s obsahem nanočástic (NePCM), vedení tepla, metoda konečných objemů

Keywords

Phase change material (PCM), nanostructured phase change material (NePCM), heat conduction, finite volume method

KOPEČKOVÁ, B. *Metoda řešení úloh vedení tepla v materiálu s fázovou změnou s obsahem nanočástic*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2016. 47 s. Vedoucí prof. Ing. Miroslav Jícha, CSc.

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci *Metoda řešení úloh vedení tepla v materiálu s fázovou změnou s obsahem nanočástic* vypracovala samostatně pod vedením prof. Ing. Miroslava Jíchy, Csc., s použitím materiálů uvedených v seznamu literatury.

Bc. Barbora Kopečková

Chtěla bych poděkovat vedoucímu mé diplomové práce panu prof. Ing. Miroslavu Jíchovi, CSc., za projevenou ochotu a odborné rady při psaní této práce. Dále bych ráda poděkovala svému příteli Kamilovi za jeho neustálou podporu a vroucí lásku.

Bc. Barbora Kopečková

Obsah

1	Úvod	3
2	Cíle diplomové práce	4
3	Materiály	5
3.1	PCM	5
3.2	PCM s nanočásticemi	5
4	Metoda konečných objemů pro rovnice vedení tepla	7
4.1	Diferenciální rovnice vedení tepla	7
4.1.1	Rovnice matematické fyziky	7
4.1.2	Aplikace rovnice matematické fyziky	11
4.2	Diskretizační rovnice vedení tepla	14
4.2.1	Formulace metody konečných objemů	15
4.3	Stacionární vedení tepla	15
4.3.1	1D stacionární vedení tepla	16
4.3.2	Okrajové podmínky	21
4.3.3	2D stacionární vedení tepla	23
4.3.4	3D stacionární vedení tepla	25
4.4	Nestacionární vedení tepla	25
4.4.1	1D nestacionární vedení tepla	25
4.4.2	Schemata řešení	27
4.4.3	2D nestacionární vedení tepla	28
4.4.4	3D nestacionární vedení tepla	29
4.5	Řešení soustavy algebraických rovnic	30
4.5.1	Řešení soustavy lineárních algebraických rovnic pro 1D	30
4.5.2	Řešení soustavy algebraických rovnic pro 2D nebo 3D	32
5	Výsledky	34
5.1	Výsledky pro stacionární vedení tepla	34
5.1.1	Dirichletova okrajová podmínka	34
5.1.2	Neumannova okrajová podmínka	35
5.1.3	Newtonova okrajová podmínka	36
5.2	Parametry	37
5.3	Výsledky pro PCM a NePCM	39
5.3.1	PCM	39
5.3.2	NePCM	40
5.3.3	Srovnání výsledků	42
6	Závěr	43
	Literatura	44
	Seznam zkratk	45

A Zdrojové kódy v MATLABu	46
A.1 Stacionární úlohy	46
A.2 Nestacionární úlohy	47

1. Úvod

V moderní době technických pokroků a velkého množství elektrických zařízení se energie řadí mezi velice nedostatkové artikly. Propast mezi celosvětovou poptávkou a nabídkou energie neustále narůstá a stává se bezprostřední hrozbou. Jednou z možností, která alespoň částečně přispívá ke snížení této hrozby, je akumulace energie, která vzniká při výrobních, chemických a průmyslových procesech a která by v jiném případě nebyla efektivně využita.

V této práci se budeme zabývat konkrétně tepelnou energií. Tepelná energie může být uložena jako latentní teplo, k jehož akumulaci dochází během fázové přeměny materiálu. K tomuto účelu se používají materiály s fázovou přeměnou (PCM - z anglického phase change material). Příkladem využití je například integrace PCM do obvodových zdí domů, díky níž dochází ke snížení tepelné fluktuace během střídání vnějších teplot a tím i ke snížení spotřeby energie a jejímu ušetření. Touto problematikou se zabývá mnoho studií [1], [2].

Důležitým parametrem je právě rychlost fázové změny materiálu. Rychlejší roztavením materiálu dojde k pohotovějšímu a účinnějšímu zachycení teplotní změny a zabránění výrazným teplotním rozdílům. Z důvodu velice nízké tepelné vodivosti PCM vznikají studie zabývající se jejím zvýšením prostřednictvím implementace různých druhů nanočástic [3], [4].

Stěžejním obsahem této práce je právě posouzení vlivu implementace nanočástic do PCM na časově proměnné teplotní pole a čas tavení ve srovnání s čistým PCM. Pro tyto účely byl vyvinut výpočetní program v softwaru MATLAB.

2. Cíle diplomové práce

Cílem diplomové práce je vývoj modelu pro řešení 2D teplotního pole při vedení tepla v kartézské souřadné soustavě v materiálu s fázovou přeměnou (tzv. PCM materiál). Model má vycházet z metody konečných objemů a umožňovat řešení pro tři typické okrajové podmínky i s vnitřním zdrojem či propadem tepla. Další úroveň modelu je zaměřena na implementaci nanočástic do materiálu a posouzení jejich vlivu na časově proměnné teplotní pole v PCM materiálu.

3. Materiály

Tato kapitola se zabývá podrobnějším popisem materiálů, použitých pro řešení 2D teplotního pole při vedení tepla. Do této skupiny spadají materiály s fázovou přeměnou, které dále budeme nazývat zkratkou PCM vycházející z anglického názvu Phase Change Material. Dalšími materiály, jejichž chování je předmětem výzkumu, jsou PCM s obsahem nanočástic, které budeme dále značit NePCM z anglického nanostructure-enhanced PCM.

3.1. PCM

Materiály s fázovou přeměnou mají široké využití např. jako tepelná ochrana systémů, dále se využívají pro akumulaci energie, nebo při aktivním, či pasivním chlazení elektroniky. Velice významné je použití tenké vrstvy PCM ve stěnách domů ke snížení tepelné fluktuace, ke které dochází vlivem střídání denních a nočních teplot [1]. Jedná se o materiál, který s rostoucí teplotou mění svou fázi z pevné na kapalnou, během čehož akumuluje latentní tepelnou energii. Mezi neznámější PCM patří voda, různé druhy parafinů, hydráty solí, mastné kyseliny a cukerné alkoholy, jejichž teplota tání se pohybuje od -100°C do 100°C , což poskytuje možnost použití jak v nízko, tak i ve vysoko teplotních aplikacích. Většina PCM během změny fáze významně nemění svůj objem a zároveň nepodléhají přechlazení. Pro své velice žádané vlastnosti, jmenovitě vysoké skupenské teplo tání, zanedbatelné přechlazení, chemická netečnost, komerční dostupnost ad., patří mezi nejčastěji využívané PCM parafinové vosky. Na druhou stranu mají však i své nedostatky, mezi které patří především nízká tepelná vodivost. Při použití parafinových vosků jako úložišť energie způsobuje jejich nízká tepelná vodivost snížení rychlosti tepelné výměny během tání, příp. tuhnutí, což je nežádoucí, protože rychlost fázové změny je jeden z nejdůležitějších parametrů systémů pro akumulaci skupenského tepla [5].

3.2. PCM s nanočásticemi

Nízkou tepelnou vodivost parafinových vosků je možno vylepšit přidáním nanočástic materiálů s vysokou tepelnou vodivostí. Tímto způsobem vznikají tzv. NePCM. Touto oblastí se zabývá mnoho studií, přičemž jejich základní přehled je zpracován v [3]. Jako nanočástice přidávající se do PCM mohou sloužit např. nanočástice Cu, Al, Fe, karbonová vlákna a mnohá další. Velice důležitým aspektem, který jednotlivé studie zkoumají je stabilita vzniklé sloučeniny a její výsledné fyzikální vlastnosti (tepelná vodivost, tepelná kapacita, hustota). Pro výpočet výsledné tepelné kapacity a hustoty sloučeniny se ve většině článků používá tzv. „pákové pravidlo“:

$$\rho_{eff} = (1 - \phi)\rho_c + \phi\rho_d, \quad (3.1)$$

kde ρ_{eff} značí výslednou hustotu, ρ_c hustotu PCM, ρ_d hustotu použitých nanočástic a ϕ objemový podíl nanočástic.

$$c_{eff} = (1 - \phi)c_c + \phi c_d, \quad (3.2)$$

kde c_i je tepelná kapacita jednotlivých částí. Zásadnější problém přichází s vyjádřením hodnoty tepelné vodivosti NePCM. Existuje mnoho modelů vyvinutých pro výpočet tepelné vodivosti pro tzv. nanokapaliny, které je možné v některých případech využít i pro

NePCM, jejich shrnutí je uvedeno v [6]. Nicméně nejčastěji využívaným modelem je vztah odvozený Maxwellem [7]:

$$\lambda_{eff} = \lambda_c \left[\frac{\lambda_d + 2\lambda_c - 2\phi(\lambda_c - \lambda_d)}{\lambda_d + 2\lambda_c + \phi(\lambda_c - \lambda_d)} \right], \quad (3.3)$$

kde λ_i odpovídá tepelné vodivosti jednotlivých částí.

Pro náš model byly použity výsledky experimentu uvedené v [4], jedná se parafinový vosk s obsahem nanočástic karbonu v různých hmotnostních poměrech.

4. Metoda konečných objemů pro rovnice vedení tepla

Tato kapitola je věnována odvození diferenciální rovnice vedení tepla a následné aplikaci numerické metody konečných objemů, konkrétně na této rovnici. Tato problematika je již podrobně popsána v mnoha knihách a učebních materiálech. Tento text je založen na přístupu uvedeném v [8] a [9].

4.1. Diferenciální rovnice vedení tepla

Existují různé přístupy k odvození rovnice vedení tepla, v této kapitole budou uvedeny dva. Prvý z nich je odvození této rovnice jako rovnice matematické fyziky, zatímco druhý přístup využívá zjednodušený avšak názornější přístup k této problematice. Ve své podstatě je první přístup odvození (matematický model) obecným principem, který lze následně konkretizovat pro danou potřebu (zjednodušený model).

4.1.1. Rovnice matematické fyziky

Tento přístup odvození rovnice vedení tepla je, jak bylo již výše zmíněno, obecnějším principem. V této kapitole se ho pokusíme názorně ilustrovat. Pro podrobnější proniknutí do této problematiky je doporučeno prostudovat skripta [10], ze kterých tento oddíl čerpá.

Cílem je tedy vytvořit model ve tvaru diferenciální rovnice. Pro odvození rovnice vedení tepla budeme vycházet z časoprostorové tepelné bilance a pro vyjádření veličin typu hmotnost, vnitřní energie, objemová síla aj. pomocí integrálů budeme používat hustotu dané veličiny. Hodnotu této dané obecné veličiny F v objemu V definujeme následovně:

$$F \equiv F(V) = \int_V f(x) dx, \quad (4.1)$$

kde $f(x)$ je příslušná hustota.

Uvažujme těleso o objemu $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, zvolme libovolný kontrolní objem $V \subset \Omega$ a časový interval $I = (t_\alpha, t_\beta)$, dále označme okraj tělesa $\partial V = S$. Neznámou $u(\mathbf{x}, t)$ je teplota v místě $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ a čase t . Nyní provedeme tepelnou bilanci. Dle zákona zachování energie platí:

$$\Delta E = Q_f - Q_S, \quad (4.2)$$

kde ΔE udává přírůstek energie v objemu V během časového intervalu I , Q_f je dodané teplo do objemu V vnitřními zdroji s hustotou $f(\mathbf{x}, t)$ během časového intervalu I a Q_S charakterizuje množství tepla, které vyteče přes okraj S během I . Dále vyjádříme jednotlivé veličiny rovnice (4.2).

Teplo dodané do objemu V během časového intervalu (t_α, t_β) :

$$Q_f = \int_{t_\alpha}^{t_\beta} \left(\int_V f(\mathbf{x}, t) dx \right) dt.$$

Přírůstek energie ΔE vyjádříme pomocí hustoty vnitřní energie $e(\mathbf{x}, t)$:

$$\Delta E \equiv E_{t_\beta} - E_{t_\alpha} = \int_V (e(\mathbf{x}, t_\beta) - e(\mathbf{x}, t_\alpha)) dx = \int_V \left(\int_{t_\alpha}^{t_\beta} \frac{\partial e}{\partial t} dt \right) dx,$$

kde dx pro prostorový případ odpovídá vektoru (dx_1, dx_2, dx_3) . Pro úpravu vyjádření veličiny ΔE bylo využito následujícího lemmatu:

Lemma 4.1.1.1. [10] *Nechť spojitá veličina f má derivaci v intervalu (x_a, x_b) . Potom platí*

$$f(x_b) - f(x_a) = \int_{x_a}^{x_b} \frac{df}{dx}(x) dx.$$

Vzhledem k tomu, že hledanou neznámou je hodnota teploty u , je nutné popsat vztah vnitřní energie a teploty. Hustota vnitřní energie e je závislá na teplotě, tj. $e = e(u)$. V případě, že nebudou uvažovány skupenské změny, lze tento vztah linearizovat a zapsat ve tvaru:

$$e = cu + konst., \quad (4.3)$$

kde konstantu c nazýváme „objemové“ měrné teplo.

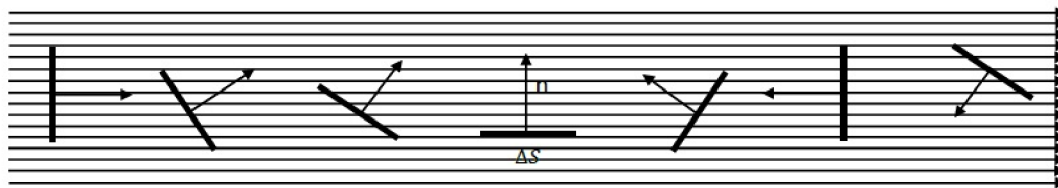
Množství tepla, které vyteče přes povrch S během času I lze vyjádřit jako:

$$Q_s = \int_{t_\alpha}^{t_\beta} \left(\int_S w dS \right) dt, \quad (4.4)$$

kde $w = w(\mathbf{x}, t, \mathbf{n})$ je hustota tepelného toku, která je závislá na poloze, čase a orientaci vnější normály \mathbf{n} plochy S .

Analýza tepelného toku

Je potřeba podrobněji analyzovat veličinu $w = w(\mathbf{x}, t, \mathbf{n})$. Jak je již výše zmíněno, jedná se o množství tepla, která projde jednotkou plochy ΔS za jednotku času. Dále je ze zápisu zřejmé, že závisí také na jednotkovém vektoru normály \mathbf{n} k dané ploše, který určuje směr a orientaci této plochy, viz obrázek 4.1. Počet čar procházejících plochou



Obrázek 4.1: Závislost hustoty tepelného toku w na směru a orientaci normály \mathbf{n} plochy S .

udává velikost toku. V prvních třech případech se jedná o tok kladný, čtvrtý případ popisuje nulový tok a poslední tři případy tok záporný. Z obrázku je tedy zřejmé, že $w = w(n)$. Zavedeme nyní kartézskou soustavu souřadnic a hustotu tepelného toku vyjádříme pomocí vektoru tepelného toku $\mathbf{w} = (w_1, w_2, w_3)$, kde w_1, w_2, w_3 jsou jednotlivé toky ve směru souřadných os. Hustota tepelného toku je pak zjevně dána následujícím výrazem:

$$w(n) = \sum_{i=1}^3 w_i n_i = \mathbf{w} \cdot \mathbf{n}. \quad (4.5)$$

Jakkoliv se tento vztah může zdát býti zřejmým, pro úplné objasnění ho zde odvodíme podrobně.

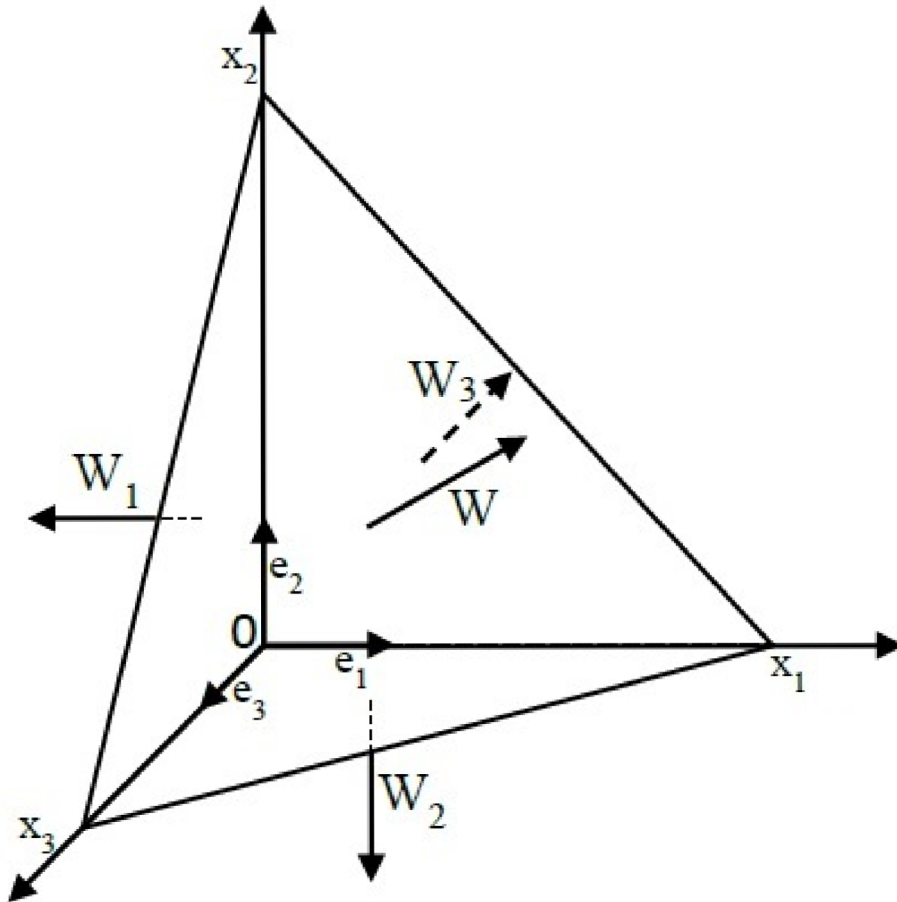
Úlohu zjednodušíme, budeme uvažovat homogenní a ustálený tepelný tok, tedy pouze $w = w(\mathbf{n})$. Představme si nyní kontrolní objem jako čtyřstěn $V = 0x_1x_2x_3$, viz obrázek 4.2, který se skládá ze čtyř trojúhelníků $T = \triangle x_1x_2x_3$, $T_1 = \triangle x_20x_3$, $T_2 = \triangle x_30x_1$ a $T_3 = \triangle x_10x_2$. Tepelná bilance pro tento čtyřstěn bude vypadat následovně (uvažujeme neměnnou vnitřní energii čtyřstěnu a žádné vnitřní zdroje):

$$W + W_1 + W_2 + W_3 = 0, \quad (4.6)$$

kde W je celkový tok přes trojúhelník T a jednotlivé W_i jsou celkové tepelné toky přes trojúhelníky T_i , které lze vyjádřit ve tvaru:

$$W = w(\mathbf{n})|T|, W_1 = w(-e_1)|T_1|, W_2 = w(-e_2)|T_2|, W_3 = w(-e_3)|T_3|,$$

kde \mathbf{n} je normála k ploše trojúhelníku T , e_i jsou jednotkové vektory souřadných os, viz obrázek 4.2 a $w(-e_i) = -w(e_i)$.



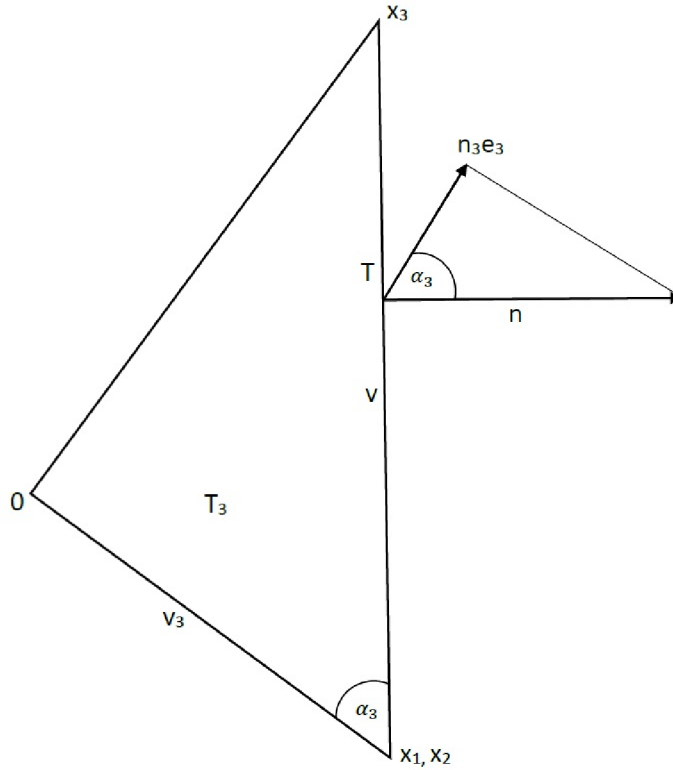
Obrázek 4.2: Kontrolní objem - čtyřstěn.

Dále využijeme vlastnosti podobnosti trojúhelníků a to konkrétně skutečnosti, že

$$|T_i| : |T| = n_i,$$

pro $i = 1, 2, 3$.

Pro lepší představivost této vlastnosti využijme obrázku 4.3, který popisuje situaci pro $i = 3$. Trojúhelníky T_3 a T mají společnou hranu $\overline{x_1x_2}$, jednotlivé výšky v_3 a v v trojúhelnících T_3 a T na tuto stranu jsou znázorněny v obrázku 4.3. Můžeme vidět, že poměr jednotlivých výšek odpovídá poměru obsahů jim odpovídajících trojúhelníků: $v_3 : v = T_3 : T$. Tato vlastnost vychází z výpočtu obsahu trojúhelníku, kde základna zůstává stejná a mění se pouze velikost výšky. Protože $v \perp \mathbf{n}$ a $v_3 \perp n_3 e_3$ (viz obrázek 4.3), je navíc trojúhelník určený výškami v_3 a v podobný trojúhelníku určenému jednotkovým vektorem normály \mathbf{n} a její složkou $n_3 e_3$.



Obrázek 4.3: Podobnost trojúhelníků.

Platí tedy vztah $W_i = w(-e_i)|T_i| = -w(e_i)|T|n_i$. Tento vztah dosadíme do rovnice (4.6), upravíme a pro posloupnost zmenšujících se podobných čtyřstěnů přejdeme k limitě. Nakonec dostáváme námi požadovanou rovnost (4.5), kde $w_i = w(e_i)$.

Závislost tepelného toku na teplotě

Pro vyjádření závislosti tepelného toku na teplotě využijeme **Fourierův zákon**, který je pro *izotropní materiál* (vlastnosti materiálu jsou ve všech směrech stejné) definován jako:

$$w_i = -k \frac{\partial u}{\partial x_i} \quad (4.7)$$

kde $i = 1, 2, 3$ a k je tepelná vodivost, která je pro izotropní materiál ve všech směrech stejná a proto je definována konstantou.

Fourierův zákon lze zapsat i ve tvaru pro *anizotropní materiál* (různé vlastnosti materiálu v různých směrech), který je uveden a dále používán v [10].

Odvození diferenciální rovnice

Analýzou tepelného toku a jeho závislosti na teplotě jsme se zabývali z důvodu potřeby vyjádření množství tepla Q_s . K převedení plošného integrálu v rovnici (4.4) na objemový využijeme Gauss-Ostrogradského vzorce¹:

$$Q_s = \int_I \left(\int_{\partial V} \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} dS \right) dt = \int_I \left(\int_{\partial V} \sum_i w_i n_i dS \right) dt = \int_I \left(\int_V \sum_i \frac{\partial w_i}{\partial x_i} dx \right) dt.$$

Vyjádření jednotlivých veličin dosadíme do rovnice (4.2), kterou následně vydělíme délkou intervalu I a mírou objemu V a přejdeme k limitě:

$$\lim_{|I| \rightarrow 0} \lim_{|V| \rightarrow 0} \frac{1}{|I|} \frac{1}{|V|} \int_I \left(\int_V \left[\frac{\partial e}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial w_i}{\partial x_i} - f \right] dx \right) dt = 0.$$

Za pomoci věty o limitě průměru² dostáváme rovnost:

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial w_i}{\partial x_i} - f = 0.$$

Do rovnosti dosadíme odvozené vztahy (4.3) a (4.7), upravíme a dostáváme výslednou diferenciální rovnici vedení tepla:

$$c \frac{\partial u}{\partial t} = k \sum_i \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} + f. \quad (4.8)$$

4.1.2. Aplikace rovnice matematické fyziky

Vedení tepla je problém difuzního charakteru, při němž dochází k přenosu tepla mezi dvěma různými body z důvodu existence teplotního spádu, jinak řečeno teplotního gradientu. V tomto důsledku vzniká tepelný tok, který je přímo úměrný právě teplotnímu spádu. Zmíněnou závislost tepelného toku popisuje **Fourierův zákon**:

$$\dot{q}_x = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (4.9)$$

kde \dot{q}_x je tepelný tok ve směru osy x a λ je tepelná vodivost použitého materiálu.

¹ $\int_{\partial V} v n_i dS = \int_V \frac{\partial v}{\partial x_i} dx$.

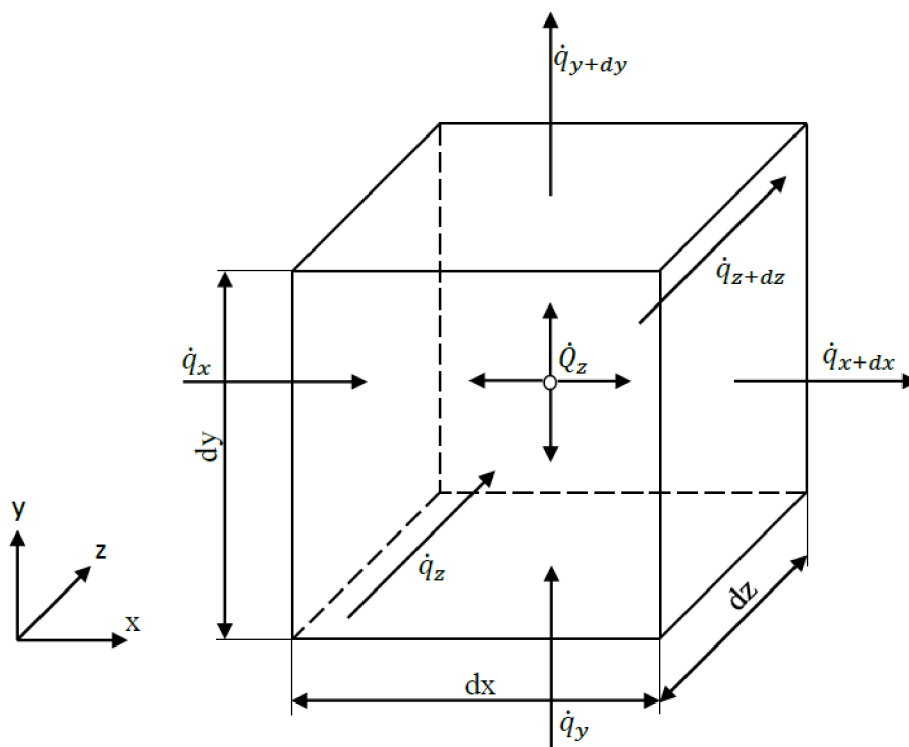
² [10] Nechť f je spojitá veličina v okolí bodu x^* . Potom platí

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{1}{|B(x^*, r)|} \int_{B(x^*, r)} f(x) dx = f(x^*).$$

Dále pro diferenciální rovnici vedení tepla musí platit rovnice energetické bilance, která vychází z 1. zákona termodynamiky. Pokud budeme 1. zákon termodynamiky formulovat pomocí toků energie (tj. v každém časovém okamžiku musí nastat rovnováha mezi toky energie), lze rovnici energetické bilance zapsat následujícím způsobem:

$$\dot{E}_{in} + \dot{E}_g - \dot{E}_{out} = \dot{E}_a = \frac{dE_{ak}}{dt}. \quad (4.10)$$

Představme si nyní kontrolní objem tvaru krychle o stranách délky dx , dy a dz (viz obr. 4.4), kde v našem případě bude *in*, popř. *out*, označovat tepelné toky vstupující do kontrolního objemu vedením ve všech třech směrech x, y, z , popř. vystupující, g bude označovat generovanou tepelnou energii vznikající v kontrolním objemu, ke které může dojít např. průchodem elektrického proudu, kterou budeme dále nazývat vnitřní zdroj energie, a $\frac{dE_{ak}}{dt}$ bude označovat rychlost akumulace vnitřní energie kontrolního objemu, ke které může dojít např., když studené těleso ponoříme do horké vody s konstantní teplotou, v tomto důsledku dojde k zahřívání tělesa (akumulace tepelné energie), až do doby dokud těleso nedosáhne teploty okolního prostředí. Vidíme tedy, že hodnota teploty je nejen funkcí polohy v tělese, ale je zároveň i funkcí času.



Obrázek 4.4: Kontrolní objem.

Přistupme nyní k sestavení výsledné diferenciální rovnice tepla. Tepelný tok vstupující do kontrolního objemu vedením ve všech směrech (souřadnice stěn dx , dy , dz) lze pomocí označení jednotlivých veličin podle obr. 4.4 vyjádřit následovně:

$$\dot{q}_x dy dz + \dot{q}_y dx dz + \dot{q}_z dx dy. \quad (4.11)$$

Zcela analogicky definujeme tepelný tok vystupující z kontrolního objemu všemi stěnami, jejichž souřadnice jsou $x + dx$, $y + dy$, $z + dz$:

$$\dot{q}_{x+dx}dydz + \dot{q}_{y+dy}dxdz + \dot{q}_{z+dz}dxdy. \quad (4.12)$$

Vnitřní zdroj energie v kontrolním objemu je dán součinem objemové energie \dot{Q}_z a objemu tělesa V :

$$\dot{Q}_z dxdydz. \quad (4.13)$$

Změna vnitřní energie kontrolního objemu v čase (rychlost akumulace vnitřní energie) je definována následovně:

$$\frac{dU}{dt} = \frac{mc\partial T}{\partial t} = \frac{\rho c\partial T}{\partial t} dxdydz. \quad (4.14)$$

Nyní může být rovnice energetické bilance (4.10) přepsána za pomoci rovnic (4.11), (4.12), (4.13) a (4.14) do následujícího tvaru:

$$(\dot{q}_x - \dot{q}_{x+dx})dydz + (\dot{q}_y - \dot{q}_{y+dy})dxdz + (\dot{q}_z - \dot{q}_{z+dz})dxdy + \dot{Q}_z dxdydz = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} dxdydz. \quad (4.15)$$

Po vydělení objemem V kontrolního objemu a využití Fourierova zákona (4.9) dostaneme diferenciální rovnici vedení tepla:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \dot{Q}_z = \rho c \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (4.16)$$

kde ρ je hustota a c je měrná tepelná kapacita látky.

Jednotlivé veličiny ρ , c , λ a \dot{Q}_z mohou být funkcemi polohy x , y , z a času t . Může však nastat i případ, kdy jsou tyto veličiny závislé navíc ještě na teplotě T , v tomto případě říkáme, že daná úloha je nelineární.

Diferenciální rovnice stejného tvaru jako je rovnice vedení tepla (4.16), mohou popisovat i jiné fyzikální procesy, pro které je tok dané veličiny funkcí gradientu a platí pro ně 1. zákon termodynamiky. Jedná se například o difuzi látky, potenciální proudění, pohyb nabitých částic v elektromagnetickém poli nebo proudění tekutin porézními materiály [8]. Je tedy možné analogicky odvodit diferenciální rovnici pro jakýkoliv výše zmíněný fyzikální proces, nebo odvodit diferenciální rovnici pro obecnou veličinu, kterou je možno následně podle potřeby specifikovat. Tvar diferenciální rovnice pro obecnou veličinu je následující:

$$\frac{\partial}{\partial x_1} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_3} \right) + \dot{Q}_z = k \frac{\partial \phi}{\partial t}, \quad (4.17)$$

kde ϕ je obecná veličina, k je kapacita na jednotku objemu, Γ je zobecněný difuzní koeficient a x_1 , x_2 , x_3 označují pak kartézské souřadnice x , y , z . Postup odvození je analogický s postupem odvození diferenciální rovnice vedení tepla. Podrobnější odvození lze nalézt v [8].

Pro další postup a numerické výpočty bude využíván upravený tvar rovnice (4.16).

4.2. Diskretizační rovnice vedení tepla

K řešení výše odvozené rovnice (4.16) využijeme numerické metody, konkrétně metodu konečných objemů. Podstatou numerické metody je nahrazení spojité informace o neznámé veličině (v našem případě teplota), která vychází z exaktního řešení, diskrétními hodnotami veličiny v daných diskrétních bodech, které dostaneme diskretizací řešené oblasti. Z tohoto důvodu se numerickým metodám říká metody diskretizační. Protože je tedy naším výsledkem pouze diskrétní pole hodnot veličiny, je nutné zvolit, jak se námi sledovaná veličina bude chovat mezi jednotlivými uzlovými body. Jako první se nabízí předpoklad jediného algebraického výrazu pro celou řešenou oblast, tento přístup se však v praxi často nevyužívá. Vhodnější je přístup pomocí po částech spojitých funkcí. Jako příklad může být uveden po částech lineární spojitý profil, což znamená, že se sledovaná veličina mezi jednotlivými uzlovými body mění lineárně. Dále se dají využít profily exponenciální, polynomiální různých řádů aj.

Jednotlivé numerické metody využívají pro odvození diskretizačních rovnic různé postupy, kterých je velké množství, přičemž zde budou uvedeny tři nejznámější. Podrobněji se budeme zabývat metodou váhových reziduí, kterou využívá metoda konečných objemů, jež je v této práci řešena.

Jako první metodu pro odvození diskretizačních rovnic uvedeme variační počet, který využívá velice známá metoda konečných prvků. Jádrem této metody je použití tzv. funkcionálů, jejichž minimalizace je ekvivalentní s určitým řešením diferenciálních rovnic.

Další metoda využívá Taylorova rozvoje. Jde o metodu, kdy jednotlivé parciální derivace aproximujeme konečnými diferenciemi hodnot námi zkoumané veličiny v jednotlivých uzlových bodech, které vychází právě z již zmíněného Taylorova rozvoje.

Poslední zmíněnou metodou je metoda váhových reziduí, které se budeme věnovat podrobněji. Celý koncept této metody je založen na jednoduché myšlence. Mějme diferenciální rovnici:

$$P(\phi) = 0. \quad (4.18)$$

Nyní aproximujme řešení ϕ rovnice (4.18) pomocí polynomu s parametry a_i a označme jej $\bar{\phi}$:

$$\bar{\phi} = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m. \quad (4.19)$$

Pokud provedeme substituci polynomu (4.19) do původní diferenciální rovnice (4.18) dostaneme reziduum definované následovně:

$$R = P(\bar{\phi}). \quad (4.20)$$

Vznik rezidua je následkem dosazení aproximovaného (přibližného) řešení do diferenciální rovnice. Cílem je, aby toto reziduum bylo malé a naše aproximované řešení bylo co nejbližší řešení přesnému. Z tohoto důvodu navrhuje, aby:

$$\int WRdx = 0, \quad (4.21)$$

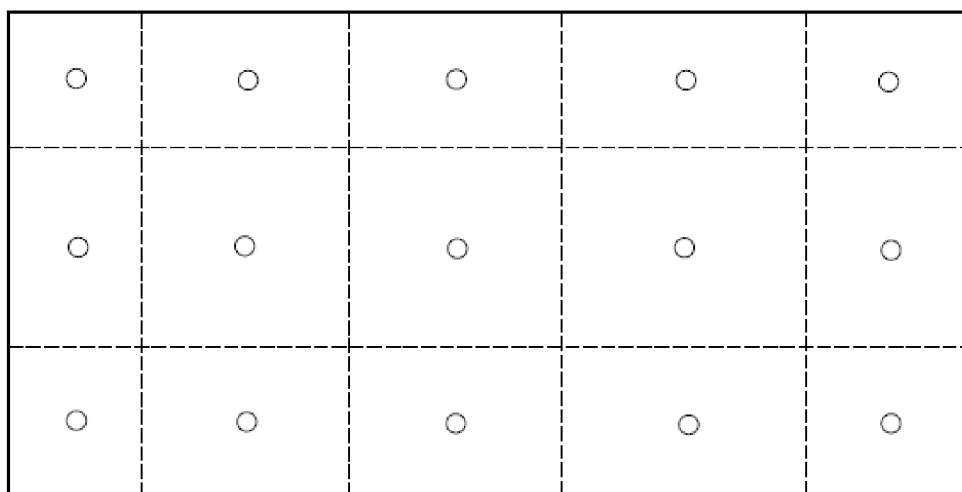
kde W je váhová funkce (odtud název metoda váhových reziduí) a integrujeme přes oblast, která nás zajímá.

Volbou různých váhových funkcí, můžeme vygenerovat potřebné množství rovnic pro určení jednotlivých parametrů. Jejich následným řešením získáme požadované řešení diferenciální rovnice. Různé verze metod vyplývají z jednotlivých voleb hodnot váhových

funkcí. Následující varianta metody váhových reziduí je nazývána **metodou konečných objemů**: Zvolme nejjednodušší váhovou funkci $W = 1$. Potřebný počet rovnic pro váhové reziduum obdržíme rozdělením výpočtové oblasti na jednotlivé kontrolní objemy a následným nastavením váhové funkce $W = 1$ v daném kontrolním objemu, který nás zajímá, a $W = 0$ v ostatních kontrolních objemech. Můžeme si všimnout, že v tomto případě musí být integrál rezidua přes každý kontrolní objem nulový.

4.2.1. Formulace metody konečných objemů

V řadě prací se odvozuje algebraické diskretizační rovnice pomocí metody Taylorových řad, která byla zmíněna výše. V předešlé části však bylo ukázáno, že metoda kontrolních objemů může být považována za speciální verzi metody váhových reziduí. Základní myšlenkou je rozdělit výpočtovou oblast na konečný počet nepřekrývajících se kontrolních objemů tak, že každý kontrolní objem obsahuje jeden uzlový bod (viz. obr. 4.5). Následně danou diferenciální rovnici integrujeme přes jednotlivé kontrolní objemy a k výpočtu jednotlivých integrálů použijeme po částech spojitý profil vyjadřující změnu veličiny ϕ mezi jednotlivými uzlovými body. Výsledkem je diskretizační rovnice obsahující hodnoty ϕ pro určitou skupinu uzlových bodů, které spolu sousedí. Výhodou této metody je, že zaručuje splnění zákona zachování hmotnosti, hybnosti a energie pro celou výpočtovou oblast včetně jejich jednotlivých podoblastí.



Obrázek 4.5: Síť.

4.3. Stacionární vedení tepla

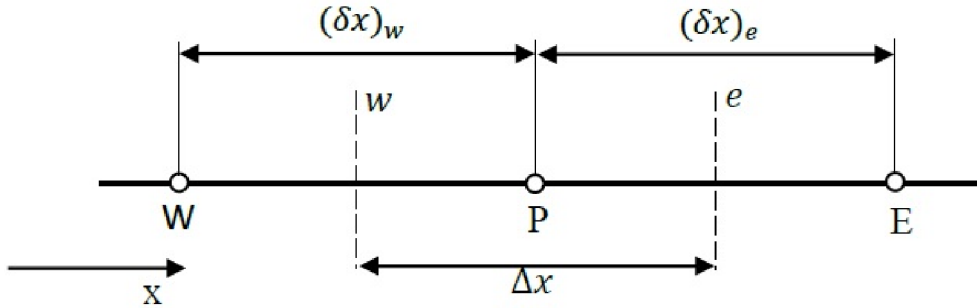
Při stacionárním (ustáleném) vedení tepla nedochází ke změně teploty v závislosti na čase t , pravá strana rovnice (4.16) bude v tomto případě tedy nulová.

4.3.1. 1D stacionární vedení tepla

Podrobný postup odvození diskretizační rovnice pro vedení tepla uvedeme pro základní případ 1D stacionárního vedení tepla. Postup pro odvození ve vícedimenzionálních případech je analogický. Uvažujme tedy 1D stacionární rovnici vedení tepla ve tvaru:

$$\frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) + \dot{Q}_z = 0. \quad (4.22)$$

Výpočtová oblast pro 1D případ a její diskretizace je znázorněna na obrázku 4.6. Můžeme zde vidět kontrolní objem pro bod P a jeho přilehlé body W a E , které nazýváme sousedními body (zkratky W a E pocházejí z anglického west a east point, západní a východní bod). Písmeny w a e jsou označeny hranice kontrolního objemu náležícímu bodu P , který má délku Δx . $(\delta x)_w$ a $(\delta x)_e$ pak označují vzdálenost mezi jednotlivými uzlovými body. Jelikož se jedná o 1D případ budeme uvažovat jednotkovou šířku ve směru y a z . Objem kontrolního objemu je tedy roven $V = \Delta x \times 1 \times 1$.



Obrázek 4.6: Výpočtová oblast pro 1D problém vedení tepla.

Rovnici (4.22) zintegrujeme přes námi popsaný kontrolní objem a dostaneme:

$$\left(\lambda \frac{dT}{dx} \right)_e - \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right)_w + \int_w^e \dot{Q}_z dx = 0. \quad (4.23)$$

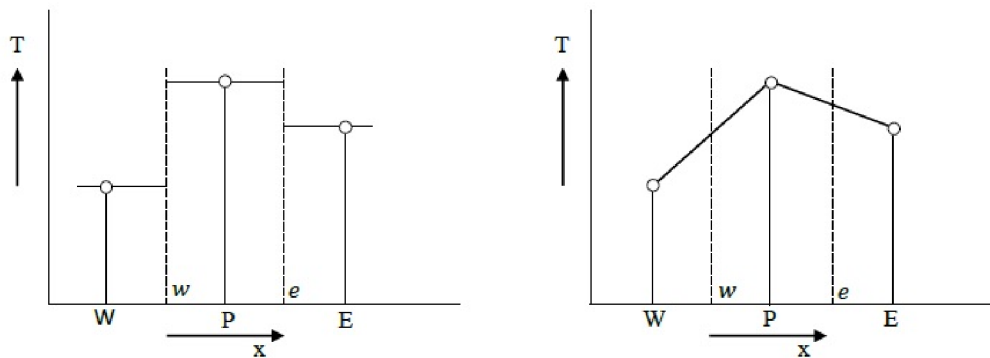
Pro jednoduchost budeme dále značit vnitřní zdroj \dot{Q}_z pouze písmenem Z . Abychom mohli vypočítat derivace $\frac{dT}{dx}$ obsažené v rovnici (4.23), musíme zavést předpoklad o chování profilu neznáme teploty T . Nejjednodušším přístupem je uvažovat hodnotu teploty T konstantní (tedy nulovou změnu teploty podél daného kontrolního objemu) v daném kontrolním objemu, tak vzniká tzv. skokový profil, který však nedává informace o chování teploty na hranicích kontrolního objemu. Z tohoto důvodu je vhodnějším předpokladem po částech spojitý lineární profil, který předpokládá lineární změnu teploty mezi jednotlivými síťovými body. Oba profily jsou znázorněny na obrázku 4.7.

S předpokladem po částech lineárního profilu můžeme jednotlivé derivace v rovnici (4.23) přepsat do následujícího tvaru:

$$\frac{\lambda_e(T_E - T_P)}{(\delta x)_e} - \frac{\lambda_w(T_P - T_W)}{(\delta x)_w} + \bar{Z}\Delta x = 0, \quad (4.24)$$

kde \bar{Z} je střední hodnota Z přes daný kontrolní objem. Rovnici (4.24) můžeme zapsat v následujícím tvaru, se kterým budeme dále pracovat:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + b, \quad (4.25)$$



Obrázek 4.7: Skokový a po částech lineární profil.

kde

$$\begin{aligned}
 a_E &= \frac{\lambda_e}{(\delta x)_e}, \\
 a_W &= \frac{\lambda_w}{(\delta x)_w}, \\
 a_P &= a_E + a_W, \\
 b &= \bar{Z} \Delta x.
 \end{aligned} \tag{4.26}$$

Rovnici (4.25) lze také přepsat do obecnějšího tvaru:

$$a_P T_P = \sum a_{nb} T_{nb} + b, \tag{4.27}$$

kde index nb značí sousední uzlové body a sumaci realizujeme přes všechny sousedy.

Odvozené diskretizační rovnice musí splňovat dva zásadní požadavky a to jak pro hrubou, tak i pro jemnou síť. Jmenovitě to je (1) fyzikálně reálné chování řešení a (2) splnění celkové bilance. Fyzikálně reálné chování můžeme chápat tak, že řešení numerické (přibližné) bude přibližně kopírovat trend řešení exaktního. Druhý požadavek lze vyložit jako splnění rovnice zachování energie, hmotnosti a hybnosti.

Základní pravidla

Abychom při odvozování diskretizačních rovnic dodrželi výše zmíněné dva požadavky, je nutné se řídit následujícími čtyřmi pravidly:

- 1. pravidlo: Konzistence na hranicích kontrolního objemu:** Uvažujme hranici společnou pro dva kontrolní objemy, pak musí být tok tekoucí přes tuto hranici popsán stejným výrazem pro oba kontrolní objemy.

Představme si dva sousední kontrolní objemy s uzlovými body zleva E a P a jejich společnou hranici označme e . Dané pravidlo v praxi znamená, že stejný tepelný tok $\frac{dT}{dx}$ přitékající z kontrolního objemu s uzlovým bodem E zleva přes hranici e musí vstoupit také do kontrolního objemu s uzlovým bodem P . Předpoklad po částech spojitěho lineárního profilu tento předpoklad splňuje. Podrobněji se tepelné vodivosti na hranici kontrolního objemu budeme věnovat v kapitole **Tepelná vodivost**

na hranici kontrolního objemu . Jako ukázkou porušení stávajícího pravidla, lze uvést příklad použití tepelné vodivosti definové pro teplotu uzlového bodu.

2. pravidlo: Kladné koeficienty: Všechny koeficienty a_i diskretizační rovnice musejí mít vždy stejné znaménko (kladné, nebo záporné). Z hlediska fyzikálního významu se volí kladné koeficienty.

Jedná se o logický požadavek, když uvážíme, že ke změně teploty v uzlovém bodě dochází pouze vlivem tepelné difuze (vedením tepla). Jedná se o to, že konkrétní uzlový bod je ovlivněn pouze hodnotami teplot jeho sousedních uzlových bodů. A pokud tedy vzroste teplota v jednom z těchto bodů, musí následně dojít ke vzrůstu teploty v sousedním bodě.

3. pravidlo: Záporná směrnice linearizovaného zdroje: Pokud budeme uvažovat následující tvar linearizovaného zdroje $\bar{Z} = Z_C + Z_P T_P$, pak koeficient Z_P musí být vždy menší nebo roven 0. Porušení tohoto požadavku by mohlo vést k nesplnění 1. pravidla. Podrobněji se tvaru linearizovaného zdroje a tvaru základní diskretizační rovnice s tímto zdrojem budeme věnovat v kapitole **Linearizace zdrojového členu**.

4. pravidlo: Suma sousedících koeficientů: $a_P = \sum a_{nb}$.

Mějme diferenciální rovnici obsahující pouze derivace závisle proměnné T , pak funkce T a $T + c$, kde c je náhodná konstanta, musí obě splňovat tuto diferenciální rovnici. Abychom zajistili platnost tohoto požadavku, je nutné splnit definici 4. pravidla. Dané pravidlo nelze aplikovat na rovnice s linearizovaným vnitřním zdrojem (platnost toho pravidla narušuje závislost zdroje na teplotě).

Tepelná vodivost na hranici kontrolního objemu

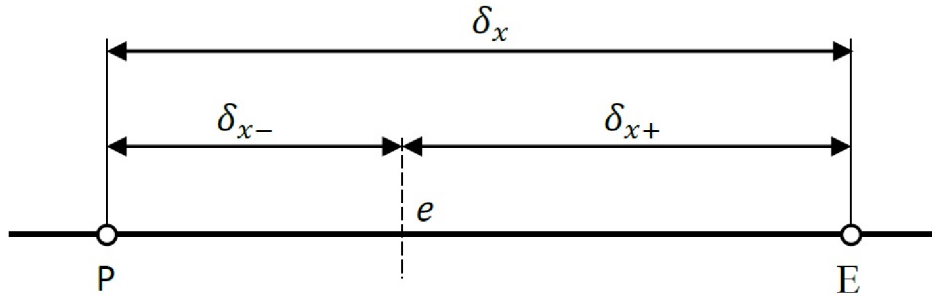
V případě konstantní vodivosti λ , je její hodnota stejná pro všechny kontrolní objemy i jejich hranice. Uvažujme nyní případ proměnné tepelné vodivosti λ . Tepelná vodivost λ_e uvedená v rovnici (4.24) označuje velikost tepelné vodivosti na hranici e daného kontrolního objemu (analogicky pro λ_w). My však známe pouze hodnoty λ_W , λ_E a λ_P v jednotlivých uzlových bodech W , E a P (pro 1D případ). Pro vyjádření tepelné vodivosti na hranicích kontrolních objemů použijeme tyto již známé tepelné vodivosti v daných uzlových bodech. Nejjednodušším způsobem vyjádření je lineární kombinace jednotlivých vodivostí:

$$\lambda_e = f_e \lambda_P + (1 - f_e) \lambda_E, \quad (4.28)$$

kde f_e je váhový faktor, definovaný jako poměr vzdáleností δx_+ a δx (viz obrázek 4.8):

$$f_e = \frac{\delta x_+}{\delta x}. \quad (4.29)$$

V případě, že zvolíme hodnotu $f_e = 0,5$, dostaneme vodivost na hranici e jako aritmetický průměr z hodnot λ_P a λ_E . Tento způsob však není zcela vhodný, zvláště v případech, kdy dochází k náhlým změnám vodivosti. Aritmetický průměr není schopen zohlednit výrazné nepoměry velikostí jednotlivých tepelných vodivostí, což vede k výrazné nepřesnosti zvláště v případě, když budeme mít dvě vrstvy a jedna z nich bude izolací, pak výsledný



Obrázek 4.8: Definované vzdálenosti pro hranici e .

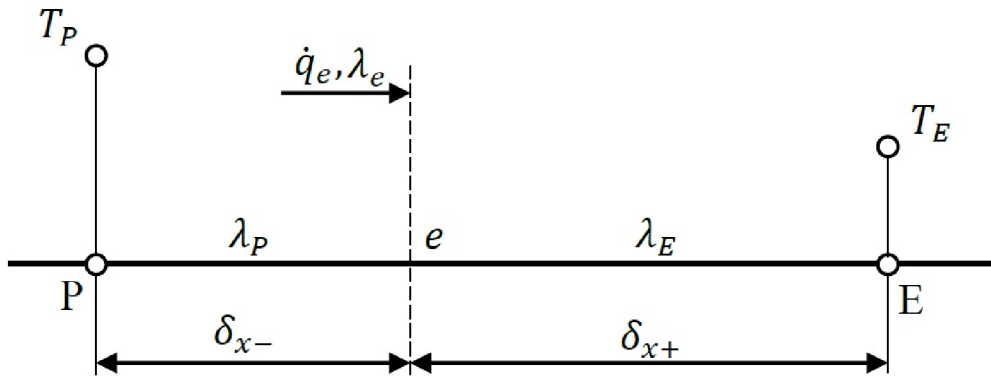
tok na tomto rozhraní musí být nulový, nicméně aritmetický průměr dá nenulovou hodnotu.

K přesnějšímu vyjádření tepelné vodivosti na hranici e využijeme tepelný tok \dot{q}_e (z rovnice (4.24)) tekoucí přes tuto hranici:

$$\dot{q}_e = \frac{\lambda_e(T_P - T_E)}{\delta x}. \quad (4.30)$$

Podle obrázku 4.9, kde kontrolní objem s uzlovým bodem P má vodivost λ_P a kontrolní objem s uzlovým bodem E má vodivost λ_E , můžeme rovnici (4.30) přepsat do tvaru s tepelnými odpory ve jmenovateli podle analogie s Ohmovým zákonem:

$$\dot{q}_e = \frac{T_P - T_E}{\frac{(\delta x)_-}{\lambda_P} + \frac{(\delta x)_+}{\lambda_E}}. \quad (4.31)$$



Obrázek 4.9: Definované vzdálenosti a vodivosti pro kontrolní body a hranici e .

Pokud rovnice (4.30) a (4.31) postavíme sobě rovny a použijeme definici váhového faktoru (4.29) dostaneme rovnici:

$$\lambda_e = \left(\frac{1 - f_e}{\lambda_P} + \frac{f_e}{\lambda_E} \right)^{-1}. \quad (4.32)$$

Volbou $f_e = 0,5$ (hranice leží přesně uprostřed mezi uzlovými body), dostáváme definici harmonického průměru:

$$\lambda_e = \frac{2\lambda_P\lambda_E}{\lambda_P + \lambda_E}. \quad (4.33)$$

Použitím rovnice (4.32) přejde koeficient a_E z rovnice (4.25) na následující tvar:

$$a_E = \left[\frac{(\delta x)_-}{\lambda_P} + \frac{(\delta x)_+}{\lambda_E} \right]^{-1}. \quad (4.34)$$

Analogicky by se postupovalo s vyjádřením koeficientu a_W , popř. dalších koeficientů. Použití takto odvozené tepelné vodivosti na hranici kontrolního objemu je velice efektivní, více v [8],[9].

Linearizace zdrojového členu

V případě, že vnitřní zdroj Z je závislý na teplotě T , vyjádříme tuto závislost jako lineární formu ve tvaru:

$$\bar{Z} = Z_C + Z_P T_P, \quad (4.35)$$

kde Z_C je konstantní část zdroje a Z_P určuje směrnici závislosti zdroje na teplotě T_P . Rovnice (4.25) pak přejde do tvaru:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + b, \quad (4.36)$$

kde

$$\begin{aligned} a_E &= \frac{\lambda_e}{(\delta x)_e}, \\ a_W &= \frac{\lambda_w}{(\delta x)_w}, \\ a_P &= a_E + a_W - Z_P \Delta x, \\ b &= Z_C \Delta x. \end{aligned} \quad (4.37)$$

V případě, že Z je nelineární funkce T , musíme ji linearizovat pomocí volby hodnot S_C a S_P , které samy mohou záviset na hodnotě T . Musíme však klást důraz na splnění 3. pravidla: $Z_P \leq 0$. Konkrétní příklady linearizací jsou uvedeny v [9].

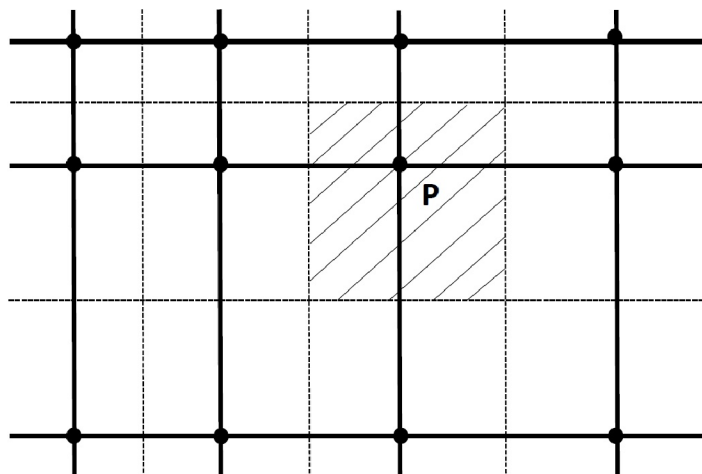
4.3.2. Okrajové podmínky

Výpočtovou oblast můžeme rozdělit na vnitřní a hraniční uzlové body. Pro vnitřní uzlové body platí rovnice (4.25), ve dvou rovnicích se však objeví i teploty hraničních uzlových bodů, díky čemuž dochází k přenosu informace o okrajových podmínkách dovnitř tělesa. Okrajové podmínky jsou trojího typu:

1. Dirichletova podmínka: V tomto případě je dána okrajová teplota.
2. Neumannova podmínka: Je dán tepelný tok hranicí.
3. Newtonova podmínka: Je zadán tepelný tok hranicí za pomoci teploty okolí a součinitele přestupu tepla.

Pokud zadáme podmínku 1. druhu (Dirichletova podmínka), nepotřebujeme žádnou další rovnici. Tato potřeba však nastává v případě podmínky 2. a 3. druhu. Je nutné zkonstruovat rovnice pro okrajové teploty na všech hranicích. Odvození těchto rovnic je závislé na geometrickém přístupu rozdělení oblasti na kontrolní objemy. Existují dva přístupy A a B.

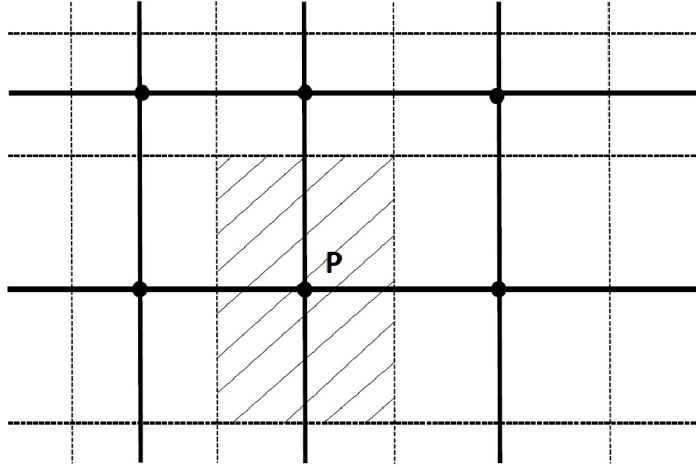
Přístup A: Tento přístup spočívá v tom, že hranice kontrolních objemů leží přímo uprostřed mezi uzlovými body. V tomto případě jsou pro nás ústřední uzlové body. Z obrázku 4.10 vidíme, že tento přístup má za následek, že uzlové body neleží ve středu kontrolních objemů.



Obrázek 4.10: Geometrický přístup A.

Přístup B: Zde jsou pro nás stěžejní kontrolní objemy. Oblast si tedy nejdříve rozdělíme na jednotlivé kontrolní objemy a do jejich středů poté umístíme uzlové body, viz obrázek 4.11. Pro vytvořený model byl použit právě tento geometrický přístup.

Detailní odvození jednotlivých diferenciálních rovnic pro oba výše zmíněné přístupy a porovnání těchto přístupů lze nalézt v [8]. Dále zmíníme zpracování okrajových podmínek pro námi zvolený geometrický přístup B. Pro naše potřeby přístup prvního řádu.



Obrázek 4.11: Geometrický přístup B.

Zpracování okrajových podmínek pro geometrický přístup B

Přístup pomocí nižšího řádu vychází z předpokladu po částech spojitého lineárního profilu, který jsme zavedli při odvozování rovnice (4.25). Vyjádření tepelného toku vstupujícího přes hranici do oblasti, viz obrázek 4.12, má tvar:

$$\dot{q}_w = \frac{\lambda(T_1 - T_2)}{\delta}, \quad (4.38)$$

kde jednotlivá označení jsou znázorněna na obrázku 4.12. Uvedeme výpočet teploty T_1 pro okrajové podmínky 2. a 3. druhu.

- Je dána Neumannova okrajová podmínka, je tedy zadán tepelný tok \dot{q}_w a hraniční teplotu T_1 , pak můžeme vyjádřit z rovnice (4.38):

$$T_1 = \frac{\dot{q}_w + \frac{\lambda_2}{\delta} T_2}{\frac{\lambda_2}{\delta}}. \quad (4.39)$$

- Je dána Newtonova okrajová podmínka, tedy tepelný tok na hranici pomocí teploty okolí T_∞ a součinitele přestupu tepla na hranici α :

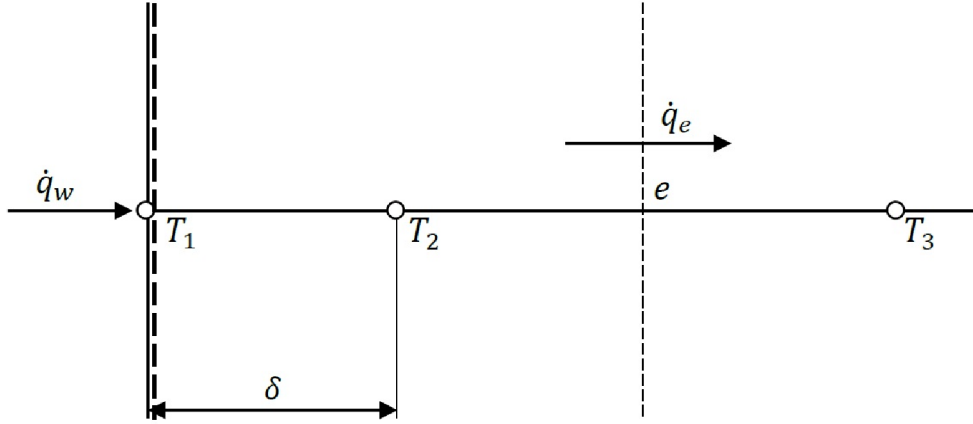
$$\dot{q}_w = \alpha(T_\infty - T_1) = \alpha T_\infty - \alpha T_1. \quad (4.40)$$

Nyní můžeme z rovnice (4.40) vyjádřit teplotu T_1 :

$$T_1 = \frac{\alpha T_\infty + \frac{\lambda_2}{\delta} T_2}{\frac{\lambda_2}{\delta} + \alpha}. \quad (4.41)$$

Přístup nižšího řádu předpokládá konstantní tepelný tok mezi dvěma sousedními uzlovými body, což je dáno volbou po částech spojitého lineárního profilu. Tento postup nazýváme tzv. jednostranné schéma, protože poskytuje nepřesnost ohledně hranice, která neleží uprostřed mezi uzlovými body. Pro naše potřeby však tento přístup je postačující.

Dále existuje přístup vyššího řádu, který některé nedostatky předešlého přístupu odstraňuje, více o tomto přístupu je možné nalézt v [8].



Obrázek 4.12: Označení uzlových bodů a toků pro geometrický přístup B.

4.3.3. 2D stacionární vedení tepla

Postup odvození diskretizační rovnice pro 2D vedení tepla je analogický s postupem uvedeným pro 1D. Kontrolní objem pro 2D přístup je znázorněn na obrázku 4.13. Pro síťový bod P máme tentokrát čtyři sousední body, W , E pro směr v ose x a S , N ve směru osy y . Vzhledem k tomu, že se jedná o 2D případ, bude tloušťka ve směru osy z jednotková a objem daného kontrolního objemu bude $V = \Delta x \times \Delta y \times 1$. Označení vzdáleností mezi jednotlivými síťovými body a hranicemi kontrolního objemu jsou patrné z obrázku 4.13. Parciální diferenciální rovnice pro 2D stacionární vedení tepla má tvar:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + Z = 0. \quad (4.42)$$

Rovnici (4.42) budeme analogicky jako v 1D případě integrovat, v tomto případě za pomoci dvojných integrálů, přes daný kontrolní objem:

$$\int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) dx dy + \int_w^e \int_s^n \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) dy dx + \int_s^n \int_w^e S dx dy = 0.$$

Po integraci dostaneme rovnici ve tvaru:

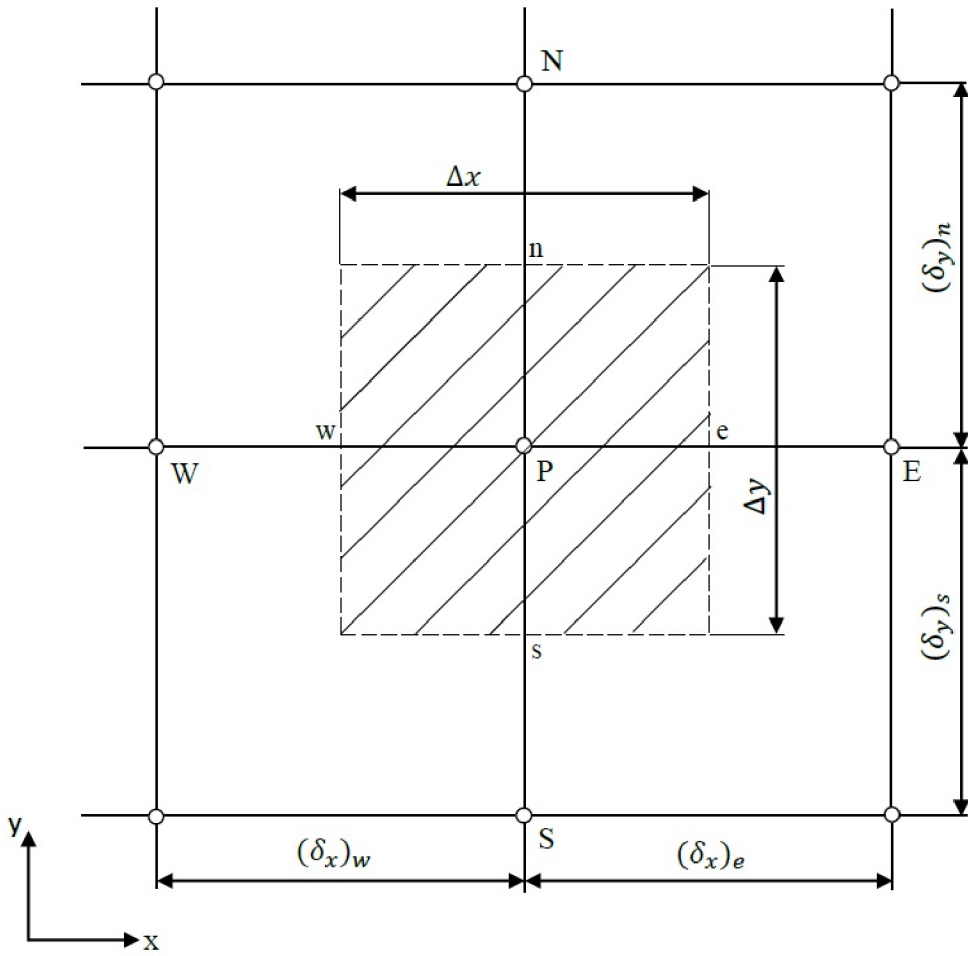
$$\left[\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right)_e - \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right)_w \right] \Delta y + \left[\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right)_n - \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right)_s \right] \Delta x + \bar{Z} \Delta x \Delta y = 0. \quad (4.43)$$

Za předpokladu po částech lineárně spojitého profilu mezi jednotlivými uzlovými body můžeme rovnici (4.43) zapsat v tomto tvaru:

$$\frac{\lambda_e \Delta y (T_E - T_P)}{(\delta x)_e} - \frac{\lambda_w \Delta y (T_P - T_W)}{(\delta x)_w} + \frac{\lambda_n \Delta x (T_N - T_P)}{(\delta y)_n} - \frac{\lambda_s \Delta x (T_P - T_S)}{(\delta y)_s} + \bar{Z} \Delta x \Delta y = 0. \quad (4.44)$$

Pokud označíme skupinu $\lambda \Delta / \delta$ jako koeficient a , můžeme zapsat výslednou diskretizační algebraickou rovnici ve tvaru:

$$a_p T_p = a_E T_E + a_W T_W + a_N T_N + a_S T_S + b, \quad (4.45)$$



Obrázek 4.13: Kontrolní objem pro 2D vedení tepla.

kde pro jednotlivé koeficienty platí:

$$\begin{aligned}
 a_E &= \frac{\lambda_e \Delta y}{(\delta x)_e}, \\
 a_W &= \frac{\lambda_w \Delta y}{(\delta x)_w}, \\
 a_N &= \frac{\lambda_n \Delta x}{(\delta y)_n}, \\
 a_S &= \frac{\lambda_s \Delta x}{(\delta y)_s}, \\
 a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S, \\
 b &= \bar{Z} \Delta x \Delta y.
 \end{aligned}
 \tag{4.46}$$

4.3.4. 3D stacionární vedení tepla

Parciální diferenciální rovnice pro 3D stacionární vedení tepla má tvar:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + Z = 0. \quad (4.47)$$

Kontrolním objemem je v tomto případě krychle, k uzlovým bodům z 2D případu nám ještě přibyly dva body T a B (z anglického top a bottom). Analogicky opět provedeme integraci přes daný kontrolní objem, v tomto případě se bude jednat o trojné integrály. Poté přepíšeme jednotlivé derivace za pomoci po částech spojitého linárního profilu a výslednou rovnici můžeme zapsat ve tvaru:

$$a_p T_p = a_E T_E + a_W T_W + a_N T_N + a_S T_S + a_T T_T + a_B T_B + b, \quad (4.48)$$

kde pro jednotlivé koeficienty platí:

$$\begin{aligned} a_E &= \frac{\lambda_e \Delta y \Delta z}{(\delta x)_e}, \\ a_W &= \frac{\lambda_w \Delta y \Delta z}{(\delta x)_w}, \\ a_N &= \frac{\lambda_n \Delta z \Delta x}{(\delta y)_n}, \\ a_S &= \frac{\lambda_s \Delta z \Delta x}{(\delta y)_s}, \\ a_T &= \frac{\lambda_t \Delta x \Delta y}{(\delta z)_t}, \\ a_B &= \frac{\lambda_b \Delta x \Delta y}{(\delta z)_b}, \\ a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B, \\ b &= \bar{Z} \Delta x \Delta y \Delta z. \end{aligned} \quad (4.49)$$

4.4. Nestacionární vedení tepla

4.4.1. 1D nestacionární vedení tepla

Pro nestacionární případ podrobněji odvodíme tvar diskretizační rovnice vedení tepla pro 1D rozměr, pro vyšší dimenze uvedeme následně již konečnou formu diskretizační rovnice. Nestacionární případ popisuje stav, kdy je teplotní pole v čase proměnné. Pokud neuvažujeme vnitřní zdroj, tak má rovnice popisující tento případ následující tvar:

$$\frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) = \rho c \frac{\partial T}{\partial t}. \quad (4.50)$$

Dále budeme pro zjednodušení uvažovat, že člen ρc je konstantní a není tedy závislý na teplotě T . Postup odvození diskretizační rovnice je analogický jako v případě odvození rovnice 1D stacionárního vedení tepla, vyjma rozdílu, že v nestacionárním případě se teplota T s časem mění. Chceme tedy znát teplotní pole v různých časových krocích, jejichž

velikost označme Δt . Rovnici (4.50) budeme tedy integrovat nejen přes daný kontrolní objem, ale také přes časový interval $(t, t + \Delta t)$. „Staré“ hodnoty teploty T (tedy v čase t) budeme označovat horním indexem 0 (T_P^0, T_E^0, T_W^0) a „nové“ (neznámé) hodnoty v čase $t + \Delta t$ horním indexem 1 (T_P^1, T_E^1, T_W^1). Přistoupíme nyní k itegraci rovnice (4.50):

$$\rho c \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial T}{\partial t} dt dx = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) dx dt. \quad (4.51)$$

Levou stranu rovnice je možné přepsat pomocí výše zmíněných „starých“ a „nových“ hodnot:

$$\rho c \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial T}{\partial t} dt dx = \rho c \Delta x (T_P^1 - T_P^0). \quad (4.52)$$

Dále přistupme k úpravě pravé strany. Integrál přes kontrolní objem lze přepsat analogicky jako v 1D případě:

$$\rho c \Delta x (T_P^1 - T_P^0) = \int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{\lambda_e (T_E - T_P)}{(\delta x)_e} - \frac{\lambda_w (T_P - T_W)}{(\delta x)_w} \right] dt. \quad (4.53)$$

Nyní je nezbytné provést předpoklad o tom, jak se jednotlivé uzlové body T_P, T_E a T_W mění v časovém intervalu $(t, t + \Delta t)$. Existuje mnoho přístupů, pro naše účely nám postačí předpoklad o lineární kombinaci starých a nových teplot ve tvaru:

$$\int_t^{t+\Delta t} T_P dt = [f T_P^1 + (1 - f) T_P^0] \Delta t, \quad (4.54)$$

kde f je váhový faktor náležící do intervalu $\langle 0, 1 \rangle$. Podle volby hodnoty váhového parametru f , pak rozlišujeme různá schemata řešení, kterým bude podrobněji věnována kapitola 4.4.2. Užitím stejného principu pro uzlové body T_E a T_W můžeme rovnici (4.53) upravit na tvar:

$$\rho c \frac{\Delta x}{\Delta t} (T_P^1 - T_P^0) = f \left[\frac{\lambda_e (T_E^1 - T_P^1)}{(\delta x)_e} - \frac{\lambda_w (T_P^1 - T_W^1)}{(\delta x)_w} \right] + (1-f) \left[\frac{\lambda_e (T_E^0 - T_P^0)}{(\delta x)_e} - \frac{\lambda_w (T_P^0 - T_W^0)}{(\delta x)_w} \right]. \quad (4.55)$$

Rovnici (4.55) zapíšeme v jednodušším tvaru za pomoci koeficientů a_E, a_E a a_P , pro jednoduchost budeme nadále vynechávat horní index 1 u „nové“ teploty. Výsledkem je rovnice tvaru:

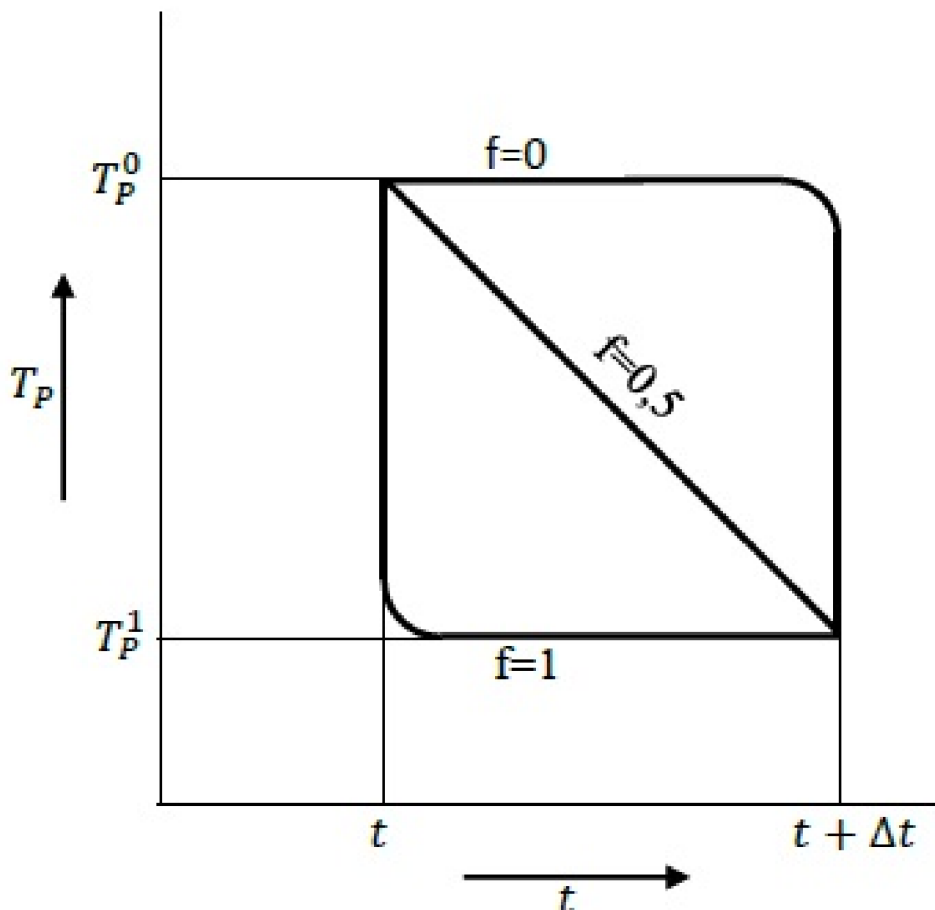
$$a_P T_P = a_E [f T_E + (1 - f) T_E^0] + a_W [f T_W + (1 - f) T_W^0] + [a_P^0 - (1 - f) a_E - (1 - f) a_W] T_P^0, \quad (4.56)$$

kde

$$\begin{aligned} a_E &= \frac{\lambda_e}{(\delta x)_e}, \\ a_W &= \frac{\lambda_w}{(\delta x)_w}, \\ a_P^0 &= \frac{\rho c \Delta x}{\Delta t}, \\ a_P &= f a_E + f a_W + a_P^0. \end{aligned} \quad (4.57)$$

4.4.2. Schemata řešení

Podle volby hodnoty váhového faktoru f rozlišujeme tři schemata řešení: Explicitní schema, Crank-Nicolsonovo schema a Implicitní schema. Jednotlivé volby váhových faktorů jsou graficky zobrazeny na obrázku 4.14.



Obrázek 4.14: Změna teploty v závislosti na čase pro tři různá schemata.

Explicitní schema

Explicitní formu rovnice (4.56) dostaneme volbou $f = 0$, rovnice (4.56) pak přejde na tvar:

$$a_P T_P = a_E T_E^0 + a_W T_W^0 + (a_P^0 - a_E - a_W) T_P^0. \quad (4.58)$$

Volbou $f = 0$ klademe velkou váhu na staré teploty a vliv nových teplot se neuvažuje. Jak je vidět v rovnici (4.58) hodnota T_P je závislá pouze na předcházejících hodnotách teploty T_P^0 , T_W^0 a T_E^0 . Z tohoto důvodu se dané schema nazývá explicitní. Na první pohled se schema zdá být výhodné hlavně pro svou jednoduchost vyjádření teplotní závislosti, bohužel má i své nevýhody. Největší z nich je podmínka omezující volbu délky časového kroku Δt , která vychází z pravidla o nutnosti pozitivních koeficientů diskretizační rovnice.

Tvar této podmínky, jinak také nazývané jako podmínka stability, může být vyjádřen jako (odvození tvaru viz. [9] nebo [8]):

$$\Delta t < \frac{\rho c (\Delta x)^2}{2\lambda}. \quad (4.59)$$

Pokud dojde k porušení této podmínky začne model dávat nerealistická řešení. Z podmínky vyplývá, že pokud budeme chtít použít pro naše výpočty jemnější síť, budeme nuceni zjemnit také časový krok, což může výrazně prodloužit výpočtovou dobu modelu.

Crank-Nicolsonovo schema

Crank-Nicolsonovo schema je v mnoha ohledech uváděno jako bezpodmínečně stabilní schema. Dostaneme ho volbou $f = 0,5$, čímž dáme stejnou váhu na staré a nové teploty. Pojem bezpodmínečné stability vede k dojmu, že časový krok může být zvolen zcela bez ohledu na velikost kontrolního objemu, bohužel tomu tak není. I v tomto případě může dojít k nestabilitě řešení, projevené např. oscilací řešení. Důvodem je, že stabilita v matematickém slova smyslu nám nezaručuje, že výsledek bude vždy fyzikálně reálný (podrobněji viz. [9]). Proto přistupujeme k poslednímu a nejpoužívanějšímu schématu a to implicitnímu.

Implicitní schema

Implicitní schema dostaneme volbou váhového parametru $f = 1$, čímž dáme největší váhu na nové hodnoty. Zprvu se tento přístup nemusí zdát býti tím nejvhodnějším, zvláště když Crank-Nicolsonova schema předpokládalo na první pohled rozumný předpoklad lineárního průběhu, ale uvědomme si, že časové chování teploty je ve své podstatě exponenciální (tj. na počátku dojde k prudké teplotní změně a následně je teplotní průběh rovný). Z tohoto důvodu se lineární průběh, který dává Crank-Nicolson, nejeví jako nejvhodnější volba. Pro hodnotu $f = 1$ tedy dostáváme rovnici (4.56) ve tvaru:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + b, \quad (4.60)$$

kde

$$\begin{aligned} a_E &= \frac{\lambda_e}{(\delta x)_e}, \\ a_W &= \frac{\lambda_w}{(\delta x)_w}, \\ a_P^0 &= \frac{\rho c \Delta x}{\Delta t}, \\ a_P &= a_E + a_W + a_P^0, \\ b &= \bar{Z} \Delta x + a_P^0 T_P^0. \end{aligned} \quad (4.61)$$

Vidíme, že pokud $\Delta t \rightarrow \infty$, rovnice (4.60) přejde na stacionární diskretizační rovnici.

4.4.3. 2D nestacionární vedení tepla

Odvození 2D diskretizační rovnice pro nestacionární vedení je analogické jako v 1D případě, z tohoto důvodu je uvedena pouze konečná verze této rovnice v implicitní formě:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + a_N T_N + a_S T_S + b, \quad (4.62)$$

kde

$$\begin{aligned}
a_E &= \frac{\lambda_e \Delta y}{(\delta x)_e}, \\
a_W &= \frac{\lambda_w \Delta y}{(\delta x)_w}, \\
a_N &= \frac{\lambda_n \Delta x}{(\delta y)_n}, \\
a_S &= \frac{\lambda_s \Delta x}{(\delta y)_s}, \\
a_P^0 &= \frac{\rho c \Delta x \Delta y}{\Delta t}, \\
b &= \bar{Z} \Delta x \Delta y + a_P^0 T_P^0, \\
a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S + a_P^0.
\end{aligned} \tag{4.63}$$

4.4.4. 3D nestacionární vedení tepla

Implicitní forma 3D diskretizační rovnice nestacionornáho vedení tepla má tvar:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + a_N T_N + a_S T_S + a_T T_T + a_B T_B + b, \tag{4.64}$$

kde

$$\begin{aligned}
a_E &= \frac{\lambda_e \Delta y \Delta z}{(\delta x)_e}, \\
a_W &= \frac{\lambda_w \Delta y \Delta z}{(\delta x)_w}, \\
a_N &= \frac{\lambda_n \Delta z \Delta x}{(\delta y)_n}, \\
a_S &= \frac{\lambda_s \Delta z \Delta x}{(\delta y)_s}, \\
a_T &= \frac{\lambda_t \Delta x \Delta y}{(\delta z)_t}, \\
a_B &= \frac{\lambda_b \Delta x \Delta y}{(\delta z)_b}, \\
a_P^0 &= \frac{\rho c \Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t}, \\
b &= \bar{Z} \Delta x \Delta y \Delta z + a_P^0 T_P^0, \\
a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B + a_P^0.
\end{aligned} \tag{4.65}$$

4.5. Řešení soustavy algebraických rovnic

Při odvozování jednotlivých diskretizačních rovnic jsme od začátku nepředpokládali žádný konkrétní algoritmus, kterým vzniklé soustavy budeme dále řešit. K řešení jednotlivých algebraických rovnic můžeme tedy použít jakoukoliv vhodnou metodu. Pro složitější úlohy, zvláště nelineární, je vhodné použít iterační metody, které se řídí základním algoritmem:

- Algoritmus začíná odhadem hodnot teplot ve všech uzlových bodech (může se jednat o odhad náhodný, popř. získaný z experimentu).
- Poté za pomoci aktuálních hodnot teploty dojde k přepočítání jednotlivých koeficientů vyskytujících se v diskretizačních rovnicích.
- Vyřešíme soustavu algebraických rovnic a získáme nové teploty v uzlových bodech.
- S novým teplotním odhadem opakujeme krok dva do té doby, než se hodnoty teplot v jednotlivých iteracích výrazně neliší (v praxi se používá vhodná norma rozdílu teplot v jednotlivých iteracích).

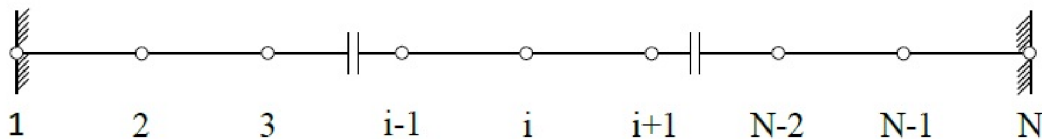
4.5.1. Řešení soustavy lineárních algebraických rovnic pro 1D

K řešení diskretizačních rovnic pro 1D případ může být použit algoritmus TDMA (z anglického TriDiagonal-Matrix Algorithm), což je zjednodušená verze Gaussova eliminačního algoritmu, která se používá pro řešení třídiagonálního systému rovnic.

Celou výpočtovou oblast rozdělme na jednotlivé kontrolní objemy, které očíslojme, viz obrázek 4.15, kde body 1 a N označují hraniční body. Diskretizační rovnici nyní můžeme napsat jako:

$$a_i T_i = b_i T_{i+1} + c_i T_{i-1} + d_i, \quad (4.66)$$

pro $i = 1, 2, 3, \dots, N$. Rovnice (4.66) popisuje závislost teploty T_i na jejich sousedních hodnotách T_{i-1} a T_{i+1} . Z rovnice plyne, že $c_1 = 0$ a $b_N = 0$, protože hodnoty teplot T_0 a T_{N+1} leží mimo řešenou oblast. Pokud zadáme teploty na hranicích (Dirichletova podmínka), rovnice (4.66) přejde do triviálního tvaru např.: zadáme-li T_1 , pak se tvar rovnice z důvodu hodnot $b_1 = 0$, $c_1 = 0$ a $a_1 = 0$ redukuje na $d_1 = T_1$. Algoritmus



Obrázek 4.15: Výpočtová oblast pro 1D úlohu.

TDMA se skládá ze dvou částí: forward elimination a backward substitution (do češtiny lze přeložit jako dopřednou eliminaci a zpětnou substituci). Úloha jednotlivých fází je popsána v následujícím algoritmu (úplné odvození rovnic uvedeno v [9]):

Za pomoci koeficientů rovnice (4.66) spočítáme nové koeficienty P_i a Q_i :

$$Q_i = \begin{cases} \frac{d_1}{a_1} & ; i = 1 \\ \frac{d_i + c_i Q_{i-1}}{a_i - c_i P_{i-1}} & ; i = 2, 3, \dots, N - 1. \end{cases} \quad (4.67)$$

$$Q_i = \begin{cases} \frac{b_1}{a_1} & ; i = 1 \\ \frac{d_i}{a_i - c_i P_{i-1}} & ; i = 2, 3, \dots, N - 1. \end{cases} \quad (4.68)$$

Nyní přistupme ke zpětné substituci. Předepíšeme:

$$T_N = Q_N.$$

A pro $i = N - 1, N - 2, \dots, 3, 2, 1$ spočteme následující rovnici (4.69), z níž obdržíme hodnoty $T_{N-1}, T_{N-2}, \dots, T_3, T_2, T_1$.

$$T_i = P_i T_{i+1} + Q_i. \quad (4.69)$$

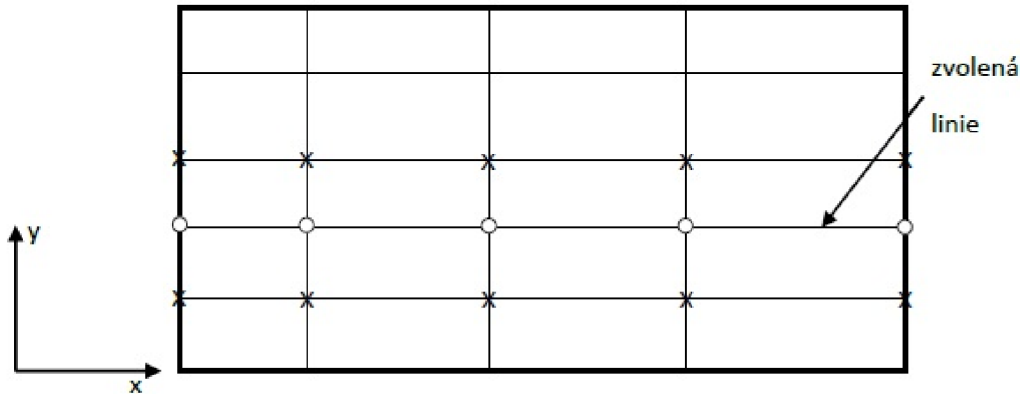
Výhodou této metody je její nízká náročnost na velikost paměti počítače (počet uzlových bodů) a také efektivní rychlost výpočtů.

4.5.2. Řešení soustavy algebraických rovnic pro 2D nebo 3D

Algebraické diskretizační rovnice typu rovnice (4.25) jsou lineární rovnice, v praxi se však můžeme setkat i s rovnicemi nelineárními (např. tepelná vodivost je funkcí teploty apod.). Použitím iteračních metod však tyto úlohy můžeme řešit jako lineární. Mezi nejjednodušší iterační metody, které lze použít k řešení soustav algebraických rovnic pro 2D, příp. 3D, patří Gauss-Seidelova iterační metoda (podrobně v [9]). Její bezesporou výhodou je jednoduchost, ovšem tato metoda má zásadní nevýhodu a to pomalou konvergenci, zvláště v oblasti velkého počtu uzlových bodů. Z tohoto důvodu k řešení našeho problému použijeme metodu nazývanou Liniová metoda (line by line method), která konverguje, oproti Gauss-Seidelově iterační metodě, výrazně rychleji.

Liniová metoda

Vysvětlíme princip této metody na 2D oblasti. Na obrázku 4.16 vidíme vyznačené tři sousedící linie ve směru osy x , z nichž si zvolíme jednu. Předpokládejme, že teploty ze sousedních linií (nad a pod zvolenou linií) známe z předchozích iterací, případně z prvotního odhadu teplotního pole. Pro výpočet hodnot teploty T na námi zvolené linii použijeme nám již známý algoritmus TDMA. Tímto algoritmem projdeme postupně všechny linie směru x . Poté změníme směr a projdeme postupně všechny linie směru osy y . Tuto metodu můžeme jednoduše rozšířit pro 3D model, stačí pouze projít ještě třetí směr linií, směr z .



Obrázek 4.16: 2D oblast pro liniovou metodu.

Pro představu uvedeme použití liniové metody na 2D rovnici (4.45), kterou pro vnitřní uzlové body na linii ve směru x můžeme zapsat ve tvaru:

$$a_p T_p = a_E T_E + a_W T_W + a_N T_N^* + a_S T_S^* + b, \quad (4.70)$$

kde $a_N T_N^* + a_S T_S^* + b$ popisující teploty na sousedních liniích z předešlých iterací označíme jako d_i . Rovnici (4.70) pak můžeme přepsat do tvaru rovnice (4.66):

$$a_i T_i = b_i T_{i+1} + c_i T_{i-1} + d_i \quad (4.71)$$

a následně aplikovat algoritmus TDMA. Analogicky můžeme přepsat rovnici (4.45) pro vnitřní uzlové body na linii ve směru y . Rychlost konvergence liniové metody je rychlejší

na rozdíl od Gauss-Seidelovy iterační metody, protože liniová metoda pomocí algoritmu TDMA v daném směru vtahuje informace o okrajových podmínkách do celého vnitřku řešené oblasti. Z tohoto důvodu byla využita pro vývoj výpočtového modelu, který je hlavním cílem této práce.

5. Výsledky

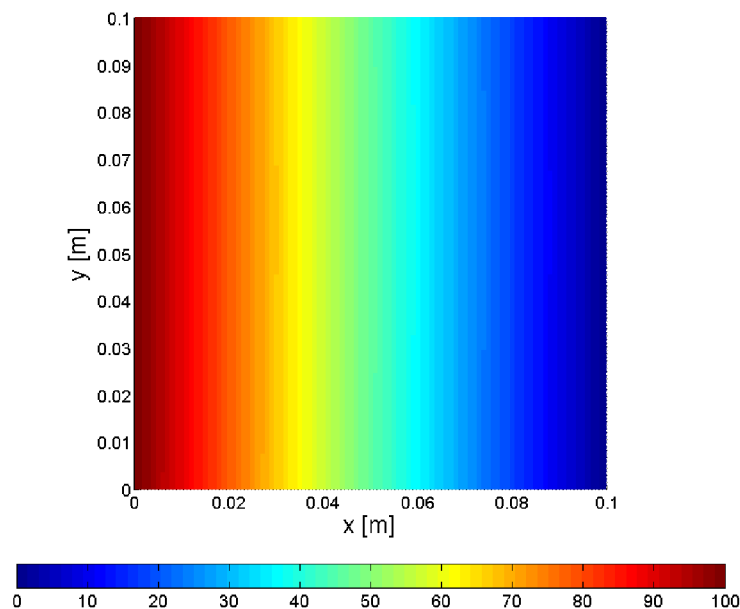
Stěžejním obsahem této kapitoly jsou výsledky vytvořeného modelu pro posouzení vlivu implementace nanočástic do PCM na časově proměnné teplotní pole (viz kapitola 5.3). Dále se tato část věnuje vykreslení výsledků pro stacionární 2D vedení tepla pro různé okrajové podmínky (viz kapitola 5.1) a také vymezení hodnot jednotlivých parametrů důležitých pro výpočet teplotního pole (viz kapitola 5.2).

5.1. Výsledky pro stacionární vedení tepla

Tato část uvádí výsledky programu pro stacionární 2D vedení tepla pro různé kombinace tří základních okrajových podmínek (Dirichlet, Neumann a Newton). Výpočty proběhly pro 2D desku o rozměrech 10×10 cm. Modelovali jsme jednoduché příklady, u kterých známe výsledné teplotní pole, abychom ověřili správnost programu a jeho závislosti na okrajových podmínkách.

5.1.1. Dirichletova okrajová podmínka

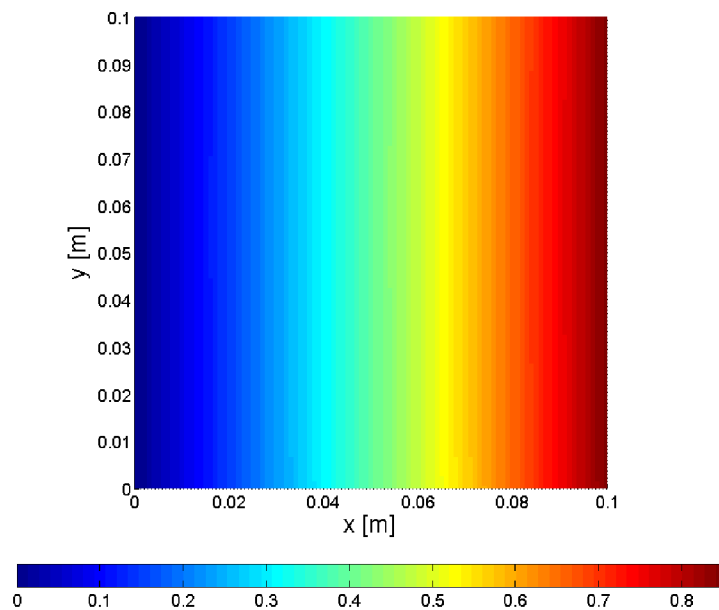
Mějme modelový příklad 2D desky o rozměrech 10×10 cm. Strany $y = 0$ m a $y = 0,1$ m zaizolujeme (adiabatická strana - Neumannova podmínka pro tok = 0) a pro strany $x = 0$ m a $x = 0,1$ m předepíšeme Dirichletovu podmínku po řadě $T = 100^\circ\text{C}$ a $T = 0^\circ\text{C}$. Startovací odhad teplot byl nastaven na jednotnou hodnotu $T = 0^\circ\text{C}$. Z praxe očekáváme, že v ustáleném stavu bude teplotní profil lineární, viz obrázek 5.1.



Obrázek 5.1: Teplotní pole pro Dirichletovu podmínku a adiabatické strany.

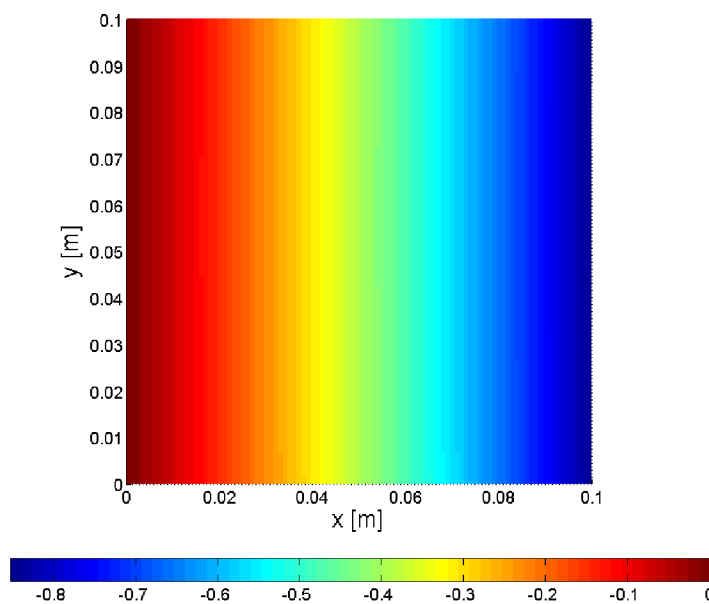
5.1.2. Neumannova okrajová podmínka

Mějme opět modelový příklad 2D desky o rozměrech 10×10 cm. Strany $y = 0$ m a $y = 0,1$ m opět zaizolujeme, pro stranu $x = 0$ m předepíšme Dirichletovu okrajovou podmínku $T = 0^\circ\text{C}$ a stranu $x = 0,1$ m budeme zahřívát pomocí tepelného toku $\dot{q} = 1000\text{W}/\text{m}^2$, což je Neumannův typ okrajové podmínky. Startovací odhad teplot byl nastaven na jednotnou hodnotu $T = 0^\circ\text{C}$. Opět očekáváme lineární teplotní profil, viz obrázek 5.2.



Obrázek 5.2: Teplotní pole pro Neumannovu podmínku $\dot{q} = 1000\text{W}/\text{m}^2$.

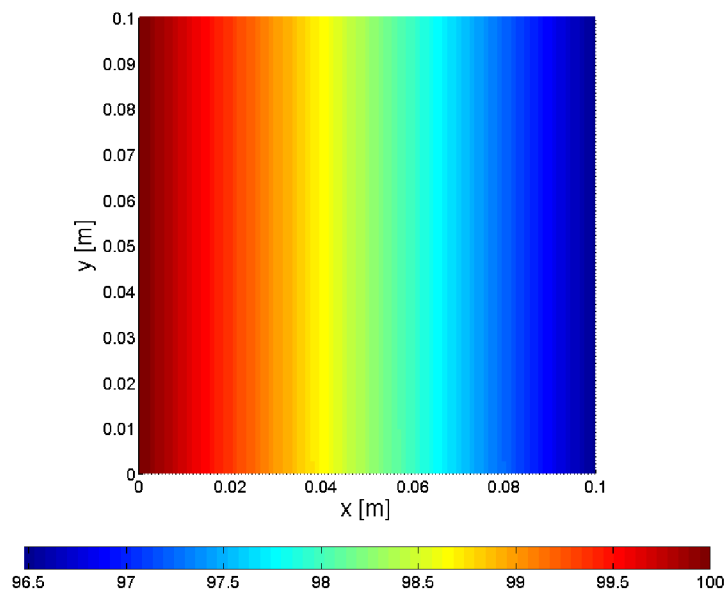
Vliv Neumannovy okrajové podmínky ověříme pomocí změny tepelného toku na hodnotu $\dot{q} = -1000\text{W}/\text{m}^2$. V daném případě by mělo docházet k chlazení, viz obrázek 5.3.



Obrázek 5.3: Teplotní pole pro Neumannovu podmínku $\dot{q} = -1000\text{W}/\text{m}^2$.

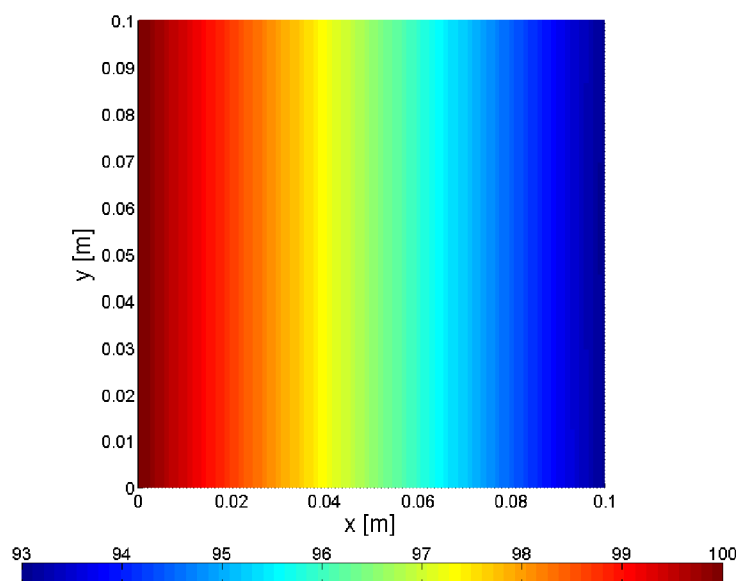
5.1.3. Newtonova okrajová podmínka

Nyní předpokládejme znova 2D desku s rozměry 10×10 cm. Strany $y = 0$ m a $y = 0,1$ m opět zaizolujeme, strana $x = 0$ m bude mít předepsanou teplotu $T = 100^\circ\text{C}$ a poslední stranu $x = 0,1$ m chladíme za pomoci okolní teploty $T_\infty = 20^\circ\text{C}$ a součinitele přestupu tepla $\alpha = 50 \frac{\text{W}}{\text{m}^2\text{K}}$. Startovací odhad teplot byl nastaven na jednotnou hodnotu $T = 100^\circ\text{C}$. Opět předpokládáme výsledek ve tvaru lineárního teplotního profilu, viz obrázek 5.4.



Obrázek 5.4: Teplotní pole pro Newtonovu podmínku $T_\infty = 20^\circ\text{C}$ a $\alpha = 50 \frac{\text{W}}{\text{m}^2\text{K}}$.

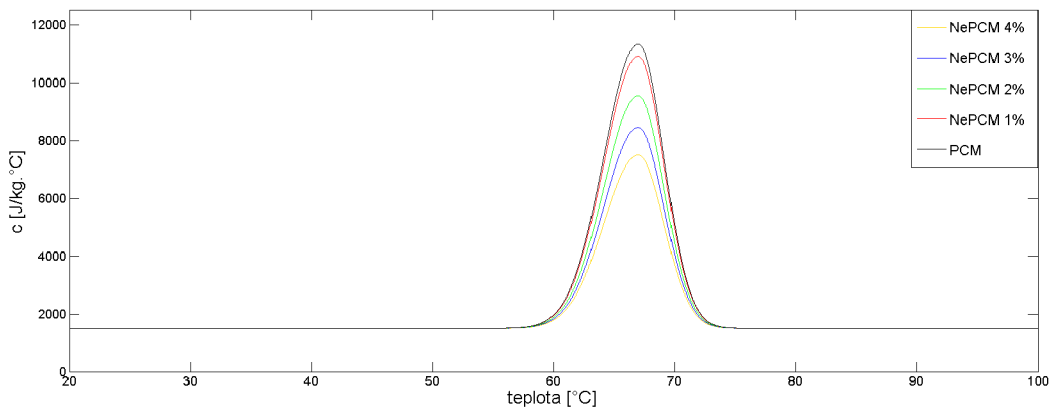
Zvýšením součinitele přestupu tepla α dochází k postupnému přibližování teploty dané hranice k teplotě okolí T_∞ , viz obrázek 5.5.



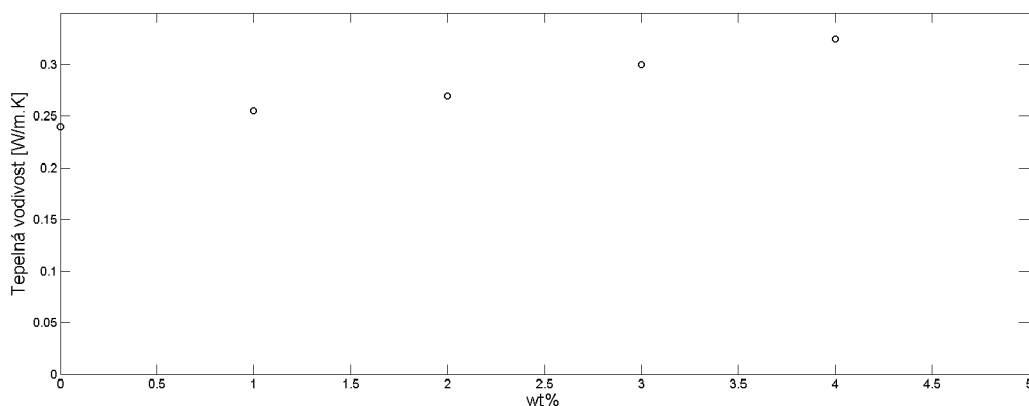
Obrázek 5.5: Teplotní pole pro Newtonovu podmínku $T_\infty = 20^\circ\text{C}$ a $\alpha = 100 \frac{\text{W}}{\text{m}^2\text{K}}$.

5.2. Parametry

Jako vstupy pro model byly použity výsledky experimentu uvedené v [4], kde byl pro pokus využit čistý parafinový vosk s teplotou tání 67°C , do kterého byly následně implementovány nanočástice karbonu (pro hmotnostní procenta $\text{wt}\% = 1, 2, 3, 4$). Výsledné hodnoty pro tepelnou kapacitu c a tepelnou vodivost λ jsou zobrazeny v následujících obrázcích 5.6 a 5.7:



Obrázek 5.6: Tepelná kapacita pro PCM a NePCM.



Obrázek 5.7: Tepelná vodivost pro PCM a NePCM (pokojevá teplota T).

Za pomoci vyjádření závislosti tepelné kapacity c na teplotě T v [1], byly odvozeny vzorce pro závislosti $c(T)$ pro parafinový vosk s různými hmotnostními procenty nanočástic karbonu:

$$c(T) = \begin{cases} 1500 + 9848e^{-((67-T)/4)^2} & \text{pro } T \leq 67^\circ\text{C} \\ 1500 + 9848e^{-((67-T)/3)^2} & \text{pro } T > 67^\circ\text{C} \text{ pro čistý parafinový vosk.} \end{cases} \quad (5.1)$$

$$c(T) = \begin{cases} 1500 + 9409e^{-((67-T)/4)^2} & \text{pro } T \leq 67^\circ\text{C} \\ 1500 + 9409e^{-((67-T)/3)^2} & \text{pro } T > 67^\circ\text{C} \text{ pro obsah karbonu } \text{wt}\% = 1. \end{cases} \quad (5.2)$$

$$c(T) = \begin{cases} 1500 + 8045e^{-((67-T)/4)^2} & \text{pro } T \leq 67^\circ\text{C} \\ 1500 + 8045e^{-((67-T)/3)^2} & \text{pro } T > 67^\circ\text{C} \text{ pro obsah karbonu } \text{wt}\% = 2. \end{cases} \quad (5.3)$$

$$c(T) = \begin{cases} 1500 + 6955e^{-((67-T)/4)^2} & \text{pro } T \leq 67^\circ C \\ 1500 + 6955e^{-((67-T)/3)^2} & \text{pro } T > 67^\circ C \text{ pro obsah karbonu } wt\% = 3. \end{cases} \quad (5.4)$$

$$c(T) = \begin{cases} 1500 + 6000e^{-((67-T)/4)^2} & \text{pro } T \leq 67^\circ C \\ 1500 + 6000e^{-((67-T)/3)^2} & \text{pro } T > 67^\circ C \text{ pro obsah karbonu } wt\% = 4. \end{cases} \quad (5.5)$$

Z důvodu nedostatku experimentálních výsledků budeme nadále uvažovat tepelnou vodivost λ pro jednotlivé materiály konstantní v průběhu celého procesu zahřívání, viz obrázek 5.7.

K výpočtu hustoty výsledné směsi bude využit vzorec 3.1, kde $\rho_c = 866\text{kg}/\text{m}^3$ a $\rho_d = 1600\text{kg}/\text{m}^3$. Abychom mohli spočítat ρ_{eff} potřebujeme ještě objemový podíl nanočástic ϕ , který lze vypočítat z hmotnostního procenta $wt\%$ následujícím způsobem:

$$\phi = \frac{\frac{wt\%}{100} \rho_c}{\frac{wt\%}{100} \rho_c + \left(1 - \frac{wt\%}{100}\right) \rho_d}. \quad (5.6)$$

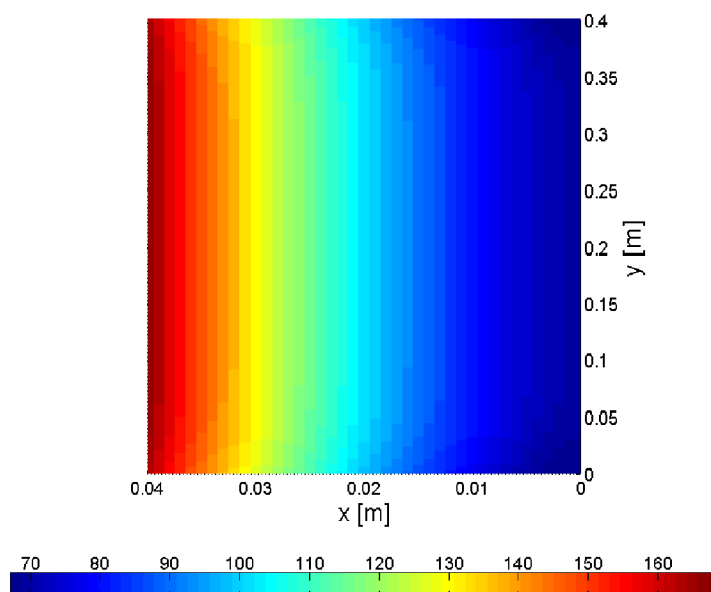
5.3. Výsledky pro PCM a NePCM

Výpočet teplotního pole pro PCM a NePCM byl uskutečněn pro 2D desku o rozměrech 4×40 cm. Strany $x = 0$ m, $y = 0$ m a $y = 0,4$ m byly zaizolovány (adiabatické strany), zbývající stranu $x = 0,04$ m jsme zahřívali za pomoci tepelného toku $\dot{q} = 1000W/m^2$, což je přibližně hodnota solárního záření. Jako prvotní odhad teplotního pole byla zvolena jednotná teplota $T = 20^\circ C$. Oblastí našeho zájmu je čas, za který dojde k úplnému roztavení PCM (parafinový vosk) a NePCM (parafinový vosk s obsahem nanočástic karbonu), čili za jak dlouho dosáhne veškerý materiál teploty $67^\circ C$. Dále bude následovat analýza vlivu obsahu nanočástic v PCM právě na zmíněnou dobu tavení.

Vzledem k vyššímu poměru stran je k prezentaci výsledků využito jiné měřítko pro jednotlivé osy, pomocí čehož je zřetelněji viditelný průběh teploty. Pro výpočet nestacionárního vedení tepla byl v modelu použit časový krok $\Delta t = 5s$ a čtvercová síť o rozměrech $1 \times 1mm$.

5.3.1. PCM

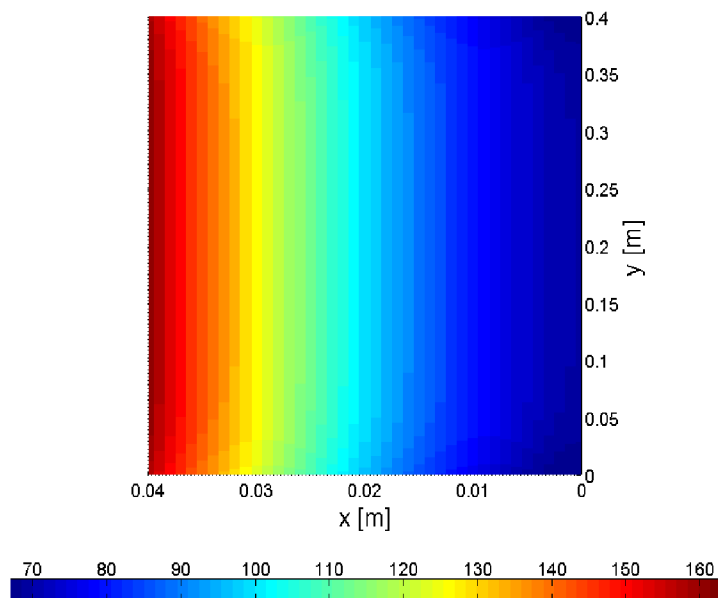
Celková doba roztavení čistého PCM, v našem případě parafinového vosku s výše zmíněnými vlastnostmi, vypočítána vytvořeným modelem je $8415s$, teplota na zahřívané straně $x = 0,04$ m dosahuje velikosti $T = 168,8^\circ C$ a teplotní pole nabývá následujících hodnot, viz obrázek 5.8.



Obrázek 5.8: Teplotní pole pro roztavené PCM.

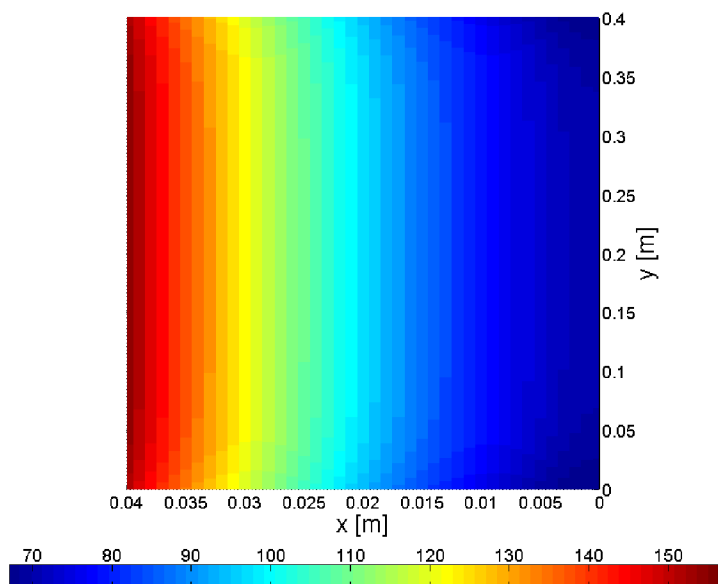
5.3.2. NePCM

Celková doba tavení pro NePCM s obsahem $wt\% = 1$ karbonových nanočástic vychází 8305s, teplota na zahříváné straně $x = 0,04$ m dosahuje velikosti $T = 162,7^{\circ}C$ a teplotní pole nabývá následujících hodnot, viz obrázek 5.9.



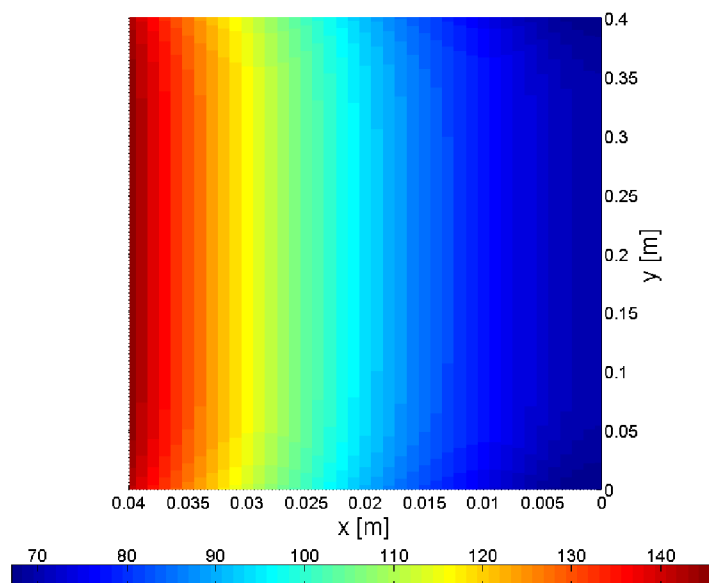
Obrázek 5.9: Teplotní pole pro roztavené NePCM ($wt\% = 1$).

Celková doba tavení pro NePCM s obsahem $wt\% = 2$ karbonových nanočástic vychází 7970, teplota na zahříváné straně $x = 0,04$ m dosahuje velikosti $T = 156,26^{\circ}C$ a teplotní pole nabývá následujících hodnot, viz obrázek 5.10.



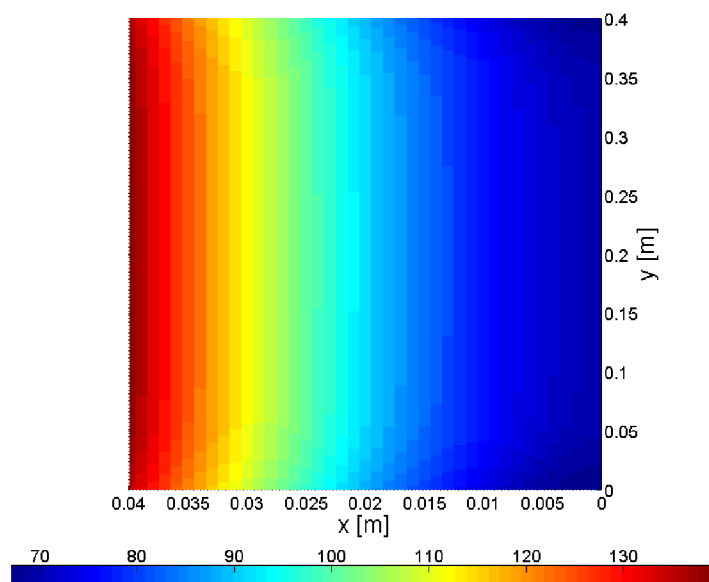
Obrázek 5.10: Teplotní pole pro roztavené NePCM ($wt\% = 2$).

Celková doba tavení pro NePCM s obsahem $wt\% = 3$ karbonových nanočástic vychází 7720s, teplota na zahříváné straně $x = 0,04$ m dosahuje velikosti $T = 146,59^\circ C$ a teplotní pole nabývá následujících hodnot, viz obrázek 5.11.



Obrázek 5.11: Teplotní pole pro roztavené NePCM ($wt\% = 3$).

Celková doba tavení pro NePCM s obsahem $wt\% = 4$ karbonových nanočástic vychází 7530s, teplota na zahříváné straně $x = 0,04$ m dosahuje velikosti $T = 139,98^\circ C$ a teplotní pole nabývá následujících hodnot, viz obrázek 5.12.



Obrázek 5.12: Teplotní pole pro roztavené NePCM ($wt\% = 4$).

5.3.3. Srovnání výsledků

V následujícím obrázku 5.13 je uvedena tabulka srovnání jednotlivých časů pro PCM a pro NePCM.

PCM	PCM s nanočásticemi karbonu (ušetření času v %)	Hmotnostní procenta
8415 s	8305s (1,307%)	wt1%
	7970 s (5,288%)	wt2%
	7720 s (8,259%)	wt3%
	7530 s (10,517%)	wt4%

Obrázek 5.13: Jednotlivé časy potřebné pro roztavení PCM a NePCM.

Z tabulky je zřejmé, že postupným zvyšováním hmotnostního procenta nanočástic karbonu dochází ke zkracování času potřebného pro roztavení celého materiálu, což je způsobeno zvýšením tepelné vodivosti pro NePCM, viz obrázek 5.7. Vyšší tepelná vodivost NePCM má také za následek postupné snížení teploty na hranici zahřívání tepelným tokem, viz obrázky 5.8, 5.9, 5.10, 5.11, 5.12.

6. Závěr

Cílem práce bylo vytvoření modelu pro řešení 2D teplotního pole při vedení tepla v PCM a v NePCM spolu s následným posouzením vlivu nanočástic na časově proměnné teplotní pole právě v PCM materiálu. Jako PCM byl použit parafinový vosk, do něhož byly dále implementovány nanočástice karbonu v hmotnostních poměrech $wt\% = 1, 2, 3, 4$. Záměrem studie bylo sledovat vliv nanočástic v různých hmotnostních poměrech na rychlost roztavení celého použitého materiálu.

Výsledky jsou interpretovány v kapitole 5.3. Z následné analýzy vyplývá, že přítomnost nanočástic zkracuje dobu potřebnou k roztavení celého materiálu a snižuje teplotu na zahřívání hranici materiálu. Tyto účinky nanočástic jsou velice užitečné v oblasti akumulace tepla, kde je rychlost fázové změny jedním z nejdůležitějších parametrů.

Na jednotlivých obrázcích v kapitole 5.3 si lze všimnout, že ačkoliv bychom očekávali průběh blízký lineárnímu vzhledem k daným okrajovým podmínkám, tak tomu zcela tak není. Jedná se o malou nepřesnost na hranicích, která způsobuje, že profil směrem k hranicím jemně klesá a v obrázcích působí, že chování teploty má náznak parabolického průběhu. Tato nepřesnost je s největší pravděpodobností způsobena numerickou chybou při výpočtu a určitými nepřesnostmi v okrajových podmínkách. Tomuto problému bude nadále věnována pozornost a dojde k odlazení v rámci dalšího rozvoje modelu.

V rámci spolupráce bude model nadále rozvíjen. Přínosné by bylo srovnání výsledků modelu s experimentálními pokusy a další zpřesňování jednotlivých parametrů, které by co nejlépe vystihovaly reálné chování daného materiálu při zahřívání.

Literatura

- [1] KUZNIK, Frédéric, Joseph VIRGONE a Jean-Jacques ROUX. Energetic efficiency of room wall containing PCM wallboard: A full-scale experimental investigation. *ENERGY and BUILDINGS*. 2008, (40), 148-156. DOI: 10.1016/j.enbuild.2007.01.022.
- [2] THIRUGNANAM, C. a P. MARIMUTHU. Experimental Analysis of Latent Heat Thermal Energy Storage using Paraffin Wax as Phase Change Material. *International Journal of Engineering and Innovative Technology (IJEIT)*. 2013, 3(2), 372-376. ISSN 2277-3754.
- [3] KHODADADI, J.M., Liwu FAN a Hasan BABAEI. Thermal conductivity enhancement of nanostructure-based colloidal suspensions utilized as phase change materials for thermal energy storage: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2013, (24), 418-444.
- [4] ELGAFY, Ahmed a Khalid LAFDI. Effect of carbon nanofiber additives on thermal behavior of phase change materials. *CARBON*. 2005, (43), 3067-3074. DOI: 10.1016/j.carbon.2005.06.042.
- [5] BUGAJE, MI. Enhancing the thermal response of latent heat storage systems. *Int J Energy Res* 1997, (21), 759-766.
- [6] HADDAD, Zoubida, Hakan F. OZTOP, Eiyad ABU-NADA a Amina MATAOUI. A review on natural convective heat transfer of nanofluids. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2012, (16), 5363-5378.
- [7] MAXWELL, JC. *A treatise on electricity and magnetism*. Oxford, UK: Clarendon Press, 1873.
- [8] JÍCHA, Miroslav. *Počítačové modelování úloh vedení tepla a proudění*. První. Brno: Nakladatelství Vysokého učení technického v Brně, 1991. ISBN 80-214-0364-0.
- [9] PATANKAR, Suhas V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. První. New York: McGRAW-HILL BOOK COMPANY, 1980. ISBN 0-07-048740-5.
- [10] FRANČŮ, Jan. *Parciální diferenciální rovnice. čtvrté doplněné*. Brno: Akademické nakladatelství CERM, s.r.o Brno, 2011. ISBN 978-80-214-4399-0.

Seznam zkratek

c	tepelná kapacita [$J/kg \cdot ^\circ C$]
c_c	tepelná kapacita spojité části [$J/kg \cdot ^\circ C$]
c_d	tepelná kapacita diskrétní části [$J/kg \cdot ^\circ C$]
c_{eff}	efektivní tepelná kapacita [$J/kg \cdot ^\circ C$]
\dot{q}_i	tepelný tok ve směru osy $i=x,y,z$ [W/m^2]
m	hmotnost [kg]
U	vnitřní energie [J]
V	objem [m^3]
T	teplota [$^\circ C$]
T_∞	teplota okolí [$^\circ C$]
t	čas [s]
$wt\%$	hmotnostní procenta [%]
α	součinitel přestupu tepla [$W/m^2 K$]
ϕ	objemový podíl [–] nebo [%]
λ	tepelná vodivost [$W/m \cdot K$]
λ_c	tepelná vodivost spojité části [$W/m \cdot K$]
λ_d	tepelná vodivost diskrétní části [$W/m \cdot K$]
λ_{eff}	efektivní tepelná vodivost [$W/m \cdot K$]
ρ	hustota [kg/m^3]
ρ_c	hustota spojité části [kg/m^3]
ρ_d	hustota diskrétní části [kg/m^3]
ρ_{eff}	efektivní hustota [kg/m^3]

A. Zdrojové kódy v MATLABu

Zdrojové texty scriptů a funkcí jsou uloženy ve dvou složkách na přiloženém CD.

A.1. Stacionární úlohy

Složka s programy pro výpočet stacionárních úloh, uvedených v kapitole 5.1.

Dirichlet

- *Dirichlet.m*: skript s nastavením sítě, odhadu počáteční teploty materiálu a nastavením okrajových teplot pro Dirichletovu podmínku
- *Dirichlet_f.m*: funkce s algoritmem metody konečných objemů a s okrajovými podmínkami pro izolované strany (Neumann)

Neumann

- *Neumann.m*: skript s nastavením sítě, odhadu počáteční teploty materiálu a nastavením okrajové teploty pro Dirichletovu podmínku
- *Neumann_f.m*: funkce s algoritmem metody konečných objemů a Neumannovými okrajovými podmínkami (izolované strany a tepelný tok)

Newton

- *Newton.m*: skript s nastavením sítě, odhadu počáteční teploty materiálu a nastavením okrajové teploty pro Dirichletovu podmínku
- *Newton_f.m*: funkce s algoritmem metody konečných objemů, Newtonovou a Neumannovými okrajovými podmínkami

A.2. Nestacionární úlohy

Složka s programy pro výpočet teplotního pole PCM a NePCM. Dále je zde obsažena složka s vlastnostmi materiálu.

Vlastnosti materiálu

- *Properties.m*: skript vykreslující vlastnosti zvoleného materiálu (parafinový vosk, parafinový vosk s obsahem nanočástic karbonu)

PCM

- *PCM.m*: skript s nastavením sítě a odhadu počáteční teploty PCM
- *PCM_f.m*: funkce s algoritmem metody konečných objemů a Neumannovými okrajovými podmínkami

NePCM

- *NePCM.m*: skript s nastavením sítě a odhadu počáteční teploty NePCM
- *NePCM.m*: funkce s algoritmem metody konečných objemů, Neumannovými okrajovými podmínkami a volbou hmotnostních procent karbonu v NePCM