



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING

ÚSTAV MATEMATIKY

INSTITUTE OF MATHEMATICS

**OPTIMALIZACE STEFANOVA PROBLÉMU VEDENÍ TEPLA
S FÁZOVOU PŘEMĚNOU**

OPTIMIZATION OF A STEFAN PROBLEM WITH HEAT CONDUCTION AND PHASE CHANGE

DIPLOMOVÁ PRÁCE

MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Bc. Michal Březina

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

Ing. Lubomír Klimeš, Ph.D.

BRNO 2017

Zadání diplomové práce

Ústav:	Ústav matematiky
Student:	Bc. Michal Březina
Studijní program:	Aplikované vědy v inženýrství
Studijní obor:	Matematické inženýrství
Vedoucí práce:	Ing. Lubomír Klimeš, Ph.D.
Akademický rok:	2016/17

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č.1111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma diplomové práce:

Optimalizace Stefanova problému vedení tepla s fázovou přeměnou

Stručná charakteristika problematiky úkolu:

Problematika přenosu tepla s fázovými přeměnami je významnou úlohou v řadě technických aplikací. V posledních letech se dostává do popředí zájmu zejména akumulace a uchování tepla prostřednictvím latentního tepla fázové přeměny. Zařízení optimálně využívající materiál měnící skupenství lze využít např. pro efektivní využití solární energie.

Cíle diplomové práce:

Cílem práce je nastudovat Stefanův problém vedení tepla s fázovou přeměnou a jeho analytické řešení pro různé typy počátečních úloh. Analytické řešení bude následně použito jako základní kámen optimalizačního modelu, který bude sestaven a řešen ve vhodném programovacím prostředí. Hlavním cílem bude provedení optimalizačních výpočtů pro stanovení podmínek přenosu tepla a dalších parametrů, které zaručí extremalizaci veličin charakterizujících tepelné chování.

Seznam doporučené literatury:

RAO, Singiresu S. Engineering optimization: Theory and practice. Čtvrté vydání. Hoboken: Wiley, 2009. ISBN 978-0-470-18352-6.

HAHN, David W. a M. Necati ÖZİŞİK. Heat conduction. Třetí vydání. Hoboken: Wiley, 2012. ISBN 978-0470902936.

STEFANESCU, Doru. Science and engineering of casting solidification. Druhé vydání. New York: Springer, 2009. ISBN 978-144-1945-099.

INCROPERA, Frank P., David P. DEWITT, Theodore L. BERGMAN a Adrienne S. LAVINE. Principles of heat and mass transfer. Sedmé vydání. Singapore: John Wiley, 2013. ISBN 978-0-470-64615-1.

Termín odevzdání diplomové práce je stanoven časovým plánem akademického roku 2016/17

V Brně, dne

L. S.

prof. RNDr. Josef Šlapal, CSc.
ředitel ústavu

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

Abstrakt

Práce je zaměřena na sestavení matematického modelu Stefanova problému vedení tepla s fázovou přeměnou a následné optimalizační výpočty extremalizující veličiny charakterizující tepelné chování. Práce rovněž obsahuje odvození základní rovnice vedení tepla, způsoby akumulace tepelné energie a úvod do problematiky materiálů s fázovou přeměnou používané při akumulaci.

Summary

The thesis deals with the mathematical model for Stefan phase change problems. The model is then used in optimization procedures aimed at extremization of quantities describing the thermal behavior. The thesis also includes the derivation of the differential heat equation, methods of energy accumulation and an introduction to phase change materials used for accumulation.

Klíčová slova

Stefanův problém, vedení tepla, latentní teplo, změna fáze, optimalizace.

Keywords

Stefan problem, heat transfer, latent heat, phase change, optimization.

BŘEZINA, M. *Optimalizace Stefanova problému vedení tepla s fázovou přeměnou*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2017. 81 s. Vedoucí Ing. Lubomír Klimeš, Ph.D.

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci Optimalizace Stefanova problému vedení tepla s fázovou přeměnou vypracoval samostatně pod vedením Ing. Lubomíra Klimeše, Ph.D. s použitím materiálů uvedených v seznamu zdrojů.

25.května 2017

.....

Bc. Michal Březina

Rád bych poděkoval svému vedoucímu mé diplomové práce Ing. Lubomíru Klimešovi, Ph.D. za mnohé rady, ochotu, trpělivost, připomínky a čas při psaní této práce.

Dále bych rád poděkoval svým rodičům a přítelkyni za veškerou podporu, která mi byla po celou dobu studia poskytována.

Bc. Michal Březina

Obsah

1	Úvod	13
2	Základy přenosu tepla	14
2.1	Přenos tepla vedením	14
2.2	Součinitel tepelné vodivosti	16
2.3	Diferenciální rovnice vedení tepla	17
2.3.1	Energetická bilance kontrolního objemu	17
2.3.2	Odvození diferenciální rovnice vedení tepla	18
3	Akumulace energie	20
3.1	Druhy akumulace energie	20
3.1.1	Přečerpávací vodní elektrárny (PVE)	20
3.1.2	Podzemní uskladnění tepelné energie (UTES)	21
3.1.3	Akumulace do stlačeného vzduchu (CAES)	21
3.1.4	Akumulace v roztavených solích	21
3.2	Akumulace tepelné energie	22
3.2.1	Akumulace pomocí citelného tepla	22
3.2.2	Akumulace pomocí latentního tepla	23
3.3	Materiály s fázovou přeměnou PCM	24
3.3.1	Požadavky na PCM materiály	24
3.3.2	Druhy PCM materiálů	25
4	Úlohy se změnou fáze	27
4.1	Matematická formulace úloh s fázovou přeměnou	28
4.1.1	Podmínka rozhraní pro proces tuhnutí	28
4.1.2	Podmínka rozhraní pro proces tání	29
5	Exaktní řešení úloh se změnou fáze	31
5.1	Jednofázová úloha: Tuhnutí podchlazené tekutiny	31
5.2	Jednofázová úloha : Tání pevné látky o teplotě změny fáze	35
5.3	Dvofázová úloha : Tuhnutí	37
6	Matematické a optimalizační modely a jejich výsledky	40
6.1	Jednofázový problém: Tuhnutí podchlazené tekutiny	40
6.1.1	Tvorba základního modelu pro Matlab	40
6.1.2	Optimalizace veličin a jejich omezení	42
6.1.3	Optimalizační modely pro Gams a interpretace výsledků	44
6.2	Jednofázový problém: Tání pevné látky o teplotě změny fáze	50
6.2.1	Tvorba základního modelu pro Matlab	50
6.2.2	Optimalizační modely pro Gams a interpretace výsledků	51
6.3	Dvofázový problém: Tuhnutí	60
6.3.1	Tvorba základního modelu pro Matlab	60
6.3.2	Optimalizace veličin a jejich omezení	61
6.3.3	Optimalizační modely pro Gams a interpretace výsledků	61
6.4	Závěrečné zhodnocení úloh	70

OBSAH

7 Závěr	71
Seznam použitých symbolů a zkratek	74
Seznam obrázků	74
Přílohy	77
A Tabulky pro výpočet parametru a grafy	78
A.1 Jednofázový problém: Tuhnutí podchlazené tekutiny	78
A.1.1 Tabulka	78
A.1.2 Graf	79
A.2 Jednofázový problém: Tání pevné látky o teplotě změny fáze	80
A.2.1 Tabulka	80
A.2.2 Graf	81

1 Úvod

V dnešní době se lidé stále více zajímají o obnovitelné zdroje energie a vhodnou akumulaci energie pro pozdější využití, neobnovitelných zdrojů pomalu, ale jistě ubývá a klimatická situace na Zemi si díky vysokým emisím CO_2 prochází nepříznivými změnami. Tato diplomová práce se zabývá problematikou v oblasti zabývající se akumulací tepelné energie s využitím materiálů procházející fázovou přeměnou v průběhu akumulace. Pro představu, proč je nutné, aby soustava, která získává energii měla možnost tuto energii akumulovat, uvažujme nyní získávání energie v podobě slunečního záření. Sluneční záření je nejvydatnějším zdrojem obnovitelné energie, který lze využít různými způsoby. Sluneční energie nelze čerpat celých 24 hodin a pokud máme dobré podmínky, jsme rádi za průměrně 8 hodin slunečního záření denně. Takto získanou energii nechceme ve většině případů využít ihned a proto je nutné, aby soustava byla schopna tuto energii akumulovat pro pozdější využití. K tomuto účelu se využívají tzv. zásobníky energie.

Tepelnou energii můžeme akumulovat ve formě citelného tepla, kde se využívá vlastního ohřevu pracovní látky a její měrné tepelné kapacity. Pro tento druh akumulace se jeví nejideálnější voda. Voda je levná, dostupná a má vysokou tepelnou kapacitu. Ovšem co se týče nároků na velikosti zásobníků a pracovní rozsah teplot, to tak dobře nevypadá. Proto se v dnešní době začíná dostávat do popředí zájmu akumulace pomocí latentního tepla. Tento způsob akumulace využívá tepelné kapacity látky a fázové přeměny látky. Díky tomu jsme schopni akumulovat větší množství tepelné energie při zachování stejných rozměrů zásobníku (popř. akumulovat stejnou tepelnou energii při snížení požadavků na rozměry zásobníků). Poznamenejme, že pod pojmem změny fáze budu v této práci uvažovat pouze změny fáze z pevné na kapalnou a z kapalnou na pevnou. Pro tento druh akumulace je v zásobnících potřeba materiálu s fázovou přeměnou. Tyto materiály se obecně označují pod zkratkou PCM (Phase-change material).

V této diplomové práci se řeší problematika vedení tepla s fázovou přeměnou pomocí Stefanova problému, který slouží k popisu rozložení teploty v médiu a určení polohy rozhraní mezi pevnou a kapalnou fází. Tento popis je potřeba pro stanovení požadovaných vlastností a tepelného chování materiálu při různých požadavcích na akumulaci.

V práci uvádím základní znalosti týkající se přenosu tepla, způsoby akumulace tepelné energie a využití materiálů s fázovou přeměnou. V dalších kapitolách se již věnuji zadané problematice, kde nejdříve ukážu, jak se tyto úlohy obecně řeší a v poslední kapitole se zabývám tvorbou matematických (optimalizačních) modelů pro řešení požadovaných úloh. Mým hlavním cílem je sestavení a řešení optimalizačního modelu pro stanovení podmínek přenosu tepla a dalších parametrů tak, abych zajistil extremalizaci veličin charakterizujících tepelné chování. Výstupem této práce jsou rovněž i programy vytvořené v programovacím prostředí Matlab a Gams.

2 Základy přenosu tepla

V moderní technologii existuje málo odvětví, v nichž by nehrál významnou roli přenos tepla[1]. Veškerá hmota uvažovaná na makroskopické úrovni má přesně danou hodnotu energie. Takový stav energie můžeme vyčíslit za podmínek termodynamické energetické funkce, která rozděluje energii na atomické úrovni mezi například, elektrickou, vibrační a rotační. Energetická funkce může být charakterizována měřitelnou skalární hodnotou (teplotou). Energie vyměněná složkami částic (např. atomy, molekuly nebo volnými elektrony) z oblasti s větší lokální teplotou (tj. větší termodynamickou energetickou funkcí) do oblasti s nižší lokální teplotou se nazývá teplo.

Přenos tepla může být realizován ve formě vedení, proudění nebo záření, v praxi se nejčastěji jedná o kombinaci všech těchto typů. Studium vedení tepla poskytuje obohacující kombinace vědy a matematiky [2]. V této kapitole si uvedeme základní veličiny a vztahy pro přenos tepla, které budu dále využívat při vytváření matematického modelu.

2.1 Přenos tepla vedením

Vedení je specifický způsob přenosu tepla v pevných látkách nebo klidné kapalině z oblasti s větší teplotou do oblastí s nižší teplotou díky přítomnosti teplotního gradientu. Jakmile je teplotní rozložení $T(\vec{r}, t)$ známo v rámci média, jakožto funkce prostoru (definovaná polohovým vektorem \vec{r}) a času (definována skalárem t), je teplotní tok předepsán zákony jimiž se řídí přenos tepla.

Zákony přírody nám poskytují přijatelné popisy přírodních jevů na základě pozorovaného chování. Tyto zákony jsou obecně založeny na velkém množství empirických důkazů, přijatých v rámci vědecké komunity, ačkoli některé z nich nemohou být obvykle prokázány ani vyvráceny. Hlavní příčiny nám nejsou známy, ale podléhají jednoduchým a stálým zákonům, které mohou být objeveny pozorováním [3]. Tyto zákony jsou považovány za základní, jelikož jejich použití je nezávislé na médiu. Dobře známé příklady zahrnují Newtonovy zákony pohybu a zákony termodynamiky. Problémy, které mohou být vyřešeny pouze při použití obecných zákonů přírody jsou označovány jakožto deterministické a zahrnují například, jednoduchý pohyb projektilu.

Jiné problémy mohou vyžadovat kromě obecných zákonů i doplňkové vztahy[4]. Tyto problémy jsou označovány jako nedeterministické a jejich řešení vyžaduje zákony aplikovatelné na specifické médium. Tyto dodatečné zákony se nazývají konstitutivní vztahy. Dobře známé příklady zahrnují například: zákon ideálního plynu, vztah mezi smykovým napětím a rychlostním gradientem pro Newtonovskou kapalinu, vztah mezi napětím a tlakem lineárně elastického materiálu (Hookův zákon) a jiné.

Konstitutivní vztah jenž udává vztah mezi tepelným tokem a teplotním polem je pojmenován po Josephu Fourierovi. Pro homogenní, izotropní, pevné látky (tj. materiál ve kterém je součinitel tepelné vodivosti nezávislý na směru), má Fourierův zákon tvar [2]

$$\vec{q}(\hat{r}, t) = -k\nabla T(\hat{r}, t), \quad (2.1)$$

kde teplotní gradient $T(\hat{r}, t)$ je vektor kolmý k izotermickému povrchu, vektor hustoty tepelného toku $\vec{q}(\hat{r}, t)$ reprezentuje tepelný tok za jednotku času na jednotku izotermického povrchu ve směru klesajícího teplotního gradientu a k je součinitel tepelné vodivosti

materiálu.

Vztah mezi hustotou tepelného toku a tepelným tokem popisuje rovnice [5]

$$\dot{q} = \frac{\dot{Q}}{S}, \quad (2.2)$$

kde S je plocha, kterou prochází tepelný tok. Součinitel tepelné vodivosti je kladná, skalární veličina pro homogenní a izotropní materiál. Znaménko mínus uvedené v rovnici (2.1) je kvůli tomu, aby se vytvořila pozitivní hodnota tepelného toku v kladném souřadnicovém směru (tzn. opak teplotního gradientu). V této práci budu uvažovat hustotu tepelného toku v SI jednotkách [Wm^{-2}], tepelný tok [W], teplotní gradient v [Km^{-1}] a součinitel tepelné vodivosti k v [$\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$]. V kartézském souřadném systému je rovnice (2.1) tvaru:

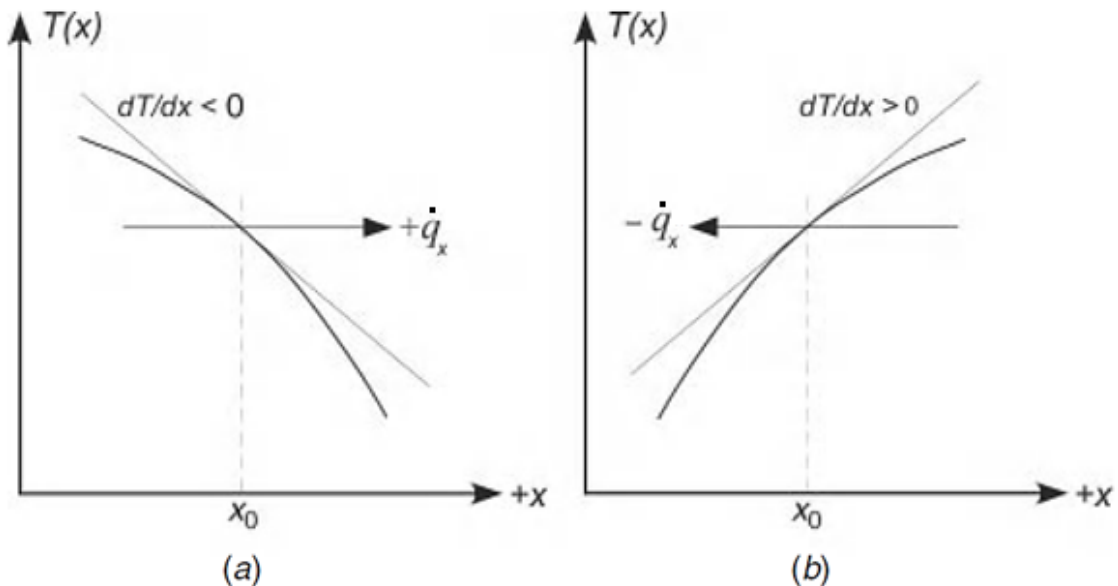
$$\dot{q}(x, y, z, t) = -\vec{i}k \frac{\partial T}{\partial x} - \vec{j}k \frac{\partial T}{\partial y} - \vec{k}k \frac{\partial T}{\partial z}, \quad (2.3)$$

kde \vec{i}, \vec{j} a \vec{k} jsou jednotkové směrové vektory podél směru os x, y , a z .

Hustota tepelného toku pro daný teplotní gradient je přímo úměrný součiniteli tepelné vodivosti materiálu. Uvažujme jednodimenzionální přenos tepla v pravoúhlém souřadném systému. Potom rovnice (2.1) bude

$$\dot{q}_x = k \frac{\partial T}{\partial x}. \quad (2.4)$$

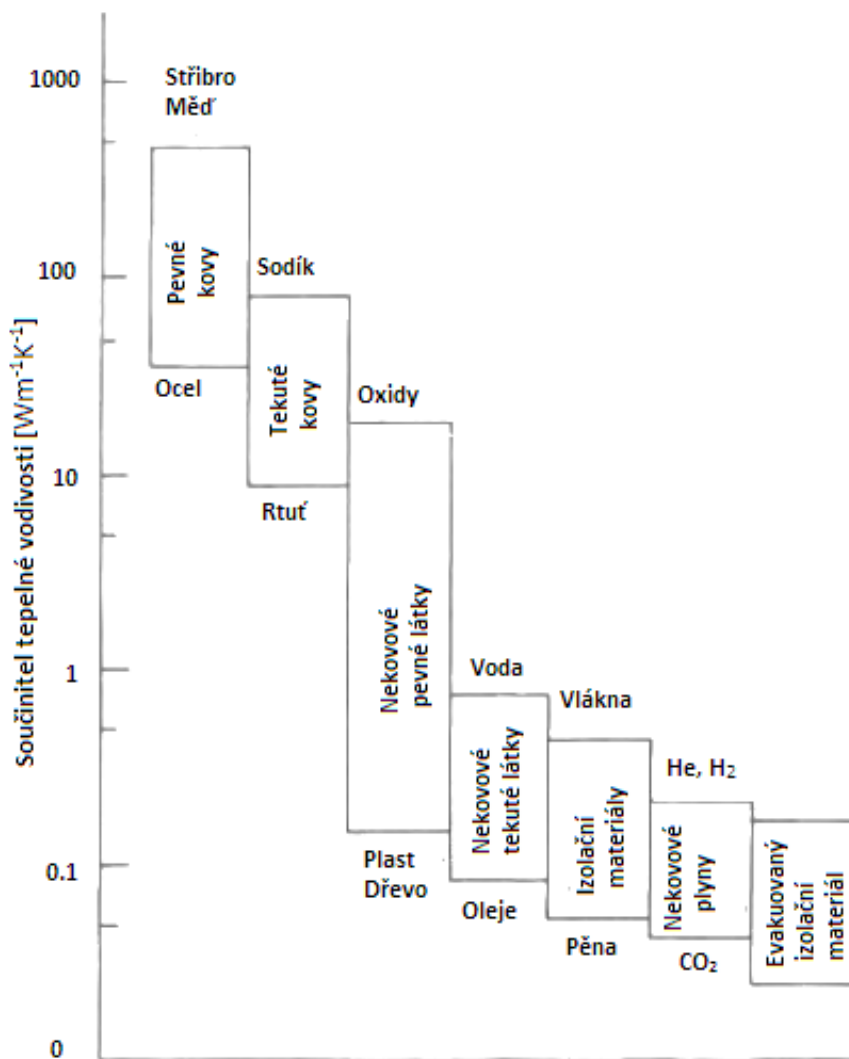
Obrázek 2.1 ilustruje znaménkovou konvekci Fourierova zákona v 1-D. Oba grafy zobrazují tepelný tok rovinou v bodě $x = x_0$ v závislosti na lokálním teplotním gradientu. Na obrázku 2.1(a) je gradient dT/dx negativní a proto výsledný tok je matematicky pozitivní. Naopak obrázek 2.1(b) zobrazuje pozitivní gradient dT/dx a výsledný tok je záporný.



Obrázek 2.1: Fourierův zákon pro (a) pozitivní tepelný tok a (b) negativní tepelný tok [2]

2.2 Součinitel tepelné vodivosti

Součinitel tepelné vodivosti je důležitým parametrem v analýze vedení tepla. Čím větší součinitel tepelné vodivosti těleso má, tím menší klade odpor proti přenosu tepla z jedné části tělesa na druhou [5]. Existuje široká škála hodnot součinitele tepelné vodivosti pro různé inženýrské materiály. Největší hodnoty součinitele tepelné vodivosti mají čisté kovy, přičemž nejmenší hodnoty vykazují plyny a výpary. Amorfni izolované materiály a anorganické kapaliny mají hodnoty někde mezi. Obrázek 2.2 zobrazuje typické rozmezí hodnot teplotní vodivosti u různých materiálových tříd [2].



Obrázek 2.2: Hodnoty součinitele tepelné vodivosti u různých materiálových tříd [2]

Součinitel tepelné vodivosti se mění s teplotou a taktéž se může změnit v rámci směru u anizotropní látky. U většiny čistých kovů se součinitel tepelné vodivosti snižuje při vzrůstající teplotě, zatímco u plynů se zvyšuje [6].

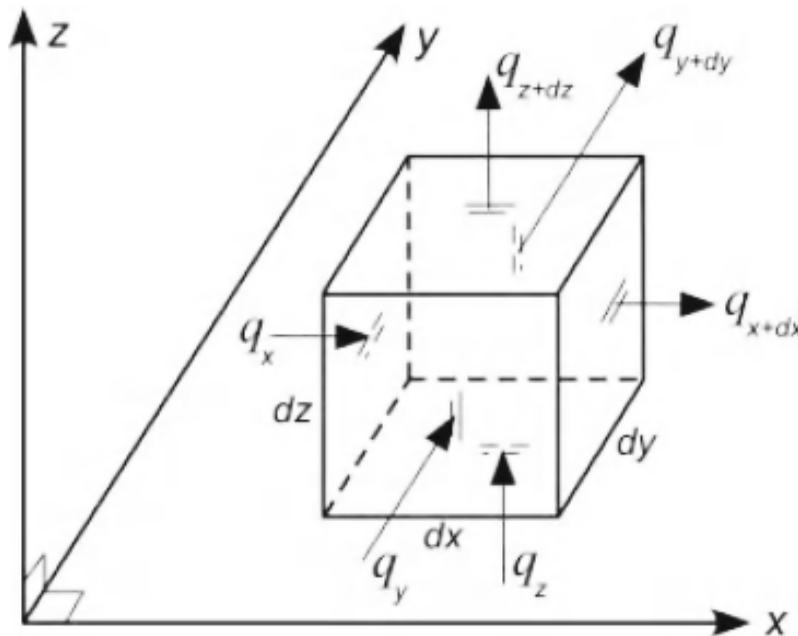
2.3 Diferenciální rovnice vedení tepla

Nyní odvodím diferenciální rovnici vedení tepla pro stacionární, homogenní, izotropní pevnou látku s generací tepla v rámci tělesa. Vnitřní generování tepla může být způsobeno díky nukleárním nebo chemickým reakcím, elektrickému proudu, absorbování laserových světél nebo dalšími zdroji, které mohou být obecně funkcí času a polohy. Rovnice vedení tepla může být odvozena buď pomocí diferenciálního nebo integrálního přístupu, já uvedu pouze ten diferenciální. Při odvozování rovnice vedení tepla jsem čerpal z [2] a přednášek termomechaniky[5]

Uvažujme elementární objem v kartézském souřadném systému viz obrázek 2.3. Odpovídající objem a hmotnost kontrolního objemu jsou

$$dV = dx dy dz \quad \text{a} \quad dm = \rho dx dy dz,$$

kde ρ je hustota [kg m^{-3}] kontrolního objemu. Diferenciální přístup předpokládá spojitost systému, tedy aby se vlastnosti neměnily na mikroskopické úrovni.



Obrázek 2.3: Kontrolní objem [2]

2.3.1 Energetická bilance kontrolního objemu

Pomocí energetické bilance jsme schopni zjistit, jak rychle se těleso ohřívá nebo chladí, než je dosaženo rovnovážného stavu s okolím[7]. Využijí zákonu zachování energie na základě prvního termodynamického zákona. Protože první zákon termodynamiky musí být splněn v každém časovém okamžiku, je možné ho formulovat pomocí toků energie [2].

$$\left(u + \frac{1}{2}v^2 + gh\right) d\dot{m}_{in} - \left(u + \frac{1}{2}v^2 + gh\right) d\dot{m}_{out} + d\dot{Q} + d\dot{E}_{gen} - d\dot{W} = \frac{dE_{cv}}{dt}, \quad (2.5)$$

kde $d\dot{m}_{in}$ a $d\dot{m}_{out}$ představují hmotnostní průtok vstupující a vystupující z kontrolního objemu. Odvozují rovnici vedení tepla pro klidné médium, proto uvažují, že hodnoty

2.3. DIFERENCIÁLNÍ ROVNICE VEDENÍ TEPLA

hmotnostního průtoku jsou nulové. Předpokládám dále, že hodnota vykonané práce je taktéž nulová ($d\dot{W} = 0$). Hodnota změny energie v rámci kontrolního objemu je tvaru

$$\frac{dE_{cv}}{dt} = \frac{d}{dt} \left[\left(u + \frac{1}{2}v^2 + gh \right)_{cv} dm \right], \quad (2.6)$$

kde u je měrná vnitřní energie [J kg^{-1}]. Přenášená energie se skládá z energie kinetické, potenciální a tepelné formy. Při přenosu tepla je kinetická a potenciální energie obvykle zanedbatelná a proto je dále nebude uvažovat. Využitím rovnic (2.5) a (2.6) dostávám zákon zachování energie [2]

$$d\dot{Q} + d\dot{E}_{gen} = \frac{d(u dm)}{dt}, \quad (2.7)$$

kde $d\dot{E}_{gen}$ [W] je hodnota energie generované v rámci kontrolního objemu a $d\dot{Q}$ představuje změnu tepelné energie v kontrolním objemu.

2.3.2 Odvození diferenciální rovnice vedení tepla

Diferenciální rovnice vedení tepla by mohla být samozřejmě odvozena i za pomoci toků energie, ale již dříve jsem byl seznámen s odvozením rovnice v předmětu termomechaniky a proto bych rád použil přístup, kdy budu uvažovat energii, která zůstane v kontrolním objemu za čas dt [5].

Teplo (energie), které zůstane v elementu v důsledku vedení

$$dQ = (dQ_x - dQ_{x+dx}) + (dQ_y - dQ_{y+dy}) + (dQ_z - dQ_{z+dz}) \quad (2.8)$$

a necht' $dQ_x + dQ_y + dQ_z$ je teplo do elementu přivedené a $dQ_{x+dx} + dQ_{y+dy} + dQ_{z+dz}$ je teplo z elementu odvedené, přičemž platí [5]

$$dQ_x = \left(-k \frac{\partial T}{\partial x} \right) dy dz dt \quad a \quad dQ_{x+dx} = dQ_x + \frac{\partial}{\partial x} (dQ_x) dx. \quad (2.9)$$

Teplo, které zůstane v elementu v důsledku vedení ve směrech osy x , y a z

$$dQ_x - dQ_{x+dx} = -\frac{\partial}{\partial x} (dQ_x) dx = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) dx dy dz dt, \quad (2.10)$$

$$dQ_y - dQ_{y+dy} = -\frac{\partial}{\partial y} (dQ_y) dy = \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) dx dy dz dt, \quad (2.11)$$

$$dQ_z - dQ_{z+dz} = -\frac{\partial}{\partial z} (dQ_z) dz = \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) dx dy dz dt. \quad (2.12)$$

Dosazením rovnic (2.10), (2.11) a (2.12) do rovnice (2.8) získáme celkové teplo, které zůstane v elementu dV v důsledku vedení

$$dQ = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right] dx dy dz dt. \quad (2.13)$$

A teplo, které zůstane v elementu v důsledku vnitřních zdrojů \dot{Q}^* [W m^{-3}]:

$$dQ_{gen} = \dot{Q}^* dx dy dz dt. \quad (2.14)$$

Uvažuji nestlačitelné těleso popř. kapalinu a tedy nechť je měrná tepelná kapacita $c = c_v = c_p$ [$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$]. Zvýšení vnitřní energie elementu dV za čas t je

$$dU = m c dT = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} dx dy dz dt, \quad (2.15)$$

kde $dU = u dm$. Potom z 1. zákona termodynamiky dostávám

$$dQ_{celk} = dU + dA = dU + 0 \Rightarrow dQ = dU \Rightarrow dQ + dQ_{gen} = dU, \quad (2.16)$$

přičemž $dQ_{celk} = dQ + dQ_{gen}$.

Po dosazení rovnic (2.13), (2.14) a (2.15) do rovnice (2.16) a vykrácení členů $dx dy dz dt$ dostávám obecnou diferenciální rovnici vedení tepla

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \dot{Q}^* = c \rho \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (2.17)$$

kde členy $k = f(x, y, z, t)$, $\rho = f(x, y, z, t)$, $c = f(x, y, z, t)$ jsou funkcí času a polohy. Můžu použít i kratšího přehlednějšího zápisu pomocí gradientu ∇

$$\nabla \cdot (k \nabla T) + g = \rho c \frac{\partial T}{\partial t}. \quad (2.18)$$

Pokud budu uvažovat, že součinitel tepelné vodivosti je konstantní, přejde rovnice (2.17) na tvar

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{\dot{Q}^*}{k} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (2.19)$$

který platí pro homogenní tuhé i kapalně látky s vnitřními zdroji, kde α je teplotní vodivost:

$$\alpha = \frac{k}{\rho c} \quad [m^2 s^{-1}]. \quad (2.20)$$

Pro těleso s konstantním součinitelem tepelné vodivosti, bez vnitřních zdrojů a za ustálených podmínek (tj. $\frac{\partial T}{\partial t} = 0$) dostávám Fourierovu diferenciální rovnici vedení tepla ve tvaru

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0 \quad \text{nebo} \quad \nabla^2 T = 0. \quad (2.21)$$

Při mých výpočtech budu zkoumat změnu teplotního rozložení v závislosti na poloze a čase, bez vnitřních zdrojů a tedy budu pracovat s rovnicí vedení tepla

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.22)$$

a dále pak v 1D případě

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t}. \quad (2.23)$$

3 Akumulace energie

V letech 2006 a 2007 se pohled člověka na klimatické změny a spotřebu energie dramaticky změnil. Lidstvo hraje dominantní roli při změně klimatu na Zemi, v důsledku vyprodukování značného množství emisí CO_2 při spotřebě energie a proto je nezbytné v blízkých letech razantně snížit množství emisí CO_2 vypuštěných do ovzduší. Ve stejnou dobu se také zásobování energie v podobě fosilních zdrojů jako např. uhlí, ropa stalo méně spolehlivým. Na jaře roku 2008 se cena ropy poprvé v historii vyšplhala až na 100 dolarů za barel. V dnešních letech již lidé přijali myšlenku, že je třeba omezit spotřebu fosilních paliv a tím snížit emise CO_2 [8]. Proto se do popředí zájmů veřejnosti v rámci dosažení cílů dostávají obnovitelné zdroje energie a lepší využití energie. V obou případech hrají důležitou roli zásobníky tepelné energie, jak pro uchování tepla, tak i chladu. Dnes je součástí téměř každé domácnosti lednička, topení, teplá voda a jiné spotřebiče využívající energii. Využití zásobníků tepelné energie pokrývá širokou oblast energetických systémů od centralizovaných soustav až po autonomní oblasti a objekty [9].

Výhodou zásobníků energie je to, že není zapotřebí okamžitého využití získané energie, ale je možné ji akumulovat pro pozdější využití a tedy nabídka může odpovídat poptávce i v době, kdy není možné získat více energie (např. tepelná energie získaná slunečním zářením). Tento proces tak umožňuje překonat časové nebo geografické rozdíly mezi výrobou a spotřebou, a to jak ve velkém, tak v malém měřítku [8].

Sluneční energie:

Sluneční energie patří mezi hlavní zdroje obnovitelné energie. Na Slunci probíhají již několik miliard let termonukleární reakce. Těmito reakcemi se přeměňuje sluneční vodík (který obnovován není) na helium za uvolnění velkého množství energie. Ze Slunce je energie předávána na Zemi ve formě záření. Energetický příkon ze Slunce je ve vzdálenosti, v níž se nachází Země, přibližně $1300 \text{ [W m}^{-2}\text{]}$. Pokud se tato energie přeměňuje nějakým technickým zařízením (sluneční kolektor, fotovoltaický článek) přímo, mluvíme obvykle o sluneční energii [10].

3.1 Druhy akumulace energie

Akumulace energie je využívána napříč energetickým sektorem – v elektrizační soustavě, v soustavách centrálního zásobování teplem a chladem, v rozptýlených a autonomních aplikacích [11]. Akumulace energie je rozlišována na dva druhy v závislosti na druhu výstupní energie (elektriny nebo tepla). Rád bych uvedl ve zkratce, ale výstižně různé možnosti akumulace energie, jak tepelné, tak elektrické.

3.1.1 Přečerpávací vodní elektrárny (PVE)

Využívají uložení elektrické energie v době malé spotřeby ve formě potenciální energie vody, pro využití v době špičkové spotřeby. Voda je čerpána ze spodní nádrže do horní nádrže, přičemž dochází ke spotřebě elektrické energie. Následně je v době špičky voda vpuštěna do přírodních potrubí a poháněním turbíny, která je hřídelí spojena s generátorem, se generuje elektrický výkon. Výhody PVE jsou ty, že dokáží rychle reagovat na výkyvy ve spotřebě energie, jsou jednoduché na obsluhu a na rozdíl od ostatních způsobů

akumulace elektrické energie mají delší životnost, ta se udává až do 100 let [8]. Nevýhodou PVE je náročnost stavby a možnost stavby jen ve vhodných terénních podmínkách.

3.1.2 Podzemní uskladnění tepelné energie (UTES)

Čerpadlem poháněný systém ukládá ohřátou nebo vychlazenou vodu do podzemního zásobníku pro pozdější užití. Zásobníky mohou být uměle vytvořené nebo přírodní. Jedná se o tzv. sezónní zásobníky, které umožňují uchovat přebytečné teplo získané v létě až do zimy, kdy je ho naopak nedostatek a může se zpětně využít. V zahraničí existuje kolem deseti úspěšných velkých instalací podzemních zásobníků tepla, které zahrnují např. vytápění celého sídliště v německém Creilsheimu.

3.1.3 Akumulace do stlačeného vzduchu (CAES)

CAES je zajímavou možností akumulace za pomoci pouze vzduchu. Využívá elektrické energie v době nízké spotřeby tak, že přebytečnou energii použije na pohánění kompresoru ke stlačení vzduchu a následnému uložení v podzemních kavernách nebo zásobnících. Stlačený vzduch je ve špičce využíván při spalování v plynové turbíně při výrobě elektřiny.

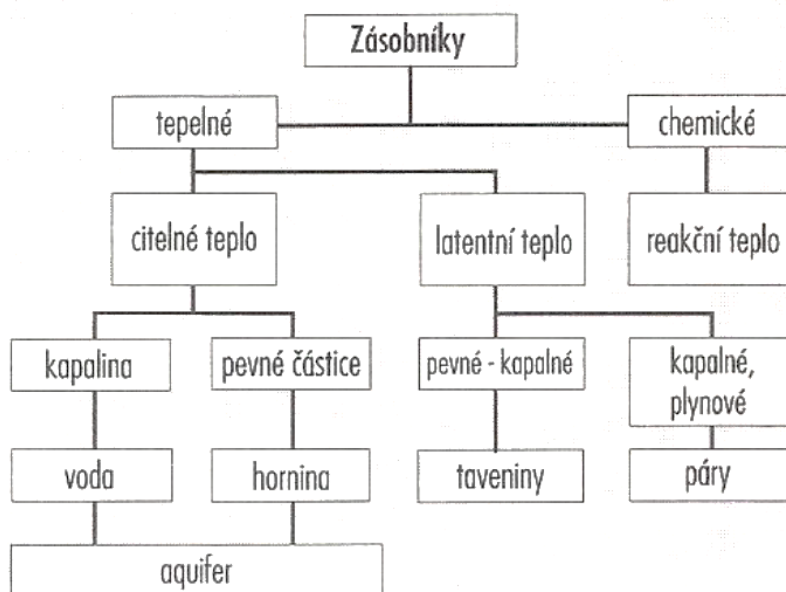
3.1.4 Akumulace v roztavených solích

Používané soli mají pevné skupenství při normálních teplotách a atmosférickém tlaku. Po zahřátí (například v solární elektrárně s centrální věží) je roztavená sůl využita k produkci vodní páry, která pohání turbínu při výrobě elektřiny nebo je uskladněna v kapalném skupenství pro pozdější využití.

Samozřejmě tím výčet druhů akumulace energie nekončí. V dnešní době se hlavně i díky krizi týkající se globálního oteplování a klimatických změn vyvíjí různé nové druhy technologií v oblasti akumulace a využití co největšího procenta takto akumulované energie [8]. Výše jsem uvedl strohý výpis druhů akumulací, ale existují i jiné druhy, například termochemické uskladnění, akumulace ve vodíku, setrvačníky atd.

3.2 Akumulace tepelné energie

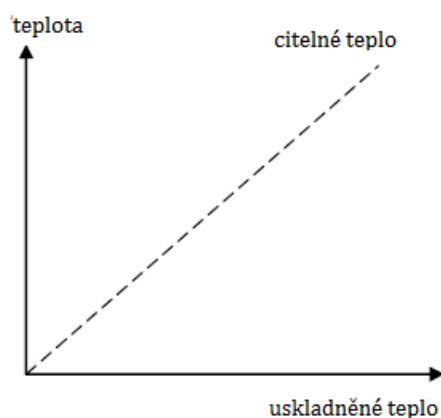
Jak už bylo zmíněno výše, zásobníky energie jsou konstruovány hlavně z důvodů, že ne vždy se kryje poptávka energie s nabídkou. Zásobníky tepelné energie mohou být naplněny materiály, které využívají akumulace díky citelnému teplu např. voda, ale také tzv. materiály s fázovou přeměnou (viz kapitola 3.3, v dalším textu už jen zkratkou PCM), kde se v průběhu akumulace mění fáze z pevné na kapalnou a naopak. K tomu, abychom dokázali takto získávat energii, je zapotřebí, aby tato metoda zásobování byla vratná. Při psaní této kapitoly jsem čerpal z [8].



Obrázek 3.1: Typy zásobníků [12]

3.2.1 Akumulace pomocí citelného tepla

Při tomto druhu akumulace se využívá pouze tepelné kapacity látky v daném rozsahu teplot. Hodnota akumulované energie je závislá na počáteční a koncové teplotě, tedy na změně teploty pracovní látky v důsledku ohřevu nebo ochlazení. Nedochozí zde ke změně



Obrázek 3.2: Citelné teplo [8]

skupenství látky. Nejvyužívanější látkou pro tento druh akumulace je voda, díky svým dobrým vlastnostem pro vedení tepla, ale taktéž kvůli tomu, že se jedná o levný a dostupný materiál.

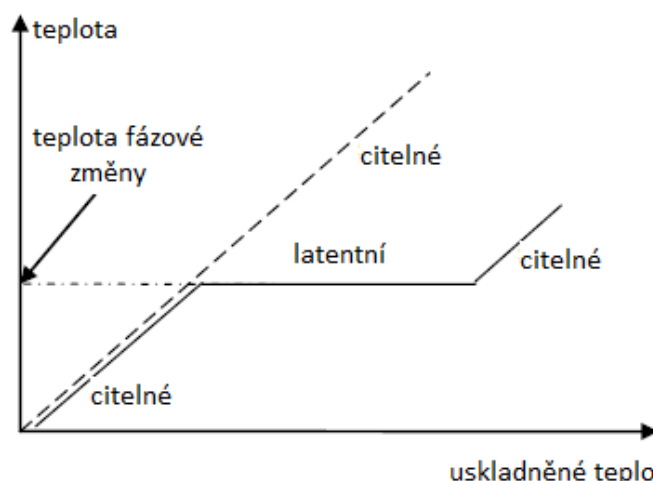
Poměr uložené energie ΔQ k nárůstu tepla ΔT je tepelná kapacita C akumulovaného média

$$\Delta Q = C \Delta T = m c \Delta T. \quad (3.1)$$

Akumulace pomocí citelného tepla je zdaleka nejběžnější způsob. Zásobníky s teplou vodou jsou používány k vytápění v téměř každé domácnosti.

3.2.2 Akumulace pomocí latentního tepla

Tento způsob akumulace využívá nejen tepelné kapacity látky, ale také změny skupenství látky. Díky změně fáze materiálu je možné akumulovat energii bez nárůstu citelného tepla a tím pádem můžeme akumulovat větší množství tepelné energie, popř. můžeme při zachování rozměrů zásobníku akumulovat díky tomuto dodatečnému teplu větší množství energie. Při změně z pevné na kapalnou fázi je potřeba energii látce dodávat a při změně z kapalnou fázi na pevnou se energie uvolňuje. Tato změna probíhá při konstantní teplotě rovné teplotě tání/tuhnutí a poté, co proběhne fázová přeměna se tepelná energie akumuluje opět s využitím citelného tepla. Při akumulaci využívající fázovou přeměnu látky se používají PCM materiály, například parafín, solné hydráty, aj [9].



Obrázek 3.3: Latentní teplo [8]

Při akumulaci tepelné energie s využitím fázové změny je využitelná jen změna fáze mezi látkou pevnou a kapalnou. V důsledku velké změny objemu akumulační látky při změně skupenství z kapaliny na plyn není tato změna pro akumulaci vhodná [13]. Pokud budeme akumulovat tepelnou energii pomocí citelného tepla s využitím fázové přeměny, je hodnota akumulované tepelné energie rovna

$$\Delta Q = m c \Delta T + m l, \quad (3.2)$$

kde l je měrné skupenské (latentní) teplo.

3.3 Materiály s fázovou přeměnou PCM

V zásobnících tepelné energie využívající latentního tepla se používají PCM materiály. Tyto materiály jsou schopny uskladnit 5-14 krát více tepla na jednotku objemu než normální materiály využívající pouze citelného tepla, jako je např. voda, zdivo, kamení. Je známo, že u velkého množství PCM materiálů probíhá tání/tuhnutí při jakémkoli požadovaném rozmezí [14]. Nicméně pro jejich použití v zásobnících tepelné energie je nutné, aby tyto materiály vykazovaly určité požadované termodynamické, kinetické a chemické vlastnosti. K dosažení co nejlepších výsledků v rámci akumulace energie je nezbytná optimální volba PCM materiálů. Při sepisování poznatků týkající se PCM materiálů jsem čerpal z [8] a [15].

3.3.1 Požadavky na PCM materiály

Vhodná volba materiálu při akumulaci využívající změny skupenství by měla splňovat následující vlastnosti.

Tepelné vlastnosti:

- Vhodná teplota změny fáze
- Vysoká hodnota latentního tepla
- Dobrý prostup tepla

Při volbě PCM pro konkrétní aplikaci by měla být provozní teplota při ohřívání a chladnutí taková, aby prošla fázovou přeměnou. Latentní teplo by mělo být co největší, aby rozměry zásobníku mohly být menší v rámci velikosti objemu zásobníku. Vysoký součinitel tepelné vodivosti samozřejmě zaručuje rychlejší prostup tepelné energie látkou.

Fyzikální vlastnosti:

- Přiměřená rovnováha fází
- Vysoká hustota
- Malá změna objemu při změnách fází

Stabilita fází v průběhu tání/tuhnutí je důležitá vlastnost, stejně tak i vysoká hustota látky, z důvodů co nejmenších možných rozměrů při konstrukci zásobníku.

Kinetické vlastnosti:

- Odolnost vůči podchlazení
- Dostatečná míra krystalizace

Podchlazení materiálu je obtížným aspektem vývoje PCM, zejména u hydrátů solí. Podchlazení o více než pár stupňů °C naruší správné získávání tepelné energie ze zásobníků a při velkém podchlazení může i zcela získání energie zabránit.

Chemické vlastnosti:

- Dlouhotrvající chemická stabilita
- Kompatibilita s konstrukčními materiály
- Netoxické, nehořlavé

PCM materiály mohou trpět degradací kvůli ztrátě hydratační vody, chemickým rozkladem nebo neslučitelností s konstrukčními materiály. Z bezpečnostních důvodů by PCM materiály neměly být toxické, hořlavé a výbušné.

Ekonomické vlastnosti:

- Dobrá dostupnost
- Nízká cena

Velmi důležitým aspektem při výběru vhodného PCM materiálu je i samozřejmě dostupnost a nízká pořizovací cena.

3.3.2 Druhy PCM materiálů

V každém požadovaném teplotním rozmezí je k dispozici velký počet PCM materiálů (organické, anorganické, eutektické). Existuje velké množství organických a anorganických chemických materiálů, které lze klasifikovat jako PCM. Avšak co se týče dalších důležitých vlastností uvedených v kapitole 3.3.1, to už tak dobře nevypadá. Vzhledem k tomu, že žádný materiál nemůže mít všechny zmiňované ideální vlastnosti, je nutné použít dostupné materiály a snažit se optimalizovat výběr materiálu tak, aby splňoval konkrétní požadavky při akumulaci. Je taktéž možné tyto některé nedostatky vykompenzovat, například použitím kovových žeber v PCM můžeme zvýšit tepelnou vodivost, podchlazení může být potlačeno zavedením nukleačního činidla do akumulační látky, atd. Při sepisování následujících podkapitol jsem čerpal z [15] a [16].

Organické materiály

Tuto skupinu PCM můžeme dělit na sloučeniny s parafíny a bez parafínů. Velkou výhodou těchto sloučenin je jejich vlastní nukleace. Díky tomu téměř nedochází k problémům s podchlazením.

Sloučeniny s parafíny:

Parafin je směs pevných uhlovodíků. Pro použití se využívá téměř přímý řetězec $\text{CH}_3\text{-(CH}_2\text{)-CH}_3$. Pro krystalizaci řady $\text{(CH}_3\text{)-}$ je potřeba velké množství latentního tepla. Právě díky této vlastnosti jsou tyto sloučeniny velmi vhodné pro použití jako PCM. Další dobrou vlastností parafínů je jejich chemická inertnost a cenová dostupnost. Tyto materiály mají poměrně dlouhý cyklus tání/tuhnutí.

Sloučeniny bez parafínů:

Tato kategorie obsahuje velké množství organických látek s rozdílnými vlastnostmi. Tvoří tak velkou skupinu látek, které se hodí k použití při akumulaci tepelné energie. Do

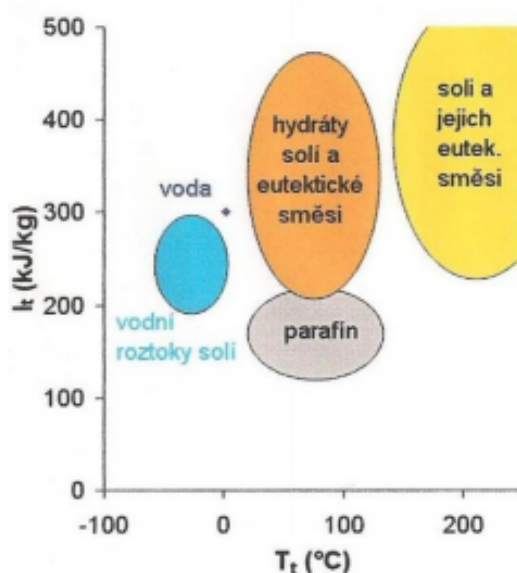
3.3. MATERIÁLY S FÁZOVOU PŘEMĚNOU PCM

této skupiny patří estery, vyšší mastné kyseliny, glykoly apod. Problematickou vlastností je jejich hořlavost, která nedovoluje jejich styk s vyššími teplotami, plamenem a oxidačními činidly. Z ekonomického hlediska jsou nevýhodné, protože jsou velmi drahé. Jejich cena se pohybuje dvou až tří násobně výš než u technických parafínů. Dobrou vlastností je vysoké latentní teplo.

Anorganické materiály

Do skupiny anorganický látek můžeme zahrnout hydráty solí a kovy. Hydráty solí jsou látky, které ve své struktuře obsahují vázané molekuly vody. Zahříváním se tyto molekuly vody odštěpují a rozpouštěním látek ve vodě opět poutají molekuly vody. Při poutání molekul vody (hydrataci) se u některých sloučenin uvolňuje tzv. hydratační teplo. Hydráty solí většinou tají buď do hydrátů s menším počtem molekul vody nebo do bezvodé formy. To znamená, že při změně skupenství z pevného na kapalné se hydráty rozpadnou do anhydridu solí a vody nebo do hydrátu nižšího řádu a vody. To u většiny hydrátů vyvolává zásadní problém. Nekongruentní tání způsobuje, že menší množství molekul vody již není schopné roztavit všechny pevné látky. Ty se díky větší hustotě začnou propadat na dno. Tím se snižuje množství látek, které mění skupenství a tedy i celkové pohlcené/uvolněné latentní teplo. Dalším nedostatkem hydrátů solí je fakt, že nemají dostatek nukleačních činitelů, proto je potřeba tyto činitele dodávat tak, aby nedocházelo k podchlazení. Dobrými vlastnostmi anorganických materiálů jsou vysoké latentní teplo, dobrá tepelná vodivost, cena a nehořlavost. Pro lepší funkci hydrátů solí se obecně doporučuje:

- Mechanické míchání
- Zapouzdření do kapslí
- Přidání zahušťovadel, která zabrání sedání solí na dno



Obrázek 3.4: Druhy PCM [17]

4 Úlohy se změnou fáze

Problém přechodného přenosu tepla je důležitý v řadě inženýrských aplikací [2]. Jedná se zejména o tání nebo tuhnutí a obecně se označuje jako úloha změny fáze nebo problém pohybující se hranice, např. výroba ledu, zmražení potravin, tuhnutí kovu v odlitku, skladování tepelné energie, zpracování chemikálií a plastů, růst krystalů, slévání a svařování kovů a slitin, a v řadě dalších. V přírodě se můžeme setkat například s jevem, při kterém dochází k chlazení velkých mas magnetických hornin. Řešení takových problémů je neodmyslitelně náročné, protože rozhraní mezi tuhou a kapalnou fází se pohybuje kvůli absorpci nebo uvolnění latentního tepla na rozhraní. Poloha rozhraní mezi pevnou a kapalnou fází je předem neznámá (a priori)¹ a musí se brát jako součást řešení [18]. Při tuhnutí čisté substance jako je např. voda, probíhá tuhnutí při diskrétní teplotě a pevná popř. kapalná fáze je oddělena jasně definovaným pohybujícím se rozhraním. Na druhé straně, pokud uvažujeme tuhnutí směsí, slitin a nečistých materiálů, probíhá tuhnutí v rozšířeném rozsahu teplot a výsledkem je rozdělení pevné a kapalné fáze pohybující se dvou-fázovou oblastí.

Základní vlastností tohoto problému je, že poloha hranic je neznámá a v pohybu, přičemž řešení parabolické rovnice vedení tepla probíhá v oblasti, kterou je potřeba také určit. Mezi první vědce, kteří se tomuto problému věnovali patří např. Lamé a Clapeyron v roce 1831, Stefan v roce 1891, úlohy změny fáze byly diskutovány na hodinách F. Neumanna, ale v psané podobě byly publikovány až roku 1912 [19]. Od této doby se v literatuře objevilo mnoho úloh týkajících se fázové změny. Exaktní řešení jsou bohužel omezena na ideální situace, zahrnující semi-infinitní nebo infinitní oblasti s jednoduchým rozhraním a počátečními podmínkami. Kvůli nelinearitě těchto úloh je princip superpozice nepoužitelný a každý případ se musí řešit odděleně [1]. Pokud není možné získat řešení exaktně, použijeme aproximace a numerické metody, abychom tuto úlohu mohli vyřešit.

Stefanův problém:

Jak jsem již uvedl, Stefanův problém je speciální druh okrajové podmínky u parciálních diferenciálních rovnic, adaptovaný na případ, ve kterém se rozhraní fází pohybuje s časem. Klasický Stefanův problém je zaměřen na popis teplotního rozložení v homogenním tělese procházející fázovou přeměnou např. tání ledu, to je splněno vyřešením rovnice vedení tepla při rovnoměrné počáteční teplotě v celém médiu a speciální okrajovou podmínkou, Stefanovou podmínkou na vývoj polohy rozhraní fází. Opět raději poznamenám, že tato poloha rozhraní je neznámá. Stefanův problém je tedy příkladem úlohy volných hranic. Z matematického hlediska, jsou fáze pouze oblasti, ve kterých je řešení PDR (parciálních diferenciálních rovnic) spojitě a diferencovatelné až do řádu rovnice [20]. Ve fyzikálních úlohách řešení reprezentuje vlastnosti média každé fáze. Pohybující se rozhraní je infinitesimální tenký povrch, který odděluje přilehlé fáze. V důsledku čehož může řešení PDR trpět nespojitostí napříč rozhraním.

¹A priori nebo také apriori je latinské spojení (doslova z předchozího), které znamená „předem“ nebo „předchůdný“. Odtud pak také apriorní, předchůdný, autoritativní. V běžné řeči se užívá například pro apriorní úsudky, které člověk dělá dříve, než se s posuzovanou věcí seznámí.

4.1 Matematická formulace úloh s fázovou přeměnou

K ilustraci matematické formulace úlohy s fázovou přeměnou budu nejdříve uvažovat jednodimenzionální problém tuhnutí a následně jednodimenzionální problém tání. V následujících podkapitolách čerpám z [2].

4.1.1 Podmínka rozhraní pro proces tuhnutí

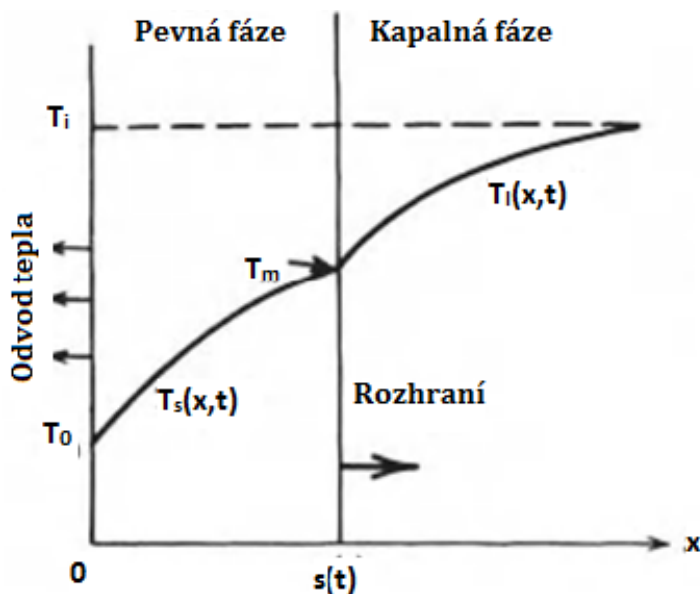
Teplota kapaliny fázové změny T_m (tj. teplota tání = teplota tuhnutí) je omezena na poloprostoru $0 < x < \infty$. Zpočátku má kapalina rovnoměrnou teplotu T_i , která je vyšší než teplota, při které dochází ke změně fáze T_m . V čase $t = 0$, je teplota na hranici povrchu $x = 0$ náhle snížena na teplotu T_0 , která je menší než teplota tuhnutí T_m a je udržována na této teplotě po dobu $t > 0$. Tuhnutí začíná v místě $x = 0$ a rozhraní pevné a kapalné fáze $x = s(t)$ se pohybuje v pozitivní směru osy x .

Na obrázku 4.1 je tento problém vyobrazen. Teploty pro pevnou $T_s(x, t)$ a kapalnou $T_l(x, t)$ fázi, jsou dány standardními difúzními rovnicemi

$$\frac{\partial^2 T_s(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_s} \frac{\partial T_s(x, t)}{\partial t} \quad \text{v} \quad 0 < x < s(t) \quad t > 0, \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial^2 T_l(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_l} \frac{\partial T_l(x, t)}{\partial t} \quad \text{v} \quad s(t) < x < \infty \quad t > 0, \quad (4.2)$$

přičemž předpokládám konstantní termofyzikální vlastnosti pro pevnou a kapalnou fázi. Člen $s(t)$ je pozice rozhraní mezi fázemi, která není předem známá a musíme ji určit. Tato úloha tedy zahrnuje tři neznámé: Teplotu v pevné $T_s(x, t)$ a kapalnou $T_l(x, t)$ fázi a polohu rozhraní mezi fázemi $s(t)$.



Obrázek 4.1: Vyobrazení problému tuhnutí v 1-D [2]

Následující rovnice uvažuje energetickou rovnováhu rozhraní $x = s(t)$

$$k_l \frac{\partial T_l}{\partial x} + \rho L \frac{ds(t)}{dt} = k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \quad \text{pro} \quad x = s(t), \quad t > 0, \quad (4.3)$$

kde L je měrné skupenské teplo tání na jednotku hmotnosti [J kg^{-1}] spojené s fázovou přeměnou. Jinými slovy: Vedení tepla z kapalně fáze v záporném směru osy x plus hodnota tepla uvolněná v průběhu tuhnutí na jednotku plochy rozhraní je rovna vedení tepla do pevné fáze v záporném směru osy x .

Prozatím jsem zanedbával rozdíl hustot mezi pevnou a kapalnou fází, a proto nadále předpokládám na rozhraní fází: $\rho_l = \rho_s = \rho$. Prostřední člen v rovnici (4.3) představuje hodnotu, při níž se energie uvolňuje na pohybujícím se rozhraní v důsledku tuhnutí. Rovnici (4.3) upravím do podoby

$$k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} - k_l \frac{\partial T_l}{\partial x} = \rho L \frac{ds(t)}{dt} \quad \text{pro} \quad x = s(t). \quad (4.4)$$

Spojitosť teploty na rozhraní fází je zaručena díky

$$T_s(x = s, t) = T_m = T_l(x = s, t). \quad (4.5)$$

Shrnutí: Rovnice (4.1), (4.2), (4.4) poskytují tři diferenciální rovnice, které umožňují výpočet teplotního rozložení v $T_s(x, t)$ pevné a $T_l(x, t)$ v kapalně fázi a polohu $s(t)$ rozhraní změn fází. Rovnice (4.5) poskytuje dvě okrajové podmínky. Další okrajové a počáteční podmínky jsou specifikovány v závislosti na povaze fyzikálních podmínek na rozhraní povrchu.

4.1.2 Podmínka rozhraní pro proces tání

Uvažujme nyní pevnou látku, která má teplotu změny fáze T_m ohrazenou na polo-prostoru $0 < x < \infty$. Zpočátku je pevná látka teploty T_i , jenž je nižší než teplota T_m . V čase $t = 0$ je teplota na hranici povrchu $x = 0$ náhle zvýšena na teplotu T_0 , což je teplota větší než teplota tání T_m a udržována na této teplotě pro časy $t > 0$. Předpokládám, že souřadný systém je pro úlohu tání stanoven tak, jak ukazuje obrázek 4.2, tudíž se rozhraní fází pohybuje v kladném směru osy x . Řídící diferenciální rovnice pro tuto úlohu předpokládají konstantní vlastnosti v obou fázích

$$\frac{\partial^2 T_l(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_l} \frac{\partial T_l(x, t)}{\partial t} \quad \text{v} \quad 0 < x < s(t) \quad t > 0, \quad (4.6)$$

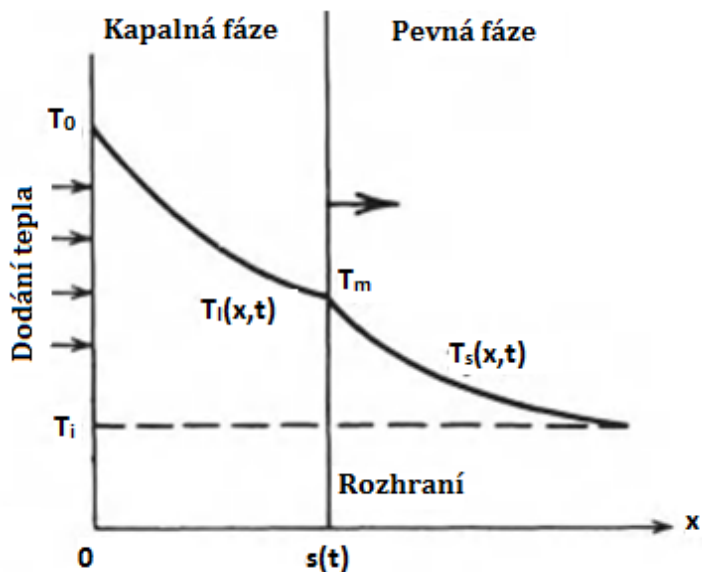
$$\frac{\partial^2 T_s(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_s} \frac{\partial T_s(x, t)}{\partial t} \quad \text{v} \quad s(t) < x < \infty \quad t > 0 \quad (4.7)$$

a energetická rovnováha na rozhraní fází $x = s(t)$

$$\left(-k_l \frac{\partial T_l}{\partial x} \right) - \left(-k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) = \rho L \frac{ds(t)}{dt} \quad \text{pro} \quad x = s(t), \quad t > 0. \quad (4.8)$$

Tedy vedení tepla z kapalně fáze v kladném směru osy x minus vedení tepla do pevně fáze v kladném směru osy x je rovno hodnotě tepla absorbované v průběhu tuhnutí na

4.1. MATEMATICKÁ FORMULACE ÚLOH S FÁZOVOU PŘEMĚNOU



Obrázek 4.2: Problému tání v 1-D [2]

jednotku plochy rozhraní. Přeuspořádání předešlé rovnice odpovídá energetické rovnováze jako v rovnici (4.4), proto opět dostávám

$$k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} - k_l \frac{\partial T_l}{\partial x} = \rho L \frac{ds(t)}{dt} \quad \text{pro} \quad x = s(t). \quad (4.9)$$

Rovnice (4.6), (4.7) a (4.9) poskytují tři diferenciální rovnice pro určení neznámých $T_s(x, t)$, $T_l(x, t)$ a $s(t)$ pro uvažovanou úlohu tání. Jak je uvedeno výše, pro rozhraní opět platí rovnice (4.5). Poznamenejme, že v rovnicích energetické rovnováhy na rozhraní (4.4) nebo (4.9), člen $ds(t)/dt$ představuje rychlost rozhraní v kladném směru osy x a proto můžu napsat

$$\frac{ds(t)}{dt} \equiv v_x(t). \quad (4.10)$$

Potom rovnici energetické rovnováhy pro rozhraní píšeme v tvaru

$$k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} - k_l \frac{\partial T_l}{\partial x} = \rho L v_x(t) \quad \text{pro} \quad x = s(t). \quad (4.11)$$

Error funkce:

Při řešení následujících úloh se budu setkávat s tzv. Error funkcí $\text{erf}(x)$ definovanou předpisem:

$$\text{erf}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-x}^x e^{-t^2} dt = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \quad (4.12)$$

a komplementární Error funkcí $\text{erfc}(x)$:

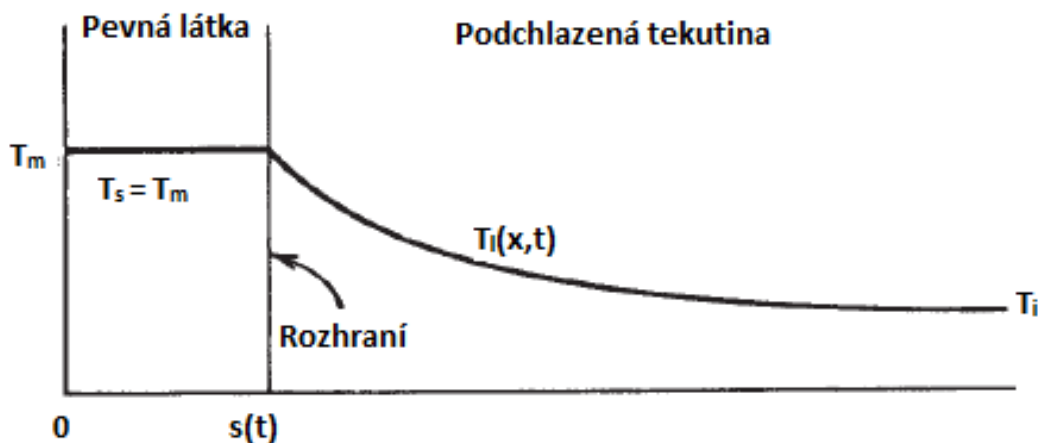
$$\text{erfc}(x) = 1 - \text{erf}(x). \quad (4.13)$$

5 Exaktní řešení úloh se změnou fáze

Exaktní řešení pro úlohy se změnou fáze jsou omezeny na pár ideálních situací kvůli důvodům uvedených dříve. Jedná se hlavně o případy jednodimenzionální nekonečné oblasti nebo semi-nekonečné oblasti a jednoduché okrajové podmínky, jakožto předepsaná teplota na okraji povrchu. Exaktní řešení jsou dosažitelná, pokud úloha připouští podobnost řešení, což umožňuje dvě nezávisle proměnné x a t sloučit v jednu podobnou proměnnou $\frac{x}{\sqrt{t}}$. Nyní si ukážeme exaktní řešení tří úloh se změnou fáze. V této kapitole budu navazovat na předchozí kapitolu a opět vycházím z [2].

5.1 Jednofázová úloha: Tuhnutí podchlazené tekutiny

Úloha tuhnutí podchlazené tekutiny v poloprostoru. Podchlazená tekutina má konstantní teplotu T_i , která je menší než teplota tuhnutí T_m a je ohraničena na poloprostoru $x > 0$. Předpokládám, že tuhnutí začíná na povrchu $x = 0$ a v čase $t = 0$, a rozhraní fází se pohybuje v kladném směru osy x . Obrázek 5.1 ilustruje tento případ. Tuhá fáze má konstantní teplotu T_m po celou dobu, neprobíhá přes ni žádný přenos tepla, teplo uvolněné v průběhu tuhnutí je převedeno do podchlazené tekutiny a zvyšuje její teplotu. Teplotní rozložení je tedy neznámé pouze v kapalně fázi, proto se úloze říká: "Jednofázová úloha". V následující analýze určím teplotní rozložení $T_l(x, t)$ v kapalně fázi a pozici rozhraní fází $s(t)$, jakožto funkci času.



Obrázek 5.1: Tuhnutí podchlazené tekutiny v poloprostoru[2]

Ještě než provedu analýzu řešení této úlohy, bylo by vhodné vysvětlit si vyskytující se jev, podchlazení tekutiny. Pokud je tekutina ochlazována velmi pomalu, okolní teplota může být ochlazena pod teplotu tuhnutí a tekutina se v takovémto stavu nazývá podchlazená tekutina. Pokud podchlazení dosáhne kritickou teplotu, začne probíhat tuhnutí a teplo uvolněné v průběhu tuhnutí zvyšuje teplotu podchlazené tekutiny tak, jak se pohybuje rozhraní pevné fáze. Zatím není mnoho známo o aktuálních podmínkách pro rozhraní fází při tuhnutí takovéto tekutiny. V průběhu tuhnutí může rozhraní narůstat jako dendritický povrch obsahující tenké krystalky ledu roztroušené ve vodě, nežli jako pohybující se ostré rozhraní. Takovéto chování můžeme příležitostně pozorovat pokud vezmeme láhev tekutiny z mrazáku, přičemž tekutina rychle ztuhne při protřepání láhve, nebo náhlé ztuhnutí velké nádrže tekutého vosku. Tedy závěrem, pokud do analýzy zahrneme i ne-

5.1. JEDNOFÁZOVÁ ÚLOHA: TUHNUTÍ PODCHLAZENÉ TEKUTINY

pravidelné povrchové podmínky, je tento proces velmi složitý. Proto tedy v následujícím řešení budu uvažovat pouze ideální situaci a tyto fakta vynechám. Předpokládám tedy, že se jedná o ostré rozhraní jehož pohyb je totožný jako při normálním procesu tuhnutí. Matematická formulace úlohy je dána následovně

$$\frac{\partial^2 T_l(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_l} \frac{\partial T_l(x, t)}{\partial t} \quad \text{pro} \quad s(t) < x < \infty \quad t > 0, \quad (5.1)$$

$$T_s = T_m \quad \text{pro} \quad 0 \leq x < s(t) \quad t > 0, \quad (5.2)$$

podléhající okrajovým a počátečním podmínkám

$$T_l(x \rightarrow \infty, t) \rightarrow T_i, \quad (5.3)$$

$$T_l(x, t = 0) = T_i \quad (5.4)$$

a podmínky pro rozhraní

$$T_l(x = s, t) = T_m \quad \text{pro} \quad x = s(t), \quad (5.5)$$

$$-k_l \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=s(t)} = \rho L \frac{ds(t)}{dt} \quad \text{pro} \quad x = s(t). \quad (5.6)$$

Rovnice pro rozhraní (5.6) uvádí, že teplo uvolněné na rozhraní v důsledku tuhnutí je rovno teplu přivedenému do podchlazené tekutiny a vychází přímo z rovnice (4.4) pro konstantní teplotu T_s . Pro určení teploty T_s není zapotřebí žádné rovnice, protože má konstantní teplotu rovnou T_m .

Z [2] vím, že $\operatorname{erfc} \left[x/2(\alpha_l t)^{\frac{1}{2}} \right]$ je řešením rovnice vedení tepla (5.1) a řešení teplotního rozložení $T_l(x, t)$ zapíši ve tvaru

$$T_l(x, t) = A + B \operatorname{erfc} \left[\frac{x}{2(\alpha_l t)^{\frac{1}{2}}} \right], \quad (5.7)$$

kde A a B jsou libovolné konstanty, které je potřeba určit. Toto řešení vyhovuje diferenciální rovnici (5.1). V tomto případě máme $A = T_i$, což vyhovuje okrajové podmínce (5.3) a počáteční podmínce (5.4), poněvadž $\operatorname{erfc}(\infty) = 0$.

Pokud požaduji, aby řešení (5.7) taktéž splňovalo podmínku rozhraní (5.5), tak píši

$$T_m = T_i + B \operatorname{erfc}(\lambda), \quad (5.8)$$

kde argument funkce erfc λ určím jako

$$\lambda = \frac{s(t)}{2(\alpha_l t)^{\frac{1}{2}}} \quad \text{nebo} \quad s(t) = 2\lambda(\alpha_l t)^{\frac{1}{2}}. \quad (5.9)$$

Rovnice (5.8) musí vyhovovat každému časovému okamžiku a tedy parametr λ musí být konstanta. Rovnice (5.8) je nyní řešena pro koeficient B , tedy

$$B = \frac{T_m - T_i}{\operatorname{erfc}(\lambda)} \quad (5.10)$$

5. EXAKTNÍ ŘEŠENÍ ÚLOH SE ZMĚNOU FÁZE

a tento tvar je zaveden do rovnice (5.7).

Následně dostávám řešení pro určení teplotního rozložení $T_l(x, t)$

$$\frac{T_l(x, t) - T_i}{T_m - T_i} = \frac{\operatorname{erfc} \left[\frac{x}{2(\alpha_l t)^{\frac{1}{2}}} \right]}{\operatorname{erfc}(\lambda)}. \quad (5.11)$$

Rovnice energetické rovnováhy na rozhraní (5.6) poskytuje dodatečný vztah pro určení parametru λ . A to substitucí $s(t)$ a $T_l(x, t)$ z rovnic (5.9) a (5.11), do rovnice (5.6) za použití

$$\frac{ds(t)}{dt} = \frac{\lambda \sqrt{\alpha_l}}{t^{\frac{1}{2}}} \quad (5.12)$$

a vztahu

$$\frac{d \operatorname{erfc}(z)}{dz} = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-z^2}, \quad (5.13)$$

obdržíme následující transcendentní rovnici pro určení λ

$$\lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erfc}(\lambda) = \frac{C(T_m - T_i)}{L\sqrt{\pi}}. \quad (5.14)$$

Tedy λ je kořenem rovnice (5.14). Nyní již znám hodnotu parametru λ , a můžu určit pozici rozhraní fází $s(t)$ z rovnice (5.9) a teplotní rozložení $T_l(x, t)$ v kapalně fázi z rovnice (5.11). Pravá strana rovnice (5.14) je rovna Stefanovu číslu podělená $\sqrt{\pi}$.

Pokud nemám dostatečně přesnou tabulku¹(viz příloha A.1.1), je vhodnější v tomto případě využít znalostí z numerických metod a poslední transcendentní rovnici vyřešit např. pomocí Newtonovy metody pro aproximaci kořene. [21]

¹V tabulce uvádím hodnoty $\lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erfc}(\lambda)$ vzhledem k λ . Pokud tedy znám hodnotu Stefanova čísla, λ určím z této tabulky.

Numerické řešení transcendentní rovnice [21]:

Kořeny nelineární rovnice $f(x) = 0$ obecně neumíme vyjádřit explicitním vzorcem. K řešení nelineární rovnice proto používáme iterační metody. Z jedné nebo několika počátečních aproximací hledaného kořene x^* generujeme posloupnost x_0, x_1, \dots , která ke kořenu x^* konverguje. Pro některé metody stačí, když zadáme interval $\langle a, b \rangle$, který obsahuje hledaný kořen. Jiné metody vyžadují, aby počáteční aproximace byla k hledanému kořenu dosti blízko a na oplátku takové metody konvergují mnohem rychleji. Budu předpokládat, že funkce $f(x)$ je spojitá a má tolik spojitých derivací kolik je jich v dané situaci zapotřebí.

V mém případě použiji **Newtonovu metodu (metodu tečen)**:

Vycházím z počáteční aproximace x_0 a postupně počítám x_1, x_2, \dots způsobem, který nyní ukáži. Předpokládám, že znám x_k a mám určit lepší aproximaci x_{k+1} . Udělám to tak, že bodem $[x_k, f(x_k)]$ vedu tečnu ke křivce $y = f(x)$ a průsečík tečny s osou x považuji za x_{k+1} .

Do rovnice tečny:

$$y = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k), \quad (5.15)$$

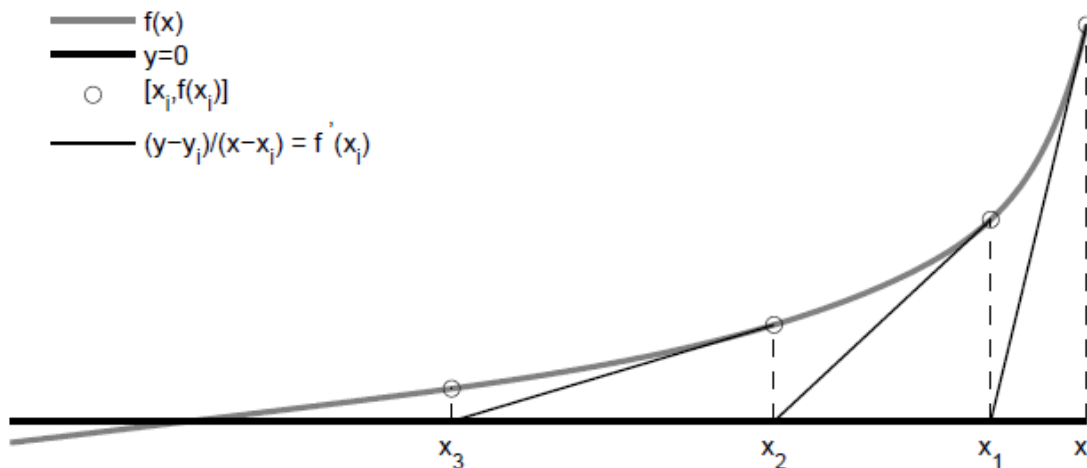
dosadím $y := 0$, vypočítám x a položíím $x_{k+1} := x$. Tak dostanu předpis

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}. \quad (5.16)$$

Výpočet x_{k+1} považuji za dostatečně přesnou aproximaci kořene, pokud

$$|x_{k+1} - x_k| \leq \epsilon, \quad (5.17)$$

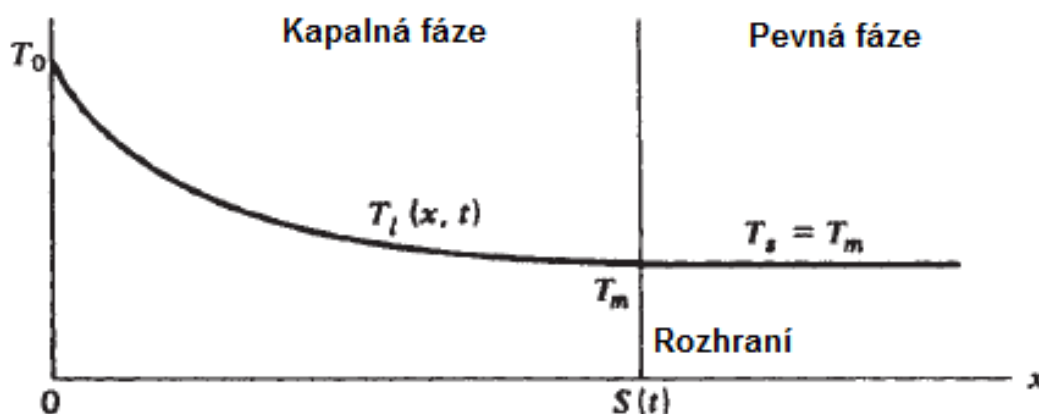
kde ϵ je požadovaná přesnost. Tímto *stop kritériem* tedy danou aproximaci ukončím.



Obrázek 5.2: Newtonova metoda [21]

5.2 Jednofázová úloha : Tání pevné látky o teplotě změny fáze

Nyní budu řešit tání v poloprostoru. Pevná látka teploty tání T_m je omezena na poloprostoru $x > 0$. V čase $t = 0$ je teplota na okraji povrchu $x = 0$ zvýšena na teplotu T_0 , která je větší než teplota T_m , a udržována při této teplotě pro čas $t > 0$. Tání tedy začíná na povrchu $x = 0$ a rozhraní fází se pohybuje v kladném směru osy x . Tento případ je zobrazen na obrázku 5.3. Pevná fáze má konstantní teplotu rovnu T_m po celou dobu a teplotní rozložení $T_l(x, t)$ je neznámé pouze u kapalně fáze a proto se jedná opět o úlohu jednofázovou.



Obrázek 5.3: Tání pevné látky o teplotě změny fáze v poloprostoru [2]

Matematická formulace úlohy pro kapalnou fázi je dána rovnicí

$$\frac{\partial^2 T_l(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_l} \frac{\partial T_l(x, t)}{\partial t} \quad \text{pro} \quad 0 < x < s(t), \quad t > 0 \quad (5.18)$$

a pro pevnou fázi

$$T_s = T_m \quad \text{pro} \quad s(t) \leq x < \infty, \quad t > 0, \quad (5.19)$$

splňující okrajovou podmínku

$$T_l(x = 0, t) = T_0. \quad (5.20)$$

Podmínku rozhraní s konstantní teplotou T_s stanovím opět ve tvaru

$$T_l(x = s, t) = T_m \quad \text{pro} \quad x = s(t) \quad (5.21)$$

$$-k_l \frac{\partial T_l(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=s(t)} = \rho L \frac{ds(t)}{dt} \quad \text{pro} \quad x = s(t). \quad (5.22)$$

Rovnice (5.22) vychází přímo z rovnice (4.4) pro konstantní T_s , pro určení teplotního rozložení v pevné fázi není potřeba žádná další rovnice, jelikož je rovna teplotě tání T_m po celou dobu.

Předpokládám řešení teplotního rozložení $T_l(x, t)$ v podobě

$$T_l(x, t) = A + B \operatorname{erf} \left[\frac{x}{2(\alpha_l t)^{\frac{1}{2}}} \right], \quad (5.23)$$

5.2. JEDNOFÁZOVÁ ÚLOHA : TÁNÍ PEVNÉ LÁTKY O TEPLOTĚ ZMĚNY FÁZE

kde A a B jsou libovolné konstanty a diferenciální rovnice (5.18) je splněna. Nyní položím $A = T_0$, což vyhovuje okrajové podmínce (5.20), jelikož $\operatorname{erf}(0) = 0$ a to nám dává upravený tvar předcházející rovnice

$$T_l(x, t) = T_0 + B \operatorname{erf} \left[\frac{x}{2(\alpha_l t)^{\frac{1}{2}}} \right]. \quad (5.24)$$

A při požadavku splnění podmínky (5.21) pro $x = s(t)$ dostávám

$$T_m = T_0 + B \operatorname{erf}(\lambda), \quad (5.25)$$

kde určím

$$\lambda = \frac{s(t)}{2(\alpha_l t)^{\frac{1}{2}}} \quad \text{nebo} \quad s(t) = 2\lambda(\alpha_l t)^{\frac{1}{2}}. \quad (5.26)$$

Rovnice (5.25) naznačuje že λ by měla být konstanta. Potom se koeficient určí z rovnice (5.25) jako

$$B = \frac{T_m - T_0}{\operatorname{erf}(\lambda)}. \quad (5.27)$$

Zavedením rovnice (5.27) do rovnice (5.24), dostávám

$$\frac{T_l(x, t) - T_0}{T_m - T_0} = \frac{\operatorname{erf} \left[\frac{x}{2(\alpha_l t)^{\frac{1}{2}}} \right]}{\operatorname{erf}(\lambda)}. \quad (5.28)$$

Na závěr využiji podmínky pro rozhraní (5.22), abych získal dodatečný vztah pro určení parametru λ . Vztahy pro $s(t)$ a $T_l(x, t)$ z rovnic (5.26) a (5.28) dosadím do rovnice (5.22) a využiji derivace

$$\frac{ds(t)}{dt} = \frac{\lambda\sqrt{\alpha_l}}{t^{\frac{1}{2}}} \quad (5.29)$$

a

$$\frac{d \operatorname{erf}(z)}{dz} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-z^2}. \quad (5.30)$$

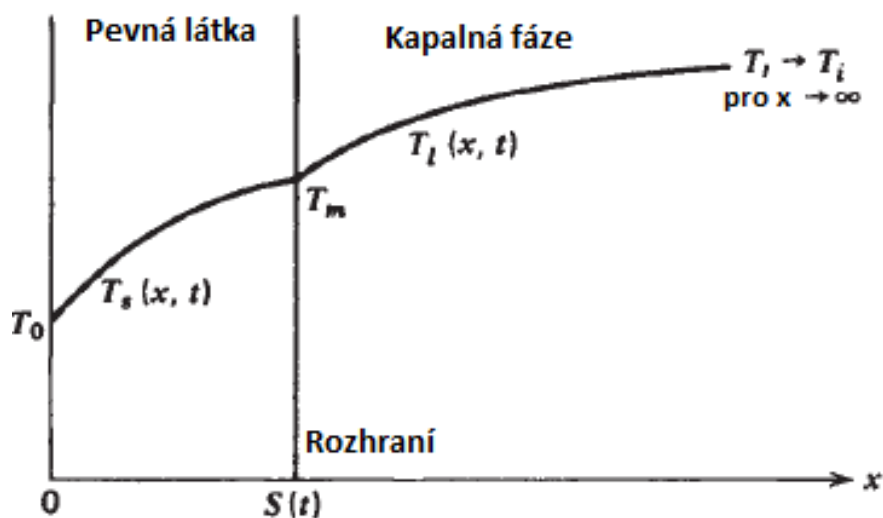
Získám podobnou transcendentní rovnici pro určení parametru λ :

$$\lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda) = \frac{C(T_0 - T_m)}{L\sqrt{\pi}}. \quad (5.31)$$

Pokud znám parametr λ , můžu následně určit polohu rozhraní fází $s(t)$ a teplotní rozložení kapalně fáze $T_l(x, t)$. Jako v předcházejícím případě je pravá strana rovnice (5.31) rovna Stefanovu číslu poděleným hodnotou $\sqrt{\pi}$. Hodnotu λ určím z tabulky (viz příloha A.2.1) nebo pomocí Newtonovy metody.

5.3 Dvofázová úloha : Tuhnutí

V tomto případě uvažují tuhnutí v poloprostoru a to takové, že řešení je vyžadováno pro obě fáze, tedy teplotní rozložení v kapalně i v pevné fázi. Tekutina má konstantní teplotu T_i , která je větší než teplota tuhnutí T_m . Řešení probíhá v poloprostoru $x > 0$. Pro čas $t = 0$ je na hranici povrchu $x = 0$ teplota snížena na teplotu T_0 , což je teplota nižší než T_m a udržována při této teplotě pro čas $t > 0$. Tuhnutí začíná na povrchu $x = 0$ a poloha rozhraní fází $s(t)$ se pohybuje v kladném směru osy x . Úloha je graficky ilustrována na obrázku 5.4. Tento problém se nazývá dvofázový problém, protože neznáme teplotní rozložení kapalně a ani pevné fáze. V následující analýze určíme teplotní rozložení obou fází a polohu rozhraní fází. Tato úloha je oproti předcházejícím úlohám obecnější a toto řešení je známo jako Neumannovo řešení.



Obrázek 5.4: Dvofázový problém: Tuhnutí [2]

Matematická formulace úlohy pro pevnou fázi je dána předpisem

$$\frac{\partial^2 T_s(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_s} \frac{\partial T_s(x, t)}{\partial t} \quad \text{pro} \quad 0 < x < s(t), \quad t > 0, \quad (5.32)$$

$$T_s(x = 0, t) = T_0 \quad (5.33)$$

a pro kapalnou fázi

$$\frac{\partial^2 T_l(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_l} \frac{\partial T_l(x, t)}{\partial t} \quad \text{pro} \quad s(t) < x < \infty, \quad t > 0, \quad (5.34)$$

$$T_l(x \rightarrow \infty, t) \rightarrow T_i, \quad (5.35)$$

$$T_l(x, t = 0) = T_i \quad \text{pro} \quad x > 0. \quad (5.36)$$

Podmínky pro rozhraní fází pro $x = s(t)$ jsou

$$T_s(x = s(t), t) = T_l(x = s(t), t) = T_m, \quad (5.37)$$

5.3. DVOUFÁZOVÁ ÚLOHA : TUHNUTÍ

$$k_s \frac{\partial T_s(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=s(t)} - k_l \frac{\partial T_l(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=s(t)} = \rho L \frac{ds(t)}{dt}. \quad (5.38)$$

Tvar řešení pro teplotní rozložení $T_s(x, t)$ v pevné fázi, zvolím podobně jako v druhé úloze:

$$T_s(x, t) = T_0 + A \operatorname{erf} \left[\frac{x}{2(\alpha_l t)^{\frac{1}{2}}} \right], \quad (5.39)$$

což splňuje diferenciální rovnici (5.32) a okrajovou podmínku (5.33). Tvar řešení teplotního rozložení v kapalně fázi $T_l(x, t)$ volím obdobně jako v první úloze

$$T_l(x, t) = T_i + B \operatorname{erfc} \left[\frac{x}{2(\alpha_l t)^{\frac{1}{2}}} \right], \quad (5.40)$$

tento tvar splňuje diferenciální rovnici (5.34), okrajovou podmínku (5.35) a počáteční podmínku (5.36). Pomocí rovnic pro rozhraní určím konstanty A a B .

Rovnice (5.39) a (5.40) nejprve dosadím do rovnice pro rozhraní (5.37), což vede k rovnosti

$$T_0 + A \operatorname{erf}(\lambda) = T_i + B \operatorname{erfc} \left[\lambda \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_l} \right)^{\frac{1}{2}} \right] = T_m, \quad (5.41)$$

kde určím

$$\lambda = \frac{s(t)}{2(\alpha_s t)^{\frac{1}{2}}} \quad \text{nebo} \quad s(t) = 2\lambda(\alpha_s t)^{\frac{1}{2}}. \quad (5.42)$$

Jako v předchozích úlohách rovnice (5.41) značí, že λ by měla být konstanta. Koeficienty A a B nyní určím z rovnice (5.41) a to následovně

$$A = \frac{T_m - T_0}{\operatorname{erf}(\lambda)}, \quad \text{a} \quad B = \frac{T_m - T_i}{\operatorname{erfc} \left[\lambda \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_l} \right)^{\frac{1}{2}} \right]}. \quad (5.43)$$

Zavedením koeficientů A a B do rovnic (5.39) a (5.40), získávám rovnice pro zjištění teplotních rozložení pro pevnou a kapalnou fázi tvaru

$$\frac{T_s(x, t) - T_0}{T_m - T_0} = \frac{\operatorname{erf} \left[\frac{x}{2(\alpha_s t)^{\frac{1}{2}}} \right]}{\operatorname{erf}(\lambda)} \quad (5.44)$$

a

$$\frac{T_l(x, t) - T_i}{T_m - T_i} = \frac{\operatorname{erfc} \left[\frac{x}{2(\alpha_l t)^{\frac{1}{2}}} \right]}{\operatorname{erfc} \left[\lambda \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_l} \right)^{\frac{1}{2}} \right]}. \quad (5.45)$$

Rovnici energetické rovnováhy na rozhraní (5.38) nyní využiji pro určení parametru λ . A to tak, že $s(t)$, $T_s(x, t)$ a $T_l(x, t)$ z rovnic (5.42), (5.44) a (5.45), dosadím do rovnice

(5.38) a užitím vztahů (5.13) a (5.30), dostávám následující transcendentní rovnici pro určení parametru λ

$$\frac{e^{-\lambda^2}}{\operatorname{erf}(\lambda)} + \frac{k_l}{k_s} \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_l} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{T_m - T_i}{T_m - T_0} \frac{e^{-\lambda^2(\alpha_s/\alpha_l)}}{\operatorname{erfc} \left[\lambda(\alpha_s/\alpha_l)^{\frac{1}{2}} \right]} = \frac{\lambda L \sqrt{\pi}}{C_s(T_m - T_0)}. \quad (5.46)$$

Pokud znám λ , můžu určit hodnoty $s(t)$ z rovnice (5.42), $T_s(x, t)$ z rovnice (5.44) a $T_s(x, t)$ z rovnice (5.45). Tvar rovnice (5.46) nedovoluje parametrizaci pomocí jednoho bezrozměrného čísla jako v předcházejících případech a tedy neuvádím žádnou tabulku, ale jsem odkázán na vyřešení rovnice pomocí Newtonovy metody.

Error funkce v prostředí Matlab a Gams [22]

Při řešení úloh v prostředích Matlab a Gams vzniká problém týkající se implementace Error funkce, jelikož v prostředí Matlab je $\operatorname{erf}(x)$ definovaná předpisem

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-x}^x e^{-t^2} dt = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt, \quad (5.47)$$

kdežto v prostředí Gams

$$\operatorname{errorf}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{1}{2}t^2} dt. \quad (5.48)$$

Tedy

$$\operatorname{errorf}(x) = \frac{1 + \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right)}{2}. \quad (5.49)$$

Takto vzniklý problém není těžké vyřešit. V předchozím textu počítám s funkcí $\operatorname{erf}(x)$ definovanou stejně, jako v prostředí Matlab a rovnici 5.49 potřebuji zapsat na tvar pro řešení $\operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right)$. Pomocí substituce $y = \frac{x}{\sqrt{2}}$. Tím získávám funkci $\operatorname{erf}(y)$ pro zápis v prostředí Gams

$$\operatorname{erf}(y) = 2 \cdot \operatorname{errorf}(\sqrt{2}y) - 1. \quad (5.50)$$

Při definici komplementární error funkce $\operatorname{erfc}(x)$, která je dána

$$\operatorname{erfc}(y) = 1 - \operatorname{erf}(y), \quad (5.51)$$

je tento problém řešen dosazením rovnice 5.50 do 5.51, tedy není třeba využívat dalších znalostí a komplementární error funkce v prostředí Gams má tvar

$$\operatorname{erfc}(y) = 1 - \left(2 \cdot \operatorname{errorf}(\sqrt{2}y) - 1 \right) \quad (5.52)$$

a po úpravě dostávám

$$\operatorname{erfc}(y) = 2 - 2 \cdot \operatorname{errorf}(\sqrt{2}y). \quad (5.53)$$

6 Matematické a optimalizační modely a jejich výsledky

S využitím poznatků z předchozích kapitol si nyní sestrojím model v programovacím prostředí Matlab, který použiji jako základní kámen při tvorbě optimalizačního modelu v prostředí Gams (General algebraic modeling system), kde optimalizují námi zvolené požadavky. Následně budou výsledky optimálních hodnot využity pro zpětné dosazení do programu Matlab, abych získal grafické výsledky tohoto problému. Postupně sestrojím a vyřeším úlohy jednofázového problému: Tuhnutí podchlazené tekutiny teploty T_i , tání pevné látky o teplotě změny fáze T_m , a dvofázový problém: Tuhnutí kapalné látky o teplotě T_i . Při tvorbě modelů jsem čerpal potřebné znalosti z [23] a [24].

6.1 Jednofázový problém: Tuhnutí podchlazené tekutiny

6.1.1 Tvorba základního modelu pro Matlab

V této podkapitole budu navazovat na stejnojmenný problém z předcházející kapitoly (viz 5.1). V úloze budu pracovat s rovnicemi: (5.9), (5.11) a (5.14). Ze všeho nejdříve si zjistím parametr λ z rovnice (5.14), která vznikla dosazením rovnic (5.9) a (5.11) do rovnice rozhraní (5.6). Řešení takto zadané transcendentní rovnice získám díky Newtonovy metody. Pro použití Newtonovy metody si rovnici (5.31) označím jako

$$y_k = \lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erfc}(\lambda) - \frac{c(T_m - T_i)}{L\sqrt{\pi}}$$

a jelikož budu potřebovat i její derivaci tak si předcházející rovnici zderivuji

$$y'_k = e^{\lambda^2} \operatorname{erfc}(\lambda) + 2\lambda^2 e^{\lambda^2} \operatorname{erfc}(\lambda) - \frac{2\lambda}{\sqrt{\pi}}.$$

Použití následujícího vzorce pro získání dostatečně dobré aproximace kořene λ vyžaduje zadání počátečního bodu λ_1

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k - \frac{y_k}{y'_k}$$

poté, co rozdíl $\lambda_{k+1} - \lambda_k$ dosáhne požadované tolerance, získávám parametr λ .

```
while rozdil>tolerance
y=lambda*exp(lambda^2)*erfc(lambda)-((c*(Tm - Ti))/(L_f*sqrt(pi)));
y_der=(exp(lambda^2)*erfc(lambda) + 2*lambda^2*exp(lambda^2)*erfc(lambda)...
- (2*lambda)/sqrt(pi));
lambda_new=lambda-(y/y_der);
rozdil= abs(lambda_new - lambda);
lambda= lambda_new;
end
```

6. MATEMATICKÉ A OPTIMALIZAČNÍ MODELY A JEJICH VÝSLEDKY

V dalším kroku se přesunu k výpočtu polohy rozhraní fází $s(t(i))$ ¹, kde můžu díky nově získané λ spočítat rovnici (5.9). V této fázi znám už i posouvání polohy rozhraní v čase, ale ještě neznám teplotní rozložení v kapalně fázi $T_l(x(j), t(i))$ ² a proto využiji rovnice (5.11).

```
for i=1:M
    st(i) = 2*lambda*sqrt(alpha*t(i));
    for j=1:M2
        if st(i) < x(j)
            Tl(i,j)=Ti(i,j)+((Tm(i,j)-Ti(i,j))*erfc(x(j)...
                / (2*(alpha*t(i))^(1/2))))/ (erfc(lambda));
        else
            Ts(i,j)=Tm(i,j);
        end
        T(i,j)=Tl(i,j)+Ts(i,j);
    end
end
```

Takto vytvořený model v prostředí Matlab bude sloužit k interpretaci grafických výsledků poté, co si v prostředí Gams zoptimalizují vstupní proměnné (vlastnosti materiálů a konkrétní požadavky u konkrétních úloh).

V úloze tuhnutí podchlazené tekutiny počítám s parametry:

- Plocha průřezu: $S = 1$ [m²]
- Teplota tuhnutí: $T_m = 300$ [K]
- Teplota na počátku: $T_i = 290$ [K]
- Čas maximální: $t_{max} = 1500$ [s]

Proměnné veličiny, jejich omezení a další hodnoty, které budu dále používat v modelu zavádím v následující podkapitole 6.1.2.

Pokud má čtenář k dispozici i soubory z programovacích prostředí k této práci, může tento problém tuhnutí podchlazené tekutiny najít pod názvy:

Matlab: SingleSolid1.m a Omezenicenym

Gams: SingleSolid1.gms

¹Index i značí rovnoměrné rozdělení časového intervalu.

²Index j značí rovnoměrné rozdělení tyče.

6.1.2 Optimalizace veličin a jejich omezení

V této fázi mám vytvořený model v Matlabu. V prostředí Gams, využiji rovnice použité v Matlabu a dodám i jistá omezení týkající se vlastností materiálu. Tyto omezení zavádím proto, abych mohl vyřešit optimalizační model, který extremalizuje požadované veličiny charakterizující tepelné chování v zadaných úlohách. Termofyzikální vlastnosti materiálů ovšem nejdou libovolně měnit, proto je potřeba zadat jakých minimálních a maximálních hodnot mohou nabývat. Při hledání optimálních hodnot narážím na fakt, že k dosažení určité vlastnosti materiálu musím zaplatit cenu, kterou tato modifikaci materiálu stojí. K tomu je potřeba zvolit i odpovídající cenové funkce, vystihující reálnou cenu při tvorbě takto požadovaného materiálu. Při řešení úloh budu optimalizovat součinitele tepelné vodivosti k , hustotu ρ , měrnou tepelnou kapacitu c a měrné latentní teplo L_f .

Rád bych ještě čtenáři připomněl, co určité veličiny značí:

- Součinitel tepelné vodivosti je vlastnost materiálu udávající, jak velký odpor klade těleso při přenosu tepla z jedné části do druhé, čím větších hodnot nabývá, tím rychleji se teplo tělesem šíří.
- Měrná tepelná kapacita c značí, kolik tepelné energie je potřeba tělesu dodat (odebrat), aby se 1 kilogram látky ohřál (ochladil) o 1 kelvin.
- Měrné latentní teplo L_f , označováno taktéž jako měrné skupenské teplo tání (tuhnutí) udává, kolik musím dodat (odebrat) tepelné energie, aby 1 kilogram látky přešel z pevné fáze na kapalnou (kapalná fáze na pevnou) beze změny teploty.
- Hustota ρ je fyzikální veličina, která vyjadřuje hmotnost objemové jednotky látky.
- Teplotní vodivost α je schopnost daného kusu látky, konstrukce (např. zdi), vést teplo. Představuje rychlost, s jakou se teplo šíří z jedné zahřáté části látky do jiných, chladnějších částí.

Pro představu, aby si čtenář ověřil zda vytvořený model pracuje správně zavedu následující poznatky. Čím větší jsou hodnoty měrné tepelné kapacity c a latentního tepla L_f tím větší tepelnou energii můžu akumulovat v rámci tělesa. Pokud ovšem tyto hodnoty nabývají velkých hodnot, je zapotřebí při ohřívání dodat tělesu velké množství energie přičemž, se poloha rozhraní pohybuje pomaleji. Dále se zaměřím na hodnotu součinitele tepelné vodivosti k . Tady požaduji hodnotu co největší, k dosažení co nejrychlejšího šíření tepla tělesem a tím samozřejmě rychlejšího šíření polohy rozhraní fází. Jako poslední materiálovou vlastnost optimalizuji hustotu ρ , která značí kolik kilogramů zaujímá objem tělesa, tedy pokud tato veličina nabývá větších hodnot, můžu předpokládat, že poloha rozhraní fází se bude šířit pomaleji.

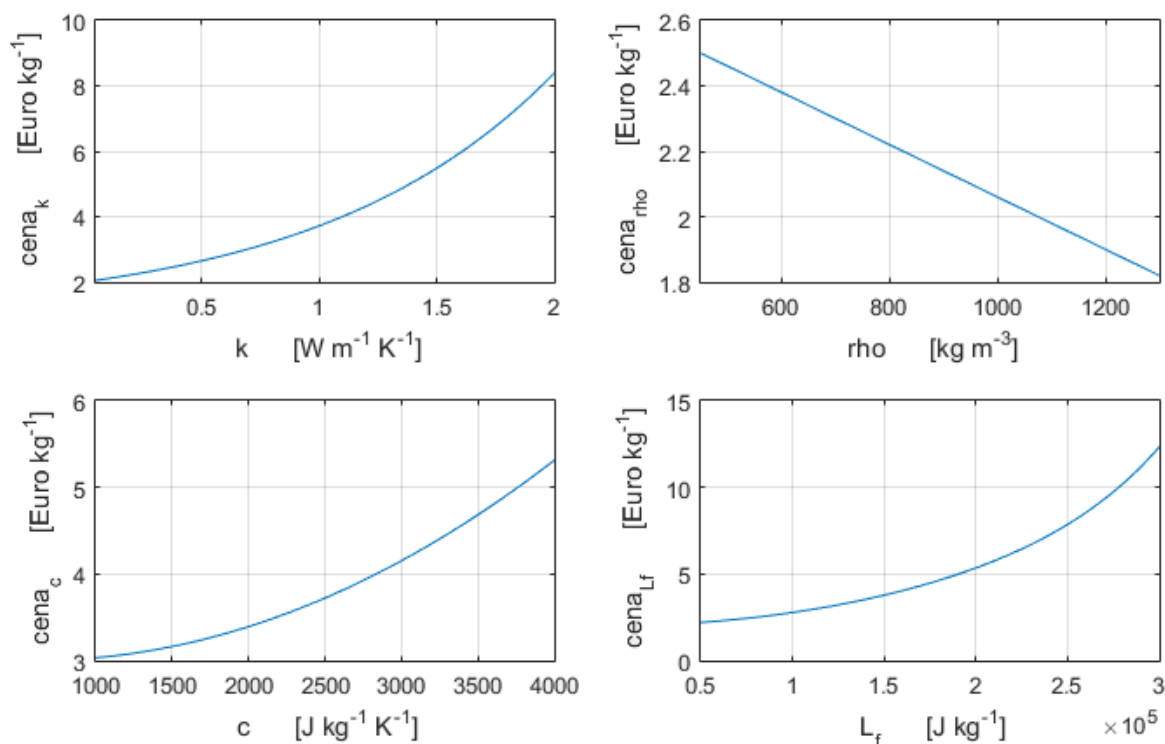
Látku s téměř optimálními vlastnostmi pro konkrétní zadání úloh jsme v dnešní době schopni vytvořit pomocí různých směsí modifikující vlastnosti látky tak, aby se alespoň přiblížila našim požadavkům. Ovšem vhodné vlastnosti materiálu něco stojí a proto je třeba si zavést omezení týkající se ceny za materiál. Z praxe vím, že jestliže budu požadovat, aby veličiny c , L_f a k nabývaly vysokých hodnot, budu muset za takto požadované vlastnosti zaplatit vyšší cenu a tedy cenové funkce budou funkce rostoucí. Pokud modifikuji hustotu materiálu, tak cena je tím vyšší, čím hustota tělesa je menší, tedy funkce bude klesající. Při volbě cenových omezení jsem vycházel z předešlých faktů a zvolil omezení 6.1, která mohou být případně upravena dle parametrů výrobce materiálu.

6. MATEMATICKÉ A OPTIMALIZAČNÍ MODELY A JEJICH VÝSLEDKY

$$\begin{aligned}
 \text{cena}_k &= 1 + e^k & , k \in \langle 0.05, 2 \rangle & \quad (6.1) \\
 \text{cena}_\rho &= -0.0008 \cdot (\rho - 450) + 2.5 & , \rho \in \langle 450, 1300 \rangle & \\
 \text{cena}_c &= 0.0000002 \cdot (c - 600)^2 + 3 & , c \in \langle 1000, 4000 \rangle & \\
 \text{cena}_L &= 0.00000000007 \cdot L^2 + 0.01 \cdot e^{\frac{L}{50000}} + 2 & , L \in \langle 50000, 300000 \rangle & \\
 \text{cena}_{\text{celk}} &\geq \text{cena}_k + \text{cena}_\rho + \text{cena}_c + \text{cena}_L & , \text{cena}_{\text{celk}} \in \langle 9.1, 28.5 \rangle &
 \end{aligned}$$

$\text{Cena}_{\text{celk}}$ se pevně zvolí z intervalu podle uvážení zákazníka a značí, kolik euro za kilogram látky je zákazník ochoten zaplatit pro získání co nejlepších vlastností látky, přičemž v mém případě $\text{cena}_{\text{celk}}$ může nabývat hodnot z intervalu $\langle 9.1, 28.5 \rangle$ [Euro kg⁻¹]. Tento interval značí minimum a maximum ceny, kterou je třeba při výrobě zaplatit za všechny čtyři požadované vlastnosti materiálu. Volbou rozmezí minimálních a maximálních hodnot k, ρ, c a L_f , které tyto veličiny nabývají se interval $\text{cena}_{\text{celk}}$ může libovolně měnit, dle výrobce materiálu.

Grafické znázornění průběhů funkcí pro omezující požadavky uvádím na obrázku 6.1.



Obrázek 6.1: Ceny za vlastnosti materiálu

Je důležité si uvědomit, že řeším úlohu tuhnutí podchlazené tekutiny a tedy rozdíl teploty na počátku T_i a teploty tuhnutí T_m nesmí být příliš velký. Tohoto faktu si taktéž můžu všimnout v tabulce (viz A.1.1), která udává hodnotu parametru λ v závislosti na hodnotě Stefanova čísla. Hodnoty λ jsou poměrně dosti citlivá na zadání vstupních hodnot. Pokud bych zadal velký rozdíl teplot, setkal bych se s problémem, že rovnice pro stanovení parametru λ by neměla řešení. Teplotu podchlazené tekutiny na počátku si zvolím tedy o trochu nižší (v mém případě o 10 [K]) než teplotu tuhnutí.

6.1.3 Optimalizační modely pro Gams a interpretace výsledků

Při vytváření optimalizačních modelů se zaměřím na případy, kdy hledám teplotní vodivost $\alpha(k, \rho, c)$ a měrné latentní teplo L_f takové, aby maximalizovalo, či minimalizovalo požadované vlastnosti při přenosu tepla u konkrétních úloh. Jelikož se jedná o úlohu nelineárního programování (NLP), používám při řešení optimalizačního modelu v Gamsu řešič CONOPT.

Nelineární programování (NLP)[25]:

Nechť $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ a $X \subset \mathbb{R}^n$, navíc symbol $\circ \in \{\leq, \geq, =\}^m$.

Potom

$$\min_{\mathbf{x}} \{f(\mathbf{x}) \mid \mathbf{g}(\mathbf{x}) \circ \mathbf{0}, \mathbf{x} \in X\} \quad (6.2)$$

se nazývá úloha nelineárního programování.

Interpretace výsledků z prostředí Gams:

Při interpretaci výsledků z prostředí Gams, získám každý identifikátor³ proměnné se čtyřmi hodnoty popsanými příponou s tečkou za identifikátorem [26] :

- Lower .LO – určuje dolní mez pro hodnoty proměnné
- Upper .UP – určuje horní mez hodnot proměnné
- Level .L – určuje vlastní hodnotu proměnné
- Marginal .M – určuje marginální, duální hodnotu proměnné odpovídající omezení kladenému na uvedenou proměnnou. Udává tedy rychlost změny účelové funkce při změně daného omezení

³Identifikátory jsou používány jako označení (jména) programů, programových jednotek, návěští, konstant, typů, proměnných, komponent záznamů, procedur a funkcí.

Poznámky k nadcházejícím výpočtům:

Při určení vlastní hodnoty proměnné se v prostředí Gams používá $.L$, kvůli tomuto značení prosím čtenáře, aby respektoval značení měrného latentního tepla a proměnné L , L_f bral jako jedno a to stejné měrné latentní teplo.

Rád bych dále čtenáře upozornil, že v následujících podkapitolách se budu zabývat formulací zadaných úloh, zobrazením výsledků z obou programovacích prostředí a zhodnocení obdržených hodnot. Závěrečné pojednání nad dosaženými výsledky všech problémů a jejich úloh budu interpretovat až v kapitole 6.4, kvůli zpřehlednění každé úlohy na dvojstranu.

K lepší přehlednosti zobrazených hodnot při grafické interpretaci, jsem zmírnil z požadavku na poloprostor a velikost osy x jsem zkrátil. Tento krok nemá žádný vliv na výsledky.

Pro snadnější orientaci v seznamu obrázků jsem si dovolil označit odpovídající obrázky ke každému případu a úloze pomocí značení "Ú.i.j.", kde i značí o který případ se jedná ($i = 1, 2, 3$) a j značí která úloha se v tom případě momentálně řeší ($j = 1, 2, 3, 4$), přičemž značení "Ú" je zkratkou pro slovo úloha.

Ve formulacích využívám i omezení (6.1), což jsou omezení týkající se ceny za materiál a ceny celkové při požadavku, aby se rozhraní fází pohybovalo co nejrychleji, v mém případě si zvolím, že jsem ochoten investovat maximálně $cena_{celk} = 20$ [euro kg^{-1}]. Maximální čas, pro který řeším přenos tepelné energie v rámci systému je t_{max} , teplota podchlazené tekutiny na počátku T_i (v úloze č.2 se jedná o proměnnou), teplota změny fáze T_m jsou libovolně zadané hodnoty, které se dají měnit podle konkrétního zadavatele. Čas $t_{max} = 1500$ [s] je sice krátký časový úsek v oblasti akumulace tepelné energie, ale pro demonstraci funkčnosti modelu je tento čas postačující. Interval parametru λ začíná na hodnotě 0.05, jelikož při uvažování $\lambda = 0$ by při řešení transcendentní rovnice mohlo dojít k chybě při výpočtu v důsledku násobení nulovou hodnotou a celý výpočet by skončil. Toto dodatečné omezení si můžu dovolit i díky tomu, že to výpočet nijak neovlivní a hodnoty parametru λ mi nikdy při vytváření a testování modelu nedosáhly hodnot menších než 0.05.

6.1. JEDNOFÁZOVÝ PROBLÉM: TUHNUTÍ PODCHLAZENÉ TEKUTINY

1. úloha optimalizace:

V úloze se má maximalizovat poloha rozhraní $s(t)$. Tedy abych za požadovaný čas t_{max} dosáhl maximální polohy rozhraní $s(t_{max})$ od počátku 0. Vytvořím optimalizační model využívající již známých faktů a postupů z programování modelu v Matlabu, doplněný o všechna omezení vyskytující se v úloze.

Základní formulace úlohy je tvaru:

$$\begin{aligned}
 \max \quad & s(t_{max}) = 2 \lambda \sqrt{\alpha_l t_{max}} \\
 \text{s.t.} \quad & \alpha_l = \frac{k}{\rho c} \\
 & \lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erfc}(\lambda) = \frac{c(T_m - T_i)}{L_f \sqrt{\pi}} \\
 & + \text{Omezení (6.1)} \\
 & \lambda \in \langle 0.05, 4 \rangle [-], \text{ cena}_{celk} = 20 [\text{Euro kg}^{-1}], \\
 & T_i = 290 [\text{K}], T_m = 300 [\text{K}], t_{max} = 1500 [\text{s}].
 \end{aligned} \tag{6.3}$$

Z obrázku 6.2 vidím, že veličiny při požadavku na maximalizaci polohy rozhraní $s(t_{max})$ nabývají, až na měrnou tepelnou kapacitu c předpokládaných hodnot. Pokud se nad tím ovšem zamyslíme, veličina c nemůže být minimální, jelikož z rovnice (5.14) nebo rovnou z tabulky A.1.1 můžeme zjistit, že je zapotřebí, aby se pravá strana rovnice rovnala nejvýše hodnotě 0.5638 (k tomuto faktu příkládám rovněž i odpovídající grafické znázornění viz A.1.2). Tedy při rozdílu teplot $\Delta T = 10$ [K] a hodnotě $L_f = 50000$, [J kg⁻¹] je potřeba, aby byla měrná tepelná kapacita c dostatečně velká, aby parametr λ byl co největší, ale zároveň nesmí být $\frac{St_e}{\sqrt{\pi}} \leq 0.5638$. Dále bych upozornil, že nebyla dosažena maximální cena za materiál $\text{cena}_{celk} \leq 20$ [Euro kg⁻¹] a pokud by se dalo při výrobě zvětšit rozmezí hodnot materiálových vlastností, mohlo by se dosáhnout ještě větší polohy rozhraní $s(t_{max})$.

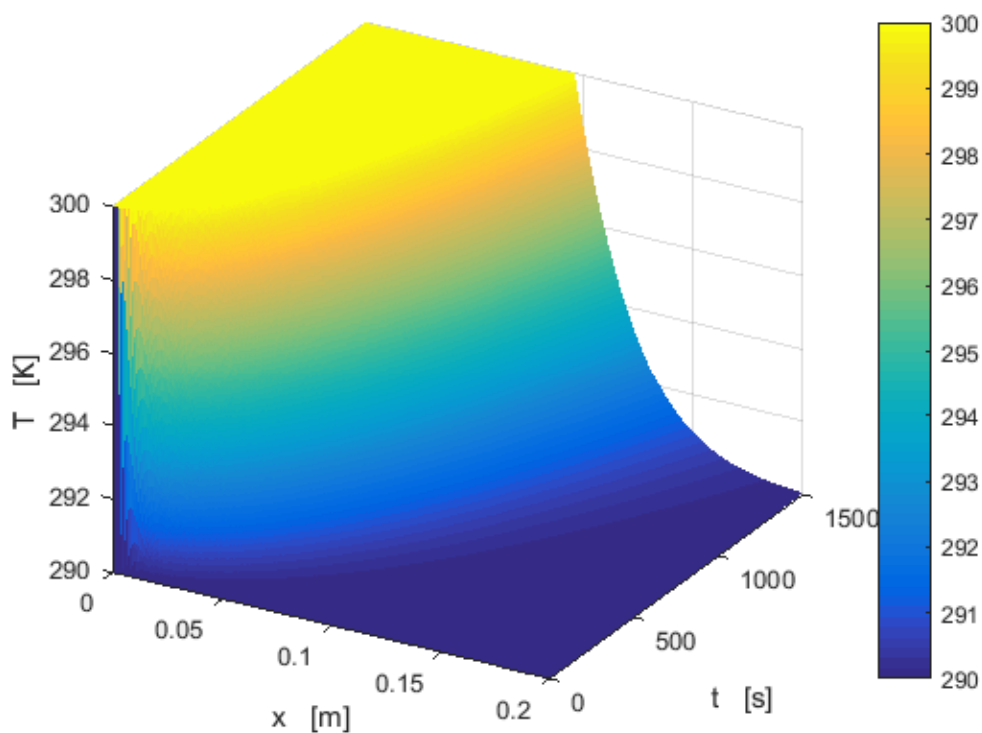
	LOWER	LEVEL	UPPER	MARGINAL
VAR k	0.050	2.000	2.000	0.024
VAR rho	450.000	450.000	1300.000	-1.066E-4
VAR c	1000.000	4000.000	4000.000	6.5531E-5
VAR L_f	50000.000	50000.000	3.0000E+5	-6.202E-6
VAR kcena	-INF	8.389	+INF	.
VAR rhocena	-INF	2.500	+INF	.
VAR ccena	-INF	5.312	+INF	.
VAR L_fcena	-INF	2.195	+INF	.

VARIABLE lambda.L	=	1.17522	Parametr
VARIABLE alpha.L	=	1.111111E-6	Teplotní vodivost
VARIABLE s.L	=	0.09596	Poloha rozhraní
EQUATION cenacelk.L	=	18.39648	Omezení celkové ceny

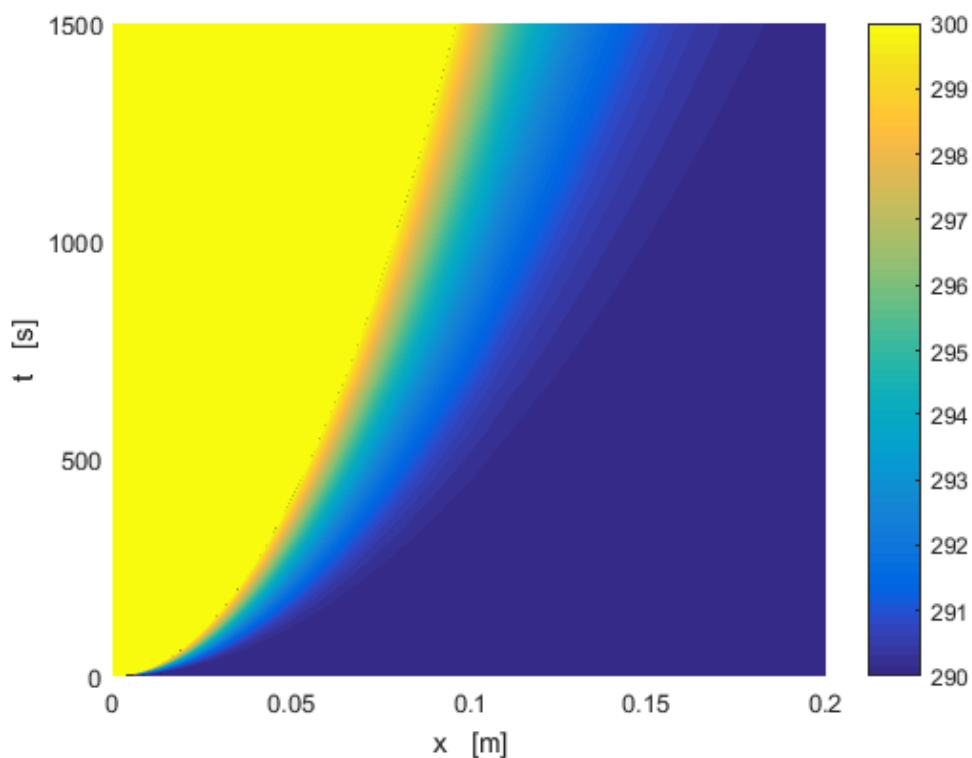
Obrázek 6.2: Ú.1.1: Výsledné optimální hodnoty z prostředí Gams pro čas t_{max}

Tím jsem dosáhl optimálních výsledků při požadovaných omezení. Tyto optimální hodnoty načtu do prostředí Matlab, kde získám grafické výsledky řešení, jak se mění

6. MATEMATICKÉ A OPTIMALIZAČNÍ MODELY A JEJICH VÝSLEDKY



Obrázek 6.3: Ú.1.1: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 3D



Obrázek 6.4: Ú.1.1: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 2D

poloha rozhraní a teplotní rozložení v celém médiu v průběhu časového úseku. Grafické výsledky této úlohy jsou zobrazeny na obrázcích 6.3 a 6.4.

6.1. JEDNOFÁZOVÝ PROBLÉM: TUHNUTÍ PODCHLAZENÉ TEKUTINY

2. úloha optimalizace:

Pro tento případ, hledám co nejmenší teplotu podchlazení T_i , tedy maximalizuji teplotu T_i podchlazené kapaliny, na které je látka ustálena v čase $t = 0$ po celé své délce, přičemž má být dosaženo požadované polohy rozhraní fází s_{poz} za čas t_{max} .

Formulace úlohy:

$$\begin{aligned}
 &max && T_i && (6.4) \\
 &s.t. && \alpha_l = \frac{k}{\rho c} \\
 &&& \lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erfc}(\lambda) = \frac{c(T_m - T_i)}{L_f \sqrt{\pi}} \\
 &&& s_{poz} = 0.02 \text{ [m]} \\
 &&& + \text{Omezení (6.1)} \\
 &&& \lambda \in \langle 0.05, 4 \rangle [-], \text{ cena}_{celk} = 20 \text{ [Euro kg}^{-1}\text{]}, \\
 &&& T_i \in \langle 275, 295 \rangle \text{ [K]}, T_m = 300 \text{ [K]}, t_{max} = 1500 \text{ [s]}.
 \end{aligned}$$

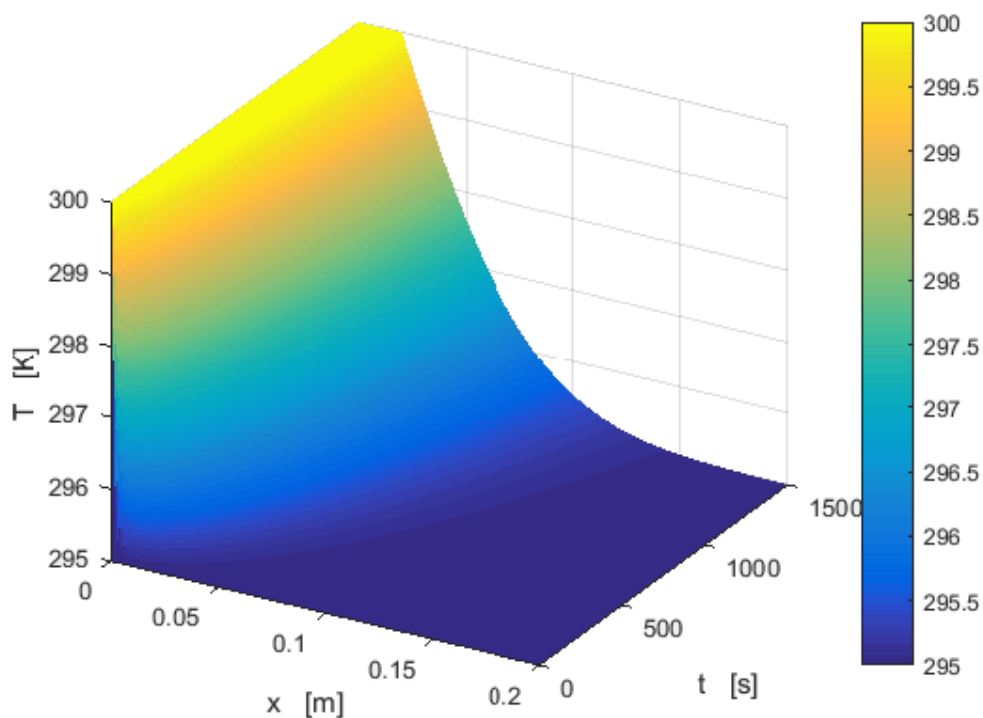
Na obrázku 6.5 opět vystupují výsledné hodnoty úlohy při požadavku na maximalizaci teploty T_i a dosažení polohy rozhraní s_{poz} . Oproti předcházející úloze se výsledky jeví více zajímavější. Teplota na počátku T_i dosáhla v tomto případě maximální možné hodnoty 295 [K] a k tomu, aby byl dodržen i požadavek na rozhraní $s_{poz} = 0.02$ [m] je nutno snížit rychlost změny polohy rozhraní. Z tabulky A.1.1 víme, že malá změna Stefanova čísla zajistí velké změny parametru λ , na kterém je závislá změna polohy rozhraní (5.9), stejně tak i snížení součinitele tepelné vodivosti ovlivní výslednou hodnotu teplotní vodivosti $\alpha(k, \rho, c)$, na které rovněž závisí změna polohy rozhraní fází. Maximální ceny za materiál

	LOWER	LEVEL	UPPER	MARGINAL
VAR k	0.050	1.843	2.000	EPS
VAR rho	450.000	450.000	1300.000	EPS
VAR c	1000.000	3825.743	4000.000	EPS
VAR L_f	50000.000	56117.534	3.0000E+5	.
VAR kcena	-INF	7.317	+INF	.
VAR rhocena	-INF	2.500	+INF	.
VAR ccena	-INF	5.081	+INF	.
VAR L_fcena	-INF	2.243	+INF	.
<hr/>				
VARIABLE lambda.L	=	0.24953	Parametr	
VARIABLE alpha.L	=	1.070649E-6	Teplotní vodivost	
VARIABLE s.L	=	0.02000	Poloha rozhraní	
VARIABLE Ti1.L	=	295.00000	Teplota na počátku v celém médiu	
EQUATION cenacelk.L	=	17.14062	Omezení celkové ceny	

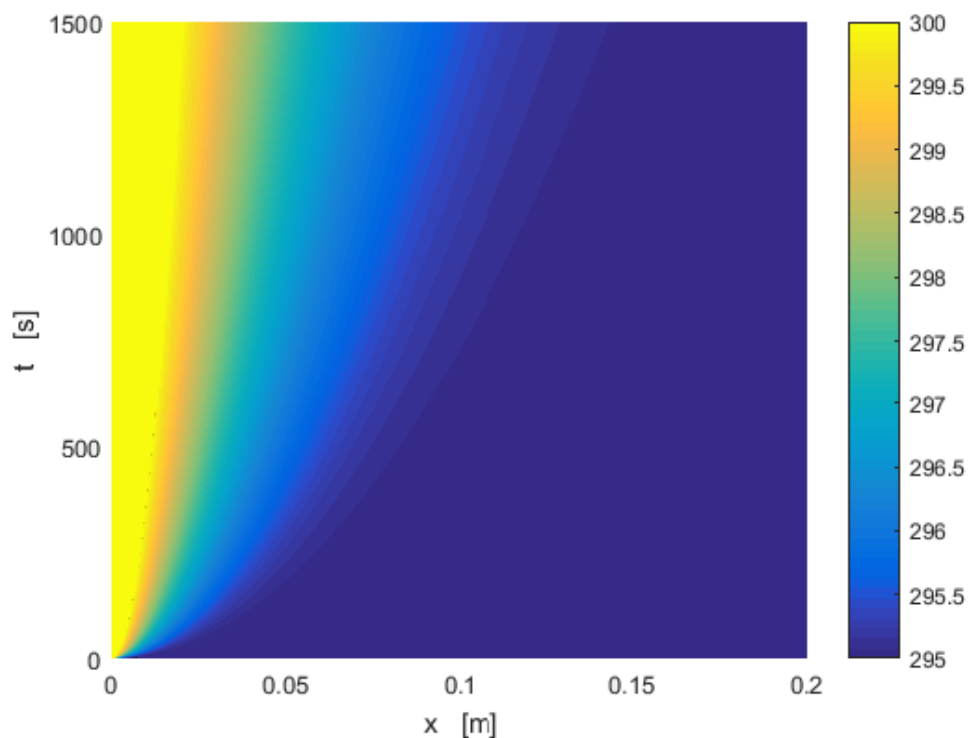
Obrázek 6.5: Ú.1.2: Výsledné optimální hodnoty z prostředí Gams pro čas t_{max}

nebylo v tomto případě taktéž dosaženo, což je samozřejmě pro zadavatele příznivý výsledek. Teplotní vodivost se oproti předešlé úloze změnila o velmi malou hodnotu a tím se potvrzuje, že hlavní člen ovlivňující rychlost změny polohy rozhraní je parametr λ .

6. MATEMATICKÉ A OPTIMALIZAČNÍ MODELY A JEJICH VÝSLEDKY



Obrázek 6.6: Ú.1.2: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 3D



Obrázek 6.7: Ú.1.2: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 2D

Tím jsem dosáhl optimálních výsledků při požadovaných omezení a načtením hodnot do Matlabu získávám grafické výsledky řešení viz obrázky 6.6 a 6.7.

6.2 Jednofázový problém: Tání pevné látky o teplotě změny fáze

6.2.1 Tvorba základního modelu pro Matlab

Tak jako v úloze tuhnutí podchlazené tekutiny se budu ve výpočtu odkazovat na rovnice podobného typu: (5.26), (5.28) a (5.31). Postupuji jako v předchozím případě. Parametr λ získám z rovnice (5.31), která vznikla dosazením rovnic (5.28) a (5.26) do rovnice rozhraní (5.22). Řešení rovnice (5.31) získám pomocí Newtonovy metody.

$$y_k = \lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda) - \frac{c(T_0 - T_m)}{L\sqrt{\pi}}$$

Následně ji zderivuji a dostávám dosti podobnou rovnici jako v předchozí úloze

$$y'_k = e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda) + 2\lambda^2 e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda) + \frac{2\lambda}{\sqrt{\pi}},$$

opět použitím vzorce pro aproximaci kořene (5.17) získávám parametr λ .

```

while rozdil>tolerance
y=lambda*exp(lambda^2)*erf(lambda)-((c*(T0 - Tm))/(L_f*sqrt(pi)));
y_der=(exp(lambda^2)*erf(lambda) + 2*lambda^2*exp(lambda^2)*erf(lambda)...
+ 2*lambda/sqrt(pi));
lambda_new=lambda-(y/y_der);
rozdil= abs(lambda_new - lambda);
lambda= lambda_new;
end

```

Jakmile znám parametr λ , spočtu polohu rozhraní fází $s(t(i))$ z rovnice (5.26). Z rovnice (5.28) následně zjistím teplotní rozložení v kapalně fázi $T_l(x(j), t(i))$.

```

for i=1:M
st(i) = 2*lambda*sqrt(alphal*t(i));
for j=1:M2
if st(i) > x(j)
Tl(i,j)=T0(i,j)+((Tm(i,j)-T0(i,j))...
*erf(x(j)/(2*(alphal*t(i))^(1/2))))/(erf(lambda));
else
Ts(i,j)=Tm(i,j);
end
T(i,j)=Tl(i,j)+Ts(i,j);
end
end
end

```

Tedy model pro zobrazení grafických výsledků je připraven a začnu optimalizovat hodnoty pro dané případy. Řešení optimalizačních problémů bude probíhat v prostředí Gams.

6.2.2 Optimalizační modely pro Gams a interpretace výsledků

Při optimalizaci se zaměřím na stejné případy, kdy hledám teplotní vodivost $\alpha(k, \rho, c)$ a měrné latentní teplo L_f takové, aby nám maximalizovalo, či minimalizovalo požadované vlastnosti charakterizující přenos tepla. Kromě řešení dvou podobných úloh jako v případě tuhnutí podchlazené tekutiny viz kapitola 6.1. zavedu další dvě úlohy týkající se tepelného toku a akumulace tepla. Používám opět řešič CONOPT, jelikož v úloze pracuji s nelineárními rovnicemi, či omezeními (NLP).

V úloze tání pevné látky o teplotě změny fáze počítám s parametry:

- Plocha průřezu: $S = 1 \text{ [m}^2\text{]}$
- Pevná látka teploty změny fáze (konst. v celém médiu pro $t = 0$): $T_m = 300 \text{ [K]}$
- Teplota na kterou se médium začne ohřívat pro $x = 0, t > 0$: $T_0 = 340 \text{ [K]}$
- Čas maximální: $t_{max} = 1500 \text{ [s]}$

Proměnné veličiny, jejich omezení a další hodnoty, které budu v modelu používat čerpám z podkapitoly 6.1.2.

Pokud má čtenář k dispozici i soubory z programovacích prostředí k této práci, může tento problém tání pevné látky o teplotě změny fáze najít pod názvy:

Matlab: SingleMelting2.m a Omezeniceny.m

Gams: SingleMelting2.gms.

6.2. JEDNOFÁZOVÝ PROBLÉM: TÁNÍ PEVNÉ LÁTKY O TEPLOTĚ ZMĚNY FÁZE

1. úloha optimalizace:

Zadání této úlohy zní: Najdi materiálové charakteristiky $\alpha(k, \rho, c)$ a L_f takové, které maximalizují polohu rozhraní $s(t)$, při daných omezení 6.1. Tedy abych za čas t_{max} dosáhl maximální polohy rozhraní $s(t_{max})$ od počátku 0.

Formulace úlohy:

$$\begin{aligned}
 \max \quad & s(t_{max}) = 2\lambda\sqrt{\alpha_l t_{max}} & (6.5) \\
 \text{s.t.} \quad & \alpha_l = \frac{k}{\rho c} \\
 & \lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda) = \frac{c(T_0 - T_m)}{L_f \sqrt{\pi}} \\
 & + \text{Omezení (6.1)} \\
 & \lambda \in \langle 0.05, 4 \rangle [-], \text{ cena}_{celk} = 20 [\text{Euro kg}^{-1}], \\
 & T_0 = 340 [\text{K}], T_m = 300 [\text{K}], t_{max} = 1500 [\text{s}].
 \end{aligned}$$

Obrázek 6.8 uvádí optimální hodnoty veličin při požadavku na maximalizaci polohy rozhraní $s(t)$ za čas t_{max} . Optimální výsledky nabývají hodnot očekávaných. Z tabulky A.2.1 lze zjistit, že parametr λ není v tomto případě tak extrémně závislý na Stefanově čísle. Tím pádem je možné nechat měrnou tepelnou kapacitu na minimu a vylepšit tím teplotní vodivost $\alpha(k, \rho, c)$, která výrazněji ovlivní změnu polohy rozhraní fází. Všechny materiálové vlastnosti ovlivňující přenos tepla dosahují mezních hodnot a z toho čtenáře nepřekvapí, že ani cena za výrobu takového materiálu nenabude maximální stanovené ceny. Z marginálních hodnot vidíme, že při zvětšení intervalů omezení na materiálové charakteristiky je možno dosáhnout lepšího výsledku na maximální změnu polohy rozhraní.

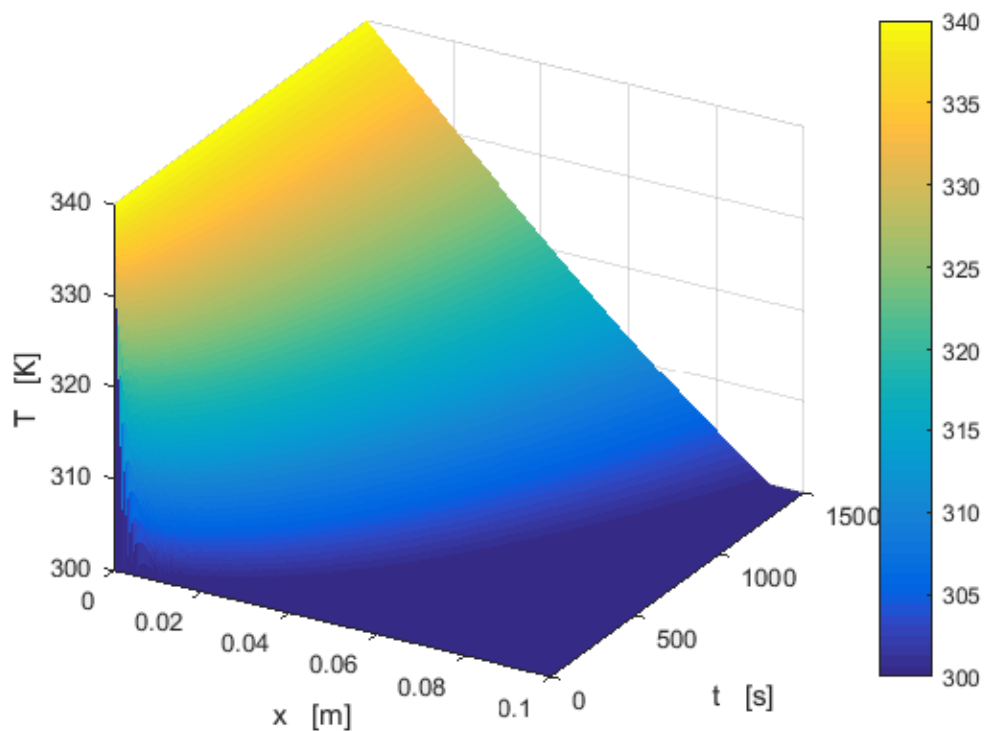
	LOWER	LEVEL	UPPER	MARGINAL
VAR k	0.050	2.000	2.000	0.023
VAR rho	450.000	450.000	1300.000	-1.029E-4
VAR c	1000.000	1000.000	4000.000	-8.445E-6
VAR L_f	50000.000	50000.000	3.0000E+5	-7.569E-7
VAR kcena	-INF	8.389	+INF	.
VAR rhocena	-INF	2.500	+INF	.
VAR ccena	-INF	3.032	+INF	.
VAR L_fcena	-INF	2.202	+INF	.

VARIABLE lambda.L	=	0.56693	Parametr
VARIABLE alpha.L	=	4.444444E-6	Teplotní vodivost
VARIABLE s.L	=	0.09258	Poloha rozhraní
EQUATION cenacelk.L	=	16.12324	Omezení celkové ceny

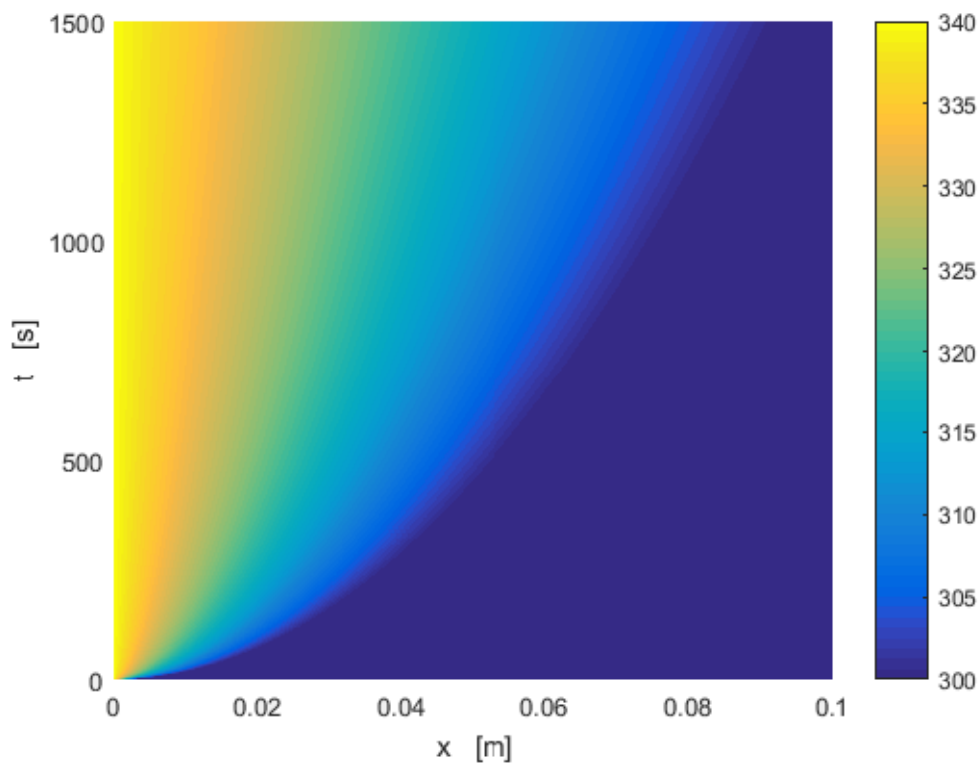
Obrázek 6.8: Ú.2.1: Výsledné optimální hodnoty z prostředí Gams pro čas t_{max}

Optimální výsledky opět načtu v prostředí Matlab a získávám grafický průběh úlohy v prostoru (x, t, T) , viz obrázek 6.9 a v rovině (x, t) obrázek 6.10.

6. MATEMATICKÉ A OPTIMALIZAČNÍ MODELY A JEJICH VÝSLEDKY



Obrázek 6.9: Ú.2.1: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 3D



Obrázek 6.10: Ú.2.1: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 2D

6.2. JEDNOFÁZOVÝ PROBLÉM: TÁNÍ PEVNÉ LÁTKY O TEPLITĚ ZMĚNY FÁZE

2. úloha optimalizace:

V této úloze hledám, co nejmenší teplotu T_0 , na kterou se začne ohřívat pevná látka teploty T_m , ustálená na této teplotě v čase $t = 0$ po celé své délce, přičemž má být dosaženo požadované polohy rozhraní fází s_{poz} za čas t_{max} .

Formulace úlohy:

$$\begin{aligned}
 \min \quad & T_0 \\
 \text{s.t.} \quad & \alpha_l = \frac{k}{\rho c} \\
 & \lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda) = \frac{c(T_0 - T_m)}{L_f \sqrt{\pi}} \\
 & s_{poz} = 0.02 \text{ [m]} \\
 & + \text{Omezení (6.1)} \\
 & \lambda \in \langle 0.05, 4 \rangle [-], \text{ cena}_{celk} = 20 \text{ [Euro kg}^{-1}\text{]}, \\
 & T_0 \in \langle 305, 340 \rangle \text{ [K]}, T_m = 300 \text{ [K]}, t_{max} = 1500 \text{ [s]}.
 \end{aligned} \tag{6.6}$$

Na obrázku 6.11 vystupují výsledné hodnoty veličin při požadavku minimalizace teploty T_0 a dosažení polohy rozhraní s_{poz} za čas t_{max} . Bylo dosaženo minimální teploty T_0 a poloha rozhraní s_{poz} byla taktéž splněna. Součinitel tepelné vodivosti nabývá oproti úloze 6.2.2 menší hodnoty, aby zajistil snížení rychlosti změny polohy rozhraní, velikost měrného latentního tepla L_f je zvýšena a nepatrně i hustota ρ , čímž se taktéž zmenší změna $s(t)$. Stefanovo číslo je při rozdílu teplot $\Delta T = 5 \text{ [K]}$ dosti ovlivněno velkým latentním teplem L_f a parametr λ tak dosáhne nízké hodnoty, oproti úloze 6.2.2 je 3,5 krát menší a teplotní vodivost je téměř poloviční. Cena za materiál opět nedosahuje maximální hodnoty a tím pádem můžeme být spokojeni za poměrně nízké náklady na splnění požadavků této úlohy.

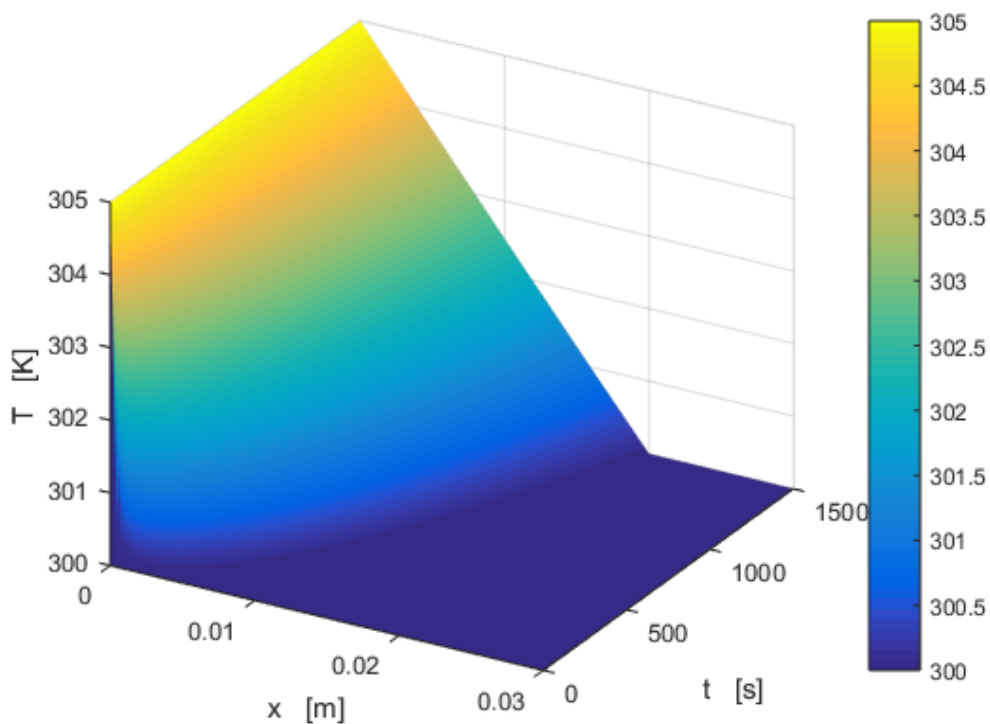
	LOWER	LEVEL	UPPER	MARGINAL
VAR k	0.050	1.229	2.000	EPS
VAR rho	450.000	506.129	1300.000	EPS
VAR c	1000.000	1000.000	4000.000	EPS
VAR L_f	50000.000	89418.355	3.0000E+5	.
VAR kcena	-INF	4.418	+INF	.
VAR rhocena	-INF	2.455	+INF	.
VAR ccena	-INF	3.032	+INF	.
VAR L_fcena	-INF	2.619	+INF	.

VARIABLE lambda.L	=	0.16568	Parametr
VARIABLE alpha.L	=	2.428610E-6	Teplotní vodivost
VARIABLE s.L	=	0.02000	Poloha rozhraní
VARIABLE T01.L	=	305.00000	Teplota na kterou se okraj ohřeje
EQUATION cenacelk.L	=	12.52505	Omezení celkové ceny

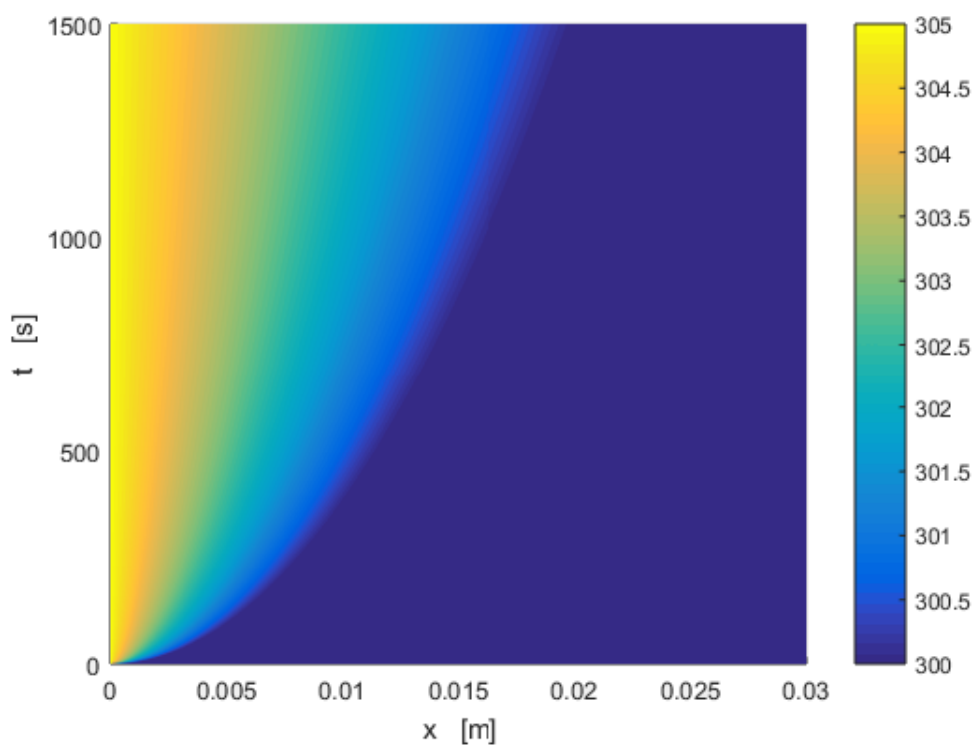
Obrázek 6.11: Ú.2.2: Výsledné optimální hodnoty z prostředí Gams pro čas t_{max}

Načtením optimálních hodnot do Matlabu získávám grafické výsledky řešení viz obrázky 6.12 a 6.13.

6. MATEMATICKÉ A OPTIMALIZAČNÍ MODELY A JEJICH VÝSLEDKY



Obrázek 6.12: Ú.2.2: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 3D



Obrázek 6.13: Ú.2.2: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 2D

6.2. JEDNOFÁZOVÝ PROBLÉM: TÁNÍ PEVNÉ LÁTKY O TEPLITĚ ZMĚNY FÁZE

3. úloha optimalizace:

Hledám materiálové charakteristiky takové, které maximalizují průměrný tepelný tok \dot{Q}_{prum} na okraji povrchu tělesa. Požadují zároveň, aby poloha rozhraní fází na konci časového úseku t_{max} byla s_{poz} . Formulace úlohy:

$$\begin{aligned}
 \max \quad & \dot{Q}_{prum} = \frac{Q}{t_{max}} \\
 \text{s.t.} \quad & Q = - \sum_{t=1}^{t_{max}} k S \frac{T_m - T_0}{\text{erf}(\lambda)} \frac{e^{-x_{surf}^2/(4\alpha_l t)}}{\sqrt{\pi \alpha_l t}} \\
 & \alpha_l = \frac{k}{\rho c}, \quad s_{poz} = 0.02 \text{ [m]} \\
 & \lambda e^{\lambda^2} \text{erf}(\lambda) = \frac{c(T_0 - T_m)}{L_f \sqrt{\pi}} \\
 & \quad \quad \quad + \text{Omezení (6.1)} \\
 & \lambda \in \langle 0.05, 4 \rangle [-], \quad \text{cena}_{celk} = 20 \text{ [Euro kg}^{-1}\text{]}, \quad S = 1 \text{ [m}^2\text{]}, \\
 & T_0 = 340 \text{ [K]}, \quad T_m = 300 \text{ [K]}, \quad t_{max} = 1500 \text{ [s]}.
 \end{aligned} \tag{6.7}$$

Obrázek 6.14 znázorňuje výsledné optimální hodnoty veličin při požadavku maximalizace průměrného tepelného toku \dot{Q}_{prum} a dosažení polohy rozhraní s_{poz} za čas t_{max} . Požadavek $s_{poz} = 0.02$ [m] způsobí zvýšení veličin zaručující větší akumulaci tepla na tak malém objemu, tedy hustota ρ dosáhla maximum, měrná tepelná kapacita c téměř taky a měrné latentní teplo L_f nabývá taktéž vysokých hodnot. Cena za materiál je nyní maximální možná a při možnosti větší investice na výrobu ideálního PCM by se dalo dosáhnout ještě většího tepelného toku do objemu.

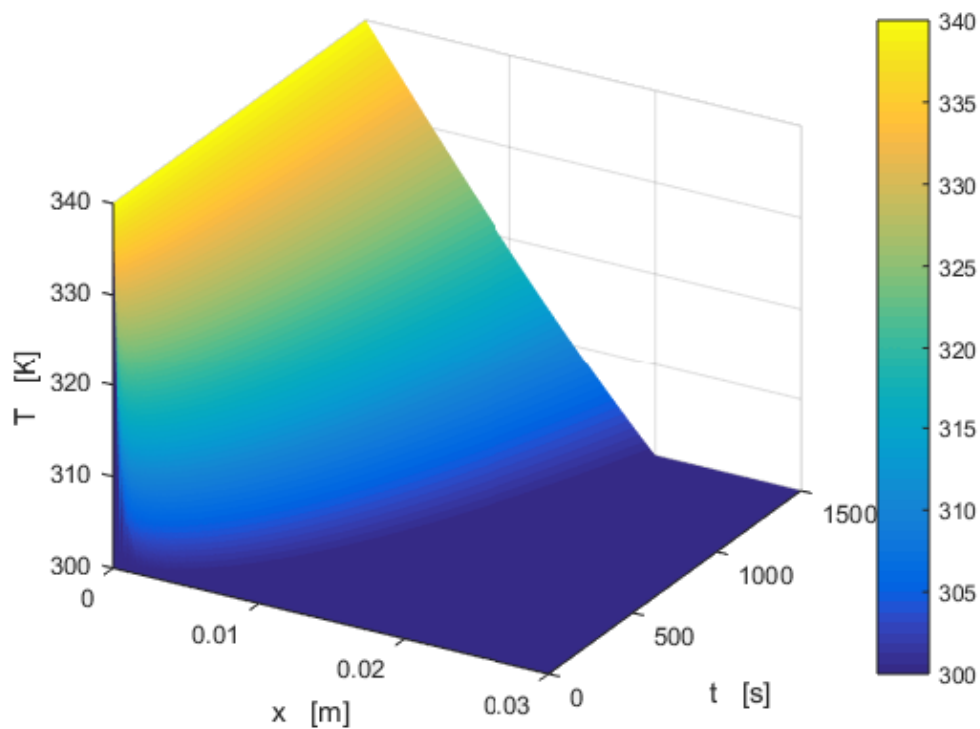
	LOWER	LEVEL	UPPER	MARGINAL
VAR k	0.050	1.317	2.000	.
VAR rho	450.000	1300.000	1300.000	73.418
VAR c	1000.000	3979.644	4000.000	EPS
VAR L_f	50000.000	2.5456E+5	3.0000E+5	.
VAR kcena	-INF	4.734	+INF	.
VAR rhocena	-INF	1.820	+INF	.
VAR ccena	-INF	5.284	+INF	.
VAR L_fcena	-INF	8.162	+INF	.

VARIABLE lambda.L	=	0.51167	Parametr
VARIABLE alpha.L	=	2.546402E-7	Teplotní vodivost
VARIABLE s.L	=	0.02000	Poloha rozhraní
VARIABLE Qprum.L	=	5625.77452	Průměrný tepelný tok po čas t_max
EQUATION cenacelk.L	=	20.00000	Omezení celkové ceny

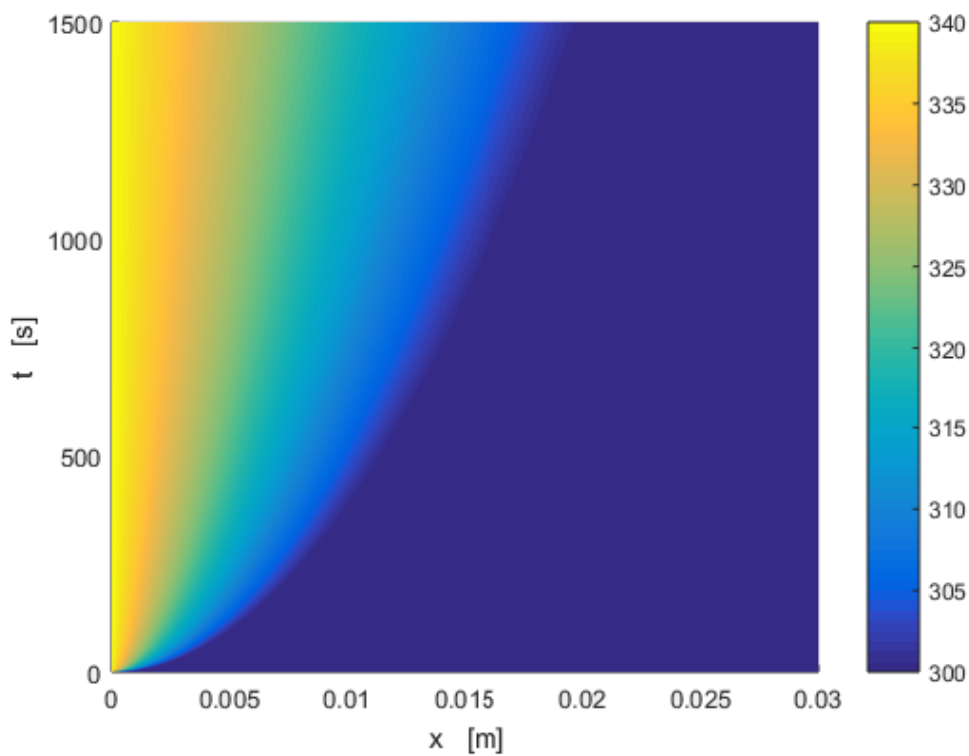
Obrázek 6.14: Ú.2.3: Výsledné optimální hodnoty z prostředí Gams pro čas t_{max}

Grafický průběh úlohy z prostředí Matlab je v prostoru (x, t, T) zobrazen na obrázku 6.15 a v rovině (x, t) na obrázku 6.16.

6. MATEMATICKÉ A OPTIMALIZAČNÍ MODELY A JEJICH VÝSLEDKY



Obrázek 6.15: Ú.2.3: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 3D



Obrázek 6.16: Ú.2.3: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 2D

6.2. JEDNOFÁZOVÝ PROBLÉM: TÁNÍ PEVNÉ LÁTKY O TEPLOTĚ ZMĚNY FÁZE

4. úloha optimalizace:

V této úloze hledám co nejmenší celkovou cenu, kterou musím zaplatit za vlastnosti materiálu (k, c, ρ, L_f) tak, aby tepelná energie uchovaná za čas t_{max} byla rovna požadované akumulaci Q_{poz} při využití maximálně s_{max} materiálu.

Formulace úlohy:

$$\min \quad \text{cena}_{celk} = \text{cena}_k + \text{cena}_\rho + \text{cena}_c + \text{cena}_L \quad (6.8)$$

$$\text{s.t.} \quad Q = - \sum_{t=1}^{t_{max}} k S \frac{T_m - T_0}{\text{erf}(\lambda)} \frac{e^{-x_{surf}^2/(4\alpha_l t)}}{\sqrt{\pi \alpha_l t}}$$

$$Q = Q_{poz}, \quad s(t_{max}) \leq s_{max}$$

$$\alpha_l = \frac{k}{\rho c}$$

$$\lambda e^{\lambda^2} \text{erf}(\lambda) = \frac{c(T_0 - T_m)}{L_f \sqrt{\pi}}$$

+ Omezení (6.1)

$$\lambda \in (0.05, 4) [-], \quad Q_{poz} = 7 [\text{MJ}], \quad s_{max} = 0.02 [\text{m}],$$

$$T_0 = 340 [\text{K}], \quad T_m = 300 [\text{K}], \quad t_{max} = 1500 [\text{s}], \quad S = 1 [\text{m}^2].$$

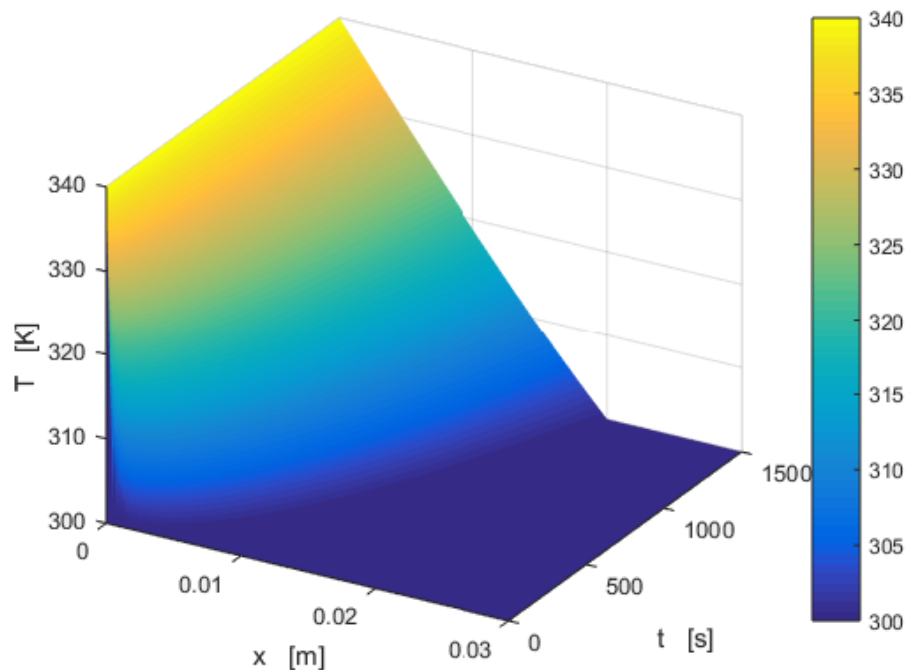
Optimální hodnoty veličin při požadavku na minimalizaci ceny cena_{celk} za náklady při výrobě PCM a při dodržení všech omezení jsou zobrazeny na obrázku 6.17. Oproti předešlé úloze 6.2.2 si pozorný čtenář všimne, že \dot{Q}_{prum} je nyní menší a může podotknout, že v předešlé úloze jsme dosáhli lepší akumulace. To nás, ale v této úloze ovšem nezajímá, jelikož požadujeme minimální celkovou cenu. Bylo dosaženo rozhraní $s_{max} = 0.02 [\text{m}]$ i akumulace $Q_{poz} = 7 [\text{MJ}]$. Cena za materiál je $\text{cena}_{celk} = 16.03 [\text{Euro kg}^{-1}]$ a zákazník může být spokojen, že nemusí platit maximální cenu, kterou byl ochotný zaplatit.

	LOWER	LEVEL	UPPER	MARGINAL
VAR k	0.050	1.103	2.000	.
VAR rho	450.000	1300.000	1300.000	-0.011
VAR c	1000.000	2943.151	4000.000	EPS
VAR L_f	50000.000	2.1773E+5	3.0000E+5	.
VAR kcena	-INF	4.014	+INF	.
VAR rhocena	-INF	1.820	+INF	.
VAR ccena	-INF	4.098	+INF	.
VAR L_fcena	-INF	6.097	+INF	.

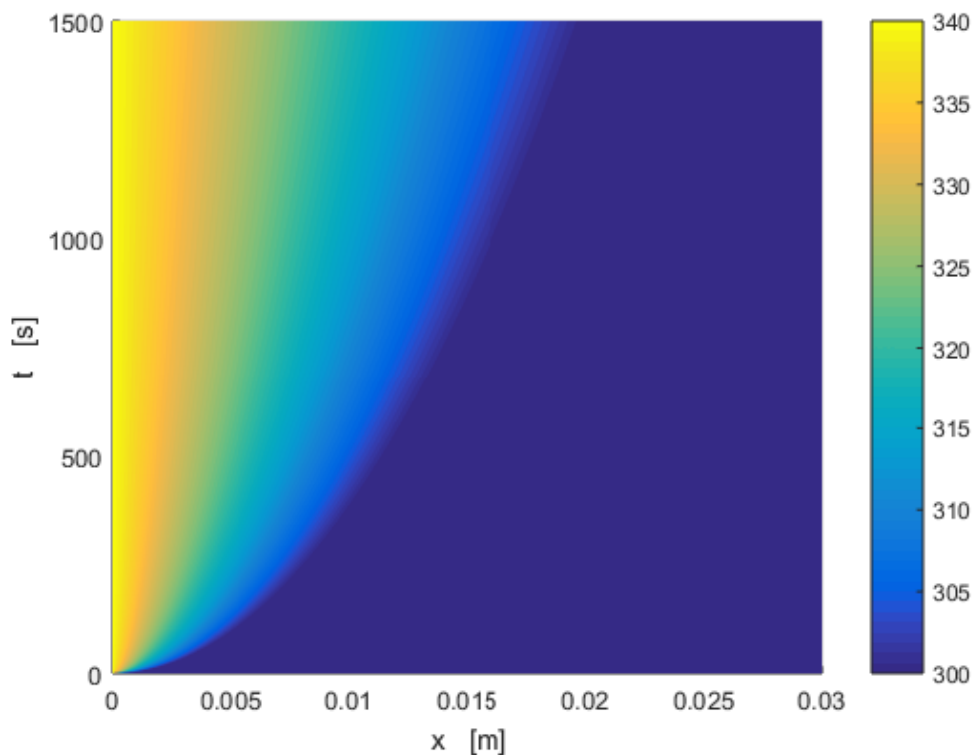
VARIABLE lambda.L	=	0.48083	Parametr
VARIABLE alpha.L	=	2.883569E-7	Teplotní vodivost
VARIABLE s.L	=	0.02000	Poloha rozhraní
VARIABLE Qakum.L	=	7.000000E+6	Akumulovaná tepelná energie [J]
VARIABLE Qprum.L	=	4666.66667	Průměrný tepelný tok po čas t_max
VARIABLE Cenacelkmin.L	=	16.02873	Minimální cena za materiálové vlastnosti

Obrázek 6.17: Ú.2.4: Výsledné optimální hodnoty z prostředí Gams pro čas t_{max}

6. MATEMATICKÉ A OPTIMALIZAČNÍ MODELY A JEJICH VÝSLEDKY



Obrázek 6.18: Ú.2.4: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 3D



Obrázek 6.19: Ú.2.4: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 2D

Z Matlabu získávám grafický průběh úlohy v prostoru (x, t, T) obrázek 6.18 a v rovině (x, t) obrázek 6.19.

6.3 Dvofázový problém: Tuhnutí

6.3.1 Tvorba základního modelu pro Matlab

U dvofázové úlohy se budu zabývat rovnicemi: (5.42), (5.44), (5.45) a (5.46). Postup probíhá obdobně. Pouze si musím dát pozor, že se jedná o dvofázový problém, při kterém jsou teploty neznámé v obou fázích a nejedná se o případ, kdy je jedna fáze konstantní teploty. Parametr λ získám z rovnice (5.46), která vznikla dosazením rovnic (5.44), (5.42) a (5.45) do rovnice rozhraní (5.38). Řešení rovnice (5.46) získám pomocí Newtonovy metody.

$$y_k = \frac{e^{-\lambda^2}}{\operatorname{erf}(\lambda)} + \frac{k_l}{k_s} \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_l} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{T_m - T_i}{T_m - T_0} \frac{e^{-\lambda^2(\alpha_s/\alpha_l)}}{\operatorname{erfc} \left[\lambda(\alpha_s/\alpha_l)^{\frac{1}{2}} \right]} = \frac{\lambda L \sqrt{\pi}}{C_s(T_m - T_0)}.$$

Rovnici zderivuji, tentokrát se jedná o poměrně složitější derivaci než v předchozích dvou případech

$$y'_k = \frac{L\sqrt{\pi}}{c_s(T_0 - T_m)} - \frac{2e^{-\lambda^2}}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}^2(\lambda)} - \frac{2\lambda e^{-\lambda^2}}{\operatorname{erf}(\lambda)} + \\ + \frac{2\alpha_s k_l e^{(-\lambda^2 \frac{\alpha_s}{\alpha_l})} (T_i - T_m)}{\sqrt{\pi} \alpha_l k_s \operatorname{erfc}^2(\lambda \sqrt{\frac{\alpha_s}{\alpha_l}}) (T_0 - T_m)} - \frac{2\alpha_s k_l \lambda e^{-\lambda^2 \frac{\alpha_s}{\alpha_l}} (T_i - T_m) \sqrt{\frac{\alpha_s}{\alpha_l}}}{\alpha_l k_s \operatorname{erfc}(\lambda \sqrt{\frac{\alpha_s}{\alpha_l}}) (T_0 - T_m)}.$$

Použitím vzorce

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k - \frac{y_k}{y'_k}$$

Získávám hodnotu parametru λ .

Pomocí λ , si spočtu polohu rozhraní fází $s(t(i))$ z rovnice (5.42) pro každý časový krok.

Jakmile znám polohu rozhraní $s(t)$, můžu zjistit teplotní rozhraní v pevné fázi $T_s(x(j), t(i))$ i v kapalně fázi $T_l(x(j), t(i))$.

Matematický model je hotový a můžu se pustit do optimalizace veličin charakterizující přenos tepla u daných případů. V případě dvofázového problému tuhnutí počítám s parametry:

- Plocha průřezu: $S = 1 \text{ [m}^2\text{]}$
- Teplota kapaliny na počátku (konstantní v celém médiu pro $t = 0$): $T_i = 340 \text{ [K]}$
- Teplota tuhnutí: $T_m = 300 \text{ [K]}$
- Teplota na kterou se médium začne ochlazovat pro $x = 0, t > 0$: $T_0 = 270 \text{ [K]}$
- Čas maximální: $t_{max} = 1500 \text{ [s]}$

Předtím, než se dostanu do prostředí Gams pro získání optimálních hodnot pro dané případy, si mírně upravím omezení vystupující v podkapitole 6.1.2. Tyto modifikované omezení uvádím v podkapitole 6.3.2.

Pokud má čtenář k dispozici i soubory z programovacích prostředí k této práci, může tento dvofázový problém tuhnutí najít pod názvy

Matlab: TwoSolid3.m a Omezenicenym.m

Gams: TwoSolid3.gms .

6.3.2 Optimalizace veličin a jejich omezení

V úloze upravím omezující podmínky na cenu za materiálové vlastnosti, jelikož potřebuji u součinitele tepelné vodivosti k a měrné tepelné kapacity c hodnoty, jak pro kapalnou k_l , c_l , tak pro pevnou fázi k_s , c_s . Omezení ceny za materiál má v této úloze následující podobu

$$\begin{aligned}
 \text{cena}_{k_s} &= (1 + e^{k_s})/2 & , k_s &\in \langle 0.05, 2 \rangle \\
 \text{cena}_{k_l} &= (1 + e^{k_l})/2 & , k_l &\in \langle 0.05, 2 \rangle \\
 \text{cena}_\rho &= -0.0008 \cdot (\rho - 450) + 2.5 & , \rho &\in \langle 450, 1300 \rangle \\
 \text{cena}_{c_s} &= (0.0000002 \cdot (c_s - 600)^2 + 3)/2 & , c_s &\in \langle 1000, 4000 \rangle \\
 \text{cena}_{c_l} &= (0.0000002 \cdot (c_l - 600)^2 + 3)/2 & , c_l &\in \langle 1000, 4000 \rangle \\
 \text{cena}_L &= 0.00000000007 \cdot L^2 + 0.01 \cdot e^{\frac{L}{50000}} + 2 & , L &\in \langle 50000, 300000 \rangle \\
 \text{cena}_{\text{celk}} &\geq \text{cena}_{k_s} + \text{cena}_{k_l} + \text{cena}_\rho + \text{cena}_{c_s} + \text{cena}_{c_l} + \text{cena}_L & , \text{cena}_{\text{celk}} &\in \langle 9.1, 28.5 \rangle
 \end{aligned} \tag{6.9}$$

Hodnota součinitele tepelné vodivosti je v pevné fázi k_s větší než v kapalně fázi k_l , měrná tepelná kapacita v pevné fázi c_s je menší než v kapalně c_l a konečně, abychom zabránili chybným výsledkům musím omezit i teplotní vodivost, která by měla být v pevné fázi α_s větší než v kapalně α_l . Tedy přidávám ještě další 3 omezení na materiálové charakteristiky

$$\begin{aligned}
 k_s &\geq k_l \\
 c_s &\leq c_l \\
 a \cdot \alpha_s &= \alpha_l
 \end{aligned} \tag{6.10}$$

Konstanta a je volena libovolně a v mých výpočtech volím $a = 0.85$.

6.3.3 Optimalizační modely pro Gams a interpretace výsledků

Při optimalizaci řeším obdobné úlohy, kdy hledám teplotní vodivost $\alpha(k, \rho, c)$ a měrné latentní teplo L_f maximalizující, či minimalizující požadované vlastnosti. I při této úloze používám nelineární řešič CONOPT. Následující čtyři podúlohy, které řeším v rámci úlohy tuhnutí mají podobné požadavky na optimalizaci jako v předešlých dvou případech viz. kapitoly 6.1 a 6.2.

Upozornění: Pro lepší grafickou interpretaci výsledků tohoto případu, jsem prohodil osy x a t ve 3D obrázcích.

6.3. DVOUFÁZOVÝ PROBLÉM: TUHNUTÍ

1. úloha optimalizace:

Maximalizuj polohu rozhraní $s(t)$ tak, aby za požadovaný čas t_{max} dosáhla maximální změny polohy rozhraní $s(t_{max})$ od počátku 0. Vytvořím optimalizační model využívající již známých faktů a postupů z programování modelu v Matlabu, doplněný o všechna omezení vyskytující se v úloze.

Základní formulace úlohy je tvaru:

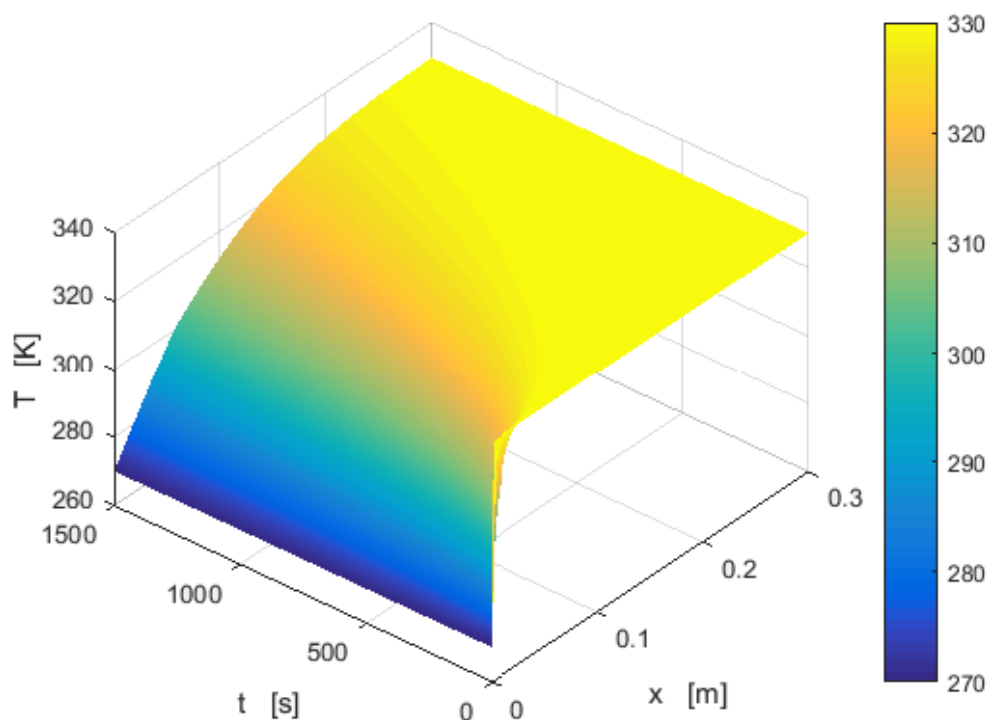
$$\begin{aligned}
 \max \quad & s(t_{max}) = 2 \lambda \sqrt{\alpha_s t_{max}} & (6.11) \\
 \text{s.t.} \quad & \alpha_l = \frac{k_l}{\rho c_l}, \quad \alpha_s = \frac{k_s}{\rho c_s} \\
 & \frac{e^{-\lambda^2}}{\operatorname{erf}(\lambda)} + \frac{k_l}{k_s} \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_l} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{T_m - T_i}{T_m - T_0} \frac{e^{-\lambda^2(\alpha_s/\alpha_l)}}{\operatorname{erfc} \left[\lambda(\alpha_s/\alpha_l)^{\frac{1}{2}} \right]} = \frac{\lambda L \sqrt{\pi}}{C_s(T_m - T_0)} \\
 & + \text{Omezení (6.9) a (6.10)} \\
 & \lambda \in \langle 0.05, 4 \rangle [-], \quad \text{cena}_{celk} = 20 [\text{Euro kg}^{-1}], \\
 & T_i = 340 [\text{K}], \quad T_m = 300 [\text{K}], \quad T_0 = 270 [\text{K}], \quad t_{max} = 1500 [\text{s}].
 \end{aligned}$$

Obrázek 6.20 znázorňuje optimální hodnoty, při požadavku na maximalizaci polohy rozhraní $s(t_{max})$ za čas t_{max} . Tak jako v případě 6.2.2 je dosaženo obdobyhodnot, tedy hustota ρ , měrné tepelné kapacity c_s , c_l a měrné latentní teplo L_f nabývají minimum při daných omezeních. Součinitel tepelné vodivosti k_s je maximální, ovšem k_l maxima nedosáhne z důvodu zachování omezující podmínky na teplotní vodivost, viz (6.10).

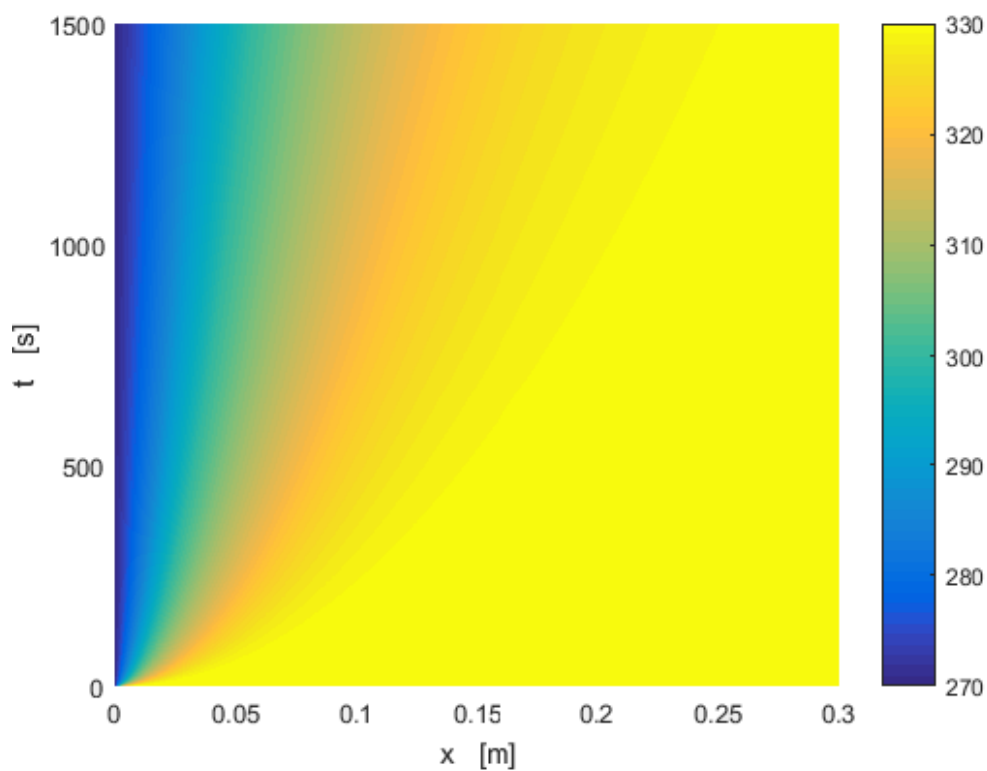
	LOWER	LEVEL	UPPER	MARGINAL
VAR k1	0.050	1.700	2.000	.
VAR ks	0.050	2.000	2.000	0.014
VAR rho	450.000	450.000	1300.000	-6.273E-5
VAR cl	1000.000	1000.000	4000.000	-1.457E-5
VAR cs	1000.000	1000.000	4000.000	.
VAR L_f	50000.000	50000.000	3.0000E+5	-2.732E-7
VAR klcena	-INF	6.474	+INF	.
VAR kscena	-INF	8.389	+INF	.
VAR rhocena	-INF	2.500	+INF	.
VAR clcena	-INF	3.032	+INF	.
VAR cscena	-INF	3.032	+INF	.
VAR L_fcena	-INF	2.202	+INF	.
<hr/>				
VARIABLE lambda.L	=	0.34573	Parametr	
VARIABLE alphas.L	=	4.444444E-6	Teplotní vodivost (s)	
VARIABLE alphas.L	=	3.777778E-6	Teplotní vodivost (l)	
VARIABLE s.L	=	0.05646	Poloha rozhraní	
EQUATION cenacelk.L	=	15.16568	Omezení celkové ceny	

Obrázek 6.20: Ú.3.1: Výsledné optimální hodnoty z prostředí Gams pro čas t_{max}

6. MATEMATICKÉ A OPTIMALIZAČNÍ MODELY A JEJICH VÝSLEDKY



Obrázek 6.21: Ú.3.1: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 3D



Obrázek 6.22: Ú.3.1: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 2D

Tyto optimální hodnoty načtu do prostředí Matlab. Grafické výsledky této úlohy jsou zobrazeny na obrázcích 6.21 a 6.22.

6.3. DVOUFÁZOVÝ PROBLÉM: TUHNUTÍ

2. úloha optimalizace:

Najdi co největší teplotu T_0 , na kterou je médium v čase $t > 0$ a v poloze $x = 0$ ochlazeno, přičemž má být dosaženo požadované polohy rozhraní fází s_{poz} za čas t_{max} .

Formulace úlohy:

$$\begin{aligned}
 &max \quad T_0 && (6.12) \\
 &s.t. \quad \alpha_l = \frac{k_l}{\rho c_l}, \alpha_s = \frac{k_s}{\rho c_s} \\
 &\quad \frac{e^{-\lambda^2}}{\operatorname{erf}(\lambda)} + \frac{k_l}{k_s} \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_l}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{T_m - T_i}{T_m - T_0} \frac{e^{-\lambda^2(\alpha_s/\alpha_l)}}{\operatorname{erfc}\left[\lambda(\alpha_s/\alpha_l)^{\frac{1}{2}}\right]} = \frac{\lambda L \sqrt{\pi}}{C_s(T_m - T_0)} \\
 &\quad s_{poz} = 0.025 \text{ [m]} \\
 &\quad + \text{Omezení (6.9) a (6.10)} \\
 &\quad \lambda \in \langle 0.05, 4 \rangle [-], \text{ cena}_{celk} = 20 \text{ [Euro kg}^{-1}\text{]}, T_i = 340 \text{ [K]}, \\
 &\quad T_m = 300 \text{ [K]}, T_0 \in \langle 255, 295 \rangle \text{ [K]}, t_{max} = 1500 \text{ [s]}.
 \end{aligned}$$

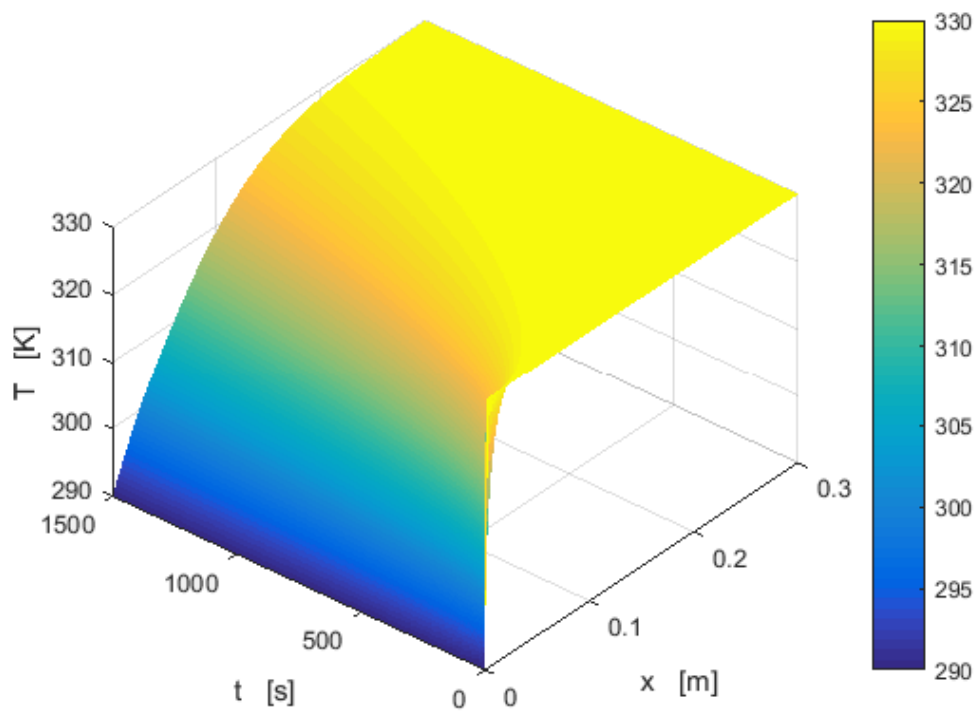
Na obrázku 6.23 vidíme výsledné optimální hodnoty veličin při požadavku maximalizace teploty T_0 a dosažení polohy rozhraní s_{poz} . Veličiny charakterizující přenos tepla nabývají mírně větší hodnot než v úloze 6.3.3 a to z důvodů dosažení polohy $s_{poz} = 0.025$ [m], ta je splněna, přičemž teplota T_0 nabývá horní meze při daném omezení. Cena za materiál je v tomto případě poměrně nízká.

	LOWER	LEVEL	UPPER	MARGINAL
VAR k1	0.050	1.431	2.000	.
VAR ks	0.050	1.684	2.000	.
VAR rho	450.000	491.164	1300.000	EPS
VAR c1	1000.000	1016.750	4000.000	.
VAR cs	1000.000	1016.750	4000.000	EPS
VAR L_f	50000.000	50637.470	3.0000E+5	EPS
VAR klcena	-INF	5.183	+INF	.
VAR kscena	-INF	6.385	+INF	.
VAR rhocena	-INF	2.467	+INF	.
VAR clcena	-INF	3.035	+INF	.
VAR cscena	-INF	3.035	+INF	.
VAR L_fcena	-INF	2.207	+INF	.

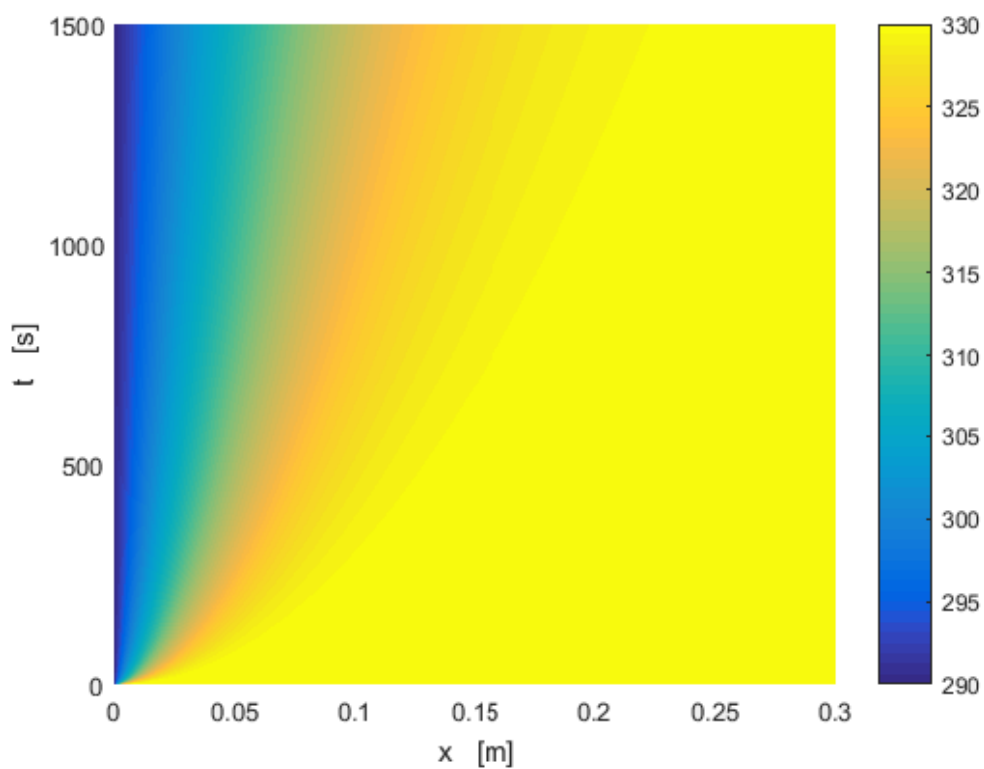
VARIABLE lambda.L	=	0.17578	Parametr
VARIABLE alphas.L	=	3.371312E-6	Teplotní vodivost (s)
VARIABLE alphas.L	=	2.865615E-6	Teplotní vodivost (l)
VARIABLE s.L	=	0.02500	Poloha rozhraní
VARIABLE T01.L	=	290.00000	Teplota na kterou se okraj ochladí
EQUATION cenacelk.L	=	13.49285	Omezení celkové ceny

Obrázek 6.23: Ú.3.2: Výsledné optimální hodnoty z prostředí Gams pro čas t_{max}

Grafické výsledky optimálního řešení viz obrázky 6.24 a 6.25.



Obrázek 6.24: Ú.3.2: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 3D



Obrázek 6.25: Ú.3.2: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 2D

6.3. DVOUFÁZOVÝ PROBLÉM: TUHNUTÍ

3. úloha optimalizace:

Maximalizují tepelný tok \dot{Q}_{prum} na okraji povrchu tělesa. Požadují zároveň, aby poloha rozhraní fází na konci časového úseku t_{max} byla s_{poz} . Upozornil bych čtenáře na případnou připomínku týkající se rovnice pro zjištění akumulované energie, kde se neobjeví znaménko mínus. Pokud vynechám mínus ve Fourierově zákoně a hodnota akumulované energie Q vyjde kladná, interpretuji tento výsledek jako teplo odvedené z objemu.

Formulace úlohy zní:

$$\max \quad \dot{Q}_{prum} = \frac{Q}{t_{max}} \quad (6.13)$$

$$s.t. \quad Q = \sum_{t=1}^{t_{max}} k S \frac{T_m - T_0}{\operatorname{erf}(\lambda)} \frac{e^{-x_{surf}^2/(4\alpha_s t)}}{\sqrt{\pi \alpha_s t}}$$

$$\alpha_l = \frac{k_l}{\rho c_l}, \quad \alpha_s = \frac{k_s}{\rho c_s}$$

$$\frac{e^{-\lambda^2}}{\operatorname{erf}(\lambda)} + \frac{k_l}{k_s} \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_l} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{T_m - T_i}{T_m - T_0} \frac{e^{-\lambda^2(\alpha_s/\alpha_l)}}{\operatorname{erfc} \left[\lambda(\alpha_s/\alpha_l)^{\frac{1}{2}} \right]} = \frac{\lambda L \sqrt{\pi}}{C_s(T_m - T_0)}$$

$$s_{poz} = 0.025 \text{ [m]}, \quad + \text{ Omezení (6.9) a (6.10)}$$

$$\lambda \in \langle 0.05, 4 \rangle [-], \quad \text{cena}_{celk} = 20 \text{ [Euro kg}^{-1}], \quad S = 1 \text{ [m}^2],$$

$$T_i = 340 \text{ [K]}, \quad T_m = 300 \text{ [K]}, \quad T_0 = 270 \text{ [K]}, \quad t_{max} = 1500 \text{ [s]}.$$

Obrázek 6.26 znázorňuje výsledné optimální hodnoty veličin. Pro co největší tepelný tok je potřeba, aby součinitel tepelné vodivosti dosáhl co největších hodnot. Následně je třeba

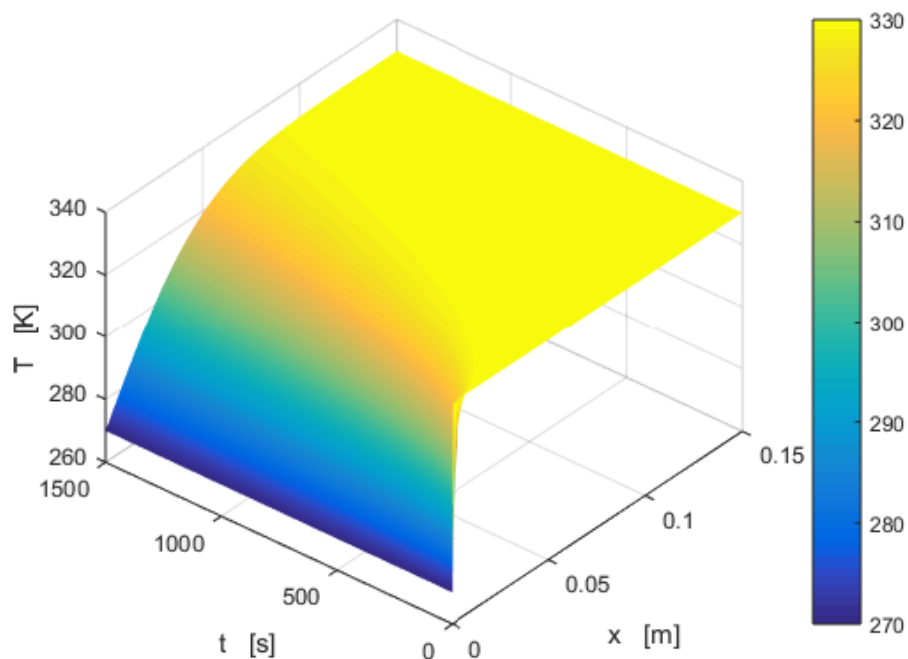
	LOWER	LEVEL	UPPER	MARGINAL
VAR k1	0.050	1.700	2.000	.
VAR ks	0.050	2.000	2.000	2505.439
VAR rho	450.000	913.664	1300.000	.
VAR cl	1000.000	4000.000	4000.000	.
VAR cs	1000.000	4000.000	4000.000	0.015
VAR L_f	50000.000	50000.000	3.0000E+5	-0.001
VAR klcena	-INF	6.474	+INF	.
VAR kscena	-INF	8.389	+INF	.
VAR rhocena	-INF	2.129	+INF	.
VAR clcena	-INF	5.312	+INF	.
VAR cscena	-INF	5.312	+INF	.
VAR L_fcena	-INF	2.202	+INF	.

VARIABLE lambda.L	=	0.43629	Parametr
VARIABLE alphas.L	=	5.472471E-7	Tepelná vodivost (s)
VARIABLE alpha1.L	=	4.651601E-7	Tepelná vodivost (l)
VARIABLE s.L	=	0.02500	Poloha rozhraní
VARIABLE Qprum.L	=	5010.87766	Průměrný tepelný tok po čas t_max
VARIABLE Qodved.L	=	7.516316E+6	Odvedená tepelná energie [J]
EQUATION cenacelk.L	=	17.07475	Omezení celkové ceny

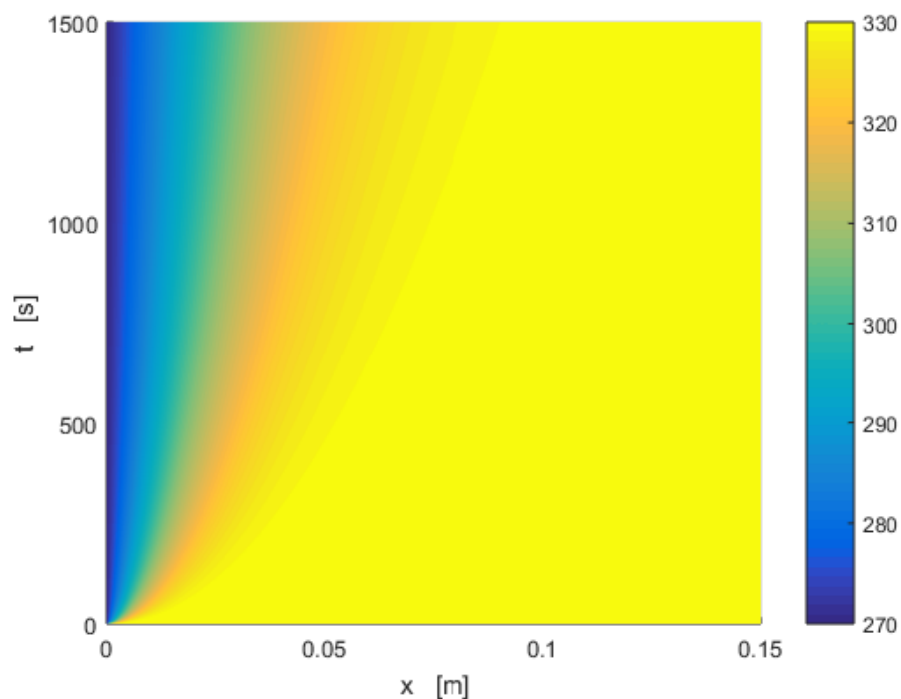
Obrázek 6.26: Ú.3.3: Výsledné optimální hodnoty z prostředí Gams pro čas t_{max}

vykompenzovat fakt, že musí být splněn požadavek na polohu rozhraní $s_{poz} = 0.025 \text{ [m]}$.

6. MATEMATICKÉ A OPTIMALIZAČNÍ MODELY A JEJICH VÝSLEDKY



Obrázek 6.27: Ú.3.3: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 3D



Obrázek 6.28: Ú.3.3: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 2D

Požadují, aby byl tepelný tok co největší, ale aby byla dosažena poloha s_{poz} , tudíž musí mít materiál dostatečně velkou kapacitu na akumulaci. To je docíleno zvýšením hustoty ρ a následnými maximálními hodnoty měrných tepelných kapacit c_s , c_l . Obrázky 6.27 a 6.28 znázorňují průběh teploty v této úlohy.

6.3. DVOUFÁZOVÝ PROBLÉM: TUHNUTÍ

4. úloha optimalizace:

Najdi co nejmenší celkovou cenu, kterou musí zákazník zaplatit za vlastnosti materiálu (k, c, ρ, L_f) tak, aby tepelná energie odvedená za čas t_{max} byla rovna požadované odvedené energii Q_{poz} při využití maximálně s_{max} materiálu. Formulace úlohy:

$$\min \quad \text{cena}_{celk} = \text{cena}_{k_s} + \text{cena}_{k_l} + \text{cena}_{\rho} + \text{cena}_{c_s} + \text{cena}_{c_l} + \text{cena}_L \quad (6.14)$$

$$\text{s.t.} \quad Q = \sum_{t=1}^{t_{max}} k S \frac{T_m - T_0}{\text{erf}(\lambda)} \frac{e^{-x_{surf}^2/(4\alpha_s t)}}{\sqrt{\pi \alpha_s t}}$$

$$Q = Q_{poz}, s(t_{max}) \leq s_{max}$$

$$\frac{e^{-\lambda^2}}{\text{erf}(\lambda)} + \frac{k_l}{k_s} \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_l} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{T_m - T_i}{T_m - T_0} \frac{e^{-\lambda^2(\alpha_s/\alpha_l)}}{\text{erfc} \left[\lambda(\alpha_s/\alpha_l)^{\frac{1}{2}} \right]} - \frac{\lambda L \sqrt{\pi}}{C_s(T_m - T_0)} = 0$$

$$\alpha_l = \frac{k_l}{\rho c_l}, \alpha_s = \frac{k_s}{\rho c_s}, + \text{Omezení (6.9) a (6.10)}$$

$$\lambda \in \langle 0.05, 4 \rangle [-], Q_{poz} = 10 [\text{MJ}], s_{max} = 0.2 [\text{m}]$$

$$T_i = 340 [\text{K}], T_m = 300 [\text{K}], T_0 = 270 [\text{K}], t_{max} = 1500 [\text{s}].$$

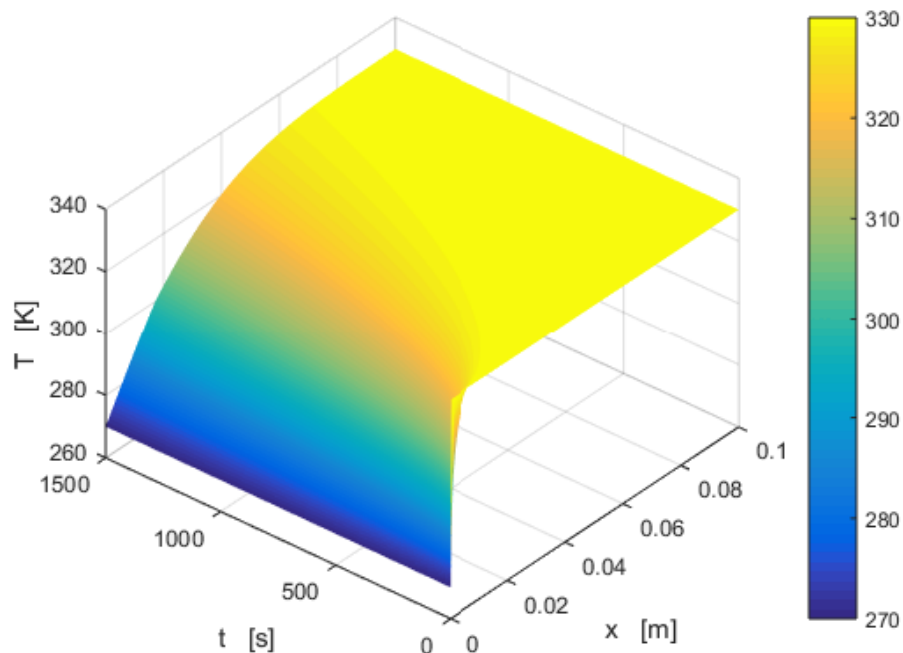
Optimální výsledné hodnoty veličin při požadavku na minimalizaci celkové ceny při dodržení zadaných omezení jsou zobrazeny na obrázku 6.29. Při výpočtu nebylo využito

	LOWER	LEVEL	UPPER	MARGINAL
VAR k1	0.050	1.571	2.000	.
VAR ks	0.050	1.848	2.000	.
VAR rho	450.000	1300.000	1300.000	-0.008
VAR cl	1000.000	4000.000	4000.000	.
VAR cs	1000.000	4000.000	4000.000	-1.344E-4
VAR L_f	50000.000	1.4859E+5	3.0000E+5	1.963E-14
VAR klcena	-INF	5.812	+INF	.
VAR kscena	-INF	7.350	+INF	.
VAR rhocena	-INF	1.820	+INF	.
VAR clcena	-INF	5.312	+INF	.
VAR cscena	-INF	5.312	+INF	.
VAR L_fcena	-INF	3.741	+INF	.

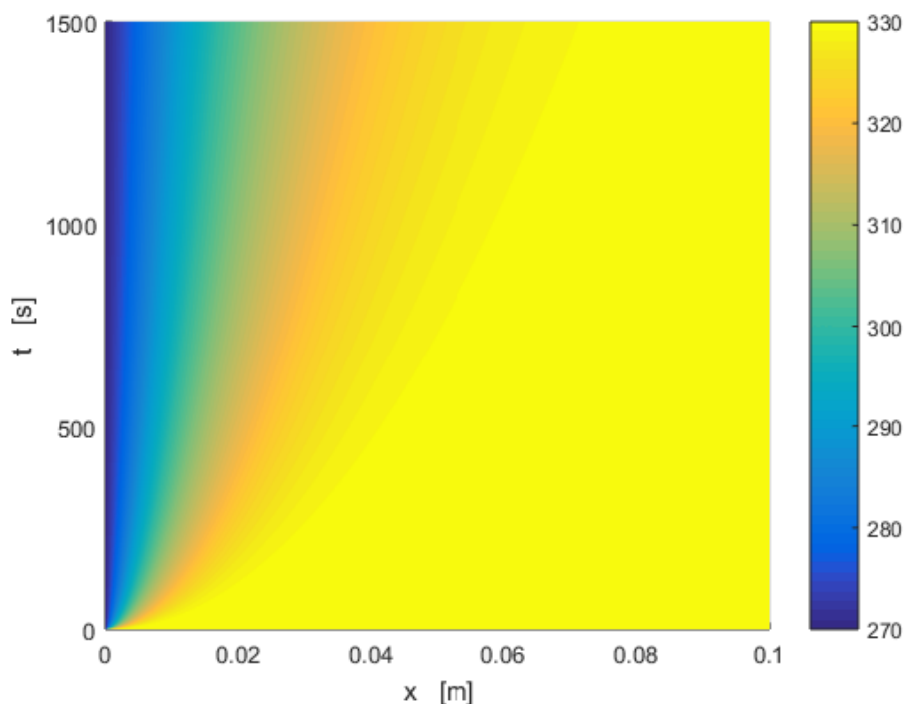
VARIABLE lambda.L	=	0.36966	Parametr
VARIABLE alphas.L	=	3.554645E-7	Teplotní vodivost (s)
VARIABLE alphas.L	=	3.021448E-7	Teplotní vodivost (l)
VARIABLE s.L	=	0.01707	Poloha rozhraní
VARIABLE Qprum.L	=	6666.66667	Průměrný tepelný tok po čas t_max
VARIABLE Qodved.L	=	1.000000E+7	Odvedená tepelná energie [J]
VARIABLE Cenacelkmin.L	=	17.45368	Minimální cena za materiálové vlastnosti

Obrázek 6.29: Ú.3.4: Výsledné optimální hodnoty z prostředí Gams pro čas t_{max}

maximum polohy rozhraní fází s_{max} , což je v pořádku a velikost odvedené energie je rovna Q_{poz} . Z optimálních dat vidíme, že součinitele tepelné vodivosti jsou menší oproti případu 6.3.3 a to hlavně kvůli velikosti polohy rozhraní fází $s(t_{max})$. V důsledku toho je dosaženo



Obrázek 6.30: Ú.3.4: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 3D



Obrázek 6.31: Ú.3.4: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 2D

maximálních hodnot při hustotě ρ a měrných tepelných kapacitách c_s , c_l . Měrné latentní teplo L_f je oproti přecházejícím úlohám v případě dvoufázového tuhnutí větší v rámci co největší kapacity materiálu, díky malé změně polohy rozhraní fází.

Z Matlabu získávám grafický průběh úlohy v prostoru (x, t, T) viz obrázek 6.30 a v rovině (x, t) obrázek 6.31.

6.4 Závěrečné zhodnocení úloh

V případě tuhnutí podchlazené tekutiny 6.1 jsem řešil dvě optimalizační úlohy. V první úloze maximalizuji polohu rozhraní $s(t)$ a v druhé úloze požaduji maximální teplotu T_i na kterou je materiál podchlazen tak, aby bylo dosaženo požadované polohy rozhraní fází s_{poz} . Obdržené výsledky se jeví jako optimální a jsou patřičně okomentovány. Čtenář si mohl povšimnout, že oproti případům 6.2 a 6.3 jsem neřešil úlohy týkající se maximalizace tepelného toku a akumulace tepelné energie. Tyto úlohy by ztrácely význam, jelikož pokud si představíme, že tuhá fáze má konstantní teplotu T_m po celou dobu t , neprobíhá přes ni žádný přenos tepla a teplo uvolněné v průběhu tuhnutí je převedeno do podchlazené tekutiny a tím zvyšuje její teplotu. V tomto případě by se úloha týkající se akumulace nejevila jako požadavek, který nás v případech podchlazení zajímá. Navíc při akumulaci energie je podchlazení jev nežádoucí a snažíme se mu vyhnout.

Při problému tání pevné látky o teplotě změny fáze 6.2 jsem již řešil 4 úlohy optimalizace. První úloha je stejná jako v případě tuhnutí podchlazené tekutiny 6.1, kde veličiny nabývají očekávaných hodnot. Mírně pozměněná je druhá úloha, kde požaduji maximální teplotu na kterou je látka v čase $t > 0$ a poloze $x = 0$ ustálena. V dalších úlohách se zaobírám požadavkem na maximalizaci tepelného toku a minimalizaci ceny na výrobu PCM. Ve třetí úloze bylo dosaženo maximální ceny na výrobu PCM, kterou je zadavatel ochotný zaplatit a tedy při možnosti investovat větší peněžní obnos na výrobu PCM, je možné docílit lepších výsledků. Ve čtvrté úloze je docíleno požadované akumulované energie Q_{poz} za čas t_{max} a cena za materiál je nejmenší možná při splnění všech omezujících podmínek.

Ve Dvofázovém problému tuhnutí se zabývám stejnými optimalizačními úlohami, jako v případě 6.2. Změní se zadání pouze 2. úlohy, ve které hledám co největší teplotu T_0 na které je povrch média v čase $t > 0$ a poloze $x = 0$ ochlazen. Interpretace výsledků úloh 3 a 4 se pozmění, jelikož se v tomto případě jedná o tuhnutí kapalné látky, je nutné uvažovat místo tepelného toku do objemu a akumulace tepelné energie, tepelný tok z objemu a velikost tepla odevzdaného v průběhu procesu.

Při řešení všech úloh bylo dosaženo optimálních výsledků. V některých případech je nutné dosáhnout přesných požadovaných hodnot, což je požadavek hodně striktní a je potřeba volit tyto požadavky (viz požadovaná poloha rozhraní s_{poz} a hodnota akumulovaného tepla Q_{poz}) vhodně, tak aby bylo možné vyřešením těchto úloh dosáhnout optimálních hodnot. Tyto podmínky, by se daly zmírnit při nahrazení rovnosti (=) za nerovnosti (\leq , \geq) a hodnoty vzít z intervalu, které může veličina nabývat.

V diplomové práci řeším celkem 12 úloh. Některé úlohy mají podobné i stejné požadavky na extremalizaci vlastností charakterizující přenos tepla. Jedná se ovšem o různé procesy vedení tepla se změnou fází a je nutné každý výsledek zvlášť probrat a promyslet, zda se optimální veličiny jeví jako správné.

7 Závěr

V úvodní části diplomové práce byly zavedeny důležité termodynamické pojmy, které jsou potřebné při řešení problematiky vedení tepla a jsou základem pro vytvoření matematického modelu. Součástí práce je odvození diferenciální rovnice vedení tepla v tělese a její následné zjednodušení na případ, kdy se uvažuje konstantní součinitel tepelné vodivosti, bez vnitřních zdrojů v rámci tělesa. V další kapitole jsem připomněl hlavní důvody, proč se lidstvo začíná více soustředit na obnovitelné zdroje energie, jejich využití a nutnost akumulace energie. Shrnul jsem různé druhy akumulace energie. Následně jsem se zaměřil na akumulaci tepelné energie, kde jsem vysvětlil výhody a nevýhody akumulace pomocí citelného a latentního tepla. Uvedl jsem, jaké materiály s fázovou přeměnou se používají při akumulaci s využitím latentního tepla a jaké jsou jejich výhody a nevýhody.

Kapitola 4. se již věnovala problematice vedení tepla s fázovou přeměnou, kde jsem uvedl hlavní poznatky při řešení úloh s procesem tání nebo tuhnutí a co představuje pojem Stefanův problém. V 5. kapitole jsem využil znalostí z předchozích kapitol a zavedl tři úlohy týkající se vedení tepla s fázovou přeměnou, u kterých jsem se již konkrétněji věnoval postupu při řešení úloh. Tato kapitola byla stěžejní částí při vytváření matematického modelu a byl zde uveden i rozdíl při definování Error funkce v prostředí Matlab a Gams.

Hlavním cílem diplomové práce bylo sestavení optimalizačních modelů pro extremizaci veličin charakterizující přenos tepla u třech daných úloh. V poslední kapitole jsem nejprve vytvořil základní matematický model pro všechny typy úloh v prostředí Matlab s využitím postupu zavedeného v 5. kapitole. Tyto modely jsem dále využíval při tvorbě optimalizačních modelů, kde bylo nutné zadat různá omezení pro optimalizaci požadovaných hodnot. Jde vidět, že omezující intervaly pro hodnoty vlastností materiálu jsou voleny dosti široké, ale s těmito intervaly se dá libovolně pohybovat v rámci možností výrobce. Důležitým typem omezení byla cena, kterou musíme zaplatit za optimální vlastnosti materiálu při tvorbě vhodného PCM. Optimalizaci v prostředí Gams jsem prováděl pomocí nelineárního řešiče CONOPT. Každá ze tří úloh se skládá ze čtyř částí, kde jsou zadány různé požadavky na maximalizaci či minimalizaci. Výpočet optimálních hodnot je následně interpretován v podobě výsledných hodnot z prostředí Gams a vyobrazení grafických výsledků řešení z prostředí Matlab. Následně pojednávám o správnosti obdržných výsledků a slovně interpretuji výsledná řešení.

Věřím, že má práce bude přínosem v odvětví zabývající se akumulací tepelné energie a jsem rád, že jsem mohl pracovat na této diplomové práci a rozšířil své znalosti v oblasti termomechaniky. Dále jsem si při vypracování diplomové práce zlepšil své dovednosti programování, počítačového modelování a optimalizace v Matlabu a Gamsu.

Seznam použitých zdrojů

- [1] JÍCHA, Miroslav. *Přenos tepla a látky: Určeno pro posl. fak. strojní*. 2. vyd. Brno: Vysoké učení technické, 1989. ISBN 80-214-1062-0.
- [2] HAHN, David W. a M. Necati ÖZİŞİK. *Heat conduction*. 3. vyd. Hoboken: Wiley, 2012. ISBN 978-0470902936.
- [3] Royal Society and The Royal Academy of Engineering. *Nanoscience and Nanotechnologies: Opportunities and Uncertainties*. The Royal Society, London.
- [4] PETER VON BÖCKH a Thomas WETZEL. *Heat transfer basics and practice*. Berlin: Springer, 2012. ISBN 978-364-2191-831
- [5] PAVELEK, Milan. *TERMOMECHANIKA PRO STUDENTY STROJNÍCH FAKULT*. Brno, 2013. Dostupné z: <http://ottp.fme.vutbr.cz>
- [6] JANNA, William S. *Engineering heat transfer*. 3rd ed. Boca Raton: CRC Press, c2009. ISBN 978-1420072020.
- [7] INCROPERA, Frank P., David P. DEWITT, Theodore L. BERGMAN a Adrienne S. LAVINE. *Principles of heat and mass transfer*. 7. vyd. Singapore: John Wiley, 2013. ISBN 978-0-470-64615-1.
- [8] MEHLING, Harald a Luisa F. CABEZA. *Heat and cold storage with PCM: an up to date introduction into basics and applications*. Berlin: Springer-Verlag, 2008. ISBN 978-3-540-68556-2.
- [9] VERMA, P, VARUN a S SINGAL. *Review of mathematical modeling on latent heat thermal energy storage systems using phase-change material. Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2008, 12(4), 999-1031. DOI: 10.1016/j.rser.2006.11.002. ISSN 13640321. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1364032106001651>
- [10] TYAGI, V.V., S.C. KAUSHIK a S.K. TYAGI. *Advancement in solar photovoltaic/thermal (PV/T) hybrid collector technology. Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2012, 16(3), 1383-1398. DOI: 10.1016/j.rser.2011.12.013. ISSN 13640321. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1364032111006058>
- [11] BUDIN, Jan. *Technologický plán akumulace energie* [online]. 6.5.2017, [cit. 2017-05-14] Dostupné z: <http://oenergetice.cz/elektrina/akumulace-energie/technologicky-plan-v-oblasti-akumulace-energie/>
- [12] LADENER, H., SPÄTE, F. *Solární zařízení*. Grada Publishing, První vydání, Praha, 2003. 268 s. ISBN 80-247-0362-9
- [13] STEFANESCU, Doru. *Science and engineering of casting solidification*. 2. vyd. New York: Springer, 2009. ISBN 978-144-1945-099.

- [14] DUTIL, Yvan, Daniel R. ROUSSE, Nizar Ben SALAH, Stéphane LASSUE a Laurent ZALEWSKI. *A review on phase-change materials: Mathematical modeling and simulations. Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2011, 15(1), 112-130. DOI: 10.1016/j.rser.2010.06.011. ISSN 13640321. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1364032110001589>
- [15] SHARMA, Atul, V.V. TYAGI, C.R. CHEN a D. BUDDHI. *Review on thermal energy storage with phase change materials and applications. Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2009, 13(2), 318-345. DOI: 10.1016/j.rser.2007.10.005. ISSN 13640321. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1364032107001402>
- [16] ZAVORALOVÁ, Pavla. *Základní charakteristiky PCM*. [online]. 18.4.2011, [cit. 2017-05-16] Dostupné z: <http://stavba.tzb-info.cz/izolace-strechy-fasady/7360-pcm-ve-stavebnictvi-dil-1-zakladni-charakteristiky-pcm>
- [17] MOKRIŠ, L. *Akumulace tepla v solárních soustavách*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2011. 3 s. Vedoucí bakalářské práce Ing. Pavel Charvát, Ph.D.
- [18] RAO, Singiresu S. *Engineering optimization: Theory and practice*. 4. vyd. Hoboken: Wiley, 2009. ISBN 978-0-470-18352-6.
- [19] DUTIL, Yvan, Daniel R. ROUSSE, Nizar Ben SALAH, Stéphane LASSUE a Laurent ZALEWSKI. *A review on phase-change materials: Mathematical modeling and simulations. Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2011, 15(1), 112-130. DOI: 10.1016/j.rser.2010.06.011. ISSN 13640321. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1364032110001589>
- [20] FRANČŮ, Jan. *Parciální diferenciální rovnice*. 4., dopl. vyd. Brno: Akademické nakladatelství CERM, 2011. ISBN 978-80-214-4399-0.
- [21] Čermák, L., Hlavička, R. *Numerické metody*. Brno: Akademické nakladatelství CERM, s.r.o., Brno, 2006. ISBN: 80-214-3071- 0.
- [22] KALVELAGEN, Erwin. *New special functions in Gams*. Amsterdam Optimization Modeling Group LLC, Washington D.C./The Hague, 2006.
- [23] ATTAWAY, Stormy. *MATLAB: A practical introduction to programming and problem solving*. Third edition. ISBN: 978-012-4058-767.
- [24] GAMS home page [online]. 2017, [cit. 2017-05-7] Dostupné z: <http://www.gams.com>
- [25] POPELA, P. *Nonlinear Programming*. PDF. 2002, [cit. 2017-04-29]
- [26] MOLLIKOVÁ, E. *Modelovací jazyky v optimalizaci*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2010. 54 s. Vedoucí bakalářské práce RNDr. Pavel Popela, Ph.D.

Seznam použitých symbolů a zkratek

Symbol	Jednotka	Veličina
Q	[J]	teplo
q	[J kg ⁻¹]	měrné teplo
\dot{Q}	[W]	tepelný tok
\dot{q}	[W m ⁻²]	hustota tepelného toku
t	[s]	čas
x	[m]	poloha
T	[K]	teplota
T_l	[K]	teplota v kapalně fázi
T_s	[K]	teplota v pevně fázi
T_m	[K]	teplota tání (tuhnutí)
T_i	[K]	teplota konstantní na počátku
T_0	[K]	teplota na kterou se těleso na počátku ohřeje nebo ochladí
$s(t)$	[m]	poloha rozhraní fází v čase t
ρ	[kg m ⁻³]	hustota
c	[J kg ⁻¹ K ⁻¹]	měrná tepelná kapacita při $c_l = c_s$
c_s	[J kg ⁻¹ K ⁻¹]	měrná tepelná kapacita v pevně fázi
c_l	[J kg ⁻¹ K ⁻¹]	měrná tepelná kapacita v kapalně fázi
k	[W m ⁻¹ K ⁻¹]	součinitel tepelné vodivosti při $k_s = k_l$
k_s	[W m ⁻¹ K ⁻¹]	součinitel tepelné vodivosti v pevně fázi
k_l	[W m ⁻¹ K ⁻¹]	součinitel tepelné vodivosti v kapalně fázi
L, L_f	[J kg ⁻¹]	latentní teplo
\dot{Q}^*	[W m ⁻³]	teplo, které zůstane v elementu v důsledku vnitřních zdrojů
$d\dot{m}_{in}$	[kg s ⁻¹]	hmotnostní průtok vstupující do elementu
$d\dot{m}_{out}$	[kg s ⁻¹]	hmotnostní průtok vystupující z elementu
u	[J kg ⁻¹]	měrná vnitřní energie
U	[J]	vnitřní energie
α	[m ² s ⁻¹]	teplotní vodivost
α_l	[m ² s ⁻¹]	teplotní vodivost v kapalně fázi
α_s	[m ² s ⁻¹]	teplotní vodivost v pevně fázi
λ	[-]	parametr
a	[m]	šířka průřezu
b	[m]	výška průřezu
S	[m ²]	plocha průřezu kolmá k tepelnému toku

Seznam obrázků

2.1	Fourierův zákon pro (a) pozitivní tepelný tok a (b) negativní tepelný tok [2]	15
2.2	Hodnoty součinitele tepelné vodivosti u různých materiálových tříd [2] . . .	16
2.3	Kontrolní objem [2]	17
3.1	Typy zásobníků [12]	22
3.2	Citelné teplo [8]	22
3.3	Latentní teplo [8]	23
3.4	Druhy PCM [17]	26
4.1	Vyobrazení problému tuhnutí v 1-D [2]	28
4.2	Problému tání v 1-D [2]	30
5.1	Tuhnutí podchlazené tekutiny v poloprostoru[2]	31
5.2	Newtonova metoda [21]	34
5.3	Tání pevné látky o teplotě změny fáze v poloprostoru [2]	35
5.4	Dvoufázový problém: Tuhnutí [2]	37
6.1	Ceny za vlastnosti materiálu	43
6.2	Ú.1.1: Výsledné optimální hodnoty z prostředí Gams pro čas t_{max}	46
6.3	Ú.1.1: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 3D	47
6.4	Ú.1.1: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 2D	47
6.5	Ú.1.2: Výsledné optimální hodnoty z prostředí Gams pro čas t_{max}	48
6.6	Ú.1.2: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 3D	49
6.7	Ú.1.2: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 2D	49
6.8	Ú.2.1: Výsledné optimální hodnoty z prostředí Gams pro čas t_{max}	52
6.9	Ú.2.1: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 3D	53
6.10	Ú.2.1: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 2D	53
6.11	Ú.2.2: Výsledné optimální hodnoty z prostředí Gams pro čas t_{max}	54
6.12	Ú.2.2: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 3D	55
6.13	Ú.2.2: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 2D	55
6.14	Ú.2.3: Výsledné optimální hodnoty z prostředí Gams pro čas t_{max}	56
6.15	Ú.2.3: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 3D	57
6.16	Ú.2.3: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 2D	57
6.17	Ú.2.4: Výsledné optimální hodnoty z prostředí Gams pro čas t_{max}	58
6.18	Ú.2.4: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 3D	59
6.19	Ú.2.4: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 2D	59
6.20	Ú.3.1: Výsledné optimální hodnoty z prostředí Gams pro čas t_{max}	62
6.21	Ú.3.1: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 3D	63
6.22	Ú.3.1: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 2D	63
6.23	Ú.3.2: Výsledné optimální hodnoty z prostředí Gams pro čas t_{max}	64
6.24	Ú.3.2: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 3D	65
6.25	Ú.3.2: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 2D	65
6.26	Ú.3.3: Výsledné optimální hodnoty z prostředí Gams pro čas t_{max}	66
6.27	Ú.3.3: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 3D	67
6.28	Ú.3.3: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 2D	67
6.29	Ú.3.4: Výsledné optimální hodnoty z prostředí Gams pro čas t_{max}	68
6.30	Ú.3.4: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 3D	69
6.31	Ú.3.4: Průběh změny polohy rozhraní a teplotního rozložení ve 2D	69
A.1	Hodnoty $\frac{Ste}{\sqrt{\pi}}$ úlohy: Tuhnutí podchlazené tekutiny	79

A.2	Hodnoty $\frac{Ste}{\sqrt{\pi}}$ úlohy: Tání pevné látky o teplotě změny fáze	81
-----	---	----

Přílohy

A Tabulky pro výpočet parametru a grafy

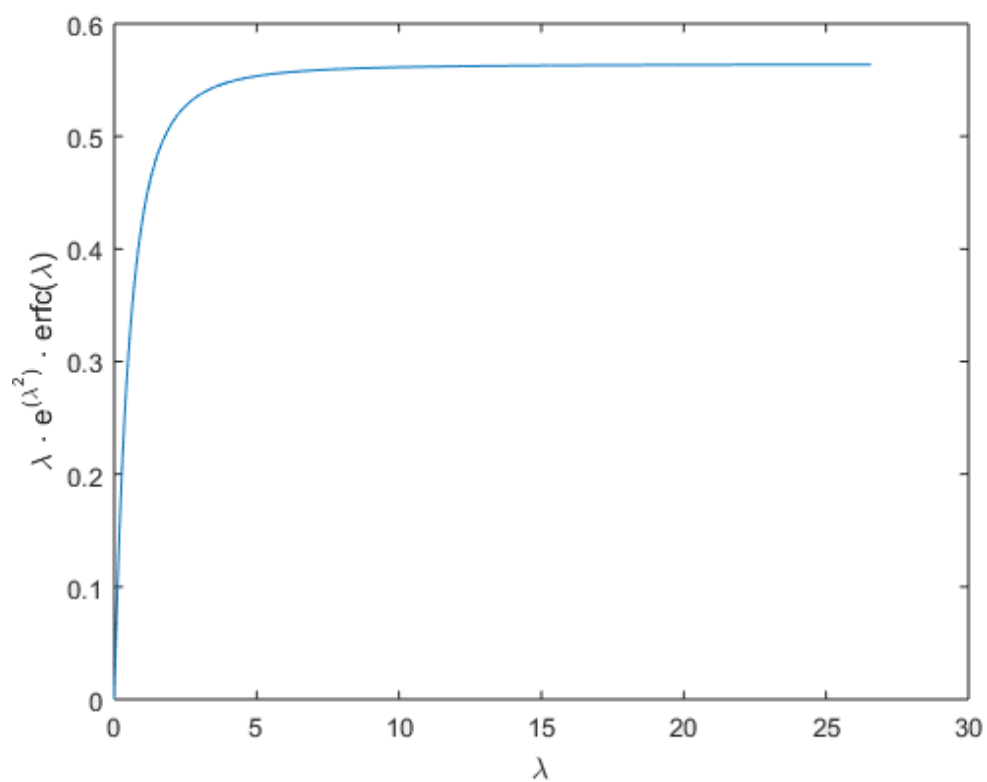
A.1 Jednofázový problém: Tuhnutí podchlazené tekutiny

A.1.1 Tabulka

λ	$\lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erfc}(\lambda) = \frac{C(T_m - T_i)}{L\sqrt{\pi}} = \frac{\operatorname{Ste}}{\sqrt{\pi}}$
0.00	0.00000E+00
0.10	8.96457E-02
0.20	1.61804E-01
0.30	2.20380E-01
0.40	2.68315E-01
0.50	3.07845E-01
0.60	3.40683E-01
0.70	3.68151E-01
0.80	3.91280E-01
0.90	4.10878E-01
1.00	4.27584E-01
1.10	4.41904E-01
1.20	4.54245E-01
1.30	4.64935E-01
1.40	4.74241E-01
1.50	4.82378E-01
1.60	4.89525E-01
1.70	4.95828E-01
1.80	5.01408E-01
1.90	5.06368E-01
2.00	5.10791E-01
2.50	5.27016E-01
3.00	5.37003E-01
3.50	5.43528E-01
4.00	5.47998E-01

Hodnoty Stefanova čísla podělené $\sqrt{\pi}$ v závislosti na hodnotě λ [2]

A.1.2 Graf



Obrázek A.1: Hodnoty $\frac{St_e}{\sqrt{\pi}}$ úlohy: Tuhnutí podchlazené tekutiny

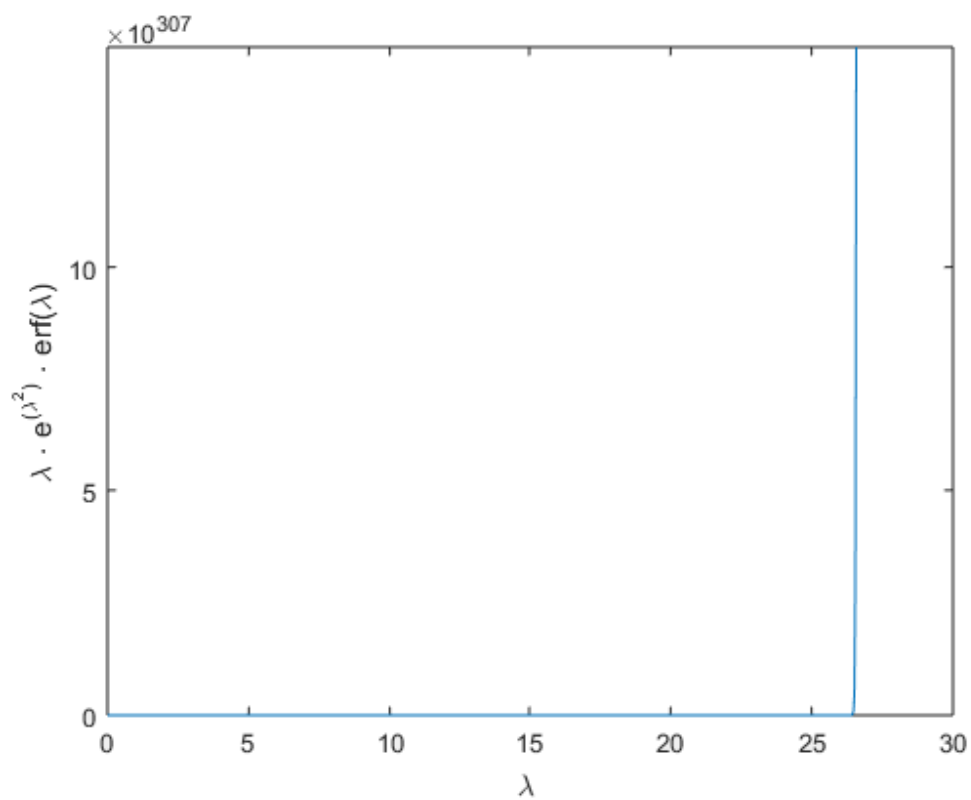
A.2 Jednofázový problém: Tání pevné látky o teplotě změny fáze

A.2.1 Tabulka

λ	$\lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda) = \frac{C(T_0 - T_m)}{L\sqrt{\pi}} = \frac{\operatorname{Ste}}{\sqrt{\pi}}$
0.00	0.00000E+00
0.10	1.13593E-02
0.20	4.63583E-02
0.30	1.07872E-01
0.40	2.01089E-01
0.50	3.34168E-01
0.60	5.19315E-01
0.70	7.74470E-01
0.80	1.12590E+00
0.90	1.61224E+00
1.00	2.29070E+00
1.10	3.24693E+00
1.20	4.61059E+00
1.30	6.58039E+00
1.40	9.46482E+00
1.50	1.37492E+01
1.60	2.02078E+01
1.70	3.00928E+01
1.80	4.54593E+01
1.90	6.97291E+01
2.00	1.08686E+02
2.50	1.29451E+03
3.00	2.43087E+04
3.50	7.31434E+05
4.00	3.55444E+07

Hodnoty Stefanova čísla podělené $\sqrt{\pi}$ v závislosti na hodnotě λ [2]

A.2.2 Graf



Obrázek A.2: Hodnoty $\frac{Ste}{\sqrt{\pi}}$ úlohy: Tání pevné látky o teplotě změny fáze