

## D 17 Skupenské fázové premeny - topenie (tavenie) a tuhnutie

### Základné pojmy

Z hľadiska termodynamiky sa fázovou premenou označuje skoková zmena makroskopických vlastností termodynamického systému (fázy) pri zmene nejakej termodynamickkej premennej (napr. teploty). Najznámejšími príkladmi fázových premien, s ktorými sa stretávame v technickej i bežnej praxi, sú skupenské fázové premeny (zmeny skupenstva)

- topenie (tavenie) a tuhnutie
- vyparovanie a kondenzácia
- sublimácia (priamy prechod pevnej fázy látky do plynnej) a desublimácia

*Topenie* (tavenie) je fázová premena pri ktorej sa pevná látka mení na kvapalinu (je to teda zmena pevnej fázy látky na jej kvapalnú fázu). Opačná zmena sa nazýva *tuhnutie*.

*Teplota topenia* (tavenia) je teplota, pri ktorej látka mení skupenstvo z tuhého na kvapalné. Kryštalické resp. polykryštalické látky, ktoré sa skladajú z jedinej zložky, t.j. z jediného chemického prvku (napr. železo Fe), alebo jedinej zlúčeniny (napr. voda H<sub>2</sub>O), majú svoju charakteristickú teplotu topenia (tavenia). Celá premena tuhej látky na kvapalnú prebehne pri tejto teplote. Kryštalické látky tvorené viacerými zložkami (napr. zliatinové ocele) alebo amorfné látky (napr. plasty, sklo) nemajú určitú teplotu topenia - mäknú a menia sa na kvapalinu v určitom intervale teploty.

*Teplota tuhnutia* je charakteristická teplota pri opačnom zmene skupenstva látky. Mnohé látky majú teplotu topenia a tuhnutia rovnakú.

**Tab. 1** Teploty topenia niektorých látok pri normálnom atmosferickom tlaku

Látka	$T_t$ [ $^{\circ}\text{C}$ ]	$T_t$ [K]
Voda(ľad)	0	273,15
Cín	232	505
Hliník	658	931
Železo	1 536	1 805
Wolfrám	3 350	3 623
Uhlík	3 550	3 823
Oceľ	1 350 – 1 540	1 623 – 1 813
Meď	1 083	1 356
Olovo	327	600

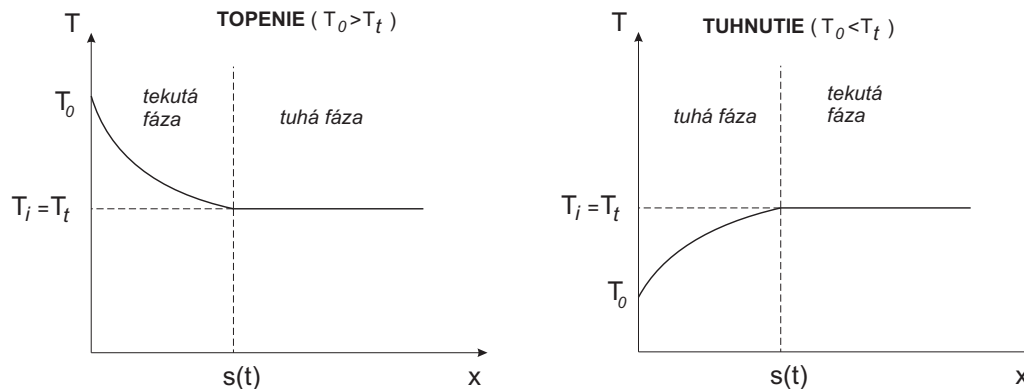
Na prechod zložky z jednej fázy do inej treba látke dodať, alebo odobrať, určité množstvo tepla, ktoré sa nazýva *skupenské teplo*. Skupenské teplo topenia  $L_t$  je množstvo tepla, ktoré musíme látke v pevnom skupenstve pri teplote topenia dodať, aby sa zmenila na kvapalinu o rovnakej teplote. Túto vlastnosť látky charakterizuje *merné skupenské teplo topenia*  $\ell_t$ , čo je množstvo tepla potrebné na tento proces pre 1 kg látky pri normálnom tlaku  $1,013 \cdot 10^5$  Pa. Potom pre látku s hmotnosťou  $m$  platí

$$\ell_t = \frac{L_t}{m} \quad [\text{J} / \text{kg}] \quad (1)$$

Napr. pre čisté železo je  $\ell_t = 289\,000$  J/kg.

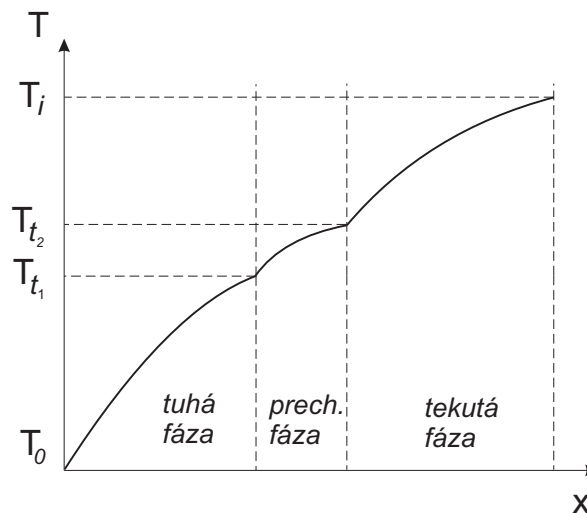
Opačnú fázovú zmenu charakterizuje *merné skupenské teplo tuhnutia*. Je to teplo, ktoré odovzdá 1 kg kvapaliny, ak sa pri teplote tuhnutia celý premení na pevnú látku s tou istou teplotou. Hodnota merného skupenského tepla tuhnutia je pre danú látku rovnaká ako hodnota merného skupenského tepla topenia.

Najjednoduchší prípad topenia (tuhnutia) je pre jednorozmernú formuláciu znázornený na obr. 1. Ak začiatočná teplota látky  $T_i$  pri procese topenia (alebo tuhnutia) sa rovná teplote topenia  $T_t$ , potom teplota tuhej (tekutej) fázy zostáva počas celého procesu fázovej premeny nemenná, rovná  $T_t$ . V takomto prípade treba určovať len časový priebeh zmeny teploty v tekutej (tuhej) fáze. Rieši sa teda problém jednej oblasti s jednou neznámou funkciou teploty. Rozhranie  $s(t)$ , oddeľujúce fázy, je pohyblivé (časovo závislé), čo je typický znak úloh so skupenskými fázovými premenami, komplikujúci riešenie úloh skupenských fázových premen.



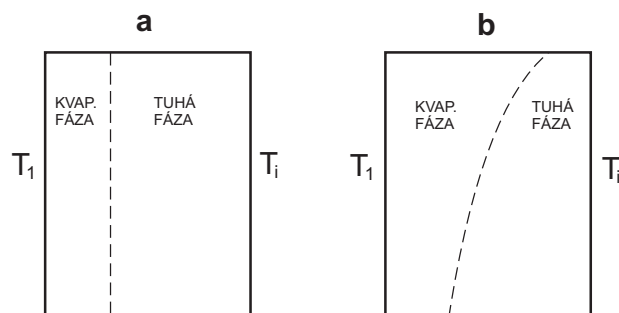
Obr.1 Topenie a tuhnutie s jedinou oblasťou časovej zmeny teploty

Pri reálnych úlohách pre viaczložkové látky sa najčastejšie stretávame s tromi rozdielnymi oblasťami časovej zmeny teploty a dvomi pohyblivými hranicami. V takomto prípade, ako sme už uviedli, sa fázová zmena uskutočňuje nie pri konštatnej teplote, ale v určitom teplotnom intervale  $(T_{t_1}, T_{t_2})$ , čoho následkom je existencia prechodovej (zmiešanej, kašovitej) oblasti medzi tuhou a tekutou fázou (obr. 2).



Obr.2 Jednorozmerné tuhnutie viaczložkovej látky

V tekutej fáze a prechodovej oblasti vplyva na procesy topenia a tuhnutia aj voľné prúdenie vyvolané teplotným gradientom. Tento efekt ilustruje obr. 3 na príklade topenia jednozložkovej látky v pravouhlej dutine. Na ľavej stene dutiny sa udržiava teplota  $T_0$  (vyššia ako teplota topenia) a na pravej stene je začiatočná teplota (nižšia ako teplota topenia). Keď sa pri riešení zanedbáva voľná konvecia, hranica oboch fáz sa posúva rovnobežne s ohrievanou stenou. V skutočnosti však prúdenie ohrievanej kvapaliny (pri ohrievanej stene smerom hore, a opačným smerom pri hranici oboch fáz) zrýchľuje v hornej časti pohyb rozhrania oboch fáz do tvaru naznačeného na obrázku.



Obr.3 Topenie bez zohľadnenia voľného prúdenia v kvapalnej fáze (a). Topenie s voľným prúdením (b)

### Formulácia úlohy

Uvažujme jednoduchú formuláciu jednorozmernej úlohy topenia jednozložkovej látky so zanedbaním voľnej konvekcie. Rovnica nestacionárneho vedenia tepla [D 16] pre kvapalnú fázu potom je

$$\lambda_{kv} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \rho_{kv} c_{kv} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2)$$

Podobne pre pre oblasť tuhej fázy platí

$$\lambda_{tu} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \rho_{tu} c_{tu} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3)$$

V týchto rovniciach je  $\lambda$  súčiniteľ vedenia tepla,  $\rho$  merná hmotnosť a  $c$  merné teplo pri konštantnom tlaku príslušnej fázy. Pre tieto diferenciálne rovnice treba predpísať začiatočné a okrajové podmienky a podmienky, ktoré platia na rozhraní oboch fáz.

Na hranici styku, označenej indexom  $kt$ , je teplota rovná teplote topenia

$$T_{kt} = T_t \quad (4)$$

Na tejto hranici tiež musí platiť, že tepelný tok privádzaný do tuhej fázy sa rovná odvádzanému toku tekutou fázou plus latentné teplo vznikajúce pri tomto procese

$$-\lambda_{tu} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{tu} = \rho_{tu} \ell_t \frac{ds}{dt} - \lambda_{kv} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{kv} \quad \text{na } s \quad (5)$$

kde  $ds/dt$  reprezentuje rýchlosť pohybu bodov rozhrania.

Hlavným problémom analytického riešenia takýchto úloh je aplikácia podmienok pre nestacionárne (pohyblivé) rozhranie oboch fáz a sledovanie jeho pohybu. Analytické riešenia sú známe len pre niekoľko špeciálnych jednorozmerných a dvojrozmerných úloh. Pri riešení reálnych úloh topenia (tavenia) a tuhnutia sa využívajú približné numerické metódy, predovšetkým metóda konečných prvkov.

### Entalpická metóda riešenia úloh topenia a tuhnutia

Metóda dostala názov podľa toho, že proces topenia a tuhnutia sleduje na základe zmien entalpie, čím sa riešenie úlohy výrazne zjednodušuje. Pre všetky oblasti úlohy platí rovnaká diferenciálna rovnica a navyše možno obísť explicitné sledovanie pohybu bodov rozhrania.

Metódu možno v jej najjednoduchšej podobe formulovať tak, že výjdeme z rovnice nestacionárneho vedenia tepla [D 16]

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right] + \bar{Q} \quad \left[ \frac{\text{W}}{\text{m}^3} \right] \quad (6)$$

Ľavú stranu tejto rovnice možno pri konštantnom tlaku považovať za časovú zmenu entalpie

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right] + \bar{Q} \quad \left[ \frac{\text{W}}{\text{m}^3} \right] \quad (7)$$

Entalpiu na jednotku objemu vyjadríme v tvare (referenčnú teplotu volíme rovnú nule)

$$H = \int_0^T \rho c dT + \phi(T) \rho \ell_t \quad \left[ \frac{\text{J}}{\text{m}^3} \right] \quad (8)$$

kde funkcia  $\phi$  v procese tuhnutia vyjadruje podiel kvapalnej fázy (pre čiste kvapalný stav  $\phi = 1$  a pre čiste tuhý stav  $\phi = 0$ ).

Sledujme najprv nárast entalpie v procese topenia jednozložkovej látky (fázová zmena prebieha pri konštantnej teplote), ktorej teplota topenia je  $T_t$ . Pri ohrievaní tuhej látky potom pre entalpiu platí

$$H_{tu}(T) = \int_0^T \rho_{tu} c_{tu} dT \quad T < T_t \quad (9)$$

Pri teplote topenia sa entalpia zvýši o latentné teplo a pre entalpiu kvapalnej fázy bude platiť

$$H_{kv} = \int_0^{T_t} \rho_{tu} c_{tu} dT + \int_{T_t}^T \rho_{kv} c_{kv} dT + \rho_{kv} \ell_t \quad T_t \leq T \quad (10)$$

Pri viaczložkových, alebo amorfných látkach, prebieha fázová premena pri meniacej sa teplote v intervale od  $T_{t1}$  do  $T_{t2}$  a v takom prípade treba pomocou funkcie  $\phi(T)$ , zavedenej v (8), vystihnúť zmenu entalpie v tomto procese. Ak túto zmenu sledujeme pomocou závislosti latentného tepla od teploty, zmenia sa rovnice (9) a (10) na

$$H_{tu}(T) = \int_0^{T_{t1}} \rho_{tu} c_{tu} dT + \int_{T_{t1}}^T \left[ \rho_{zm} \left( \frac{d\ell}{dT} \right) + \rho_{zm} c_{zm} \right] dT \quad T_{t1} < T \leq T_{t2} \quad (11)$$

$$H_{kv}(T) = \int_0^{T_{t1}} \rho_{tu} c_{tu} dT + \rho \ell + \int_{T_{t1}}^{T_{t2}} \rho_{zm} c_{zm} dT + \int_{T_{t2}}^T \rho_{kv} c_{kv} dT \quad T \geq T_{t2} \quad (12)$$

kde index *zm* označuje hodnoty v prechodovej (zmiešanej) oblasti fáz.

Pre konkrétnu úlohu sa diferenciálna rovnica (7) spolu s rovnicami (11) a (12), ktoré udávajú vzťah medzi entalpiou a teplotou rieši štandardným postupom MKP [2], [D7], [D16]. Po geometrickej a časovej diskretizácii, sumácii prvkových príspevkov do globálnych matíc, zadaní začiatočných a okrajových podmienok sa rieši nestacionárna a nelineárna úloha vedenia tepla a fázovej premeny tvorená sústavou diferenciálnych rovníc

$$\mathbf{H}(T) \dot{\mathbf{T}} + \mathbf{K}(T) \mathbf{T} = \mathbf{q}(T, t) \quad (13)$$

kde  $\mathbf{H}$  je matica entalpie,  $\mathbf{K}$  je matica vedenia tepla,  $\mathbf{q}$  je vektor (stĺpcová matica) uzlových tepelných tokov. Vektory  $\mathbf{T}$  a  $\dot{\mathbf{T}}$  obsahujú hodnoty uzlových teplôt a uzlových rýchlostí teploty. Sústava (13) sa rieši pomocou Newton-Raphsonovej iteračnej procedúry pre každý časový krok v celkovom časovom intervale riešenia úlohy. Spôsob zadávania a vyhodnocovania takejto úlohy v MKP si ukážeme na riešení príkladu v programovom systéme ANSYS.

### Príklad

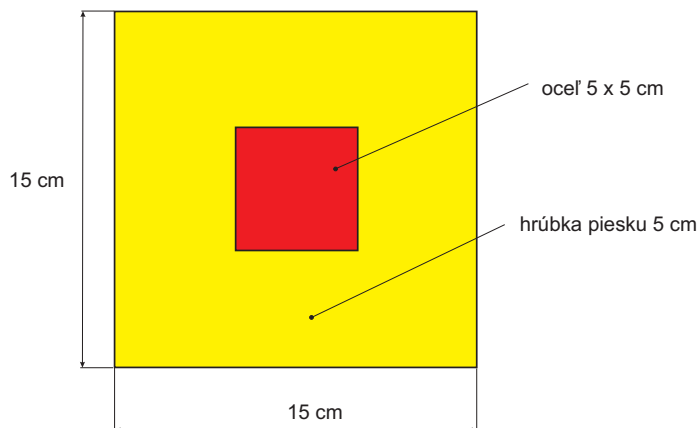
Oceľová tyč štvorcového prierezu sa vyrába odlievaním do pieskovej formy s rozmermi pričného rezu podľa obrázku. Budeme analyzovať tuhnutie odliatku v časovom intervale 4 hodiny so zohľadnením tepelnej konvekcie vonkajšieho povrchu formy s okolitým vzduchom pri daných materiálových vlastnostiach. Tepelnú radiáciu zanedbáme. Latentné teplo zohľadníme v zmene entalpie ocele v časovom intervale tuhnutia.

### Materiálové vlastnosti piesku (volíme nezávislé od teploty)

tepelná vodivosť 0,52 W/(mK)

hustota 1500 kg/m<sup>3</sup>

merné teplo 1170 J/(kgK)



### Materiálové vlastnosti ocele

Teplota °C	Tepelná vodivosť W/(mK)	Entalpia 10 <sup>9</sup> J/m <sup>3</sup>
1580 (tekutý stav)	25	11,214
1510 (začiatok tuhnutia)	25	10,545
1450 (koniec tuhnutia)	32	8,247
0 (vzťažná hodnota)	30	0

### Začiatkové podmienky

Teplota ocele na začiatku riešenia 1580 °C

Teplota piesku na začiatku riešenia 27 °C

### Údaje pre konvekciu

Koeficient prestupu tepla 11,5 W/(m<sup>2</sup> K)

Teplota vzduchu 27 °C

### **Riešenie**

Zanedbali sme zložitejšie pomery na koncoch a úlohu sme riešili ako rovinnú, čím sme približne určili situáciu vo všeobecnom priereze. Úlohu sme vyriešili touto postupnosťou interaktívnych príkazov:

1. Zobrazovať len príkazy pre termálnu úlohu

*Preferences > Thermal, OK;*

2. Typ prvku

*Preprocessor > Element Type > Add/Edit/Delete > Add > Solid > Quad 4 node 55, OK, Close;*

3. Materiál č.1 - piesok

*Material Props > Material Models > Material Model Number 1 > Thermal > Conductivity > Isotropic, KXX=0.52, OK, Specific Heat, C = 1170, OK, Density, DENS = 1500, OK;*

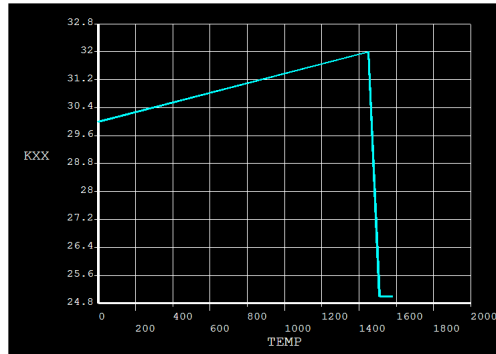
4. Materiál č.2 - oceľ

*Material Props > Material Models > Material > New Model..., ID = 2, OK, Thermal > Conductivity > Isotropic, Kliknite trikrát Add Temperature pre vytvorenie potrebných stĺpcov, do ktorých zadajte*

T1 = 0    T2 = 1450    T3 = 1510    T4 = 1580

KXX = 30    KXX = 32    KXX = 25    KXX = 25

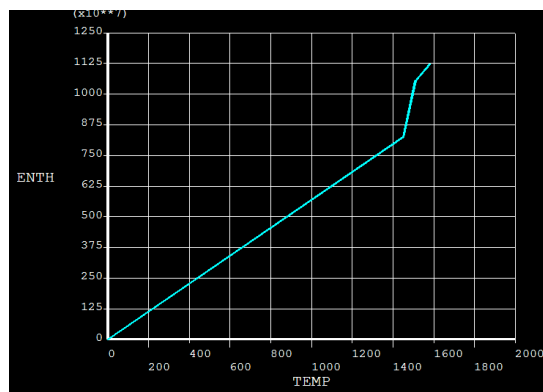
Kliknite *Graph* (Všimnite si nárast vodivosti pri tuhnutí taveniny)



Vysviette riadok teplôt a uložte ho pomocou *Ctrl C, OK, Thermal >Enthalpy*, Kliknite trikrát *Add Temperature* pre vytvorenie potrebných stĺpcov, Vysviette riadok teplôt a zadajte teploty pomocou *Ctrl V*, Do spodného riadku zadajte hodnoty

ENTH1 = 0      ENTH2 = 8.247 E9      ENTH3 = 10.545 E9      ENTH4 = 11.214 E9,

Kliknite *Graph* (Všimnite si zmenu sklonu priebehu entalpie vplyvom latentného tepla)  
OK, Material, Exit;

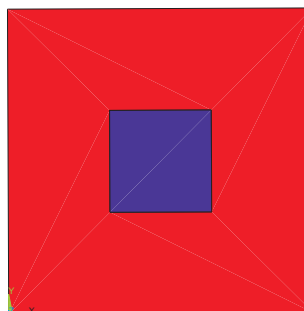


## 5. Vytvorenie prierezoých plôch

*Modeling >Create >Areas >Rectangle >By Dimensions*, X1 = 0, Y1 = 0, X2 = 0.15, Y2 = 0.15, Apply,  
X1 = 0.05, Y1 = 0.05, X2 = 0.1, Y2 = 0.1, OK;

*Modeling >Operate >Booleans >Overlap >Areas*, Kliknite a potvrdte postupne obe plochy s OK;

*Utility Menu >PlotCtrls >Numbering*, AREA = On, /NUM = Colors only, OK;



## 6. Vytvorenie prvkov

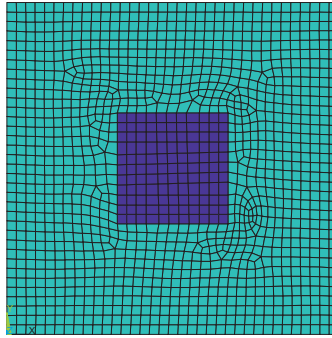
*Preprocessor >Meshing >Size Cntrls >SmartSize >Basic*, LVL = 1 (fine), OK;

*Meshing >Mesh >Areas >Free*, Kliknite plochu formy (orientujte sa podľa farebného vysvietenia), OK, OK;

*Meshing >Mesh Attributes >Default Attribs*, MAT = 2, OK;

*Meshing >Mesh >Areas >Free*, Kliknite vnútorný štvorec (orientujte sa podľa farebného vysvietenia), OK, OK;

*Utility Menu >PlotCtrls >Numbering*, Elem/Attrib numberig = Material Numbers, OK;



## 6. Nestacionárna úloha

*Solution >Analysis Type >New Analysis, ANTYPE = Transient, OK, OK;*

## 7. Okrajové podmienky pre konvekciu

*Solution >Define Loads >Apply >Thermal >Convection >On Lines, Kliknite postupne 4 čiary väčšieho štvorca, OK, VAL1 = 11.5, VAL21 = 27, OK;*

## 8. Začiatkové podmienky

### Pre taveninu

*Utility Menu >Select >Entities, Areas, OK, Kliknite vnútorný štvorec, OK, Select >Everything Below >Selected Areas;*

*Solution >Define Loads >Apply >Initial Condit'n >Define, Pick All, Lab = TEMP, VALUE = 1580, OK;*

### Pre formu

*Utility Menu >Select >Entities, Nodes, Invert;*

*Solution >Define Loads >Apply >Initial Condit'n >Define, Pick All, Lab = TEMP, VALUE = 27, OK;*

*Utility Menu >Select >Everything;*

## 9. Riadiace parametre výpočtu

*Solution >Load Step Opts >Time/Freqvenc >Time-Time Step, TIME = 14400, DELTIM = 30, Minimum time step size = 5, Maximum time step size = 200, OK;*

*Solution >Load Step Opts >Output Ctrl's >DB/Results File, FREQ = Every Substep, OK;*

## 10. Výpočet

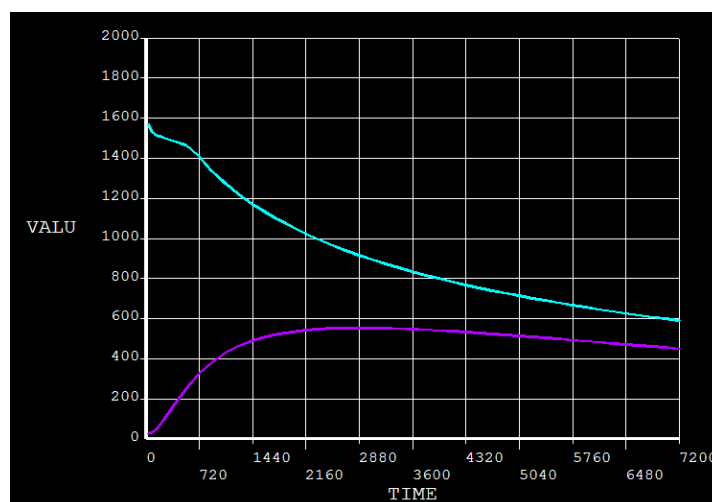
*Solution >Solve >Current LS, OK;*

## 11. Znázornenie priebehu teploty v intervale prvých dvoch hodín vo zvolených bodoch

*Utility Menu >Plot Cntrl's >Style >Graphs >Modify Axes, /XRANGE = Specific range, XMIN = 0, XMAX = 7200, OK;*

*Utility Menu >Plot >Elements;*

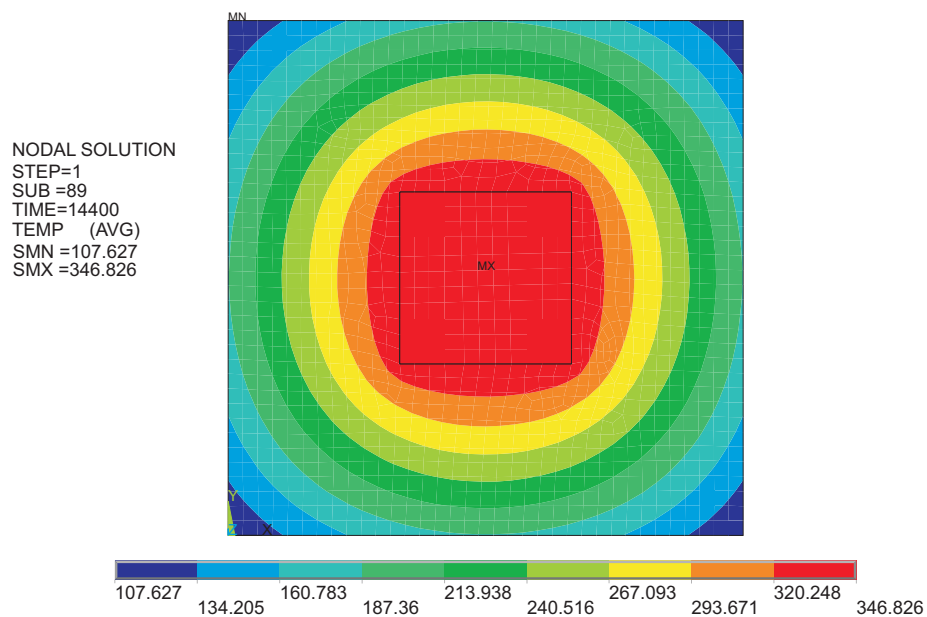
*TimeHist Postpro >Variable Viewer, Kliknite 1. ikonku zľava (Add Data), Nodal Solution >DOF Solution >Nodal Temperature, OK, Kliknite ľubovoľný uzol zhruba v strede oceľovej časti, Apply, Nodal Solution >DOF Solution >Nodal Temperature, OK, Kliknite ľubovoľný uzol zhruba v strede hrúbky formy, OK, Vysviette oba riadky s údajmi o teplotách a kliknite 3. ikonku zľava (Graph Data);*



## 12. Znáznornenie rozdelenia teploty na konci štvrtej hodiny chladnutia

*General Postproc >Read Results >Last Set;*

*General Postproc >Plot Results >Contour Plot >Nodal Solu >Nodal Solution >DOF Solution >Nodal Temperature, OK;*



## 13. Ukončenie výpočtu

*Utility Menu >File >Exit, Save Geom+Loads, OK;*

### Poznámka

Pokiaľ by sme pri analýze výsledkov riešenia takejto úlohy zmenili niektoré parametre tak, že je potrebný nový výpočet, potom treba pred jeho spustením opätovne zadať začiatočné podmienky.