

3. Numeryczne modelowanie procesów krzepnięcia

Modelowanie numeryczne przepływów, którym towarzyszą przemiany fazowe lub przepływy ze swobodną powierzchnią, wciąż stanowi wyzwanie dla naukowców zajmujących się mechaniką płynów. Jest to głównie związane z trudnościami rozwiązywania nieliniowych układów równań transportu momentu i energii dla zmieniającej się w czasie domeny obliczeniowej. Dotychczasowe osiągnięcia w tym zakresie nie są zadawalające. Główną przyczyną jest brak efektywnego algorytmu wyznaczenia położenia frontu krzepnięcia. Jest to problem, który można uznać za jeden z podstawowych w całym zagadnieniu, powodujący konieczność implementacji drastycznych uproszczeń w wielu komercyjnych programach odlewniczych. Dodatkową komplikacją, pomijaną w większości modeli symulacyjnych procesy przemysłowe, jest powstawanie pęcherzy powietrznych, tworzenie się mikro-struktur w zakrzepłej fazie stałej, czy nienewtonowskie własności płynów.

Istnieją dwie podstawowe metodologie pozwalające na numeryczne rozwiązywanie problemu krzepnięcia. Pierwsza metoda oparta jest na podziale domeny obliczeniowej na dwie niezależne i zmieniające się w czasie domeny, jednej dla cieczy (*liquidus*) oraz drugiej dla zakrzepłej fazy (*solidus*). Rozwiązywanie wymaga dokładnego śledzenia powierzchni międzyfazowej, wyznaczającej granicę tych domen (ang. *front tracking method*, Crank [9]). Podstawową wadą tej metody jest pracochłonny numerycznie proces regeneracji siatki obliczeniowej w każdym kroku czasowym.

Druga metoda polega na takiej modyfikacji równań transportu i energii, aby opisywały podstawowe własności obu faz, co pozwala na rozwiązywanie problemu krzepnięcia dla jednej, nieruchomej domeny obliczeniowej. Praktyczną realizacją tej metody jest tzw. metoda entalpowa (ang. *fixed grid enthalpy porosity method*), jedna z najpopularniejszych obecnie metod symulacji przepływu z krzepnięciem cieczy (Ni, Beckermann [43]). Obok prostoty procedury numerycznej, dodatkową zaletą metody entalpowej jest brak ostrego przejścia z fazy ciekłej do stałej, co pozwala na modelowanie nie-izotermicznych procesów krzepnięcia. Systematyczne porównanie obu tych metod, wskazujące na ich zalety i mankamenty, zostało przedstawione w pracy Vollera [61]. Interesujące jest także porównanie wyników symulacji numerycznych przeprowadzonych tymi metodami z przebiegiem eksperymentów (Giangi [17, 18], Banaszka [4] oraz Kowalewskiego, Rebova [33]), pokazujące rozbieżności w uzyskanych rezultatach i wskazujących na silny wpływ na uzyskane rozwiązanie zarówno termicznych warunków brzegowych, jak i zależnych od temperatury własności cieczy. Nieizotermiczne przejścia fazowe, szczególnie dla substancji wieloskładnikowych, wiążą się z procesem mikrosegregacji i tworzenia się na powierzchni międzyfazowej kolumnowych struktur (dendrytów), poważnie modyfikujących wymianę ciepła i masy w tym obszarze. Uwzględnienie takich procesów wymaga stosowania specjalnych metod lokalnych, np. tzw. metody pól fazowych (ang. *Phase Field Method*, Fabbri, Voller [13]). Niestety, do tej pory nie podano żadnej implementacji tej metody wykraczającej poza model dynamiki wzrostu pojedynczych dendrytów.

Osobną kategorię stanowi równie trudny problem modelowania granicy rozdziału faz przy uwzględnieniu wpływu napięcia powierzchniowego. Tego typu modelowanie jest konieczne dla prawidłowego opisu swobodnej powierzchni cieczy podczas procesu wypełniania form odlewniczych. Obecnie standardową metodą, wykorzystującą nieruchomą siatkę do modelowania rozdziału faz ciekłej i gazowej, jest tzw. metoda VoF (ang. *Volume of Fluid*). Jej podstawy zostały przedstawione w pracy Hirta [24], a szczegóły implementacji z uwzględnieniem napięcia powierzchniowego opisano w pracy Brackbilla i współautorów [8].

W niniejszym rozdziale zebrano podstawowe informacje na temat numerycznego modelowania procesów krzepnięcia w obecności przepływu konwekcyjnego oraz przepływu z powierzchnią rozdziału faz. Wszystkie wymienione metody bazują na podstawowym w mechanice płynów układzie równań różniczkowych i warunków brzegowo-początkowych opisujących transport masy i energii. Uwzględnienie w symulacjach numerycznych przemian fazowych i powierzchni rozdziału faz wymaga jednak modyfikacji równań podstawowych. Konkretnie realizacje różnią się również szczegółowymi założeniami oraz sposobem realizacji procedur numerycznych. Poniżej przedstawiono podstawowe równania i warunki brzegowo-początkowe opisujące omawiane procesy, a następnie założenia i cechy stosowanych w pracy algorytmów.

3.1. Postawienie problemu dla celów numerycznej mechaniki płynów

Symulacje krzepnięcia w obecności konwekcji naturalnej i/lub przepływów z powierzchnią rozdziału wymagają rozwiązania sprzężonego układu równań opisujących wymianę ciepła i masy dla dwóch faz oraz równania Naviera-Stokes'a. Dla płynów nieściśliwych układ ten składa się z:

- zasady zachowania masy

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (3.1.1)$$

- zasady zachowania pędu

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} + \rho w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \text{div}(\mu \nabla u) + G_x + S_u + F_{\sigma x} \quad (3.1.2)$$

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} + \rho u \frac{\partial v}{\partial x} + \rho v \frac{\partial v}{\partial y} + \rho w \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \text{div}(\mu \nabla v) + G_y + S_v + F_{\sigma y} \quad (3.1.3)$$

$$\rho \frac{\partial w}{\partial t} + \rho u \frac{\partial w}{\partial x} + \rho v \frac{\partial w}{\partial y} + \rho w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \text{div}(\mu \nabla w) + G_z + S_w + F_{\sigma z} \quad (3.1.4)$$

- zasady zachowania energii

$$\rho \left[\frac{\partial(c_p T)}{\partial t} + u \frac{\partial(c_p T)}{\partial x} + v \frac{\partial(c_p T)}{\partial y} + w \frac{\partial(c_p T)}{\partial z} \right] = \text{div}(k \nabla T) + S_T \quad (3.1.5)$$

gdzie występujące po prawej stronie symbole \mathbf{G} , \mathbf{S} , \mathbf{F}_{σ} , oraz S_T oznaczają człony źródłowe.

Równania różniczkowe (3.1.1)-(3.1.5) wraz z odpowiednimi warunkami brzegowymi oraz warunkami początkowymi określającymi prędkość i temperaturę w analizowanym obszarze w chwili $t=t_0$ stanowią problem początkowo – brzegowy, który jest przedmiotem rozważań numerycznej mechaniki płynów. Jego rozwiązanie prowadzi do wyznaczenia składowych prędkości u , v , w , temperatury T , ciśnienia p oraz położenia granicy faz.

W rozpatrywanych przepływach członem źródłowym, odpowiedzialnym za generację przepływu konwekcyjnego, jest człon wypornościowy \mathbf{G} . Przy modelowaniu konwekcji naturalnej najczęściej człon ten jest upraszczany przez przyjęcie stałej wartości współczynnika rozszerzalności objętościowej cieczy β i wyraża się liniową zależnością siły wyporu od temperatury:

$$\mathbf{G} = \mathbf{g} \rho \beta (T - T_0) \quad (3.1.6)$$

gdzie \mathbf{g} oznacza wektor przyspieszenia ziemskiego. W wielu przypadkach takie uproszczenie prowadzi do dużych błędów, a przy modelowaniu konwekcji naturalnej wody w pobliżu punktu anomalii gęstości jest niedopuszczalne. W niniejszej pracy uwzględniano nieliniową charakterystykę członu wypornościowego przyjmując funkcyjną zależność gęstości płynu od temperatury:

$$\mathbf{G} = \mathbf{g} (\rho(T) - \rho(T_0)) \quad (3.1.7)$$

Człony źródłowe \mathbf{S} w równaniu transportu masy wykorzystywane są przy modelowaniu procesów przemiany fazowej i zostały omówione w poniżej. Człon źródłowy \mathbf{F}_{σ} pojawia się natomiast przy modelowaniu przepływu ze swobodną powierzchnią (rozdział 3.1.3) i odpowiada za siły napięcia powierzchniowego. Dodatkowy strumień ciepła związany z przemianą fazową opisuje człon źródłowy równania energii S_T .

Istnieje szereg metod dyskretyzacji i rozwiązywania równań Naviera-Stokes'a (3.1.1)-(3.1.4), każda z nich ma swoje wady i zalety. Ze względu na problemy numeryczne z członem ciśnieniowym, często stosowanym podejściem jest transformacja tych równań do równań transportu wirowości

(Davis [11]). Zastosowanie takiej transformacji pozwala wyeliminować z równań ciśnienie, co znacznie upraszcza metodę rozwiązywania. Wadą tej metody jest to, iż wynikowe pola prędkości nie zawsze spełniają równanie ciągłości (3.1.1), które w tej reprezentacji ulega redukcji. Wśród metod bezpośredniego rozwiązywania układu (3.1.1)-(3.1.4) można wyróżnić metody projekcyjne (Ferziger, Peric [14]), z których najbardziej rozpowszechnione są zaproponowane przez Patankara algorytmy SIMPLE i SIMPLEC ([46]) oraz przez Issa algorytm PISO ([25]). Kłopoty numeryczne z członem ciśnieniowym rozwiązano tutaj drogą dodatkowych korekt składowych prędkości, tłumiących niefizyczne oscylacje ciśnienia (ang. *checkboard pressure*).

3.1.1. Modelowanie procesu krzepnięcia

Modelowanie procesów krzepnięcia wymaga, jak wspomniano na wstępie, uwzględnienia w równaniach (3.1.1) - (3.1.5) dodatkowych członów źródłowych, odpowiedzialnych za modyfikacje transportu energii i masy. Z fizycznego punktu widzenia zjawisko krzepnięcia można rozdzielić na dwa niezależne procesy: konwekcyjnego transportu energii i masy w płynie i przewodnictwa cieplnego w fazie stałej. Te dwa procesy są sprzężone równaniem przemiany fazowej, opisującym przemieszczanie się granicy między obu fazami. Rozwiązanie tak postawionego problemu sprowadza się do znalezienia tej granicy i wygenerowania rozwiązań dla każdej z faz. Wyznaczenie tej granicy polega na znalezieniu powierzchni o temperaturze przejścia fazowego $T(t)$. Oba rozwiązania, dla fazy ciekłej i stałej, muszą być zgodne na zmiennej granicy. Dla uzyskania tej zgodności przyjmuje się dodatkowe dwa związki: warunek zgodności temperatur oraz warunek zgodności bilansu strumieni ciepła. Ten ostatni warunek, zwany warunkiem Stefana, opisuje dodatkowy strumień ciepła przez powierzchnie granicy faz związany z przemianą fazową:

$$k_s \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_s - k_l \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_l = \rho \lambda \frac{\partial v}{\partial n} \Big|_\Gamma \quad (3.1.8)$$

Warunek Stefana umożliwia obliczenie zmian położenia granicy międzyfazowej. W obliczeniach numerycznych pociąga to za sobą konieczność generowania w każdym kroku czasowym nowej siatki obliczeniowej.

Podstawy teoretyczne metody śledzenia frontu opisane są w książce Cranka [9], natomiast implementacja oraz przykłady rozwiązań dla procesów krzepnięcia substancji jednoskładnikowych zostały przedstawione m.in. w pracy Yeoh'a i współautorów [67]. Na metodzie śledzenia frontu jest oparty stosowany przez autorów niniejszej pracy program ICE3D [68].

Z uwagi na komplikacje numeryczne metoda śledzenia frontu jest niemal wyłącznie domeną badań teoretycznych w ośrodkach akademickich. W praktycznych realizacjach najczęściej wykorzystywana jest jedno-obszarowa metoda entalpowa Voller [62], Bennona i Incropera [7]. Podstawą tej metody jest założenie, że ten sam układ równań różniczkowych oraz warunków brzegowych obowiązuje w całej domenie obliczeniowej Ω . Temu uproszczeniu służy wprowadzenie współczynnika, zwanego frakcją cieczy (ang. *liquid fraction*), opisującego stan skupienia materiału w danym punkcie domeny:

$$f_s = \begin{cases} 0 & \text{dla } T < T_s \\ \frac{T - T_s}{T_l - T_s} & \text{dla } T_s < T < T_l \\ 1 & \text{dla } T_l < T \end{cases} \quad (3.1.9)$$

Wartość współczynnika frakcji zmienia się od 0 dla fazy stałej do 1 dla fazy ciekłej. Dla przemiany izotermicznej odpowiada to skokowej zmianie na granicy faz. W rzeczywistości konieczne jest przyjęcie ciągłej zmiany własności i obok fazy ciekłej i stałej pojawia się obszar przejściowym ($T_s < T < T_l$), gdzie frakcja cieczy określona jest przez wartości ułamkowe. Istnienie takiego obszaru jest w wielu przypadkach fizycznie uzasadnione, odpowiada on tzw. *mushy zone*, porowatej strukturze obserwowanej na granicy faz dla przemian nieizotermicznych i substancji wieloskładnikowych.

W metodzie jedno-domenowej przepływ ciepła wygodnie jest opisywać zmianami entalpii ośrodka. Przyjmując założenie o liniowej zmienności ciepła przemiany fazowej między temperaturami solidus i liquidus, entalpię $h(T)$ w dowolnym punkcie obszaru Ω można określić wzorem:

$$h(T) = \int_{T_0}^T c_p dT + f_s \lambda \quad (3.1.10)$$

Fracja cieczy służy także do określenia ciągłej zmiany własności termofizycznych ośrodka (ciepła właściwego c_p oraz przewodności cieplnej k) oraz wygaszania prędkości na granicy z fazą stałą. Potrzebne związki w formie liniowej kombinacji wielkości odpowiadających fazie stałej i ciekłej mają postać:

$$u = f_s u_l \quad (3.1.11)$$

$$v = f_s v_l \quad (3.1.12)$$

$$w = f_s w_l \quad (3.1.13)$$

$$c_p = f_s c_{pl} + (1 - f_s) c_{ps} \quad (3.1.14)$$

$$k = f_s k_l + (1 - f_s) k_s \quad (3.1.15)$$

Odrębnego omówienia wymaga postać dodatkowych członów źródłowych S , występujących w równaniach (3.1.2)-(3.1.4). Człony te służą do modyfikacji tych równań, tak by ich postać dla płynu ($f_s = 1$) odpowiadała równaniom Naviera-Stokes'a, a dla fazy stałej gwarantowała zerowanie się pola prędkości. Praktycznie oznacza to dobór odpowiednich funkcji, zapewniających ciągłość pochodnych i stabilny proces numeryczny:

$$S_u = -C \frac{(1 - f_s)^2}{f_s^3 + 0.001} u \quad (3.1.16)$$

$$S_v = -C \frac{(1 - f_s)^2}{f_s^3 + 0.001} v \quad (3.1.17)$$

$$S_w = -C \frac{(1 - f_s)^2}{f_s^3 + 0.001} w \quad (3.1.18)$$

Można zauważyć, że dla temperatur powyżej punktu topnienia ($f_s = 1$) te człony źródłowe znikają w równaniach przepływu. Dla fazy stałej ich wysoka wartość powoduje natomiast zerowanie pola prędkości. Gdy temperatura ośrodka T przyjmuje wartości pośrednie z przedziału $[T_s, T_l]$ otrzymuje się niezerowe wartości członów źródłowych S . Dzięki temu równania przepływu opisują pole prędkości na granicy faz, tak jak w ośrodku porowatym. Takim ośrodkiem w zagadnieniach odlewniczych jest obszar przejściowy zajęty przez krzepnący metal i tworzące się w nim dendryty.

Metoda entalpowa z uwagi na prostotę i przydatność do modelowania nieizotermicznych procesów krzepnięcia stosowana jest bardzo często w kodach komercyjnych i uniwersyteckich. Przykładami mogą być m.in. programy Fluent [16], Fidap [15] i Nc4mar [18]. Do popularności metody entalpowej przyczynia się brak konieczności regeneracji siatki obliczeniowej w każdym kroku czasowym symulacji numerycznej, co istotnie zwiększa wydajność obliczeń. Ponadto, metoda ta daje lepsze rezultaty w porównaniu z metodą śledzenia frontu przy modelowaniu krzepnięcia materiałów anizotropowych, takich jak stopy metali. Poprzez implementację odpowiednich członów źródłowych, istnieje możliwość modelowania innych, dodatkowych procesów, takich jak

przechłodzenie i powstawanie tzw. *mushy zone*. Mankamentem metody entalpowej są trudne do uniknięcia oscylacje pola temperatury pojawiające się w pobliżu frontu międzyfazowego, przy stosowaniu niewystarczająco gęstych siatek obliczeniowych.

3.1.2. Modelowanie przepływów ze swobodną powierzchnią

Modelowanie swobodnej powierzchni w przepływach opiera się najczęściej na metodzie VoF (ang. *Volume of Fluid*, Hirt [24]), pozwalającej na uwzględnienie w modelach numerycznych sił napięcia powierzchniowego. Metoda VoF wyznacza powierzchnię rozdziału pomiędzy fazami (na ogół cieczą i gazem) na podstawie rozwiązania równania ciągłości dla objętościowej frakcji jednego ze składników. Równanie to ma następującą postać:

$$\frac{\partial f_l}{\partial t} + u \frac{\partial f_l}{\partial x} + v \frac{\partial f_l}{\partial y} + w \frac{\partial f_l}{\partial z} = 0 \quad (3.1.19)$$

Objętościowa frakcja jest dodatkową zmienną dla fazy ciekłej f_l określającą jej ułamkowy udział w każdej komórce obliczeniowej, przy czym zachowany jest następujący warunek:

$$f_l + f_g = 1 \quad (3.1.20)$$

Zakłada się, podobnie jak w metodzie entalpowej, że wielkości opisujące właściwości termo-fizyczne substancji zależą liniowo od ułamka każdej z frakcji objętościowej:

$$\rho = f_l \rho_l + f_g \rho_g \quad (3.1.21)$$

$$\mu = f_l \mu_l + f_g \mu_g \quad (3.1.22)$$

$$c_p = f_l c_{pl} + f_g c_{pg} \quad (3.1.23)$$

$$k = f_l k_l + f_g k_g \quad (3.1.24)$$

Podobnie prędkości płynu w równaniach ruchu wyrażają się przez ułamki frakcji faz:

$$u = f_l u_l + f_g u_g \quad (3.1.25)$$

$$v = f_l v_l + f_g v_g \quad (3.1.26)$$

$$w = f_l w_l + f_g w_g \quad (3.1.27)$$

Dzięki takiej definicji możliwe jest opisanie tymi samymi równaniami ruchu zachowania się obydwu faz w całym obszarze obliczeniowym Ω . Oddziaływanie między fazami na granicy rozdziału jest modelowane w równaniach (3.1.2)-(3.1.4) za pomocą dodatkowego członu źródłowego F_σ w postaci:

$$F_\sigma = \sigma \frac{\rho \gamma \nabla f_l}{\frac{1}{2}(\rho_l + \rho_g)} \quad (3.1.28)$$

Człon ten zależy od napięcia powierzchniowego σ , gradientu frakcji objętościowej f_l , lokalnej krzywizny powierzchni swobodnej γ oraz gęstości ρ . Łatwo zauważyć, że dla wszystkich komórek obliczeniowych wypełnionych tylko przez jedną z faz, człon F_σ znika z powodu zerowego gradientu frakcji objętościowej.

Podobnie jak w metodzie entalpowej, metoda VoF wymaga stosowania bardzo gęstych siatek obliczeniowych na granicy faz. Jej efektywne wykorzystanie w przepływie z ruchomą granicą (wypełnianie naczyń) wiąże się z koniecznością dodatkowego zagęszczania siatki obliczeniowej w

po bliziu szybko przemieszczającego się frontu fazowego. Taka implementacja metody wraz z dynamicznym zagęszczaniem siatki jest dostępna w stosowanym w tej pracy programie numerycznym FLUENT 6.2 [16].

3.2. Modele fizyczne i metody wykonywania symulacji procesów odlewniczych

Z uwagi na konieczność rozwiązywania problemów o skomplikowanej geometrii i istotne dla praktyki ograniczenie czasu obliczeń, programy odlewnicze w swojej najprostszej postaci często sprowadzały się do rozwiązania problemu przewodnictwa ciepła i krzepnięcia stopu w formie. Matematycznie proces ten opisany jest zagadnieniem początkowo-brzegowym dla równania różniczkowego przewodzenia ciepła (3.1.5), przy czym poszukiwanym rozwiązaniem jest rozkład temperatury $T=T(x,y,z,t)$ w funkcji położenia x, y, z i czasu t . Analizowany obszar przewodzenia ciepła dzieli się na podobszary Ω_l, Ω_s , zajęte przez fazę ciekłą i stałą stopu, oraz dodatkowo wydzielony podobszar Ω_f zajęty przez formę. Powierzchnia brzegowa $\partial\Omega_f$, ograniczająca obszar Ω_f , jest stała, natomiast powierzchnie brzegowe $\partial\Omega_l, \partial\Omega_s$ obszarów Ω_l i Ω_s zmieniają się wraz ze spadkiem temperatury, gdy faza ciekła kurczy się, a stała powiększa. Dla materiałów typowych dla odlewnictwa obszary Ω_l i Ω_s rozgranicza obszar przejściowy, gdzie obserwuje się stopniową przemianę fazy ciekłej w stałą. W największym uproszczeniu przyjmuje się jednak, że granica między fazą ciekłą i stałą stanowi zmienną w czasie powierzchnię $s(t)$, wyznaczoną przez część wspólną powierzchni $\partial\Omega_l$ i $\partial\Omega_s$ ($s(t) \equiv \partial\Omega_l \cap \partial\Omega_s$). Przy przejściu przez tę powierzchnię stop wydzielą ciepło krzepnięcia λ w temperaturze T_s , a udział fazy stałej f_s doznaje skoku: $f_s=0$ dla $(x,y,z) \in \Omega_l$ i $f_s=1$ dla $(x,y,z) \in \Omega_s$. Rozwiązania równania energii (3.1.5), spełniającego warunki początkowe i brzegowe poszukuje się dla każdej z domen obliczeniowych. Położenie granicy międzyfazowej $s(t)$ określa warunek Stefana (3.1.8). W pełnym opisie problemu dochodzą dodatkowo warunki ciągłości strumienia ciepła przekazywanego pomiędzy formą a stopem odlewniczym i odpowiednie warunki brzegowe wymiany ciepła układu forma-odlew z otoczeniem.

Typowe dla procesów metalurgicznych są silne zmiany własności materiałowych z temperaturą. Ich uwzględnienie w modelu numerycznym często stwarza kłopoty z uwagi na brak wystarczająco precyzyjnych informacji literaturowych. Dalszy rozwój komercyjnych programów odlewniczych koncentruje się na dodatkowych modyfikacjach modeli fizycznych, warunków brzegowych i początkowych, tak by możliwie ściśle opisywały przebieg fizycznego zjawiska. Na przykład zauważono, że istotną poprawę wyników można uzyskać przez uwzględnienie wpływu procesu zalewania na początkowy rozkład temperatury stopu, deformowanie się stygnącego odlewu, segregację składników chemicznych, tworzenie się dendrytów i kształtowanie mikrostruktury materiału. Uwzględnianie tych dodatkowych efektów prowadzi do rozbudowanych modeli, w których konieczne jest rozwiązywanie pełnego, sprzężonego układu równań masy, momentu pędu oraz energii. Zależnie od założeń programu, różne procesy (zalewania formy, tworzenia mikrostruktury, deformacji, pęknięcia odlewów, itd.) rozwiązywane są razem (sprzężenie równań) lub osobno. Z uwagi na złożone kształty geometryczne, komercyjne programy odlewnicze budowane są w oparciu o metody różnic skończonych (MRS) i elementów skończonych (MES). Specyficzny dla odlewnictwa problem analizy sprzężeń pól temperatury i naprężeń skutecznie rozwiązuje się metodą elementów skończonych. Problem mikrostruktury materiału rozwiązuje się używając wielu metod: MES, MES w połączeniu z automatami komórkowymi i metodami stochastycznymi, uwzględniając w modelu fizycznym przechłodzenie stopu i dynamikę procesu stygnięcia. W przeciwieństwie do symulacji akademickich, obok konieczności bardzo precyzyjnego modelowania geometrii i własności materiałów, istotny dla zastosowań przemysłowych jest czas obliczeń. Wprowadzanie koniecznych z tego względu uproszczeń modeli numerycznych, jak pokazano w dalszej części pracy, może jednak prowadzić do trudnych do przewidzenia rozbieżności rozwiązań numerycznych i przebiegu zjawiska fizycznego.

3.3. Metody dyskretyzacji

Numeryczna mechanika płynów bazuje na metodach dyskretyzacji domeny obliczeniowej i stosowane algorytmy rozwiązywania podstawowego zestawu równań (3.1.1–3.1.5) są ściśle powiązane z tymi metodami. Głównym celem numerycznej części pracy była ocena możliwości i dokładności modelowania procesów krzepnięcia, przepływu konwekcyjnego oraz przepływu dwufazowego z powierzchnią rozdziału. Symulacje numeryczne wykonano programami wykorzystującymi różne metody dyskretyzacji obszaru obliczeniowego. Każda z istniejących metod ma swoje zalety i wady. Do metod wykorzystanych w prezentowanych dalej obliczeniach należą:

- metoda objętości skończonych (MOS) [46]
- metoda różnic skończonych (MRS) [11, 14]
- metoda elementów skończonych (MES) [14]
- metoda bezsiatkowa [3, 37]

Pierwsze trzy metody należą do klasycznych i są stosowane od wielu lat zarówno w kodach akademickich jak i komercyjnych. Ich opis można znaleźć w większości podręczników metod numerycznych. Metody bezsiatkowe należą do nowych metod, nie mających jeszcze dużego praktycznego zastosowania w mechanice płynów. Tym niemniej, uzyskiwana dzięki uniknięciu skomplikowanego generowania siatki obliczeniowej elastyczność tych metod w opisie niemal dowolnych geometrii jest bardzo atrakcyjna dla zastosowań przemysłowych. Metody bezsiatkowe pozwalają na szybsze wyznaczenie współczynników układu równań algebraicznych dla całego obszaru obliczeniowego przy użyciu dowolnie rozłożonego zbioru punktów. Punkty te mogą być generowane wewnątrz domeny obliczeniowej równomiernie lub losowo. Dodatkowo punkty można w łatwy sposób zagęszczać w najbardziej interesujących rejonach przez dodawanie kolejnych, uzyskując dzięki temu odpowiednik siatek adaptacyjnych. Istnieje wiele odmian metod bezsiatkowych z różnego typu aproksymacjami – obszerny ich przegląd można znaleźć w książkach Liu [37] lub Alturi [3]. Do tej pory jedynie kilka z nich zostało zastosowanych do rozwiązywania problemów transportu ciepła i przepływu [55], w tym także z przemianą fazową [27].

W ramach obecnej pracy stworzono oparty o metodę bezsiatkową program numeryczny SOLVMEF, rozwiązujący zagadnienie przepływu konwekcyjnego. W implementacji metody zdecydowano się wykorzystać podejście oparte o model DAM (z ang. *Diffuse Approximation Method*), będący średniokwadratową aproksymacją najmniejszych kwadratów pól skalarnych i ich pochodnych. Dokładny opis metody w zastosowaniu do przepływów lepkich i termicznych można znaleźć w pracach Sadat [54] oraz Prax [48]. Metoda może być zastosowana do dowolnego rozmieszczenia punktów kolokacyjnych. Dla uproszczenia procedury testowej w naszych obliczeniach, prezentowanych w dalszej części niniejszej pracy, ograniczono się do równomiernego rozkładu punktów. Przy tak uproszczonym podejściu i przy zastosowaniu prostej postaci tzw. funkcji bazowych: $(1, x, y, x^2, xy, y^2)$, wzory różnicowe na pierwsze i drugie pochodne dowolnej funkcji można wprowadzić analitycznie.

Aproksymacja DAM pierwszych i drugich pochodnych skalarnej funkcji Φ w dowolnym punkcie P wyraża się prostymi wzorami, przypominającymi wzory różnicowe:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} = \frac{m_1(\Phi_E - \Phi_W) + m_2(\Phi_{NE} - \Phi_{NW}) + m_2(\Phi_{SE} - \Phi_{SW})}{2hm_1 + 4hm_2} \quad (3.3.1)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial y} = \frac{m_1(\Phi_N - \Phi_S) + m_2(\Phi_{NW} - \Phi_{SW}) + m_2(\Phi_{NE} - \Phi_{SE})}{2hm_1 + 4hm_2} \quad (3.3.2)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = \frac{\Phi_E - 2\Phi_P + \Phi_W}{h^2} \quad (3.3.3)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = \frac{\Phi_N - 2\Phi_P + \Phi_S}{h^2} \quad (3.3.4)$$

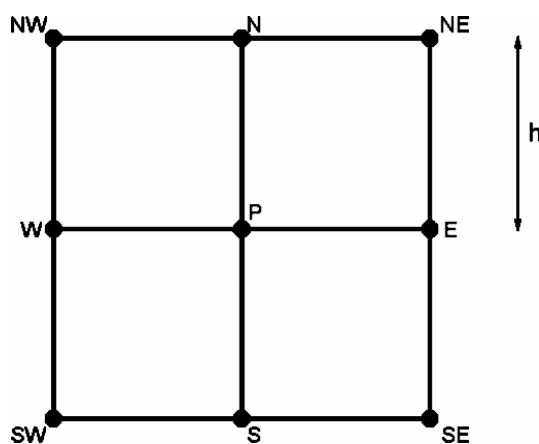
$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x \partial y} = \frac{\Phi_{SW} + \Phi_{NE} - \Phi_{NW} - \Phi_{SE}}{4h^2} \quad (3.3.5)$$

We wzorach h oznacza odległość pomiędzy sąsiednimi punktami, tak jak na rys. 10, a $\Phi_P, \Phi_N, \Phi_S, \Phi_W, \Phi_E, \Phi_{NW}, \Phi_{NE}, \Phi_{SW}, \Phi_{SE}$ oznaczają wartości funkcji aproksymowanej w punktach będących w bezpośrednim sąsiedztwie punktu P, m_1, m_2 oznaczają wartości tzw. funkcji wagowej. Funkcja wagowa określa zakres oddziaływania aproksymacji i najczęściej jest przyjmowana w postaci:

$$m(P, Z) = \begin{cases} \exp\left[-\ln(10)\left(\frac{r}{h\sqrt{2}}\right)^2\right] & \text{dla } r \leq h\sqrt{2} \\ 0 & \text{dla } r > h\sqrt{2} \end{cases} \quad (3.3.6)$$

gdzie r jest odległością pomiędzy punktem P a Z (Z jest dowolnym punktem z otoczenia punktu P, $m_1 = m(P, N) = m(P, S) = m(P, E) = m(P, W)$, $m_2 = m(P, NE) = m(P, NW) = m(P, SE) = m(P, SW)$).

Macierz układu równań liniowych otrzymanych z zastosowaniem opisanej aproksymacji jest rzadka, a ilość niezerowych współczynników w każdym wierszu macierzy jest ściśle związana z ilością punktów wziętych pod uwagę dla wyprowadzenia wzorów różnicowych. Każda *molekuła obliczeniowa* (rys. 10) składa się z dziewięciu punktów. Zatem w każdym wierszu macierzy otrzymano nie więcej niż dziewięć niezerowych współczynników. Jednak z uwagi na trudności efektywnej faktoryzacji tak powstałej macierzy, otrzymany układ musi być rozwiązywany klasyczną metodą Gaussa – Seidla. Nie jest to efektywne i jest to też jeden z powodów ograniczających szersze stosowanie metod bezsiatkowych.



Rys. 10. Przykładowe rozmieszczenie punktów obliczeniowych w aproksymacji DAM