

4. Charakterystyka programów symulacyjnych

Poniżej opisane są główne cechy programów używanych do symulacji przepływów termicznych. Opis rozpoczyna omówienie programów komercyjnych specjalizowanych pod kątem potrzeb odlewnictwa. W drugiej części omawiane są dwa uniwersalne programy komercyjne, stosowane w pracy do symulacji wykonywanych badań eksperymentalnych. Na końcu przedstawiona jest krótka charakterystyka programów akademickich, których głównym przeznaczeniem jest prowadzenie prac badawczych nad nowymi metodami i modelami obliczeniowymi. Główna zaleta tych programów to pełna dostępność kodów źródłowych, umożliwiająca kontrolę, weryfikację i modyfikację stosowanych algorytmów.

4.1. Programy komercyjne dla odlewnictwa

Zainteresowanie komercyjnymi systemami do symulacji procesów odlewniczych wynika z ich skuteczności – ułatwiają one projektowanie odlewów i ograniczają (lub wręcz zastępują) stosowane dawniej próby technologiczne. Duży potencjał kapitałowy przemysłu odlewniczego zainicjował pojawienie się na rynku wielu pakietów obliczeniowych i trudno znaleźć dla nich wspólny mianownik. Przykładowo w odlewniach japońskich często używane są programy SOLDIA i JS-CAST, w rosyjskich POLIGON, w amerykańskich CAPCAST – w Polsce mało znane i niedostępne. Prezentowany przegląd ograniczono więc tylko do omówienia kilku programów bardziej oferowanych w kraju. Takim programem jest dobrze znany w świecie niemiecki program MAGMA. Opis uwzględnia ponadto systemy: PROCAST, VULCAN, NOVAFLOW, PAM-CAST i SIMTEC (dwa ostatnie znane też odpowiednio jako: SIMULOR i WINCAST). Szczegóły komercyjnych systemów są okrywane tajemnicą, zatem opis opiera się głównie na materiałach reklamowych i na wynikach własnych testów lub informacji uzyskanych z zaprzyjaźnionych ośrodków.

Do przeprowadzonych w ramach tej pracy symulacji wykorzystano jedynie dwa z wymienionych programów (VULCAN i PROCAST), udostępnione autorom na zasadach grzecznościowych. Tym niemniej warto zapoznać czytelnika z możliwościami jakie oferują też inne firmy. Podobieństwa i różnice między wybranymi systemami omówiono według umownego podziału na podstawowe zagadnienia, takie jak: a) modele fizyczne i metody symulacji, b) odwzorowanie geometrii odlewów, c) cechy użytkowe, jak wbudowana baza materiałowa, rodzaje symulowanych technologii (odlewanie grawitacyjne, ciśnieniowe, z odwracaną formą, itp.), automatyzacja pracy (pre- i postprocessing).

4.1.1. Modele fizyczne i metody wykonywania symulacji

Poniżej przedstawiono listę ważniejszych procesów fizycznych, które można analizować przy użyciu komercyjnych systemów symulacyjnych dla odlewnictwa (skrótów podane w nawiasach oznaczają metody obliczeniowe stosowane w analizie):

MAGMA

- Zalewanie wnętrza formy sprzężone z analizą temperatury i krzepnięciem stopu (MRS),
- Krzepnięcie sprzężone z analizą mikrostruktury (MRS),
- Naprężenia i odkształcenia liczone na podstawie wyznaczonej historii temperatury (MES),
- Powstawanie wad odlewniczych, skurczu i mikroporowatości liczone na podstawie wyznaczonej historii temperatury.

NOVAFLOW

- Zalewanie wnętrza formy (MRS),
- Krzepnięcie (MRS),
- Powstawanie wad odlewniczych i skurczu liczone na podstawie wyznaczonej historii temperatury.

PAM-CAST

- Zalewanie wnętrza formy sprzężone z analizą temperatury (MRS),
- Krzepnięcie (MRS),

- Mikrostruktura (MES),
- Naprężenia i odkształcenia liczone na podstawie wyznaczonej historii temperatury (MES),
- Powstawanie wad odlewniczych, skurczu i mikroporowatości liczone na podstawie wyznaczonej historii temperatury.

PROCAST

- Zalewanie wnęki formy sprzężone z analizą temperatury (MES),
- Krzepnięcie sprzężone z analizą mikrostruktury oraz naprężeń i odkształceń (MES),
- Powstawanie wad odlewniczych, skurczu i mikroporowatości liczone na podstawie wyznaczonej historii temperatury,
- Identyfikacja parametrów procesu w oparciu o analizę odwrotną.

SIMTEC

- Zalewanie wnęki formy sprzężone z analizą temperatury (MES),
- Krzepnięcie sprzężone z analizą naprężeń i odkształceń (MES),
- Mikrostruktura (MES),
- Powstawanie wad odlewniczych, skurczu i mikroporowatości liczone na podstawie wyznaczonej historii temperatury.

VULCAN

- Zalewanie wnęki formy sprzężone z analizą temperatury (MES),
- Krzepnięcie sprzężone z analizą naprężeń i odkształceń (MES),
- Powstawanie wad odlewniczych i skurczu liczone na podstawie wyznaczonej historii temperatury.

4.1.2. Odwzorowanie geometrii układu odlew-forma

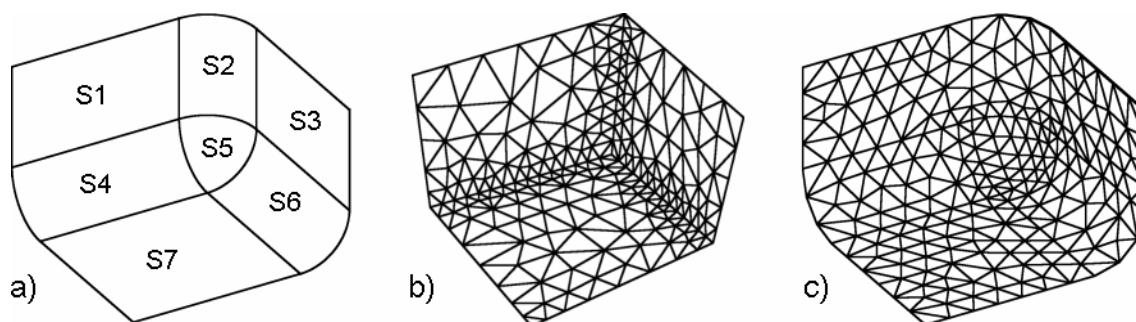
Dla celów symulacyjnych geometria układu odlew-forma podlega uproszczeniom. O tym, które uproszczenia są potrzebne, które dopuszczalne, a które nieuniknione, decyduje doświadczenie osoby wykonującej obliczenia. Doświadczony użytkownik programu może przez dobór tolerancji automatycznie pomijać szczegóły konstrukcyjne modelu mało ważne dla wyników obliczeń. Uproszczenia geometrii są pierwszym, ważnym źródłem możliwych błędów symulacji. Ten wstępny etap tworzenia modelu jest też na ogół najbardziej czasochłonny, zasługuje więc tym bardziej na szczególną uwagę. Problem jest bardzo szeroki i niżej omówiono tylko niektóre aspekty zagadnienia, wspólne dla programów opartych na dyskretyzacji metodą elementów skończonych MES i różnic skończonych (MRS). Pomijane są między innymi takie aspekty, jak np. modelowanie granicy między formą i odlewem poprzez podwójne węzły siatki, gdyż jest to problem pojawiający się w zagadnieniach krzepnięcia ze sprzężeniem termo-mechanicznym analizowanych jedynie programami MES.

W procesie budowy modelu numerycznego o dokładności odwzorowania geometrii decydujące są dwa podstawowe aspekty:

- a) wybór szablonu opracowywanych geometrii, możliwość korekty błędów, itp.,
- b) rodzaj oraz jakość użytych siatek obliczeniowych.

Pierwsza grupa czynników nie zależy od metody obliczeniowej stosowanej w symulacjach, druga silnie zależy zarówno od geometrii jak i od metody obliczeniowej.

Geometria odlewu opracowywana jest w specjalistycznych programach CAD i wczytywana do obliczeń w formatach stosowanych w projektowaniu komputerowym (ACIS, DXF, IGES, Parasolid, STEP, STL, VDA, XGL). Programy wspomagające projektowanie nie są tworzone pod kątem wymagań programów symulacyjnych, stąd przy implementacji geometrii generowanej programami CAD często pojawiają się rozbieżności. Typowe trudności ilustruje przykład z rys. 11, w którym prosty kształt prostopadłościanu z zaokrąglonymi krawędziami, opisany jest w programie CAD przez tzw. powierzchnie NURBS (powierzchnie S1-S7).



Rys. 11. Prosty model bryły i generacja siatek MES: (a) powierzchnie NURBS, (b) lokalne zagęszczenie siatki MES wzdłuż uproszczonych krawędzi, (c) docelowa siatka MES

Matematycznie NURBS określa się na bazie zbioru punktów kontrolnych P_{ij} i funkcji B-spline $N_{i,p}(u)$ i $N_{j,q}(v)$ rzędu p i q we współrzędnych powierzchniowych u, v ([47]). Rozmieszczenie punktów kontrolnych jest wyznaczone w programie CAD w konsekwencji działań projektanta, a więc jest znane. Położenie innych punktów modelowanej powierzchni dane jest wzorem

$$R(u, v) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m \left(\frac{N_{i,p}(u)N_{j,q}(v)w_{i,j}}{\sum_{k=0}^n \sum_{l=0}^m N_{k,p}(u)N_{l,q}(v)w_{k,l}} \right) P_{i,j} \quad (4.1.4)$$

(gdzie w_{ij} oznacza współczynniki wagowe). Powyższy związek pozwala na modelowanie bardzo złożonych kształtów w przestrzeni trójwymiarowej, przy równoczesnym zachowaniu znacznej dokładności odwzorowania. Z tego względu powierzchnie NURBS używane są w większości systemów CAD, jednak przy znacznej dowolności kształtów dokładne odtworzenie kształtu jest często trudne w realizacji.

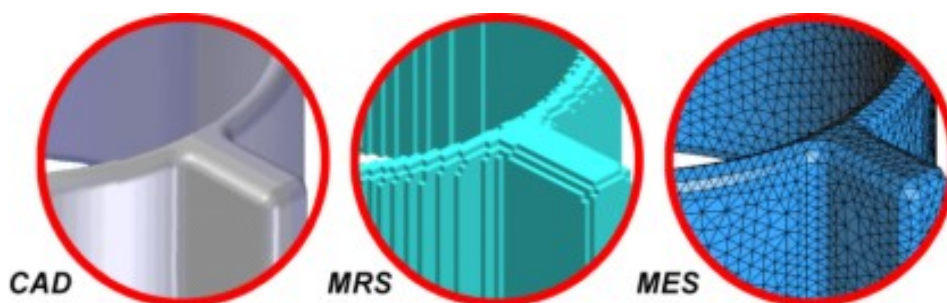
Dokładność analizy geometrii należy różnicować (np. dla krawędzi i powierzchni), by automatycznie upraszczać modele. Jednak eliminując nieistotne szczegóły, program symulacyjny potraktuje dwa punkty kontrolne (dwie krawędzie lub powierzchnie) jako ten sam element, jeżeli znajdują się zbyt blisko siebie, tj. ich odległość jest mniejsza od zadanej tolerancji. Zbyt duża tolerancja może więc wywoływać nieoczekiwane rezultaty. Taki przypadek ilustruje przykład rys.11, gdy program graficzny czytając model z rys. 11a pominął powierzchnie zaokrąglone S2, S4, S5, S6, i spowodował niepożądane powiększenie i nachylenie ścian S1, S3, S7. Efektem nieprawidłowego działania jest siatka elementów pokazana na rys. 11b. Ponowne wczytanie modelu CAD i jego analiza ze zmienioną dokładnością, lub manualną korektą geometrii przy użyciu prostych narzędzi programu graficznego, pozwala na wygenerowanie poprawnej siatki widocznej na rys. 11c.

Dokładność odwzorowania geometrii zależy od rodzaju stosowanej metody dyskretyzacji. Wysoka wydajność generatorów siatek dla metody różnic skończonych wynika ze stosowania prostego podziału modelu na zbiór prostopadłościów (w układzie kartezjańskim), o ścianach równoległych do płaszczyzn układu współrzędnych. W praktyce tak utworzona siatka rzadko pozwala na dokładne odwzorowanie kształtu odlewu. W rezultacie siatka wygenerowana dla realnego odlewu tworzy „schodkową” powierzchnię (widoczną na rys. 12) i jedynie dalsze jej zagęszczanie pozwala na zwiększenie dokładności odwzorowania geometrii.

Generatory siatek elementów skończonych są bardziej elastyczne w działaniu, ale generacja siatki wymaga często więcej czasu. Mniejsza efektywność wynika z konieczności automatycznego poszukiwania takiego zagęszczenia siatki, które odpowiadać będzie szczegółom modelu CAD – położenie węzłów siatki nie jest z góry zadawane. Dodatkowe, lokalne zagęszczanie siatki jest wykonywane przez projektanta dla poprawy odwzorowania zmian kształtu czy cech materiału. Ponieważ stosunkowo niewielka liczba elementów wystarcza aby ze satysfakcjonującą dokładnością odwzorować niemal każdą bryłę, metoda elementów skończonych jest podstawą większości kodów przemysłowych.

Wybór stopnia dyskretyzacji, czyli zagęszczenia siatki obliczeniowej, jest zawsze kompromisem między dokładnością wykonywanych symulacji i czasem obliczeń. Każdy problem ma typową dla siebie tolerancję dokładności. Dokładne rozwiązanie potrzebne będzie przykładowo do opisu ewolucji temperatury wewnątrz ważnych konstrukcyjnie miejsc odlewu (szczególnie, gdy potrzebna jest analiza mikrostruktury stopu), natomiast przy rozwiązywaniu problemu transportu energii w ściankach formy gęsta siatka powoduje jedynie zbędne przedłużenie czasu obliczeń. Optymalna siatka obliczeniowa powinna więc zapewnić dokładne wyniki bez niepotrzebnego zwiększania kosztu symulacji.

Siatkę ocenioną jako „dobrą” prawie zawsze otrzymuje się przez lokalne zagęszczanie elementów. Ocena siatki stosowanej w obliczeniach MES zależy od konkretnych cech konstrukcji i potrzeb obliczeniowych. Na rys. 11b zagęszczenie jest efektem nieprawidłowo wczytanego modelu CAD i nieprawidłowo przyjętych parametrów siatki. W innej sytuacji podobny rozkład elementów mógłby być jednak efektem celowego wyznaczenia rejonu lokalnego zagęszczenia. Przykład z rys. 12 pokazuje bardziej realistyczny detal modelu CAD z jego odpowiednikami po utworzeniu siatki MRS i MES. Widoczna dla siatki MRS typowa struktura schodkowa może generować niedokładności przy analizie efektów lokalnych dla tak zaprojektowanej geometrii.



Rys. 12. Porównanie modelu CAD z siatkami MRS i MES

Rodzaj siatki jest determinowany przez problem fizyczny i możliwą do zastosowania dla niego metodę obliczeniową. Dlatego od metody zależy także ocena jakości siatki. Instrukcja do programu NOVAFLOW wskazuje, że dla zapewnienia poprawnych wyników każdy przekrój analizowanego odlewu powinien zawierać minimum trzy elementy. Powoduje to znaczne zwiększenie liczby elementów w przypadku odlewów cienkościennych. Globalne zagęszczenie siatki konieczne dla MRS powoduje, że przeciętnie tylko 20% wygenerowanych elementów obliczeniowych reprezentuje odlew, reszta modeluje formę odlewniczą. Biorąc pod uwagę gorsze odwzorowanie kształtu odlewu i konieczność znacznego zagęszczania siatki w przypadku odlewów cienkościennych, widać nieefektywność MRS dla takich przypadków. Problem ten nie istnieje w przypadku siatek MES, pozwalających na elastyczny dobór lokalnego zagęszczania siatki.

Wprowadzanie uproszczeń geometrii jest dopuszczalne we wstępnej fazie modelowania, o ile np. pokrywa się z nieuniknionymi błędami odwzorowania geometrii powodowanymi przez wygenerowaną na koniec procesu modelowania siatkę elementów obliczeniowych. Błąd ostatecznego odwzorowania modelu zależy m.in. od sprawności generatorów siatek i może być na przykład oceniany na podstawie różnicy między objętością modelu wyjściowego i objętością siatki. Wpływ błędów geometrii na rozwiązanie problemu przepływowego jest jednak bardzo trudny do oceny *a priori*. Przeprowadzenie procedury weryfikacji i walidacji kodu może być dla takiej oceny pomocne.

4.1.3. Cechy użytkowe programów komercyjnych dla odlewnictwa

Pod względem wymagań sprzętowych komercyjne programy do symulacji procesów odlewniczych nie różnią się od innych aplikacji. To co różni programy do symulacji odlewniczych od analogicznych programów w innych dziedzinach, dotyczy szeregu cech specyficznych dla odlewnictwa. W pierwszym rzędzie jest to różnorodność materiałów, wielość form odlewniczych i dodatkowych elementów obejmujących nadmiar ciepła, jak ochładzalniki, pokrycia, itp. Symulacje

przemysłowe wymagają często uzupełniania baz materiałowych programu, tymczasem brak jest dokładnych danych niezbędnych do obliczeń. Każdy z programów pozwala na swój sposób uzupełnić braki, jednak ta możliwość wprowadza dodatkowe potencjalne źródło niedokładności generowanego rezultatu symulacji.

Stosowany w tej pracy program VULCAN przechowuje dane materiałowe w łatwych do edycji zbiorach tekstowych, umożliwiając użytkownikowi uzupełnienie bazy danymi z literatury lub innych źródeł. Z kolei program PROCAST zawiera moduł do tzw. analizy odwrotnej, umożliwiający identyfikację danych na podstawie m.in. przebiegu procesu krzepnięcia znanego z eksperymentu. Programy MAGMA oraz PROCAST dają także możliwość wyznaczania niezbędnych danych według zadanego składu chemicznego. Dotyczy to oczywiście jedynie typowych dla odlewnictwa materiałów. Podobnie jest w programie NOVAFLOW, z tym, że użytkownik tego programu może definiować własny materiał zmieniając skład chemiczny jedynie dla z góry zadanych stopów, dla których zdefiniowany jest typ układu równowagi (np. Fe-C, Al-Si, itd.).

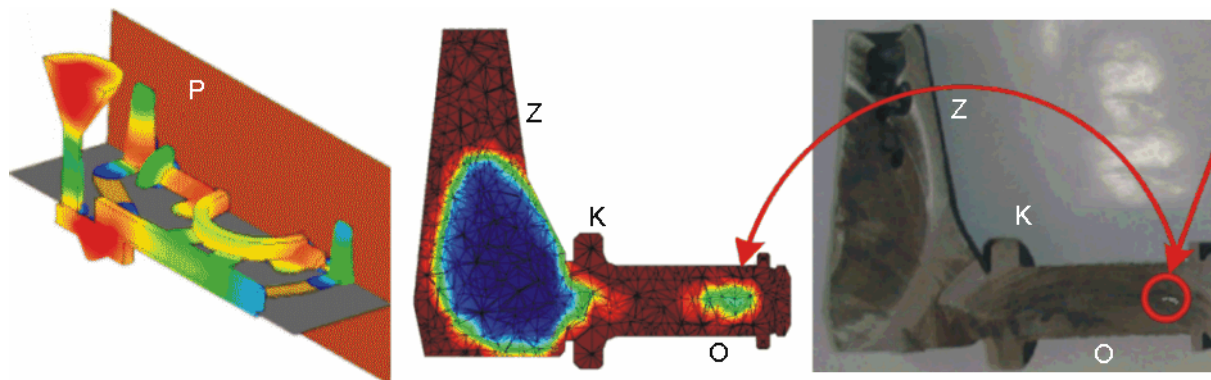
Innym, typowym dla programów odlewniczych, elementem jest możliwość wyboru stosowanej technologii. Przed rozpoczęciem obliczeń symulacyjnych użytkownik musi określić rodzaj odlewania – nisko- lub wysokociśnieniowe, grawitacyjne, z wypalaniem modelem (ang. *lost foam*), w formie piaskowej, kokilowej, odśrodkowej, ciągłej, z formą odwracaną. Pod tym względem najbardziej rozbudowany jest program MAGMA. Podstawowe charakterystyki każdej z technologii są elementem „dopasującym” przebieg symulacji do przebiegu zjawiska fizycznego. Ocena wiarygodności tego dopasowania jest bardzo trudna bez konfrontacji rezultatu symulacji z rzeczywistością.

Do niewątpliwych zalet komercyjnych programów odlewniczych należy zaliczyć możliwość dokładnej analizy przebiegu podstawowych faz procesu technologicznego (tj. zalewanie wnęki formy odlewniczej, krzepnięcie stopu, zasilanie odlewu, powstawanie wad, itd.). Umożliwia to optymalizację produkcji i poprawę jakości produktu. I tak podczas symulacji zalewania i wypełniania wnęki formy można poszukiwać numerycznie sposobu eliminacji zagazowania, przelania i wtrąceń niemetalicznych. Analiza procesu krzepnięcia i zasilania odlewu wiąże się z możliwością weryfikacji i optymalizacji technologii odprowadzania ciepła i eliminacji wad wskutek przerw w wypełnianiu formy. Proces stygnięcia jest źródłem naprężeń i odkształceń odlewu, symulacja numeryczna tej fazy ma pozwolić na analizę stanu naprężeń w stygnącym odlewie. Skuteczność analizy numerycznej zależy nie tylko od jej dokładności, ale i formatu w jakim rezultaty symulacji są udostępnione użytkownikowi programu. Przykładowy raport udostępniany przez program WINCAST podano w poniższej tabeli:

rodzaj symulacji	wynik z programu WINCAST
zalewanie formy	czas zalewania, rodzaj przepływu (laminarny/turbulentny), front zalewania, zmiany temperatury
krzepnięcie	czas i prędkość krzepnięcia, izotermy, gradienty temperatury, porowatość, obszary fazy stałej i ciekłej, ciśnienie makroskopowe wynikające z powstawania ziaren mikrostruktury
analiza termo-mechaniczna	naprężenia termiczne, wytrzymałość na ściskanie i rozciąganie, odkształcenie

We wszystkich programach odlewniczych stosuje się wizualizację wyników w formie wykresów charakterystycznych wielkości w funkcji czasu w wybranych punktach, map i izolinii pól skalarnych w zadanej chwili czasu i przekroju (bądź w rzucie na wybraną płaszczyznę), oraz w formie animacji. Jest to istotne dla oceny zarówno jakości samej symulacji, jak i dla przeprowadzenia porównań z pomiarami, czy innymi symulacjami. Standardem jest analiza zmiany pola temperatury, udziału fazy ciekłej, prędkości przepływu, ciśnienia oraz czasu krzepnięcia. Inne wielkości są związane z możliwościami konkretnego programu. Przykładowo program NOVAFLOW pokazuje na podstawie interpretacji wyników rozkład żużla (Al_2O_3 , SiO_2 , MnO , FeO , Cr_2O_3 , ZrO_2 , itp.) w stopie, czy też miejsca kondensacji pary. Takie informacje są już niedostępne np. w programie VULCAN.

Skuteczność obliczeń symulacyjnych można w pełni ocenić porównując wyniki numeryczne z rzeczywistymi odlewami przemysłowymi. Przykład takiego porównania pokazuje rys. 13. Po lewej stronie jest rozkład temperatur w wybranym przekroju (P), a po prawej fotografia wady skurczowej we fragmencie rzeczywistego odlewu. Strzałki wskazują wadę i odpowiadające jej miejsce gorące w zaawansowanym etapie stygnięcia. Gradienty temperatury, w wynikach obliczeń wyróżnione przez tęczowo zmieniające się kolory, pozwalają wyjaśnić przyczynę powstawania wady. Można zauważyć, że podczas krzepnięcia istnieją rozdzielone fazą stałą dwa gorące obszary z ciekłym metalem. Również układ zasilający nie jest prawidłowo zaprojektowany, na połączeniu między odlewem (O) i zasilaczem (Z) znajduje się charakterystyczny kołnierz (K) przyspieszający lokalne stygnięcie odlewanej konstrukcji. Tego rodzaju informacje są cenne przy projektowaniu i przyczyniają się do skrócenia czasu potrzebnego na opracowanie technologii i wzrostu efektywności. Takie porównanie, choć bardzo wartościowe, wymaga jednak wielokrotnego powtarzania całego, nieraz bardzo kosztownego, procesu technologicznego. Proponowane w tej pracy stosowanie modeli zastępczych mogłoby ten proces znacznie uprościć i znacznie zredukować koszty analizy. Jest to tym bardziej istotne, jeśli zważyć niebezpieczny brak zaufania wśród *odlewników* do rezultatów profesjonalnych programów symulacyjnych. Znana jest np. opinia o braku wiarygodności czołowego programu symulacyjnego MAGMA przy lokalizacji naprężeń i pęknięć odlewów na gorąco. Podobne, trudne do przewidzenia *a priori* problemy pojawiać się mogą w innych zagadnieniach rozwiązywanych przy użyciu programów komercyjnych.



Rys. 13. Rozkłady temperatur wyznaczone programem VULCAN i rzeczywista wada konstrukcji

4.2. Uniwersalne programy obliczeniowe i akademickie

Jak już wcześniej wspomniano, w typowych programach odlewniczych komplikacje związane ze złożoną geometrią i stosowanymi w przemyśle materiałami powodują konieczność pogodzenia się z licznymi uproszczeniami modeli fizycznych. Porównanie programów odlewniczych ze standartowymi pakietami obliczeniowymi stosowanymi w mechanice płynów powinno wskazać na skutki takich uproszczeń i umożliwić ocenę wiarygodności tych pierwszych. W pierwszej kolejności omówimy stosowane w tej pracy dwa komercyjne pakiety obliczeniowe: FLUENT i FIDAP. W dalszej części, programy akademickie, stworzone lub zaadaptowane dla potrzeb przeprowadzonych symulacji.

FLUENT (metoda objętości skończonych)

Jednym z powszechniej stosowanych pakietów obliczeniowych numerycznej mechaniki płynów jest program FLUENT [16]. Dzięki zastosowaniu metody objętości skończonych i całkowitego sformułowania zasad zachowania masy i pędu, możliwy jest elastyczny wybór niestrukturalnych i nieortogonalnych siatek obliczeniowych. W przeciwieństwie do typowych programów odlewniczych, program pozostawia użytkownikowi dużą swobodę wyboru modelu fizycznego, algorytmu numerycznego oraz schematów dyskretyzacji pochodnych przestrzennych i czasowych. Ta niewątpliwa dla badacza zaleta programu jest często źródłem pierwszych błędów, generowanych przez program obsługiwany przez niedoświadczonego użytkownika. Inna, istotna dla numerycznego *eksperymentowania* zaleta programu FLUENT, to możliwość definiowania własnych modułów

(tzw. *user defined function*), odpowiedzialnych za odwzorowanie własności materiałowych, warunków brzegowych, czy też modyfikacje samego algorytmu numerycznego. W obliczeniach prezentowanych w pracy wykorzystywano tę możliwość do zaimplementowania w obliczeniach nieliniowej zależności gęstości oraz lepkości od temperatury, opisaney na podstawie własnych pomiarów. Do modelowania procesów krzepnięcia program FLUENT korzysta z opisaney wcześniej metody entalpowey operującej na stałej siatce, co znacznie upraszcza dyskretyzację problemu i skraca czas obliczeń. Przepływy z powierzchnią rozdziału dwóch płynów (np. gaz – ciecz) są modelowane w programie przy pomocy metody VOF. Jednoczesne stosowanie obydwu metod umożliwia symulację wypełniania modelu wnęki odlewniczej.

FIDAP (metoda elementów skończonych)

Kolejnym z kodów numerycznych wykorzystanych w tej pracy do analizy problemów przepływu z przemianami fazowymi jest program FIDAP v. 8.7.0 [15]. Podobnie jak uprzednio opisany pakiet obliczeniowy, FIDAP umożliwia stosowanie w symulacjach szerokiej gamy modeli fizycznych i algorytmów numerycznych. Modelowanie przepływów połączonych z procesem krzepnięcia realizowane jest podobnie jak w programie FLUENT, przy wykorzystaniu metody entalpowey. Dyskretyzacja w programie FIDAP oparta jest na metodzie elementów skończonych, co znacznie ułatwia odwzorowanie skomplikowanych geometrii i skraca czas obliczeń. Rozwiązanie nieliniowego układu równań, będącego wynikiem dyskretyzacji metodą elementu skończonego, może być uzyskane metodami projekcyjnymi, przy wykorzystaniu rozdzielania zmiennych ciśnienia od zmiennych prędkości lub metodami sprzężonymi. Przewidziano w programie możliwość definiowania własnych zależności własności materiałowych od temperatury, chociaż nie jest to procedura tak prosta, jak w programie FLUENT. Podsumowując opisane dalej porównanie obu programów FLUENT i FIDAP, można stwierdzić, że ten ostatni zapewnia szybką i stabilną zbieżność rozwiązania, ale odbywa się to kosztem dokładności obliczeń.

FRECON3V, ICE3D (metoda różnic skończonych)

Program FRECON3V [36] jest kodem uniwersyteckim opartym na metodzie różnicowej. Zmodyfikowana wersja kodu, który powstał w University of New South Wales w Sydney, została wykorzystana w pracy do stworzenia porównawczej bazy rozwiązań. Algorytm programu pozwala na rozwiązywanie równań przepływu i energii dla stałej, ortogonalnej siatki obliczeniowej. Ogranicza to praktycznie stosowalność programu jedynie do różnych wariantów geometrii prostopadłościanu. Dla uniknięcia problemów z członem ciśnieniowym algorytm programu rozwiązuje układ równań przepływu płynu nieściśliwego w zmiennych wirowości i potencjału prędkości [11]. Zastosowanie półjawnej metody ADI (*Alternating Direction Implicit*) dla zmiennych przestrzennych i nad-relaksacji całkowania w czasie (*false transient*), pozwala na szybkie rozwiązywanie problemów przepływowych w trzech wymiarach. Prosta struktura programu, duża szybkość i dokładność obliczeń to podstawowe zalety omawianego kodu. Dzięki możliwości definiowania funkcyjnych zależności temperaturowych dla lepkości, gęstości, ciepła właściwego i współczynnika przewodnictwa cieplnego płynu, implementowanych w formie odpowiednich procedur, FRECON3V mógł również być wykorzystany w obecnych badaniach do analizy wpływu zmiennych własności materiałowych płynu na strukturę przepływu.

Znacznie bardziej złożony wariant tego programu, ICE3D [67, 68], powstał dla potrzeb analizy procesów krzepnięcia. Program ICE3D (i jego wariant ICE3DW3 - uwzględniający ścianki naczyń) wykorzystuje do symulacji przepływu z przemianą fazową dwie domeny obliczeniowe, dla fazy stałej i ciekłej, z osobnymi siatkami dopasowanymi do granicy faz. Wymaga to w każdym kroku obliczeniowym pracochłonnej generacji nowej siatki obliczeniowej i transformacji rozwiązywanego układu równań ze współrzędnych krzywoliniowych układu fizycznego do kartezjańskiego układu współrzędnych systemu obliczeniowego. Mimo długiego czasu obliczeń, kod ten został wykorzystany jako generator rozwiązań referencyjnych, głównie ze względu na bardziej *fizyczne* modelowanie izotermicznej powierzchni rozdziału faz.

SOLVSTR (metoda różnic skończonych)

Ograniczenie metody numerycznej do dwóch wymiarów pozwala na zastosowanie klasycznej transformacji równań Naviera-Stokes'a do układu równań transportu wirowości i funkcji prądu, i uniknięcie tym samym problemów numerycznych z członem ciśnieniowym. Taką metodę zastosowano w stworzonym dla celów testowych programie SOLVSTR. Do efektywnego osiągnięcia stanu stacjonarnego wykorzystana została w programie tzw. metoda całkowania w pseudoczasie [14], wykorzystująca schemat trapezów do aproksymacji pochodnej czasowej. Do dyskretyzacji równania wirowości, funkcji prądu oraz równania energii wykorzystano drugorzędowy schemat różnic centralnych (CDS [14]). Równania rozwiązywane są przy użyciu algorytmu ADI. Program SOLVSTR w swoim założeniu posłużył do generowania rozwiązań referencyjnych do porównań i oceny dokładności używanych w symulacjach schematów numerycznych.

SOLVMEF (metoda bezsiatkowa)

Jak wspomniano wcześniej, w numerycznej mechanice płynów wiąże się ostatnio duże nadzieje z zastosowaniem metod bezsiatkowych. Dla zbadania przydatności tego podejścia do symulacji przepływów termicznych opracowano w oparciu o metodę opisaną w pracach Praxa [48] i Sadata [54] nowy program SOLVMEF. Program ten wykorzystuje omówioną wcześniej aproksymację DAM do rozwiązywania dwuwymiarowych problemów przepływowych, również w obecności konwekcji naturalnej. Równomierne rozłożenie punktów kolokacyjnych pozwoliło na znaczne uproszczenie wzorów różnicowych, zastosowanych do dyskretyzacji równań transportu energii, wirowości i funkcji prądu. Przyjęcie tej reprezentacji równań przepływu umożliwiło bezpośrednie porównania rezultatów symulacji z omawianym wcześniej programem SOLVSTR. Obydwa kody zostały pozytywnie zweryfikowane przez porównanie z klasycznym wzorcem numerycznym Davisa [10] (błąd funkcji prądu mniejszy niż 1% dla liczby Rayleigh'a $Ra = 10^5$).