

6. Weryfikacja i walidacja obliczeń numerycznych

Niniejszy rozdział rozpoczyna się definicją wzorca numerycznego zaproponowanego dla sprawdzenia dokładności i wydajności programów numerycznych używanych w symulacjach numerycznych. Stosując ten wzorec określono dokładności rozwiązań otrzymanych za pomocą różnych algorytmów i oceniono ich przydatność w dalszych badaniach. W dalszej części rozdziału znajduje się opis analiz wiarygodności symulacji, przeprowadzony przez porównanie wyników numerycznych z niektórymi wynikami eksperymentów omówionych w Rozdziale 5.

6.1. Definicja wzorca numerycznego

W celu określenia dokładności każdego z testowanych programów w ramach prowadzonych badań zdefiniowano wzorec numeryczny (ang. *benchmark solution*), który ma umożliwić wstępną analizę dokładności obliczeń modeli numerycznych stosowanych do symulacji przepływów termicznych [41]. Wzorec opisuje zjawisko konwekcji naturalnej wody w pobliżu temperatury krzepnięcia i odpowiada wzorcowi eksperymentalnemu SIG, opisanemu w poprzedniej części pracy (patrz Rozdział 5.1.1). Dla uproszczenia, w zadaniu numerycznym ograniczono się do analizy dwuwymiarowego przekroju centralnego sześcianu. Przepływ generowany jest różnicą temperatur $T_h = 283K$ i $T_c = 273K$, ustaloną dla przeciwległych pionowych ścianek izotermicznych. Dla pozostałych ścianek naczynia przyjęto adiabatyczne warunki brzegowe. Ze względu na małe zmiany temperatury w przepływie, a także dla uproszczenia wzorca numerycznego, przyjęto stałe wartości wszystkich własności materiałowych, za wyjątkiem gęstości wody. Gęstość wody w pobliżu punktu krzepnięcia wykazuje silnie nieliniową zależność od temperatury. Zależność ta, opisana w Tabeli 3, została zaimplementowana w członie wypornościowym testowanych kodów (tzw. model Bousinesqua).

Wybór tej konfiguracji jako wzorca podyktowany jest dużą wrażliwością struktur przepływu na błędy symulacji numerycznej. Nieliniowość przebiegu funkcji gęstości sprzężona z ruchomym brzegiem granicy fazowej powoduje, że nawet ten prosty układ przepływowy stanowi trudne do dokładnego odwzorowania zadanie numeryczne (Kowalewski, Redow, [33]). Zaproponowany wzorec numeryczny pozwala na porównanie wydajności kodów numerycznych oraz oszacowanie ich dokładności. Dwuwymiarową reprezentację problemu opisuje podstawowy układ równań (3.1.1)-(3.1.3) i (3.1.5). Przyjmując jako warunek początkowy zerowe pole prędkości oraz temperaturę $T_0 = 278K$, poszukiwano stanu stacjonarnego przepływu.

Bezwymiarowe liczby charakteryzujące powyższy przepływ to liczba Rayleigha Ra i liczba Prandtla Pr . Dla opisanej powyżej konfiguracji wynoszą one odpowiednio $1.503 \cdot 10^6$ oraz 13.31 . Należy zwrócić uwagę na umowność wartości liczby Rayleigha zdefiniowanej dla materiałów o nieliniowej charakterystyce termicznej. Podana wartość odnosi się do referencyjnej temperatury $273K$ (temperatura krzepnięcia wody). W zakresie temperatur $273K - 283K$, ze względu na anomalie gęstości wody, liczba Rayleigha zmieniałaby się wielokrotnie dla innej temperatury referencyjnej.

Celem zwiększenia stabilności kodu i zmniejszenia wpływu błędów zaokrąglenia (*round-off errors*), część z opisanych programów numerycznych operuje w zmiennych bezwymiarowych. Bezwymiarowa temperatura \mathcal{G} , współrzędne X , Y oraz składowe prędkości U , V są zdefiniowane w oparciu o następujące relacje:

$$\mathcal{G} = (T - T_c) / (T_h - T_c), \quad X = x/L, \quad Y = y/L, \quad U = \mu c_p u L / k, \quad V = \mu c_p v L / k \quad (6.1.1)$$

6.2. Weryfikacja programów

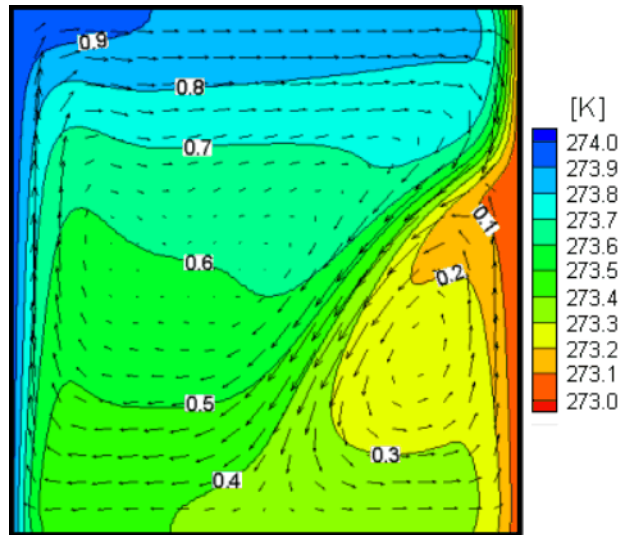
Do rozwiązania powyżej sformułowanego problemu użyto pięć opisanych wcześniej kodów numerycznych opartych na różnych metodach dyskretyzacji (metoda różnic skończonych, metoda objętości skończonych, metoda elementów skończonych, metoda bezsiatkowa). Porównania dokonano po weryfikacji każdego z kodów numerycznych przeprowadzając analizę wrażliwości na stopień dyskretyzacji (gęstość siatki). Po wybraniu rozwiązania referencyjnego przeprowadzono

porównawczą analizę błędów. Poniżej omówiono rezultaty przeprowadzonego testu i podstawowe dane ilościowe. Dla każdego z testowanych kodów numerycznych podano tabelarycznie ekstremalne wartości prędkości wewnątrz naczynia oraz średnią wartość liczby Nusselta na prawej, zimnej ścianie. Dodatkowo podano wartości ekstremalne prędkości na poziomej linii przecinającej centralnie kuwetę ($Y=0.5$) oraz pionowej linii przecinającej centralnie kuwetę ($X=0.5$) – Dodatek B2. Poniżej w pierwszej kolejności omówiono podstawowe cechy rozwiązań otrzymanych przy użyciu omawianych programów, zwracając uwagę na zachowanie się wartości globalnych i na czas obliczeń. Porównanie globalnych wartości, przedstawionych w Tabelach B2-6 w Dodatku B2, nie jest jednak wystarczające dla oceny wydajności różnych metodologii rozwiązywania powyższego zadania. Okazuje się, że zbieżność wartości globalnych nie gwarantuje dokładności odtworzenia struktury przepływu. Dla przeanalizowania tego parametru zaproponowano nową metodę weryfikacji rozwiązań numerycznych, polegającą na analizie średnich błędów profili prędkości i temperatury ekstrahowanych dla wybranych, charakterystycznych przekrojów. Rezultaty tej analizy przedstawiono w punkcie 6.2.6 tego podrozdziału.

6.2.1. FRECON3V (metoda różnic skończonych)

Pierwszym z przetestowanych kodów numerycznych jest trójwymiarowy kod FRECON3V oparty na metodzie różnic skończonych, opisany w Rozdziale 4.2. FRECON3V wykorzystuje do reprezentacji zmiennych tzw. potencjał wektorowy, sprawiający problemy przy definicji warunków brzegowych i w złożonych geometriach. Reprezentacja taka jest też często przyczyną kłopotów ze spełnieniem przez rozwiązania równania ciągłości 3.1.1. Okazało się jednak, że pod względem czasu obliczeń i dokładności odwzorowania struktur przepływu najefektywniejszym kodem jest FRECON3V. Rozwiązania uzyskano dla prostokątnych jednorodnych kartezjańskich siatek obliczeniowych. Ponieważ porównania dotyczą problemu płaskiego, przyjęto symetryczne warunki brzegowe i 5 węzłów obliczeniowych dla trzeciego wymiaru. W praktyce dla wektora prędkości oznacza to przyjęcie na tej granicy zerowania składowej normalnej i założenie poślizgu składowych stycznych prędkości. Dla pola temperatury przyjmuje się zerowanie strumienia ciepła w trzecim wymiarze, realizowane przez adiabatyczne warunki brzegowe. Dwuwymiarowe rozwiązania dla tak postawionego problemu zostały uzyskane dla siatek o rosnącej od 21×21 do 301×301 liczbie węzłów obliczeniowych. Wyniki tych obliczeń, oznaczone skrótem FRE, przedstawiono w Tabeli B1 w Dodatku B2. W pierwszej części tabeli podano globalne wartości ekstremalne dla składowych prędkości i średnią wartość liczby Nusselta obliczoną dla prawej (zimnej) ścianki kuwety. W drugiej części tabeli zostały zestawione wartości minimalne i maksymalne składowych prędkości na prostych przecinających kuwetę poziomo ($Y=0.5$) i pionowo ($X=0.5$). Warunek zbieżności określony dla residuów wynosił 10^{-9} . Czas obliczeń wydłużał się z trzecią potęgą rozmiaru siatki obliczeniowej, od $180s$ dla siatki najrzadszej (FRE1) do około $3.6 \times 10^5 s$ dla siatki najgęstszej (FRE7). Czasy obliczeń zdefiniowano dla programu uruchomionego na stacji roboczej pracującej w 32bitowym systemie operacyjnym Linux i wyposażonej w procesor Pentium4 HT/3GHz, 2GB RAM. Analiza zbieżności pozwoliła uznać rozwiązanie FRE7 za wzorcowe i rezultaty opisanych dalej symulacji odniesiono do tego rozwiązania.

Wektory prędkości oraz kontury temperatury otrzymane dla siatki 201×201 (FRE6) przedstawia rys. 35. Możemy tu wyróżnić dwie główne cyrkulacje płynu. Pierwsza cyrkulacja, zgodna z ruchem wskazówek zegara, odpowiada za transport płynu ogrzewanego na lewej gorącej ścianie. Po osiągnięciu krawędzi gorącej ścianki ogrzana ciecz przemieszcza się poziomo wzdłuż górnej adiabatycznej ścianki, po czym nie osiągając przeciwległej ścianki zimnej zawraca wzdłuż przekątnej naczynia, podążając zgodnie z izoliniami maksymalnej gęstości płynu. Druga, *anomalna* cyrkulacja, generowana jest wzdłuż zimnej ścianki. Wyporność wody rośnie ze spadkiem temperatury poniżej $277K$ i w związku z tym ochłodzona ciecz porusza się wzdłuż ścianki zimnej w kierunku ścianki górnej. Zimny strumień cieczy zderza się ze strumieniem gorącej cieczy unoszonej przez pierwotną cyrkulację (por. rys. 14a). W ten sposób anomalia gęstości wody stworzyła ciekawą i jednocześnie trudną do symulacji numerycznych strukturę przepływu z tzw. punktem siodłowym utworzonym w miejscu kolizji obu cyrkulacji. Ze uwagi na wrażliwość takiej struktury na niedokładności numeryczne i zmiany warunków brzegowych jest ona szczególnie predysponowana do weryfikacji kodów numerycznych.



Rys. 35. Naturalna konwekcja wody w naczyniu typu SRG. Kontury temperatury i wektory prędkości otrzymane w obliczeniach kodem FRECON3V (FRE6 w Tabeli 5)

6.2.2. FLUENT (metoda objętości skończonych)

Obliczenia wykonane programem FLUENT wykonano dla kilku jednorodnych siatek kartezjańskich, a uzyskane wartości ekstremalne, oznaczone skrótem FLU, przedstawiono w Tabeli B2 w Dodatku B2. Obliczenia wykonano poszukując stacjonarnego rozwiązania przepływu laminarnego, stosując dla członu ciśnieniowego metodę projekcyjną SIMPLEC oraz schemat dyskretyzacji QUICK. Czas obliczeń tym programem jest znacznie dłuższy niż miało to miejsce w dla poprzedniego kodu numerycznego. W związku z tym pierwotnie obliczenia wykonywano z pojedynczą precyzją zmiennoprzecinkowej reprezentacji liczb. Jednak uzyskiwane wyniki, porównane z wzorcem FRE6, wykazywały znaczne błędy, nawet dla bardzo gęstych siatek obliczeniowych (190x190 i 380x380). W związku z tym wszystkie inne rozwiązania prezentowane w niniejszej pracy poszukiwano w podwójnej precyzji. W rezultacie testów kod oceniono jako stosunkowo wolny, ale zapewniający uzyskanie dokładnego rozwiązania przy odpowiednim zagęszczeniu siatki.

6.2.3. FIDAP (metoda elementów skończonych)

Stacjonarne dwuwymiarowe rozwiązanie dla wzorcowego problemu otrzymano programem FIDAP, stosując kwadratowe elementy z funkcjami kształtu drugiego stopnia (elementy Hermite'a). Nieliniowy układ równań będący wynikiem dyskretyzacji został rozwiązany przez rozdzielanie zmiennych ciśnienia i prędkości. W Tabeli B3 w Dodatku B2 zebrano wyniki dotyczące ekstremów globalnych dla składowych prędkości uzyskane dla dwóch siatek, otrzymane dla residuów na poziomie 10^{-4} . Główną zaletą programu FIDAP jest szybkość obliczeń, zadanie FID1 rozwiązuje się pięć razy szybciej niż odpowiadające mu gęstością siatki zadanie FLU0 z zastosowaniem kodu FLUENT. Wyniki otrzymane dla wybranych punktów kontrolnych nawet dla rzadkich siatek 38x38 (FID1 w Tabeli B4a) wydają się bardzo zbliżone do tych uzyskanych dla znacznie gęstszych siatek poprzednich kodów. Jednakże ich dokładniejsza analiza, uwzględniająca skomplikowaną strukturę przepływu wykazała znaczące rozbieżności w porównaniu ze wzorcem (Tabela B4b).

6.2.4. SOLVSTR (metoda różnic skończonych)

Mimo, że reprezentacja równań w kodzie SOLVSTR jest podobna do zastosowanej w kodzie FRECON3V, jednakże kod SOLVSTR jest z założenia tylko dwuwymiarowy i dzięki temu może korzystać z nie sprawiającej kłopotów numerycznych skalarnej funkcji prądu. Szybkość programu SOLVSTR przy rozwiązywaniu zadanego problemu była porównywalna z osiąganą przez program FRECON3V. Szacunkowy czas rozwiązania zadania z siatką obliczeniową 200x200 (przy

akceptowalnym residuum $< 10^{-9}$) wynosił 10^5 sekund. Jednak obserwowana zbieżność rozwiązania była znacznie wolniejsza niż w przypadku kodu FRECON3V, utrudniając nawet dla najgęstszych siatek osiągnięcie rezultatów różniących się od wzorca mniej niż 1%. W efekcie, porównywanie dokładności kodów wypada niekorzystnie dla programu SLOVSTR (Tabela B4 Dodatek B2)

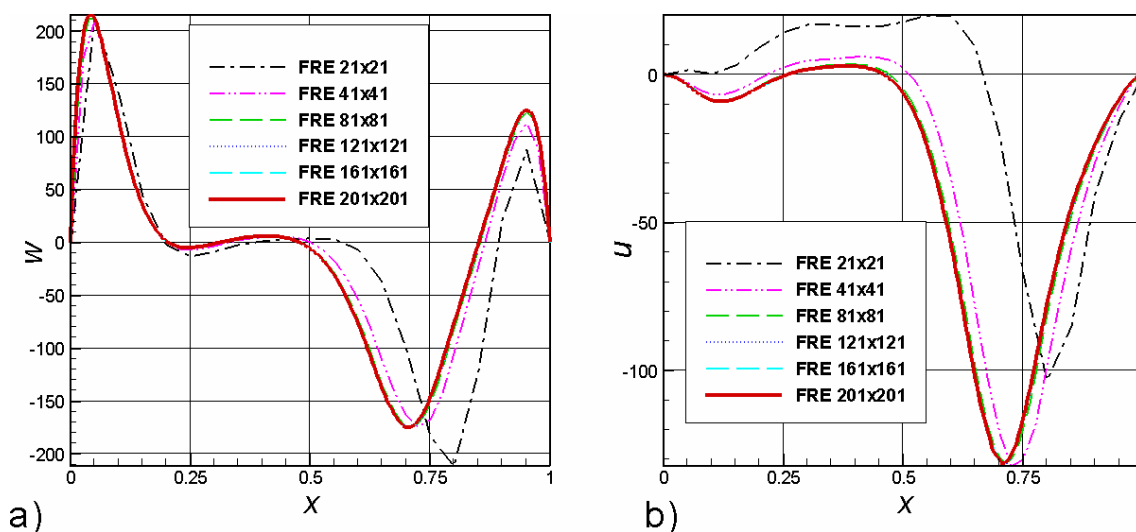
6.2.5. SOLVMEF (metoda bezsiatkowa, aproksymacja DAM)

Powyżej sformułowany problem rozwiązano również metodą bezsiatkową z wykorzystaniem opisaną wcześniej aproksymacji DAM. Jak wspomniano, rozwiązywanie otrzymanego w wyniku aproksymacji algebraicznego układu równań wymaga znacznie dłuższego czasu obliczeń w porównaniu z innymi kodami. Czas obliczeniowy potrzebny do otrzymania zbieżności na poziomie 10^{-6} na siatce obliczeniowej 100×100 okazał się około 50 razy dłuższy niż dla analogicznego przypadku rozwiązywanego programem SOLVSTR. W dodatku uzyskane rozwiązanie nie spełnia podstawowych kryteriów poprawności (błąd powyżej 5%). W celach porównawczych wartości ekstremów globalnych zostały zebrane w Tabeli B5 w Dodatku B2.

6.2.6. Analiza średnich błędów rozwiązań numerycznych

Praktykowane powszechnie porównywanie globalnych wartości (*extremów*) rozwiązań nie wystarcza dla określenia dokładności otrzymanego rozwiązania. Przykładem jest porównanie zamieszczonego w Tabeli B1 zestawienia wartości globalnych dla różnych siatek programu FRE z profilami prędkości otrzymanych dla tych przypadków (rys. 36). Można zauważyć, że rozwiązanie dla siatki 40×40 (FRE2), mimo że charakteryzuje się małymi błędami globalnymi, różni się od rozwiązania wzorcowego w niektórych punktach profilu pionowej składowej prędkości niemal o 50% (rys. 36).

Podobne rozbieżności widoczne są też dla poziomej składowej prędkości. Powyższe fakty dowodzą, że modelowanie naturalnej konwekcji z silnie nieliniowym członem wypornościowym wymaga dokładnej analizy i gęstych siatek obliczeniowych. Porównując na przykład liczbę Nusselta dla najrzadszej siatki (FRE1) i dla siatki dwa razy gęstszej można błędnie wywnioskować, że oba rozwiązania przedstawiają taką samą konfigurację. Porównanie profili składowych prędkości (rys. 36) jasno wskazuje na duże rozbieżności w obu przypadkach. Widać, że rozwiązania charakteryzujące się małymi błędami (2%-5%) odwzorowania wartości globalnych, i tym samym kwalifikowane zazwyczaj w literaturze jako poprawne, mogą w istocie opisywać różne struktury przepływu. Takie błędy mogą być decydujące dla poprawności modelowania procesu krzepnięcia, gdzie nieliniowe charakterystyki równań przepływowych sprzęgają się z deformującą się, ruchomą granicą frontu fazowego.



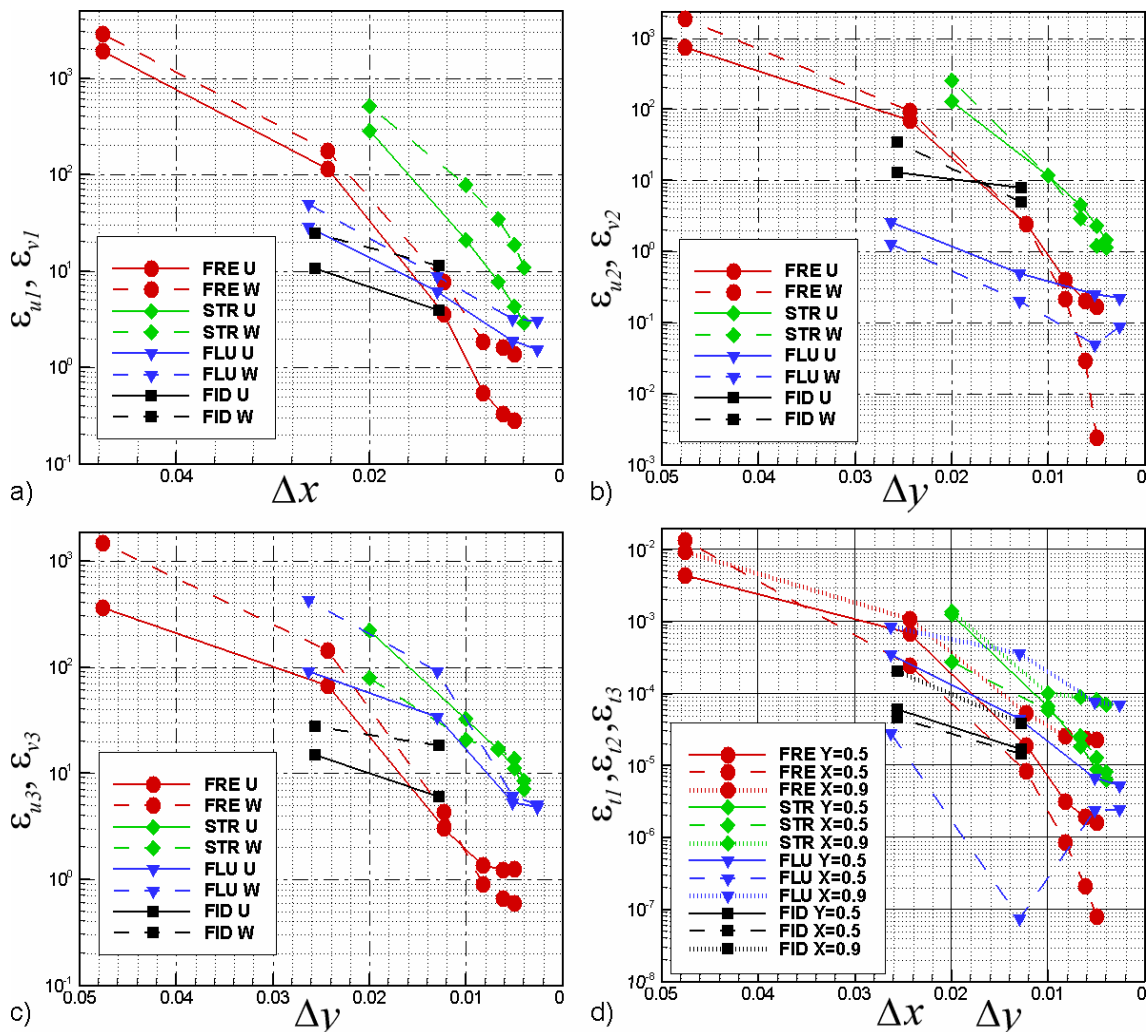
Rys. 36. Wartości składowych prędkości dla poziomego centralnego przekroju naczynia typu SRG uzyskane kodem FRECON ($Y=0.5$). (a) – pionowa składowa prędkości, (b) – pozioma składowa prędkości (Tabela 5, #1)

Dla przeprowadzenia ilościowej analizy jakości odwzorowania struktury przepływu zaproponowano nową metodę weryfikacji. Do porównań wybrano profile składowych prędkości i temperatury otrzymane na podstawie rozwiązania wzorcowego (referencyjnego), otrzymanego programem FRECON3V na siatce 201x201 (FRE5). Wybrane profile aproksymowano wielomianami wyższego rzędu, co umożliwi ich porównanie z innymi rozwiązaniami bez dodatkowej interpolacji (przy różnych rozmiarach siatek). Profile wyznaczono dla trzech przekrojów: poziomą i pionową linię przecinającą centralnie naczynie ($Y=0.5$ i $X=0.5$), oraz pionową linię przecinającą obszar punktu siódlowego przepływu ($X=0.9$). Wartości współczynników wielomianów reprezentujących te referencyjne profile udostępniono w Dodatkach B3, B4.

Za miarę dokładności wyznaczenia wartości funkcji $f(x_i)$ badanego rozwiązania numerycznego, otrzymanego dla $N \times N$ węzłów, przyjęto odchylenie standardowe obliczane w stosunku do wartości $w(x_i)$ wielomianu rozwiązania wzorcowego w węzłach x_i siatki:

$$\varepsilon = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (f(x_i) - w(x_i))^2 \quad (6.2.1)$$

Dla trzech wybranych profili odchylenia standardowe ε składowych prędkości U , V i temperatury T opisuje dziewięć wskaźników: ε_{u1} , ε_{w1} , ε_{l1} , ε_{u2} , ε_{w2} , ε_{l2} , ε_{u3} , ε_{w3} oraz ε_{l3} . Wartości te obliczone dla testowanych przypadków zebrano w tabeli Tabeli B1 i pokazano na rys. 37.



Rys. 37. Miara dokładności rozwiązania numerycznego w funkcji odległości między węzłami:

- (a) – $\varepsilon_{u1}, \varepsilon_{v1}$ dla składowych prędkości wzdłuż prostej $Y=0.5$;
- (b) – $\varepsilon_{u2}, \varepsilon_{v2}$ dla składowych prędkości wzdłuż prostej $X=0.5$,
- (c) – $\varepsilon_{u3}, \varepsilon_{v3}$ dla składowych prędkości wzdłuż prostej $X=0.9$;
- (d) – $\varepsilon_{l1}, \varepsilon_{l2}, \varepsilon_{l3}$ dla temperatury wzdłuż prostych $Y=0.5$, $X=0.5$ i $X=0.9$

Zaproponowana miara dokładności może być łatwo użyta do oceny wydajności dowolnego rozwiązania numerycznego, bez względu na wymiar siatki, na jakiej zostało otrzymane. Przyjmując trzy odchylenia standardowe jako dopuszczalny błąd rozwiązania, można uznać, że tylko rozwiązania FRE4-7 i FLU3 spełniają kryterium dokładności, czyli są wystarczająco bliskie rozwiązaniu referencyjnego.

Analiza wrażliwości siatki wykonana dla pięciu opisanych powyżej programów pozwala na ocenę zbieżności rozwiązań i na oszacowanie ich asymptotycznego zachowania. Na rys. 37 widać, na przykład, bardzo powolną zbieżność rozwiązań programu SOLVSTR w porównaniu z programem FRECON. Analiza wartości odchylenia standardowego wyznaczonego dla kolejnych siatek i rozwiązań dostarczanych przez programy FLUENT i FIDAP wykazuje zbieżność liniową, co jest także dużo gorszym wynikiem niż ten otrzymany przez programy FRECON, czy nawet SOLVSTR. Rezultat ten jest zaskakujący, gdyż teoretyczny wykładnik zbieżności wszystkich analizowanych kodów jest ten sam i wynosi dwa.

Analizując rys. 37d można zauważyć, że błąd rozwiązania dla temperatury znacznie szybciej maleje niż ma to miejsce dla składowych prędkości. Wskazuje to na niewielki wpływ członu konwekcyjnego na zbieżność rozwiązania. Wynika z tego, że porównywanie samej temperatury nie jest wystarczającym kryterium poprawności rozwiązania, przynajmniej dla analizowanej konfiguracji.

Metoda bezsiatkowa zastosowana w programie SOLVMEF nie pozwala na osiągnięcie wystarczającej dokładności rozwiązań. Błąd obliczony według powyżej zdefiniowanego kryterium jest nieakceptowalnie duży, a bardzo powolna zbieżność kodu uniemożliwiła przeprowadzenie testów dla dużej liczby punktów kolokacyjnych. Zmiana metody rozwiązywania układu równań na bardziej zaawansowaną oraz wykorzystanie tzw. *preconditioningu* być może pozwoliłaby pokonać te trudności.

Podsumowując, zdefiniowany wzorzec numeryczny pozwala na wiarygodną ocenę dokładności i wydajności kodów numerycznych. Przeprowadzone testy wykazały nieadekwatność oceny zbieżności na podstawie analizy punktowych wartości wybranych zmiennych. Porównane tutaj dwa komercyjne i trzy akademickie kody wykazują znaczne różnice w szybkości osiągania rozwiązania zbieżnego i dokładnego. Stosując definicję błędu opartą na odchyleniu standardowym dla wybranych profili prędkości i temperatury stwierdzono, że tylko rozwiązania kodów FRECON3V i FLUENT są dokładne. Jednak uzyskanie dokładnego rozwiązania komercyjnym programem FLUENT wymagało siatki obliczeniowej składającej się z 380x380 węzłów, prawie dwa razy gęstszej od tej użytej dla uzyskania podobnego rozwiązania programem FRECON3V. Niewątpliwie komplikacje wewnętrznej struktury bardzo rozbudowanych uniwersalnych programów komercyjnych mogą utrudniać uzyskanie dokładnego rozwiązania. Stosowanie wzorców numerycznych, takich jak zaproponowano powyżej, umożliwia obiektywną ocenę jakości rezultatów symulacji komputerowych.

6.3. Walidacja – porównanie wyników numerycznych z eksperymentem

Poniżej omówione są wyniki testów obliczeniowych, wykonywanych dla sprawdzenia przydatności dostępnych programów numerycznych do symulacji zjawisk obserwowanych w eksperymentach przeprowadzonych w laboratorium. Wyróżnikiem przeprowadzonych testów są nietypowe dla odlewnictwa ciecze modelowe i naczynia o uproszczonych kształtach, zastępujące formy odlewnicze. Pozwala to na pełniejszą kontrolę zarówno eksperymentu, jak i warunków symulacji numerycznej.

Opis i ocena wykonanych obliczeń odwołują się do Tabeli 5, która, podobnie jak w przypadku rzeczywistych eksperymentów w laboratorium, stanowi podstawowe zestawienie danych o rodzaju i warunkach fizycznych analizowanego problemu. W każdym przypadku w uwagach umieszczonych w ostatniej kolumnie tabeli podano informację o użytym programie. W obliczeniach korzystano z programów komercyjnych VULCAN, PROCAST, NOVAFLOW, pakietów uniwersalnych (FLUENT, FIDAP) oraz programów akademickich (FRECON, ICE3D, NUSCAS).

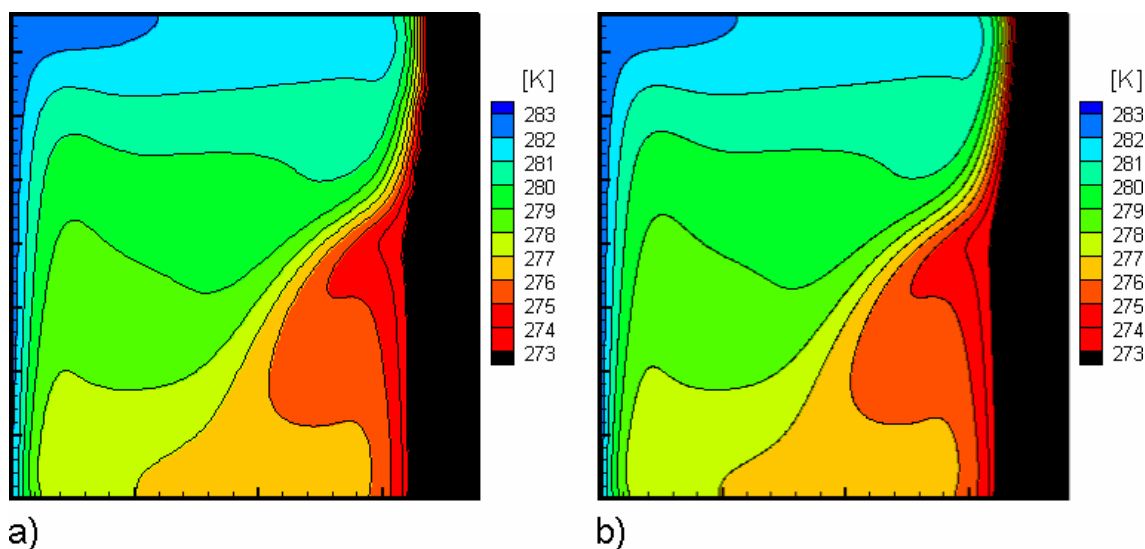
6.3.1. Modelowanie krzepnięcia

(1) Sześcian grzany różnicowo, wypełniony wodą

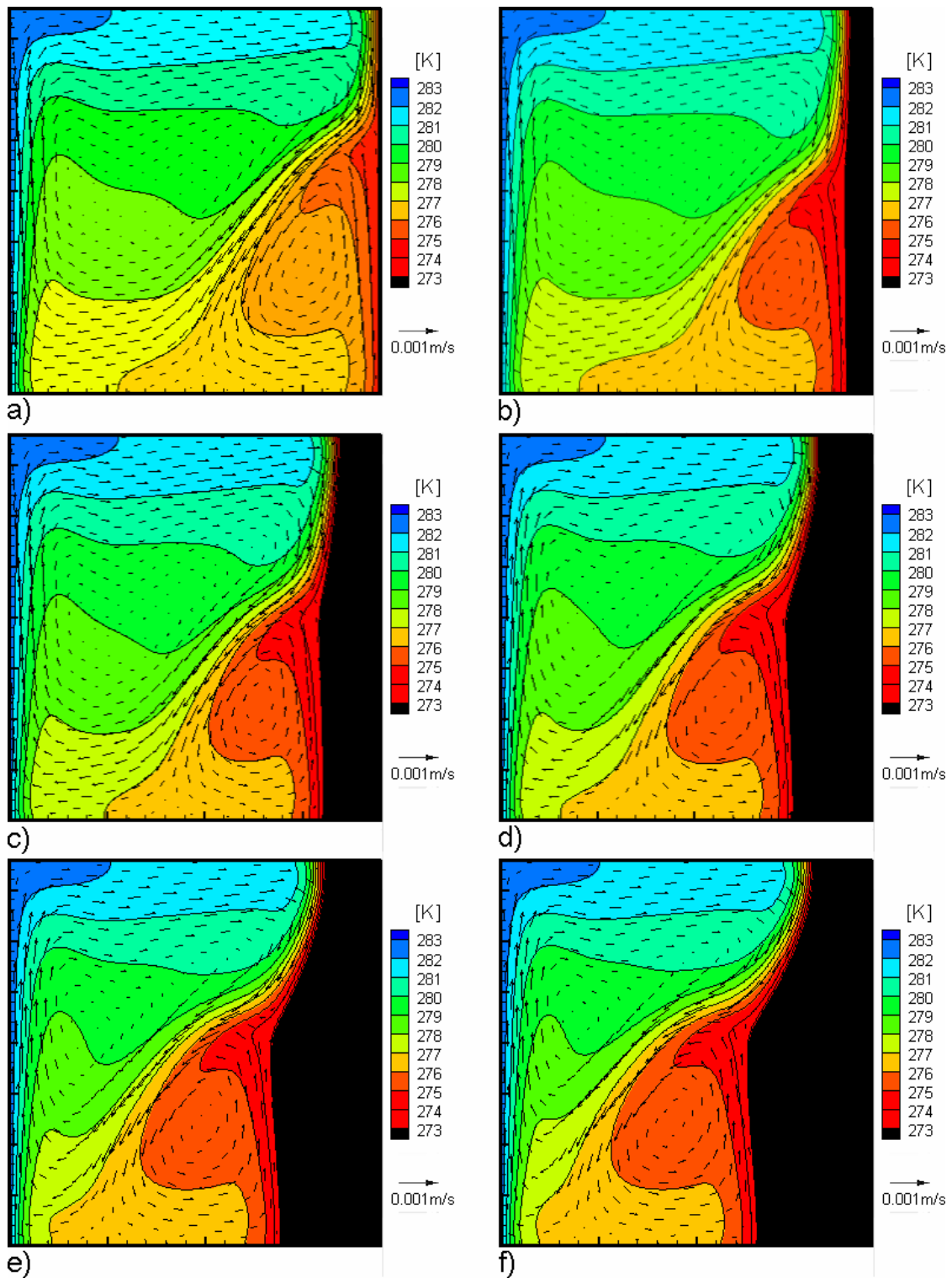
Jednym z podstawowych wzorców numerycznych i eksperymentalnych przepływów z krzepnięciem jest zamarzanie wody w różnicowo grzanym naczyniu sześciennym. W niniejszej pracy analizowano zjawisko krzepnięcia oraz towarzyszącą mu konwekcję naturalną w dwuwymiarowym przekroju sześcianu. Pionowe ściany modelowano jako izotermiczne o temperaturach $T_h = 283K$ (lewa ściana), $T_c = 263K$ (prawa ściana), a pozostałe poziome ściany jako adiabatyczne. Warunkiem początkowym był stan ustalony konwekcji naturalnej dla temperatur lewej i prawej ścianki równych odpowiednio $T_h = 283K$ i $T_c = 273K$. Przepływ ten był przedmiotem wzorca numerycznego opisanego w podrozdziale 6.2. Ten rodzaj warunku początkowego, nazwany wcześniej „ciepłym startem” (Kowalewski, Rebow [33]), przyjęto w badaniach doświadczalnych. Proces krzepnięcia rozpoczyna się w momencie nagłego obniżenia temperatury ścianki zimnej. Wielkości bezwymiarowe charakteryzujące ten proces to obok podanych wcześniej liczb Rayleigha i Prandtla, liczba Stefana, uwzględniająca ciepło przemiany fazowej. Jej wartość dla analizowanego przypadku wynosi 0.125 .

Obliczenia numeryczne przeprowadzono programem FLUENT z wykorzystaniem metody entalpowej na sztywnej siatce. Do rozwiązywania równań Naviera-Stokesa została użyta metoda projekcji SIMPLEC. Pochodną czasową wyznaczano używając jawnego schematu drugiego rzędu, natomiast pochodne przestrzenne aproksymowano za pomocą schematu QUICK, opartego na średniej ważonej schematu centralnego (CDS) i schematu drugiego rzędu z zastosowaniem *upwindingu* (UDS).

Przedmiotem modelowania jest przebieg zjawiska krzepnięcia w czasie. Weryfikację (test siatki) podzielono na cztery etapy ze względu na czas obliczeń ($t = 100s$, $t = 500s$, $t = 1000s$, $t = 3000s$), dokonując dla każdego kroku czasowego porównań wyników otrzymanych dla różnych siatek obliczeniowych. Dla porównania analogiczne obliczenia wykonano programem ICE3D dla liczby węzłów domeny płynu wynoszących $21 \times 21 \times 21$, $31 \times 31 \times 31$ i $41 \times 41 \times 41$. W tym programie warstwa zajmowana przez fazę stałą (lód) dyskretyzowana była dla każdego przypadku dodatkowymi 10 węzłami. Ekstremalne wartości prędkości wewnątrz całego naczynia podano w Tabelach B7 i B8. W Tabeli B9 podano również objętość względną fazy stałej. Dla dodatkowego zilustrowania zbieżności rozwiązań w Dodatku B na rys. B1 pokazano wybrane profile prędkości dla analizowanych przypadków.



Rys. 38. Wpływ gęstości siatki obliczeniowej na kształt powierzchni lodu i pola temperatury. Symulacja zamarzania wody w naczyniu typu SRG (Tabela 5, #2) dla chwili $t = 500 s$. Obliczenia dla siatki (a) 76×76 i (b) 380×380



Rys. 39. Przyrost fazy stałej i zmiany pola temperatury i pola prędkości dla wody zamarzającej w naczyniu typu SRG. Rezultaty symulacji numerycznych wykonanych programem Fluent (FLU2 w Tabelach B7-9) dla kroków czasowych: (a) $t = 0$ s, (b) $t = 100$ s, (c) $t = 500$ s, (d) $t = 1000$ s, (e) $t = 2000$ s, (f) $t = 3000$ s

Z przeprowadzonych testów wynika, że w analizie zjawisk przepływowych, którym towarzyszy przemiana fazowa cieczy, konieczne jest stosowanie bardzo gęstych siatek obliczeniowych, szczególnie w pobliżu granicy międzyfazowej. Porównanie frontów fazowych oraz pól temperatur dla dwóch siatek (rzadkiej 76x76 i gęstej 380x380) przedstawiono na rys. 38. Przy rzadkiej siatce w górnej części powierzchni lodu obserwuje się typową niestabilność numeryczną, generującą schodkowy kształt powierzchni międzyfazowej. Jest to otoczenie punktu, w którym spotkają się dwa

przeciwbieżne strumienie i powstają duże gradienty prędkości i temperatury. Wyniki otrzymane z użyciem siatki 76x76 węzłów nie odzwierciedlają więc fizycznego procesu i dopiero użycie gęściejszych siatek, odpowiadających przypadkom FLU2, FLU3, poprawia dokładność rozwiązania. W rezultacie stwierdzono konieczność wykonania obliczeń procesu krzepnięcia w naczyniu SRG programem Fluent dla siatki 380x380 węzłów. Rysunek 39 przedstawia rozwiązania otrzymane dla kilku punktów czasowych, ilustrujące zmiany w czasie kształtu powierzchni międzyfazowej, oraz struktur pól prędkości i temperatury. Można wyróżnić pierwszy etap procesu krzepnięcia (do chwili $t=100s$), charakteryzujący się równomiernym narastaniem fazy stałej, z frontem fazowym przebiegającym niemal równoległe do pionowej ściany naczynia (rys. 39a). W późniejszym okresie (od chwili $t=100s$ do $t=500s$) w dolnej części powierzchni lodu pojawia się charakterystyczne wybrzuszenie, świadczące o nierównomierności strumieni cieplnych. W późniejszym okresie czasu ($t=3000s$) całkowity przyrost fazy stałej ulega spowolnieniu, tym niemniej zdeformowany kształt granicy międzyfazowej zostaje zachowany. Najcieńsza warstwa lodu występuje w miejscu bezpośrednio sąsiadującym z punktem kolizji dwóch przeciwbieżnych strumieni płynu. Biorąc pod uwagę strukturę przepływu, można stwierdzić, że *anomalna* cyrkulacja zimnej cieczy widoczna na rys. 39e-f w prawym dolnym rogu kuwety izoluje dolne warstwy lodu od strumienia ciepła przenoszonego przez cyrkulację główną. Powoduje to niesymetryczny przyrost lodu. Pod koniec symulowanego fragmentu procesu (mniej więcej od chwili $t=2800s$) rozwiązanie zbliża się do stanu stacjonarnego. Jednak, jak można zauważyć na rys. 14 ($t=6000s$), przyrost fazy stałej w eksperymencie ma nadal miejsce. Porównanie metodologii stałej siatki (FLU) i siatki ruchomej (ICE3D) wskazuje na dość istotne różnice w obliczonym położeniu frontu międzyfazowego. Różnice mogą wynikać z mniejszej efektywnej rozdzielczości dyskretyzacji w kodzie ICE3D (tylko 41x41 węzłów dla dwuwymiarowego przekroju). Jednak bardzo długie czasy obliczeniowe uniemożliwiły przeprowadzenie dalszych weryfikacji gęstości siatki dla tego kodu.

Przeprowadzone symulacje numeryczne wykazują jedynie jakościową zbieżność z wynikami eksperymentów i obliczeń zamieszczonych we wcześniejszych pracach (Kowalewski, Rebow, [33], Giangli [17], [4], [43]). Zasadnicza wada zarówno zamieszczonych tam rezultatów jak i obecnych symulacji polega na błędnym odwzorowaniu kształtu powierzchni lodu. W porównaniu z rezultatami eksperymentalnymi, w obecnych symulacjach numerycznych przyrost lodu jest zbyt wolny, a położenie punktu siodłowego pola prędkości znajduje się zbyt wysoko (por. rys. 6b w [33]). Wskazuje to na błędy modelu fizycznego rozwiązania numerycznego, o czym dyskutowano już wcześniej w pracy [33]. Znalezienie źródeł tych błędów okazało się być zadaniem bardzo trudnym. Silna nieliniowość zmian gęstości wody, trudne do zasymulowania efekty przechłodzenia i anizotropia lodu mogą być jednymi z przyczyn, dla których nie udało się uwiarygodnić obliczeń numerycznych dla tego przypadku.

(2) Sześcienną z izotermiczną ścianką górną (SIG), wypełnioną PEG-900

W sześciennym naczyniu oznaczonym skrótem SIG, ruch konwekcyjny jest wywołany różnicą temperatur ΔT pomiędzy izotermiczną ścianką górną i pozostałymi ściankami naczynia. Pierwszym etapem obliczeń numerycznych mających na celu symulację przeprowadzonych eksperymentów było modelowanie zjawisk konwekcji naturalnej i przechłodzenia cieczy modelowej (PEG-900). Proces taki obserwowano w laboratorium przy zadaniu różnicy temperatur $\Delta T=10K$ między ścianką górną a zewnętrznym płaszczem wodnym (Tabela 5, #17). Bezwymiarowe liczby charakteryzujące analizowane zjawisko wynoszą odpowiednio $Ra = 526612$, $Pr = 1358$. Opisany poniżej przykład ilustruje procedurę walidacji rozwiązania numerycznego, traktowaną jako proces izolowania dwóch typów błędów rozwiązania: tych, które wynikają z przyjętego modelu fizycznego, i tych, które są pochodną metody numerycznej (przykładowo: efektem zbyt rzadkiej siatki).

Do rozwiązania problemu zdefiniowanego dla trójwymiarowej geometrii użyto komercyjnego programu FLUENT. Na górnej ściance przyjęto izotermiczny warunek brzegowy $T_c = 299K$, na pozostałych ściankach, z ich zewnętrznej strony, przyjęto konwekcyjny warunek brzegowy (mieszany) ze współczynnikiem przejmowania ciepła $\alpha = 3000 W/m^2K$. Zadanie przewodnictwa cieplnego rozwiązywane było w obszarze modelującym ścianki wykonane z pleksiglasu. Przepływ

pływu wewnątrz naczynia opisują równania Naviera-Stoksa otrzymane metodą projekcji SIMPLEX, przy założeniu modelu Boussinesqua dla płynu (stałe własności materiałowe). Pochodne przestrzenne wyznaczano używając schematu QUICK. Rezultaty tych obliczeń zweryfikowano przez porównanie ich z rezultatami kodu FRECON3V.

Zadanie zostało rozwiązane dla trzech jednorodnych kartezjańskich siatek obliczeniowych FLU3D1-3. Obliczenia poddano walidacji porównując je z wynikami eksperymentalnymi dla profili składowej pionowej prędkości oraz wartości temperatury wyznaczonymi wzdłuż prostej $Y=0.019\text{m}$ przebiegającej na płaszczyźnie poziomej $Z = 0.019\text{m}$ (oś pozioma przekroju centralnego).

Strukturę przepływu widoczną w płaszczyźnie pionowego przekroju centralnego charakteryzują dwie symetryczne cyrkulacje (por. rys. 40). Wywołuje je centralna struga zimnej cieczy spływająca od ścianki górnej i zawracająca po osiągnięciu dna naczynia wzdłuż ścianek bocznych. Podobną strukturę przepływu rejestrowano eksperymentalnie (rys. 42 b,d,f). Początkowe obliczenia, w których konserwatywnie założono niezależną od temperatury lepkość płynu, dały jedynie jakościową zgodność struktury przepływu z eksperymentem. Ilościowe porównanie wybranych profili prędkości wykazało istotne różnice wartości eksperymentalnych i numerycznych, obliczone wartości prędkości maksymalnych są niemal dwukrotnie wyższe od ich eksperymentalnych odpowiedników (por. rys. 41). Różnica utrzymuje się mimo powtórzenia pomiarów, jak i wykonania obliczeń dwoma zupełnie różnymi kodami FLUENT i FRECON3V (rys. 41). Wskazuje to na błąd modelu fizycznego w symulacji numerycznej.

Dla wyjaśnienia źródeł obserwowanych różnic zbadano wrażliwość zależności pola prędkości i temperatury od współczynnika przejmowania ciepła występującego w warunkach brzegowych oraz wpływ zmian lepkości w funkcji temperatury. Współczynnik przejmowania ciepła α dla zewnętrznych ścianek naczynia zanurzonych w kąpeli wodnej jest niewiadomą termicznych warunków brzegowych przyjmowaną w obliczeniach szacunkowo. Przeprowadzone testy numeryczne wykazały, że nawet drastyczna zmiana tego współczynnika, od $100\text{W/m}^2\text{K}$ do $3000\text{W/m}^2\text{K}$, nie doprowadziła do uzyskania zgodności obliczeń z eksperymentem. Dla mniejszych wartości współczynnika przejmowania ciepła temperatura na ściankach wewnętrznych obniżała się, co powodowało zmniejszenie się gradientu temperatury i spowolnienie cyrkulacji w naczyniu. Jednak nie spowodowało to pożądanego obniżenia wartości prędkości w głównym zimnym strumieniu cieczy.

Lepkość cieczy ma niewątpliwie wpływ na wartości prędkości przepływu i zwykle akceptowane w symulacjach numerycznych przyjęcie stałej wartości lepkości może generować błędy. Zmiany lepkości w funkcji temperatury zmierzono dla przechłodzonego glikolu polietylenowego przy pomocy wiskozymetru i wprowadzono do kodu numerycznego aproksymując współczynnik lepkości liniowo odcinkami dla punktów pomiarowych z Tabeli 6.

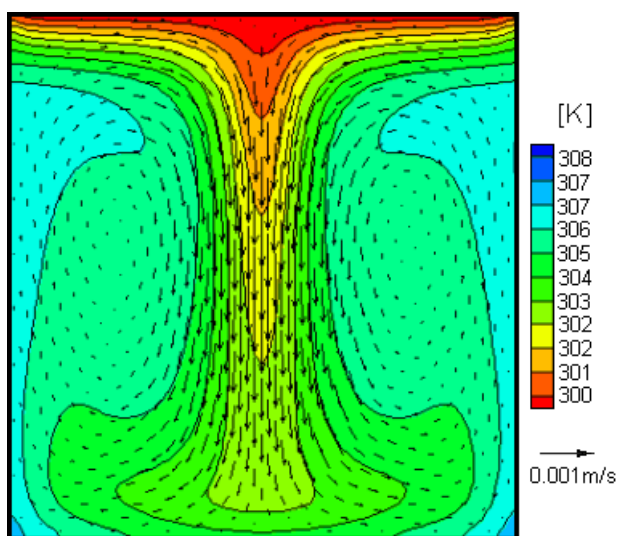
Wprowadzona modyfikacja pozwoliła na otrzymanie zadowalającej zgodności wyników eksperymentalnych i numerycznych, zarówno pod względem jakościowym, jak i ilościowym. Do takiego wniosku prowadzą przykładowo struktury przepływu pokazane na rys. 42 i 43, a także porównanie temperatur przedstawionych wyżej w Tabeli 7 (kolumny TP1-TP4). Porównanie profili prędkości pionowej wzdłuż prostej przecinającej przekrój centralny (rys. 43) wskazuje na ilościową poprawę rezultatów obliczeń dla zmodyfikowanego modelu kodu numerycznego. Porównanie pomiarów laboratoryjnych temperatury z obliczeniami numerycznymi możliwe było jedynie w punktach, gdzie umieszczone były termopary. Porównanie tych wartości z Tabelą 7 wskazuje zadowalającą zgodność między eksperymentem a obliczeniami. Rozbieżności między temperaturą zmierzoną i wyliczoną dotyczą jedynie termopary TP4 umieszczonej 2mm pod powierzchnią górnej ścianki naczynia. Można jednak uznać, że i w tym przypadku obliczona temperatura mieści się w granicach tolerancji pomiarowej. Do takiej oceny skłaniają warunki prowadzenia pomiarów. Z obliczeń wynika, że w strefie umieszczenia termopary TP4 występują duże gradienty temperatury, powodujące, że niewielka zmiana położenia termopary mogła powodować znaczne zmiany mierzonych wartości (rys. 44). Na przykład w punkcie znajdującym się o 1mm (wymiar średnicy użytej termopary) poniżej miejsca pomiaru obliczona numerycznie temperatura różni się już o około jeden stopień od wartości temperatury podanej w tabeli. Biorąc to pod uwagę, wyżej podana ocena dokładności pomiaru użytego do weryfikacji obliczeń jest w pełni zasadna.

Tabela 6. Zależność lepkości od temperatury zastosowana w obliczeniach

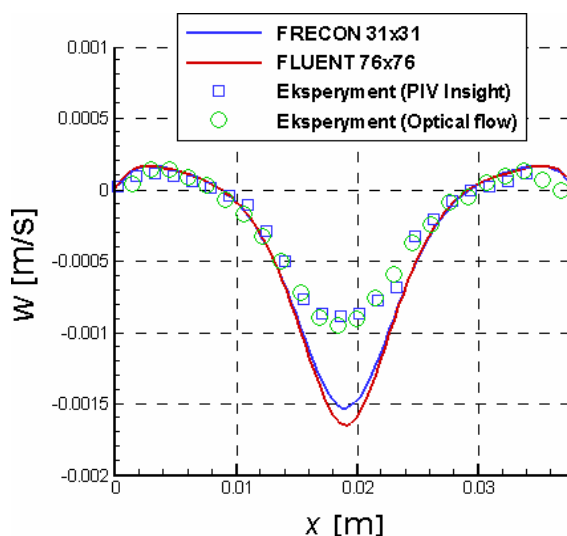
Temperatura	[K]	299	307	308	309	310	312	314	318	319
Lepkość	[kg/ms]	0.4	0.12	0.113	0.108	0.103	0.095	0.086	0.073	0.07

Tabela 7. Test wrażliwości siatki oraz porównanie z danymi eksperymentalnymi dla konwekcji PEG-900 w naczyniu SIG. Padano wartości ekstremalne pionowej składowej prędkości, minimum temperatury cieczy w przepływie i temperatury w czterech punktach badanych eksperymentalnie.

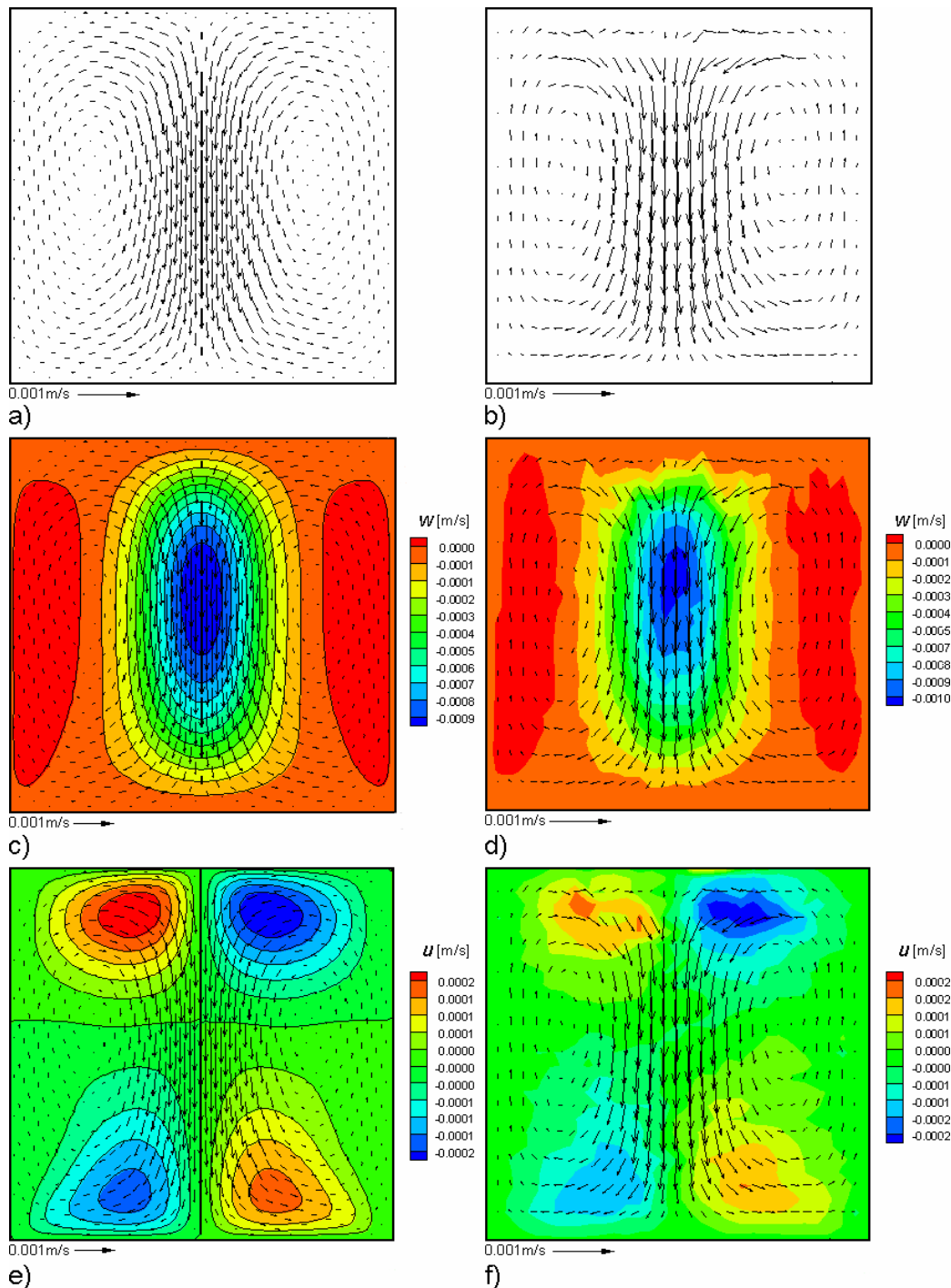
Obliczenia	Siatka	$W_{\min} \cdot 10^3$ [m/s]	$W_{\max} \cdot 10^3$ [m/s]	T_{\min} [K]	TP1 [K]	TP2 [K]	TP3 [K]	TP4 [K]
FLU3D1	19x19x19	-0.905	0.111	302.55	307.3	306.4	306.1	304.5
FLU3D2	38x38x38	-0.964	0.123	302.03	307.3	306.4	306.2	303.7
FLU3D3	76x76x76	-0.963	0.125	302.00	307.3	306.5	306.2	303.5
Eksperyment		-0.965	0.140		307.2	306.8	306.8	305.5



Rys. 40. Pole temperatury i prędkości w naczyniu typu SIG w płaszczyźnie przekroju centralnego otrzymane z symulacji numerycznej programem Fluent (Tabeli 5, #19)



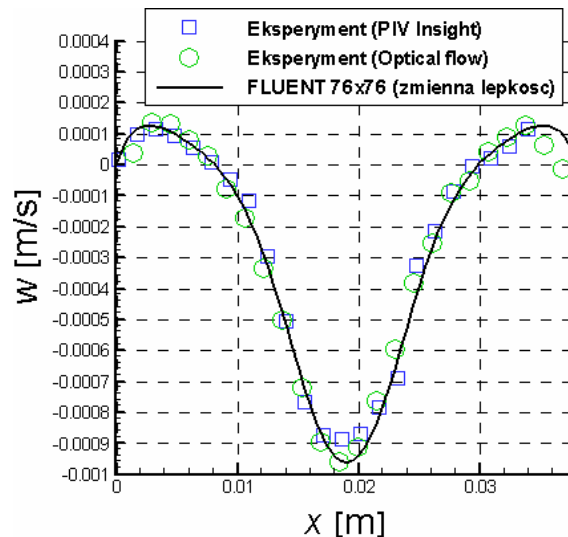
Rys. 41. Profile pionowej składowej prędkości wyznaczone wzdłuż prostej $Z = 0.019$ przekroju centralnego. Wartości zmierzone dwiema metodami (Tabela 5, #15) porównano z wynikami numerycznymi (linie ciągłe), uzyskanymi dla stałego współczynnika lepkości (Tabela 5, #19) kodami FRECON3V i FLUENT.



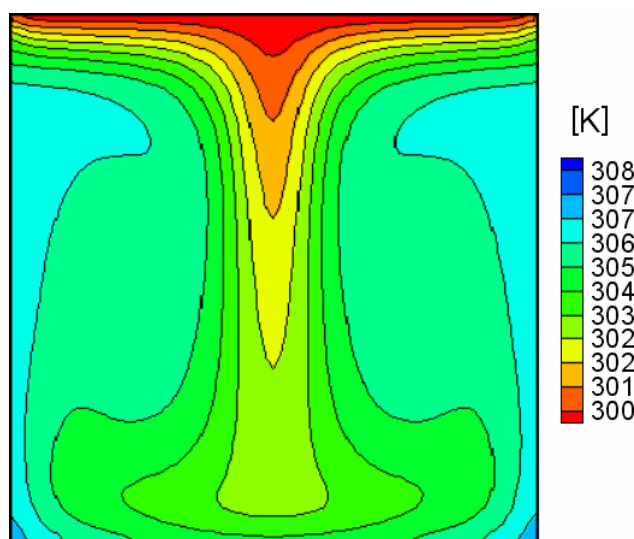
Rys. 42. Porównanie pól prędkości dla procesu przepływu konwekcyjnego glikolu polietylenowego w naczyniu typu SIG w płaszczyźnie $Z = 0.019$, otrzymanych eksperymentalnie (b), (d), (f) (Tabela 5, #15) z wynikami obliczeń (a), (c), (e) (Tabela 5, #19)

Zasadniczym celem badań przeprowadzonych w naczyniu typu SIG była analiza procesu krzepnięcia materiału o nieizotermicznej charakterystyce przejścia fazowego, typowej dla stopów metali. Wykonane obliczenia numeryczne miały na celu symulację badań eksperymentalnych krzepnięcia PEG900, wymienionych w Tabeli 5 #17. Z przeprowadzonych pomiarów wynikało, że po obniżeniu temperatury górnej ścianki poniżej temperatury krzepnięcia w naczyniu w chwili początkowej miało miejsce wyraźne przechłodzenie płynu i dopiero po pewnym czasie (około 10min) od górnej izotermicznej ścianki następowało krzepnięcie cieczy. Symulacja procesu przechłodzenia wymaga implementacji dodatkowych równań stanu i ich uwzględnienie jest trudne do realizacji na obecnym etapie rozwoju kodów numerycznych. W metodzie entalpowej granicę międzyfazową wyznacza się jedynie na podstawie dwóch temperatur: krzepnięcia (*solidus*) i topnienia (*liquidus*). Aby uzyskać rozwiązanie numeryczne w zadowalający sposób ilustrujące

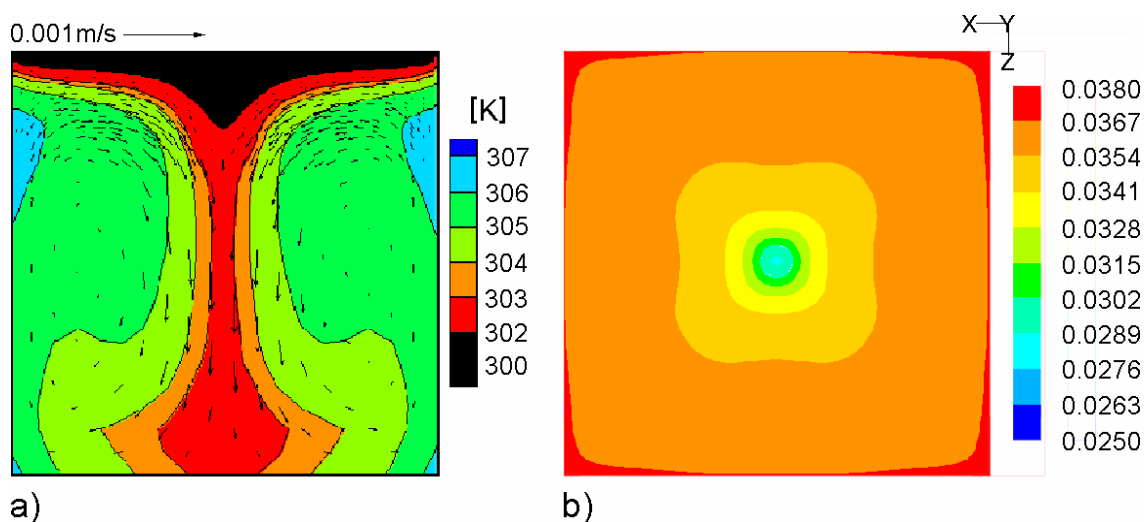
obserwowany eksperymentalnie proces krzepnięcia, w obliczeniach numerycznych konieczne było obniżenie tych temperatur ($T_s = 300K$, $T_l = 302K$), uzyskując faktycznie przesunięcie granicy krzepnięcia i topnienia. Wszystkie pozostałe warunki materiałowe, jak również warunki brzegowe, pozostawiono bez zmian. W rezultacie dla tak zmodyfikowanych warunków w symulacji numerycznej otrzymano stan ustalony z cienką warstwą zakrzepniętego materiału (rys. 45a), analogiczny do obserwowanego w eksperymentach. Symulacja numeryczna poprawnie odzwierciedla widoczny w eksperymentach charakterystyczny dzwonowy kształt powierzchni (rys. 21c). Topologia utworzonego zakrzepu wykazuje jednak różnice. Widoczne w poziomych przekrojach kształty powierzchni wskazują na istnienie symetrii środkowej (por. rys. 21a), podczas gdy jego osie symetrii w obliczeniach numerycznych znajdują się na przekątnych naczynia. Taki efekt zmiany symetrii struktury przepływu był już obserwowany w analogicznym naczyniu sześciennym we wcześniejszych badaniach konwekcji naturalnej i zamarzania wody [30, 36]. Wskazuje on na błędy modelu transportu ciepła w nieizotermicznych ściankach bocznych naczynia. Zmiany symetrii są spowodowane obserwowaną dla tej geometrii dużą wrażliwością struktur pola przepływu na termiczne warunki brzegowe. Poprawne odwzorowanie symetrii struktur przepływu wymaga uwzględnienia w modelu numerycznym termicznego przewodnictwa ścianek i rozwiązywania sprzężonego problemu transportu ciepła. Taka informacja mogła być uzyskana jedynie dzięki przeprowadzeniu powyższej procedury walidacyjnej.



Rys. 43. Porównanie prędkości otrzymanych eksperymentalnie w naczyniu typu SIG (Tabela 5, #15) z symulacją numeryczną (Tabela 5, #19). Profile pionowej składowej prędkości wzdłuż osi $Y = 0.5$ dla przekroju centralnego.



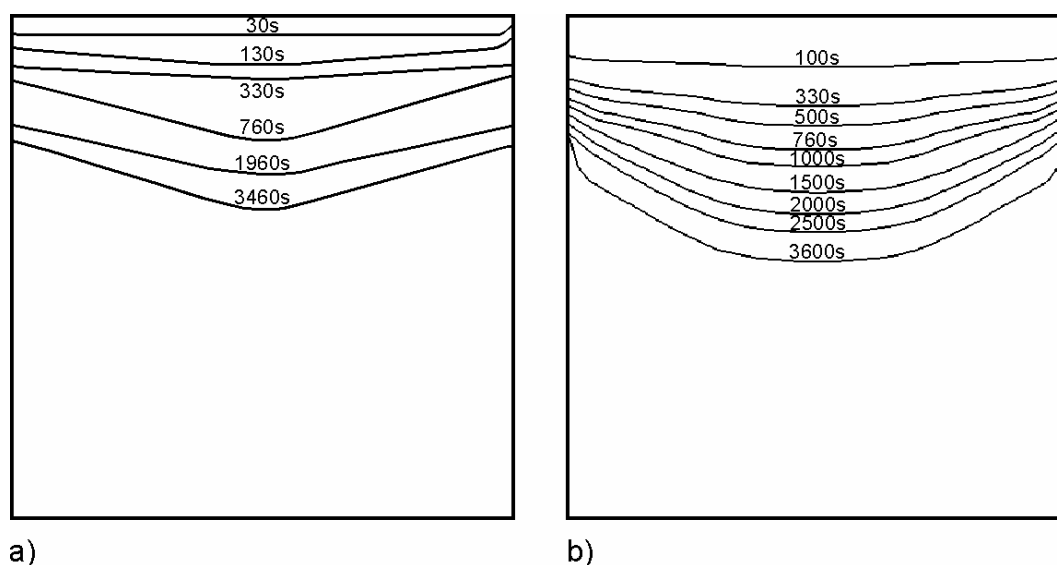
Rys. 44. Pole temperatury w przepływie konwekcyjnym glikolu polietylenowego w naczyniu typu SIG (Tabela 5, #19)



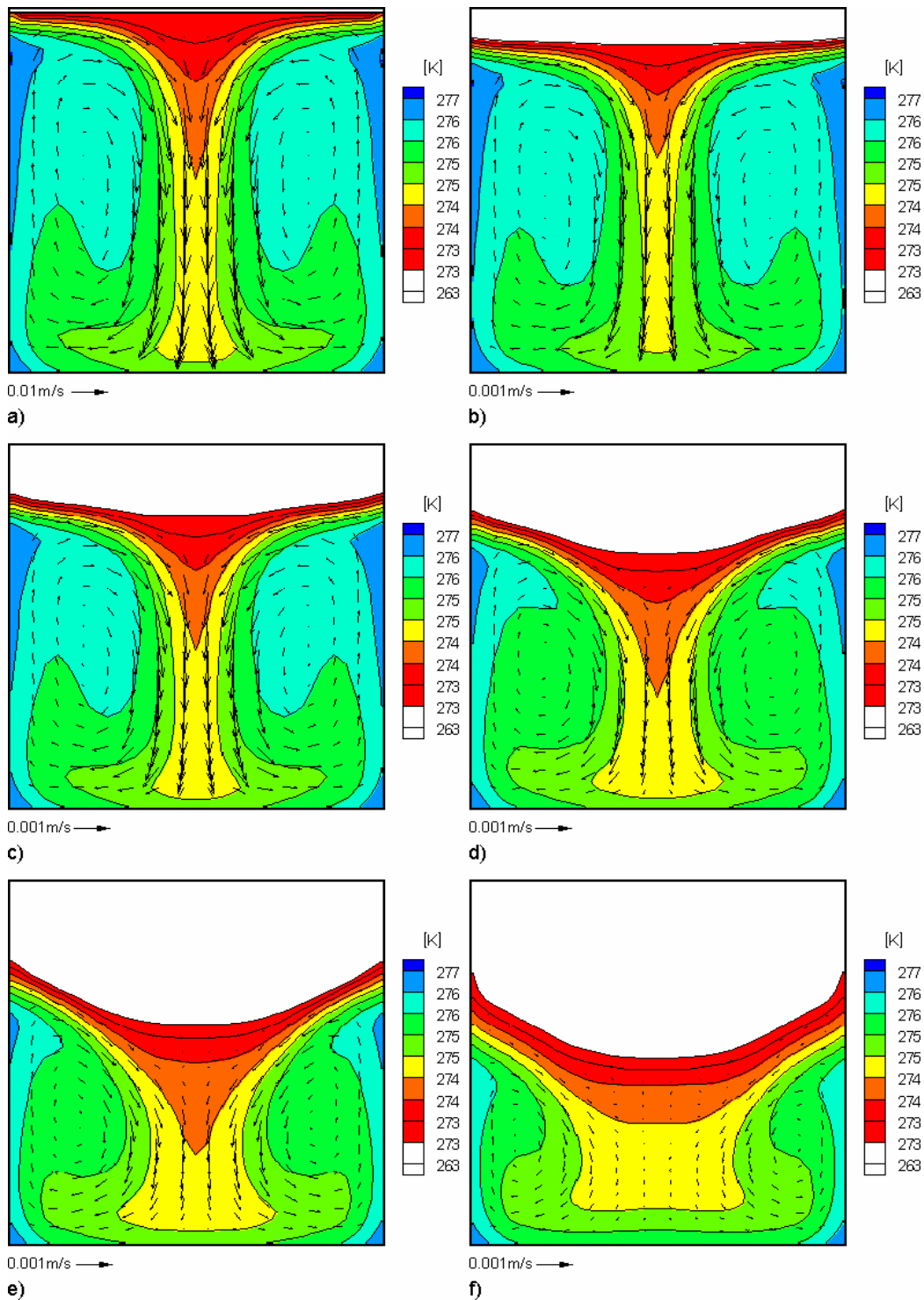
Rys. 45. Symulacja krzepnięcia glikolu polietylenowego w naczyniu typu SIG (Tabela 5, #20):
 (a) pole temperatury oraz pole prędkości w przekroju centralnym,
 (b) wysokość powierzchni międzyfazowej w przekroju poziomym.

(3) Sześcian z izotermiczną ścianką górną, wypełniony wodą

Kolejnym wzorcem eksperymentalnym, dla którego wykonano obliczenia w naczyniu sześciennym SIG, jest krzepnięcie wody i przyrost warstwy lodu na górnej izotermicznej ściance. Badania eksperymentalne w tej geometrii opisano w cytowanych wcześniej pracach [29, 30]. Prezentowane niżej obliczenia miały na celu przeprowadzenie analizy wiarygodności rezultatów uzyskanych dla dostępnych przypadków empirycznych. Obliczenia wykonano przy użyciu programów FRECON oraz ICE3D stosując warunki brzegowe i początkowe opisane w Tabeli 5 #27 i #28. Symulacja numeryczna obejmowała modelowanie krzepnięcia począwszy od stanu ustalonego konwekcji naturalnej (Tabela 5, #27). Dla rozpatrywanej konfiguracji tylko takie warunki początkowe zapewniały eksperymentalną realizację stabilnego rozwoju struktur przepływu i frontu krzepnięcia (por. [30]). W obliczeniach temperatura górnej ścianki dla problemu konwekcji wynosiła $T_c = 273K$, a dla problemu krzepnięcia $263K$. Temperatura zewnętrznej kąpieli wynosiła w eksperymencie $283K$. W symulacjach numerycznych przyjęto dla pięciu nieizotermicznych ścianek konwekcyjny warunek termiczny ze współczynnikiem przyjmowania ciepła $\alpha=1000 W/m^2K$, upraszczając transport ciepła w ściankach do jednowymiarowego modelu przewodnictwa cieplnego. Bezwymiarowe liczby charakteryzujące analizowany przepływ wynoszą odpowiednio $Ra=3015084$, $Pr = 13.31$, $Ste = 0.252$ (zdefiniowane dla temperatury referencyjnej $273K$).



Rys. 46. Dynamika przyrostu warstwy lodu w naczyniu typu SIG, granica faz w przekroju centralnym: (a) eksperyment [30], (b) symulacja numeryczna (Tabela 5, #28)



Rys. 47. Symulacja krzepnięcia wody w naczyniu typu SIG (Tabela 5, #28). Pole temperatury i prędkości: (a) stan początkowy (b) $t = 100\text{ s}$ (c) $t = 400\text{ s}$ (d) $t = 1000\text{ s}$ (e) $t = 2000\text{ s}$ (f) $t = 3600\text{ s}$

Struktura przepływu obserwowana w kanale typu SIG dla wody jest analogiczna do opisanej wyżej dla glikolu PEG900. Charakteryzuje ją centralna struga zimnej cieczy spływająca wzdłuż osi symetrii od ścianki górnej i cyrkulacja zwrotna wzdłuż ścianek bocznych. Ta struktura jest dobrze widoczna we wszystkich przeprowadzonych symulacjach numerycznych, jeśli jako warunek początkowy przyjąć rozwiniętą konwekcję naturalną. Przekrój pionowy dokonany w płaszczyźnie symetrii naczynia, na którym zaznaczono liniami ewolucję granicy między fazą ciekłą i stałą (rys. 46), pozwala porównać przebieg krzepnięcia obserwowanego podczas eksperymentu z odpowiednim rozwiązaniem numerycznym. Można zauważyć, że symulowany i rzeczywisty kształt lodu odbiegają od siebie w pobliżu bocznych ścian – rzeczywista warstwa lodu jest w tym miejscu wyraźnie cieńsza.

Podczas symulacji procesu krzepnięcia w początkowej fazie warstwa lodu narastała równoległe do izotermicznej ścianki górnej (rys. 47b-c). Wraz z upływem czasu wpływ konwekcji staje się widoczny i powstająca warstwa lodu ulega wyraźnej deformacji (por. rys 48-d-e). Na osi symetrii tworzy się wyraźne wybrzuszenie, malejące w miarę zbliżania się do ścian bocznych naczynia. Pod koniec obliczeń ($t=3600s$) został osiągnięty stan zbliżony do stacjonarnego. Warstwa lodu utworzonego w środkowej części górnej ścianki była prawie dwukrotnie grubsza niż przy ścianach bocznych (rys. 47f).

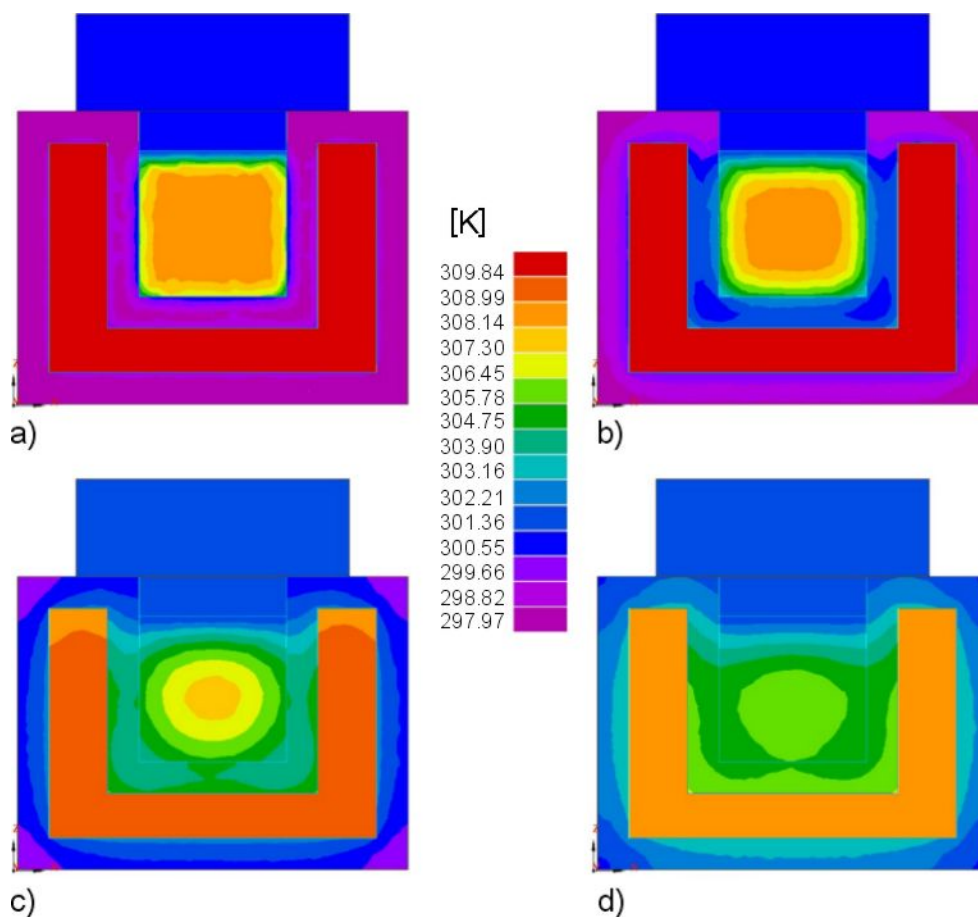
(4) Sześcian z izotermiczną ścianką górną, symulacja programami odlewniczymi krzepnięcia PEG-900

Dla weryfikacji zachowania się typowych kodów odlewniczych przeprowadzono symulacje przypadku krzepnięcia glikolu polietylenowego (PEG-900) w sześcianie z izotermiczną ścianką górną, odpowiadającego badaniom doświadczalnym prowadzonym w eksperymencie oznaczonym #16 w Tabeli 5. Celem obliczeń było wyznaczenie przepływu ciepła zachodzącego pod wpływem zmiany początkowej temperatury elementów układu i zbadanie wpływu współczynnika wymiany ciepła między powierzchniami na przebieg obserwowanego procesu krzepnięcia. W obliczeniach przyjęto następujące wartości współczynników wymiany ciepła w modelu:

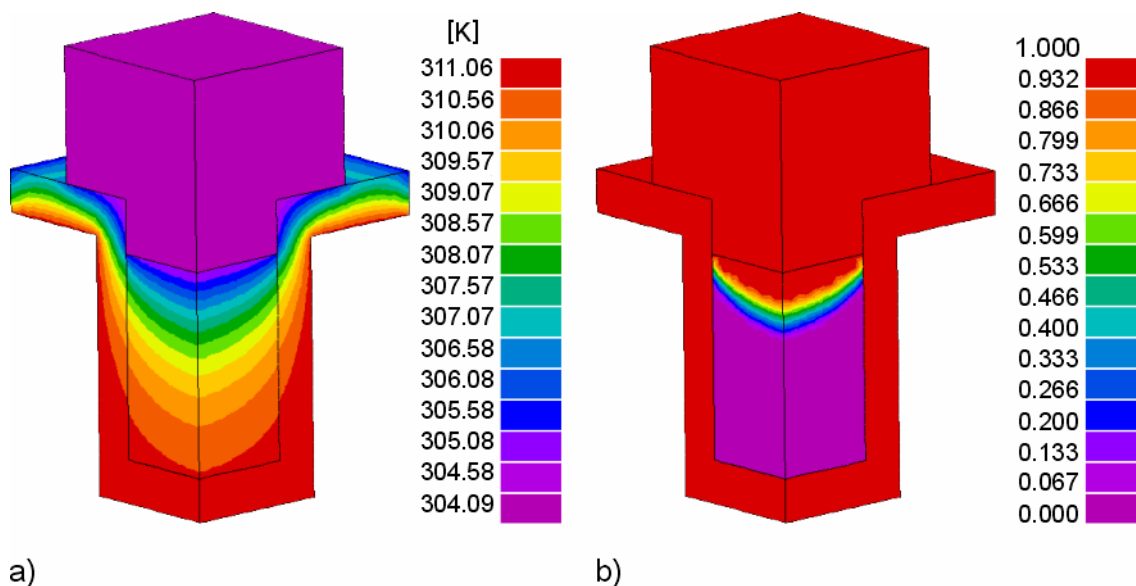
- poliglicol – aluminium : $100 W/m^2 K$
- woda – pleksiglas : $1000 W/m^2 K$
- pleksiglas – aluminium : $100 W/m^2 K$
- aluminium – powietrze : $10 W/m^2 K$

Zadanie zostało rozwiązane przy użyciu programów PROCAST, VULCAN. Wyniki z obliczeń programem PROCAST przedstawiają rys. 48-49.

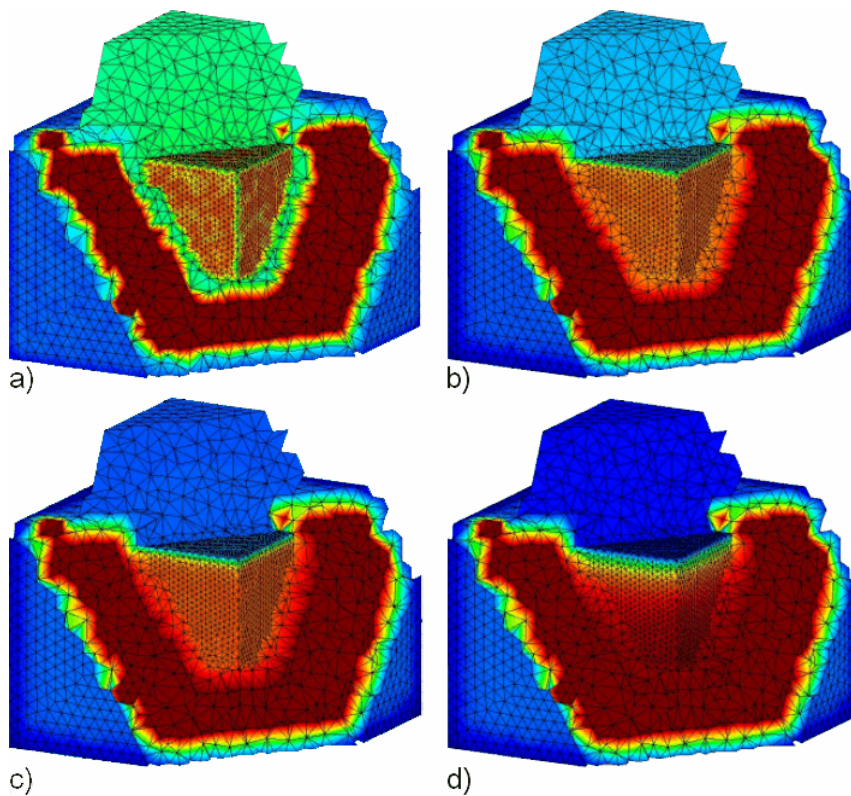
Specyfika programów odlewniczych utrudnia porównanie otrzymanych wyników z rezultatami innych programów, czy eksperymentem. Wiąże się to z ograniczonymi możliwościami modyfikowania własności materiałowych, warunków brzegowo-początkowych, jak i trudnościami z uzyskaniem pełnej informacji o interesujących nas szczegółach pól prędkości i temperatury. Z tego względu zamieszczone poniżej rezultaty mają charakter jedynie jakościowy. Warto zwrócić uwagę na brak w programie informacji o polu prędkości w cieczy. Nasuwa się przypuszczenie, że program nie rozwiązuje równania przepływowego, redukując transport ciepła do przewodnictwa i ewentualnie sparametryzowanego transportu masy. Rezultaty symulacji przedstawionej na rys. 48 ilustrują przypadek krzepnięcia modelu wlewki w warunkach bliskich adiabatycznym, tzn. bez dodatkowego odbioru ciepła z układu. Widoczny jest tutaj stały wzrost temperatury zarówno kąpieli wodnej wokół naczynia z PEG-900, ścianek naczynia i metalowej ścianki górnej. Warunek izotermiczności tej ścianki nie jest więc spełniony. Odpowiada to w przybliżeniu schładzaniu się odlewu w formie odlewniczej, kosztem ogrzewania jej ścianek. Temperatura glikolu wprowadzona w warunkach początkowych spada wraz z upływem czasu i od górnej powierzchni oraz częściowo na powierzchniach bocznych rozpoczyna się proces krzepnięcia. Rozwiązanie przedstawione na rys. 49 zakłada stałą temperaturę zewnętrznej kąpieli wodnej i izotermiczne warunki ścianki górnej, odwzorowując warunki przeprowadzonych badań laboratoryjnych. Izotermy wskazują na nierównomierność procesu schładzania cieczy, z maksymalnymi strumieniami ciepła w górnych częściach naczynia. Pominięcie w rozwiązaniu zewnętrznego płaszcza wodnego, otaczającego naczynie z cieczą modelową, nie wprowadza istotnych błędów, o czym można było się przekonać porównując te wyniki z wykonaną programem VULCAN symulacją uwzględniającą gradienty temperatury w płaszczu wodnym. Wyniki uzyskane programem VULCAN dla stałej temperatury płaszcza wody i pełnej konfiguracji analizowanego układu eksperymentalnego ilustrują rys. 50-52. Podobnie jak przy symulacji programem PROCAST, również dla programu VULCAN brak jest informacji o polu prędkości w cieczy. Przy braku konwekcji naturalnej, stosunkowo małe przewodnictwo cieplne glikolu spowalnia proces krzepnięcia. Transport ciepła od ścianek bocznych zapobiega krzepnięciu w całej objętości materiału. W rezultacie krzepnięcie części cieczy ogranicza się do okolic górnej ścianki a reszta materiału znajdującego się poniżej pozostaje w stanie ciekłym.



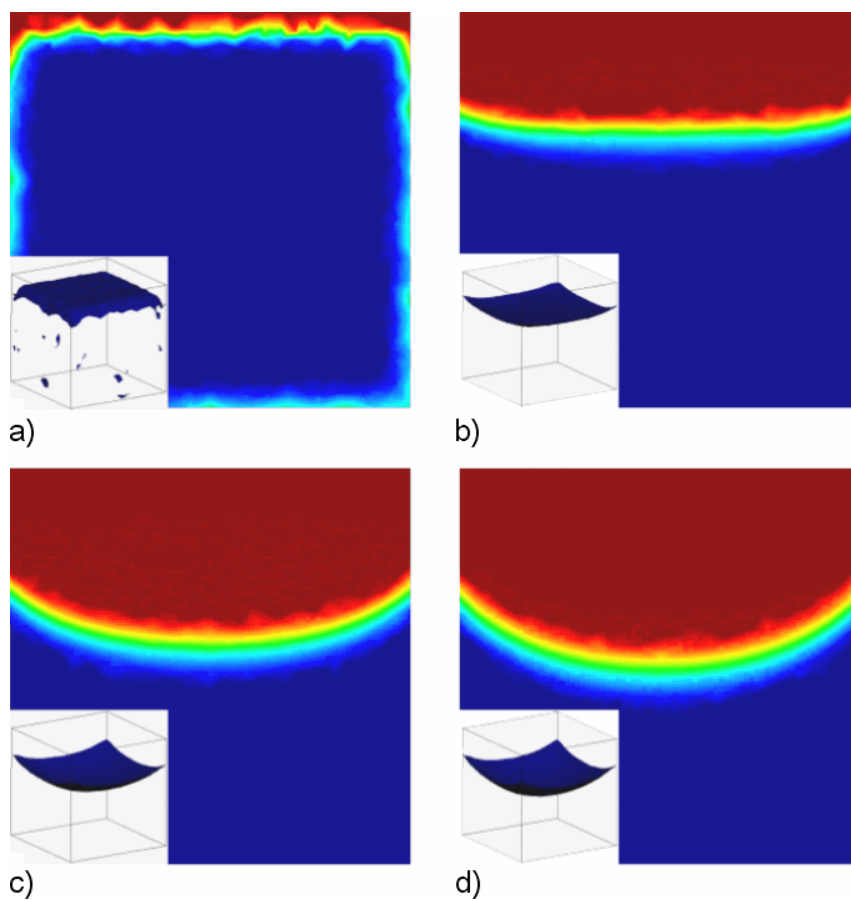
Rys. 48. Proces krzepnięcia PEG900 symulowany programem PROCAST przy braku wymiany ciepła z otoczeniem. Izotermy ilustrujące cztery fazy przesuwania się frontu krzepnięcia glikolu pokazane w płaszczyźnie symetrii układu (dzięki uprzejmości p. M. Sokolnickiego IWiT)



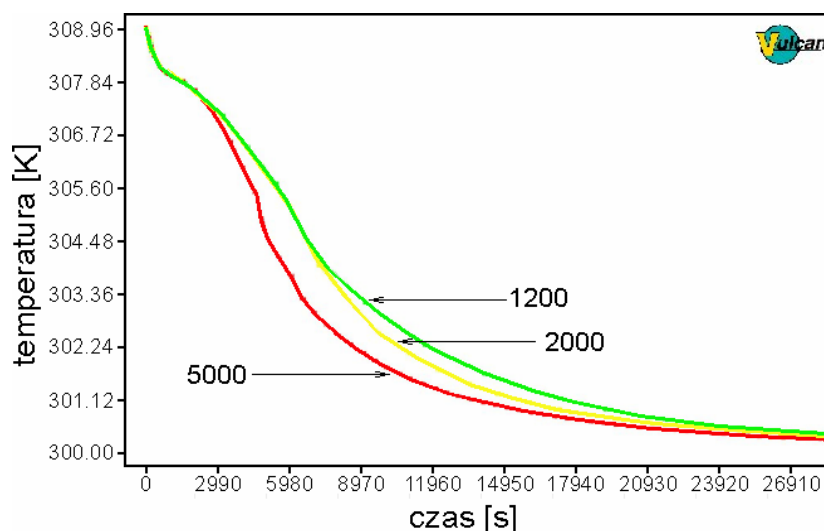
Rys. 49. Proces krzepnięcia PEG900 symulowany programem PROCAST dla izotermicznych warunków brzegowych (stała temperatura płaszcza wodnego i górnej ścianki). a) – izotermy, b) udział fazy stałej w krzepącym glikolu (dzięki uprzejmości prof. W. Kapturkiewicza AGH)



Rys. 50. Rozkład pola temperatury dla czterech faz krzepnięcia glikolu w warunkach eksperymentu laboratoryjnego, pokazany w przekrojach przestrzennych całej domeny obliczeniowej – wyniki symulacji programem VULCAN



Rys. 51. Wyniki z programu VULCAN - cztery fazy przesuwania się frontu krzepnięcia glikolu pokazane w płaszczyźnie symetrii układu



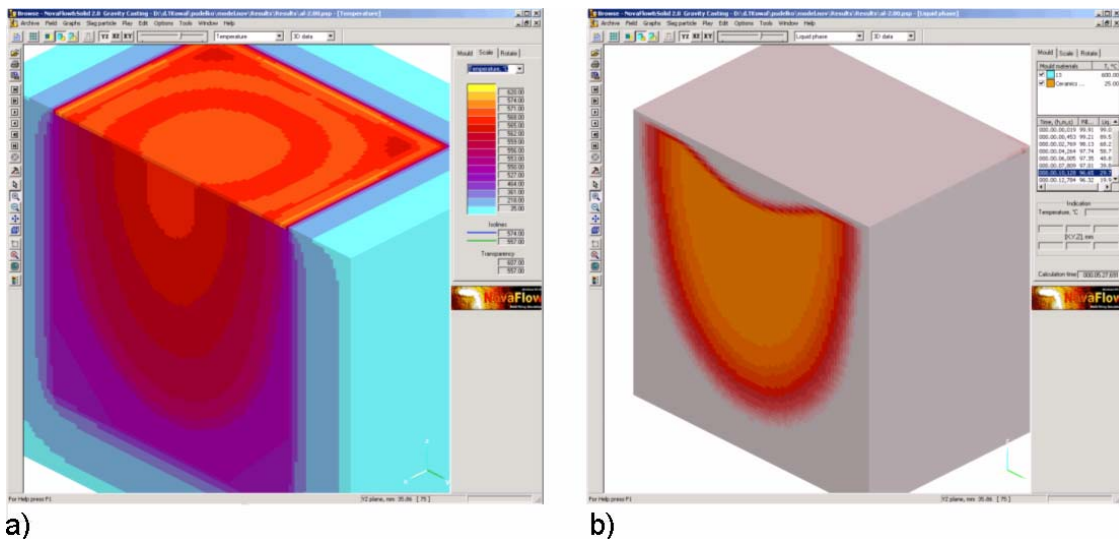
Rys. 52. Proces stygnięcia wybranego punktu cieczy w funkcji kroków czasowych symulacji programem VULCAN; geometria typu SIG. Porównanie wpływu współczynnika przyjmowania ciepła ścianek bocznych

Wyniki symulacji numerycznej procesu odlewniczego bardzo silnie zależą od współczynnika przyjmowania ciepła ścianek naczyń, parametru często przyjmowanego jedynie szacunkowo. Wpływ tego parametru na przebieg historii temperatury w środku PEG-900 prezentuje rys. 52. Warto zauważyć, że mimo radykalnej zmiany tego parametru, przebieg schładzania cieczy zilustrowany dla wybranego punktu kontrolnego zmienia się tylko nieznacznie. Jest to między innymi rezultatem ograniczenia transportu ciepła jedynie do przewodnictwa cieplnego.

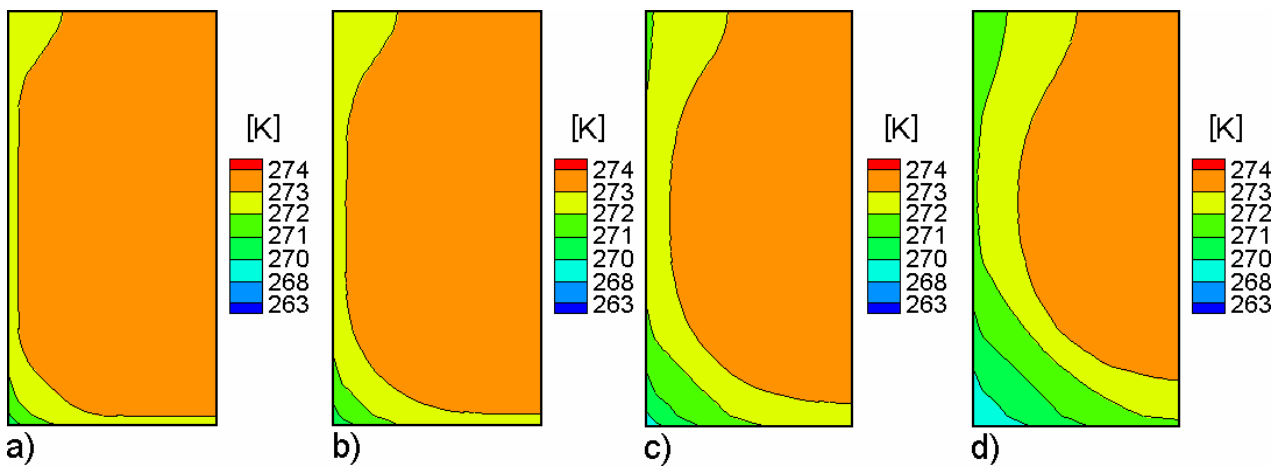
(5) Sześcián z górną powierzchnią swobodną (SP), symulacja programem NOVAFLOW krzepnięcia wody i aluminium

Użycie programu NOVAFLOW do rozwiązania zagadnienia sześciánu z górną izotermiczną ścianką i glikolem jako cieczą roboczą (odpowiednik eksperymentu numer 16 z Tabeli 5) okazało się niemożliwe do realizacji w związku z problem określenia danych materiałowych dla formy i „odlewu”. Konstruktorzy programu NOVAFLOW, jako produktu dostosowanego do typowych konfiguracji przemysłowych, nie przewidzieli możliwości swobodnej modyfikacji parametrów termofizycznych użytych materiałów „stopu” i formy. W efekcie zagadnienie badane w laboratorium z użyciem cieczy „analogowej” nie mogło być symulowane. Dla porównania rozwiązano więc analogiczne, zastępcze zagadnienie krzepnięcia kostki aluminium w formie prostopadłościowej wykonanej z ceramiki, zachowując, na ile to było możliwe, podobieństwo warunków i geometrii z eksperymentem laboratoryjnym opisanym jako geometria SP. Głównym celem tego testu było zbadanie wpływu wybranego kształtu formy na przebieg procesu krzepnięcia. Otrzymane w rezultacie symulacji rozkłady temperatury i udziału fazy stałej pokazano na rys. 55. Widoczne wyniki ilustrują przebieg procesu zachodzącego dla materiałów typowych dla odlewnictwa. Warto zwrócić uwagę na wywołane radiacyjnym strumieniem ciepła krzepnięcie płynu (aluminium) od powierzchni swobodnej, proces nie obserwowany dla substancji analogowych w laboratorium.

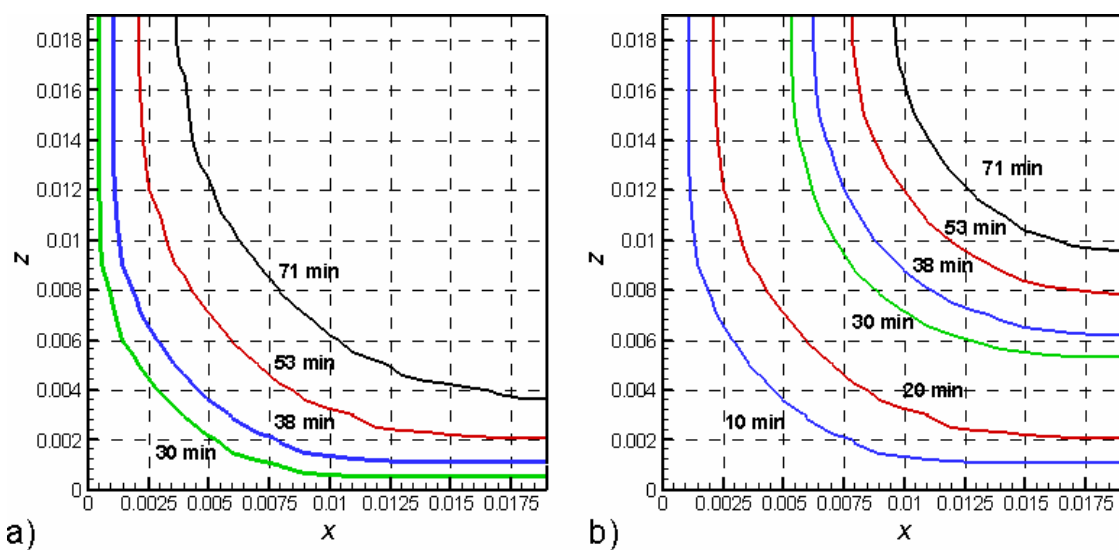
Właściwe obliczenia dotyczące procesów zachodzących w naczyniu z górną powierzchnią swobodną obejmowały modelowanie krzepnięcia wody w obecności konwekcji naturalnej. W eksperymentach laboratoryjnych w naczyniu z otwartą powierzchnią (SP) badano proces zalewania wraz z zamarzaniem wody (szczegóły eksperymentu #51 z Tabeli 5 przedstawiono w Rozdziale 5). W obliczeniach numerycznych ograniczono symulację jedynie do samego procesu krzepnięcia wody w obecności konwekcji naturalnej, zaniedbując zaburzenie warunków początkowych wywołane procesem wypełniania naczyń. Właściwości materiałowe wody i lodu przyjęte do obliczeń zostały przedstawione w Tabeli 3.



Rys. 53. Wyniki z programu NOVAFLOW - rozkład temperatury i udziału fazy stałej, symulacja krzepnięcia kostki aluminium w naczyniu typu SP



Rys. 54. Symulacja krzepnięcia wody w naczyniu typu SP (Tabela 5, #53). Pole temperatury dla: (a) $t = 1800$ s, (b) $t = 2280$ s, (c) $t = 3180$ s, (d) $t = 4260$ s



Rys. 55. Wyznaczona numerycznie (Tabela 5, # 53) ewolucja profili powierzchni lodu w naczyniu typu SP: (a)- w poziomym przekroju środkowym ($Y = 0.019$ m), (b) dla powierzchni cieczy ($Y = 0.038$ m).

Ze względu na symetrię zadania problem rozwiązano dla jednej czwartej sześcianu, co znacznie przyspieszyło czas obliczeń. Ściany naczynia włączono do obszaru obliczeniowego, rozwiązując w nim jedynie zadanie przewodnictwa cieplnego. Równania przepływu rozwiązywano metodą projekcji SIMPLEC zaimplementowaną w kodzie komercyjnym FLUENT. Pochodne przestrzenne liczone były za pomocą schematu QUICK, a pochodne czasowe w postaci niejawnego schematu drugiego rzędu. Przyjęto, że temperatura początkowa chłodzonej cieczy w naczyniu wynosiła $T_0 = 276K$. Na zewnątrz sześcianu zadano konwekcyjne warunki termiczne, ze współczynnikiem przejmowania ciepła $\alpha = 3000 W/m^2K$. Z pól temperatury i prędkości otrzymanych w rezultacie przeprowadzonych symulacji zestawów zrekonstruowano przebieg procesu fizycznego.

Rozwiązanie numeryczne pokazuje, że temperatura wody wewnątrz sześcianu spada stosunkowo szybko. W efekcie, po około 10 minutach od rozpoczęcia procesu chłodzenia ścianek bocznych temperatura wewnątrz naczynia spada poniżej temperatury krzepnięcia wody, inicjując narastanie fazy stałej na ściankach. Po dalszych 20 minutach temperatura wewnątrz spada poniżej temperatury $274K$, powodując wykształcenie się powierzchni międzyfazowej. Narastanie lodu przebiega od ścianek bocznych ku centrum, przy czym najszybszy wzrost następuje w dolnych rogach sześcianu oraz tuż pod powierzchnią swobodną w górnej części sześcianu. Kształt granicy fazy stałej częściowo tylko zgadza się z kształtem obserwowanym eksperymentalnie. Najbliższe rzeczywistości jest odwzorowanie kształtu powierzchni międzyfazowej dolnych narożników sześcianu. Gruba warstwa lodu w górnej części sześcianu, uwidocziona w rozwiązaniu numerycznym w późniejszym etapie procesu (por. rys. 54c-d), nie została zaobserwowana w pomiarach laboratoryjnych. Prawdopodobnie strumień ciepła do powierzchni cieczy do otoczenia, zaniechany w symulacji numerycznej, skutecznie hamuje proces narastania lodu w górnych częściach naczynia. Można to zauważyć porównując granice międzyfazowe przedstawione na rys. 55 dla dwóch poziomych przekrojów: środkowego ($Y=0.019m$) i na powierzchni cieczy ($Y=0.038m$). W rozwiązaniu numerycznym, w fazie początkowej powierzchnia przyrastającego lodu jest niemal równoległa do ścianek sześcianu z zaokrągleniami przy narożnikach, zmieniając się później do niemal okrągłego obrysu. Podobny przebieg zjawiska obserwowano w laboratorium (por. rys. 34). Porównując obserwowany i przewidywany numerycznie przyrost fazy stałej, można stwierdzić dość dobrą zgodność obydwu wyników w przypadku płaszczyzny środkowej $Y = 0.019m$ (rys. 55a) i dość poważne rozbieżności na powierzchni $Y = 0.038m$ (rys. 55b). Istniejące rozbieżności są prawdopodobnie efektem wprowadzonych uproszczeń modelu numerycznego, tzn. pominięcia wymiany ciepła przez powierzchnię swobodną oraz zaniechania zaburzenia pól temperatur i prędkości podczas wypełniania naczynia.

6.3.2. Modelowanie wypełniania

(6) Prostopadłościan z przegrodami wypełniany wodą i gliceryną

Kolejnym kształtem naczynia, dla którego numeryczne rozwiązania przepływu z przemianami fazowymi porównywano z wzorcem eksperymentalnym, był prostopadłościan z dwiema przegrodami (PZP) i bez przegród (PBP), ustawiany pod różnymi kątami nachylenia. Pozornie niewielka różnica w stosunku do wcześniej analizowanych przypadków powodowała istotne skomplikowanie przebiegu procesu, zbliżając zagadnienie do przemysłowych konfiguracji odlewniczych. Biorąc pod uwagę złożony charakter przepływu, zdefiniowano dwa typy wzorców eksperymentalnych opisane w części eksperymentalnej pracy (Tabela 5, # 32-44).

Pierwszy z nich obejmuje wypełnianie prostopadłościanu z przegrodami i chłodzenie wprowadzonego materiału. Ze względu na istotny w tym etapie efekt silnych zmian lepkości cieczy podczas jej chłodzenia, jako ciecz modelową wybrano glicerynę. Lepkość gliceryny wykorzystanej w laboratorium do modelowania procesu wypełniania wnęki odlewniczej zwiększa się badanym zakresie temperatur prawie dwudziestokrotnie. Takie zachowanie jest charakterystyczne dla krzepnięcia niektórych materiałów, np. polimerów. Duża zmiana lepkości w trakcie krzepnięcia jest charakterystyczna także dla metali. Stygnięcie gliceryny w modelu przypomina założenia „jedno-

plynowego” modelu numerycznego procesu krzepnięcia, gdzie nagły skok lepkości symuluje przejście fazowe. Pierwsza seria symulacji numerycznych obejmowała jedynie proces wypełniania prostopadłościanu cieczą, w którym celem nadrzędnym było odwzorowanie przepływu z powierzchnią rozdziału, a następnie po wypełnieniu - modelowanie jej schładzania. Analizowany proces nie zawiera procesu krzepnięcia.

Drugi z wzorców eksperymentalnych obejmował proces krzepnięcia płynu, w tym wypadku wody. Symulacja numeryczna tego procesu obejmuje zarówno przepływ cieczy, jak i krzepnięcie. Wyniki symulacji numerycznych procesów obejmujących jednocześnie zachowanie się trzech faz (ciecz, zakrzep i powietrze), uwzględniające deformacje swobodnej powierzchni i tworzenie się powierzchni krzepnięcia, często nie są zadawalające. Jest to spowodowane brakiem efektywnego algorytmu pozwalającego na modelowanie przepływu przy dynamicznie zmieniających się w czasie powierzchniach rozdziału pomiędzy tymi trzema fazami. Dla bardziej złożonych przypadków, np. dla nierównomiernych powierzchni ścianek z zagłębieniami i niejednorodnościami, dodatkową trudność sprawia uwzględnienie efektów zwilżania, istotnego dla uzyskania poprawnych wyników przy modelowaniu swobodnej powierzchni cieczy. Prezentowany tutaj model stanowi więc duże uproszczenie procesu zalewania wnęki odlewniczej. Wydaje się jednak, że jest to konieczne dla identyfikacji problemów spotykanych w programach symulacyjnych.

W pierwszym eksperymencie numerycznym modelowano wymuszoną konwekcję lepkiego płynu w prostokątnym, pochylonym prostopadłościanie z dwiema przeszkodami (naczynie typu PZP, rys. 7). Izotermiczne zimne ścianki naczynia były utrzymywane w temperaturze $T_c = 283K$. Gliceryna o temperaturze początkowej $T_h = 323K$ była wprowadzana do wewnątrz formy przy stałym wydatku objętościowym wynoszącym $0.82cm^3/s$. Liczby Rayleigh’a i Prandtla dla tej konfiguracji wynoszą 6×10^6 i 4000 . Bezwymiarowe liczby charakteryzujące przepływy obliczono na podstawie własności termo-fizycznych gliceryny wyznaczonych w temperaturze $303K$. Liczba Rayleigh’a została policzona w oparciu o różnicę temperatur wprowadzonej cieczy i zimnych ścianek naczynia oraz odległość między tymi ściankami.

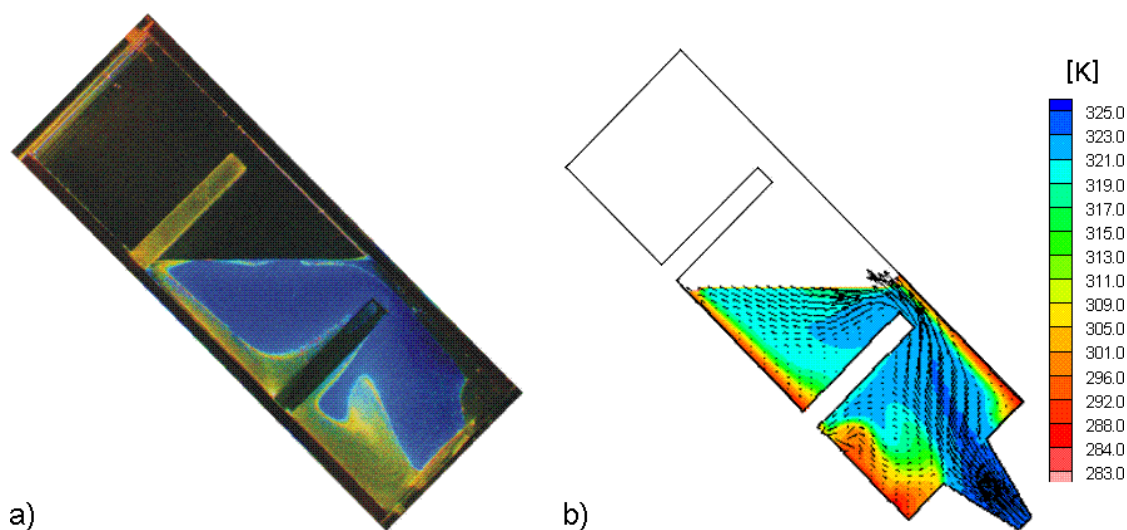
Za transport ciepła pomiędzy zimnymi ściankami formy a ciepłą cieczą są odpowiedzialne zarówno konwekcja wymuszona, jak i naturalna, przy czym ta druga zaczyna odgrywać istotną rolę po zakończeniu fazy zalewania, gdy różnica temperatur pomiędzy cieczą, a zimnymi ściankami pozostaje jedynym wymuszeniem przepływu. Przepływ ma charakter laminarny, liczba Reynoldsa na wlocie ma wartość 0.2 .

Przebieg eksperymentu symulowano programem FLUENT, przyjmując w równaniach transportu laminarny, lepki i nieściśliwy model przepływu płynu o zmiennej lepkości i gęstości. Opisana wcześniej metoda VoF została użyta do śledzenia powierzchni rozdziału pomiędzy fazą ciekłą (gliceryna), a fazą gazową (powietrze). Nieliniowa zależność lepkości od temperatury, podanej w rozdziale 2.4, została zaimplementowana w równaniach ruchu.

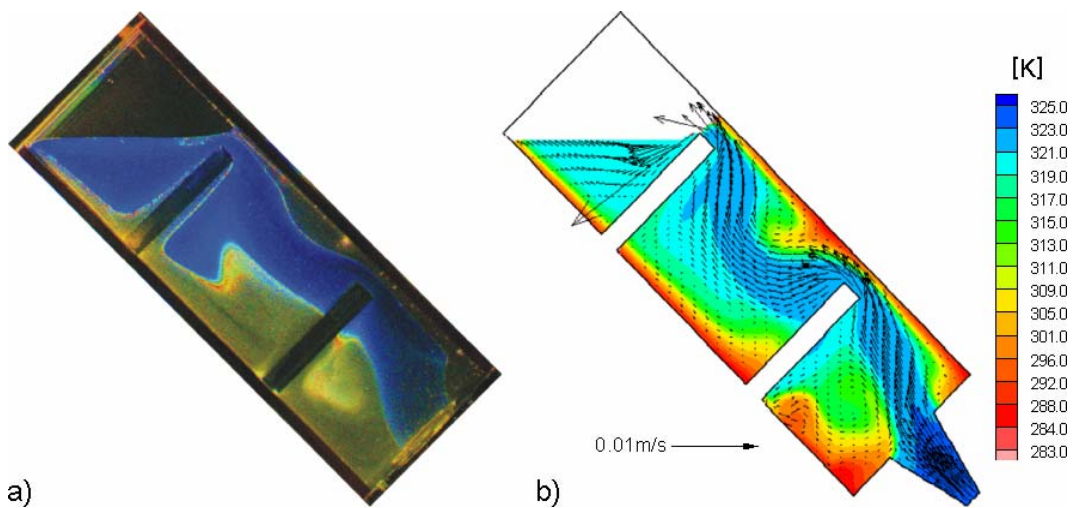
Dwuwymiarowe, niestacjonarne rozwiązanie zostało uzyskane na siatce 38×114 węzłów obliczeniowych. Pomimo dużej lepkości płynu i w zasadzie prostej geometrii formy symulacja problemu okazała się bardzo czasochłonna, szczególnie dla pierwszej fazy wypełniania u samego wlotu do naczynia. Krok czasowy rzędu 10^{-5} sekundy były konieczny, aby zapewnić stabilność symulacji. Jednym z czynników utrudniających obliczenia była gęsta siatka w obszarach, gdzie znajdowało się powietrze. Obszar ten, nie interesujący z punktu widzenia praktycznego, zajmuje większość domeny obliczeniowej w początkowej fazie wypełniania. Czas obliczeniowy potrzebny do symulacji eksperymentu wyniósł miesiąc ciągłej pracy komputera klasy PC (1.7 GHz Pentium4). Toteż, aby przeprowadzić weryfikację obliczenia w rozsądnym czasie, zdecydowano się na wykorzystanie adaptacyjnej siatki, zagęszczanej w funkcji gradientu frakcji objętościowej. Ponieważ największe gradienty występują w okolicach powierzchni swobodnej płynu, więc zmiana jej położenia powodowała przesuwanie się obszaru lokalnie zagęszczanej siatki. Dzięki temu uzyskano efekt znaczącego przyspieszenia symulacji numerycznej.

Proces modelowania podzielono na dwa etapy: fazę wtlaczania gliceryny oraz fazę jej chłodzenia. Pierwsza część obejmowała symulację przepływu z powierzchnią rozdziału, w której dominującą rolę odgrywała konwekcja wymuszona przez napływ cieczy na wlocie formy. W drugiej fazie, następującej bezpośrednio po wypełnieniu formy, zerując wydatek cieczy na wlocie naczynia symulowano jedynie proces chłodzenia gliceryny od zimnych ścianek. Dla oceny dokładności symulacji i oceny poprawności przyjętego modelu badanego zjawiska, porównano zmierzone pola prędkości i temperatury z otrzymanymi wynikami symulacji komputerowej. Poniżej przedstawiono opis struktur przepływu obserwowanych w eksperymentach oraz ich odpowiedniki numeryczne, wraz z uwagami dotyczącymi prawidłowości lub rozbieżności modelowanego zjawiska.

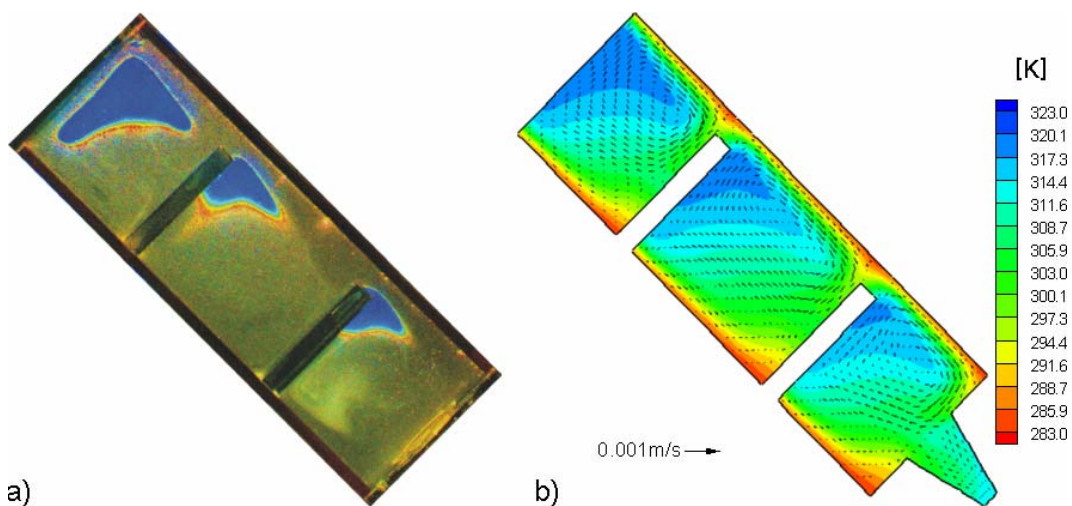
Eksperyment rozpoczyna się od otwarcia zaworu z dopływem gliceryny do otworu w dolnej części zalewanego prostopadłościanu. Początkowo gliceryna płynęła wzdłuż dolnej izotermicznej ścianki, gdzie następowało jej chłodzenie. Po wypełnieniu około jednej czwartej pierwszej komory naczynia zaobserwowano pojawienie się recyrkulacji cieczy zgodnej z ruchem wskazówek zegara. Taka struktura przepływu utrzymała się aż do momentu całkowitego wypełnienia pierwszej komory modelu. W tym momencie gliceryna, przepływając przez wąską szczelinę do kolejnej komory, sphywała pod wpływem grawitacji wzdłuż przegrody między komorami. Po częściowym wypełnieniu drugiej komory obserwowany był przepływ podobny do tego, jak przy wypełnianiu się pierwszej komory, z tym, że wytworzył się wir przeciwnie skierowany do ruchu wskazówek zegara. Ta recyrkulacja powodowała intensywne mieszanie gorącego płynu wprowadzanego do komory, za wyjątkiem dolnych rejonów, gdzie obserwowano obszar zastoju z niemal jednorodnym rozkładem temperatury (por. rys 58). Wypełnieniu trzeciej komory towarzyszyła znacznie mniejsza recyrkulacja płynu. Rozkład ciepła transportowanego wzdłuż górnej ścianki przez gorącą ciecz wpływającą do ostatniej z trzech komórek powoduje, że na rys. 57 widoczny jest charakterystyczny węzowaty kształt. Recyrkulacja w niewielkim stopniu pomaga wymianie płynu w dolnej części kanału, przy dolnej zimnej ściance. Płyn zalewając tą ścianę szybko stygnie, co powoduje powstanie obserwowanej w eksperymencie zimnej warstwy termicznej o większej lepkości (rys. 56a). Podobna warstwa zimnej, bardzo lepkiej (a więc mało mobilnej) cieczy tworzy się w późniejszej fazie eksperymentu przy górnej ściance kanału (por. rys. 57a).



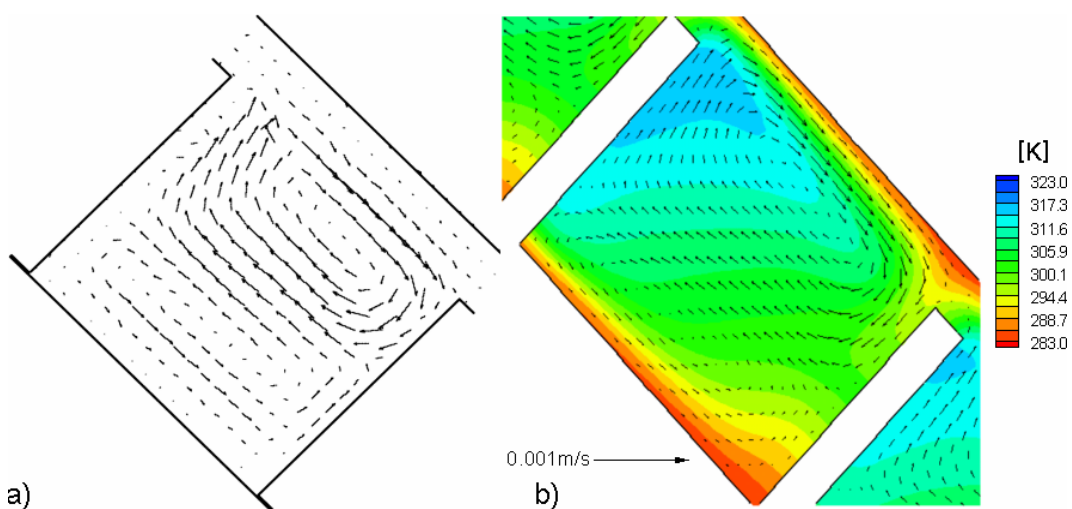
Rys. 56. Faza wypełniania naczynia typu PZP. Porównanie wyników eksperymentalnych z symulacją numeryczną dla $t=100.5$ s (a) eksperyment, pole temperatury (PIT); (b) pole temperatury i prędkości (Tabela 5, #45)



Rys. 57. Faza wypełniania naczynia typu PZP. Porównanie wyników eksperymentalnych z symulacją numeryczną dla $t=160.5$ s (a) eksperyment, pole temperatury (PIT); (b) pole temperatury i prędkości (Tabela 5, # 45)



Rys. 58. Faza chłodzenia gliceryny w naczyniu typu PZP. Porównanie wyników eksperymentalnych z symulacją numeryczną dla $t=380$ s (a) eksperyment, pole temperatury (PIT) (b) pole temperatury i prędkości (Tabela 5, #45)



Rys. 59. Faza chłodzenia gliceryny w naczyniu typu PZP. Porównanie wyników eksperymentalnych z symulacją numeryczną dla $t=500$ s (a) eksperyment, pole prędkości (PIV) (b) pole temperatury i prędkości (Tabela 5, #45)

Przeprowadzona symulacja numeryczna prawidłowo odwzorowała przebieg zjawiska. W obrazach pola temperatury widoczne jest powstawanie analogicznej lepkiej, zimnej warstwy płynu w lewej dolnej części prostopadłościanu (rys. 56b). Również wynik symulacji jest zadawalający w odtworzeniu przepływu przy przechodzeniu przez szczeliny oraz za przeszkodami. Otrzymano dobrą zgodność z eksperymentem zarówno chwilowych pól prędkości, jak i temperatury. Godne uwagi jest dokładne odtworzenie ciepłego obszaru płynu w kształcie „języka”, który powstał w pierwszej komórce przy przechodzeniu płynu przez przeszkodę, penetrującego głęboko w zimną warstwę przy lewej ścianie prostopadłościanu (rys. 56). Takie wtrącenia gorącego płynu, powstające na skutek silnych, początkowych zawirowań podczas wypełniania prostopadłościanu, pozostają jako izolowane *gorące wyspy* w rejonach stagnacji, gdzie chłodzenie odbywa się głównie przez przewodnictwo. Obecność w płynie takich rejonów o podwyższonej temperaturze prowadzi, przy krzepnięciu materiałów o wysokim współczynniku skurczu (np. metale), do tworzenia się pustych komór. Jest to podstawowe źródło wad odlewniczych.

Po wypełnieniu pierwszych dwóch komór pole temperatury układa się w charakterystyczny „węzowaty” kształt widoczny zarówno w eksperymencie, jak i w symulacji numerycznej (rys. 57). Przy górnej zimnej ścianie można zaobserwować powstanie warstwy lepkiej, mało mobilnej cieczy, odchylającej napływający przez szczelinę między komorami ciepły strumień gliceryny. Ogranicza to dyfuzję ciepła od mniej lepkiego, ciepłego strumienia, powiększając efekt chłodzenia ścian formy, co z kolei powoduje dalszy spadek lokalnej temperatury, wzrost lepkości i narastanie tej warstwy. Przechodzący przez szczelinę ciepły „język” płynu rozwija się również w trzeciej komórce, po przejściu przez drugą szczelinę. Jednakże w tym przypadku obszar gorącego wtrącenia obserwowany w symulacji numerycznej był dużo mniej wyraźny niż w eksperymencie. Dokładna analiza porównawcza pól temperatury i pól prędkości pozwoliła na wyodrębnienie źródła rozbieżności. Zauważono wyraźną różnicę w wartościach prędkości w recyrkulacji utworzonej poniżej ciepłej strugi gliceryny w drugiej komórce (por. rys. 61). Ta różnica pozostawała widoczna do końca fazy wtłaczania gliceryny, jak i podczas fazy chłodzenia.

Proces wypełniania naczynia kończy się po 195 sekundach i przepływ zostaje natychmiast zatrzymany. Rozpoczyna się druga faza procesu, powolne stygnięcie cieczy, częściowo wspomagane konwekcją naturalną. Zaobserwowano, że masy zimnego, bardziej lepkiego płynu, utworzone już w fazie napełniania, praktycznie nie mieszają się z pozostałymi obszarami płynu o wyższej temperaturze. Widać to wyraźnie w postaci „*gorących wysp*” pod każdą z przegród kanału. Siły wyporu powodują powolne przesunięcie tych ciepłych wtrąceń płynu wzdłuż przeszkód, w kierunku szczelin między komorami, co jest dobrze widoczne na rys. 58. Rysunek ten przedstawia zaobserwowane i symulowane numerycznie pole temperatury podczas fazy chłodzenia dla czasu $t = 380$ s, czyli prawie 200 sekund po zakończeniu fazy wtłaczania gliceryny. Trzy dobrze widoczne obszary o wyższej temperaturze są widoczne w każdej z komórek prostopadłościanu, zarówno w pomiarach eksperymentalnych, jak i obliczeniach numerycznych. Pomimo zgodności pól temperatur, wcześniej wspomniana różnica pól prędkości recyrkulacji w dolnej części komory jest obserwowana podczas całej fazy chłodzenia. Ilustruje to zbliżenie środkowej komórki prostopadłościanu pokazane na rys. 59. W eksperymencie zaobserwowano dwa prawie symetryczne wiry przeciwnie skierowane, a w obliczeniach numerycznych wir bliżej dolnej ścianki jest dużo mniej wyraźny w porównaniu z wirem w górnej części.

Podsumowując ocenę obliczeń numerycznych i wyniku ich analizy porównawczej z danymi eksperymentalnymi można stwierdzić, że dla problemu ze swobodną powierzchnią rezultaty uzyskane metodą VoF, zawartą w pakiecie programu FLUENT, są prawidłowe. Symulacja właściwie odtwarza podstawową strukturę przepływu, pozycję swobodnej powierzchni, powstawanie wtrąceń w chłodzonym materiale. Równocześnie wskazane zostały rozbieżności dla pola przepływu: występowanie „*gorących wysp*” jest mniej wyraźne w uzyskanych obliczeniach, również pole prędkości okazało się być mniej symetryczne w modelu numerycznym podczas fazy chłodzenia. Dokładna analiza pomiarów pól temperatury i prędkości została wykorzystana w celu wskazania

źródeł rozbieżności. Zastosowanie metody VoF do symulacji przepływu z powierzchnią rozdziału sprężonego z transportem ciepła okazało się obliczeniowo bardzo czasochłonne. Długotrwałość obliczeń może stanowić główną przeszkodę stosowania tego typu algorytmów do rzeczywistych zagadnień przemysłowych.

(7) Prostopadłościan bez przegród – proces krzepnięcia wody

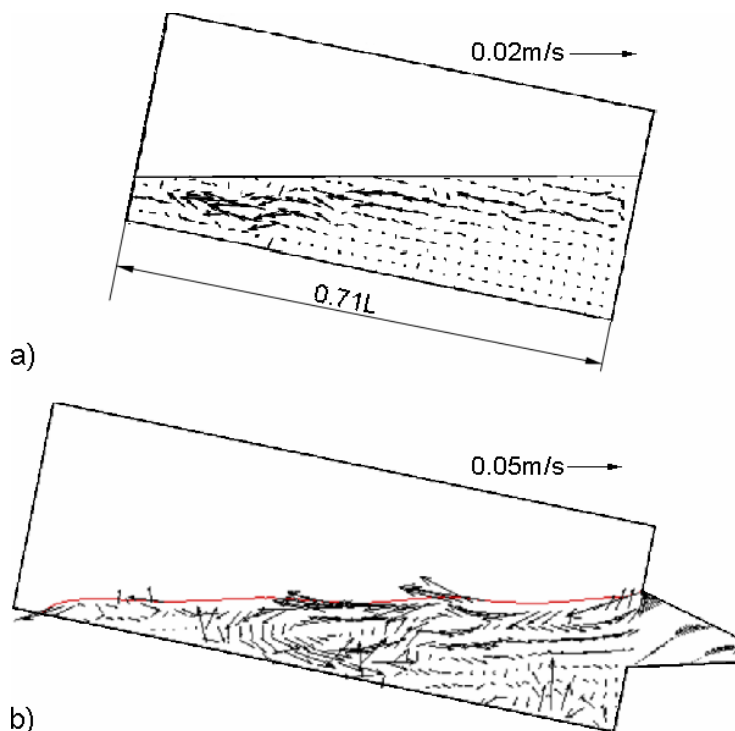
Kolejna konfiguracja eksperymentalna obejmowała zarówno modelowanie przepływu z powierzchnią rozdziału, jak i modelowanie procesu krzepnięcia. Jako materiał płynny zastosowano wodę. Przedmiotowa konfiguracja odpowiada eksperymentowi numer 41 (Tabela 5), w którym temperatura ścianek była ustawiona poniżej temperatury krzepnięcia. Opisana geometria odpowiada naczyniu typu PBP przedstawionemu w punkcie 2.3.3 części eksperymentalnej. Podobnie jak poprzednio, eksperyment składał się z dwóch etapów: wtłaczania wody (przepływ z powierzchnią rozdziału) i chłodzenia – w obydwu występowało krzepnięcie płynu. Woda o temperaturze początkowej $T_h = 297K$ doprowadzana przy stałym wydatku objętościowym równym $0.35 \times 10^{-3} m^3/s$ wpływała do formy poprzez okrągły otwór umieszczony w dolnej części formy odlewniczej. Konwekcja wymuszona, jak i konwekcja naturalna są odpowiedzialne za transport ciepła pomiędzy zimnymi ściankami formy, a ciepłą cieczą. Liczba Rayleigh'a i Prandtla wyznaczone dla tej konfiguracji wynoszą około 3 i 13.31. Liczba Rayleigh'a została obliczona w oparciu o różnicę temperatur pomiędzy temperaturą początkową cieczy, a temperaturą krzepnięcia (273K). Liczba Reynoldsa zdefiniowana na wlocie wynosi około 500.

Podobnie jak poprzednio, opisany powyżej eksperyment był symulowany przy użyciu kodu FLUENT 6.1 ([16]). Przepływ dwufazowy z powierzchnią rozdziału modelowano przy pomocy metody VoF ([24]), w połączeniu z laminarnym, lepkim, nieściśliwym modelem przepływu wraz z transportem ciepła, oraz metodą entalpową wykorzystaną do symulacji krzepnięcia. Dla uwzględnienia swobodnej powierzchni równania zachowania zawierają dodatkowe człony źródłowe odpowiedzialne za modelowanie oddziaływań gaz-ciecz i za wzrost fazy stałej (wzrost kryształu lodu). Nieliniowa zależność gęstości wody w badanym zakresie temperatur została uwzględniona w członie wypornościowym, podobnie jak w przypadku modelowania krzepnięcia w różnicowo grzanym sześcianie. W modelu numerycznym starano się zapewnić maksymalną zgodność z eksperymentem warunków brzegowych i początkowych. Stały wydatek masowy przyjęto, tak aby był w zgodzie z całkowitym czasem zalewania naczynia (Tabela 5, #42). Adiabatyczne warunki brzegowe dla równania temperatury zostały przyjęte dla wszystkich ścian, za wyjątkiem przeciwległych ścian chłodzących, które przyjęto jako izotermiczne ze stałą temperaturą $T_c = 263K$. Po przeanalizowaniu pomiarów temperatura wtłaczanej wody została ustalona w modelu numerycznym na $T_h = 293K$. W chwili początkowej forma odlewnicza była całkowicie wypełniona powietrzem. W górnej części formy odlewniczej umiejscowiono otwory odpowietrzające, podobnie jak to miało miejsce w eksperymencie. Wartości własności termo-fizycznych wody i powietrza zastosowane w obliczeniach zostały podane w Tabeli 3.

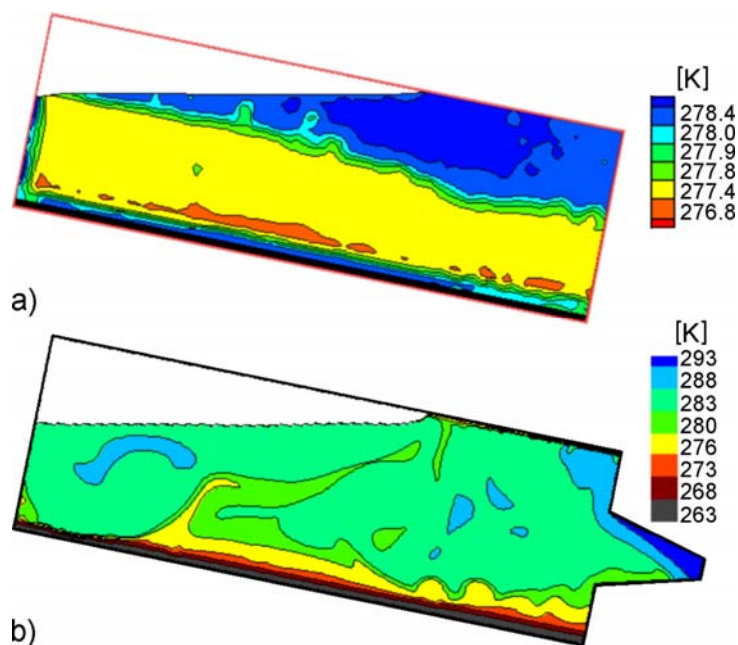
Dwuwymiarowe, niestacjonarne rozwiązanie uzyskano przy użyciu węzłów rozmieszczonych w siatkach obliczeniowych 38x114 oraz 76x228. Symulacja okazała się bardzo czasochłonna, szczególnie pierwsza faza obliczeń. Kroki czasowe rzędu 10^{-3} sekundy były konieczne w pierwszej fazie obliczeń, aby zapobiec niestabilnościom numerycznym. Dla gęstszej siatki czas obliczeniowy potrzebny do symulacji fazy wtłaczania wody wyniósł około trzech miesięcy ciągłej pracy komputera klasy PC (1.7 Ghz Pentium4).

Modelowanie można podzielić na dwie części: faza wtłaczania wody oraz fazę jej chłodzenia. Pierwsza część obejmowała symulację przepływu z powierzchnią rozdziału, w której dominującą rolę odgrywała konwekcja wymuszona napływem cieczy przez wlot formy. Proces krzepnięcia towarzyszący tej fazie odgrywał mniejszą rolę, cienka warstwa lodu narastała jedynie na dolnej

ściance. Druga faza, następująca bezpośrednio po wypełnieniu formy, związana jest z dalszym krzepnięciem wody na zimnych ściankach i przyrostem warstwy lodu. Dominującą rolę odgrywała tu konwekcja naturalna wywołana różnicą temperatur pomiędzy ściankami bocznymi, a temperaturą cieczy. Porównanie wyników eksperymentalnych pomiarów pól prędkości i pól temperatury z wynikami symulacji komputerowej przedstawiono na rys. 60 i 61.



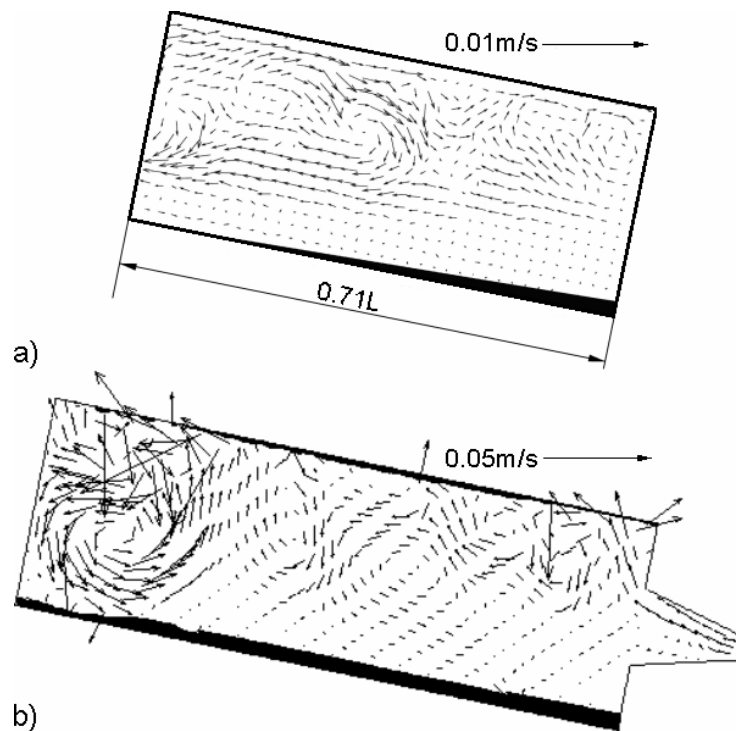
Rys. 60. Porównanie pól prędkości dla $t = 65$ s w naczyniu typu PBP (a) pomiar metodą PIV (Tabela 5, #40); (b) symulacja numeryczna (Tabela 5, #43)



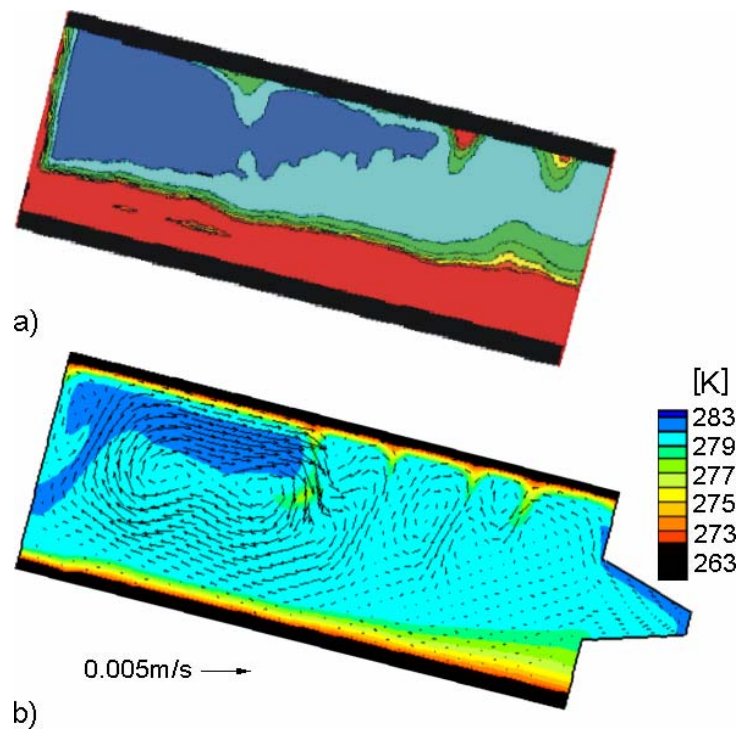
Rys. 61. Porównanie pól temperatury dla $t = 150$ s w naczyniu typu PBP (a) pomiar metodą PIT (Tabela 5, #40); (b) symulacja numeryczna (Tabela 5, #43)

Pierwsza faza eksperymentu, polegająca na wypełnianiu formy odlewniczej, trwała przez 180 sekund. Dominującym zjawiskiem w tym czasie była konwekcja wymuszona. Wtryskiwany ciepły

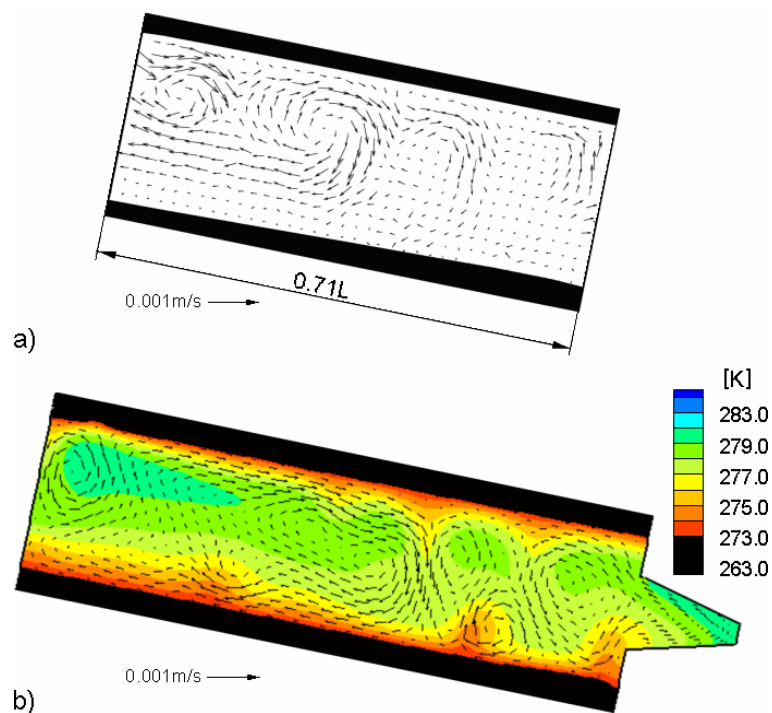
płyn przemieszczał się wzdłuż powierzchni swobodnej ze stosunkowo dużą prędkością, podczas gdy w pobliżu dolnej chłodnej ścianki, na której obserwowano narastanie fazy stałej, wartości prędkości były znacznie niższe. Symulacja numeryczna poprawnie oddała ten charakter przepływu, co jest widoczne na rys. 60 i 61. Druga część fazy zalewania, tj. po wypełnieniu ponad połowy formy, wykazała większe różnice między eksperymentem a obliczeniami numerycznymi. Rozkład temperatur w eksperymentach charakteryzował się równoległą stratyfikacją w stosunku do ścianek naczynia, z największym gradientem w połowie wysokości kanału (rys. 62a). Natomiast symulowane pole temperatury jest bardziej zróżnicowane, a maksymalne gradienty temperatury występują bliżej dolnej ścianki chłodzącej (rys. 62b). Dodatkowa różnica objawia się w kształcie narastającej warstwy fazy stałej. W eksperymencie warstwa lodu narasta nieco skośnie, najgrubsza warstwa występuje w prawym dolnym rogu formy. W obliczeniach numerycznych przyrost grubości warstwy fazy stałej jest jednorodny wzdłuż całej dolnej ścianki. Widoczne jest to na rys. 60a-b, gdzie pokazano pole prędkości w lewej części prostopadłościanu.



Rys. 62. Porównanie pól prędkości dla $t = 180$ s w naczyniu typu PBP (a) pomiar metodą PIV (Tabela 5, #40) (b) symulacja numeryczna (Tabela 5, # 43)



Rys. 63. Porównanie pól temperatury dla $t = 250$ s w naczyniu typu PBP (a) pomiar metodą PIT (Tabela 5, #40) (b) symulacja numeryczna (Tabela 5, #43)



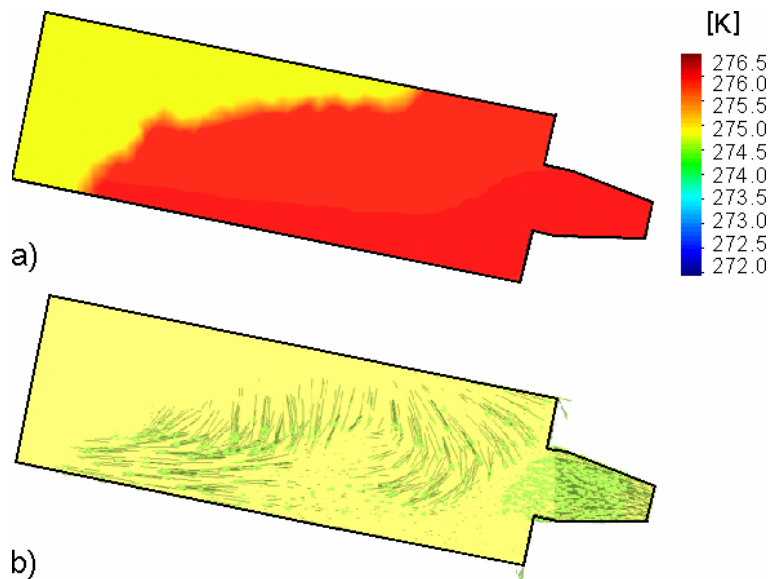
Rys. 64. Porównanie pól prędkości dla $t = 560$ s w naczyniu typu PBP (a) pomiar metodą PIV (Tabela 5, #40) (b) symulacja numeryczna (Tabela 5, #43)

Ze względu na rozbieżności, które wystąpiły w pierwszej fazie eksperymentu, nie było możliwe dokonanie ilościowego porównania uzyskanych wyników pomiarów z rozwiązaniami numerycznymi. W drugiej fazie eksperymentu różnice w rozkładzie temperatury i jej stratyfikacji były wciąż obecne, ograniczając możliwość i wartość porównań jedynie do ocen jakościowych. Podczas laboratoryjnych pomiarów dominującymi zjawiskami było krzepnięcie i towarzyszący temu zjawisku przepływ wywołany konwekcją naturalną. Ciepłe masy płynu przemieszczają się w

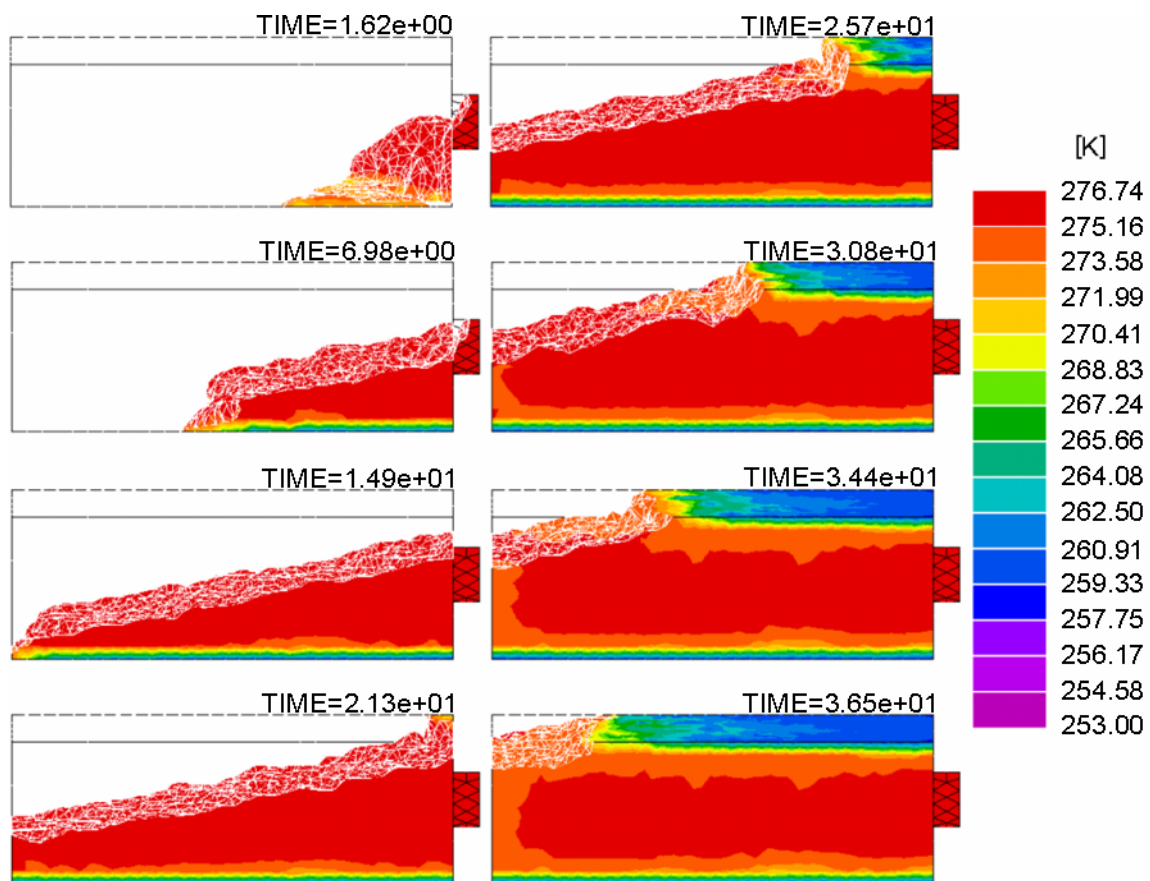
kierunku górnej ścianki, co jest widoczne na rys. 63a i 63b. Opisane w części eksperymentalnej niestabilności (zwane „termikami”), widoczne na rys. 63a, tworzące się wzdłuż górnej warstwy fazy stałej i przemieszczające się z prawej na lewą stronę, były również odtwarzane poprzez symulację numeryczną (rys. 63b).

Struktura przepływu podczas procesu krzepnięcia charakteryzowała się obecnością wirów skierowanych zgodnie ze wskazówkami zegara. Prowadziły one do tworzenia się „termików” z prawej do lewej strony wzdłuż górnej granicy międzyfazowej. Obliczenia numeryczne prawidłowo odtwarzały tego typu struktury, co jest widoczne na rys. 64a i b, jednakże równocześnie powstawały wiry przeciwnie skierowane wzdłuż dolnej granicy międzyfazowej, które nie zostały zaobserwowane w eksperymencie. Głównym powodem tej rozbieżności jest przypuszczalnie omówiona powyżej różnica w rozkładzie temperatur, modyfikująca dalszy rozwój przepływu.

W uzupełnieniu eksperymentów numerycznych, porównano wyniki badań laboratoryjnych, krzepnięcia wody (Tabela 5, #47), z symulacją procesu zalewania wykonaną przy użyciu programów odlewniczych VULCAN i PROCAST. Wyniki z obu programów oddają przebieg zjawiska zalewania tylko jakościowo. Przykłady wyników numerycznych pokazano na rys. 65-68. Zmiana położenia powierzchni swobodnej ukazana przez program VULCAN ma podobny charakter do wyników uzyskanych z programu PROCAST. Zauważono, że rozkład prędkości w wybranym przekroju znacznie odbiega od wielkości obserwowanych w eksperymencie. O podobieństwie do eksperymentu można mówić tylko w stosunku do położenia powierzchni swobodnej. Kolejne fazy procesu zalewania i krzepnięcia pokazuje rys. 66. Zarówno zaburzenia kształtu powierzchni swobodnej jak i szybkość przyrastania fazy stałej znacznie odbiegają od rezultatów eksperymentu fizycznego. Obliczeń nie powtarzano, stwierdzając, że z uwagi na prawdopodobny brak pełnego układu równań Naviera-Stokesa w obu modelach numerycznych, odtworzenie warunków laboratoryjnych wymaga znacznej modyfikacji tych kodów.



Rys. 65. Rozkłady temperatury i prędkości przepływu wyznaczone programem VULCAN (odpowiednik eksperymentu # 47 z Tabeli 5)



Rys. 66. Rozkłady temperatury i prędkości przepływu wyznaczone programem PROCAST (odpowiednik eksperymentu #47 z Tabeli 5, dzięki uprzejmości p. M. Sokolnickiego IWiT)