

# 1. Wstęp

## 1.1. Motywacja

Numeryczna mechanika płynów (*ang. Computational Fluid Dynamics*) obecnie jest jedną z najpopularniejszych metod rozwiązywania problemów z mechaniki i fizyki płynów. Metody numerycznej mechaniki płynów znajdują zastosowanie zarówno przy rozwiązywaniu problemów inżynierskich, jak i w badaniach naukowych. Na podstawie rozwiązań będących wynikiem jedynie symulacji numerycznej projektuje się urządzenia przemysłowe oraz optymalizuje procesy produkcyjne. Również w badaniach naukowych co raz częściej wiodącym narzędziem analizy staje się modelowanie numeryczne, przy pomocy którego potwierdza się słuszność zapostulowanych modeli teoretycznych. Stało się to możliwe dzięki bardzo szybkiemu rozwojowi technik komputerowych, w tym algorytmów obliczeniowych, języków programowania oraz architektury komputerów i infrastruktury sieciowej. Powszechność modelowania numerycznego powoduje, iż często zastępuje się nimi badania eksperymentalne, które wymagają dużych nakładów finansowych na aparaturę doświadczalną oraz są czasochłonne.

Można stwierdzić, iż symulacje komputerowe stały się nieodzownym narzędziem przy prowadzeniu badań naukowych, jak i przy projektowaniu i optymalizacji procesów technologicznych. Do tradycyjnego podziału mechaniki płynów na teoretyczną i eksperymentalną dołączyć należy mechanikę obliczeniową (numeryczną) jako oddzielną dyscyplinę. Istotne zatem jest pytanie o dokładność, jakość i wiarygodność wykonywanych obliczeń numerycznych, które są wykorzystywane do opisu zjawisk fizycznych. Jest to szczególnie ważne w świetle faktu, iż w oparciu o uzyskiwane rezultaty będące wynikiem symulacji numerycznej często wyjaśnia się zjawiska fizyczne i postuluje się nowe modele służące do ich opisu. W celu oceny dokładności i poziomu wiarygodności symulacji numerycznych przeprowadza się ich **weryfikację** i **walidację**. Precyzyjna definicja obu pojęć zostanie podana w następnym rozdziale, teraz jedynie w celu przedstawienia motywacji niniejszej pracy nakreślimy zwięźłą definicję, która została zaproponowana przez Boehma [1] oraz Blottnera[2], a później została zaadaptowana przez Roache [3]. Określili oni weryfikację jako proces, który ma za zadanie odpowiedzieć na pytanie **czy poprawnie zostały rozwiązane równania** opisujące badany model (*ang. verification ~ solving the equations right*), natomiast walidację jako proces, który odpowiada na pytanie **czy odpowiednie równania zostały rozwiązane** w celu zamodelowania procesu fizycznego (*ang. validation ~ solving the right equations*). Ta najzwięźlejsza definicja dwóch procedur służących do oceny wiarygodności (uwiarygodnienia) symulacji numerycznych wyróżnia dwa istotne etapy. Pierwszy, dotyczący sprawdzenia i oszacowania błędów wynikających z wykorzystania procedur numerycznych wykonywanych przy pomocy maszyn cyfrowych do rozwiązania równań modelu, drugi dotyczy poprawności modelu w świetle badań eksperymentalnych. Podział ten jest ściśle związany z procesem numerycznego rozwiązywania problemów z zakresu mechaniki płynów.

Ogólnie proces numerycznego rozwiązywania zadań z mechaniki płynów można podzielić na trzy etapy: (i) sformułowanie problemu w języku pojęć fizycznych (przyjęcie założeń dotyczących modelowanego procesu, zagadnienia, rodzaju płynu i charakteru przepływu np. płyn lepki - nielepki, newtonowski – nienewtonowski, ściśliwy - nieściśliwy, problem jedno - dwu - trój wymiarowy, stacjonarny – niestacjonarny, turbulentny – laminarny, izotermiczny - nieizotermiczny). (ii) matematyczne sformułowanie problemu (zazwyczaj w formie zestawu równań różniczkowych cząstkowych, definicji obszaru obliczeniowego, warunków brzegowych i początkowych) (iii) rozwiązanie numeryczne (metody dyskretyzacji obszaru, równań, algorytmy rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych oraz inne algorytmy numeryczne). Taki schemat postępowania przy rozwiązywaniu numerycznym wyjaśnia podział uwiarygodnienia na weryfikację i walidację. Walidacja dotyczy pierwszego etapu, natomiast weryfikacja dotyczy drugiego i trzeciego etapu. Etapy te są oddzielne i mają za zadanie sprawdzić poprawność kolejnych etapów procesu składającego się na poprawne rozwiązywanie problemu. Ogólnie przyjętą i zalecaną zasadą jest, aby weryfikacja poprzedzała walidację [3]. Dzięki temu

uwiarygodnienie modelu fizycznego (walidacja) nie jest obarczone błędami pochodzącymi z symulacji numerycznej (tj. błędami z poprzedniego etapu).

Każdy z etapów pociąga za sobą przyjęcie wielu założeń i uproszczeń. Jednakże kluczowe założenia dotyczące problemu, który chcemy zamodelować, są definiowane w pierwszym etapie. Efektem tych założeń jest opis problemu w formie równań różniczkowych cząstkowych wraz z warunkami brzegowymi i początkowymi oraz określenie niewiadomych tak, aby było możliwe rozwiązanie postulowanego układu równań. Stąd liczba parametrów opisujących proces lub zagadnienie jest zminimalizowana do kilku funkcji określających przepływ (np. składowe prędkości, ciśnienie, temperatura). Pozostałe parametry zazwyczaj przyjmuje się jako znane lub wyznacza się z empirycznych zależności. Mimo to ocena uzyskanych rezultatów tylko pod względem nieodłącznych błędów numerycznych nastęrcza wiele problemów, głównie ze względu na ogromną ilość danych wynikowych. Na przykład gdy rozważamy przepływ w obszarze o geometrii sześcienniej, dla którego wygenerowano siatkę obliczeniową liczącą 20 x 20 x 20 węzłów, a poszukiwanymi niewiadomymi jest pięć podstawowych funkcji (trzy składowe prędkości, ciśnienie i temperatura) to w rezultacie obliczeń otrzymujemy wartości tych pięciu niewiadomych w 8000 punktach obszaru obliczeniowego w kolejnych krokach czasowych. Czyli otrzymamy około 40000 liczb pomnożone przez ilość kroków czasowych obejmujących symulację. Tak ogromna ilość danych sprawia, że weryfikacja jest procesem żmudnym i czasochłonnym, nawet w przypadku znajomości analitycznej rozwiązania. W praktyce zazwyczaj brak jest rozwiązań analitycznych, a częstą praktyką jest ograniczenie porównywania wyników tylko dla stanów stacjonarnych, o ile takie istnieją.

Jedną z standardowych metod weryfikacji obliczeń przy braku referencyjnych rozwiązań analitycznych stało się definiowanie **wzorców numerycznych** (*ang. benchmark solutions*), pozwalających na ocenę rezultatów symulacji numerycznej i określenie ich błędów. Dokładny przegląd opublikowanych dotychczas w literaturze numerycznych rozwiązań wzorcowych dotyczących omawianej w niniejszej pracy klasie przepływów jest przedstawiony w rozdziale 1.2.1 i 1.3. Ponadto tworzone są bazy danych zawierające rozwiązania wzorcowe dla przepływów należących do określonych klas przepływów [4] tak, aby móc bez trudu porównywać rozwiązania wykonane przy użyciu różnych metod, algorytmów numerycznych lub różnych schematów dyskretyzacyjnych. Również tego typu weryfikacjom poświęcone są seminaria i sympozja naukowe takie, jak: AGARD[5], CFD Triatlons [6], Ercoftag Meetings[7], Eurotherm Seminars[8]. Podczas tych spotkań definiowane są zadania problemowe, stanowiące definicje wzorców numerycznych, a następnie przedstawiane są rozwiązania wykonane niezależnie przez grupy naukowców z różnych zespołów badawczych. Celem takich porównań jest chęć określenia optymalnych schematów i algorytmów numerycznych pod względem kosztów i trudności w osiągnięciu zadanej dokładności, jak i ogólne określenie przydatności metod lub schematów do konkretnych problemów.

Powyżej opisane wzorce numeryczne dotyczą jedynie **weryfikacji programów** służących do symulacji numerycznych. Dzięki takim porównaniom jesteśmy w stanie sprawdzić czy nowo stworzony program rozwiązuje poprawnie przykładowe zadania należące do konkretnej klasy przepływów. Drugim etapem weryfikacji jest **weryfikacja konkretnego obliczenia**, dla którego zazwyczaj nie dysponujemy danymi wzorcowymi. Ten etap wykonuje się po to by oszacować margines błędu numerycznego dla konkretnego rezultatu symulacji numerycznej, przy użyciu metod takich, jak: ekstrapolacja Richardsona, test wrażliwości siatki, i inne, które zostały opisane dokładnie w rozdz. 1.2.2.

Drugi etap uwiarygodnienia – walidacja, jak do tej pory nie doczekał się standaryzacji ani nawet ogólnej akceptacji co do metod jej przeprowadzania tak jak ma to miejsce w przypadku weryfikacji. Ze względu na to, iż walidacją określa zgodność obliczeń numerycznych z fizycznym modelem wykonuje się ją przy użyciu dostępnych danych eksperymentalnych. Definiowane są **wzorce eksperymentalne** (*ang. experimental benchmarks*), na podstawie których możliwe jest dokonania porównanie pomiędzy wynikami numerycznymi i eksperymentalnymi. Tworzy się również bazy danych zawierające wyniki pomiarów eksperymentalnych wraz z dokładnym opisem przebiegu doświadczeń [9]. Jednakże, takie porównania określają tylko czy symulacja numeryczna

poprawnie odtworzyła parametry fizyczne dla jednego modelowego przykładu, i jest odpowiednikiem pierwszego etapu weryfikacji (weryfikacji programu). Natomiast drugi etap walidacji, odpowiadający za walidację konkretnego problemu fizycznego (odpowiednik weryfikacji konkretnego obliczenia), zazwyczaj nie jest przeprowadzany, ze względu na brak odpowiednich metod. Jest to głównie spowodowane tym, iż nie możliwe jest przewidzenie *a priori* marginesu błędu dla wyników doświadczenia w przypadku gdy zostanie zmieniony czy pominięty jeden z parametrów fizycznego opisu analizowanego układu. Z drugiej strony, ze względu na ogromną ilość możliwych do uwzględnienia parametrów zjawiska fizycznego, trudno byłoby zamieszczać wyniki eksperymentalne rejestrując wszystkie dopuszczalne wartości zmian parametrów. Niniejsza praca ma za zadanie wypełnić tę lukę i przedstawić metodę, dzięki której na podstawie obliczeń numerycznych będzie można określić istotne parametry fizyczne przepływu, czyli takie, które decydują o charakterze przepływu, oraz podać dokładność z jaką należy wykonać pomiar tych parametrów w celu wykonania pełnej walidacji. Korzyści z takiej metody są dwojakie: po pierwsze w wyniku jedynie obliczeń numerycznych można określić z jaką dokładnością należy kontrolować parametry układu eksperymentalnego aby móc przeprowadzić pełną walidację. Jest to bardzo istotna informacja dla eksperymentatorów. Po drugie, w przypadku gdy walidacja nie będzie przeprowadzana na podstawie analizy wrażliwości parametrów układu, można będzie wnioskować, które z obliczeń numerycznych ma wyższy poziom wiarygodności. Model numeryczny charakteryzujący się mniejszą wrażliwością na zmianę parametrów będzie określany jako bardziej wiarygodny w porównaniu z tym, który wykazuje dużą wrażliwość.

Zaproponowana metoda oczywiście nie zastąpi walidacji, która zawsze będzie polegała na porównaniu rezultatów symulacji numerycznych z wynikami eksperymentalnymi. Metoda ta ma usprawnić ten proces, tak aby porównywać te parametry, które są istotne dla przepływu oraz wyodrębnić optymalny układ do badań eksperymentalnych. W ten sposób ilość konfiguracji eksperymentalnych jest ograniczana do niezbędnego minimum podczas procesu uwiarygodnienia oprogramowania stworzonego w celu symulacji numerycznych pewnej klasy przepływów (tzw. procesu atestacji). Postępowanie takie ma szczególne znaczenie w przypadku, gdy modeluje się co raz bardziej skomplikowane przepływy wraz z modelowaniem dodatkowych zjawisk takich, jak przepływy wielofazowe, przepływy ze swobodną powierzchnią, przepływy z transportem ciepła i/lub masy, przepływy w obecności krzepnięcia. Ilość parametrów w tego rodzaju zagadnieniach, które mogą wpływać na końcowy rezultat wyników numerycznych i eksperymentalnych, rośnie bardzo szybko co utrudnia analizę uzyskanych wyników. Dlatego wyodrębnienie najistotniejszych parametrów staje się kluczowe, a niejednokrotnie umożliwia jakiegokolwiek ilościowe porównanie pomiędzy wynikami numerycznymi i eksperymentalnymi.

Kolejnym aspektem przemawiającym na korzyść proponowanej metody walidacji jest to, iż znaczna część obliczeń numerycznych jest obecnie wykonywana przy pomocy programów komercyjnych lub bibliotek oprogramowania bez dostępu do kodów źródłowych. Nawet korzystając z profesjonalnego oprogramowania, które przeszło pierwszy etap weryfikacji (porównanie z wzorcami numerycznymi) oraz być może pierwszy etap walidacji (porównanie z wzorcami eksperymentalnymi), nie można pominąć drugiego etapu weryfikacji czyli oszacowania błędu otrzymanego rezultatu [3]. Natomiast drugi etap walidacji, zaproponowany w niniejszej pracy, oczywiście nie jest wymagany lecz mamy nadzieję, że może stać się obowiązującym standardem. Został on tak zaprojektowany aby użytkownicy zarówno programów komercyjnych, jak i autorzy własnych programów mogli go wykorzystać. Cała procedura wymaga przetwarzanie tylko rezultatów obliczeń numerycznych podobnie, jak procedury weryfikacyjne służące do określenia błędów numerycznych w przeprowadzonych obliczeniach, czyli jest analizą *a posteriori*.

Mimo gwałtownego rozwoju metod numerycznych, w tym powstania nowych schematów służących do dyskretyzacji przestrzennej jak i czasowej, a także nowych metod numerycznych do rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych, nie ma ogólnie przyjętych standardów służących do weryfikacji i walidacji oprogramowania, podobnych do tych jakich doczekały się metody eksperymentalne [10]. Lawina rozwiązań numerycznych, bez oszacowania błędów numerycznych lub z zastosowaniem nieodpowiednich schematów dyskretnych spowodowała na

łamach czasopism naukowych dyskusję na temat kryteriów akceptacji manuskryptów zawierających obliczenia numeryczne. W wyniku tej dyskusji większość czasopism naukowych dotyczących numerycznej mechaniki płynów opublikowało zalecenia (*ang. editorial statements*) dotyczące zasad powoływania się na obliczenia numeryczne i opisywania rozwiązań numerycznych. Jednym z pierwszych był *Journal of Fluid Engineering*, który w 1993 roku podał dziesięć zasad dotyczących wymagań dotyczących rozwiązań numerycznych publikowanych na łamach tego czasopisma [11]. Zawierają one następujące wymagania: (i) podstawowe cechy metody muszą być opisane, (ii) aproksymacja przestrzenna musi być co najmniej drugiego rzędu (iii) lepkość numeryczna właściwa dla konkretnej metody powinna być oceniona i zminimalizowana, (iv) niezależność rozwiązania od siatki obliczeniowej oraz zbieżność na siatce powinna być przedstawiona, (v) zbieżność iteracyjna powinna być osiągnięta jeśli zachodzi taka potrzeba, (vi) dla obliczeń niestacjonarnych błąd fazowy musi zostać oceniony i zminimalizowany, (vii) dokładność i implementacja warunków brzegowych i początkowych powinna być objaśniona, (viii) istniejące oprogramowanie powinno być w pełni zacytowane, (ix) rozwiązania wzorcowe mogą być wykorzystane do weryfikacji konkretnych przepływów, (x) wiarygodne dane eksperymentalne mogą zostać wykorzystane do walidacji rozwiązania. Zestaw powyższych zasad jest na tyle ogólny, że nakłada tylko obowiązki na autora publikacji, a nie konkretyzuje metod, którymi należy się posłużyć. Dzięki czemu otwarta jest droga dla nowych metod weryfikacji, jak i walidacji. Podobne oświadczenia edytorskie opublikowały inne czasopisma naukowe dotyczące numerycznej mechaniki płynów [12,13,14]. Dowolność w wyborze metody uwiarygodnienia obliczeń numerycznych jest cechą wspólną tego typu zaleceń i umożliwia zaproponowanie nowych metod, na przykład niniejszej metody oceny wiarygodności.

W celu zademonstrowania proponowanej metody walidacji, opartej na badaniu wrażliwości parametrów i dokonaniem na tej podstawie wyborze optymalnej konfiguracji do przeprowadzenia pełnej walidacji przy użyciu danych eksperymentalnych, wybrano klasę przepływów lepkich wywołanych gradientem temperatur, znanych jako konwekcja naturalna. Dla tej klasy przepływów zdefiniowany zostanie wzorzec eksperymentalny oraz zostaną wykonane pomiary, które będą źródłem jakościowych i ilościowych danych do porównań. Wzorzec ten obejmuje przepływ wody w różnicowo grzanej szóstokątnej o zadanej różnicy temperatur pomiędzy dwoma przeciwległymi ścianami sześcienu. Wybrano tę konfigurację z kilku względów. Konfiguracja ta była często opisywana w literaturze, zarówno w pracach o charakterze teoretycznym, obliczeniowym, jak i eksperymentalnym. Najbardziej rozpowszechniony wzorzec numeryczny dla tej klasy przepływów dotyczący tej konfiguracji został zdefiniowany już w 1983 roku przez Grahama de Vahl Davisa [15]. Dotyczył on przepływu powietrza, co oczywiście z obliczeniowego punktu widzenia nie ma wielkiego znaczenia. W naszym przypadku jako substancja robocza została wykorzystana woda ze względu na możliwość przeprowadzenia dokładnych pomiarów eksperymentalnych z wykorzystaniem cyfrowej anemometrii obrazowej (PIV) oraz cyfrowej termometrii obrazowej (PIT). Dzięki tym metodom zamierza się dostarczyć ilościowych i jakościowych danych o charakterze przepływu w całym dwuwymiarowym centralnym przekroju przez sześcien. Metody te są intensywnie rozwijane w Zakładzie Mechaniki i Fizyki Płynów od około dziesięciu lat, a co za tym idzie wykorzystano istniejące zasoby sprzętowe, zebrane doświadczenie oraz wytworzone oprogramowanie do zdefiniowania wzorca eksperymentalnego. Po trzecie wzorzec ten będzie uzupełniony o rozwiązania numeryczne, które będą stanowiły wraz z danymi eksperymentalnymi pełen zestaw do walidacji tej klasy przepływów.

Podstawowymi parametrami bezwymiarowymi charakterystycznymi dla zaproponowanego wzorca eksperymentalnego oraz opisującymi zjawiska przepływowe konwekcji naturalnej wody są liczba Rayleigha  $Ra$ , (efekty wypornościowe) i liczba Prandtla  $Pr$ , charakteryzująca własności termofizyczne cieczy. Przy małych liczbach Rayleigha przepływ jest laminarny i daje się odwzorować przy pomocy symulacji numerycznej. Wzorzec numeryczny Grahama de Vahl Davisa dotyczył właśnie liczb Rayleigha w zakresie od  $10^3$  do  $10^6$ . Dla wyższych liczb Rayleigha, kilkanaście lat później w 1999 roku, Patrik Le Quere opublikował numeryczne rozwiązanie wzorcowe dla liczb Rayleigha w zakresie  $10^6 - 10^8$  [16], określając granice zerwania stacjonarności

przepływu dla  $Ra = 2.1 \times 10^8$  [17]. Obydwa rozwiązania numeryczne dotyczyły przepływu powietrza ( $Pr = 0.71$ ) w różnicowo grzonym kanale (problem dwuwymiarowy) przy założeniu tzw. modelu Bousinesq.

Badanie zerwania stacjonarności przepływu i pojawienia się oscylacji termicznych wiąże się z koniecznością znacznego zwiększania liczby Rayleigha powyżej  $10^8$ . Dla wybranej konfiguracji eksperymentalnej jest to stosunkowo łatwe do zrealizowania przez zmianę skali długości (wymiaru naczynia), oraz poprzez zwiększanie różnicy temperatur. Znajomość wartości krytycznych liczb Rayleigha dla danej geometrii ma istotne znaczenie dla określenia zakresu stosowalności danego modelu i wyznaczania reżimów przejściowych dla badanego zjawiska. Wyznaczenie wartości kryterialnych dla tego przejścia jest jednym z celów tej pracy. Porównanie wyników numerycznych oraz określenie ich dokładności i zakresu stosowalności wykorzystanych metod zostanie wykonane przy wykorzystaniu opracowanej metody oceny wiarygodności. Dzięki temu zaprezentowana zostanie zasadność metody i przeprowadzona zostanie pełna walidacja stworzonego oprogramowania. Wybór konfiguracji jest o tyle korzystny dla przeprowadzenia tego typu porównań, gdyż wraz z wzrostem liczby Rayleigha, problem staje się co raz trudniejszy do symulacji numerycznej, rosną zarówno błędy numeryczne (problem staje się co raz gorzej uwarunkowany) i następuje zerwanie stacjonarności przepływu. Istotne jest więc znalezienie odpowiedzi na pytanie, czy model numeryczny jest w takim zakresie wciąż poprawny (tzn. czy pozwala na symulację przepływu turbulentnego). Dla niższych liczb Rayleigha oraz temperatur płynu w granicach od  $0^\circ\text{C}$  do  $10^\circ\text{C}$  podstawowa struktura przepływu w wybranej konfiguracji znacznie odbiega od klasycznego „benchmarku de Vahl Davis’a” [15]. Z powodu anomalnej zależności gęstość wody od temperatury przepływ rozdziela się na dwa przeciwbieżne cyrkulacje. Jedna z nich, dla temperatur płynu powyżej  $4^\circ\text{C}$ , transportuje płyn od ścianki cieplej do zimnej, druga dla niższych temperatur płynu w przeciwnym kierunku. Taka konfiguracja jest bardzo wrażliwa na zmiany warunków brzegowych i niedokładności numeryczne, co dodatkowo predysponuje ją jako wzorzec numeryczny i eksperymentalny.

## 1.2. Definicja weryfikacji i walidacji

Ze względu na to iż nie ma ogólnie przyjętego standardu dotyczącego definicji procedur weryfikacji i walidacji dla celów numerycznej mechaniki płynów poniżej zostały zamieszczone definicje, które będą wykorzystywane w dalszej części pracy. Ponadto w kolejnych podrozdziałach zostały opisane metody weryfikacji i walidacji, które są wykorzystywane w dalszej części pracy. Definicje w tym rozdziale oparte są na literaturze naukowej, w tym sensie jest to część przeglądu literatury, jednakże została tu wydzielona w celu usystematyzowania pojęć.

### 1.2.1 Terminologia

Pojęcia weryfikacji i walidacji pojawiły się zarówno jako pojęcia z zakresu inżynierii oprogramowania, dotyczące określania poprawności oprogramowania tworzonego przez programistów, jak i pojęcia w badaniach naukowych (w szczególności technicznych) określające potwierdzenie prawdziwości czy zakresu stosowalności modeli teoretycznych w świetle badań eksperymentalnych. Toteż w numerycznej mechanice płynów ze względu na to, iż polega ona na rozwiązywaniu problemów mechaniki płynów przy użyciu narzędzi informatycznych (języków programowania, kompilatorów) widoczne są dwa nurty w definicji tych pojęć. Pierwszy informatyczny, związany z inżynierią oprogramowania i badaniami operacyjnymi oraz drugi związany z mechaniką płynów w oparciu głównie o badania eksperymentalne.

Jedną z pierwszych definicji weryfikacji i walidacji była definicja związana z pierwszym nurtem i została opublikowana w 1984 roku przez Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE) [18,19]. Określała ona weryfikację jako proces oceniający etap tworzenia oprogramowania (*ang. software development*) pozwalający uzyskać pewność, że spełnia on wymagania zdefiniowane

w etapie poprzedzającym czyli etapie projektowania. Natomiast definicję walidacji określono jako proces testowania programu komputerowego i oceny jego rezultatów w celu zapewnienia zgodności z wymaganiami, które zostały mu postawione na etapie jego specyfikacji (analiza). Podobne definicje obu terminów zostały przyjęte przez International Organization for Standardization (ISO) [20].

Ze względu na specyfikę oprogramowania komputerowego z zakresu mechaniki płynów komitet do spraw standardów American Institute of Aeronautics and Astronautics (AIAA) zdecydował się na uszczegółowienie tych pojęć i zaadaptowanie ich dla potrzeb numerycznej mechaniki płynów. W wyniku pracy zespołu nad opracowaniem standardów w terminologii i metodologii weryfikacji i walidacji powstał w 1998 roku specjalny przewodnik (*ang. Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics*) [21]. Zdefiniowano w nim weryfikację jako proces określający czy implementacja modelu dokładnie reprezentuje konceptualny opis modelu i jego rozwiązanie. Natomiast walidacja została zdefiniowana jako proces określenia do jakiego stopnia model jest dokładną reprezentacją rzeczywistości z perspektywy określonego wykorzystania modelu.

Nie do pominięcia jest również wkład pojedynczych naukowców, którzy zauważyli brak zrozumienia w środowisku naukowym przy definiowaniu pojęć dotyczących uwiarygodnienia problemu i wnieśli istotny wkład w tę dziedzinę. Przede wszystkim cytowany wcześniej już Patrick J. Roache, który opublikował szereg artykułów [3,22] na ten temat oraz przeglądową książkę (*ang. Verification and Validation in Computational Science and Engineering*, [23]), która stała się niemal podręcznikiem w tej dziedzinie. Autor w tej książce bardzo zwięźle traktuje sprawy terminologii i jak sam pisze „interesują go praktyczne definicje i metody niż bezwartościowa semantyka i efektywne filozofowanie”. Toteż zaadoptował on, wspomniane już we wstępie, najprostsze pojęcia do określenia weryfikacji, którą zdefiniował jako poprawne rozwiązanie równań modelu, a walidację jako określenie czy poprawne równania są rozwiązywane dla konkretnego fizycznego modelu. Zwrócił uwagę na to iż weryfikacja jest w głównej mierze oparta i ściślej związana z matematyką, a walidacja z nauką, a w szczególności jej gałęziami takimi, jak: fizyka, chemia czy mechanika.

Roache nie podał ściśle obowiązującej i jedynie trafnej definicji weryfikacji czy walidacji lecz w zamian za to skupił się na podaniu konkretnych przykładów dotyczących różnicy w obu pojęciach. Dodatkowo opisał inne pojęcia, które często pojawiają się w literaturze takie, jak: certyfikacja, zapewnianie jakości oprogramowania, atestacja, dokładność, niezawodność, które są często mylone z pojęciem weryfikacji i walidacji. Roache zacytował cztery kategorie błędów za Oberkampferem [24], które określił jako „sensowne i odpowiednie”, gdyż źródła ich są wyraźnie rozdzielone. Są to błędy w modelowaniu fizycznym (*ang. physical modeling errors*), błędy dyskretyzacji (*ang. discretization errors*), błędy, pomyłki w kodzie programu (*ang. programming mistakes*) i błędy zaokrągleń (*ang. round-off errors*). W książce swej przedstawił też własną rozszerzoną klasyfikację, w której znalazło się sześć kategorii. Powyższe cztery uzupełnione o błędy występujące w parametrach fizycznych modelu oraz błędy występujące w parametrach numerycznych. Przyporządkował też, że weryfikacja zajmuje się oszacowaniem lub oceną błędów dyskretyzacji, pomyłek programistycznych, błędów zaokrągleń oraz błędów w parametrach numerycznych, natomiast walidacja – błędów w modelowaniu fizycznym oraz błędów w parametrach fizycznych.

Ponadto Roache wyraźnie podzielił weryfikację na dwa podprocesy: **weryfikację kodu numerycznego** oraz **weryfikację konkretnego obliczenia**. Określił, że weryfikacja kodu numerycznego stworzonego dla konkretnej klasy przepływów musi zawierać ocenę błędu dla znanego *a priori* rozwiązania, natomiast weryfikacja konkretnego obliczenia musi zawierać estymację błędu lub jego oszacowanie i jest zawsze wykonywana na podstawie konkretnych obliczeń, czyli *a posteriori*. Metody weryfikacji kodu numerycznego oraz weryfikacji konkretnego obliczenia zostaną podane w rozdziale 1.2.2.

Walidacja natomiast, dla Roache, jest ściśle związana z badaniami eksperymentalnymi i z dziedziną nauki, której dotyczy. Toteż stwierdził, iż jedynie ogólne uwagi oraz zalecenia są możliwe dotyczącego tego procesu. Stoi on również na stanowisku, że proces weryfikacji powinien

poprzedzić proces walidacji aby odpowiednio zinterpretować wyniki obliczeń numerycznych w świetle badań eksperymentalnych.

Odmienne stanowisko dotyczące terminologii zostało zaprezentowane na łamach Journal of Fluids Engineering przez Freda Sterna, Roberta Wilsona, Hugh Colemana oraz Erica Patersona. W ich artykule pod tytułem “Comprehensive Approach to Verification and Validation of CFD” [25] podali oni konkretne i ścisłe definicje procesów weryfikacji i walidacji. Weryfikację zdefiniowali jako proces oceny niepewności symulacji numerycznych (*ang. uncertainty of numerical simulations*) oraz, o ile jest to możliwe, estymacji znaku i wartości błędu numerycznego i niepewności w jego estymacji. Walidacja została przez nich zdefiniowana jako proces oceny niepewności modelu przy wykorzystaniu danych z wzorców eksperymentalnych oraz, o ile jest to możliwe, estymacji znaku i wartości błędu modelowania. Podejście to bierze pod uwagę niepewność zarówno w danych eksperymentalnych jak i symulacji numerycznej w celu oceny poziomu walidacji. Obie definicje są definicjami procesów, które aplikuje się do uwierzytelnienia istniejącego kodu numerycznego, bez potrzeby ingerencji czy znajomości jego budowy. U podstaw tych definicji leży konieczność oszacowania błędów oraz ich niepewności podobnie jak to ma miejsce w eksperymentalnej mechanice płynów.

Z tego powodu błąd  $\delta_S$  definiują oni jako różnicę pomiędzy symulowaną wartością pewnej wielkości, a jej prawdziwą wartością, natomiast niepewność  $U$  jest oszacowaniem błędu, takim że przedział  $[\delta_S - U; \delta_S + U]$  zawiera wartość prawdziwą błędu  $\delta$  z prawdopodobieństwem 0.95. Przy tak przyjętej definicji błędu można określić, że dokładność wzrasta wtedy gdy błąd zmierza do zera. Zdefiniowane zostały dwa różne rodzaje błędów: modelowania  $\delta_{SM}$  i symulacji  $\delta_{SN}$ . Błędy modelowania  $\delta_{SM}$  są związane z założeniami, uproszczeniami, aproksymacjami występującymi w matematycznej reprezentacji fizycznego układu (np. geometria, równania matematyczne, warunki brzegowe, modele turbulencji), a także wykorzystaniu danych wejściowych, takich jak dane materiałowe. Błędy numeryczne  $\delta_{SN}$  natomiast są błędami związanymi z procedurą rozwiązywania równań (np. dyskretyzacją, brakiem zbieżności iteracyjnej, brakiem zachowawczości w rozwiązaniu, błędami zaokrągleń, itp.). Istotnym założeniem, które zostało przyjęte przez Sterna i współautorów [25] jest to, iż nie istnieją żadne korelacje pomiędzy błędami. Przyjmują oni, że błędy symulacji numerycznej, z jednej z strony równe są różnicy wartości otrzymanej w symulacji i wartości prawdziwej ( $\delta_S = S - T$ ), a z drugiej strony błędy te są sumą błędów w modelowaniu i błędów symulacji numerycznej ( $\delta_S = \delta_{SM} + \delta_{SN}$ ). Przy tak przyjętych formułach dla błędów została zdefiniowana również niepewność symulacji numerycznej, o której mowa w definicji weryfikacji:

$$U_S^2 = U_{SM}^2 + U_{SN}^2 \quad (1.1)$$

Zdefiniowano ją jako sumę niepewności w oszacowaniu błędów modelowania i błędów symulacji numerycznej. W przypadku kiedy błędy symulacji numerycznej  $\delta_{SN}$  da się estymować, czyli zachodzi równość

$$\delta_{SN} = \delta_{SN}^* + \varepsilon_{SN} \quad (1.2)$$

( $\delta_{SN}^*$  - estymator  $\delta_{SN}$ ,  $\varepsilon_{SN}$  - błąd estymacji  $\delta_{SN}^*$ ), można skorygować otrzymaną wartość symulacji numerycznej  $S$  uwzględniając estymator błędu  $\delta_{SN}^*$  w tej symulacji. Otrzymuje się wtedy wartość skorygowaną

$$S_C = S - \delta_{SN}^* \quad (1.3)$$

z błędem

$$\delta_{Sc} = S_C - T = \delta_{SM} + \varepsilon_{SN} \quad (1.4)$$

oraz z niepewnością tego wyniku

$$U_{Sc}^2 = U_{SM}^2 + U_{ScN}^2 \quad (1.5)$$

gdzie  $U_{ScN}^2$  jest niepewnością w estymacji  $\varepsilon_{SN}$ . Powyższe wyprowadzenie wzorów dla korekty wartości symulacji numerycznej  $S_C$  wraz z oszacowaniem dla niej błędu  $\delta_{Sc}$  oraz niepewności  $U_{Sc}$  zostało wyprowadzone przez Sterna i współautorów przy założeniu, że błędy w symulacji numerycznej  $\delta_{SN}$  mają charakter deterministyczny. Zastosowane podejście jest analogiczne do tego stosowanego w eksperymentalnej mechanice płynów przez Colemana i Steele [10].

Przyjęta powyżej terminologia definiuje weryfikację jako proces oceny niepewności w symulacji numerycznej  $U_{SN}$  i, o ile to możliwe, estymacje wartości i znaku błędu w symulacji numerycznej  $\delta_{SN}^*$  wraz z niepewnością w tym oszacowaniu. W błędach w symulacji numerycznej  $\delta_{SN}$  zostały wskazane następujące źródła błędów: niepełna iteracja, rozmiar siatki, krok czasowy oraz inne parametry numeryczne. Co pozwoliło zapisać  $\delta_{SN}$  jako sumę  $\delta_I, \delta_G, \delta_T, \delta_P$  oraz analogicznie  $U_{SN}$  i  $\delta_{SN}^*$ , jako odpowiednie sumy  $U_I, U_G, U_T, U_P$  oraz  $\delta_I^*, \delta_G^*, \delta_T^*, \delta_P^*$ . Metody wyznaczania powyższych estymatorów zostaną podane w następnym rozdziale.

Walidacja w świetle powyżej przyjętej terminologii to proces oceny niepewności modelowania  $U_{SM}$  przy pomocy danych z wzorców eksperymentalnych oraz, o ile to możliwe, estymacja znaku i wartości błędu modelowania  $\delta_{SM}$ . Definicja ta wymaga niezależnego oszacowania błędów i niepewności zarówno danych eksperymentalnych, jak i błędów w symulacji numerycznej i jej niepewności. Do oszacowania błędów eksperymentalnych i niepewności pomiarowej autorzy zalecają procedury zaproponowane przez Colemana i Steele [10]. Porównanie pomiędzy wynikami eksperymentalnymi, a wynikami symulacji numerycznej dokonuje się analizując tzw. błąd porównania  $E$  oraz jego niepewność  $U_E$ . Błąd porównania  $E$  jest zdefiniowany jako różnica wartości otrzymanej w eksperymencie  $D$  i wartości otrzymanej w symulacji numerycznej  $S$ . Przyjmując, że

$$D - \delta_D = S - \delta_S \quad (1.6)$$

gdzie  $\delta_D$  błąd eksperymentalny, a  $\delta_S$  błąd symulacji numerycznej. Można wyrazić błąd porównania  $E$  jako różnicę błędu eksperymentalnego i błędu symulacji.

$$E = D - S = \delta_D - \delta_S \quad (1.7)$$

Walidacja symulacji numerycznej jest osiągnięta jeśli wartość błędu porównania  $E$  jest mniejsza niż jego niepewność  $U_E$ . W celu wyliczenia wartości błędu porównania  $E$  błędy symulacji zostały podzielone na błędy wynikające z symulacji numerycznej  $\delta_{SN}$ , błędy wynikające z wykorzystania danych wejściowych (np. dane materiałowe)  $\delta_{SPD}$  oraz błędy wynikające z założeń w modelu  $\delta_{SMA}$ . Ten podział pozwala wyliczać  $E$  jako

$$E = \delta_D - (\delta_{SMA} + \delta_{SPD} + \delta_{SN}) \quad (1.8)$$

oraz niepewność tego błędu jako

$$U_E^2 = U_D^2 + U_{SMA}^2 + U_{SPD}^2 + U_{SN}^2. \quad (1.9)$$

Ze względu na to, jak autorzy sami przyznają, w praktyce nie ma możliwości wyestymować wartości  $U_{SMA}$ , a co za tym idzie  $U_E$  zaproponowali oni badanie wartości niepewności walidacji  $U_V$  zdefiniowanej jako

$$U_V^2 = U_E^2 - U_{SMA}^2 = U_D^2 + U_{SPD}^2 + U_{SN}^2 \quad (1.10)$$

i określili ją jako kluczową **metrykę walidacji procesu**<sup>1</sup>. Jako kryterium poprawnej walidacji symulacji numerycznej przyjęli warunek

$$|E| < U_V. \quad (1.11)$$

Powyższa definicja walidacji spotkała się z krytyką ze strony Roache [26,27], jak i Oberkampfa i Trucano [28], którzy zauważyli że przyjęcie warunku (1.11) oznacza, że tym łatwiej zwalidować symulacje numeryczne im większa niepewność  $U_D$ , która oznacza mniej dokładne pomiary eksperymentalne. Autorzy definicji odparli bezwątpienia słuszny zarzut [29] tym, iż walidacji nie można osiągnąć jeśli niepewność walidacji  $U_V$  nie jest mniejsza niż założony z góry pewien poziom niepewności  $U_{reqd}$  na etapie projektowania symulacji numerycznej. Ponadto  $U_V$  określa poziom z jaką możliwe jest przeprowadzenie procedury walidacyjnej z wykorzystaniem danych  $D$ . Sposób interpretacji błędu porównania  $E$ , metryki walidacyjnej  $U_V$  zostaną podane w rozdziale 1.2.3.

Oberkampff i Trucano [28], jako definicję weryfikacji i walidacji przyjęli tę zaproponowaną przez AIAA w [21] przy czym uściślili czego wymagają procesy weryfikacji i walidacji. Określili, że podstawowym celem weryfikacji jest identyfikacja, oszacowanie ilościowe (*ang. quantification*) i redukcja błędów modelu numerycznego i jego rozwiązania. Niezbędne do przeprowadzenia

<sup>1</sup> (*ang. key validation metric*) nazwa ta to bezpośrednie tłumaczenie z języka angielskiego i nie odpowiada definicji metryki w sensie matematycznym.



oszacowania ilościowego błędu symulacji numerycznej, a co za tym idzie weryfikacji symulacji numerycznej, jest istnienie bardzo dokładnych i wiarygodnych wzorców numerycznych. Tego typu wzorce mogą być rozwiązaniami analitycznymi lub bardzo dokładnymi rozwiązaniami numerycznymi (*ang. benchmark solutions*). Dzięki takim rozwiązaniom weryfikacja ma za zadanie dostarczyć dowodu, że model (w przypadku mechaniki płynów zestaw równań różniczkowych cząstkowych + warunki brzegowe + warunki początkowe) został poprawnie rozwiązany poprzez zawarte w programie komputerowym algorytmy. Autorzy zwracają uwagę, że weryfikacja oprogramowania powinna być każdorazowo powtarzana, gdy zmieniana jest choćby część kodu. Błędy, które należy zidentyfikować oraz oszacować ilościowo na etapie weryfikacji zostały podzielone na pięć kategorii: (i) błędy wynikające z nie osiągnięcia wystarczającej zbieżności dyskretyzacji przestrzennej, (ii) błędy wynikające z nie osiągnięcia wystarczającej zbieżności dyskretyzacji czasowej (iii) niewystarczająca zbieżność procedur iteracyjnych, (iv) błędy zaokrąglenia oraz (v) pomyłki programistyczne. Dodatkowym zadaniem weryfikacji jest wykazanie stabilności, zgodności i wydajności schematów dyskretyzacyjnych. Pierwsze trzy kategorie błędów autorzy określili jako charakterystyczne dla numerycznej mechaniki płynów, wynikające z modelu w formie równań różniczkowych cząstkowych i przytoczyli metody ich estymacji, które zostaną podane w następnym rozdziale. Błędy zaokrąglenia według autorów rzadko są oddzielnie traktowane i zazwyczaj zakłada się że są mniejsze w stosunku do tych z kategorii (i)-(iii), jednakże ich oszacowanie ilościowe też jest celem weryfikacji. Natomiast pomyłki programistyczne występujące w programach komputerowych uznali, że należy eliminować przy pomocy narzędzi z inżynierii oprogramowania, a mianowicie przy pomocy narzędzi do zapewniania jakości oprogramowania.

Definicja walidacji podana przez AIAA została zaadaptowana przez Oberkampfa i Trucano jako procedura której celem jest ocena na ile dokładnie model odwzorowuje (reprezentuje) rzeczywistość z perspektywy zaplanowanego wykorzystania praktycznego modelu [30]. Uszczegółowili oni dodatkowo, że walidacja ma na celu ocenę porównania pomiędzy wystarczająco dokładnymi wynikami symulacji numerycznej i wynikami doświadczalnymi. Walidacja, według nich nie określa jak model numeryczny powinien zostać zmieniony aby polepszyć zgodność pomiędzy porównywanymi wynikami. Walidacja natomiast wymaga identyfikacji, ilościowego oszacowania konceptualnych błędów i niepewności modelu, ilościowego oszacowania błędu numerycznego w rozwiązaniu numerycznym, estymacji niepewności pomiarowej danych doświadczalnych, i w końcu porównania wyników symulacji numerycznej z danymi doświadczalnymi. Dokładność jest mierzona w relacji do wyników eksperymentalnych, które są według autorów najlepszą miarą rzeczywistości. Strategia przyjęta nie zakłada, że wyniki eksperymentalne są bardziej dokładne w porównaniu z wynikami obliczeń numerycznych lecz zdecydowanie zakłada, że wyniki eksperymentalne w sposób najbardziej wiarygodny odzwierciedlają rzeczywistość. Ze względu na brak możliwości lub niepraktyczność przeprowadzania eksperymentów dla bardzo skomplikowanych modeli, rekomendowane przez autorów jest podejście blokowe (*ang. building-block approach*). Ideą tego typu walidacji, jest podział skomplikowanego modelu fizycznego na trzy lub cztery warstwy, które zawierają uproszczone modele. I tak cały model jest dzielony na podsystemy (*ang. subsystem cases*), następnie te podsystemy dzielone są na wzorce (*ang. benchmark cases*), które z kolei mogą jeszcze zostać podzielone na problemy jednostkowe (*ang. unit problems*). U przyczyn takiego podziału leży to, iż w ten sposób można podzielić cały skomplikowany, rzeczywisty układ na kilka prostszych podukładów oraz to, iż tylko dla prostszych przypadków jesteśmy w stanie dostarczyć wiarygodne dane eksperymentalne, niezbędne w procesie walidacji. Autorzy podali również zestaw wskazówek, które powinny zostać uwzględnione podczas eksperymentów których celem jest dostarczenie wiarygodnych danych eksperymentalnych. Wskazówki te zostaną zacytowane w następnym rozdziale.

Podsumowując przytoczone definicje pochodzące z różnych źródeł można wyróżnić kilka elementów wspólnych dla tych definicji:

- weryfikacja jak i walidacja definiowane są jako **procesy**
- weryfikacja jak i walidacje dotyczą **dokładności** modeli lub procedur

- weryfikacja oszacowuje na ile dokładnie równania modelu są rozwiązywane przez program komputerowy i nie określa czy model ten ma coś wspólnego z rzeczywistością
- walidacja oszacowuje na ile dokładnie model zaimplementowany w programie komputerowym modeluje rzeczywistość
- weryfikacja powinna poprzedzać walidację

Główne różnice występujące w przytoczonych powyżej definicjach wiążą się z faktem, iż tematyka weryfikacji i walidacji leży na pograniczu dwóch dyscyplin wiedzy: mechaniki i informatyki. Toteż w zależności od tego, jakie podejście się zastało przyjęte przez autorów za punkt wyjścia, pojęcia mają inny charakter, aczkolwiek definicje te nie są sprzeczne czy wykluczające się.

## 1.2.2 Metody weryfikacji

Niniejszy podrozdział przedstawia literaturowe zestawienie metod wykorzystywanych do weryfikacji symulacji numerycznych. Przedstawione zostały procedury lub metody weryfikacji kodu (programu) numerycznego, jak i konkretnego obliczenia.

Celem weryfikacji jest oszacowanie na ile równania modelu zostały poprawnie rozwiązane przy pomocy dyskretnego modelu zaimplementowanego w programie komputerowym. Zakładając, że modelem w naszym przypadku jest układ równań różniczkowych cząstkowych wraz z warunkami początkowymi i brzegowymi, a  $u_{exact}$  jest analitycznym rozwiązaniem dla tego układu, wtedy błąd możemy oznaczyć, jako:

$$E = u_{exact} - u_{discrete} \quad (1.12)$$

Gdzie  $u_{discrete}$  jest rozwiązaniem otrzymanym jako wynik symulacji komputerowej. Błąd  $E$  zależy od dyskretyzacji przestrzennej, która można parametryzować wielkością komórki obliczeniowej  $h$ , dyskretyzacji czasowej, którą można parametryzować krokiem czasowym  $\tau$ , parametrów w procedurach iteracyjnych  $I$ , oraz od konkretnego kodu programu  $c$ . Wygodnie jest, podobnie jak Oberkampf i Trucano [28], rozdzielić  $E$  na dwie kategorie, wprowadzając  $u_{h,\tau \rightarrow 0}$  rozwiązanie graniczne, czyli osiągane w granicy gdy  $h \rightarrow 0$  i  $\tau \rightarrow 0$ . Wtedy

$$E \leq ||u_{exact} - u_{h,\tau \rightarrow 0}|| + ||u_{h,\tau \rightarrow 0} - u_{h,\tau,I,c}|| \quad (1.13)$$

gdzie  $u_{h,\tau,I,c}$  jest wynikiem obliczeń numerycznych wykonanych przy pomocy kodu programu  $c$ , przy wykorzystaniu siatki obliczeniowej  $h$ , z krokiem czasowym  $\tau$ , oraz z parametrami procedur iteracyjnych  $I$ . Pierwszy składnik sumy prawej strony nierówności (1.13) w analizie numerycznej nazywany jest błędami obcięcia<sup>2</sup>. Oszacowanie tego składnika wykonywane jest przy użyciu narzędzi z analizy numerycznej, i dowodzi się je zazwyczaj dla konkretnej metody dyskretyzacji (metody różnic skończonych, metody objętości skończonych, metody elementów skończonych). Definiuje się, że metoda dyskretyzacji (schemat dyskretyzacji) jest zgodna wtedy i tylko wtedy gdy  $u_{h,\tau} \rightarrow u_{exact}$  przy  $h \rightarrow 0$  i  $\tau \rightarrow 0$ . Sprawdzenie czy metoda jest zbieżna do rozwiązania dokładnego wykonuje się zazwyczaj *a priori* korzystając z twierdzeń z analizy numerycznej. Przykładem takiego twierdzenia może być twierdzenie Laxa [31]: *Dla dobrze postawionego<sup>3</sup> liniowego problemu początkowego dla układu równań różniczkowych cząstkowych hiperbolicznych oraz zgodnej aproksymacji metodą różnic skończonych rozwiązanie dyskretne  $u_{h,\tau}$  zbiega do rozwiązania analitycznego  $u_{exact}$  wtedy i tylko wtedy gdy aproksymacja jest stabilna.* Bardzo silnym założeniem jest liniowość układu, której nie mamy w przypadku układu równań opisujących przepływy. Mimo to powszechnie stosuje się badanie stabilności jako warunek konieczny i wystarczający dla wykazania zbieżności metody [23]. Wiąże się to z faktem, iż stabilność układu równań różniczkowych cząstkowych bada się przy pomocy metody von Neumana [32], która dotyczy nie

<sup>2</sup> Błędy obcięć (ang. truncation errors) nie mają nic wspólnego z błędami zaokrąglenia (ang. round-off error), które wynikają ze skończonej reprezentacji liczby w maszynach cyfrowych. Często ich mylenie wynika z bardzo podobnych odpowiedników w języku polskim.

<sup>3</sup> Dobrze postawiony problem w analizie numerycznej to taki, który posiada dokładnie jedno rozwiązanie oraz rozwiązanie jest zależne od danych wejściowych w sposób ciągły [92].

tylko układów liniowych. Analogiczne twierdzenie służące do określania zbieżności numerycznej metody zostało udowodnione przez Cea [33] dla metody elementów skończonych.

Powyższy podział błędów (1.13) został przytoczony po to, aby określić, że weryfikacja nie obejmuje oszacowania błędów obciążenia, które bada się na gruncie analizy numerycznej i nie jest to oszacowanie ilościowe. Na poparcie tej tezy można przytoczyć Obekampfa i Trucano [28], którzy stwierdzają, iż niemożliwe jest jakiegokolwiek oszacowanie ilościowe błędu *a priori* oraz Roache [23], który uważa, że znaczenie twierdzenia Laxa jest przeceniane podobnie, jak twierdzenia dotyczące istnienia i jednoznaczności rozwiązań r.r.cz. Toteż metody przedstawione poniżej dotyczą oszacowania drugiego składnika po prawej stronie nierówności (1.13), dostarczają one ilościowego oszacowania błędu  $\|u_{h, \tau \rightarrow 0} - u_{h, \tau, l, c}\|$  i są wykonywane *a posteriori*.

### **Metoda sztucznych rozwiązań (*ang. the method of manufactured solutions*)**

Metoda ta została zaproponowana przez Roache [23] w celu weryfikacji programu komputerowego (kodu) zaprojektowanego i napisanego do rozwiązywania konkretnego modelu (w przypadku przepływów dla konkretnej klasy przepływów). Należy podkreślić, że metoda ta została zaproponowana jedynie do weryfikacji programu komputerowego a nie konkretnego obliczenia, ponieważ Roache zdefiniował dwa etapy weryfikacji. Weryfikacja kodu obliczeniowego (pierwszy etap) wymaga, według Roache, oceny błędu względem **znanego** rozwiązania i metoda powyższa daje możliwość generacji takiego rozwiązania dla dowolnego układu równań różniczkowych cząstkowych oraz warunków brzegowych i początkowych.

Dokładny opis metody został opisany w pracach Roache [23,34] i polega ona na wybraniu dowolnej funkcji analitycznej i przyjęcie jej jako rozwiązania. Wstawienie jej do układu równań różniczkowych pozwala na obliczenie analityczne lub symboliczne (przy użyciu takich narzędzi jak Macsyma, Mathematica czy Maple) członów źródłowych dla rozwiązywanych równań, gdyż wybrana funkcja zazwyczaj nie spełnia równań modelu. Następnie wyliczone człony źródłowe definiuje się dla nowych, przetransformowanych równań modelu. Podobnie postępuje się z warunkami brzegowymi, tak aby zapewnić zgodność na brzegu obszaru obliczeniowego. Ten nowy zestaw równań rozwiązuje się przy pomocy programu komputerowego, przy czym znane jest rozwiązanie dla przetransformowanego modelu i możliwe jest obliczenie różnicy pomiędzy otrzymanym rezultatem z symulacji numerycznej a znanym rozwiązaniem – wybraną funkcją analityczną.

Roache zachwala swoją metodę, gdyż uważa jest to jak do tej pory jedyny sposób zweryfikowania kodu programu dla nietrywialnych problemów. Podaje szereg przykładów praktycznych, w których dzięki tej metodzie udało się nie tylko ocenić ilościowo błędy dyskretyzacji przestrzennej i czasowej, błędy przy generowaniu siatki obliczeniowej, czy błędy procedur iteracyjnych, ale również zidentyfikować pomyłki programistyczne czy błędy zaokrągleń. Brak jakiegokolwiek odniesienia do fizyki w generowanych rozwiązaniach Roache uważa również za pozytywną cechę tej metody, gdyż jak sam określa weryfikacja nie powinna mieć nic wspólnego z nauką, fizyką czy rzeczywistością, a jedynie z matematyką.

Metoda ta idealnie pasuje do definicji weryfikacji, którą zaproponował Roache, czyli oszacowania błędu względem znanego *a priori* rozwiązania. Jednakże w celu zastosowania jej konieczna jest ingerencja w kod programu, a mianowicie transformacja równań. Proces ten nie jest trywialny, a czasami nawet niemożliwy, gdy nie ma dostępu do źródeł programu.

### **Wzorce analityczne**

Weryfikację programu obliczeniowego można również wykonywać korzystając ze znanych rozwiązań analitycznych. Wyliczając bezpośrednio różnicę pomiędzy rozwiązaniem analitycznym, a dyskretnym. Główną wadą tego podejścia jest to, iż istnieje tylko kilka rozwiązań analitycznych i dotyczą one bardzo wąskiej klasy przepływów. Zazwyczaj są to rozwiązania dla modeli jedno lub dwu wymiarowych oraz prostej geometrii.

Przykładami takich rozwiązań są: dwuwymiarowy przepływ Darcy ze zmiennymi właściwościami materiałowymi [35], rozwiązanie analityczne dla przepływu w zagłębieniu podane przez Huanga i Li [36] czy stacjonarne rozwiązania dla pewnych typów równań Naviera-Stokesa podane przez Wanga [37]. Dla bardziej skomplikowanych przepływów, którym towarzyszą dodatkowe zjawiska, zazwyczaj nie znamy rozwiązania analitycznego, a jeśli to są to przypadki wyidealizowane (przewodnictwo ciepła w nieskończonym pręcie czy problem Stefana – jednowymiarowe krzepnięcie [38]).

## Wzorce numeryczne

Kolejnym sposobem weryfikacji programu komputerowego jest porównywanie wyników obliczeń z opublikowanymi dotychczas wzorcami numerycznymi. Czyli porównanie z bardzo dokładnymi rozwiązaniami numerycznymi, których dokładność została potwierdzona bądź poprzez stosowanie wyszukanych metod dyskretyzacji (np. wielomiany Czebyszewa, metody spektralne, metody wielosiatkowe), bądź też poprzez uzyskanie rozwiązań klasycznymi metodami numerycznymi z dokładnym oszacowaniem błędu.

Przykładem takiego wzorca jest rozwiązanie podane przez Ghia i współautorów [39] dla przepływu w zagłębieniu z wykorzystaniem metody wielosiatkowej (*ang. multigrid technique*), oraz rozwiązanie podane przez de Vahl Davisa dla przepływu w różnicowo grzanym kanale [15], z wykorzystaniem klasycznej aproksymacji drugiego rzędu i oszacowaniu błędu przy pomocy ekstrapolacji Richardsona. Rozwiązanie podane przez de Vahl Davisa zostało potwierdzone przez Hortmana i Perica [40], a także Le Quere [16], którzy otrzymali rozwiązania z wykorzystaniem bardziej zaawansowanych metod. Weryfikacja przy pomocy wzorców numerycznych budzi wciąż wątpliwości, szczególnie w kręgach matematyków, gdyż często stosuje się ją do sprawdzenia poprawności zastosowanej aproksymacji o której nie wiadomo czy jest zgodna. Jednakże niniejsza metoda jest najprostszą i najszybszą metodą sprawdzenia poprawności programu. O jej popularności świadczy co raz większa liczba publikowanych rozwiązań wzorcowych, na przykład na łamach *Journal of Computational Physics*, a także wielu innych czasopism dotyczących numerycznej mechaniki płynów, obejmując tym samym stosunkowo szeroki zakres przepływów.

## Metoda określania zbieżności na podstawie ekstrapolacji Richardsona

Podstawową i najbardziej popularną metodą określania zbieżności w celu weryfikacji konkretnego obliczenia jest metoda oparta na ekstrapolacji Richardsona [41,23,28]. Można ją wykorzystywać zarówno do oszacowania zbieżności przestrzennej jak i czasowej. Zakłada ona, że poszukiwane rozwiązanie jest funkcją analityczną (tzn. można ją rozwinąć w szereg Taylora), znany jest formalny rząd schematu, który został użyty do otrzymania rozwiązania, oraz błąd dyskretyzacji schematu jest co najwyżej tego samego rzędu co pierwszy pomijany człon reszty we wzorze Taylora (przy spełnieniu tych warunków mówi się, że rozwiązanie znajduje się w zakresie asymptotycznej zbieżności). Wtedy rozwiązanie dokładne można związać z rozwiązaniem dyskretnym rzędu  $p$  otrzymanym na siatce  $h$  w następujący sposób:

$$u_{exact}(x) = u_h(x) + \alpha h^p + O(h^{p+1}) \quad (1.14)$$

Mając dwa rozwiązania  $u_{h1}$  oraz  $u_{h2}$  otrzymane odpowiednio na siatkach  $h1$  i  $h2$ , oraz zakładając, że znamy formalny rząd schematu metody  $p$ , można rozwiązać układ równań podstawiając do równania (1.14) rozwiązania  $u_{h1}$  i  $u_{h2}$  i wyliczając  $u_{exact}$  i  $\alpha$  jako niewiadome. Otrzymamy wtedy, że

$$\alpha = \left[ \frac{u_{h1} + u_{h2}}{h_2^p - h_1^p} \right] + O(h_1^{p+1}) + O(h_2^{p+1}) \quad (1.15)$$

$$u_{exact} = \left[ \frac{h_2^p u_{h1} + h_1^p u_{h2}}{h_2^p - h_1^p} \right] + O(h_1^{p+1}) + O(h_2^{p+1}) \quad (1.16)$$

Pomijając człony rzędu wyższego niż  $p$  można zdefiniować estymator błędu dyskretyzacji przestrzennej  $\varepsilon$  dla dowolnego rozwiązania numerycznego  $u_h$  otrzymanego na siatce  $h$ , jako

$$\mathcal{E}(u_h) = \frac{\|u_{exact} - u_h\|}{\|u_{exact}\|} \quad (1.17)$$

W ten sposób można też obliczyć błąd rozwiązań  $u_{h1}$  i  $u_{h2}$ . Główną zaletą tego podejścia jest to, iż powyższą definicję błędu można stosować zarówno do całych rozwiązań, jak i do funkcjonałów zależnych od otrzymanych rozwiązań dyskretnych (np. strumień ciepła, liczba Nusselta, itp.). Główną wadą jest konieczność wykonania co najmniej dwóch niezależnych obliczeń na różnych siatkach ( $h_1 \neq h_2$ ).

Postępowanie opisane powyżej można uogólnić i mając do dyspozycji trzy rozwiązania  $u_{h1}$ ,  $u_{h2}$ ,  $u_{h3}$  otrzymane odpowiednio na siatkach  $h_1$ ,  $h_2$ ,  $h_3$  tak, że  $r = h_3/h_2 = h_2/h_1$ . Rozwiązanie  $u_{exact}$  można wtedy przedstawić następująco:

$$u_{exact} = u_{h1} - g_1 h_1 - g_2 h_1^2 \quad (1.18)$$

Gdzie  $g_1$  i  $g_2$  wynoszą:

$$g_1 = \frac{u_{h3} - u_{h2} - r^2(r^2 - 1)u_{h2}h_1^2}{r(r-1)h_1} \quad (1.19)$$

$$g_2 = \frac{u_{h3} - u_{h2} - r(u_{h2} - u_{h1})}{r(r-1)(r^2 - 1)h_1^2} \quad (1.20)$$

Co więcej można wtedy określić rzeczywisty rząd zbieżności schematu dyskretnego  $p$ , jako:

$$p = \ln\left(\frac{u_{h3} - u_{h2}}{u_{h2} - u_{h1}}\right) / \ln(r) \quad (1.21)$$

i porównywać z formalnym rzędem schematu oraz w ten sposób sprawdzić czy rzeczywiście ciąg rozwiązań znajduje się w zakresie asymptotycznej zbieżności.

Również podobne podejście badania zbieżności polegające na wykorzystaniu ekstrapolacji Richardsona zostało przedstawione w pracy Sterana i współautorów [25] i nazwane uogólnioną ekstrapolacją Richardsona. Określono tam, że aby wykazać zbieżność należy wykonać obliczenia dla co najmniej trzech siatek. Na podstawie otrzymanych rozwiązań należy badać stosunek różnicy pomiędzy kolejnymi rozwiązaniami  $R$

$$R = (u_{h2} - u_{h1}) / (u_{h3} - u_{h2}) \quad (1.22)$$

Zostały wyróżnione trzy możliwości: (i)  $0 < R < 1$  - monotoniczna zbieżność, (ii)  $R < 0$  - zbieżność oscylacyjna, (iii)  $R > 1$  rozbieżność. Dla pierwszego przypadku podano zarówno oszacowanie błędu  $\delta^*$ , jak i niepewności w tym oszacowaniu  $U^*$ , dla drugiego tylko oszacowanie niepewności  $U^*$ , natomiast trzeci zakwalifikowano jako wykazanie braku zbieżności.

Dla przypadku (i), przy założeniu, że kolejne siatki  $h_1$ ,  $h_2$ ,  $h_3$  były zagęszczane tak, że  $r = h_3/h_2 = h_2/h_1$  jest stałe, został określony estymator błędu, również na podstawie ekstrapolacji Richardsona, jako

$$\delta_{h1}^* = \mathcal{E}(u_{h1}) = (u_{h2} - u_{h1}) / (r^p - 1) \quad (1.23)$$

natomiast niepewność tego estymatora została określona, jako

$$U_{h1}^* = C\delta_{h1}^* = C(u_{h2} - u_{h1}) / (r^p - 1) \quad (1.24)$$

gdzie  $C$  jest współczynnikiem korygującym, zależnym od formalnego rzędu aproksymacji wykorzystanym do otrzymania rozwiązań na siatkach  $h_1$  oraz  $h_2$ . Wzór oraz wyprowadzenie współczynnika można znaleźć w pracy [25]

Dla przypadku (ii) nie można wyprowadzić estymatora błędu, a jedynie wartość niepewności w jego oszacowaniu, która została zdefiniowana jako:

$$U_{h1}^* = \frac{1}{2}(\bar{u} - \underline{u}) \quad (1.25)$$

gdzie  $\bar{u}$ ,  $\underline{u}$  oznaczają odpowiednio górne i dolne ograniczenie oscylujących rozwiązań  $u_{h1}$ ,  $u_{h2}$ ,  $u_{h3}$ .

Głównym ograniczeniem podejścia zaproponowanego przez Sterna i współautorów jest konieczność wykonania co najmniej trzech obliczeń, co nie zawsze jest możliwe, gdyż zagęszczanie

siatek powoduje wydłużenie czasu obliczeń oraz zwiększenie skali zadania dla zadań dwuwymiarowych czterokrotnie, a dla zadań trójwymiarowych ośmiokrotnie.

### Indeks zbieżności siatki GCI(ang. Grid Convergence Index)

W celu ujednoczenia sposobu estymacji błędów dyskretyzacyjnych, wykonywanych dla oszacowania błędów dla konkretnego obliczenia, Roache zaproponował metodę również opartą na ekstrapolacji Richardsona [23]. Zdefiniował on współczynnik, który wylicza się według zaproponowanej przez niego procedury i nazwał go indeksem zbieżności siatki.

U podstaw tej procedury legła chęć estymacji błędu poprzez porównanie estymatora  $\varepsilon$  wyliczonego na podstawie równania (1.17) dla rozwiązań uzyskanych na siatkach  $h_1$  i  $h_2$  z  $\varepsilon$ , który byłby uzyskany w przypadku gdy zagęszczenie siatki byłoby jednorodne ( $h_2 = 2h_1$ ) a rząd aproksymacji  $p = 2$ . Dzięki takiemu zabiegowi udało się wyeliminować konieczność rozwiązywania problemu na trzech siatkach. Definicja indeksu zbieżności siatki została więc przyjęta, jako:

$$GCI(u_{h_1}) = F_s \left( \left| \frac{u_{h_2} - u_{h_1}}{u_{h_1}} \right| / (r^p - 1) \right) \quad (1.26)$$

gdzie  $F_s$  jest tzw. współczynnikiem bezpieczeństwa i ma on funkcję normującą. Roache zaleca aby dla obliczenia wykonanego tylko przy użyciu dwóch siatek przyjmować  $F_s = 3$ , natomiast dla obliczenia wykonanego przy użyciu trzech lub więcej siatek  $F_s = 1.25$ . Wartość 3 normuje nam ten współczynnik w ten sposób, że dla obliczenia, dla którego  $p = 2$  i  $r = h_2/h_1 = 2$ , otrzymujemy wartość GCI równą wartości błędu bezwzględnego  $u_{h_1}$  względem  $u_{h_2}$  (1.17).

Definicja napotkała krytykę ze strony Sterna [25] dotyczącą tego, iż indeks ten nie wykrywa oscylacyjnych zbieżności oraz według Sterna jest zbyt konserwatywny tzn. przedział niepewność błędu wyliczony na podstawie GCI jest często zbyt duży. Stern podał kilka przykładów dla których wartość  $F_s = 1$ , byłaby wystarczająca. Roache odparł zarzut „nadmiernego konserwatyzmu” [26] w definicji indeksu przykładami, w których wskazał, że wartość współczynnika bezpieczeństwa równa trzy jest niezbędna, słusznie stwierdzając, że posiadając tylko dwa rozwiązania nie ma pewności czy ciąg tych rozwiązań znajduje się w zasięgu asymptotycznej zbieżności.

### Metody określania zbieżności procedur iteracyjnych

Dyskretyzacja równań różniczkowych cząstkowych zwykle prowadzi do wyznaczenia układu równań liniowych, które ze względu na swe rozmiary są rozwiązywane przy użyciu metod iteracyjnych, takich jak: metoda Jacobiego, Gaussa – Seidla, TDMA, GMRES, CGSTAB itp. Błędy powstałe w wyniku tych procedur należą do błędów dyskretyzacji, i według Roache identyfikuje się je przy pomocy metod weryfikacji (np. GCI). Ze względu na konieczność dostarczenia kryterium, które umożliwiłoby kontrolę błędu  $\delta_i$  podczas iteracyjnego rozwiązywania liniowego układu równań, Ferziger [42] określił kryterium dotyczące estymacji błędu zbieżności dla takich procedur estymując wartość największej wartości własnej rozwiązywanego układu. Kryterium podane przez Ferzigera może być używane do estymacji błędów procedur iteracyjnych.

Oddzielnym źródłem błędów, które nazywane są również błędami procedur iteracyjnych są błędy procedur które wykorzystuje się do linearyzacji równań nieliniowych. Przykładem mogą być nadrelaksacyjne metody iteracji kroków czasowych (w tzw. *pseudoczasie* - ang. false transient). Dla tych procedur błędy estymuje się analizując zmianę wartości residuów w bieżącej i poprzedniej iteracji. Wartość tych residuów, może być wykorzystana jako estymator błędów. Dla metod służących do rozwiązywania nieliniowych układów równań, które rozwiązywanie są w sposób iteracyjny, różnica pomiędzy wartościami wyliczonymi w kolejnych iteracjach może również zostać wykorzystana jako estymator błędu iteracyjnego.

## Inne metody estymacji błędów dyskretyzacji

Głównym mankamentem opisanych powyżej procedur weryfikacji modeli numerycznych jest konieczność przeprowadzenia obliczeń dla co najmniej dwóch siatek obliczeniowych. Dla uniknięcia tego problemu podjęto próbę zdefiniowania estymatorów, które informowałyby o błędach dyskretyzacji bez konieczności zagęszczania lub rozrzedzania siatki.

Do pierwszej klasy takich estymatorów można zaliczyć określanie błędu dyskretyzacji na podstawie dwóch rozwiązań na tej samej siatce lecz przy wykorzystaniu schematów dyskretyzacji przestrzennej różnego rzędu. Na przykład porównując rozwiązania otrzymane przy wykorzystaniu wzorów różnicowych czwartego rzędu i drugiego. Podwyższanie rzędu aproksymacji przestrzennej jest możliwe stosunkowo niskim kosztem wykorzystując tzw. metodę „deferred correction” [43], w której wyrazy wyższego rzędu wylicza się w sposób jawny, a wyrazy niższego rzędu w sposób niejawny. Porównując dwa rozwiązania można zdefiniować estymator błędu, na przykład w taki sposób jak zdefiniował to Roache [23].

Kolejną klasą estymatorów wykorzystująca tylko jedną siatkę jest rozwiązywanie pomocniczych równań różniczkowych, które konstruuje się tak aby informowały nas w jaki sposób propagowane są błędy (dyfuzja lub adwekcja błędów). Podejście to zostało zaproponowane przez Babuske i współpracowników [44,45] dla obliczeń wykonywanych metodą objętości skończonych i elementów skończonych.

Podobnym do powyższego podejścia jest metoda wykonywania obliczeń pomocniczych w celu sprawdzenia czy otrzymane rozwiązania, które mają swą interpretację fizyczną, spełniają zasady zachowania: masy, pędu i energii dla każdej komórki obliczeniowej. Rozszerzenie tego typu metod zostało zastosowane przez Changa i Hawortha [46] aby monitorować całkowitą energię kinetyczną dla komórek obliczeniowych w przepływach turbulentnych przy wykorzystaniu uśrednionych równań Naviera – Stoksa (ang. Reynolds-Averaged Navier-Stokes equations). Metoda ta jest często wykorzystywana, jednakże w świetle definicji weryfikacji, która nie powinna mieć nic wspólnego ze sprawdzeniem poprawności modelu, nie jest zalecana przez Roache.

Inna klasa estymatorów opartych na obliczeniach z wykorzystaniem pojedynczej siatki obliczeniowej została zaproponowana przez Zhu i Zienkiewicza [47,48] dla metody elementów skończonych i nosi nazwę pomysłodawców. Estymatory te, obszernie opisane i wykorzystywane przez Pelletiera [49,50], zostały wyprowadzone w celu dostarczenia kryterium w procesie adaptacji siatki obliczeniowej. Jednakże mogą one również być wykorzystywane do estymacji błędów dyskretyzacji metody elementów skończonych. Zaproponowana metoda oparta jest na fakcie, że słabe sformułowanie wykorzystywane w metodzie elementów skończonych przy pewnych warunkach równoważne jest minimalizacji funkcjonału energetycznego. Badanie wartości takiego funkcjonału oraz wartości ekstremalnych przy pomocy metod optymalizacji wykorzystywane jest w tego typu estymatorach.

### 1.2.3 Metody walidacji

Niniejszy podrozdział przedstawia literaturowe zestawienie metodologii walidacji symulacji numerycznych. Przedstawione zostały kryteria i wskazówki dotyczące procesu walidacji.

Podstawowym celem walidacji jest określenie poprawności rozwiązania otrzymanego przy użyciu symulacji numerycznej czyli będącego wynikiem rozwiązania równań przyjętego modelu w świetle badań eksperymentalnych. Walidacja określa czy model matematyczno-numeryczny został prawidłowo wybrany w celu symulacji określonego zjawiska lub procesu fizycznego. Toteż błąd pomiędzy rzeczywistą wartością  $u_{nature}$ , a otrzymaną w wyniku działania programu wartością  $u_{discret}$  może zostać podzielony następująco:

$$E = u_{nature} - u_{discrete} = (u_{nature} - u_{exp}) + (u_{exp} - u_{exact}) + (u_{exact} - u_{discrete}) \quad (1.27)$$

Pierwszy składnik odpowiada za błędy pomiarowe, które estymuje się podczas przeprowadzania eksperymentów, drugi składnik określa błędy pomiędzy przyjętym konceptualnym modelem a pomiarami eksperymentalnymi, natomiast trzeci składnik określa opisane w rozdziale 1.2.2 błędy

związane z rozwiązaniem numerycznym. Celem walidacji jest oszacowanie środkowego składnika sumy (1.27).

Oberkampff i Trucano [28] skupili się przede wszystkim na podaniu strategii jaka jest rekomendowana przy przeprowadzaniu walidacji symulacji numerycznej. Zalecają oni hierarchiczną strategię podziału procesu/zjawiska, które jest modelowane, podczas walidacji rzeczywistych procesów inżynierskich (*ang. building-block approach*). Dzięki takiemu podziałowi całego układu na podukłady, następnie na poziom wzorców i poziom problemów jednostkowych, skomplikowane zagadnienie inżynierskie jest rozbijane na szereg problemów, w których możliwe jest przeprowadzenie precyzyjnych pomiarów eksperymentalnych. Ponadto dla takich prostych układów można wykorzystać istniejące modele teoretyczne i skupić się na jednym lub dwóch zjawiskach, które da się precyzyjnie zbadać i opisać. Oberkampff stwierdza nawet więcej, że na poziomie systemu czy podsystemu, wzorce eksperymentalne są nie do przeprowadzenia ze względu na komplikację takich układów, wskazując jako jedyną drogę podział warstwowy z wyraźnym określeniem zjawisk jednostkowych, które w całości tworzą skomplikowany układ.

W celu przeprowadzenia eksperymentów, których wyniki służyłyby walidacji symulacji numerycznych problemów przepływowych Oberkampff i Trucano zdefiniowali sześć wskazówek, które są konieczne przy przeprowadzaniu takich eksperymentów. Podstawowym celem dla którego takie eksperymenty są przeprowadzane jest określenie dokładności modelu numerycznego i zasięgu jego stosowalności.

*Wskazówka 1: Eksperyment walidacyjny powinien być przygotowywany wspólnie przez eksperymentatorów, projektantów modelu, projektantów komputerowych, użytkowników oprogramowania od momentu powstania projektu do momentu jego dokumentacji z uwzględnieniem silnych i słabych stron każdej z w/w grup.*

*Wskazówka 2: Eksperyment walidacyjny powinien być tak przygotowany aby obejmował istotę zjawiska fizycznego, włączając wszystkie dane niezbędne do przeprowadzenia symulacji numerycznej (dane materiałowe, warunki brzegowe, warunki początkowe).*

*Wskazówka 3: Eksperyment walidacyjny powinien dążyć do podkreślenia wspólnego uzupełniania się (synergizmu<sup>4</sup>) pomiędzy symulacją numeryczną a badaniami doświadczalnymi*

*Wskazówka 4: Pomimo to, że koncept eksperymentu powinien zostać zaprojektowany wspólnie przez eksperymentatorów i osoby tworzące modele numeryczne, niezbędna niezależność musi być zachowana przy otrzymywaniu rezultatów eksperymentalnych, jak i numerycznych.*

*Wskazówka 5: Zachowana powinna zostać hierarchia przeprowadzania pomiarów, zaczynając od tych, które nie wymagają skomplikowanych obliczeń, do tych, które wymagają dodatkowych żmudnych wyliczeń i analizy danych.*

*Wskazówka 6: Projekt eksperymentu powinien być tak przygotowany aby można było dokonać analizy i estymacji zarówno błędów dokładności pomiarów (niepewności pomiarowej), jak i systematycznych błędów eksperymentalnych (*ang. bias errors*).*

Odmienne podejście do problemu walidacji zostało przedstawione przez Colemana i Sterna [25], którzy nie tylko zdefiniowali metrykę walidacyjną  $U_V$  (1.10), dzięki której można określić odległość pomiędzy wynikami symulacji numerycznej, a wynikami eksperymentalnymi, ale również zdefiniowali ostre kryterium (1.11), które pozwala uznać, że walidacja modelu przebiegła pozytywnie. Przedstawili oni sześć możliwych scenariuszy pomiędzy wartościami modułu błędu porównania  $|E|$  (1.8), a wartością metryki walidacyjnej  $U_V$  (1.10) oraz wymaganym poziomem niepewności  $U_{reqd}$ , definiowanym na etapie projektowania eksperymentu walidacyjnego i symulacji numerycznej. Dla pierwszych trzech przypadków obejmujących

$$|E| < U_V < U_{reqd} \text{ lub } |E| < U_{reqd} < U_V \text{ lub } U_{reqd} < |E| < U_V \quad (1.28)$$

błąd porównania jest poniżej poziomu szumu, więc oszacowanie błędów modelowych  $\delta_{SMA}$  nie jest możliwe na poziomie wymaganej niepewności. Jedynie dla pierwszego przypadku można ocenić czy walidację można zakwalifikować pozytywnie, i to tylko z punktu widzenia projektu modelu. W pozostałych przypadkach, czyli dla

<sup>4</sup> Synergizm rozumiany jest tutaj jako uzupełnianie się badań eksperymentalnych z modelowaniem numerycznym w celu osiągnięcia lepszego zrozumienia obydwu metod.



$$U_V < |E| < U_{reqd}, U_V < U_{reqd} < |E| \text{ lub } U_{reqd} < U_V < |E| \quad (1.29)$$

metryka walidacji  $U_V$  (czyli niepewność porównania) jest poniżej poziomu wartości błędu porównania  $E$ , więc błąd ten jest powyżej poziomu szumu, co oznacza, że jest możliwe oszacowanie błędów modelu  $\delta_{SMA}$  poniżej poziomu niepewności  $U_V$ .

Patrick Roache podobnie jak Oberkampf i Trucano nie definiuje konkretnych metod czy procedur, które są rekomendowane, a w zamian za to przedstawia kilkadziesiąt przypadków walidacji symulacji numerycznej i udziela cennych wskazówek, które mogą być przydatne zarówno przy badaniach eksperymentalnych, jak i przy porównywaniu tych wyników z rezultatami symulacji numerycznej. Uważa, że walidacja jest ściśle związana z dziedziną badań, których dotyczy, dlatego tylko ogólne spostrzeżenia są możliwe. Ze względu na to, iż walidacja wymaga przeprowadzenia badań doświadczalnych, należy być świadomym jakie metody eksperymentalne się wykorzystuje, znać ich ograniczenia i nie traktować rezultatów eksperymentalnych jako nieomylnych, co jest częstym błędem popełnianym przez osoby wykonujące obliczenia numeryczne, jak przyznaje Roache. Uważa, że pojedyncze pomiary eksperymentalne wykonane w celu walidacji symulacji numerycznej powinny być brane pod uwagę z dużą ostrożnością, ze względu na ograniczenia aparatury pomiarowej. Z tego względu zaleca, aby pomiary eksperymentalne przeprowadzać niezależnie kilka razy oraz najlepiej przeprowadzać je niezależnie w różnych miejscach z wykorzystaniem za każdym razem innego sprzętu, a jeśli to możliwe to pomiary powinny być przeprowadzane przez różne osoby. Autor przytacza kilka przykładów, w których nieprawidłowo wykonane pomiary eksperymentalne spowodowały negatywną walidację modelu, a po kilku latach okazało się, że model był poprawny, a błąd tkwił w nieodpowiednio przeprowadzonych eksperymentach (Aeschliman and Oberkampf [51]). Wymienia, że głównym powodem braku zgodności pomiędzy rezultatami obliczeń numerycznych a wynikami badań eksperymentalnych jest: nieodpowiednie odwzorowanie geometrii, procedury redukcji danych oraz pominięcie istotnego zjawiska fizycznego. Roache zgodził się z Marvinem [52], który uznał za niezbędną ocenę dokładności danych eksperymentalnych oraz określił, że zgodność z eksperymentem może być określona na poziomie nie większym niż oszacowana niepewność pomiarowa rezultatów doświadczalnych. Obaj autorzy zarekomendowali analizę niepewności jako dobrze ugruntowaną metodę oszacowania niepewności pomiarów eksperymentalnych (Moffat [53], Coleman i Steele [10]). Roache podzielił błędy, które należy oszacować w pomiarach eksperymentalnych na błędy dokładności (*ang. precision errors*) oraz błędy systematyczne (*ang. bias errors*). Uznali również, że dużo łatwiej zidentyfikować i oszacować błędy dokładności a niżeli błędy systematyczne. Roache zgodził się z Colemanem [23] odnośnie możliwych źródeł błędów systematycznych i wymienił wśród nich: procesy kalibracyjne, obróbkę danych eksperymentalnych, procedury redukcji danych oraz technikę testowania sprzętu jako potencjalne zagrożenia.

Kolejna wskazówka Roache na temat procedury walidacji dotyczy kolejności wykonywania pomiarów eksperymentalnych w stosunku do powstania modelu fizycznego. Według niego konceptualny model fizyczny dla celów obliczeń powinien zostać zdefiniowany przed przystąpieniem do pomiarów eksperymentalnych, ponieważ walidacją ma na celu określić jego poprawność. Podobnie jak Oberkampf, uznał, że walidację skomplikowanych procesów inżynierskich należy prowadzić poprzez kaskadowe rozbitcie na mniejsze podukłady, następnie podukłady na przypadki wzorcowe i jeśli zachodzi konieczność podzielić przypadki wzorcowe na problemy jednostkowe. Dzięki czemu otrzymujemy procesy, układy, a w szczególności przepływy mniej skomplikowane i prostsze do zamodelowania numerycznie jak i eksperymentalnie. Otrzymane problemy są bardziej ogólne, mają teoretyczny charakter, jednakże z drugiej strony możliwość bezpośredniego wykorzystania takich modeli z wszystkimi przyjętymi uproszczeniami jest mała, a co za tymi idzie wiarygodność obliczeń dla całego skomplikowanego procesu spada. Toteż często postuluje się, że analiza takich problemów jednostkowych nie jest wystarczająca do przeprowadzenia skutecznej walidacji, ale jest niezbędna.

Roache również zwrócił uwagę na częsty brak wystarczających danych dla własności materiałowych, które wpływają zarówno na wyniki eksperymentu, jak i wyniki modelowania numerycznego. Uczulił, aby zapewnić maksymalną zgodność warunków brzegowych i

początkowych pomiędzy pomiarami eksperymentalnymi, a założeniami przyjętymi w modelu numerycznym. Stwierdził, że nawet najprostsze typy warunków brzegowych są z trudem realizowane w warunkach laboratoryjnych.

Roache uważa, że głównym źródłem braku zgodności pomiędzy rezultatami badań doświadczalnych, a wynikami symulacji numerycznej jest brak świadomości przyjętych w symulacjach założeń. Określił, że należy rozważyć, czy przepływ jest lepki czy nielepki, ściśliwy czy nieściśliwy, płyn newtonowski czy nienewtonowski, należy umieć określić charakter przepływu (laminarny, przejściowy, turbulentny), zidentyfikować czy mają miejsce reakcje chemiczne, wyróżnić dodatkowe zjawiska, które mogą zachodzić oraz wiedzieć, jakie czony równań modelu odpowiedzialne są za przyjęte założenia.

Metodologia walidacji zaproponowana przez Oberkampfa i Trucano oraz rekomendowana przez Roache o rozbijaniu skomplikowanych układów na prostsze (ang. building-block technique), dla których można uzyskać wiarygodne dane eksperymentalne zapoczątkowała powstawanie baz danych, które zawierają dokładny opis przeprowadzonych eksperymentów wraz z uzyskanymi rezultatami. Przykładami takich baz są dostępne w sieci bazy stworzone przez ERCOFTAC [54], NAS Data Set Archive [55], QNET-CFD [56], ASME [57], NPARC Alliance Validation Archive[9]. Próbę stworzenia takiej bazy dla procesów odlewniczych podjęto również niedawno w IPPT PAN [123]. Podobnym sposobem walidacji jest uczestnictwo lub skorzystanie z wyników konferencji, spotkań na temat walidacji konkretnych typów przepływów. Przykładami takich spotkań są WUA Benchmark 1994 [58], WUA Benchmark 1996 [59], Stanford Turbulance Olympics [6], AGARD 1998 (NATO Advisory Group for Aeronautical Research and Development)[5], EURO THERM Seminars [8]

### 1.3. Przegląd literatury

Ze względu na to, iż w poprzednich rozdziałach została przedstawiona literatura dotycząca terminologii i metodologii weryfikacji i walidacji w poniższym przeglądzie ograniczę się do przeglądu prac opisujących rozwiązania numeryczne, w tym rozwiązań wzorcowych oraz wyników eksperymentalnych, a także rozważań teoretycznych przepływów lepkich i termicznych, których dotyczy niniejsza praca. Klasa ta obejmuje przepływ konwekcyjne, a w głównej mierze skupię się na przeglądzie literatury dotyczącej przepływów w obszarach ograniczonych (różnicowo grzany sześciąt), wywołanych gradientem temperatury pomiędzy przeciwległymi izotermicznymi ściankami.

Najbardziej znanym, a zarazem najczęściej używanym wzorcem numerycznym do weryfikacji poprawności symulacji numerycznych obejmujących przepływy z konwekcją naturalną jest wzorec zdefiniowany przez Grahama de Vahl Davisa prawie 20 lat temu [15]. Podał on wzorcowe rozwiązanie numeryczne, dotyczące płaskiego przepływu w różnicowo grzanym kanale. Przepływ wywołany jest gradientem temperatur pomiędzy dwoma przeciwległymi pionowymi krawędziami izotermicznymi, podczas gdy pozostałe dwie poziome krawędzie zostały przyjęte jako adiabatyczne. Rozwiązanie wzorcowe obejmuje cztery rozwiązania stanów stacjonarnych dla liczb Rayleigha od  $10^3$  do  $10^6$ , oraz stałej liczby Prandtla równej 0.71. Wartość liczby Prandtla odpowiada przypadkowi fizycznemu w którym powietrze wykorzystane byłoby jako medium. Do rozwiązania równań Naviera – Stokesa w sformułowaniu transportu wirowości wraz z równaniem przewodnictwa cieplnego, opisujących przepływ w powyżej opisanej geometrii wykorzystany został schemat różnic centralnych drugiego rzędu do aproksymacji wszystkich pochodnych. W celu otrzymania dokładnych rozwiązań zastosowane równomierne zagęszczanie siatek kartezyjskich. Rozwiązania zostały otrzymane dla siatek 11x11, 21x21, 41x41 oraz 81x81. Jako rozwiązania wzorcowe zostały podane wartości liczby Nusselta, których stabilność wzdłuż prostych łączących przeciwległe krawędzie adiabatyczne była analizowana, wraz z maksymalną wartością funkcji prądu, maksymalnymi wartościami prędkości pionowej i poziomej wraz z położeniami tych wartości. Wzorcowe wartości zostały otrzymane na podstawie ekstrapolacji Richardsona, analizując wyniki dla najgęstszych siatek. Błąd numeryczny w tych wartościach został oszacowany jako 0.1 %, 0.2 %, 0.3 % oraz 1 % odpowiednio dla liczb  $Ra = 10^3, 10^4, 10^5$  oraz  $10^6$ .

Rozwiązanie otrzymane przez de Vahl Davisa zostało potwierdzone przez Hortmanna, Perica i Scheuerera [40], którzy dostarczyli rozwiązania wzorcowego z oszacowaniem błędu numerycznego mniejszym niż 0.01 %. Rozwiązali oni problem opisany powyżej wykorzystując metodę objętości skończonych wraz z zastosowaniem metody wielosiatkowej (ang. multigrid method). Zadanie zostało rozwiązane przy użyciu niejednorodnych siatek o rozmiarach 10x10, 20x20, 40x40, 80x80, 160x160, 320x320 oraz 640x640. Siatki konstruowano przez ich stopniowe zagęszczenie w kierunku krawędzi bocznych. Rozwiązania na rzadszych siatkach były wykorzystywane do otrzymania rozwiązań na gęstszych siatkach, wykorzystując metodę wielosiatkową, dzięki czemu czas obliczeń wydłużył się jedynie o 1%. Porównanie metody wielosiatkowej ze zwykłym jednorodnym zagęszczaniem siatki wykazało, że czas obliczeń przy pomocy metody wielosiatkowej rośnie liniowo wraz z zagęszczaniem, co jest dużo wydajniejsze niż kwadratowy przyrost czasu obliczeń otrzymany dla standardowej metody zagęszczania. Wykorzystano schematy różnic centralnych do aproksymacji członów konwekcyjnych, jak i dyfuzyjnych w wyniku czego cała metoda cechowała się kwadratowym rzędem zbieżności. Jako rozwiązania wzorcowe podano, podobnie jak zrobił to de Vahl Davis, wartości liczby Nusselta, oraz wartości prędkości i temperatury w pojedynczych punktach obszaru obliczeniowego.

Uzupełnienie rozwiązania zdefiniowanego przez Grahama de Vahl Davisa o rozwiązania stacjonarne dla wyższych liczb Rayleigha równych  $10^7$  oraz  $10^8$  podał Patric Le Quere [16]. Zastosował on do tego celu pseudo – spektralną metodę, wykorzystując do aproksymacji wielomiany Czebyszewa. W celu otrzymania dokładnych rozwiązań zostały wykorzystane przestrzenie aproksymacyjne złożone z wielomianów do 128 stopnia. W celu określenia zbieżności analizowano nie tylko liczbę Nusselta ale również zachowawczość masy i pędu. Ponadto wykonano obliczenia pomocnicze polegające na obliczeniu funkcji prądu i wirowości, w celu analizy jakościowej struktury przepływu wraz ze wzrostem liczby Rayleigha. Rozwiązania wzorcowe obejmowały wartości liczby Nusselta, wartości ekstremalne funkcji prądu, prędkości poziomej i pionowej. Otrzymane wyniki zostały porównane z dostępnymi rezultatami dla liczb  $Ra = 10^6 - 10^7$ , otrzymanymi przez Upsona i Greso [60], Quona [61], Wintersa [62], Lauriata i Altimira [63], Chenowetha i Paolucciego [64] oraz Haldenwanga i Labrossa [65].

Powyższe prace są w większości cytowane jako rozwiązania referencyjne i przy pomocy tych rozwiązań weryfikuje się obliczenia dotyczące konwekcji naturalnej. Jednakże dokładna ilościowa walidacja opisanej powyżej konfiguracji (porównanie z wynikami doświadczalnymi) nie jest możliwa, ze względu na liczbę  $Pr = 0.71$ , co pociągało by za sobą wykorzystanie powietrza jak medium w badaniach eksperymentalnych. Toteż w celu wykonania porównań symulacja numeryczna versus eksperyment wybrano podobną konfigurację, jeśli chodzi o geometrię i warunki brzegowe z tą różnicą, że wykorzystano wodę jako substancją roboczą. Wyniki numeryczne i eksperymentalne dotyczące takiej konfiguracji zostały zaproponowane w pracy Kowalewskiego i Rebowa [125] oraz Banaszka i współautorów [66], jako test weryfikacyjny i walidacyjny do problemów modelowania krzepnięcia wody w sześcienniej geometrii. Użycie cieczy jako medium jest korzystniejsze ze względu na możliwość dokładniejszego kontrolowania warunków eksperymentalnych, w tym termicznych warunków brzegowych. Szczególnie trudne jest zapewnienie w konfiguracjach eksperymentalnych warunku adiabatyczności ścianek. Ilościowe dane eksperymentalne wskazujące na istotność poprawnego określenie termicznych warunków brzegowych zostały do powyższej konfiguracji ( $Ra = 10^4 - 10^6$ ,  $Pr = 13.31$ ) zaprezentowane w pracach Kowalewskiego [67,68,126] oraz Hillera [69]. W pomiarach wykorzystano nowatorskie jak na owe czasy cyfrowe techniki wizualizacyjne, takie jak cyfrowa anemometria obrazowa (PIV) oraz cyfrowa termometria obrazowa (PIT). Konwekcja wody w pobliżu punktu zamarzania stwarza dodatkową interesującą modyfikację struktury przepływu. Ze względu na nieliniową zmianę gęstości wody w przedziale (tj.  $0^{\circ}C - 10^{\circ}C$ ) wybrana do analizy konfiguracja eksperymentalna charakteryzuje się układem dwóch wirów przeciwnie skierowanych, tworzących kolidujące ze sobą strumienie ciepłej i zimnej cieczy. Stanowi to ciekawy wzorzec eksperymentalny, który musi być modelowany z zachowaniem szczególnej dokładności aby otrzymać zadawalające rezultaty. W pracy Kowalewskiego i Giangli [70,71], zbadano wrażliwość tego modelu na zmiany własności

materiałowych, poprzez porównanie rozwiązań dla stałych wartości materiałowych z rozwiązaniami w których własności materiałowe są funkcjami temperatury. W wyniku obliczeń numerycznych stwierdzono dużą wrażliwość na zmiany w lepkości, i mniejszą na zmiany ciepła właściwego i przewodności cieplnej. Opisana powyżej konfiguracja badana była przez Kowalewskiego i Rebova [68] w celu określenia wpływu przewodzenia ciepła przez ścianki boczne, modelowane jako adiabatyczne. Porównano rozwiązanie generowane dla adiabatycznych ścianek z takim, które uwzględnia przewodzenie ciepła w tych ściankach stwierdzając, że struktura przepływu w pobliżu lewej ścianki ulega istotnej zmianie w zależności od przyjętego warunku brzegowego. Numeryczne rozwiązania przepływu wody w różnicowo grzonym sześciacie zostało też przedstawione przez Zubkova i Kalbina [72] dla liczb Grashofa od  $2.9 \times 10^4$  do  $10^6$ , na tej podstawie zidentyfikowano jeden stan stacjonarny i trzy samo-oscylujące. Nieliniową anomalia gęstości została zamodelowana tam poprzez zastosowanie formuły Gebharta-Moldendorfa [73], jednakże obliczenia nie zostały porównane z wynikami eksperymentalnymi.

Określenie reżimu stacjonarności przepływu w różnicowo grzonym sześciacie było przedmiotem badań Paolucciego i Chenowetha [64] oraz Le Quere i Behnii [17]. Określili oni zerwanie stacjonarności dla krytycznej liczby  $Ra \approx 2 \times 10^8$ . Badanie te oparte były na symulacji numerycznej metodą DNS (Direct Numerical Simulation), przeprowadzonej z wykorzystaniem wielomianów Czebyszewa do aproksymacji przestrzennej (wykorzystano tę samą aproksymację co do podania rozwiązania wzorcowego [16] opisanego powyżej). Badano zachowanie się współczynników w aproksymacji Czebyszewa, przy jednoczesnym zwiększaniu liczby Rayleigha i jako kryterium zmiany charakteru przepływu, przejścia od stanu stacjonarnego do stanu niestacjonarnego, przyjęto złamanie symetrii przepływu. Wyznaczone zostały pola fluktuacji temperatur oraz ich charakterystyczny charakter falowy. Analogiczne symulacje numeryczne z wodą jako medium robocze zostały później przedstawione przez Le Quere [74] w podłużnych geometriach prostokątnych. ( $Ra = 10^7-10^8$ ,  $Pr = 7$ ,  $A = 1,4,10$ ). Analiza struktury przepływu, w szczególności fluktuacji termicznych i prędkości powiązały początek niestabilności z pojawieniem się niestabilności termicznej warstwy przyściennej. W pracy tej przeanalizowano wpływ przepływu niestacjonarnego na współczynnik przejmowania ciepła oraz zauważono rozbieżność pomiędzy rezultatami uzyskanymi w tych obliczeniach, a klasyczną analizą stabilności dla warstw przyściennych. Badania te oparte były jedynie na wynikach symulacji numerycznej dla dwuwymiarowego przypadku, wykonanie pomiarów eksperymentalnych w podobnych geometriach i porównanie rezultatów mogłoby pozwolić na walidację tych obliczeń.

Pierwsza teoretyczna praca na temat konwekcji naturalnej w zamkniętych geometriach (kwadrat, prostokąt) została opublikowana przez Pattersona i Imberga [75]. Przy pomocy analizy wymiarowej wyróżniono sześć różnych reżimów przepływu w zależności od wartości liczb bezwymiarowych  $Ra$ ,  $Pr$  i stosunku boków obszaru (*ang. aspect ratio*). Analiza wymiarowa dla tego przypadku została podana przez Bejana [76], który na jej podstawie wyprowadził wzory na grubość termicznej warstwy przyściennej, maksymalną wartość prędkości poziomej przy aktywnej (cieplej lub zimnej) ścianie, grubość przyściennej warstwy kinematycznej wzdłuż ścianki, charakterystycznego czasu osiągnięcia stanu stacjonarnego oraz oszacowania liczby Nusselta w zależności od liczb  $Ra$  i  $Pr$ . Potwierdzenie wyników otrzymanych przy pomocy analizy wymiarowej zostało wykonane poprzez Schladow, Pattersona, i Streeta [77], poprzez dostarczenie rezultatów obliczeń numerycznych, a później również przez porównanie tych wyników z pomiarami eksperymentalnymi wykonanymi przez Pattersona i Armfielda [78] dla różnicowego grzanego sześcianu wypełnionego wodą ( $Ra = 2 \times 10^9$ ). Jednakże uzyskane wyniki eksperymentalne i numeryczne mogły być tylko porównane jakościowo, ze względu na ograniczenia zastosowanej techniki eksperymentalnej oraz niewielką liczbę danych ilościowych (punktowe pomiary temperatury). Kilka wspólnych dla symulacji numerycznej cech przepływu zostało jednak zidentyfikowanych: obecność niestabilności falowych, obecność oscylacji w termicznej warstwie przyściennej, obecność struktur wirowych w rogach sześcianu oraz oscylacyjne dochodzenie do stanu stacjonarnego. Początkowa faza tworzenia się warstwy przyściennej, której towarzyszy powstawanie fal została zanalizowana przez Armfielda i Pattersona [79] metodą bezpośredniej

symulacji numerycznej (DNS) oraz analizy stabilności. Badana przez nich konfiguracja dotyczyła liczb  $Ra = 6 \times 10^8$  i  $Pr = 7.5$ ,  $Ra = 5.4 \times 10^8$  i  $Pr = 13$  oraz  $Ra = 6.2 \times 10^8$  i  $Pr = 18$ . Stwierdzili oni, że początkowa faza przepływu może być opisana na podstawie analizy wymiarowej, ponieważ wartości określające grubość termicznej warstwy przyściennej są zgodne z modelem asymptotycznym, jednakże wraz z upływem czasu wpływ ścianek adiabatycznych jest zauważalny i uzyskane rezultaty zaczynają się różnić. Analiza stabilności potwierdziła możliwość istnienia fal biegnących o prędkości większej niż średnia prędkość w przepływie. Proces początkowego rozwoju konwekcji naturalnej został przestudiowany również eksperymentalnie dla powyższych konfiguracji, przy pomocy badań eksperymentalnych, przez wykorzystanie do wizualizacji metody cieniowej (ang. shadowgraph technique). Otrzymane serie zdjęć pozwalają zidentyfikować dwie grupy fal biegnących. Pierwsza grupa została powiązana z powstaniem gradientu temperatur, a druga na skutek oddziaływania pierwszej ze ścianką. Eksperymenty te przeprowadzone były w celu zbadania właściwości termicznej warstwy przyściennej, jednakże poza grubością tej warstwy, żadne inne wyniki ilościowe nie zostały podane. W kolejnej pracy Schopf i Paterson [80] przy użyciu tej samej techniki, opisali stopniowe zanikanie fal biegnących na skutek stratyfikacji temperatury, prowadzące do osiągnięcia stanu stacjonarnego. Opisano dokładnie proces rozpraszania się fal, który trwał dłużej w porównaniu z procesem powstawania niestabilności, jednakże również nie podano żadnych danych ilościowych. Głównym celem opisanych powyżej prac eksperymentalnych nie była jednak walidacja symulacji numerycznej a jedynie chęć zidentyfikowania i jakościowego opisu zjawisk. Były to więc eksperymenty poznawcze, a nie walidacyjne. Z uwagi na ograniczone możliwości eksperymentalne w latach osiemdziesiątych i dziewięćdziesiątych, brak pełnych danych ilościowych nie może dziwić.

Dopiero na początku lat 90tych wspomniane już wyżej prace Kowalewskiego [67,68,70] dostarczyły pełnych ilościowych danych dotyczących pola prędkości i temperatury. Jednakże zostały one otrzymane dla dosyć niskich liczb  $Ra = 10^4 - 10^6$ . Wykorzystano w nich metodę cyfrowej analizy obrazów, zaproponowaną przez Hillera i Kowalewskiego [81], technikę jednoczesnego pomiaru prędkości i temperatury, udoskonaloną później technikami cyfrowymi DPIV&T [69], oraz techniką potoków optycznych do analizy przemieszczeń [82,83]. Zastosowanie tych technik pozwoliło na pomiar pełnych dwuwymiarowych pól prędkości i temperatury, wykorzystanych do porównań z symulacjami numerycznymi konwekcji naturalnej, towarzyszącej jej zjawisku krzepnięcia [68,70], oraz przepływu ze swobodną powierzchnią [84,85].

#### 1.4. Zakres i cel pracy

Biorąc pod uwagę przedstawioną motywację oraz przegląd literatury na temat weryfikacji i walidacji symulacji numerycznych można śmiało stwierdzić, iż temat ten jest w ostatnich latach intensywnie badany poprzez różne zespoły naukowców. Weryfikacja i walidacja jako procesy uwiarygodniania obliczeń numerycznych są na drodze do ustalenia standardów, podobnie jak to miało miejsce w przypadku eksperymentalnej mechaniki płynów. Można stwierdzić, że istnieje duże zapotrzebowanie na wiarygodne, dokładne dane eksperymentalne obejmujące różne klasy przepływów oraz widoczny jest brak metodologii, która pozwalałaby jednoznacznie i szybko uwiarygodniać (walidować) obliczenia numeryczne.

W celu przedstawienia zaproponowanej metody oceny wiarygodności symulacji numerycznych oraz zademonstrowania przykładowego procesu weryfikacji i walidacji dla przepływów lepkich i termicznych przy pomocy tej metody, zdecydowano się na:

1. Stworzenie programu numerycznego do modelowania przepływów lepkich i termicznych, poddania go weryfikacji (uwzględniając metody opisane w rozdziale 1.2.2). W tym celu wykorzystana zostanie zarówno klasyczna metoda różnic skończonych, jak i nowatorska metoda bezsiatkowa (Rozdział 2)
2. Zdefiniowanie wzorca numerycznego dla przedmiotowej klasy przepływów obejmującego konwekcję naturalną wody w różnicowo grzanym kanale oraz dostarczenie referencyjnego rozwiązania. Porównanie różnych metod i algorytmów numerycznych. (Rozdział 2)

3. Zaproponowanie metody uwiarygodniania przepływów lepkich i termicznych, opartej na analizie wrażliwości, do określenia najodpowiedniejszej konfiguracji w celu przeprowadzenia walidacji eksperymentalnej symulacji numerycznej, określenia istotnych parametrów dla konkretnej konfiguracji eksperymentalnej oraz dokładności pomiarów z jaką należy je przeprowadzić. (Rozdział 3)
4. Przeprowadzenie eksperymentu oraz zdefiniowanie wzorca eksperymentalnego dla przepływów lepkich i termicznych. Dostarczenie jakościowych i ilościowych danych do przeprowadzenia walidacji, w oparciu o cyfrowe techniki analizy obrazów (PIV, PIT). Dostarczenie danych eksperymentalnych charakteryzujące przejście od stanu stacjonarnego do niestacjonarnego, będących uzupełnieniem literaturowych badań numerycznych [17]. (Rozdział 4)
5. Walidację obliczeń numerycznych z wykorzystaniem kilku konfiguracji eksperymentalnych, zaprezentowanie skuteczności metody oceny wiarygodności symulacji numerycznej do identyfikacji istotnych parametrów dla przepływu oraz określenie tych parametrów symulacji numerycznych przy których układy te charakteryzują się większą wiarygodnością. (Rozdział 5)