

# **LABORATORYJNE WZORCE DO WALIDACJI PROGRAMÓW ODLEWNICZYCH**

Tomasz A. Kowalewski, Andrzej Cybulski, Tomasz Michałek, Maciej Kowalczyk



**Instytut Podstawowych Problemów Techniki Polskiej Akademii Nauk**  
Warszawa, 2005

# Spis treści

<b>Streszczenie</b> .....	iii
<b>Abstract</b> .....	v
<b>Lista ważniejszych oznaczeń</b> .....	vi
<b>1. Wstęp</b> .....	1
<b>1.1. Motywacja</b> .....	1
<b>1.2. Wybór konfiguracji</b> .....	2
<b>2. Metody eksperymentalne</b> .....	4
<b>2.1. Opis metod pomiarowych</b> .....	4
2.1.1. Pomiar pól prędkości .....	4
2.1.2. Pomiar pól temperatury .....	5
2.1.3. Wizualizacja struktur przepływu .....	6
<b>2.2. Układy pomiarowe i systemy akwizycji danych</b> .....	6
2.2.1. Rejestracja obrazów .....	7
2.2.2. Punktowa rejestracja temperatury .....	9
<b>2.3. Wybrane geometrie naczyń</b> .....	9
2.3.1. Sześcian grzany różnicowo (SRG) .....	10
2.3.2. Sześcian z izotermiczną górną ścianką (SIG) .....	10
2.3.3. Pochylony prostopadłościan (PBP i PZP) .....	12
2.3.4. Sześcian otwarty (SP) .....	14
<b>2.4. Ciecze modelowe i materiały stosowane w badaniach</b> .....	15
<b>3. Numeryczne modelowanie procesów krzepnięcia</b> .....	18
<b>3.1. Postawienie problemu dla celów numerycznej mechaniki płynów</b> .....	19
3.1.1. Modelowanie procesu krzepnięcia .....	20
3.1.2. Modelowanie przepływów ze swobodną powierzchnią .....	22
<b>3.2. Modele fizyczne i metody wykonywania symulacji procesów odlewniczych</b> .....	23
<b>3.3. Metody dyskretyzacji</b> .....	24
<b>4. Charakterystyka programów symulacyjnych</b> .....	26
<b>4.1. Programy komercyjne dla odlewnictwa</b> .....	26
4.1.1. Modele fizyczne i metody wykonywania symulacji .....	26
4.1.2. Odwzorowanie geometrii układu odlew-forma .....	27
4.1.3. Cechy użytkowe programów komercyjnych dla odlewnictwa .....	29
<b>4.2. Uniwersalne programy komercyjne i akademickie</b> .....	31
<b>5. Przebieg eksperymentów</b> .....	34
<b>5.1. Sześcian grzany różnicowo (SRG)</b> .....	34
<b>5.2. Sześcian z izotermiczną ścianką górną (SIG)</b> .....	35

<b>5.3. Pochylony prostopadłościan (PBP i PZP)</b> .....	42
5.3.1. Proces wypełniania bez krzepnięcia .....	43
5.3.2. Proces wypełniania z krzepnięciem .....	45
<b>5.4. Sześcian z górną powierzchnią swobodną (SP)</b> .....	51
5.4.1. Wypełnianie i proces krzepnięcia wody .....	51
5.4.2. Proces wypełniania turbulentnego bez krzepnięcia .....	52
5.4.3. Proces wypełniania laminarnego z krzepnięciem .....	54
<b>5.5. Wybór wzorców eksperymentalnych</b> .....	55
<b>6. Weryfikacja i walidacja obliczeń numerycznych</b> .....	60
<b>6.1. Definicja wzorca numerycznego</b> .....	60
<b>6.2. Weryfikacja programów</b> .....	60
6.2.1. FRECON3V (metoda różnic skończonych) .....	61
6.2.2. FLUENT (metoda objętości skończonych) .....	62
6.2.3. FIDAP (metoda elementów skończonych) .....	62
6.2.4. SOLVSTR (metoda różnic skończonych) .....	62
6.2.5. SOLVMEF (metoda bezsiatkowa, aproksymacja DAM) .....	63
6.2.6. Analiza średnich błędów rozwiązań numerycznych .....	63
<b>6.3. Walidacja – porównanie wyników numerycznych z eksperymentem</b> .....	65
6.3.1. Modelowanie krzepnięcia .....	66
(1) Sześcian grzany różnicowo, wypełniony wodą .....	66
(2) Sześcian z izotermiczną ścianką górną (SIG), wypełniony PEG-900 .....	68
(3) Sześcian z izotermiczną ścianką górną, wypełniony wodą .....	73
(4) Sześcian z izotermiczną ścianką górną, symulacja programami odlewniczymi krzepnięcia PEG-900 .....	75
(5) Sześcian z górną powierzchnią swobodną (SP), symulacja programem NOVAFLOW krzepnięcia wody i aluminium .....	78
6.3.2. Modelowanie wypełniania .....	80
(6) Prostopadłościan z przegrodami wypełniany wodą i gliceryną .....	80
(7) Prostopadłościan bez przegród – proces krzepnięcia wody .....	85
<b>7. Wnioski końcowe</b> .....	90
<b>8. Literatura</b> .....	92
<b>Dodatek A Uzupełnienie opisu eksperymentalnej części badań</b> .....	96
<b>Dodatek B Uzupełnienie opisu numerycznej części badań</b> .....	104

## Streszczenie

Prezentowane w niniejszej pracy badania wiążą się ściśle z dziedziną transportu ciepła w procesach metalurgicznych. Procesy te charakteryzują się silnie nieliniowym sprzężeniem zjawisk przepływowych ze zjawiskami przemiany fazowej, na ogół w złożonych geometriach i w obecności swobodnej powierzchni. Przedmiotem modelowania numerycznego w odlewnictwie są podstawowe procesy służące do nadania kształtu i własności odlew, tj. zalewanie formy, krzepnięcie (kształtowanie struktury materiału) oraz stygnięcie (związane z powstawaniem naprężeń i skurczy odlewniczych). Ze względu na złożoność problemu, modelowanie numeryczne zjawisk fizycznych zachodzących w tych procesach wiąże się przyjęciem wielu założeń upraszczających, często znacznie modyfikujących podstawowe parametry badanego problemu. Silna nieliniowość zjawisk powoduje, że oszacowanie błędów spowodowanych nieuniknionymi uproszczeniami w modelach numerycznych jest trudne lub niemożliwe. Istotnym kryterium przydatności danego modelu numerycznego staje się więc jego weryfikacja eksperymentalna. Weryfikacja jest też potrzebna przy empirycznym dopasowaniu parametrów wymaganych w obliczeniach modelowych, tzn. wyznaczeniu charakterystyk materiałowych, czy termicznych warunków brzegowych w taki sposób, by zapewniały maksymalną zgodność wyników numerycznych z obserwacjami na stanowisku eksperymentalnym lub w odlewni.

Z drugiej strony, badania prowadzone w warunkach laboratoryjnych stanowią część procesu tworzenia modeli symulacyjnych. Wobec olbrzymiej liczby czynników wpływających na jakość odlewów istnieje konieczność wyodrębnienia najistotniejszych cech procesu fizycznego i opracowania metody kontroli prawidłowości ich odtworzenia w rozwiązaniu numerycznym. Taka procedura związana jest z koniecznością doskonalenia zarówno modeli symulacyjnych jak i technik zbierania danych empirycznych.

Weryfikacja rezultatów symulacji numerycznych w warunkach przemysłowych jest bardzo trudna i często możliwa jedynie dla globalnych parametrów. W związku z tym w ramach tej pracy zaproponowano i stworzono cztery grupy laboratoryjnych modeli eksperymentalnych o dobrze zdefiniowanych parametrach przepływowych. Uproszczona geometria i odpowiedni dobór zastosowanych materiałów umożliwiły precyzyjny pomiar pól prędkości, temperatur, struktury przepływu i geometrii frontów fazowych. W tak zdefiniowanych modelach starano się by mimo koniecznych uproszczeń zachować większość cech charakteryzujących zjawiska fizyczne towarzyszące procesom typowym dla odlewnictwa.

Zdefiniowane tą drogą eksperymentalne wzorce (*benchmarks*) procesów odlewniczych wykorzystano do analizy wiarygodności symulacji numerycznych przeprowadzonych przy wykorzystaniu dostępnych komercyjnych kodów numerycznych (FLUENT, FIDAP, VULCAN, PROCAST), kodów uniwersyteckich (FRECON, ICE3D), a także dla rozwoju własnego oprogramowania (SOLVSTR, MESHFREE).

Rezultaty badań eksperymentalnych, stworzone wzorce i przeprowadzona analiza wiarygodności wybranych kodów numerycznych wykazały istnienie szeregu niedoskonałości w istniejących i powszechnie stosowanych narzędziach inżynierskich, używanych do modelowania procesów krzepnięcia. Konieczne dla przyspieszenia obliczeń uproszczenia modeli wiążą się z ryzykiem generacji rezultatów znacznie odbiegających od przebiegu zjawiska fizycznego. Przeprowadzone badania wskazały na przydatność kontrolnych badań eksperymentalnych, pozwalających oszacować wpływ uproszczeń wprowadzanych w modelach numerycznych.

W pierwszej części niniejszej pracy przedstawiono opis stanowiska pomiarowego oraz metodykę i zakres przeprowadzonych badań laboratoryjnych, zilustrowanych przykładami uzyskanych wyników. Główny rezultat badań, szczegółowe tabele wartości zmierzonych parametrów przepływu (pola prędkości, temperatury, położenia frontu fazowego) zebrano w załączniku. Dane te stanowią w zamierzeniu autorów pracy podstawę do weryfikacji kodów

numerycznych stosowanych zarówno w ośrodkach akademickich jak i w przemyśle do modelowania przepływów z przemianą fazową.

Kolejny rozdział pracy poświęcono opisowi podstaw teoretycznych typowych modeli numerycznych i dyskusji problemów związanych z weryfikacją tych modeli. Biorąc pod uwagę trudny do oszacowania wpływ niedokładności niektórych schematów numerycznych, zaproponowano nowy wzorzec (*benchmark*) numeryczny dla weryfikacji symulacji problemów konwekcji naturalnej. Wykorzystanie takiego wzorca umożliwia weryfikację zastosowanej metodyki symulacji numerycznej już na etapie budowania schematu i ułatwia optymalizację dyskretyzacji geometrii. Na tym etapie pracy przeprowadzono również test nowej w numerycznej mechanice płynów techniki numerycznej, rokującego duże nadzieje dla modelowania procesów przemysłowych, tzw. metody dyskretyzacji bezsiatkowej. Rezultaty przeprowadzonych testów porównawczych kilku używanych w pracy kodów numerycznych wskazały na przewagę metody objętości skończonych w zakresie dokładności obliczeń a metody elementów skończonych w zakresie czasu obliczeń. Metoda bezsiatkowa w obecnej realizacji numerycznej charakteryzuje się małą dokładnością rozwiązań i bardzo długimi czasami obliczeń. Wskazuje to na konieczność dalszych prac nad udoskonaleniem tego nowego w numerycznej mechanice płynów podejścia.

Pełne zestawienie zbiorczych kart pomiarowych, tabel uzyskanych wyników z pomiarów laboratoryjnych oraz wyników obliczeń numerycznych stanowi odrębne opracowanie. W dodatku A, zamieszczonym na końcu niniejszej pracy, wskazane zostały podstawowe wyniki z proponowanych wzorców eksperymentalnych. Szczegółowe wyniki eksperymentów oraz porównań z obliczeniami numerycznymi są dostępne do wykorzystania przez inne ośrodki na stronach WWW (<http://fluid.ippt.gov.pl/benchmark>).

# Laboratory benchmarks for validating numerical simulation of casting problems

## Abstract

Numerical modelling of casting problems implies introduction of several assumptions and simplifications. However, strong non-linearity of the governing equations combined with a moving boundary make *a priori* prediction of consequences of inaccuracy or simplifications used in the numerical models almost impossible. This obviously appeals laboratory experiments to verify and validate numerical methodology used. Unfortunately most industrial problems involve configurations and substances which are very difficult to investigate experimentally. Therefore three experimental benchmarks has been constructed, based on so called *analog* fluids which are transparent and have well known physical properties: succinonitrile, poliethylen glycol, water and glycerine. The mould filling and freezing was investigated in small rectangular containers: inclined channel with forced flow, freezing at two isothermal, parallel walls; freezing from the top surface in a cubic cavity immersed in hot environment; volumetric freezing in a cube filled with fluid. Optical methods: Particle Image Velocimetry and Thermometry were applied for the flow analysis. Computer supported experimentation combined with digital data recording and processing allowed for the acquisition of a large amount of details on temporary temperature and velocity fields, as well as on phase front position. This data are available on the website and in several publications to be used as experimental benchmarks which allow the validation of numerical models used in solidification problems. The data obtained were used to test reliability of typical casting codes (Vulcan, Procast), two general purpose CFD codes Fluent and Fidap, and available university codes. Investigations indicated large sensitivity of the simulation results on thermal boundary conditions. Severe discrepancies were observed for data obtained with the casting codes. The performance and accuracy of typical approximation schemes finite differences, finite volume and finite element method, were compared with a new mesh-free numerical approach, for a flow configuration typical for solidification problems. The finite volume method appeared favourable in accuracy whereas finite element in performance (speed). Performance and accuracy of the mesh-free approach was unsatisfactory. It indicates necessity for further development of its fundamental algorithms.

## Lista ważniejszych oznaczeń:

$\alpha$	(W m <sup>-2</sup> K <sup>-1</sup> )	współczynnik przejmowania ciepła
$\beta$	(K <sup>-1</sup> )	współczynnik rozszerzalności cieplnej
$\lambda$	(kJ kg <sup>-1</sup> )	ciepło topnienia
$\mu$	(kg/ms)	lepkość dynamiczna
$\nu$	(m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	lepkość kinematyczna
$\rho_l$	(kg m <sup>-3</sup> )	gęstość substancji w stanie ciekłym
$\rho_s$	(kg m <sup>-3</sup> )	gęstość substancji w stanie stałym
$\sigma$	(N m <sup>-1</sup> )	napięcie powierzchniowe
$c_{pl}$	(J kg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )	ciepło właściwe substancji w stanie ciekłym
$c_{ps}$	(J kg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )	ciepło właściwe substancji w stanie stałym
$f_g$		udział objętościowy substancji w fazie gazowej
$f_l$		udział objętościowy substancji w fazie ciekłej
$f_s$		udział objętościowy substancji w fazie stałej
$g$	(m s <sup>-2</sup> )	przyspieszenie ziemskie
$h$	(kJ kg <sup>-1</sup> )	entalpia
$k$	(W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )	przewodność cieplna
$k_l$	(W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )	przewodność cieplna substancji w stanie ciekłym
$k_s$	(W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )	przewodność cieplna substancji w stanie stałym
$p$	(N m <sup>-2</sup> )	ciśnienie
$q$	(m <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> )	wydatek (warunki początkowe eksperymentu)
$t$	(s)	czas
$u, v, w$	(m s <sup>-1</sup> )	składowe prędkości
$x, y, z$	(m)	współrzędne układu kartezjańskiego
$L$	(m)	wymiar charakterystyczny, wewnętrzny wymiar naczynia
$T_{ext}$	(K)	temperatura zewnętrzna
$T_s$	(K)	temperatura solidus
$T_l$	(K)	temperatura liquidus
$T_h$	(K)	temperatura ścianki gorącej
$T_c$	(K)	temperatura ścianki zimnej
$T_0$	(K)	temperatura początkowa
$U, V, W$		bezwymiarowe składowe prędkości
$X, Y, Z$		bezwymiarowe współrzędne układu kartezjańskiego
$Ra$		liczba Rayleigha
$Pr$		liczba Prandtla
$Ste$		liczba Stefana
$Nu$		liczba Nusselta

# 1. Wstęp

## 1.1. Motywacja

Współczesne technologie związane z przemysłem lotniczym, samochodowym, elektronicznym, medycznym i wielu innymi wymagają stosowania materiałów bardzo wysokiej jakości. Wiele ze stosowanych w tych technologiach elementów jest otrzymywanych w rezultacie procesów krzepnięcia. Uzyskanie wymaganej jakości takiego elementu wymaga dokładnego rozpoznania i kontrolowania wszystkich zjawisk fizycznych towarzyszących procesom krzepnięcia, tak aby otrzymany produkt odlewniczy pozbawiony był niejednorodności i defektów. Powszechna już obecnie dostępność wysokowydajnych komputerów i rozwój technik numerycznych pozwala zastąpić żmudny proces modyfikacji procedur technologicznych przez odpowiednio dostosowane symulacje numeryczne. Analiza i kontrola procesów krzepnięcia metodami symulacji numerycznej może pozwolić na efektywną optymalizację procesu przemysłowego. Na ogół wymaga ona jednak wykonania licznych prób i trudnych pomiarów „*in vivo*”, aby można było uznać za wiarygodne rezultaty uzyskane w wirtualnym świecie komputera. Niestety, powszechnie występujące w procesach przemysłowych trudności z uzyskaniem dostatecznie dokładnych danych empirycznych uniemożliwiają pełną atestację symulacji numerycznych i w praktyce jedynie niewielki odsetek instalacji przemysłowych korzysta z osiągnięć komputerowej optymalizacji procesów odlewniczych.

W obecnej pracy proponuje się alternatywne rozwiązanie, polegające na uwiarygodnieniu stosowanych procedur numerycznych już na etapie ich tworzenia. Takie uwiarygodnienie założeń fizycznych najwygodniej jest prowadzić przy użyciu modelowych eksperymentów, które można zrealizować i kontrolować w skali laboratoryjnej. Pozwala to na znaczną poprawę dokładność badań i minimalizuje ich koszt. Wykorzystanie modelu eksperymentalnego do kontroli poprawności rozwiązań numerycznych jest często zwane walidacją kodu numerycznego (od angielskiego terminu *validation*). W odróżnieniu od weryfikacji matematycznej poprawności symulacji numerycznej, której m.in. służą numeryczne wzorce porównawcze (ang. *numerical benchmark*), walidacja kodu numerycznego ma za zadanie odpowiedzieć na pytanie, czy przeprowadzona symulacja numeryczna poprawnie opisuje fizykę zjawiska, uwzględnia istotne dla danego procesu warunki, własności substancji i wzajemne sprzężenia. Przeprowadzenie takiej walidacji wymaga stworzenia wzorca fizycznego, czyli tzw. *experimental benchmark*.

Jak ważny staje się problem wiarygodności symulacji numerycznych w mechanice płynów może świadczyć fakt, że American Institute of Aeronautics and Astronautics utworzył komitet do spraw standardów danych CFD (Computational Fluid Dynamics) oraz zorganizował bazę danych modeli eksperymentalnych używanych do certyfikacji kodów CFD. Procedury testowania symulacji muszą być oparte na danych pochodzących z wzorcowych modeli eksperymentalnych, zatem proces tworzenia i badania takich modeli musi uwzględniać potrzeby twórców i użytkowników kodów numerycznych. Podobną inicjatywę podjęto w Europie i w ramach jednego z europejskich projektów badawczych 5PR UE utworzono sieć tematyczną FLOWnet (Flow Library On the Web network). Podstawowym zadaniem tej sieci jest dostarczanie naukowej i przemysłowej wspólnocie narzędzi do weryfikacji i walidacji symulacji numerycznych przepływów.

Procesy odlewnicze ze względu na swoją specyfikę nie doczekały się dotychczas jednolitych zasad certyfikacji kodów numerycznych. Istnieje wprawdzie szereg grup uniwersyteckich intensywnie pracujących nad stworzeniem przemysłowych wzorców procesów odlewniczych. Rezultaty tych badań są przedmiotem regularnych doniesień w specjalistycznych czasopismach i na konferencjach poświęconych modelowaniu procesów odlewniczych. Warto tutaj wymienić na przykład wzorzec eksperymentalny zaproponowany przez Sirrell'a i innych na seryjnej konferencji *Modelling of Casting* (1995, [57]). Badana geometria składała się z wąskiego kanału o wysokości ok. 40cm, przez który do niewielkiej komory zalewowej wlewano płynne aluminium. Mimo bardzo kosztownej aparatury rentgenowskiej oraz precyzyjnego systemu pomiaru temperatury, uzyskane informacje sprowadzały się do bardzo niedokładnego opisu dynamiki ruchu powierzchni cieczy.



Brak informacji o granicy frontu fazowego, rozkładach pól prędkości i temperatury jest charakterystyczny dla tego typu przemysłowych wzorców eksperymentalnych. Dlatego nie budzi zdziwienia, że oczekiwane przez autorów tego wzorca przeprowadzenie walidacji symulacji numerycznych zakończyło się niepowodzeniem. Żaden z zaproponowanych kodów numerycznych nie pozwolił na jakościową zgodność obserwowanego procesu, a o zgodności ilościowej trudno było mówić z braku wystarczająco dokładnych danych eksperymentalnych.

Proponowane w obecnej pracy laboratoryjne wzorce eksperymentalne mają za zadanie rozpoznanie zjawisk fizycznych typowych dla technologii przemysłowych i zweryfikowanie dopuszczalności uproszczeń powszechnie stosowanych w przemysłowych programach numerycznych. Użyteczność takich modeli eksperymentalnych wykracza daleko poza rolę wzorca, bo w powiązaniu z właściwym modelem numerycznym tworzą one świetne narzędzie diagnostyki i usprawniania technologii oraz badania i interpretowania zjawisk fizycznych obserwowanych w laboratoriach badawczych. Jest natomiast oczywiste, że uwiarygodnienie modelu fizycznego badanego kodu numerycznego w skali laboratoryjnej jest warunkiem koniecznym ale niewystarczającym dla zastosowania otrzymanych rezultatów w symulacjach procesów przemysłowych. Proponowana metodologia wskazuje jednak na źródła błędów i może w znacznym stopniu zredukować liczbę niewiadomych w końcowej procedurze walidacyjnej.

## 1.2. Wybór konfiguracji

Stosowanie we wzorcach eksperymentalnych materiałów typowych dla przemysłowych procesów krzepnięcia ma ograniczone zastosowanie z uwagi na wysokie temperatury topnienia (powyżej 1500K) oraz brak możliwości penetracji tych materiałów przez klasyczne metody pomiarowe. Dodatkowym problemem jest często spotykany dla takich substancji brak dokładnych danych fizycznych i termodynamicznych w temperaturach bliskich temperaturze topnienia. Biorąc pod uwagę problemy eksperymentalne i wysokie koszty takich badań, interesująca wydaje się alternatywna koncepcja polegająca na wykorzystaniu substancji o dobrze znanych własnościach fizycznych, przezroczystych optycznie i zapewniających możliwość kontroli procesu przemiany fazowej w umiarkowanych temperaturach, dostępnymi powszechnie metodami eksperymentalnymi. Tego typu eksperymenty, często zwane *analogami* procesów przemysłowych, pozwalają na stworzenie wzorców do uwiarygodnienia założeń fizycznych modeli numerycznych stosowanych później w warunkach przemysłowych. Należy jednak pamiętać, że nie zawsze jest to wystarczające kryterium wiarygodności. Tak uwiarygodniony model numeryczny, zastosowany dla materiałów o silnie nieliniowych parametrach, w innym zakresie bezwymiarowych liczb charakterystycznych (Reynoldsa, Rayleigha czy Prandtla) może prowadzić do błędnej prognozy. Z drugiej strony niepowodzenie odwzorowania „*analogowego*” wzorca eksperymentalnego, z pewnością wskazuje na podstawowe braki modelu w zakresie poprawności, czy pełności opisu zjawiska fizycznego.

Celem niniejszej pracy jest zbadanie roli zjawisk przepływowych i ich wpływu na produkt końcowy będący wynikiem procesu krzepnięcia. Cel ten jest realizowany przez zastosowanie uproszczonych, *analogowych* modeli eksperymentalnych różnych technologii odlewniczych. Zastosowane modele procesów technologicznych nie są prostymi odwzorowaniami rzeczywistości tylko pewnymi analogami procesów, wykorzystują ciecze modelowe i takie warunki fizyczne realizacji technologii, które umożliwiają wprowadzenie metod optycznych do diagnostyki przepływów. Stąd, naczynia będące uproszczonymi odpowiednikami urządzeń stosowanych w wybranych technologiach, wykonano z polimetakrylanu metylu (popularnie nazwanego pleksi), a wybrane ciecze były przezroczyste i charakteryzowały się niską temperaturą krzepnięcia. Zastosowanie cyfrowych metod rejestracji i analizy obrazów przepływu, takich jak, anemometria obrazowa (ang. *Particle Image Velocimetry*), termometria obrazowa (ang. *Particle Image Thermometry*) i śledzenie torów cząstek znacznikowych (ang. *Particle Tracking*) pozwoliły na precyzyjny pomiar pól temperatur i prędkości, wyznaczenie linii prądu w przepływie i dokładną lokalizację frontu przemiany fazowej. Zgromadzony bogaty materiał empiryczny posłużył do porównań z danymi uzyskanymi w modelowaniu numerycznym badanych przypadków. Przyjęto

zasadę, że dla tworzonych własnych modeli eksperymentalnych przeprowadzono również własne symulacje numeryczne, oparte na uniwersalnym oprogramowaniu. Takie podejście pozwalało na bieżące rozpoznawanie zjawisk fizycznych w eksperymencie, dobieranie warunków optymalnego przebiegu eksperymentu i określenie, jakie charakterystyki fizyczne i w jakiej postaci powinny być rejestrowane i opracowane podczas badań, aby mogły służyć do weryfikacji modelu numerycznego. Z drugiej strony analiza warunków laboratoryjnych umożliwiała takie modyfikacje modelu numerycznego, aby opierał się on na rzeczywistych warunkach brzegowych i początkowych.

Dla typowego procesu odlewniczego można wyróżnić dwie podstawowe fazy, fazę przepływową – dominującą podczas wypełniania formy ciecżą – i fazę krzepnięcia (solidyfikacji) ciecży. Każda z tych faz ma istotny wpływ na produkt końcowy. Z uwagi na różną specyfikę zjawisk fizycznych w każdej z tych faz, w prowadzonych badaniach starano się rozdzielić te dwa etapy.

Proces odlewniczy charakteryzuje jednoczesne występowanie szeregu procesów fizycznych, których wzajemne sprzężenie decyduje o rezultacie końcowym. Jednoczesne występowanie konwekcji naturalnej i wymuszonej, swobodnej powierzchni i wielu frontów przemiany fazowej komplikuje analizę eksperymentalną i utrudnia przeprowadzenie procedury walidacyjnej. Dlatego przy tworzeniu wzorców eksperymentalnych, mających na celu weryfikację kodów numerycznych, podstawowym kryterium wyboru konfiguracji musi być ograniczenie stopnia komplikacji badanego procesu. Uproszczenie geometrii naczynia jest tu koniecznym warunkiem dla jednoznacznej analizy pól prędkości i położenia frontów fazowych. Przedmiotem zainteresowania w obecnej pracy są więc proste geometrie (sześciian i prostopadłościan) wypełniane ciecżą grawitacyjnie lub pod ciśnieniem.

Po wypełnieniu modelu, kiedy zanika przepływ wymuszający, istotną rolę zaczynają odgrywać przepływy termiczne wywołane gradientami temperatury: konwekcja naturalna i konwekcja termokapilarna. Przepływy te wpływają na nierównomierność procesu krzepnięcia oraz deformacje powierzchni przemiany fazowej. Zbadanie charakterystyk tych przepływów w połączeniu z analizą położenia frontu fazowego jest kolejnym etapem przeprowadzonej analizy procesu krzepnięcia.

Mimo dążenia do prostoty kształtów geometrycznych naczyń wykorzystywanych do badań, nie da się uniknąć znacznej złożoności obserwowanego zjawiska. Przykładowo oddziaływanie swobodnej powierzchni ciecży z prostymi wewnętrznymi przeszkodami umieszczonymi w geometrii prostopadłościanu powoduje, że wypełnianie połączone jest z procesem przelewania, powstawania fal powierzchniowych i wtórnej cyrkulacji wielo-komorowej. Analiza eksperymentalna takich przepływów jest utrudniona wskutek dużej rozpiętości występujących prędkości oraz załamań światła na przeszkodach wewnętrznych i swobodnej powierzchni ciecży. Z kolei przy wypełnianiu geometrii w formie sześcianu generowana jest silna cyrkulacja wewnętrzna, prowadząca do deformacji powierzchni swobodnej. Utrudnia to obserwacje wnętrza naczynia przez górną powierzchnię. Podobną przeszkodą w pomiarach staje się krzepnięcie ciecży na zimnych ściankach bocznych tego modelu. Tym niemniej wyselekcjonowane dane eksperymentalne pozwoliły na zdefiniowanie wzorca procesu wypełniania naczynia, wzorca procesu krzepnięcia dla naczynia wypełnionego oraz wzorca dla sprzężenia procesów wypełniania i krzepnięcia.

## 2. Metody eksperymentalne

Podstawą tworzonych wzorców eksperymentalnych jest zastosowanie nowoczesnych metod pomiarowych i odpowiedniego systemu rejestracji mierzonych wielkości, oraz wybór optymalnej konfiguracji naczyń pomiarowych i substancji modelowych. W niniejszym rozdziale opisano każdy z tych elementów, zwracając szczególną uwagę na aspekty istotne dla procesu tworzenia wzorca eksperymentalnego.

### 2.1. Opis metod pomiarowych

Podstawową metodą pomiarową stosowaną w tej pracy jest anemometria obrazowa (Particle Image Velocimetry - PIV), umożliwiająca ilościowy pomiar pól prędkości w płynach. Zastosowanie ciekłokrystalicznych zawiesin jako cząstek wskaźnikowych umożliwiło rozszerzenie anemometrii obrazowej na pomiary pól temperatury. Przez analogię metodę tę nazwano termometrią obrazową (Particle Image Termometry). Idea obu tych metod opiera się na analizie optycznej obrazów przepływu. Z tego powodu w prowadzonych badaniach stosowane płyny powinny być przezroczyste, podobnie jak ściany naczyń, w których ma miejsce badany przepływ. Przy tej okazji warto wspomnieć o nowej, przewodnościowej metodzie pomiarowej, rozwijanej w ramach prowadzonych obecnie prac (Rahaim [51], Dekajlo [53]). Istotną zaletą tego podejścia jest wykorzystanie różnic przewodnictwa elektrycznego w płynie, a zatem możliwy jest pomiar koncentracji składników czy temperatury cieczy w ośrodkach optycznie nieprzezroczystych. Z tego względu dalszy rozwój tej metody może spowodować, że stanie się ona cennym uzupełnieniem metod optycznych.

#### 2.1.1. Pomiar pól prędkości

Współczesnym narzędziem pomiaru pól prędkości przepływu jest anemometria obrazowa, w skrócie oznaczana PIV (z ang. *Particle Image Velocimetry*). Poprzez oświetlenie badanego obszaru przepływu wąską płaszczyzną świetlną (tzw. nożem świetlnym) otrzymuje się obraz cząstek wskaźnikowych (posiewu) poruszające się w tej płaszczyźnie. Cyfrowa rejestracja pary kolejnych obrazów i ich korelacja w pamięci komputera prowadzą do wyznaczenia średnich przemieszczeń w każdym punkcie obrazu przepływu (Westerweel i inni, [64], Willert i Gharib, [65]). Dzięki temu na podstawie dwóch obrazów wykonanych w znanym odstępie czasu można wyznaczyć wielkość, kierunek i zwrot wektorów prędkości dla całego badanego przekroju przepływu. Procedura taka może być powtarzana dla wielu przekrojów, umożliwiając odtworzenie przestrzennej struktury wektorowego pola prędkości.

Dokładność pomiaru metodą PIV ograniczona jest wieloma czynnikami, z których najistotniejszymi są rozdzielczość obrazu oraz prawidłowy dobór sekwencji korelacji i odstępu czasowego między obrazami. W pracy dla zwiększenia dokładności i dynamiki pomiaru korelację obrazów przepływu przeprowadzano dla wielu par z dłuższych sekwencji zarejestrowanych obrazów. Dla typowych obrazów przepływu rejestrowanego przy rozdzielczości 768 x 512 pikseli uzyskiwana względna dokładność pomiarów prędkości (dla pojedynczego punktu) wynosiła  $\pm 6\%$ .

Klasyczna metoda PIV oparta na korelacji ma szereg wad, wynikających głównie ze sztywnego podziału analizowanego obrazu na okna próbkowania. Zastąpienie korelacji obrazów metodą potoków optycznych (ang. *optical flow*) pozwoliło na powiększenie dokładności pomiaru i ominięcie szeregu ograniczeń klasycznej analizy PIV (Quénot, Pakleza, Kowalewski, [50]). Metoda ta umożliwia wyznaczenie pola prędkości dla każdego elementu obrazu (piksela), wykorzystując sekwencję wielu (niekoniecznie dwóch) obrazów. Użycie tej metody w opisanych niżej badaniach pozwoliło w wielu przypadkach na istotną poprawę dokładności pomiaru pól prędkości.

Metoda pomiaru pól prędkości PIV, w szczególności w wersji opartej na potokach optycznych, w wielu wypadkach wymaga odpowiedniej filtracji obrazów, wykonywanej przy pomocy specjalnie przygotowanych programów pomocniczych. Obok poprawy kontrastu i równomierności oświetlenia istotne jest maskowanie fragmentów obrazów nieistotnych z punktu widzenia pomiaru pól prędkości. Liczne próby wykazały, że rezultat obliczeń oparty na potokach optycznych może

zależać od tekstury fragmentów obrazów nie należących do analizowanego przepływu (ścianki naczyń, elementy nie wypełnione cieczą). Na przykład występowanie we fragmentach obrazu w otoczeniu przepływu dużych obszarów o stałej jasności zakłóca w tych okolicach procedurę analizy przemieszczeń. Zminimalizowanie tego efektu uzyskano dzięki wypełnieniu takich obszarów teksturą odpowiednio przygotowanego obrazu odniesienia.

Procedura filtracji obrazów, tworzenia właściwej tekstury, maskowania odpowiednich fragmentów obrazów, obliczania pól wektorowych i transformacji rezultatów obliczeń do wygodnego dla programów graficznych formatu była przeprowadzana automatycznie dzięki wykorzystaniu środowiska Linux i odpowiednio przygotowanego pakietu skryptów powłoki systemu. Pozwoliło to na szybką analizę setek obrazów i przeprowadzenie odpowiednich operacji numerycznych prowadzących do wyznaczenia reprezentatywnych pól wektorowych.

Porównanie pełnego wektorowego pola prędkości w danym przekroju z jego odpowiednikiem otrzymanym w rezultacie obliczeń numerycznych pozwala na szybką, wizualną analizę zgodności i rozbieżności. Ilościowa ocena takiego porównania jest wygodniejsza do przeprowadzenia dla wybranych profili prędkości, wyekstrahowanych ze zmierzonych i obliczonych pól wektorowych. Takie profile posłużyły również do analizy dokładności obliczeń numerycznych przy definiowaniu opisanego dalej wzorca numerycznego.

### 2.1.2. Pomiar pól temperatury

Pomiar pola temperatury cieczy w badanych przepływach bazuje na zjawisku selektywnego rozproszenia światła przez niektóre substancje ciekłokrystaliczne. Objawia się to jako zmiana barwy światła (długości fali) w funkcji temperatury i kąta rozproszenia. Wykorzystanie zawiesiny ciekłokrystalicznej jako posiewu stworzyło możliwość wizualizacji temperatury cieczy w przepływie (Hiller i Kowalewski, [23]). Komputerowa analiza zmiany barwy światła rozproszonego na cząstkach wskaźnikowych doprowadziła do opracowania metody termometrii obrazowej PIT (*Particle Image Thermometry*). Stosowany w tej metodzie układ optyczny jest analogiczny do używanego do pomiaru pól prędkości metodą PIV. Umożliwiło to stworzenie przez Hillera i innych ([22]) podstawowego narzędzia pomiarowego do diagnostyki przepływów termicznych, będącego połączeniem w jednym eksperymencie obrazowych metod pomiaru pola prędkości (PIV) i pola temperatury (PIT). Przydatność tak utworzonej techniki hybrydowej do badań przepływów z przemianą fazową zademonstrowano w pracy Kowalewskiego i Cybulskiego ([30]).

Określenie lokalnej temperatury cieczy wiąże się z wyznaczeniem barwy (długości fali) światła rozproszonego przez znajdujące się tam cząstki posiewu ciekłokrystalicznego. Zastosowana analiza obrazów, prowadząca do wyznaczenia barwy dominującej światła rozproszonego (długości fali o maksymalnej intensywności), opiera się na klasycznej metodzie kolorymetrii, czyli rozkładzie rejestrowanego światła na trzy składowe podstawowe, barwę czerwoną, zieloną i niebieską (*RGB*). Odpowiednia transformacja algebraiczna tych trzech zmierzonych dla danego punktu obrazu zmiennych umożliwia wyznaczenie istotnego dla metody PIT parametru, tzn. barwy dominującej (ang. *Hue*). Wartość *Hue*, czyli barwa dominująca, jest bezpośrednio funkcją temperatury ciekłego kryształu. Pomiar lokalnej temperatury cieczy w przepływie metodą PIT wymaga wyznaczenia krzywej kalibracyjnej, będącej relacją wartości *Hue* w funkcji zmian temperatury (Kowalewski, [28]). Zastosowana w tej pracy metoda kalibracyjna opiera się na 8-bitowej reprezentacji barw składowych i zapewnia rozdzielczość koloru lepszą niż 1%. Jednak z uwagi na silnie nieliniową charakterystykę odwzorowania, dokładność pomiaru temperatury zależy od wartości *Hue* i zmienia się od 3% do 10% pełnego zakresu zmiany barw. Dla ciekłych kryształów używanych w opisywanych niżej eksperymentach daje to absolutną dokładność pomiaru  $0.15K$  dla niższych temperatur (czerwony-zielony zakres zmian koloru) i  $0.5K$  dla wyższych temperatur (niebieski zakres kolorów). Największa czułość metody ma miejsce przy zmianie barwy materiału ciekłokrystalicznego z czerwieni do zieleni, odpowiadającej zmianie wartości temperatury poniżej jednego stopnia.

Typowe materiały ciekło-krystaliczne mają ciężar właściwy zbliżony do ciężaru właściwego wody i w stosowanych cieczach cząstki posiewu mogły być traktowane jako neutralne względem siły wyporu. Czas relaksacji termicznej materiału ciekło krystalicznego jest stosunkowo długi i dla typowej zawiesiny cząstek o wymiarze 50 $\mu$ m wynosi około 3 ms. Jest to jednak nadal czas zupełnie wystarczający dla badań problemów konwekcji termicznej w cieczach.

Pomiar pól temperatury techniką PIT, chociaż bardzo atrakcyjny z uwagi na bezinwazyjność metody i możliwość uzyskania informacji o rozkładzie temperatury w całym przekroju przepływu, posiada szereg ograniczeń. Zakres zmian barwy materiału ciekłokrystalicznego na ogół nie pokrywa całego interesującego nas zakresu zmian temperatury. Uzyskiwana informacja o polu temperatury jest często niepełna lub obarczona błędami wskutek przekłamań barw wynikających z odbić światła czy jego rozproszenia na elementach naczynia. Niezbędna jest więc niezależna kontrola zmian temperatury w przepływie, pozwalająca na weryfikacje i ewentualną korektę wyników pomiaru metodą PIT. Takie pomiary konieczne są również dla przeprowadzenia procedury kalibracyjnej. W opisanych badaniach lokalne pomiary temperatury wykonywano w kilku a nawet czasami kilkunastu wybranych punktach (np. w płaszczyźnie ścianek lub na wlotach cieczy) używając systemu termopar i czujników oporowych typu Pt-100. Uzyskiwana dokładność punktowego pomiaru temperatury wynosiła  $\pm 0.1K$ .

### 2.1.3. Wizualizacja struktur przepływu

Ważnym narzędziem eksperymentalnej analizy przepływów jest ich wizualizacja. Informacja zbierana podczas wizualizacji odpowiada scałkowanym w czasie torom poruszającego się z płynem posiewu i stanowi cenne uzupełnienie metody PIV. Wizualizacja przepływu pozwala stosunkowo łatwo identyfikować i interpretować poszczególne struktury pola przepływu. W opisanych badaniach wykorzystywano tą metodę analizy przepływu zarówno do jakościowej oceny zgodności symulacji numerycznych z rezultatami pomiarów jak również do wydobycia szczegółów pól prędkości, trudnych do identyfikacji na podstawie pól wektorowych.

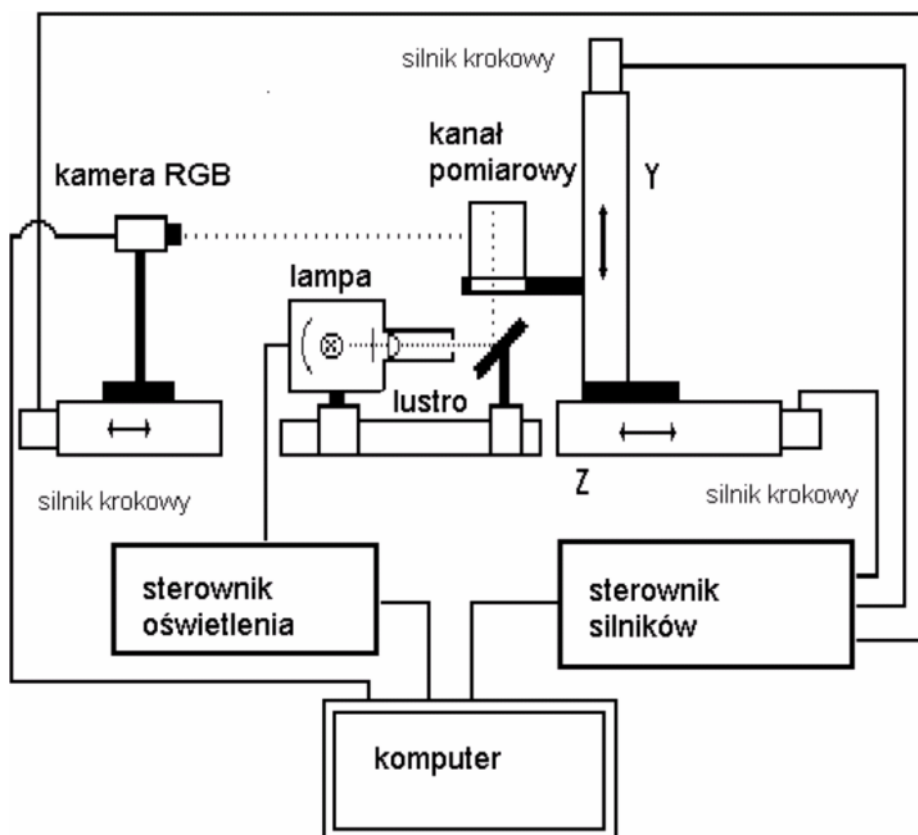
W klasycznej postaci wizualizacja torów cząstek uzyskiwana jest przez wielokrotne zsumowanie obrazów przepływu na kliszy czy matrycy światłoczułej aparatu fotograficznego. W niniejszej pracy, komputerowa rejestracja obrazów przepływu umożliwiała rejestrację dłuższych sekwencji obrazów i ich późniejsze zsumowanie w pamięci komputera. Przed zsumowaniem poszczególne obrazy komputerowe poddawano dodatkowo filtracji pozwalającej na wzmocnienie kontrastu i pełniejsze wyodrębnienie poszczególnych cząstek. Odpowiedni dobór parametrów filtracji, liczby sumowanych obrazów i odstępów czasowych umożliwiał wizualizację tych torów cząstek, które były najbardziej istotne dla dalszej analizy struktur przepływu.

Wizualizacja torów cząstek pozwoliła uzyskać globalny opis struktur przepływu i ułatwia interpretację podstawowych charakterystyk pola prędkości. Otrzymana z eksperymentów informacja o torach cząstek wskaźnikowych była porównywana z wirtualnymi torami cząstek, generowanymi na bazie otrzymanych rozwiązań numerycznych danego problemu. Procedura taka, zwana *particle tracking*, w pewnym sensie jest zbliżona do wyznaczania linii prądu przepływu. Podobna operacja mogła być również wykonana z wykorzystaniem zmierzonych metodą PIV pól prędkości, pozwalając wykreślić wirtualne tory cząstek dla zmierzonego pola prędkości. Porównanie uzyskanych rezultatów eksperymentalnych, tzn. fizycznych torów pochodzących z wizualizacji przepływu, i wirtualnych torów powstałych przez scałkowanie pól prędkości, umożliwiło właściwą interpretację skomplikowanych struktur przepływu i procesów odpowiedzialnych za konwekcyjną dyfuzję ciepła.

## 2.2. Układy pomiarowe i systemy akwizycji danych

Podstawowy schemat stanowiska pomiarowego stosowanego w doświadczeniach ilustrują rysunki 1 i 2. Wspólnymi elementami obu układów pomiarowych są systemy oświetlenia, rejestracji obrazów i systemy termostatów do stabilizacji temperatury. Rysunek 1 przedstawia stanowisko do rejestracji obrazów dla badań w kanale sześciennym z dodatkowym systemem przesuwu położenia

płaszczyzny świetlnej, umożliwiającym odtworzenie struktur przestrzennych. Rysunek 2 ilustruje układ pomiarowy stosowany do badań w prostopadłościennym modelu układu zalewowego, obejmujący naczynie z cieczą modelową o zmiennym nachyleniu, ciśnieniowy system napełniania oraz dodatkowy układ punktowych pomiarów temperatury.



Rys. 1. Podstawowe elementy układu rejestracji obrazów przepływu

### 2.2.1. Rejestracja obrazów

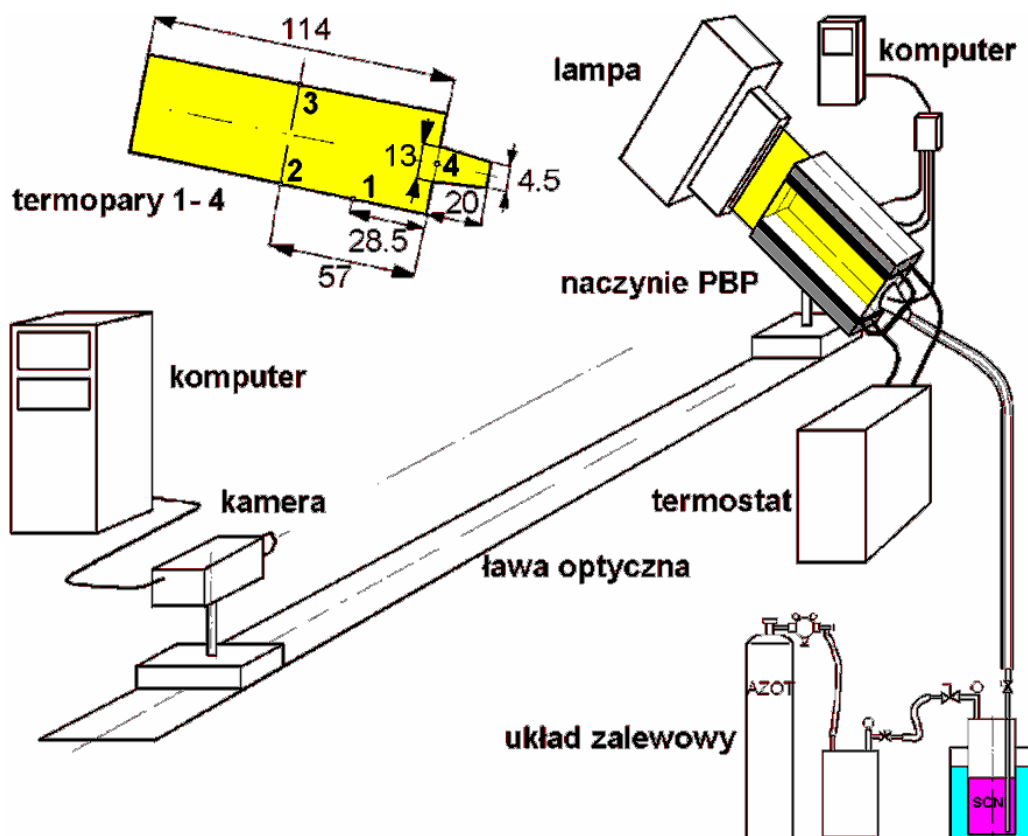
Cyfrowe obrazy posiewu znajdującego się w przepływie są podstawą wykorzystywanych w pracy metod pomiaru pól prędkości i temperatury. Narzędziem pomiarowym w tych badaniach jest kamera CCD połączona z procesorem obrazowym i umożliwiająca cyfrową rejestrację obrazów przepływu w przekrojach wyróżnionych przez nóż świetlny. Rejestracja obrazów odbywa się z kierunku prostopadłego do płaszczyzny światła. Komorę modelującą formę odlewniczą umieszczano na ławie optycznej i obserwowano przy pomocy kamery przesuwanej wzdłuż ławy. Podstawowe elementy układu do rejestracji obrazów, pokazane schematycznie na rys. 1, to:

- kamera,
- komputer,
- karta akwizycji obrazów w komputerze,
- nóż świetlny – liniowe źródło światła służące dla wytworzenia płaszczyzny świetlnej o szerokości 100 mm i grubości 1-2 mm,
- system silników krokowych oraz
- układ zwierciadeł.

Płaszczyznę obserwacji wybierano przez oświetlenie wnętrza komory warstwą świetlną formowaną przez układ optyczny oświetlacza halogenowego o mocy 1000 W. Zmiany położenia płaszczyzny oświetlającej umożliwiał system silników krokowych sterujący przemieszczaniem kamery, źródła światła i komory pomiarowej. Program komputerowy sterujący eksperymentem kontrolował ruch

silników krokowych, włączanie oświetlenia, rejestracje temperatury z czujników i proces rejestracji i zapisu obrazów przepływu. Pozwoliło to na automatyzację wcześniej zaprogramowanego przebiegu eksperymentu, łącznie z szybkim wyborem różnych płaszczyzn przekroju przepływu.

Obrazy wykorzystywane do analizy pól temperatury i prędkości metodą hybrydową PIV oraz PIT uzyskiwano wykorzystując trójprzetwornikową kamerę 3CCD typu XC003/P firmy Sony, podłączoną do 32-bitowego modułu akwizycji obrazów AM-STD-RGB (Imaging Tech. Inc.). Kamera ta charakteryzuje się stosunkowo niewielką rozdzielczością wynoszącą 768x542 pikseli. Dla uzyskania precyzyjnych pomiarów pól prędkości użyto wysoko rozdzielczej (1300x1024 pikseli), czarno-białej kamery CCD typu A113P firmy Basler, współpracującej z 16-bitowym modułem akwizycji obrazów AM-DIG (Imaging Tech. Inc.).



Rys. 2. Układ eksperymentalny do badania procesów zalewania i krzepnięcia w modelach form odlewniczych – zalewanie ciśnieniowe, punkty kontroli temperatury

Stosowane karty akwizycji umieszczono w komputerach osobistych klasy PC-Pentium, wyposażonych w szybkie szyny transmisji danych PCI. Rejestrację obrazów wykonywano przy pomocy trzech specjalnie opracowanych programów komputerowych, pozwalających na elastyczny wybór wielkości sekwencji pomiarowej, czasu między obrazami oraz kontrolowanie dodatkowych elementów stanowiska pomiarowego, jak silniki krokowe czy termopary. Dwa z opracowanych programów o nazwach VFGLAB i PCISTD oparte są na systemie czasu rzeczywistego MS-DOS. Ograniczenia tego systemu operacyjnego nie pozwalają na pełne wykorzystanie pamięci współczesnych komputerów. W związku z tym dodatkowo opracowano nowy program akwizycji obrazów AMDIG, oparty o wielowątkowy system operacyjny LINUX i pozwalający na nieograniczone wykorzystywanie zasobów komputerowych. W praktyce oznacza to możliwość rejestracji serii kilkuset obrazów wysokorozdzielczych w pamięci komputera podczas jednej sesji akwizycji. Dodatkową zaletą przejścia z systemu DOS do systemu operacyjnego LINUX jest możliwość zdalnego sterowania i obserwacji procesu rejestracji z wykorzystaniem protokołu TCPIP.

Typowy eksperyment, wymagający rejestracji zmieniających się w czasie pól prędkości, generuje setki kilku-megabajtowych obrazów. Wielokrotne powtarzanie badań dodatkowo zwiększa ilość danych. W związku z tym analiza wyników pomiarów jest możliwa jedynie przy pełnym zautomatyzowaniu tego procesu. Dla filtracji obrazów, analizy pól prędkości i temperatury oraz wyznaczenia położenia frontów fazowych wykorzystano własne programy komputerowe: PIV (korelacyjna anemometria obrazowa), OPFLOW (anemometria metodą potoków optycznych), MY8LOC (specyficzna dla PIV filtracja obrazów), IMGPROC (wielofunkcyjny manipulator obrazów), LFARBE (analiza barw dla metody PIT), MYXVK i BTMESS (pomiar położenia frontów fazowych). Wykorzystanie tych programów w środowisku LINUX umożliwiło tworzenie skryptowego systemu zarządzania wykonywanymi operacjami i pełną automatyzację analizy dużych pakietów obrazowych.

### 2.2.2. Punktowa rejestracja temperatury

Istotnym parametrem w badaniach przepływów termicznych jest temperatura. Obok pomiarów pól temperatury metodą PIT konieczny jest dokładny pomiar temperatury w wybranych, charakterystycznych punktach układu przepływowego. Jest to szczególnie ważne w systemach zalewanych cieczą (faza wypełniania formy), charakteryzujących się szybkimi zmianami temperatury. W trakcie badań prowadzonych w takich układach stwierdzono konieczność wielopunktowego monitorowania temperatury zarówno cieczy jak i zmieniającej się w czasie wypełniania temperatury ścian naczynia pomiarowego. Informacja o temperaturze ścian naczyń odgrywa istotną rolę przy ustalaniu termicznych warunków brzegowych w symulacjach numerycznych, często niesłusznie upraszczanych jako adiabatyczne czy izotermiczne.

W związku z tym w każdym z przeprowadzanych eksperymentów, niezależnie od rejestracji pól temperatury metodą PIT, monitorowano w sposób ciągły zmiany temperatury w wybranych punktach badanego przepływu, na powierzchniach zewnętrznych i wewnętrznych ścianek naczyń ograniczających przepływ oraz w elementach układu stabilizowanych termicznie przez termostaty. Do rejestracji temperatur wykorzystywano termopary i elementy oporowe Pt100 połączone z dwoma wielokanałowymi przetwornikami analogowo - cyfrowymi. Pierwszy z nich to 8 kanałowy rejestrator firmy Advantech opartym na kartach PCLD-779 i PCL-711B, współpracujący z własnym programem akwizycji obrazów VFGLAB. Dokładność pomiaru temperatury dla tego układu wynosiła około  $0.2K$ . Celem zwiększenia dokładności pomiarów i liczby monitorowanych punktów w części badań wykorzystano specjalistyczny rejestrator firmy Prema. Przyrząd ten umożliwia jednoczesną obsługę 30 czujników temperatury i pomiar temperatury z dokładnością rzędu  $0.01K$ .

Szczegóły rozmieszczenia punktów pomiaru temperatury podano przy opisie geometrii stosowanych naczyń oraz przy opisach zarejestrowanych przebiegów temperatur w czasie procesu zalewania i krzepnięcia. Częstotliwość rejestracji temperatury wynosiła dla większości eksperymentów 1Hz.

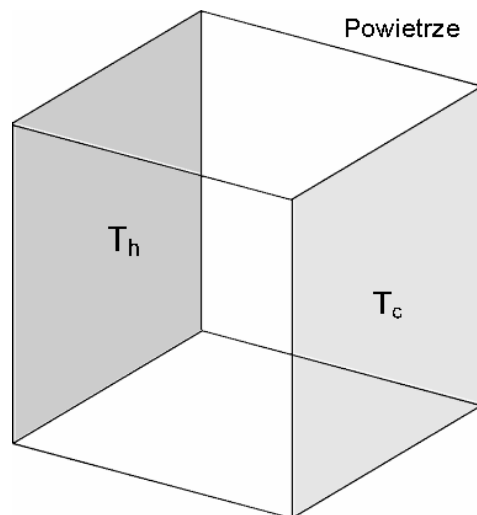
## 2.3. Wybrane geometrie naczyń

Mając na względzie, że przeprowadzone badania miały na celu sformułowanie wzorców eksperymentalnych, podstawowym zagadnieniem był wybór geometrii naczyń do obserwacji zjawisk przepływowych. Podjęte przy tym decyzje wynikały z konieczności spełnienia warunku, by układ ścian i użyte materiały umożliwiały stosowanie metod optycznych. Po rozważeniu wybrano cztery podstawowe geometrie: a) sześcián grzany różnicowo, b) sześcián z chłodzoną górną powierzchnią, c) pochylony prostopadłościán (bez lub z przegrodami) i d) sześcián otwarty, wypełniany cieczą od dołu. Dla uproszczenia opisu w dalszej części pracy geometrie te są odpowiednio oznaczane skrótami: SRG, SIG, PBP (lub PZP – zależnie od wariantu), oraz SP. Poniżej omówiono podstawowe cechy wybranych układów geometrycznych, zwracając uwagę na kryteria jakimi się kierowano dokonując wyboru, szczegóły konstrukcyjne konieczne dla zdefiniowania warunków brzegowych oraz rozmieszczenie elementów pomiarowych.



### 2.3.1. Sześcian grzany różnicowo (SRG)

Pierwsza wybrana konfiguracja wiąże się z klasycznym układem, który był przedmiotem wielu prac teoretycznych, numerycznych i eksperymentalnych z wymiany ciepła. Geometrię naczynia stanowi sześcian z dwiema przeciwległymi ściankami pionowymi utrzymywanymi w zadanych stałych temperaturach  $T_h$  i  $T_c$  (rys. 3). Wymuszony różnicą temperatur przepływ konwekcyjny w takim naczyniu stanowi klasyczny wzorzec (*benchmark*) do testowania programów numerycznych. Obniżenie temperatury jednej ze ścianek izotermicznych poniżej temperatury zmiany fazy  $T_s$  cieczy prowadzi do stworzenia wzorca procesów krzepnięcia. Prostota geometrii, dobrze zdefiniowane termiczne warunki brzegowe i własności materiałowe tworzą układ bardzo wygodny do badania wiarygodności obliczeń numerycznych. Warto zauważyć, że mimo tych zalet symulacja procesów krzepnięcia dla tego układu nadal wykazuje poważne rozbieżności w porównaniu ze zdefiniowanymi wcześniej wzorcami eksperymentalnymi (Kowalewski, Rebow [33]).



Rys. 3. Geometria sześcianu różnicowo grzanego (SRG)

Wybór tej dobrze znanej i wielokrotnie zbadanej konfiguracji w niniejszej pracy wynikał z konieczności wstępnego zweryfikowania stosowanych modeli numerycznych. Stosunkowo duży materiał, zarówno eksperymentalny, jak i teoretyczny, pozwalał na identyfikację podstawowych mechanizmów decydujących o przemianie fazowej w obecności czystej konwekcji naturalnej. Rozpatrywana geometria naczynia została wybrana także jako kontynuacja badań opisanych w pracy Banaszka i innych ([5]).

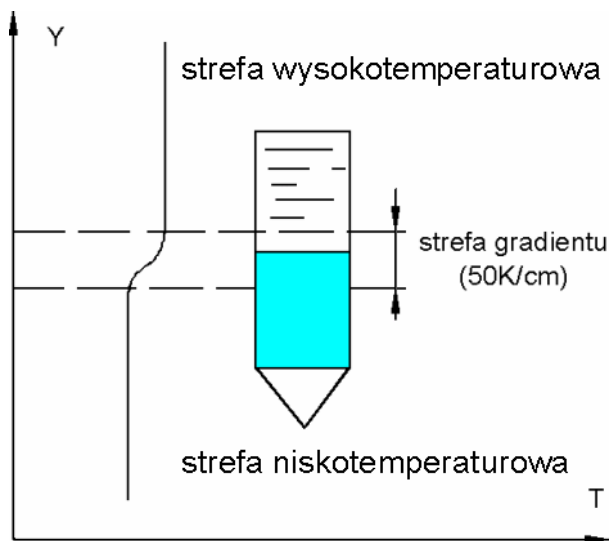
Wymiar wewnętrzny stosowanego do badań sześcianu wykonanego z pleksiglasu wynosi  $38\text{ mm}$  a grubość czterech ścianek nieizotermicznych  $6\text{ mm}$ . Pozostałe dwie ścianki wykonane zostały z aluminium a ich temperaturę stabilizował przepływ płynu z termostatu przez wewnętrzne kanaliki. Termopary w eksperymentach z układem o opisywanej geometrii były umieszczone tak, by mierzyć temperatury ścianek izotermicznych  $T_h$  i  $T_c$ . Zgromadzone wcześniej wzorcowe pola prędkości i temperatury oraz położenia frontu przemiany fazowej wykorzystano do przeprowadzenia testów wiarygodności kodów numerycznych, przed ich wykorzystaniem do bardziej skomplikowanych układów.

Zaproponowany w dalszej części pracy nowy wzorzec numeryczny oparty na tej geometrii ma pozwolić na wstępną weryfikację stosowanej metody numerycznej i ocenę wpływu stopnia dyskretyzacji na szybkość i dokładność uzyskanego rozwiązania.

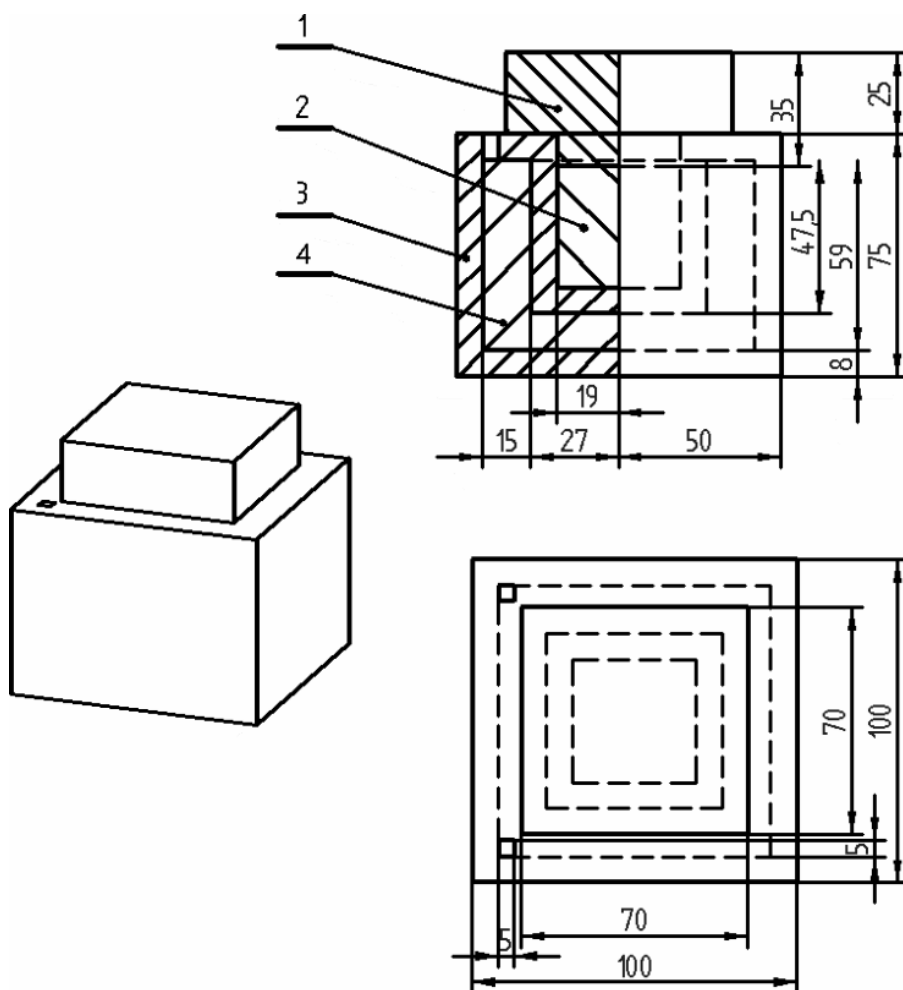
### 2.3.2. Sześcian z izotermiczną górną ścianką (SIG)

Drugi układ eksperymentalny wzorowano na procesie otrzymywania monokryształów w tzw. konfiguracji Bridgman'a, w której wymusza się konwekcję kierunkową i wykorzystuje w tym celu wytworzony pionowy gradient temperatury (rys. 4). Szybkość wzrostu monokryształu jest wprost proporcjonalna do gradientu temperatury, a jego wielkość zależy od przewodności cieplnej w punkcie topnienia. Skonstruowane dla tego układu naczynie posiada górną ściankę izotermiczną,

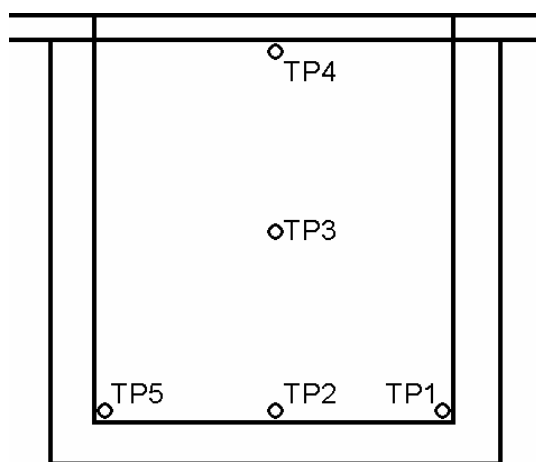
utrzymywaną w temperaturze  $T_c$ , poniżej temperatury krzepnięcia cieczy  $T_s$ . Pozostałe ścianki wykonano z pleksiglasu. Naczynie zanurzone jest w kąpeli wodnej, zapewniającej kontrolowany przepływ ciepła pomiędzy otoczeniem a krzepnącą w naczyniu cieczą. W konfiguracji Bridgman'a odpowiada to transportowi ciepła od ścianek pieca do materiału tworzącego kryształ.



Rys. 4. Schemat metody Bridgman'a stosowanej w hodowli kryształów



Rys. 5. Schemat geometrii SIG, naczynie wykonane z pleksiglasu z cieczowym płaszczem chłodzącym: 1 - aluminiowy korek, 2 - komora wypełniona cieczą modelową, 3 - zewnętrzna ścianka, 4 - kąpiel zewnętrzna



Rys. 6. Rozmieszczenie termopar typu K (NiCr-NiAl) w sześciennym naczyniu z płaszczem chłodzącym

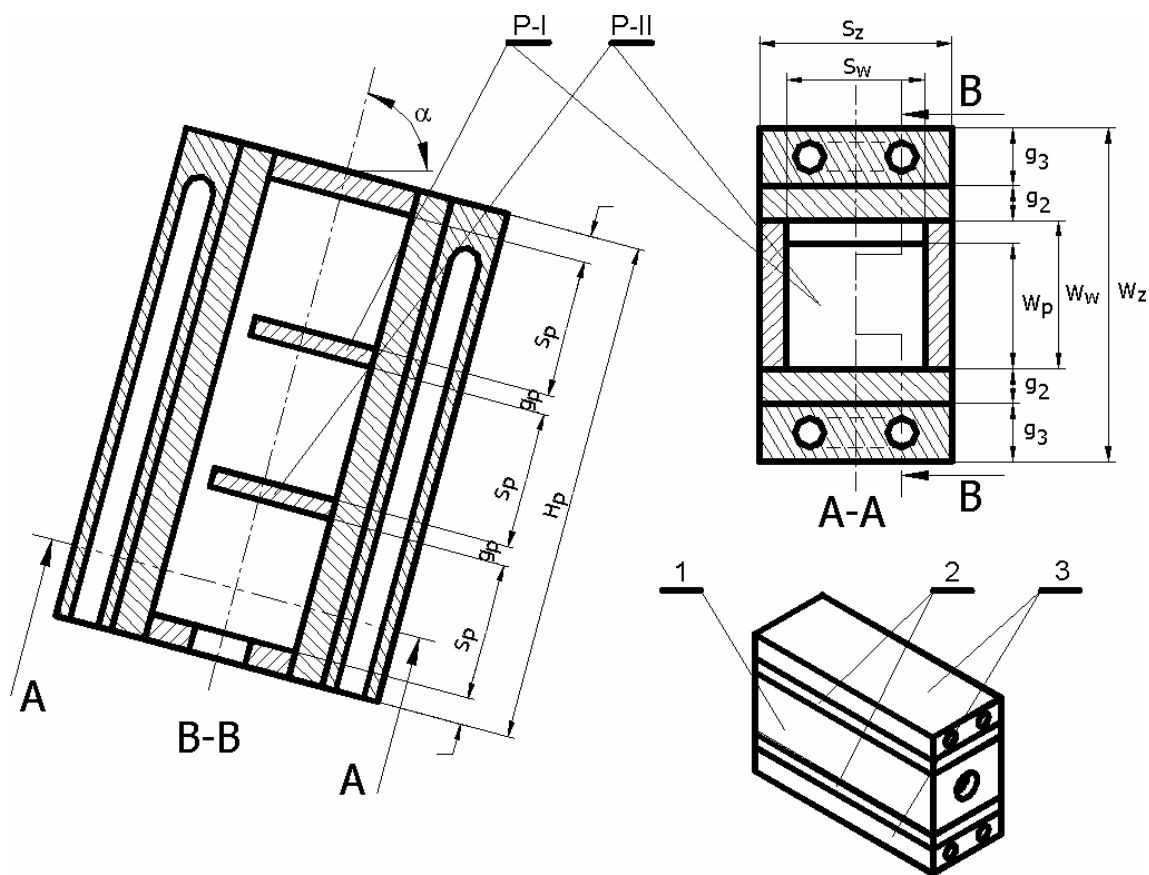
Rysunek 5 ilustruje szczegóły geometrii stosowanego naczynia. Górna ścianka naczynia, wykonana z aluminiowego „korka” (1) zamyka sześcienną komorę (3) wypełnioną materiałem (2) podlegającym przemianie fazowej. Komora umieszczona jest w większym pudełku tak, by w przestrzeni między naczyniami mogła przepływać ciecz z termostatu (4). Wewnętrzne ścianki sześciennego naczynia mają wymiar  $38\text{ mm}$ . Zarówno komora, jak i zewnętrzne pudełko wykonano z pleksiglasu o grubości  $8\text{ mm}$ . Termiczne warunki brzegowe eksperymentu wyznacza temperatura górnej ścianki  $T_c$  oraz temperatura cieczy  $T_{ext}$  w otaczającej komorę przepływową kąpieli wodnej. Różnica tych temperatur wymusza konwekcję naturalną w komorze i decyduje o przebiegu procesu krzepnięcia wewnątrz komory. W efekcie tych procesów ustala się strumień ciepła przepływającego przez ścianki z pleksiglasu. Dla kontroli temperatury wewnętrznej powierzchni jednej z tych ścianek służyły dodatkowe termopary rozmieszczone według układu prezentowanego na rys. 6.

Omawiana konfiguracja była przedmiotem wcześniejszych badań Kowalewskiego i Cybulskiego ([30]), które pozwoliły na wskazanie związku między strukturą przepływu konwekcyjnego, a geometrią tworzącego się frontu fazowego (kryształ). W niniejszej pracy zdefiniowano dla tej konfiguracji dwa eksperymentalne wzorce, jeden dla izotermicznego procesu krzepnięcia wykorzystując jako medium wodę destylowaną. Drugi wzorec, zdefiniowany dla poliglikolu, dotyczy nie-izotermicznego procesu krzepnięcia, charakteryzującego się formowaniem się na powierzchni międzyfazowej struktur dendrycznych. Z uwagi na obserwowany dla tej konfiguracji silny wpływ termicznych warunków brzegowych oraz własności termofizycznych użytych cieczy na strukturę przepływu, proponowane wzorce stanowią przydatny element walidacji procesu krzepnięcia w obecności konwekcji naturalnej.

### 2.3.3. Pochylony prostopadłościan (PBP i PZP)

Modelowanie fazy wypełniania komory odlewniczej przeprowadzono na stanowisku pomiarowym składającym się z nachylonego prostopadłościennego kanału z dwiema ściankami izotermicznymi. Model umożliwia symulacje prostego, quasi-dwuwymiarowego zjawiska krzepnięcia między ściankami modelu formy odlewniczej. Wybór takiej geometrii naczynia podyktowany był dążeniem do maksymalnego uproszczenia problemu, tak by w pełni wykorzystać możliwości stosowanych optycznych metody pomiarowych. W trakcie badań modyfikowano wymiary naczynia i jego nachylenie, uzyskując różne reżimy procesu zalewania. Ogólną koncepcję układu schematycznie przedstawiono na rys. 7.

Podstawowy wariant wybranej geometrii naczynia (PBP) składa się z kanału utworzonego między dwiema bocznymi ściankami z pleksiglasu (1), oraz metalowymi ściankami górną i dolną (2) i (3). Naczynie zamykają dwie ścianki wykonane z pleksiglasu. W dolnej ściance znajduje się otwór, przez który wpływa ciecz, a górne zamknięcie pozwala na wprowadzenie płaszczyzny świetlnej z lampy oświetlającej. W drugim wariantcie (PZP), kształt wewnętrznej komory wypełnianej cieczą modelową był dodatkowo zmodyfikowany przez umieszczenie w niej dwóch wykonanych z pleksiglasu przegród P-I i P-II.



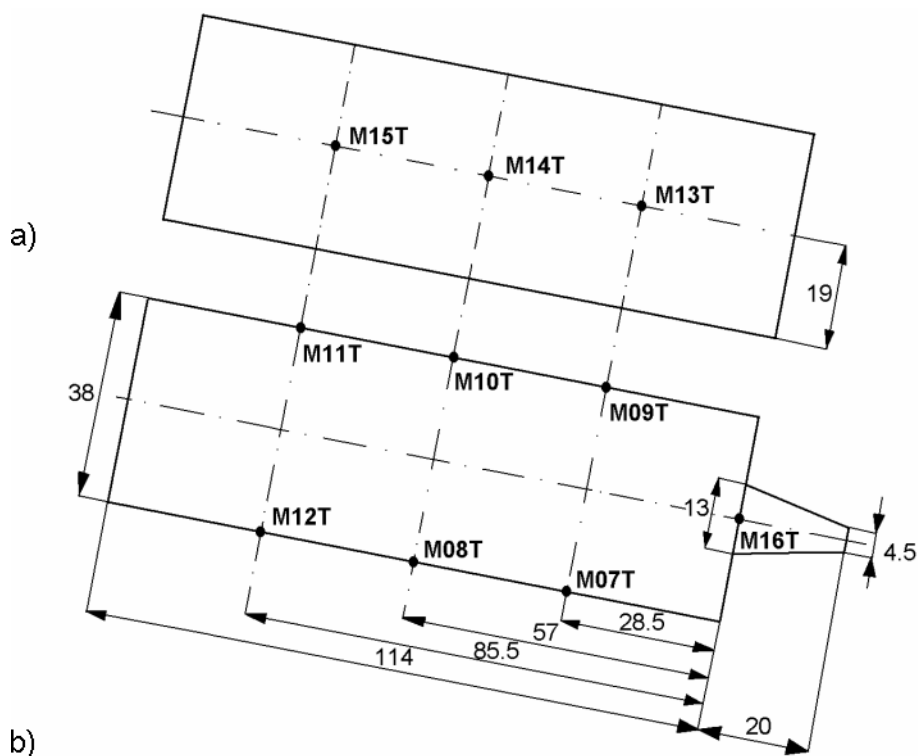
Rys. 7. Pochylony prostopadłościan (PBP): (1) ścianki z pleksiglasu, (2) i (3) okładki metalowe z wewnętrznym kanałem dla cieczy chłodzącej; przegrody P-I, P-II (wariant PZP),  $\alpha$  - kąt pochylenia

Tabela 1. Wymiary pochylonego prostopadłościanu (PBP i PZP, porównaj rys. 7)

Wariant	$S_z$	$S_w$	$W_z$	$W_w$	$W_p$	$H_p$	$S_p$	$g_p$	$g_2$	$g_3$
1	53	38	84	38	32.5	132	34.6	5	7	16
2	53	38	86	38	32.5	132	34.6	5	24	0

Gorąca ciecz modelowa wypełniająca kanał mogła być obserwowana przez przezroczyste ścianki boczne wykonane z pleksiglasu, usytuowane pionowo w przekroju A-A (rys. 7). Otwór wlewowy, umieszczony w ścianie równoległej do przegród, widoczny jest na przekroju B-B i w rzucie aksonometrycznym. Ścianki metalowe wykonane z płyty miedzianej wyposażono w kanałiki (uwidocznione w przekroju A-A) do stabilizacji temperatury przy pomocy obiegu cieczy z termostatu. Początkowo system chłodzący składał się z miedzianej okładki (2) i stykającej się z płytką (3) wykonaną z aluminium. Ten układ okazał się jednak nieefektywny i został zastąpiony okładkami wykonanymi tylko z miedzi.

W komorę wmontowano łącznie 10 termopar typu K (Ni-NiCr) w miejscach pokazanych na rys. 8. Po trzy termopary typu K umieszczono w pionowej płaszczyźnie centralnej każdej ze ścianek chłodzonych w taki sposób, by złącza pomiarowe znajdowały się w odległości  $1\text{ mm}$  od powierzchni stykającej się z cieczą modelową. Kolejne trzy termopary umieszczone w tylnej ścianie (w stosunku do kamery) służyły do pomiaru temperatury cieczy na styku z naczyniem. Ostatnią termoparę umieszczono w osi otworu wlewowego. Stabilizację temperatury zapewniają sprzężone z termostatem czujniki oporowe Pt100 umieszczone w ściankach metalowych.



Rys. 8. Schemat rozmieszczenia czujników temperatury w komorze zalewowej (porównaj Tabela 2)

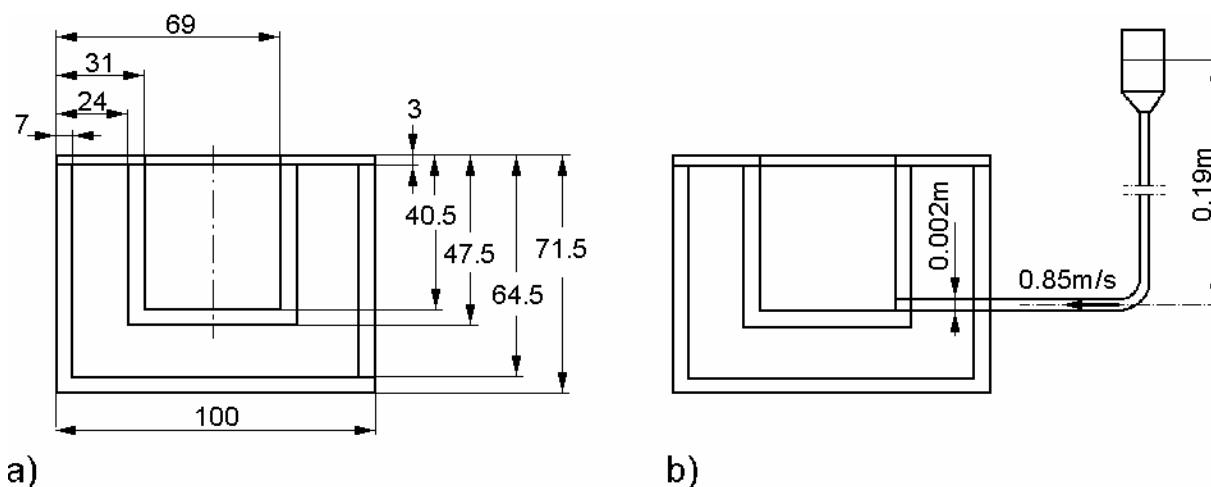
Tabela 2. Legenda czujników temperatury rozmieszczonych w komorze zalewowej

Symbol	Opornik/Termopara	Usytuowanie
M01R	Pt-100	w zbiorniku termostatu ścianki dolnej
M02R	Pt-100	w zbiorniku termostatu ścianki górnej
MCJ	Pt-100	mierzący temperaturę otoczenia
M07T	typ K	w dolnej okładce metalowej
M08T	typ K	w dolnej okładce metalowej
M09T	typ K	w górnej okładce metalowej
M10T	typ K	w górnej okładce metalowej
M11T	typ K	w górnej okładce metalowej
M12T	typ K	w dolnej okładce metalowej
M13T	typ K	w ściance tylnej z pleksiglasu względem kamery
M14T	typ K	w ściance tylnej z pleksiglasu względem kamery
M15T	typ K	w ściance tylnej z pleksiglasu względem kamery
M16T	typ K	w otworze wlotowym

#### 2.3.4. Sześcián otwarty (SP)

Proces krzepnięcia w otwartych naczyniach wypełnianych cieczą od dołu jest typowy dla wielu procesów odlewniczych. Modelowanie takiego procesu przeprowadzono w naczyniu o kształcie sześciennym pokazanym na rys. 9, będącym prostą modyfikacją wcześniej omawianego sześcianu z izotermiczną ścianką górną (SIG). Geometrię otwartego sześcianu (SP) wybrano dla przeprowadzenia symulacji procesu zalewania formy odlewniczej, oddawania ciepła, stygnięcia oraz wielopłaszczyznowego krzepnięcia odlewu. Prowadzone przy jego użyciu badania pozwalają na określenie wzorcowych procesów zalewania od dołu i jednoczesnego tworzenia się frontu

krzepnięcia na pięciu ściankach naczynia. Podczas fazy wypełniania, szczególnie z większą prędkością, obserwowano silną cyrkulację cieczy, przechodzącą często w przepływ turbulentny i wyraźną deformację powierzchni swobodnej wywołaną napływającym strumieniem cieczy.



Rys. 9. Schemat otwartego naczynia w kształcie sześciangu (SP) stosowanego do modelowania procesu napelniania i krzepnięcia, a) gabaryty, b) układ zalewowy

Wymiary wykorzystywanego naczynia są identyczne jak dla konfiguracji SIG (rys. 5 i 6), jedynie usunięto górną ściankę metalową a w prawym dolnym narożu dna naczynia wykonano otwór wlewy o średnicy 2 mm. Przepływy obserwowano przez przezroczyste ścianki boczne i przez otwartą górną powierzchnię. Komorę zanurzano w kąpeli wodnej o temperaturze poniżej temperatury krzepnięcia cieczy. Strumień ciepła oddawanego do zewnętrznej kąpeli jest odpowiedzialny za tworzenie się na wszystkich 5 ściankach komory fazy stałej. Pomiar temperatury cieczy wykonywano w trzech wybranych punktach na ściance bocznej. Rozmieszczenie termopar było identyczne, jak w opisanym wcześniej naczyniu typu SIG (rys. 6). Badania przeprowadzone dla tej konfiguracji obejmowały głównie pomiar kształtu frontu fazowego i struktury pól prędkości podczas wypełniania komory cieczą i podczas procesu krzepnięcia.

## 2.4. Ciecze modelowe i materiały stosowane w badaniach

Poniżej opisane są aspekty związane z doбором materiałów – zarówno cieczy modelowych, jak i materiałów konstrukcyjnych samych naczyń. Wybór obu grup materiałów w zasadniczy sposób wpływa na skuteczność przeprowadzanych badań. Dokładna znajomość własności termofizycznych stosowanych materiałów i cieczy jest warunkiem koniecznym dla wykorzystania zdefiniowanych wzorców eksperymentalnych do atestacji symulacji numerycznych. Dlatego ograniczono się tylko do substancji i materiałów, których własności są dobrze opisane w literaturze.

Biorąc pod uwagę wcześniej opisywane charakterystyki stosowanych metod pomiarowych zdecydowano, aby jako ciecze modelowe użyć: wodę destylowaną, succinonitril (wzór chemiczny  $\text{SCN NCCH}_2 \text{CH}_2 \text{CN}$ ), glikol polietylenowy (wzór chemiczny  $\text{H}(\text{OCH}_2 \text{CH}_2)_n \text{OH}$ ) i glicerynę (wzór chemiczny  $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}_3$ ). Podstawowe własności tych cieczy zebrano w Tabeli 3. Wybór tych cieczy podyktowany był dwiema podstawowymi cechami: przezroczystość i niska temperatura krzepnięcia. W przypadku wody jej dodatkową zaletą jest niska lepkość, pozwalająca na symulacje typowych dla wypełniania form odlewniczych przepływów z wysoką liczbą Reynolds'a. Wybór glikolu polietylenowego (dalej w skrócie oznaczanego przez PEG 900) i succinonitrylu (SCN) został podyktowany charakterem przejścia fazowego, z typowym dla krzepnięcia metali narastaniem dendrytów i efektem przechłodzenia. Nie bez znaczenia jest również fakt, że obie wybrane ciecze są opisane w literaturze jako tzw. substancje analogowe, używane do modelowania procesów związanych z krzepnięciem.

Tabela 3. Własności termofizyczne cieczy modelowych i materiałów konstrukcyjnych naczyń badawczych

Wartości tabelaryczne	Wielkość fizyczna	Symbol	Jednostki	Woda <sup>1)</sup>	PEG 900 <sup>1)</sup>	Gliceryna <sup>2)</sup>	SCN <sup>1)</sup>	Pleksyglas	Miedź <sup>5)</sup>	Aluminium
	Gęstość		$\rho_l$	[kg m <sup>-3</sup> ]	1000.000	1100.000	1263.000	985.000		
$\rho_s$								1180.000	8933.000	2702.000
Ciepło właściwe przy stałym ciśnieniu		$c_{pl}$	[Jkg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ]	4217.800	2260.000	2372.000	2000.000			
		$c_{ps}$						1500.000	385.000	903.000
Przewodność cieplna		$k_l$	[Wm <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ]	0.552	0.188	0.285	0.223			
		$k_s$						0.200	401.000	237.000
Współczynnik rozszerzalności cieplnej		$\beta$	[K <sup>-1</sup> ]	-0.070x10 <sup>-3</sup>	0.760x10 <sup>-3</sup>	0.480x10 <sup>-4</sup>	0.810x10 <sup>-3</sup>			
Temperatura topnienia		$T_l$	[K]	273.000	308.000		329.000			
		$T_s$			306.000		327.000			
Lepkość kinematyczna		$\nu$	[m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]	1.8x10 <sup>-6</sup>	108.3x10 <sup>-6</sup>	1180x10 <sup>-6</sup>	2.6x10 <sup>-6</sup>			
Ciepło utajone		$\lambda$	[Jkg <sup>-1</sup> ]	335.0x10 <sup>3</sup>	167-196x10 <sup>3</sup>		46.5x10 <sup>3</sup>			
Wartości w obliczeniach numerycznych	Wielkość fizyczna	Symbol	Jednostki	Woda <sup>1)</sup>	PEG 900 <sup>1)</sup>	Gliceryna <sup>3)</sup>		Pleksyglas	Powietrze <sup>4)</sup>	
	Gęstość		[kg m <sup>-3</sup> ]	999.800	1100.000	1271.900			1.225	
				$\rho_s$	916.800	1100.000				1180.000
	Ciepło właściwe przy stałym ciśnieniu		[Jkg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ]	4212.000	2260.000	2298.000			1006.430	
				$c_{ps}$	2116.000	2260.000				1388.690
	Przewodność cieplna		[Wm <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ]	0.566-0.572	0.188	0.284			0.0242	
				$k_s$	2.260	0.188				0.195
	Współczynnik rozszerzalności cieplnej		$\beta$	[K <sup>-1</sup> ]	wzór (2.2)	0.00076	0.00047			
	Temperatura topnienia		[K]	273.000	308.000					
				$T_s$	273.300	306.000				
Lepkość dynamiczna		$\nu$	[kg m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]	1.789x10 <sup>-3</sup>	tabela 4	wzór (2.1)			1.789x10 <sup>-5</sup>	
Ciepło utajone		$\lambda$	[Jkg <sup>-1</sup> ]	335000.000	167-190x10 <sup>3</sup>					
Napięcie powierzchniowe		$\sigma$	[Nm <sup>-1</sup> ]	0.075		0.065				

Wartości dla temperatury: 1) topnienia; 2) 293K; 3) 298K; 4) 288K; 5) 300K

Drugą grupą są materiały konstrukcyjne użyte do budowy naczyń badawczych. Także i w tym przypadku warunek przezroczystości ścianek stanowił istotne kryterium selekcji. Dodatkowo dla naczyń typu PZP, PBP i SIG istotny jest przepływ ciepła przez przezroczyste ścianki naczyń. Wybrano pleksiglas jako podstawowy materiał budowy naczyń, uznany za optymalny ze względu na przezroczystość, łatwość obróbki mechanicznej i dobrze znane własności termo-fizyczne. Do konstrukcji termostatowanych ścianek metalowych stosowano aluminium lub miedź. Jako ciecz chłodzącą w obiegu termostatów opływająca naczynia typu PZP i PBP stosowano wodę lub przezroczysty glikol etylenowym.

W Tabeli 3 umieszczono komplet danych materiałowych cieczy modelowych i materiałów konstrukcyjnych użytych w badaniach. Pierwsza część tabeli obejmuje wartości termofizyczne używane dla opracowywania założeń planowanych eksperymentów. Druga część tabeli prezentuje wartości używane do wykonania obliczeń numerycznych. Widoczne różnice wynikają z faktu, że korzystano z różnych źródeł: tablic, danych fabrycznych i Internetu. Różnorodność danych, a równocześnie brak dostępu do bazy z kompletem wartości dla wymaganych własności powoduje, że należy mieć ograniczone zaufanie do wiarygodności wykorzystywanych źródeł informacji. Między innymi z tego powodu w dwóch przypadkach wykonywano własne pomiary. Wcześniejsze badania wykonane za pomocą aparatu płytowego dotyczyły pomiaru współczynnika przewodności cieplnej pleksiglasu. Zmierzona wartość  $k=0.195$  W/(mK) różni się nieco od wartości katalogowej  $k=0.2$  W/(mK). Silne zmiany lepkości i gęstości niektórych cieczy w funkcji temperatury wymagają szczególnej uwagi. Dla gliceryny i poliglikolu (PEG 900) zależność lepkości kinematycznej w funkcji temperatury wyznaczono wiskozymetrem Hepplera. Dla materiału PEG 900 zmierzone wartości (Tabela 4) implementowano bezpośrednio w symulacjach numerycznych. Zmierzone zmiany lepkości gliceryny przybliżono wielomianem (Sobiecki [58])

$$\mu(T) = 24301.95 - 309.8748 \cdot T + 1.482784 \cdot T^2 - 0.003155546 \cdot T^3 + 2.5198E - 06 \cdot T^4, \quad (2.1)$$

który później użyto w obliczeniach numerycznych. Anomalne zmiany gęstości wody w funkcji temperatury zostały również opisane wielomianem, zdefiniowanym na podstawie danych literaturowych (Kowalewski [33]):

$$\rho(T) = -5150.43 + 78.48118 \cdot T - 0.3769827 \cdot T^2 + 8.10902 \cdot 10^{-4} \cdot T^3 - 6.621398 \cdot 10^{-7} \cdot T^4 \quad (2.2)$$

Tabela 4. Zmiany wartości lepkości kinematycznej PEG-900 w funkcji temperatury

Temperatura [K]	Lepkość kinematyczna $\times 10^6$ , [m <sup>2</sup> /s]
307	108.311
308	103.216
309	98.300
310	93.875
311	89.979
312	86.188
313	82.397
314	78.383
315	75.295
316	72.171
317	69.479
318	66.725
319	63.895



### 3. Numeryczne modelowanie procesów krzepnięcia

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

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

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

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

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

### 3.1. Postawienie problemu dla celów numerycznej mechaniki płynów

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

- zasady zachowania masy

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

- zasady zachowania pędu

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

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

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

- zasady zachowania energii

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

### 3.1.1. Modelowanie procesu krzepnięcia

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

### 3.1.2. Modelowanie przepływów ze swobodną powierzchnią

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Człon ten zależy od napięcia powierzchniowego  $\sigma$ , gradientu frakcji objętościowej  $f_l$ , lokalnej krzywizny powierzchni swobodnej  $\gamma$  oraz gęstości  $\rho$ . Łatwo zauważyć, że dla wszystkich komórek obliczeniowych wypełnionych tylko przez jedną z faz, człon  $F_\sigma$  znika z powodu zerowego gradientu frakcji objętościowej.

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

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

### 3.2. Modele fizyczne i metody wykonywania symulacji procesów odlewniczych

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

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

### 3.3. Metody dyskretyzacji

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

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

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

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

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

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

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

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

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

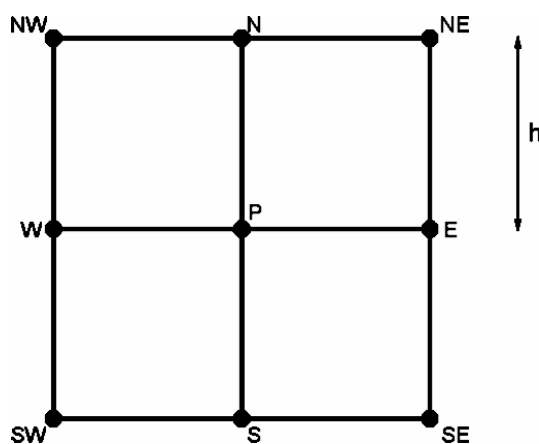
$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x \partial y} = \frac{\Phi_{SW} + \Phi_{NE} - \Phi_{NW} - \Phi_{SE}}{4h^2} \quad (3.3.5)$$

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

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

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

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



Rys. 10. Przykładowe rozmieszczenie punktów obliczeniowych w aproksymacji DAM



## 4. Charakterystyka programów symulacyjnych

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

### 4.1. Programy komercyjne dla odlewnictwa

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

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

#### 4.1.1. Modele fizyczne i metody wykonywania symulacji

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

##### MAGMA

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

##### NOVAFLOW

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

##### PAM-CAST

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

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

#### PROCAST

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

#### SIMTEC

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

#### VULCAN

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

### 4.1.2. Odwzorowanie geometrii układu odlew-forma

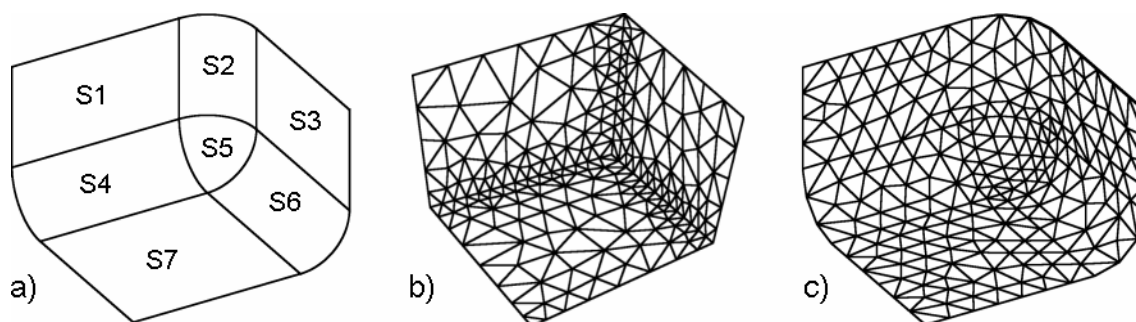
Dla celów symulacyjnych geometria układu odlew-forma podlega uproszczeniom. O tym, które uproszczenia są potrzebne, które dopuszczalne, a które nieuniknione, decyduje doświadczenie osoby wykonującej obliczenia. Doświadczony użytkownik programu może przez dobór tolerancji automatycznie pomijać szczegóły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

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

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

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

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



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

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

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

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

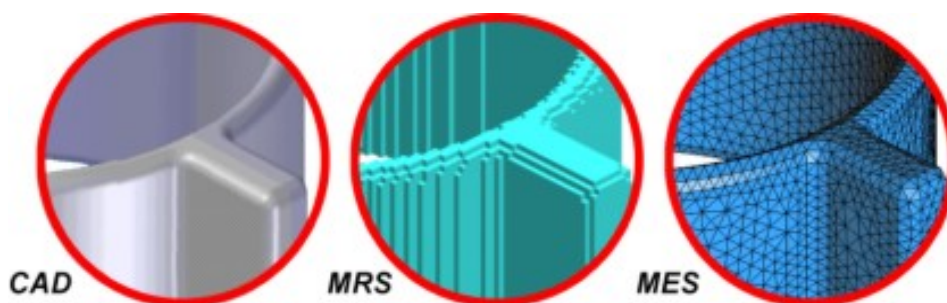
Dokładność analizy geometrii należy różnicować (np. dla krawędzi i powierzchni), by automatycznie upraszczać modele. Jednak eliminując nieistotne szczegóły, program symulacyjny potraktuje dwa punkty kontrolne (dwie krawędzie lub powierzchnie) jako ten sam element, jeżeli znajdują się zbyt blisko siebie,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

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

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

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

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



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

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

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

#### 4.1.3. Cechy użytkowe programów komercyjnych dla odlewnictwa

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

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

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

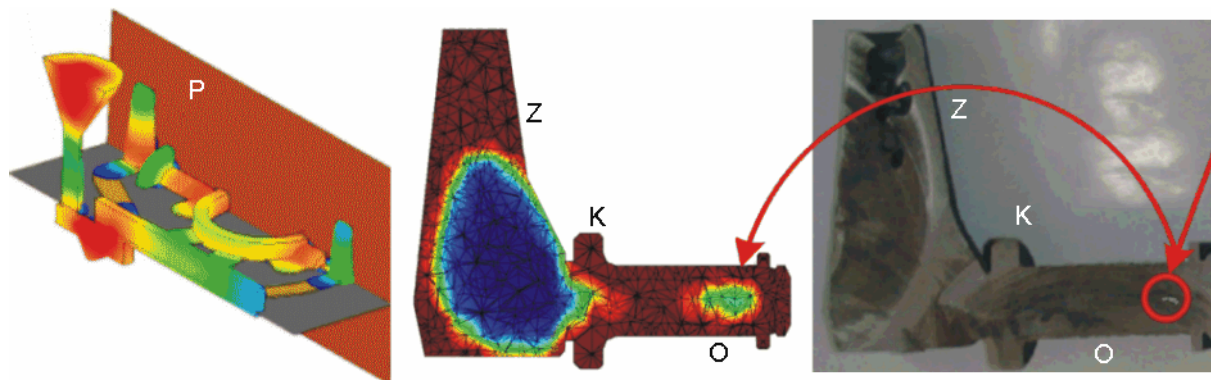
Innym, typowym dla programów odlewniczych, elementem jest możliwość wyboru stosowanej technologii. Przed rozpoczęciem obliczeń symulacyjnych użytkownik musi określić rodzaj odlewania – nisko- lub wysokociśnieniowe, grawitacyjne, z wypalaniem modelem (ang. *lost foam*), w formie piaskowej, kokilowej,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

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

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

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

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



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

## 4.2. Uniwersalne programy obliczeniowe i akademickie

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

### FLUENT (metoda objętości skończonych)

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

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

#### FIDAP (metoda elementów skończonych)

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

#### FRECON3V, ICE3D (metoda różnic skończonych)

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

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

### SOLVSTR (metoda różnic skończonych)

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

### SOLVMEF (metoda bezsiatkowa)

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



## 5. Przebieg eksperymentów

Głównym celem przeprowadzonych prac eksperymentalnych było zebranie ilościowych informacji o polach prędkości, temperatury oraz położeniu granicy przemiany fazowej dla wybranych materiałów i naczyń, przy różnych warunkach przeprowadzania badań symulujących zjawiska charakterystyczne dla procesów odlewniczych. Na tej podstawie starano się określić wzorce służące do weryfikacji modeli numerycznych procesów przepływowych z przemianą fazową. Najważniejsze przypadki przedstawiono w Tabeli 5 zawierającej dane charakterystyczne dla każdej konfiguracji. Przy znacznej ilości wyników niezbędne było skondensowanie formy zestawienia i wprowadzenie szeregu oznaczeń wyjaśnionych w legendzie pod tabelą.

By uniknąć potrzeby wielokrotnego definiowania konfiguracji i warunków eksperymentu, zarówno eksperymenty fizyczne, jak i numeryczne, są ponumerowane według numerów wierszy Tabeli 5. Numer wiersza tabeli definiuje komplet danych używanych do wykonania obliczeń prezentowanych w następnym rozdziale. W miarę potrzeb w opisie powtarzana jest tylko niezbędna część informacji z tabeli.

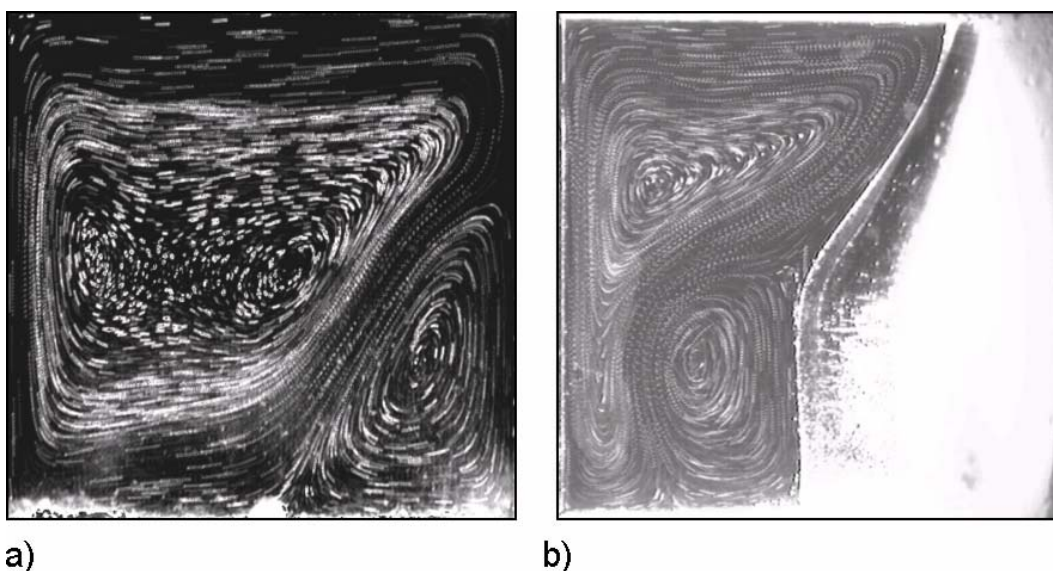
### 5.1. Sześcian grzany różnicowo (SRG)

Z szerokiego zakresu przeprowadzonych wcześniej badań eksperymentalnych [5] jako wzorzec do porównań z obliczeniami numerycznymi wybrano eksperymenty w sześcianie grzany różnicowo, oznaczonym skrótem SRG (rys. 3). W eksperymencie tym badano zjawisko przepływu termicznego i krzepnięcia wody destylowanej. Przepływ wymuszano różnicą temperatur między przeciwległymi, pionowymi ściankami wykonanymi z aluminium i podłączonymi do termostatów. Sześcian otoczony był powietrzem atmosferycznym o temperaturze  $298K$ . Eksperyment w wypełnionym naczyniu rozpoczęto od stanu rozwiniętej konwekcji naturalnej, wymuszonej przez temperatury ścianek: ciepłej  $T_h = 283K$  i zimnej  $T_c = 273K$ . Wartość temperatury ścianki ciepłej nie zmieniała się w ciągu całego doświadczenia. Po ustabilizowaniu się ruchu konwekcyjnego wody, temperaturę ścianki zimnej zmieniano do poziomu  $T_c = 263K$  i rozpoczynano rejestrację obrazów dla dalszego procesu. Ustalony w ten sposób warunek początkowy dla procesu krzepnięcia nazwano „*startem ciepłym*”, w przeciwieństwie do tzw. „*startu zimnego*” oznaczającego warunek początkowy z zerowym polem prędkości i jednorodną temperaturą płynu.

Zgromadzone podczas wcześniejszych badań ([5, 30, 33]) wzorcowe pola prędkości i temperatury oraz położenia frontu przemiany fazowej wykorzystano do przeprowadzenia testów wiarygodności komercyjnych i własnych kodów numerycznych. Dla porównań zdefiniowano dwa wzorce eksperymentalne:

- Stacjonarny przepływ konwekcyjny wody dla temperatur ścianek izotermicznych  $T_h = 283K$  oraz  $T_c = 273K$ ,
- Niestacjonarny proces krzepnięcia dla temperatur ścianek izotermicznych  $T_h = 283K$  oraz  $T_c = 263K$ .

Obraz konwekcji naturalnej wody w zakresie temperatur powodujących występowanie anomalii gęstości zasadniczo różni się od obrazu konwekcji naturalnej standardowych płynów (por. rys. 14). Ciecz w otoczeniu ciepłej ścianki (lewa strona naczynia) zachowuje się „normalnie”, tzn. jej gęstość maleje z temperaturą. Ogrzane warstwy wody przemieszczają się w związku z tym wzdłuż ciepłej ścianki w kierunku ścianki górnej. Dalszy kierunek przepływu nadaje geometria naczynia i ciepłe masy płynu docierają do górnej krawędzi ścianki zimnej. Anomalia zmian gęstości w temperaturach poniżej  $277K$  powoduje powstanie drugiej, odwrotnej cyrkulacji w pobliżu zimnej ścianki, przemieszczającej ciecz w przeciwnym kierunku. Oddziaływanie obu wirowych struktur przepływu stanowi interesujący i zarazem trudny do symulacji numerycznych wzorzec eksperymentalny. Nasze wcześniejsze badania wskazały dużą czułość tworzącej się struktury przepływu na termiczne warunki brzegowe. Z tego względu eksperyment z nietypowym zachowaniem cieczy stanowi idealny wzorzec służący do wykrywania wad symulacji numerycznych.



Rys. 14. Tory cząstek dla wody zamarzającej w geometrii SIG : (a) stacjonarna konwekcja naturalna; (b) proces krzepnięcia zarejestrowany po 6000s

W pracach [5] i [52] zebrano szczegółowe informacje dotyczące położenia granicy faz, pól temperatur i prędkości oraz profili prędkości dla tej geometrii. W niniejszej pracy dane te zostały wykorzystane do zdefiniowania wzorców eksperymentalnych i uwiarygodnienia testowanych modeli i programów numerycznych.

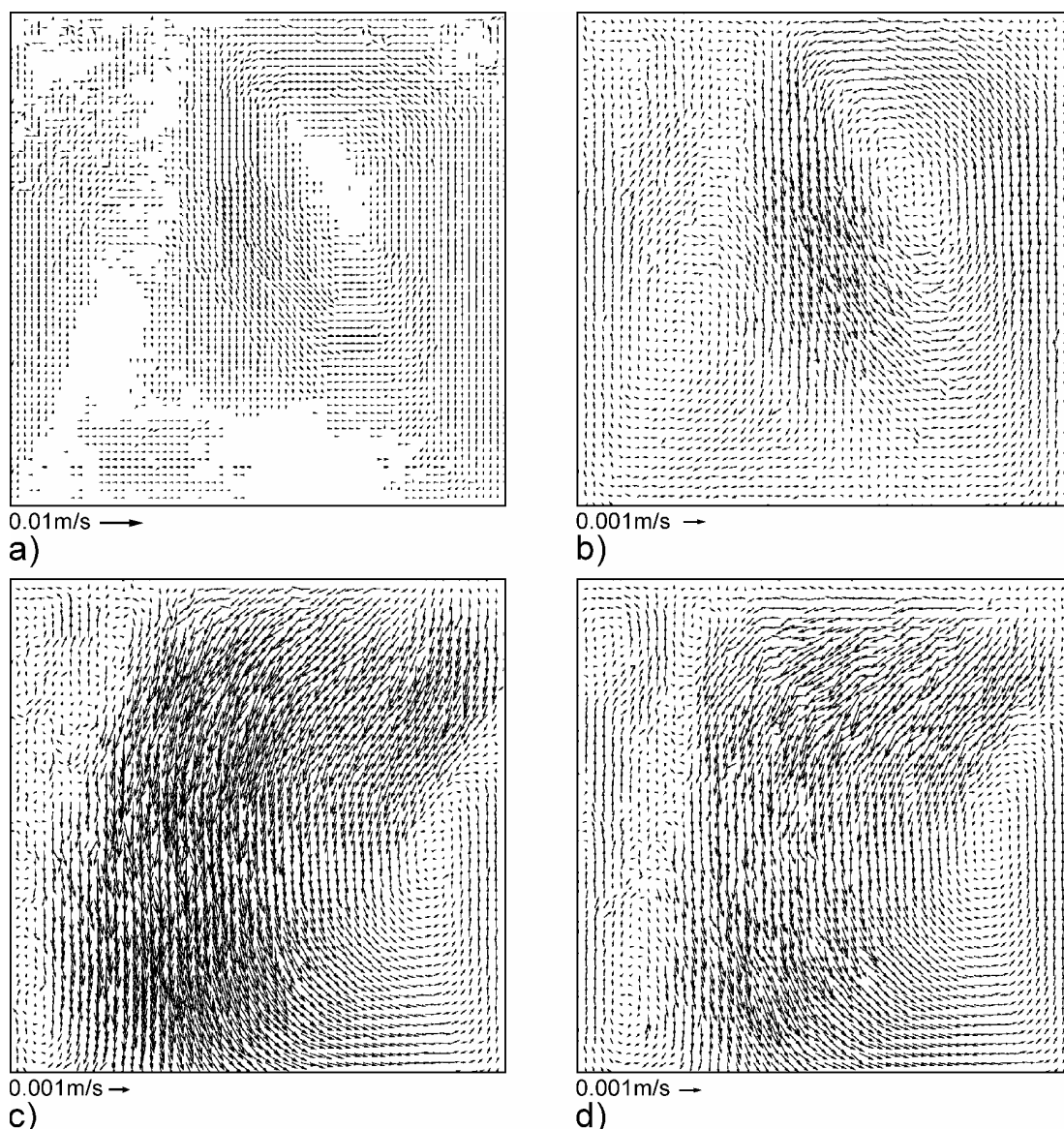
## 5.2. Sześciian z izotermiczną ścianką górną (SIG)

### Naczynie typu SIG wypełnione polyglikolem PEG900

Proces krzepnięcia materiału oznaczonego w skrócie PEG-900 badano eksperymentalnie w sześciennym naczyniu z chłodzoną ścianką górną (SIG). Obrazy przepływu rejestrowano wysokorozdzielczą kamerą f-my Basler, a rozkład temperatur w cieczy mierzono układem termopar. Spośród wszystkich wyników badawczych do omówienia wyselekcjonowano jedynie takie, które pozwalają na jednoznaczną ocenę czynników wpływających na postać pola przepływu i kształt krzepnącego materiału. Pod tym względem na uwagę zasługują eksperymenty oznaczone w Tabeli 5 numerami 3, 4, 5, 6, 11, 13, 16 i 18.

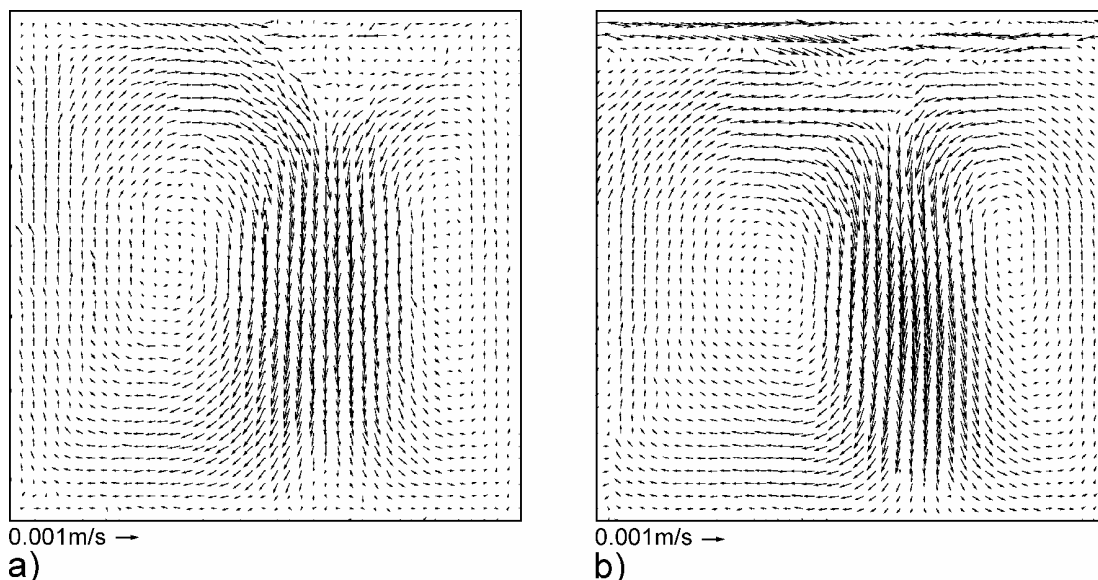
Celem eksperymentu numer 3 było wywołanie ustalonego ruchu konwekcyjnego cieczy modelowej pod wpływem różnicy temperatur ścianki górnej i ścianek bocznych naczynia i przygotowanie warunków dla właściwych rejestracji oznaczonych odpowiednio numerami 4, 5 oraz 6. W trakcie tej fazy badań zwrócono szczególną uwagę na zapewnienie powtarzalności przebiegu procesu. Typowe parametry przepływu stanowiące warunek początkowy dla eksperymentu numer 4 to temperatura zimnej ścianki górnej  $309K$  i temperatura zewnętrznej kąpieli wodnej  $313K$ . Po ustaleniu się przepływu trzy termopary (TP1-3) zanurzone w PEG-900 wskazywały tą samą temperaturę  $312.5K$ , natomiast temperatura cieczy mierzona termoparą TP-4 w odległości  $1\text{ mm}$  od ścianki górnej była równa  $310.1K$ .

Właściwe eksperymenty 4 i 5 rozpoczęły się od zmiany temperatury cieczy termostatu ścianki górnej na  $283K$ . Po schłodzeniu cieczy termostatu obserwowane zmiany przepływu są bardzo powolne. Z uwagi na dużą bezwładność cieplną układu temperatura górnej ścianki zmieniała się stopniowo, osiągając  $305K$  po około  $300s$ . W tym samym czasie termopara TP-4 znajdująca się w przepływie tuż pod powierzchnią ścianki wskazywała temperaturę  $308K$ . Zmiany procesu konwekcyjnego zachodzące w przepływie widocznym w warstwie świetlnej ustawionej w płaszczyźnie centralnej naczynia, rejestrowano w odstępach  $85ms$ , w seriach po pięć obrazów. Obliczenia pól prędkości metodą PIV wykonywano wybierając pary do korelacji z serii pięciu obrazów. Obserwacje torów cząstek, zmian temperatury i analiza pól prędkości otrzymanych w wyniku korelacji obrazów z różnymi odstępami czasu, potwierdziły dużą wrażliwość struktury przepływu na dokładność wypoziomowania naczynia.

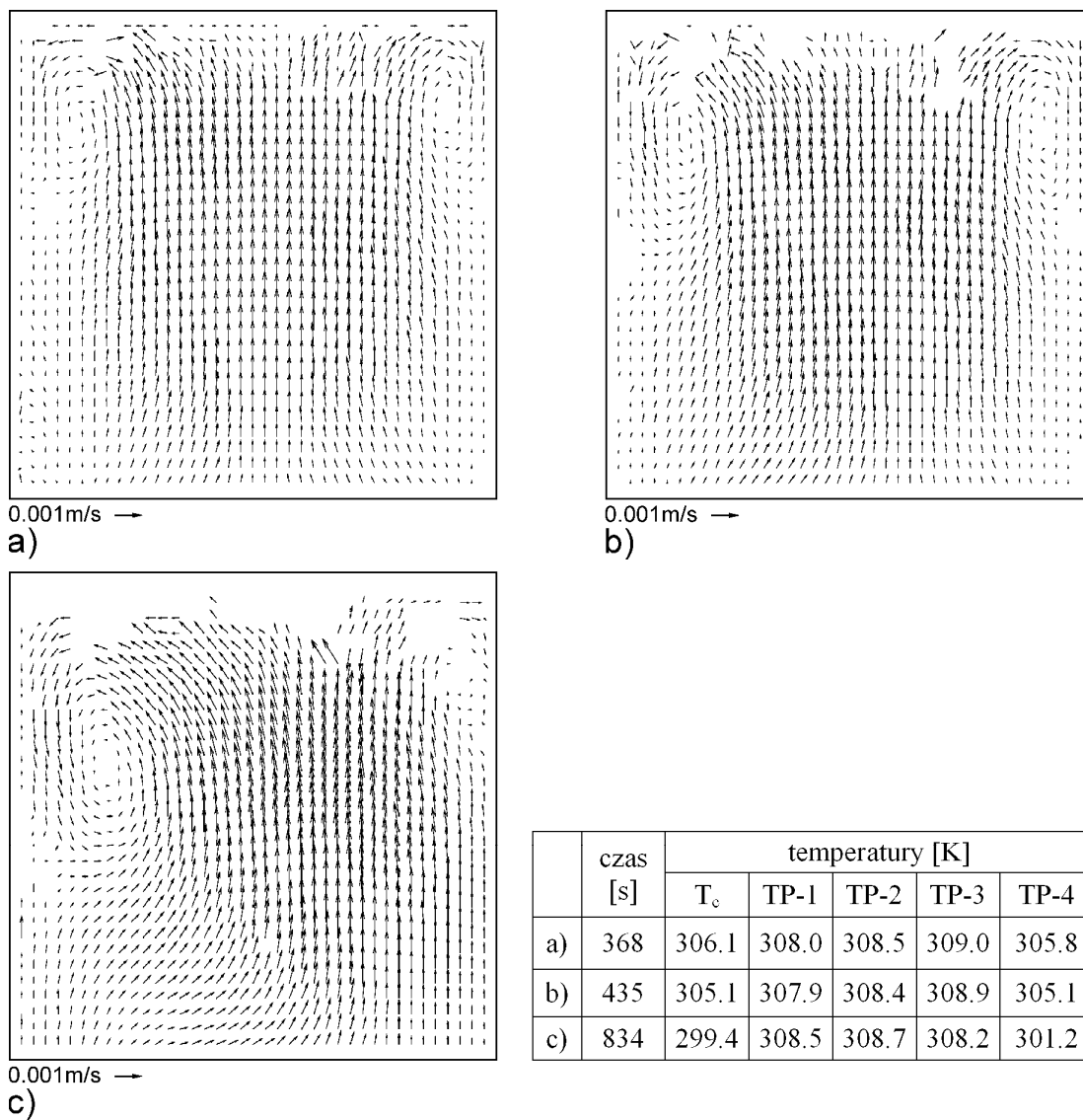


Rys. 15. Asymetria pola prędkości zarejestrowana w naczyniu typu SIG metodą PIV: (a) i (b) faza początkowa pola prędkości wyznaczona dla dwóch odstępów czasowych między korelowanymi obrazami, (c)  $t = 595s$ , (d)  $t = 780s$ . (Tabela 5, #4)

Początkowy rozwój przepływu w eksperymencie #4 przedstawia rys. 15. Obserwowane dwie niesymetryczne cyrkulacje, widoczne na rys. 15b, charakteryzuje dodatkowo silne odchylenie od pionu centralnej osi przepływu. Początkowa asymetria przepływu utrzymuje się w trakcie dalszego rozwoju procesu, ilustrują to pola prędkości rejestrowane po 595s i 780s (rys. 15c-d). Warto zauważyć, że konfiguracja z pionowym gradientem temperatury z zasady charakteryzuje się niestabilnością typu Rayleigh'a - Benarda. W rozpatrywanym przykładzie objawia się to dużą wrażliwością początkowych struktur przepływu na niewielkie zaburzenia symetrii warunków brzegowych i początkowych. W omawianym przypadku zaburzeniem tym okazała się niewielka niedokładność poziomowania naczynia. Obrazy pół prędkości otrzymane dla skorygowanej konfiguracji (por. rys. 16a) potwierdziły, że struktura przepływu w sześcianie jest metastabilna i jej badanie wymaga dużej precyzji eksperymentalnej. Korekta konfiguracji pozwoliła zmniejszyć pochylenie osi głównej strugi, jednak widoczna początkowa asymetria przepływu jest charakterystyczna dla rozwoju konwekcji naturalnej w takiej geometrii. Asymetria przepływu pozostaje nadal widoczna po 1188s (rys. 16b), kiedy temperatura górnej ścianki obniżyła się już do poziomu 294K i rozpoczął się proces krzepnięcia cieczonej.

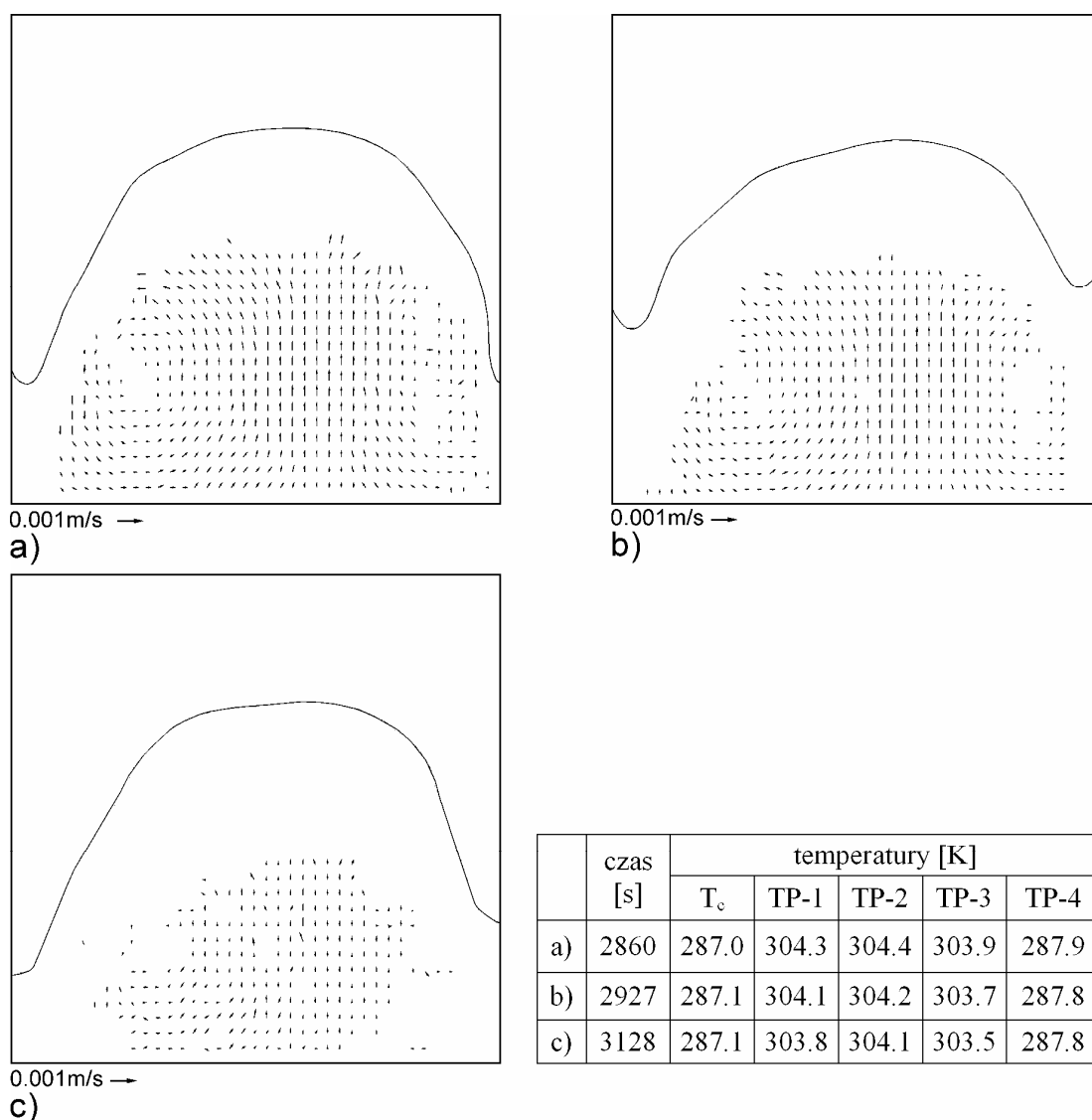


Rys. 16. Pole prędkości zmierzone po korekcie poziomowania chwil czasowych:  
(a) 186s, (b) 1188s. (Tabela 5, #5)



	czas [s]	temperatury [K]				
		T <sub>c</sub>	TP-1	TP-2	TP-3	TP-4
a)	368	306.1	308.0	308.5	309.0	305.8
b)	435	305.1	307.9	308.4	308.9	305.1
c)	834	299.4	308.5	308.7	308.2	301.2

Rys. 17. Pola prędkości w naczyniu typu SIG podczas krzepnięcia PEG-900 (Tabela 5, #6)



Rys. 18. Pola prędkości i granica przemiany fazowej dla PEG-900 w naczyniu typu SIG przy „swobodnych” warunkach termicznych w kąpieli zewnętrznej (Tabela 5, #6)

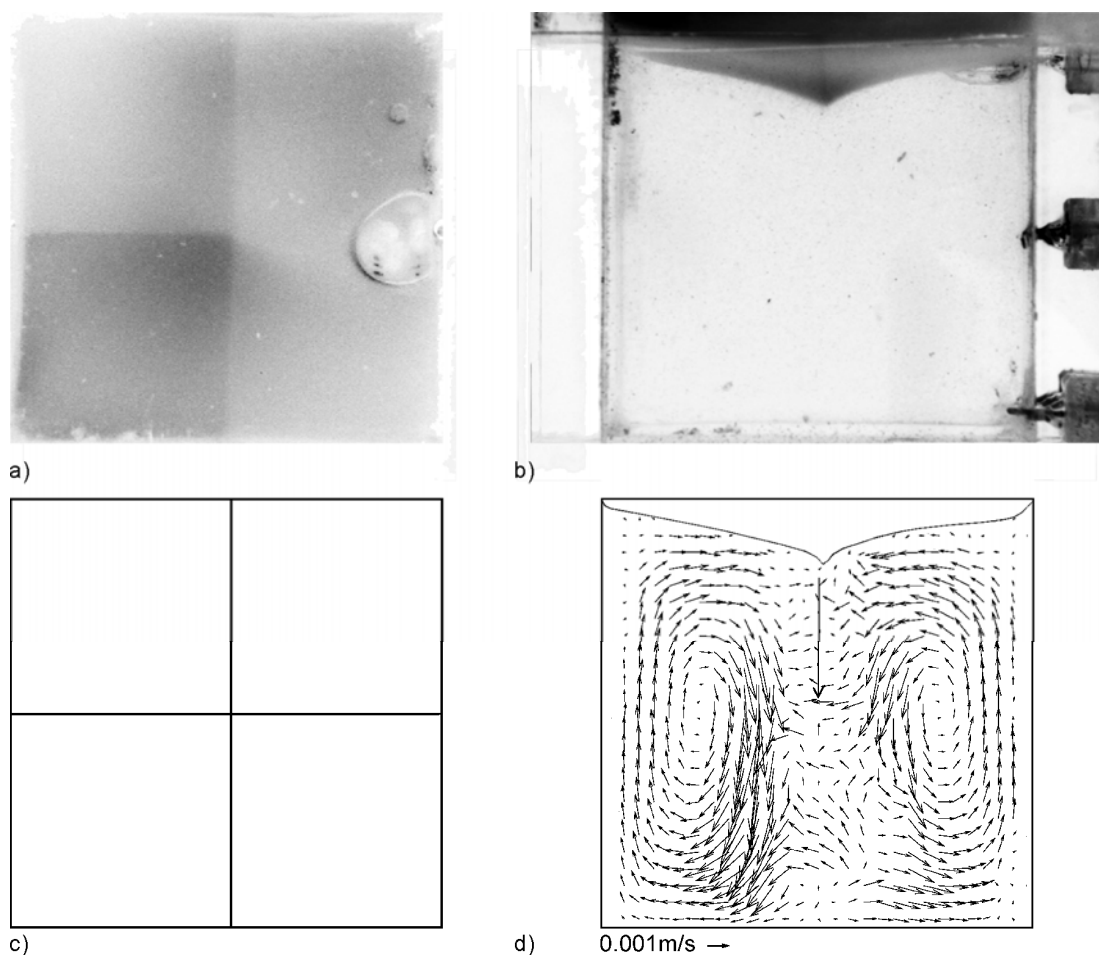
Powtórzenie eksperymentu #5, oznaczone jako #6 w Tabeli 5 potwierdziło uzyskane wcześniej obserwacje. Przeprowadzono też dodatkowy test wpływu „swobodnych” termicznych warunków brzegowych dla bocznych ścianek. Po wstępnym ustaleniu się struktury przepływu (czas 1800s), odcięto zewnętrzny termostat stabilizujący temperaturę zewnętrznej kąpieli. Stopniowy spadek temperatury w całym układzie symuluje schładzanie odlewu w formie. Wybrane pola prędkości zmierzone w płaszczyźnie pokazano w zestawieniu na rys. 17. Istotną cechą obserwowanego procesu jest odwrócenie kierunku cyrkulacji cieczy w stosunku do eksperymentów 4 i 5. Tym razem ciecz poruszała się do góry wzdłuż osi symetrii naczynia. Wywołane jest to postępującym od górnej powierzchni i wzdłuż bocznych ścianek krzepnięciem materiału. Powierzchnia rozdziału faz staje się wklęsła, a ciecz oddzielona od ścianki górnej i części ścianek bocznych warstwą zakrzepłego materiału (por. rys. 18) jest głównie ogrzewana zanikającym strumieniem ciepła od ścianki dolnej.

Zupełnie odmienna struktura przepływu i kształt powierzchni międzyfazowej charakteryzują eksperymenty z termostatowanym przepływem cieczy w kąpieli zewnętrznej. Kształt zakrzepłego materiału PEG-900, zarejestrowany dla takiej konfiguracji w eksperymencie numer 16 (Tabela 5), ma postać ostrosłupa o czterech krawędziach wychodzących ze środków boków podstawy (rys. 19a-b). Ruch zimnej cieczy na osi naczynia generuje symetryczną cyrkulację, podobną do tej, jaką

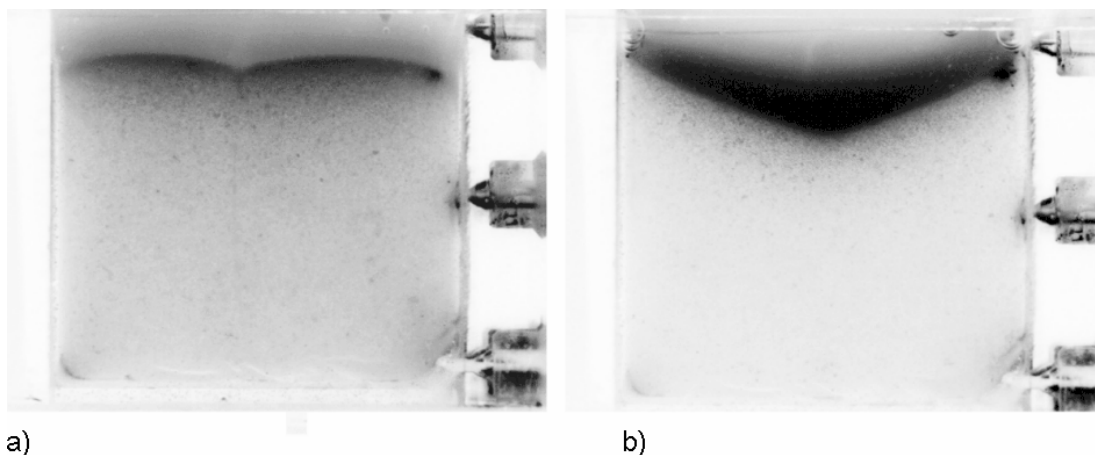
obserwowano również dla zamarzającej wody [30]. Pole prędkości wyznaczone metodą PIV w płaszczyźnie centralnej pokazano na rys. 19d. Widoczne na rysunku błędne wektory na osi symetrii są rezultatem przekroczenia maksimum prędkości dla wybranych parametrów metody PIV. Wobec tego dla środkowej części naczynia wyznaczono na podstawie analizy torów cząstek jeden, reprezentatywny wektor prędkości, o wartości  $0.58 \times 10^{-3} \text{ m/s}$ . Maksymalna zmierzona tą metodą prędkość na osi przepływu wynosiła  $1.3 \times 10^{-3} \text{ m/s}$ .

Inny przykład ukazujący związek kształtu powierzchni rozdziału faz z ruchem konwekcyjnym PEG-900 pokazany jest na rys. 20. W obu przypadkach zachowano tą samą temperaturę ścianki górnej, zmieniając jedynie temperaturę cieczy w kąpieli zewnętrznej. Porównując obrazy frontów fazowych obserwowanych w eksperymentach numer 11 i 13 widać, że zmiana temperatury zewnętrznej cieczy o  $4K$  wydatnie zmieniła kształt powierzchni krzepnącej cieczy.

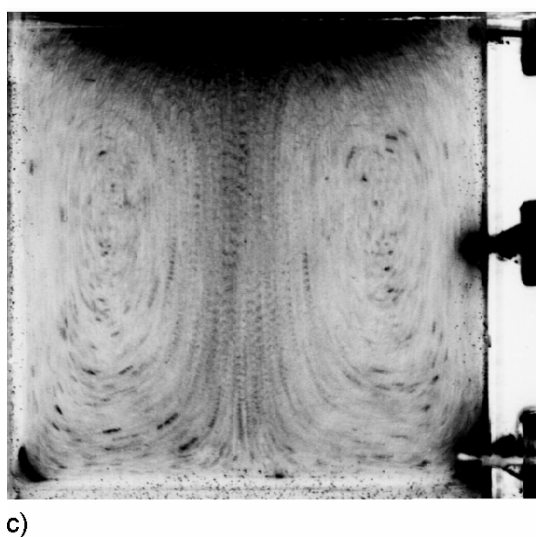
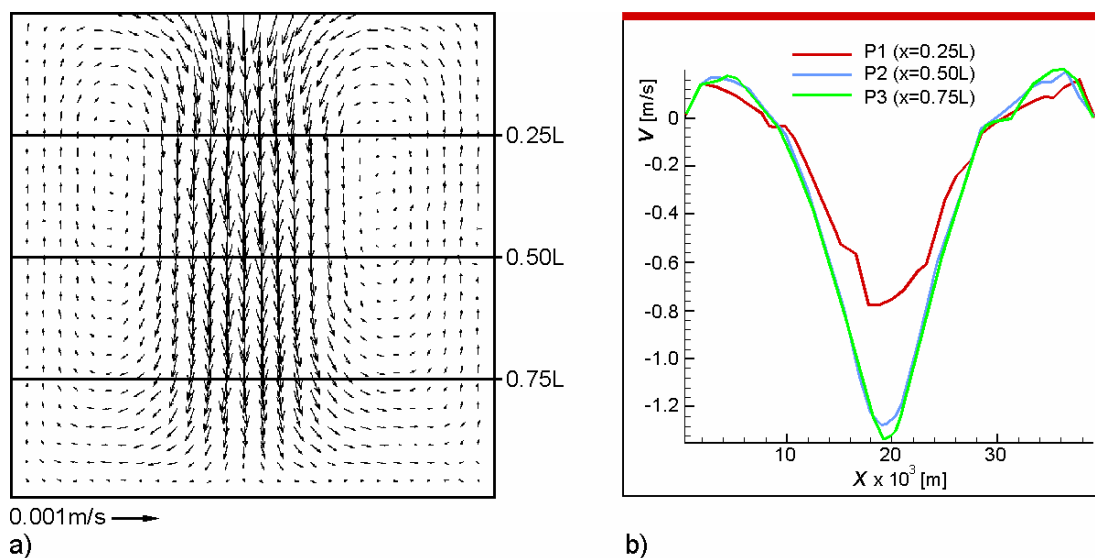
W wyniku wielu doświadczeń ostatecznie zdefiniowano metodykę prowadzenia pomiarów i dzięki temu w dobrze wypoziomowanym naczyniu uzyskano wzorcowy, symetryczny przepływ konwekcyjny. Zmierzone w stanie ustalonym pole prędkości, wybrane profile prędkości, temperatury w punktach kontrolnych oraz tory cząstek ilustruje rys. 21. Ten przypadek porównywano następnie z symulacjami numerycznymi.



Rys. 19. Widok od dołu (a) i z boku (b) oraz linie konturowe (c) i (d) profilów zakrzepłego PEG-900 w naczyniu typu SIG (Tabela 5, #16)



Rys. 20. Wpływ temperatury  $T_{ext}$  na kształt profilu zakrzepłego PEG-900 w naczyniu typu SIG:  
 (a)  $T_{ext}=304K$  (Tabela 5, #11), (b)  $T_{ext}=308K$  (Tabela 5, #13)



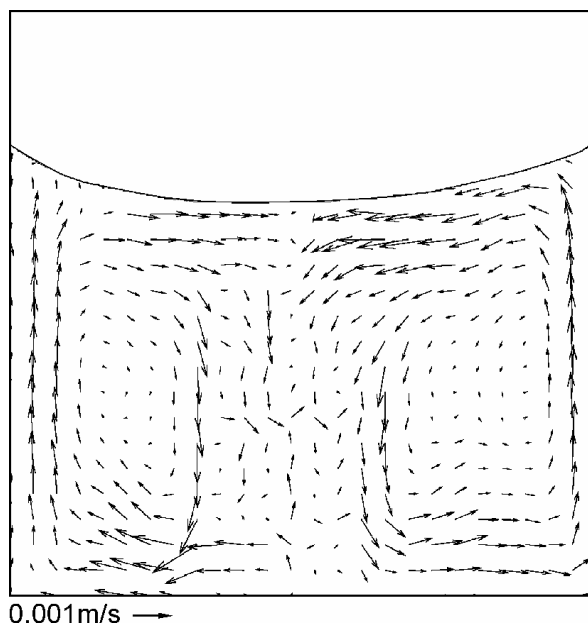
temperatury [K]				
$T_c$	TP-1	TP-2	TP-3	TP-4
302.0	309.0	308.7	308.6	308.5

Rys. 21. Pole prędkości (a), profile prędkości (b) i tory cząstek (c) dla stanu ustalonego konwekcji naturalnej PEG-900 w naczyniu typu SIG (Tabela 5, #18)

### Naczynie typu SIG wypełnione succinonitrem (SCN)

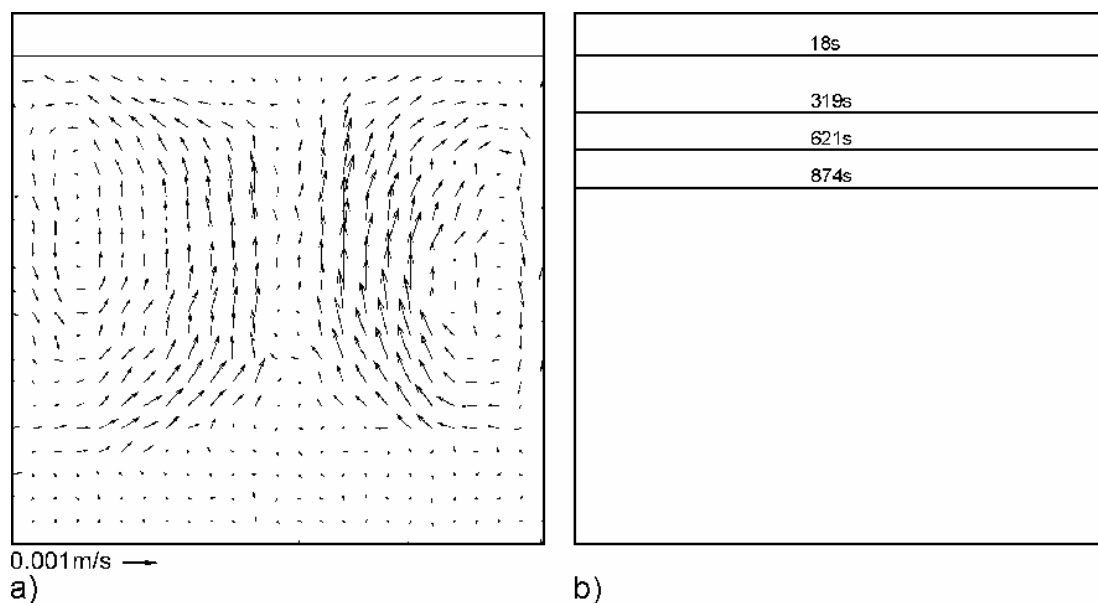
Kolejną serię eksperymentów przeprowadzono dla przepływu w naczyniu typu SIG badając proces krzepnięcia succinonitrylu. Podobnie jak PEG-900, materiał ten należy do grupy substancji charakteryzujących się nieizotermicznym przejściem fazowym i dendryczną strukturą frontu fazowego, stanowiąc pewien odpowiednik procesu krzepnięcia metali. W eksperymencie starano się zrealizować krystalizację kierunkową z płaskim frontem przemiany fazowej. Ten typ krystalizacji ma duże znaczenie technologiczne i jest szczególnie pożądanym w przemysłowym hodowaniu kryształów, zwłaszcza dla potrzeb elektroniki. Stwierdzono, że uzyskanie regularnego frontu krzepnięcia dla tego materiału wiąże się z szeregiem komplikacji. Krzepnięcie succinonitrylu wymaga znacznego przechłodzenia cieczy. Jest to w dużej mierze spowodowane niskim przewodnictwem cieplnym zestalonego materiału, co skutecznie hamuje przyrost fazy stałej na zimnej ścianie. W rezultacie kształt zakrzepłego succinonitrylu zależy bardzo od warunków termicznych na ściankach naczynia.

Celem eksperymentu oznaczonego w Tabeli 5 numerem 25 było zbadanie wpływu termicznych warunków brzegowych na procesy przepływowe w stanie ustalonej konwekcji towarzyszącej krzepnięciu SCN. Stabilna warstwa zakrzepłego pod górną ścianką materiału została wytworzona przy temperaturze ścianki górnej  $298K$  i temperaturze kąpieli  $333K$ . W osiągniętym stanie ustalonym obserwowano konwekcyjny ruch ciekłego succinonitrylu. Zakrzepły materiał był opłukiwany przez ciepłą ciecz w pobliżu ścianek bocznych i w efekcie jego powierzchnia przypominała wypukłą czaszę. Faza stała dobrze izolowała przepływ od chłodzonej ścianki górnej powodując, że temperatura wewnątrz fazy ciekłej w niewielkim stopniu różniła się od temperatury pięciu ścianek bocznych. Termopary wskazywały na powierzchni wewnętrznej ścianki sześcianu temperatury:  $TP1 = 332.4K$ ,  $TP2 = 330.2K$ ,  $TP3 = 332.2K$ ,  $TP4 = 333.4K$ . Prędkość przepływu w stanie ustalonym była mała i wynosiła maksymalnie  $1.5 \times 10^{-3} m/s$ . Mierzone pole prędkości i położenie frontu przemiany fazowej dla tego przypadku ilustruje rys. 22. Jak widać w płaszczyźnie przekroju zimna ciecz w pobliżu osi symetrii naczynia opada w dół, a następnie zmieniając kierunek i ogrzewając się w okolicy dna oraz ścianek bocznych wznosi się ponownie w górę.



Rys. 22. Krzepnięcie SCN w naczyniu typu SIG (Tabela 5, #25), zmierzone pole prędkości i granica fazowa dla stanu ustalonego





Rys. 23. Krzepnięcie SCN w naczyniu typu SIG (Tabela 5, #22),  
 (a) pole prędkości po 18s, (b) ewolucja profilu fazy stałej

W eksperymencie oznaczonym w Tabeli 5 numerem 22 dążono do uzyskania możliwie regularnej, płaskiej powierzchni przemiany fazowej. Właściwy eksperyment poprzedzała faza wstępna (Tabela 5, #21), w której zadano dla całego wypełnianego układu jednakową temperaturę początkową równą  $309K$ . Po napełnieniu naczynia cieczą o podwyższonej temperaturze ( $333K$ ), zainicjowano chłodzenie górnej ścianki przez zmianę ustawienia termostatu na  $273K$ . Biorąc pod uwagę, że temperatura krzepnięcia materiału SCN wynosi  $327K$ , po pewnym czasie rozpoczęło się krzepnięcie materiału na górnej ściance. W trakcie tego procesu temperatura ścianki górnej ulegała stopniowemu obniżaniu, zmieniając się od  $299K$  w fazie wstępnej (18s) do  $287K$  (po 874s). Stopniowa zmiana temperatury górnej ścianki wymuszała stosunkowo powolny, stabilny ruch konwekcyjny (rys. 23a). Pozwoliło to na uzyskanie w całym okresie prowadzonych obserwacji niemal równoległego frontu zakrzepłego materiału (rys. 23b). Warto zwrócić uwagę na odwrotny kierunek cyrkulacji w naczyniu (por. rys. 23a), wyraźnie wskazujący, że to odmienny niż poprzednio charakter przepływu stabilizuje proces krzepnięcia. Odmienny przebieg ruchu konwekcyjnego wiązał się z faktem, że temperatura początkowa cieczy w naczyniu była wyższa niż w otaczającej ją kąpieli wodnej. Powoduje to w pobliżu ścianek ruch cieczy w kierunku zakrzepu, kompensując nierównomierność przyrostu fazy stałej obserwowaną dla poprzednich konfiguracji.

### 5.3. Pochylony prostopadłościan (PBP i PZP)

W prostopadłościennym naczyniu wypełnianym cieczą przez otwór w dolnej ściance (naczynia typu PBP lub PZP) badano przebieg procesu krzepnięcia, symulując proces zalewania formy odlewniczej. Wstępne pomiary przeprowadzono dla gliceryny, symulując eksperymentalnie sam proces wypełniania formy. Wpływ grawitacji na procesy przepływowe obserwowano zmieniając kąt nachylenia wypełnianego cieczą naczynia. W badaniach związanych z krzepnięciem materiału wykonano kilkanaście eksperymentów z wodą i jeden z succinonitrylem. Ograniczenie liczby eksperymentów z SCN wynikało z faktu, że natychmiast po zalaniu naczynia cieczą o temperaturze  $343K$  ścianki pokrywały się warstwą zakrzepu. Uniemożliwiło to wykorzystanie metod optycznych do pomiaru pól prędkości i temperatury (PIV&T). Trudności eksperymentalne wynikały z istniejących warunków laboratoryjnych, które nie pozwalały na utrzymywanie temperatury ścianek z pleksiglasu powyżej temperatury krzepnięcia succinonitrylu. Problem ten nie istnieje w eksperymentach z wodą.

### 5.3.1 Proces wypełniania bez krzepnięcia

Lepkość ciekłych metali gwałtownie wzrasta w miarę stygnięcia poprzedzającego proces krzepnięcia. Podobnie dużą zmianą lepkości w funkcji temperatury charakteryzuje się gliceryna, którą stosowano w badaniach procesu zalewania (Sobiecki [58], Kowalewski oraz inni [32]). Celem badań, podczas których lepkość zmieniała się w zakresie temperatur od 283K do 318K niemal 20-krotnie, była ocena wpływu tego zjawiska na przebieg procesu zalewania naczynia. Ten modelowy eksperyment może służyć jako analog krzepnięcia polimerów we wtryskarkach do produkcji elementów z tworzyw sztucznych.

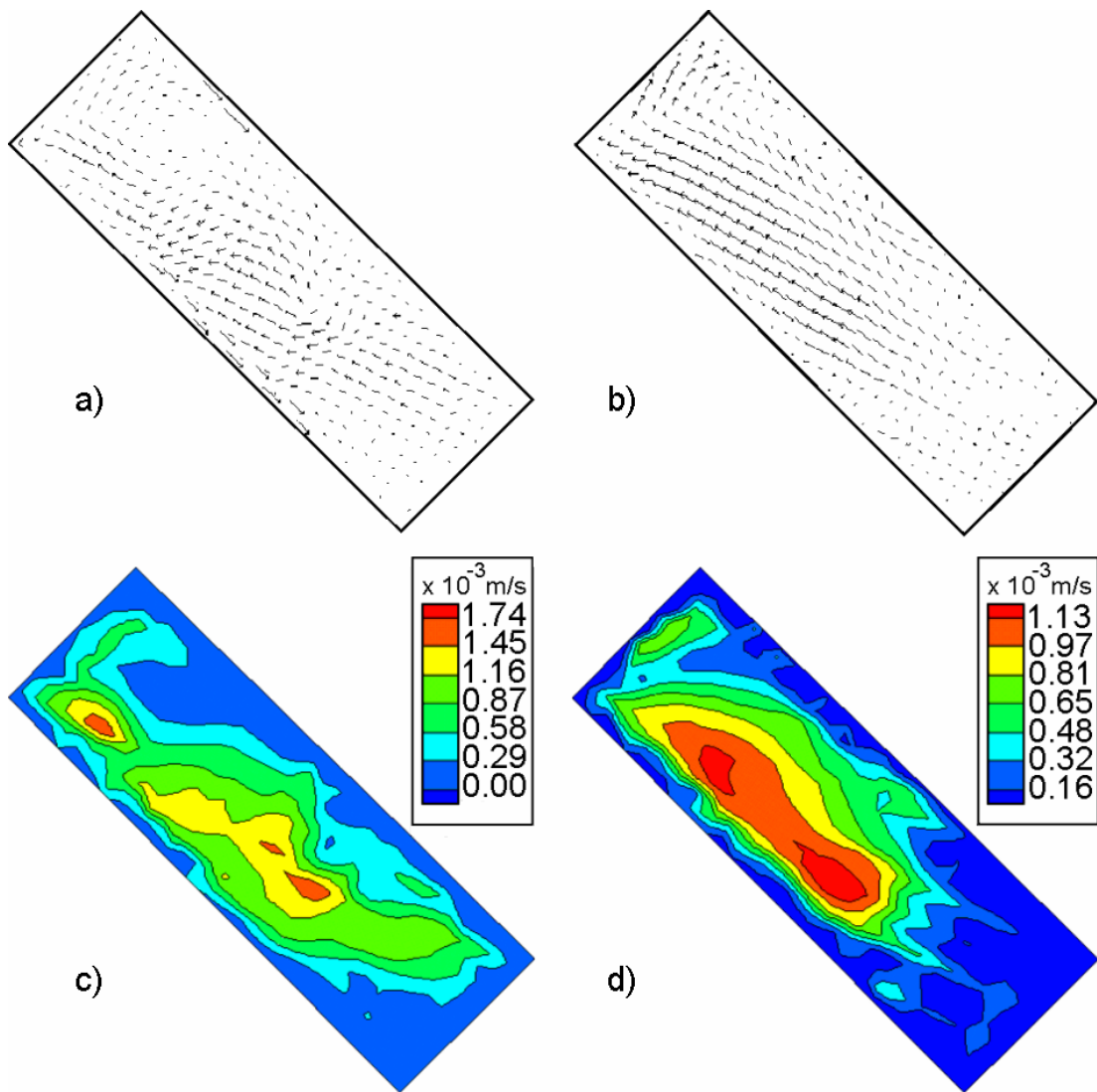
Badany kanał prostopadłościenny był wyposażony w dwie przegrody prostopadłe do ścianek bocznych, wykonane z przezroczystego materiału (naczynie typu PZP). Przegrody te nie zamykają całkowicie światła kanału, stanowią przeszkodę dla przepływu w istotny sposób modyfikując warunki przepływowe i termiczne pojawiające się w kanale. Dwie metalowe ścianki naczynia utrzymywano w niskiej temperaturze (283K) przy pomocy termostatu. Glicerynę o początkowej temperaturze 323K wprowadzano do kanału pod ciśnieniem przez dolny otwór wlewowy. Typowe wydatki objętościowe cieczy wynosiły  $0.6 \times 10^{-6} - 5.5 \times 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$ . Występujące w eksperymencie pola temperatury i prędkości przepływu analizowano z wykorzystaniem ciekłych kryształów, uzyskując ilościowe informacje o przepływie dla szeregu kątów nachyleń naczynia (45°, 64°, 76,5°). Zmiana kąta pochylenia zmienia w istotny sposób nie tylko sam proces wypełniania kanału, lecz również modyfikuje wpływ konwekcji naturalnej, szczególnie podczas procesu stygnięcia płynu. Przepływ w trzech utworzonych w ten sposób komorach charakteryzował się silną recyrkulacją cieczy. Stygnięciu gliceryny towarzyszyło tworzenie się obszarów martwych i częściowe blokowanie przepływu. Obszary zastoju i recyrkulacji, gdzie ciecz ulega opóźnionemu, bardzo powolnemu schłodzeniu, mają swoje odpowiedniki w postaci obszarów „skurczu” w rzeczywistym odlewie. Rezultaty opisanych tu pomiarów wykorzystano do walidacji symulacji numerycznych procesów ze swobodną powierzchnią (por. rozdz. 6).

#### Naczynie typu PBP z wodą

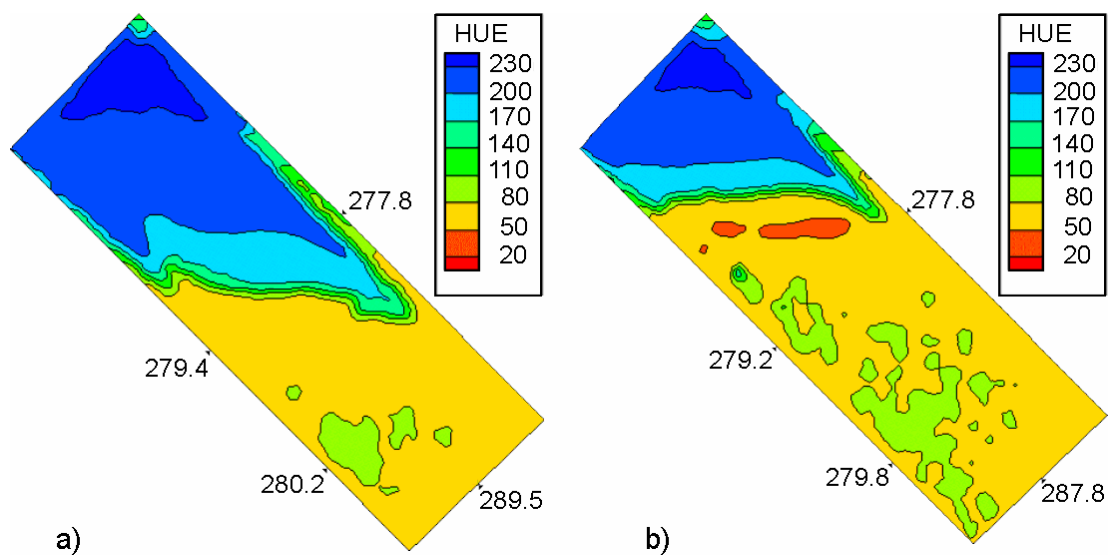
W eksperymencie oznaczonym w Tabeli 5 numerem 39 badano wypełnianie naczynia w kształcie prostopadłościanu bez przegród i konwekcję naturalną stygnącej wody. Uzyskane wyniki miały służyć do porównań z dalszymi obserwacjami przepływu z krzepnięciem, gdy przemiana fazowa i ruch konwekcyjny oddziałują na siebie. Prostopadłościan ustawiono pod kątem 45° do poziomu i przeprowadzono eksperyment dla temperatur  $T_h=276K$  (ścianki metalowe) i  $T_c=294K$  (woda). Do pomiaru pól temperatury i prędkości przepływu wykorzystano zawieszinę ciekłych kryształów. Obok metody PIV & PIT, dodatkowe informacje o lokalnej temperaturze dostarczały cztery termopary umieszczone na ściankach i w osi strumienia wpływającego do prostopadłościanu.

Przykładowe rozkłady wektorowego pola prędkości przepływu w przekroju centralnym po czasie 1901s i 1929s od wypełnienia naczynia pokazano na rys. 24. Przepływ w cienkiej warstwie przyściennej charakteryzuje prędkość kilkakrotnie większą od średniej prędkości w pozostałym obszarze naczynia. W tym rejonie technika pomiaru pola prędkości oparta na korelacji obrazów zawodziła z uwagi na duże gradienty prędkości cząstek w sąsiedztwie nieruchomego otoczenia. Dla określenia prędkości w takich rejonach konieczne było zastosowanie dodatkowej techniki śledzenia torów indywidualnych cząstek.

Rozkład temperatury pokazany na rys. 25 odpowiada rozkładowi barwy światła rozpraszanego na posiewie ciekłokrystalicznym. Zmianie temperatury cieczy odpowiada zmiana barwy (*hue*) światła rozproszonego. Granice pól o stałej barwie ilustrują przebieg izoterm. Po ustaniu napływu cieczy, chłodzenie wody w naczyniu rozpoczęło się od dolnego narożnika prostopadłościanu. W miarę stygnięcia wody izotermi niskiej temperatury przesuwały się równoległe od dołu do góry naczynia i obszar ciepły, oznaczony na rysunku kolorem niebieskim, stopniowo zanikał. Na rysunku można zauważyć charakterystyczne lokalne zagęszczenia i zmiany kierunku izoterm w pobliżu zimnych ścianek. Miejsca te odpowiadają lokalnym perturbacjom warstwy termicznej, obserwowanym jako separacje pola prędkości (por. rys 26) i tworzenie się tzw. termików.



Rys. 24. Pole prędkości: (a) po 1901s i (b) po 1929s, oraz kontury prędkości: (c) po 1901s i (d) po 1929s dla wody w naczyniu PBP (Tabela 5, #39)



Rys. 25. Rozkład temperatury w wodzie w naczyniu PBP, reprezentowany jako zmiana koloru (hue) posiewu ciekłych kryształów: (a) po 1901s, (b) po 1929s od startu zalewania (Tabela 5, #39)

### 5.3.2. Proces wypełniania z krzepnięciem

#### Naczynie typu PBP z wodą

W eksperymencie oznaczonym w Tabeli 5 numerem 42 badano przebieg procesu krzepnięcia w prostopadłościanie bez przegród wypełnianym wodą o temperaturze  $276K$ . Naczynie ustawiono pod kątem  $11.4^\circ$  do poziomu. Przed startem eksperymentu powietrze w naczyniu miało temperaturę  $279K$ . Przed eksperymentem i następnie w ciągu całego jego trwania termostat chłodzący metalowe ścianki był nastawiony na temperaturę  $258K$ , jednak w trakcie wypełniania wodą temperatura naczynia rosła. Zmiany temperatury w naczyniu rejestrowano termoparami rozmieszczonymi w trzech punktach na ściankach chłodzonych i na wlocie do naczynia. Zalewanie grawitacyjne naczynia typu PZP przy wydatku  $4.57 \times 10^{-6} m^3/s$  trwało  $36s$ . Rejestrowano serie po 50 obrazów w odstępach co  $1s$  w trzech etapach. W pierwszym etapie, do  $50s$  od startu, obserwowano proces zalewania i przepływ w wypełnionym naczyniu, w drugim, po  $250s$  od startu, proces stygnięcia ze wstępnym krzepnięciem wody, w trzecim, po  $557s$  od startu, proces rozwiniętego krzepnięcia.

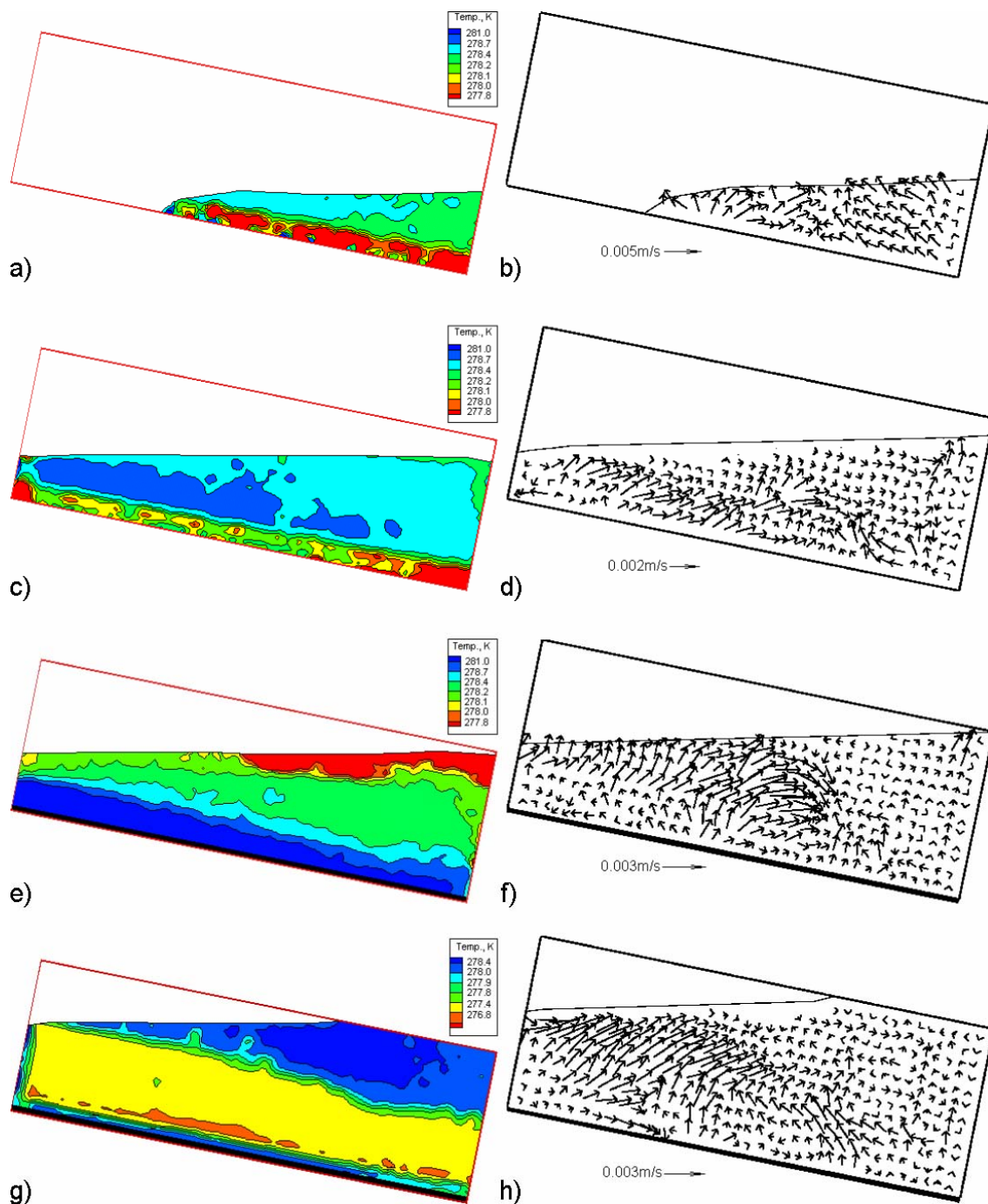
Rozkłady temperatur w cieczy w przekroju centralnym widoczne na rys. 26a, c, e, g odpowiadają obrazom pola prędkości przepływu pokazanym na rys. 26b, d, f, h. Przebieg izoterm został uzyskany przez analizę barwy światła odbijanego przez ciekłe kryształy. Pole prędkości zostało wyznaczone metodą PIV dla par obrazów.

Procesowi laminarnego zalewania prostopadłościanu towarzyszy kilka charakterystycznych etapów zmiany temperatury na ściankach metalowych. Początkowo obserwowano stratyfikację termiczną w intensywnie chłodzonej wodzie. W efekcie powstała w naczyniu zimna warstwa płynu, prawie równoległa do dolnej ścianki, w której (po  $5s$  i po  $15s$ ) widoczne są niewielkie strefy cieplejsze, widoczne na rys. 26a-b i 26c-d. W miarę napełniania naczynia, najcieplejsze miejsca obserwowano w przedniej i górnej części uformowanego klina cieczy, a najzimniejsze (po  $15s$ ) w narożnikach przy dolnej ścianie. Cienka warstwa lodu (około  $1mm$ ), widoczna na rys. 26e jako czarny pasek, pojawia się po  $20s$  od chwili rozpoczęcia eksperymentu. W tej fazie przepływu najzimniejsze obszary znajdowały się przy prawej stronie powierzchni swobodnej klina, natomiast bezpośrednio przy lodzie obserwowano warstwę nieco cieplejszą. Wydaje się, że ten lokalny wzrost temperatury w warstwie przyściennej jest wywołany ciepłem utajonym uwolnionym w trakcie krzepnięcia wody. Warstwę cieplejszej cieczy dodatkowo stabilizuje efekt inwersji gęstości występujący dla zamarzającej wody. W miarę upływu czasu (rys. 28g-h) grubość lodu zwiększa się tylko nieznacznie, a równocześnie niemal czterokrotnie maleje grubość cieplejszej warstwy termicznej nad lodem. W tym czasie większość płynu wypełniającego naczynie ma jednorodną temperaturę, bliską temperaturze inwersji gęstości ( $277K$ ) wody.

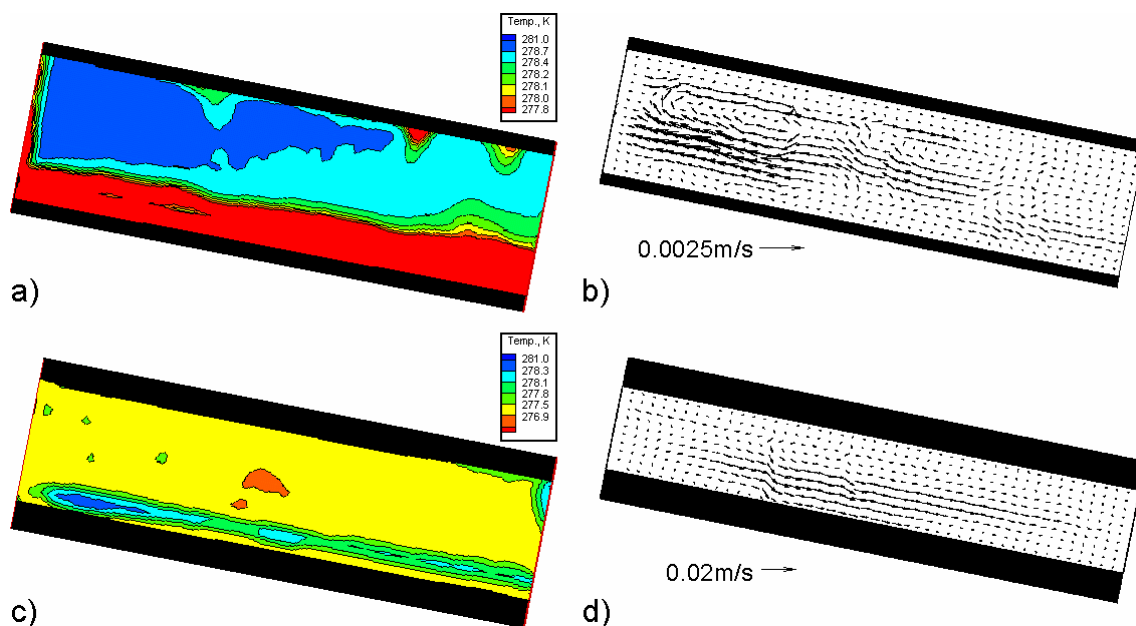
Pola temperatury i pola prędkości obserwowane w naczyniu po ustaniu procesu wypełniania i ustabilizowaniu się procesu krzepnięcia pokazano na rys. 27. Warto zwrócić uwagę na minimalne prędkości konwekcji naturalnej (rys. 27b), która wkrótce niemal całkowicie zamiera (rys. 27d). Porównując pola prędkości i temperatur można zauważyć, że obszary o większych prędkościach pojawiają się w miejscach cieplejszych, o większych gradientach temperatury. W pozostałych rejonach naczynia ma miejsce stagnacja płynu i jego powolne chłodzenie dyfuzyjnym strumieniem ciepła. Ilustruje to niemal równoległy przebieg izoterm w pobliżu dolnej ścianki. Po upływie  $557s$  niemal 50% objętości naczynia wypełniają już warstwy lodu przy ściankach.

Eksperyment określony numerem 40 w Tabeli 5 był modyfikacją omówionego powyżej eksperymentu numer 42 i służył do rejestracji obrazów niezbędnych do porównań i oceny wpływu warunków brzegowych i warunków początkowych na przebieg całego procesu przepływu i krzepnięcia. Dodatkowym celem tego pomiaru było zwiększenie precyzji wyznaczania pól prędkości. Bardzo małe prędkości przepływu obserwowane w końcowym etapie zamarzania wody wymagały zwiększenia rozdzielczości rejestrowanych obrazów przez wykonanie zbliżenia wybranego fragmentu naczynia. Spowodowało to jednak ograniczenia obszaru rejestracji do około 70% długości prostopadłościanu. Dzięki zwiększonej rozdzielczości obrazów uzyskano wyraźną

poprawę dokładności pomiaru pól prędkości metodą PIV. Złożenie wyników zebranych z obu eksperymentów pozwala więc na dokładniejszą ocenę weryfikowanych programów numerycznych. W stosunku do eksperymentu numer 42 zmodyfikowano temperaturę wlewanej wody na 297K, temperaturę ścianek metalowych na 263K oraz wydatek wody na  $0.91 \times 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$ . Pomiary prowadzono przez 974s (licząc od chwili początku procesu zalewania).



Rys. 26. Pola temperatur i prędkości zmierzone podczas procesu wypełniania naczynia PBP wodą: (a) i (b) po 5s, (c) i (d) po 15s, (e) i (f) po 20s, (g) i (h) po 25s, od startu zalewania (Tabela 5, #42)



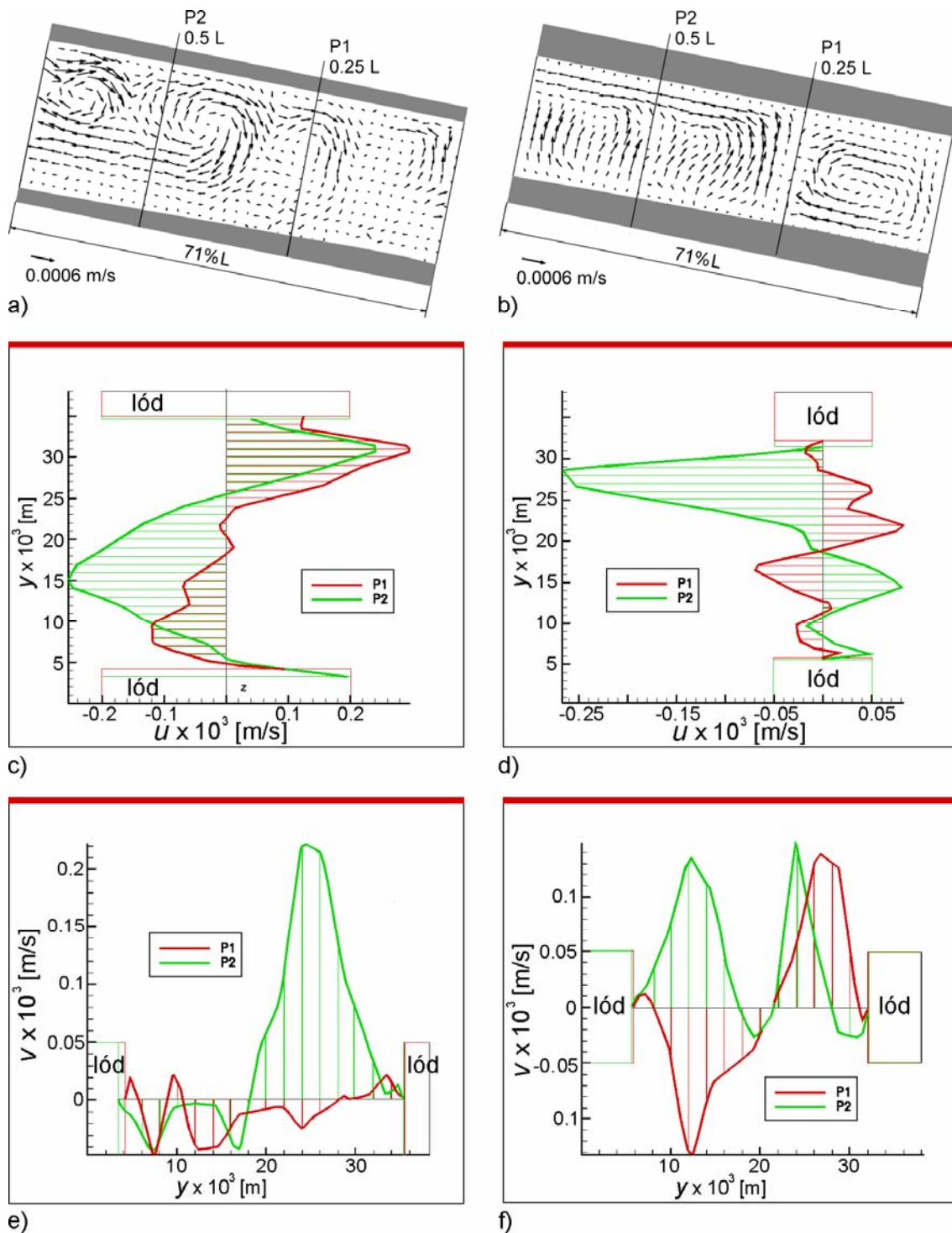
Rys. 27. Pola temperatur i prędkości zmierzone podczas krzepnięcia wody w naczyniu PBP: (a) i (b) po 250s, (c) i (d) po 557s, od startu zalewania (Tabela 5, #42)

Z uwagi na różnice temperatur wody wlewanej i temperatur naczynia przebieg procesu w czasie w obu eksperymentach znacznie się różnił. Jak łatwo można przewidzieć, czas wymagany dla utworzenia podobnej objętości lodu był w drugim przypadku dłuższy. Z tego powodu jako kryterium doboru obrazów do porównań obu eksperymentów i wyciągnięcia wniosków dla analizy obliczeń numerycznych przyjęto warunek podobieństwa procesu krzepnięcia, określony przez zbliżoną objętość lodu (np. 1/4 objętości naczynia). Przykładowe pary tworzą obrazy pól prędkości pokazane na rys. 27b i rys. 28a, oraz rys. 27d i rys. 28b. Przy takim doborze widać, jak zmiana warunków termicznych wpłynęła na zmiany w przepływie i rozkładzie temperatury wody w naczyniu. W przeciwieństwie do eksperymentu numer 42, stygnięciu wody w eksperymencie 40 towarzyszyła bardziej intensywna konwekcja naturalna. Charakterystyczną cechą przepływu jest powstanie struktury wirowej, widocznej na (rys. 28 a), tworzącej się w okolicy punktu wlewowego. Z upływem czasu struktura ta przemieszczała się wzdłuż naczynia od niżej położonej części do części wyżej położonej (rys. 28 b).

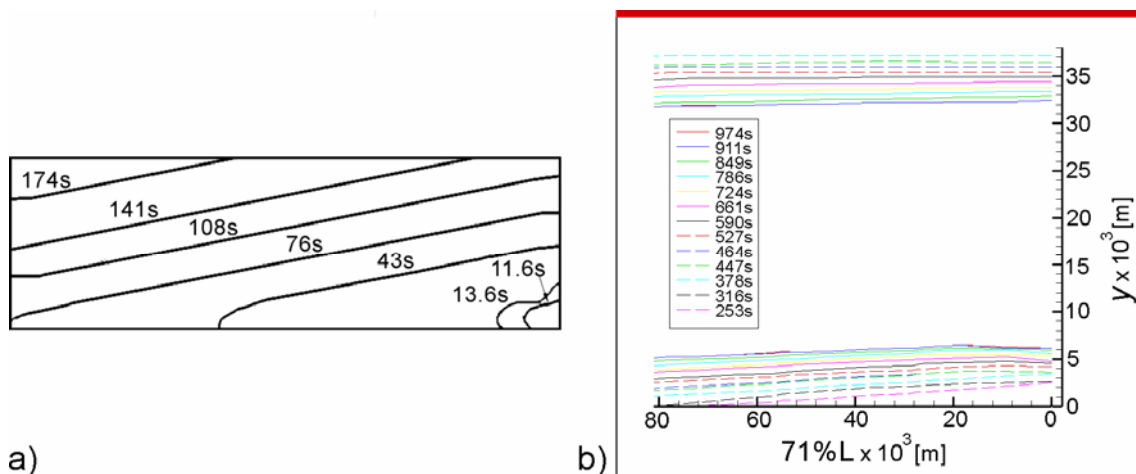
Zwiększona rozdzielczość rejestracji w eksperymencie 40 pozwala na sporządzenie profili prędkości wzdłuż prostych poprowadzonych przez wybrane miejsca w płaszczyźnie obrazu. Profile z rys. 28c i e oraz z rys. 28d i f pokazują przykładowe rozkłady składowych prędkości  $u$  i  $v$ , odpowiadające obrazom przepływu z rys. 28a oraz z rys. 28b. Zaznaczone na rysunkach proste P1 i P2, dla których sporządzono wykresy, poprowadzono odpowiednio w odległościach  $0.25L$  i  $0.5L$ , mierzonych wzdłuż osi naczynia od ścianki z otworem wlewowym i odniesionych do długości  $L$  całego prostopadłościanu. Istotną trudność przy porównaniach rezultatów pomiarów z obliczeniami numerycznymi stanowi niejednoznaczność chwili czasowej porównywanych zjawisk. Wspomniane wcześniej dopasowanie początku skali czasowej przez porównanie objętości utworzonego lodu jest za mało precyzyjne. Jak można zaobserwować na rys. 30, struktura przepływu ulega ciągłej zmianie mimo niewielkiego przyrostu lodu. Z tego względu oparcie porównywania na analizie profili prędkości może stanowić cenny materiał do weryfikacji symulacji komputerowych. Jednak uzyskanie tą drogą dobrej zgodności jest trudnym zadaniem.

Ilustracją przebiegu całego procesu wypełniania naczynia i krzepnięcia wody są kolejne trzy rysunki. Zestawienie położenia powierzchni swobodnej w poszczególnych fazach zalewania naczynia pokazano na rys. 29a. Analogicznie zestawienie, prezentujące proces narastania warstwy lodu na obydwu ściankach naczynia od początku zalewania aż do końca eksperymentu, zawiera rys. 29b. W fazie początkowej wzrost lodu można było zaobserwować tylko przy dolnej ściance, co wynika z wcześniejszego jej przykrycia wodą. Lód na górnej ściance zaczął się osadzać po około 350s od

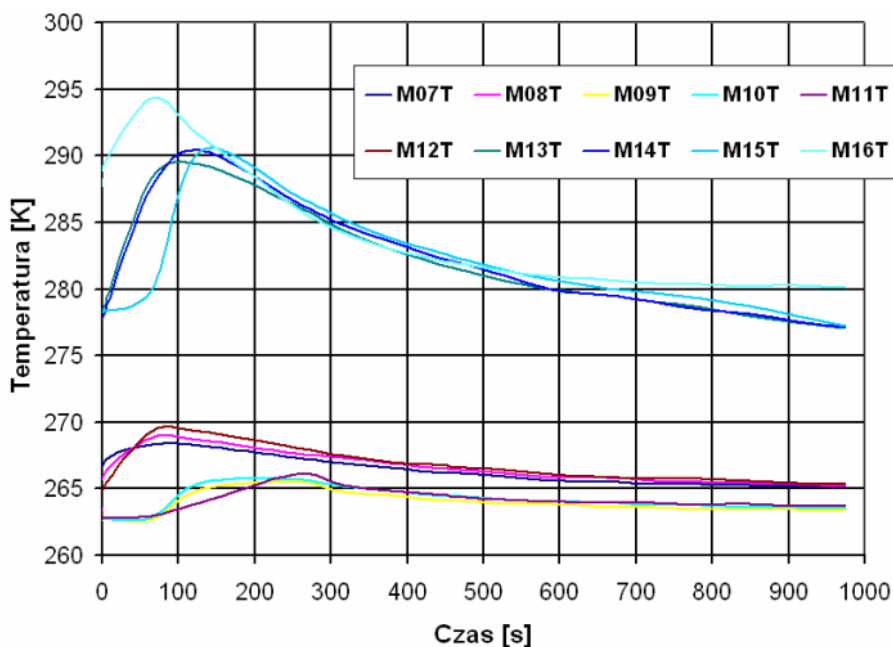
startu procesu zalewania. Jednak pod koniec eksperymentu obie warstwy lodu miały niemal jednakową grubość. W rezultacie po całkowitym wypełnieniu naczynia wodą prędkość narastania górnej warstwy lodu była większa niż na dolnej ścianie. Wydaje się, że wytłumaczenia tej różnicy należy poszukiwać w anomalii gęstości wody w wyniku czego zimniejsze warstwy płynu przemieszczają się w kierunku górnej ścianki. Lokalne zmiany temperatury, rejestrowane przy pomocy termopar w 10 punktach na ściankach prostopadłościanu, pokazano rys. 30. Oznaczenia termopar oraz ich rozmieszczenie wyjaśnione są w rozdziale 2 na rys. 8 i w Tabeli 2.



Rys. 28. Pola i profile prędkości zmierzone podczas krzepnięcia wody w naczyniu PBP: (a), (c) i (e) po 590 s. oraz (b), (d), (f) po 974s. (Tabela 5, #40)



Rys. 29. (a) Zmiana położenia powierzchni swobodnej oraz (b) narastanie grubości lodu w naczyniu PBP wypełnianym wodą (Tabela 5, #40)

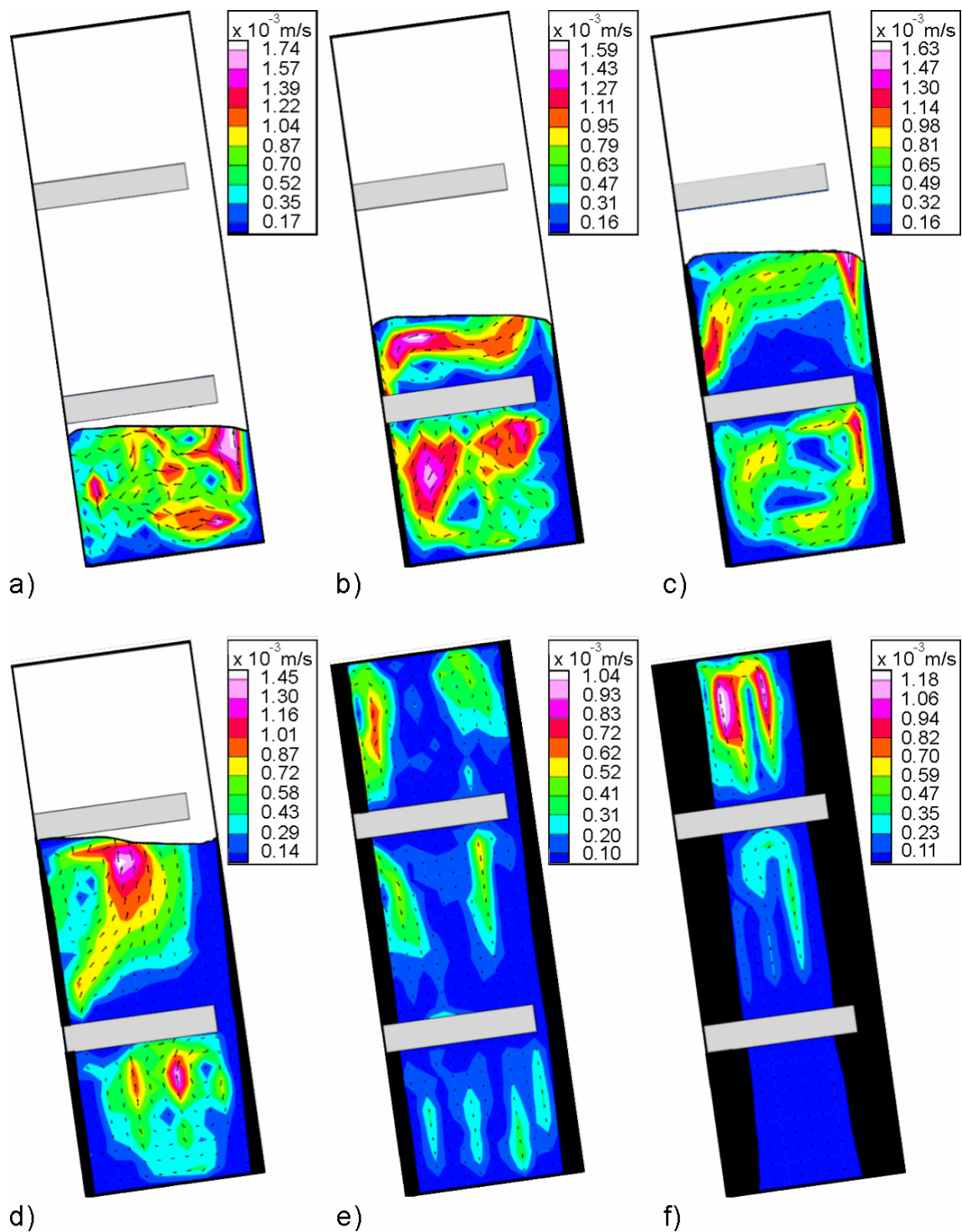


Rys. 30. Ewolucja temperatury rejestrowana przez termopary w naczyniu PBP wypełnionym wodą (Tabela 5, #40)

### Naczynie typu PZP z wodą

Zasadnicza modyfikacja naczynia PZP w stosunku do omówionego wyżej przypadku polega na umieszczeniu dwóch wewnętrznych przegród. W eksperymencie oznaczonym w Tabeli 5 numerem 47 obserwowano zjawisko przepływu oraz krzepnięcia wody wypełniającej takie naczynie. Wprowadzenie przegród pogorszyło jakość rejestrowanych obrazów wskutek refleksów światła i trudności z uzyskaniem równomiernego oświetlenia w całym przekroju naczynia. Duża różnica współczynników załamania światła między materiałem przegród (pleksiglas) a płynem oraz tworzenie się warstw lodu zmieniły warunki oświetleniowe w stosunku do wcześniej omawianego przypadku naczynia PZP z gliceryną. W rezultacie wielu prób z oświetleniem, wybrano optymalne nachylenie naczynia w stosunku do poziomu pod kątem równym  $82^\circ$ . Rejestrację obrazów rozpoczęto od chwili startu procesu wypełniania. Ścianki metalowe utrzymywano przez cały czas w temperaturze  $259.4K$ , a naczynie wypełniano wodą o temperaturze początkowej  $274K$  przy stałym wydatku objętościowym  $1.33 \times 10^{-6} m^3/s$ .





Rys. 31. Ewolucja konturów prędkości i wzrostu objętości lodu w wodzie w naczyniu PZP: (a) po 17s, (b) po 31s, (c) po 45s, (d) po 59s, (e) po 267s, (f) po 1163s od startu zalewania (Tabela 5, #47)

Wskutek oddziaływania przepływu z przegrodami, przelewania się cieczy i wypełniania nią kolejnych komór naczynia, struktury przepływu w naczyniu z przegrodami są bardziej złożone od opisanych powyżej dla naczynia PBP. W związku z tym możemy wyróżnić przynajmniej trzy fazy procesu wypełniania. W chwili początkowej zostaje wypełniona pierwsza komora, następnie ciecz pokonując pierwszą przegrodę sływa w dość gwałtowny sposób po jej powierzchni do drugiej komory. W tej fazie postać przepływu przypomina zjawiska typowe dla problemu przelewania przez zapórę (ang. *dam breaking problem*). Analogiczne procesy zachodzą podczas pokonywania drugiej przegrody. Przepływ komplikuje się, gdy narastający lód na chłodzonych ściankach zwęża

szczeliny nad przegrodami, by w końcu całkowicie je zamknąć. Do tego dochodzą złożone cyrkulacje przepływu tworzące i zmieniające się we wszystkich fazach procesu zalewania i krzepnięcia wody. Przykłady zarejestrowanych obrazów pól prędkości przepływu oraz narastania lodu pokazano na rys. 31. Procesy przepływowe rejestrowane w naczyniu prostopadłościennym z przegrodami mają podobne cechy do tych jakie obserwowano dla gliceryny. Najważniejsze z nich omówiono poniżej.

W każdym analizowanym przypadku istotnym parametrem był wydatek cieczy wpływającej do naczynia. Poprzez sprzężenie zwrotne procesu przepływowego i procesu chłodzenia wydatek cieczy decydował o szybkości procesu chłodzenia i kierunkach jej recyrkulacji w naczyniu. Przy dużych wydatkach obserwowano bardziej intensywne recyrkulacje, rozwijające się natychmiast po wypełnieniu kolejnych sektorów naczynia.

Na początku procesu wypełniania naczynia ciecz opadając wzdłuż ścianki z otworem wlewowym wypełnia dolną część naczynia. Jej temperatura obniża się w kontakcie z chłodzoną ścianką. Wytwarza to cyrkulację, która stopniowo ogarnia prawie całą pierwszą komorę naczynia PZP. Podczas wypełniania drugiego sektora sytuacja jest podobna, ale kierunek głównej cyrkulacji płynu jest przeciwny. Wydaje się, że jest to spowodowane większą inercją przelewającego się przez przeszkodę płynu. Stosunkowo duża prędkość spływającej przez pierwszą przeszkodę cieczy powoduje, że po spotkaniu z dolną (lewą) ścianką przepływ zmienia gwałtownie kierunek i generuje przeciwnie skierowaną recyrkulację koło drugiej przeszkody. Podczas pokonywania szczelin przez przepływ dobrze widoczne są fale powierzchniowe propagujące się odwrotnie do kierunku przepływu, bardzo podobne do tych obserwowanych w eksperymencie z gliceryną (rys. 56 i 57). Ze względu na bezwładność cieczy, czas relaksacji potrzebny, aby powierzchnia wygładziła się i powstała regularnie propagująca płaska granica faz, jest rzędu kilku sekund. Po całkowitym wypełnieniu drugiego sektora recyrkulacja staje się dużo wolniejsza, ruch płynu odbywa się głównie w okolicach górnej (prawej) ścianki.

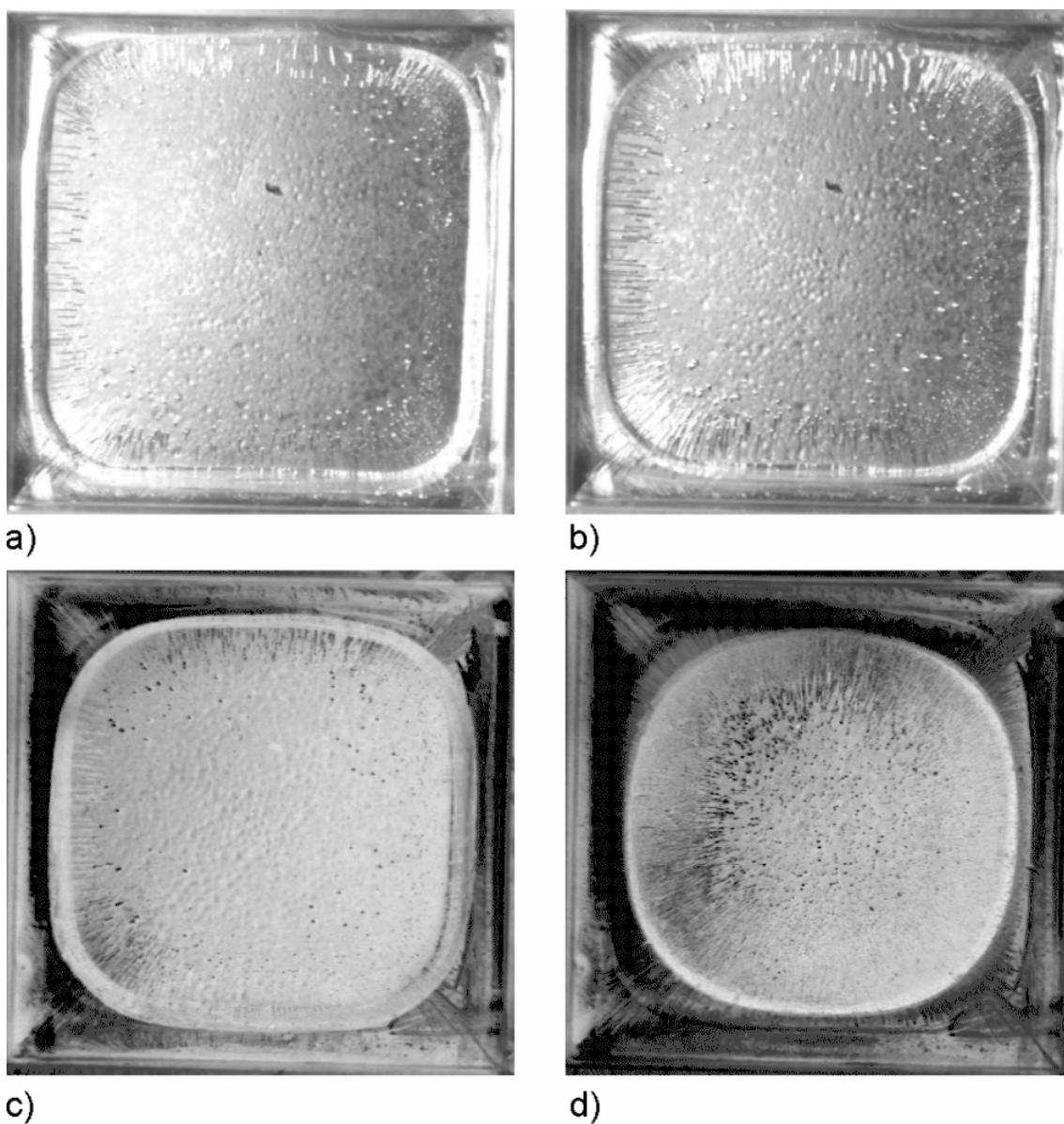
Przepływ wymuszony ustaje, gdy całe naczynie jest wypełnione. Wkrótce potem obszerne recyrkulacyjne strefy wypełniają wszystkie sektory naczynia. Na skutek gradientów temperatury w cieczy rozwija się konwekcja naturalna. Mieszanie konwekcyjne wygląda na bardzo skuteczne dla niskich liczb Prandtla, szczególnie dla wody. Kiedy przepływ zatrzymuje się, konwekcja naturalna staje się mechanizmem napędzającym, regulującym dalsze chłodzenie i przejścia fazowe. Charakterystyczne podwójne wiry w przepływie z recyrkulacją rozwijają się w każdej strefie wnęki z przepływem w dół wzdłuż ścianek (rys. 31) i przepływem powrotnym w środku wnęki. Brak jest przepływu (lub przepływ jest minimalny) w szczelinach nad przegrodami.

## **5.4. Sześcian z górną powierzchnią swobodną (SP)**

### **5.4.1. Wypełnianie i proces krzepnięcia wody**

Krzepnięcie materiału we wnęce w obecności swobodnej powierzchni jest typowe dla wielu procesów odlewniczych. Proces symulowano w laboratorium (eksperyment #49 w Tabeli 5) analizując przepływ i krzepnięcie wody wypełniającej naczynie sześciennie ze swobodną górną powierzchnią (SP). Sześcian wypełniono od góry wodą o temperaturze 276K a temperaturę pięciu ścianek wykonanych z pleksiglasu stabilizowano kąpielą w zewnętrznym płaszczu, w której przepływał glikol etylenowy o temperaturze 258K. Po wypełnieniu naczynia rejestrowano zmiany kształtu lodu tworzącego się na wszystkich ściankach. Obserwacje prowadzono w świetle rozproszonym przez przezroczyste ścianki sześcianu i z góry od strony powierzchni swobodnej.

Podczas wypełniania naczynia miało miejsce szybkie wstępne zalodzenie ścianek. Po tym etapie dalsze narastanie lodu było znacznie wolniejsze. Lód przybierał postać walca z przekrojem kołowym, pozostawiając w środku swego rodzaju „wanne”, w której ciecz porusza się ruchem toroidalnym. Najszybciej chłodzone były narożniki naczynia z uwagi na przyleganie do siebie dwóch zimnych ścianek. Powierzchnię lodu widzianą od góry po czasie 1800s, 2280s, 3180s i 4260s pokazano na rys. 32. W lodzie widoczne były liczne kanaliki wypełnione wodą. Z obserwacji wody zabarwianej niewielką ilością atramentu wynika, że tworzenie się kanałków jest związane z uwalnianiem rozpuszczonego w wodzie powietrza.



Rys. 32. Ewolucja profilu lodu w naczyniu typu SP – widok z góry: (a) po 1800s, (b) po 2280s, (c) po 3180s oraz (d) 4260s (Tabela 5, #49)

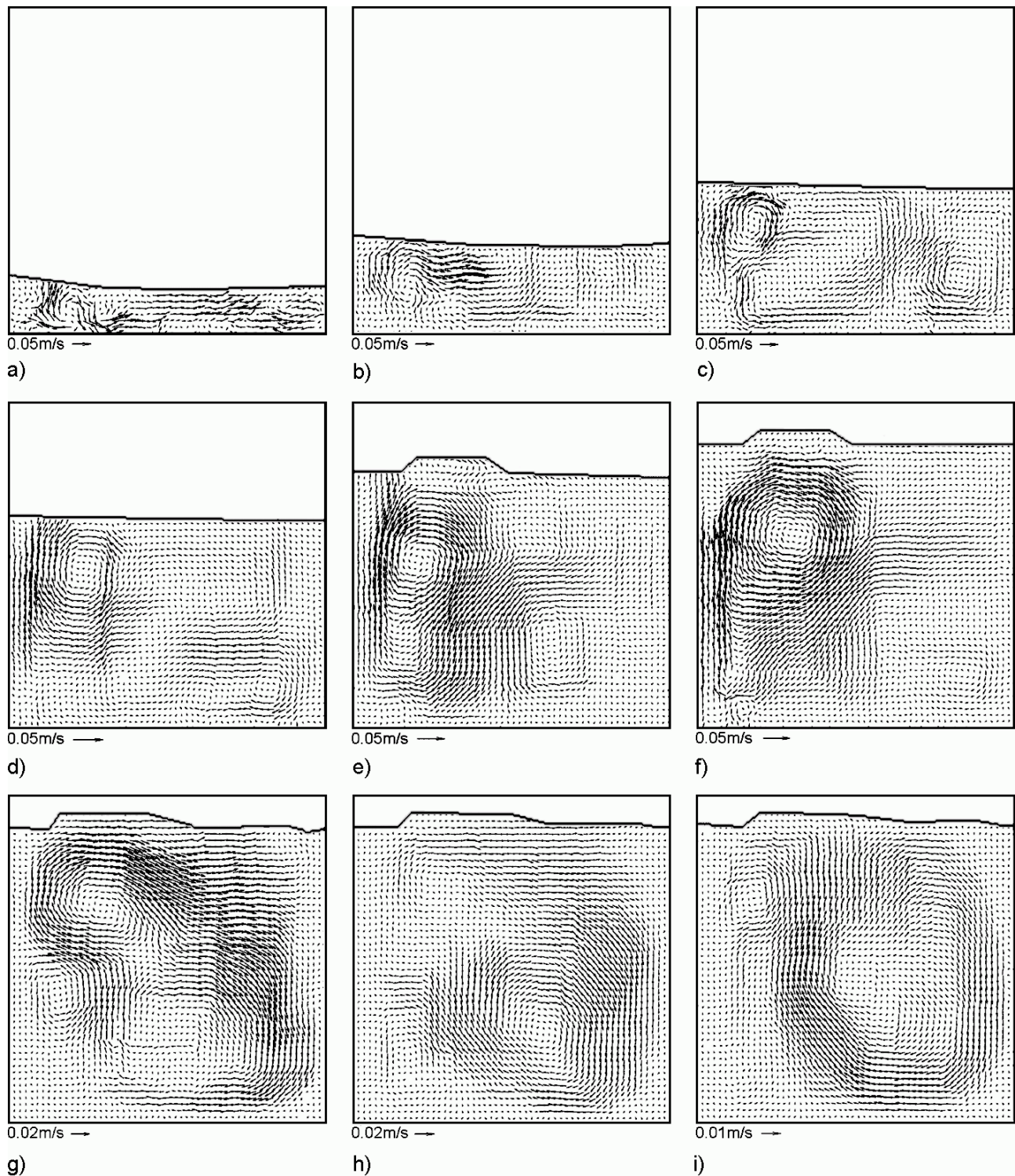
#### 5.4.2. Proces wypełniania turbulentnego bez krzepnięcia

Przemysłowe procesy odlewnicze, z uwagi na wymiar stosowanych naczyń jak i prędkości wlewu, charakteryzują się na ogół przepływami o rozwiniętej turbulencji. W eksperymentach laboratoryjnych prowadzonych w małej skali tego typu przepływ ze stosunkowo dużą prędkością symulowano wypełniając wodą opisywane wyżej naczynie sześciennie (Tabela 5, #50).

Woda zawierająca jako posiew pyłki sosny była wlewana przez otwór przy dnie naczynia z prędkością na wlocie  $0.85 \text{ m/s}$ . W czasie wypełniania nie obserwowano krzepnięcia, mimo że przed zalaniem ścianki naczynia miały temperaturę  $262.5\text{K}$ , a wlewana woda temperaturę  $277.6\text{K}$ . Odmierzanie czasu oraz rejestrację obrazów przepływu w przekroju centralnym rozpoczęto od startu procesu zalewania. Z uwagi na duże prędkości przepływu, obrazy rejestrowano przy użyciu szybkiej kamery FASTCAM–ultima 40 K PHOTRON z prędkością 250 kadrów/s.

W chwili rozpoczęcia wypełniania naczynia, ciecz rozpyłała się na dnie tworząc w widoku z góry kołowe wiry z centrum w środku naczynia i niemal martwe strefy w narożach. Po lewej stronie pionowego przekroju centralnego można było obserwować wir, który deformował powierzchnię swobodną przepływu. Seria podobnych eksperymentów (numer 51 i 52) pokazała, że proces jest

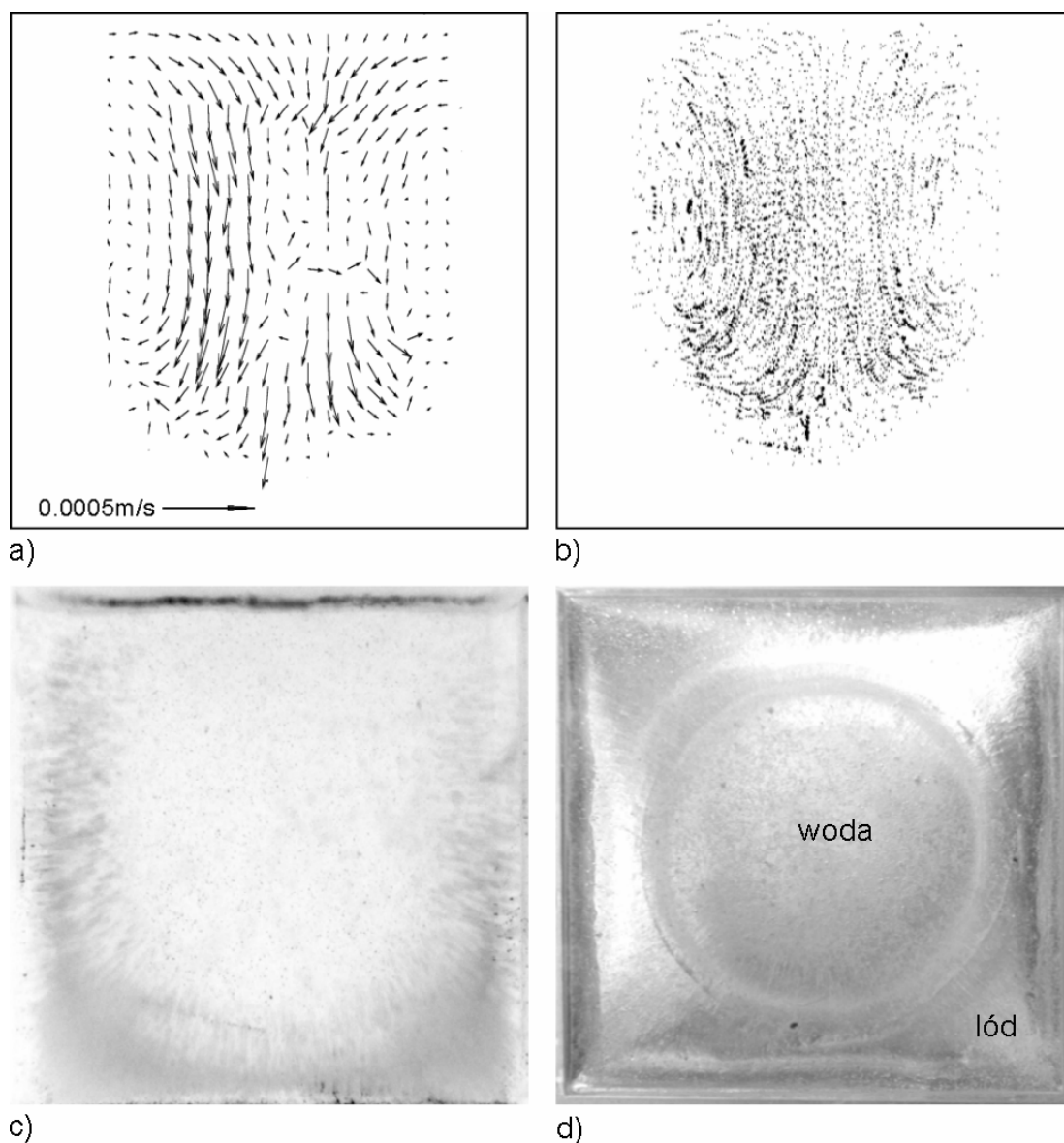
powtarzalny. Kolejne fazy zalewania naczynia pokazano na rys. 33 w formie obrazów pól wektorowych prędkości otrzymanych przy zastosowaniu metody PIV – potoków optycznych (ang. *optical flow*). Istotną cechą przepływu jest zmiana struktury przepływu z początkowego płaskiego wiru w płaszczyźnie poziomej do złożonego trójwymiarowego ruchu, w którym na koniec dominuje wyraźnie wykształcona cyrkulacja wody wokół środka naczynia, otoczona mniejszymi zmiennymi cyrkulacjami.



Rys. 33. Fazy zalewania wodą naczynia SP po: (a) 2.2 s, (b) 5.0 s, (c) 8.6 s, (d) 13.0 s, (e) 20.2 s, (f) 22.2 s, (g) 24.2 s, (h) 26.2 s, (i) 28.2 s (Tabela 5, #50)

### 5.4.3. Proces wypełniania laminarnego z krzepnięciem

Celem eksperymentu oznaczonego w Tabeli 5 numerem 48 było badanie procesu wypełniania i krzepnięcia wody w naczyniu typu SP. Naczynie utrzymywano w temperaturze  $257K$ , a woda z domieszką pyłków sosny miała w czasie zalewania temperaturę  $295K$ . Obserwacje z boku sześcianu oraz z góry, od strony powierzchni swobodnej, prowadzono przez  $6720s$ , przy tym rejestrowano w wybranych etapach, określonych czasem mierzonym od startu procesu zalewania, serie po sześć obrazów przepływu wody i narastania objętości lodu. Używano do tego żarowej lampy fotograficznej i kamery 3CCD XC-003P Sony. Do opracowania wyników rejestracji wykorzystano korelację PIV techniką potoków optycznych.



Rys. 34. Woda krzepnąca w naczyniu typu SP: (a) pole prędkości po 3840s, (b) tory cząstek po 3840s, (c) widok lodu z boku po 3840s, (d) widok lodu z góry po 6720s (Tabela 5, #48)

Niska temperatura naczynia oraz warunki w laboratorium sprawiały, że przy każdej próbie uruchomienia eksperymentu na zewnętrznej stronie ścianek naczynia osadzała się para wodna. Po usunięciu pary wodnej, dalszą obserwację utrudniała nierównomierna, pokryta „dendrytami” warstwa lodu. Dodatkowym utrudnieniem obserwacji było uwalnianie pęcherzy powietrza przez „rurki dendrytów” w warstwie lodu na ściankach naczynia. Pęcherze zakłócały przepływ

wyływając na powierzchnię. W efekcie obrazu procesu wypełniania nie pozwalały na dokładniejszą analizę ilościową i wyznaczenie pól prędkości metodą PIV. Natomiast już po napełnieniu naczynia, była możliwa częściowo niezakłócona optycznie obserwacja procesu krzepnięcia i przepływu wewnątrz utworzonego w centrum naczynia „jeziorka wodnego”. Wybrane obrazy, zarejestrowane po 1440s, 2640s, 3840s, 4680s i 6120s, posłużyły do jakościowej analizy pola przepływu, wyznaczenia torów cząstek oraz pomiaru szybkości narastania lodu celem wykonania porównań z odpowiednimi wynikami numerycznymi.

Wynik eksperymentu pokazuje, że w przepływie dominuje konwekcja naturalna. Lżejsza woda o temperaturze zbliżonej do 273K płynie wzdłuż lodu do góry, a cięższa o temperaturze około 277K opada w dół wzdłuż centralnej części cyrkulacji toroidalnej. Przy powierzchni swobodnej i przy dnie obserwujemy radialny przepływ z punktami spiętrzenia w środku. W toroidalnej strukturze przepływu, przy powierzchni swobodnej woda promieniście napływa od ścianek do środka naczynia, potem opada do dna i tam zawraca wzdłuż ścianek (dokładniej mówiąc, wzdłuż powierzchni lodu na ściankach bocznych). Taka struktura przepływu jest analogiczna do opisanej wcześniej w naczyniu z zimną górną ścianką (SGI). Mechanizm generujący przepływ jest też podobny, gdyż mimo odwrócenia temperatur (zewewnętrzne ścianki obecnie chłodzą płyn), wskutek anomalii gęstości wody ciecz przemieszcza się w tym samym kierunku, tzn. do powierzchni górnej.

W widoku od góry obserwowano przyrost lodu na ściankach bocznych. Grubość zamrożonej warstwy początkowo wzrastała równomiernie. W fazie przejściowej proces lodu najszybciej przyrastał w narożach naczynia, by pod koniec utworzyć kształt o wewnętrznej powierzchni zbliżonej do walca. Przykłady opisywanych obserwacji ilustruje rys. 34. Zamieszczone obrazy pokazują pole prędkości przepływu i tory cząstek po 3840s od startu zalewania sześcianu, a także widoki kształtu lodu z boku i z góry, odpowiednio po 3840s i po 6720s.

## 5.5. Wybór wzorców eksperymentalnych

W eksperymentach laboratoryjnych rezultaty pomiarów pola temperatury, prędkości i obserwowana ewolucja położenia granicy faz były oceniane niezależnie. Każda z wielkości rejestrowanych eksperymentalnie może stanowić odrębny wzorec dla programów numerycznych, w których symulowane są procesy przepływowe z przemianą fazową. Przy takim traktowaniu, do pozytywnej oceny eksperymentu wystarczy, by choć jeden zestaw wyników był zakwalifikowany jako wzorcowy. Tabela 5 pozwala wstępnie zorientować się w ocenie jakości danych eksperymentalnych. Umożliwia to informacja zawarta w ostatniej kolumnie, w której podano symboliczne oznaczenia dwóch ogólnych przypadków – pozytywnej lub negatywnej oceny przydatności wyników do ilościowych porównań z symulacją numeryczną.

Z pozytywną oceną mamy do czynienia, gdy przebieg eksperymentu i rejestracja jego parametrów były niezakłócone, a otrzymane rezultaty pomiarów pozwalają na ich porównanie z wynikami z programów numerycznych. Wówczas w uwagach Tabeli 5 umieszczono symbole t, v lub s, co oznacza, że materiał może być wzorcem dla porównań odpowiednio pola temperatury, pola prędkości lub kształtu frontu przemiany fazowej. Bardziej zróżnicowane są symbole wskazujące na negatywne przypadki eksperymentów, w których uzyskane wyniki mają jedynie charakter jakościowy i nie pozwalają na porównania z wynikami symulacji numerycznych. Mamy z nimi do czynienia, gdy wiersz tabeli w ostatniej kolumnie zawiera kody od 0 do 10. Kod równy 0 wskazuje tylko wstępny etap badań, natomiast wyższe kody oznaczają rodzaje przyczyn negatywnej oceny wyników.

Wstępna faza eksperymentów służyła dla przygotowania układu do stanu ustalonego, od którego prowadzono właściwe pomiary. W czasie niektórych eksperymentów stwierdzano, że pewne warunki prowadzenia pomiarów wymagają korekty (np. niezbędne było poprawienie wypoziomowania, usunięcie pęcherzy z cieczy, itd.). Takie przypadki oznaczono w uwagach w tabeli kodem 1, uznając, że wyniki mogą być przydatne do badań wrażliwości rozwiązań na tego

typu zakłócenia. Kodem 2 oznaczono jeden eksperyment, w którym omyłkowo nie został włączony układ rejestracji temperatury za pomocą termopar. Mimo tego tabela zawiera opis tego przypadku, ponieważ zarejestrowane obrazy przepływu stanowią poprawny materiał badawczy do porównań z innymi, podobnymi eksperymentami. Kolejną przyczyną, oznaczoną kodem 3, uniemożliwiającą zaliczenie wyników eksperymentu do kategorii wzorców, był przypadek, gdy w cieczy, szczególnie dla succinonitrylu i poliglikolu, pojawiały się drobne struktury zakrzepłych cząstek, powodujące mętnienie obrazu i brak możliwości pomiaru pól prędkości. Kodem 4 oznaczono trudności, które wiązały się z brakiem rozkładu barw w świetle odbitym od znaczników z ciekłego kryształu. Objawy źle „pracującego” posiewu z ciekłych kryształów pojawiały się dla cieczy modelowych PEG i SCN, mimo że rodzaj kryształów był dopasowany do rejestrowanego w eksperymencie zakresu temperatur. Nie udało się wyjaśnić przyczyn tego zjawiska. Inne trudności pomiarowe wiążą się z rejestracją obrazów. Odpowiednio kodem 5, 6 i 7 oznaczono słabo zróżnicowaną jasność obrazu, zbyt małe powiększenie obrazu lub zbyt niską rozdzielczość użytej kamery, bądź zbyt małe koncentracje cząstek posiewu. Problem jasności, uniemożliwiający dalszą obróbkę obrazów metodą PIV, występował zwłaszcza przy krótkich czasach rejestracji, kiedy dostępne oświetlenie było niewystarczające. Drobny posiew powodował, że na obrazach poszczególne cząstki nie były rozróżnialne, a więc podstawowy warunek dla powodzenia stosowanej metody pomiarowej nie był spełniony. W niektórych przypadkach eksperyment był powtarzany w identycznych warunkach, dla potwierdzenia rezultatów. Wzorcem uznawano ten pomiar, który dawał w ocenie dokładniejsze rezultaty, natomiast pozostałe eksperymenty oznaczono w Tabeli 5 kodem 8. Stosunkowo często zdarzało się w eksperymentach, że temperatury ustalające się na ściankach obserwowanego naczynia były niższe od temperatur krzepnięcia cieczy modelowej i ścianki pokrywały się zakrzepłym materiałem utrudniającym obserwacje. Takie przypadki, oznaczone kodem 9, występowały głównie dla PEG, rzadziej dla SCN. W Tabeli 5 umieszczono także informacje o eksperymentach, w których występowały trudności pomiarowe nie wymienione wcześniej (np. awarie w czasie eksperymentu). Takie przypadki oznaczono kodem 10. Mimo że materiał pomiarowy nie może służyć jako wzorzec dla obliczeń numerycznych, jego analiza może dostarczyć dodatkowej wiedzy o samym procesie.

Tabela 5 Specyfikacja problemów analizowanych eksperymentów i obliczeń numerycznych

Lp. #	Geo-metria	Ciecz modelowa	Badanie	Kąt	PIV	PIT	Posiew	Warunki brzegowe			Warunki początkowe		Uwagi
				$\alpha$ [°]				$T_h$ [K]	$T_c$ [K]	$T_{ext}$ [K]	$T_0$ [K]	$q \times 10^6$ [m <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]	
1	SRG	Woda	T	0.0				283.0	273.0		278.0	0.0	FFFSS
2	SRG	Woda	T+K	0.0				283.0	263.0		Lp. 1	Lp. 1	FLUENT
3	SIG	PEG-900	T	0.0	●	○	Proszek Szklany		309.0	313.0	313.0	Z. start	0
4	SIG	PEG-900	T+K	0.0	●	○	Proszek Szklany		283.0	313.0	Lp. 3	Lp. 3	3
5	SIG	PEG-900	T+K	0.0	●	○	Proszek Szklany		283.0	313.0	Lp. 3	Lp. 3	10
6	SIG	PEG-900	T+K	0.0	●	○	Proszek Szklany		283.0		Lp. 3	Lp. 3	v
7	SIG	PEG-900	T+K	0.0	●	●	BM100/R90F2W		296.0	316.0	316.0	Z. start	4,9
8	SIG	PEG-900	T+K	0.0	●	●	BM100/R29C4W		296.0	316.0	316.0	Z. start	4,9
9	SIG	PEG-900	T+K	0.0	●	●	BM100/R29C4W		296.0	306.0	306.0	Z. start	4,9
10	SIG	PEG-900	T+K	0.0	●	●	BM100/R29C4W		296.0	306.0	306.0	Z. start	4,9
11	SIG	PEG-900	T+K	0.0	●	●	BM100/R29C4W		296.0	304.0	304.0	Z. start	4,6,9
12	SIG	PEG-900	T+K	0.0	●	●	BM100/R29C4W		296.0	308.0	308.0	Z. start	4,9
13	SIG	PEG-900	T+K	0.0	●	●	BM100/B29C4W		296.0	308.0	308.0	Z. start	4,6,9
14	SIG	PEG-900	T+K	0.0	●	●	BM100/R29C4W		296.0	306.0	306.0	Z. start	4,9
15	SIG	PEG-900	T+K	0.0	●	●	BM100/R29C4W		298.0	309.0	309.0	Z. start	v,s
16	SIG	PEG-900	T+K	0.0	●	●	BM100/R90F2W		300.0	311.0	311.0	Z. start	v,s
17	SIG	PEG-900	K	0.0	●	●	BM100/R90F2W		300.0	311.0	Z. start	Z. start	4,9
18	SIG	PEG-900	T+K	0.0	●	●	BM100/R29C4W		302.0	311.0	313.0	Z. start	v,s
19	SIG	PEG-900	T	0.0					299.0	309.0	304.0	0.0	FLUENT
20	SIG	PEG-900	T+K	0.0					299.0	309.0	Lp. 19	Lp. 19	FLUENT
21	SIG	SCN	T	0.0	●	○	Proszek Szklany		309.0	309.0	333.0	Z. start	0
22	SIG	SCN	T+K	0.0	●	○	Proszek Szklany		273.0	309.0	Lp. 21	Lp. 21	v,s
23	SIG	SCN	T+K	0.0	●	●	BM100/R29C4W		292.0	333.0	333.0	Z. start	4,9
24	SIG	SCN	T+K	0.0	●	●	BM100/R29C4W		293.0	335.0	335.0	Z. start	4,9
25	SIG	SCN	T+K	0.0	●	●	BM100/R90F10W		298.0	333.0	333.0	Z. start	v,s
26	SIG	SCN	T+K	0.0	●	●	BM100/R90F10W		298.0	333.0	333.0	Z. start	4,9
27	SIG	Woda	T	0.0					273.0	283.0	278.0		FRECON
28	SIG	Woda	T+K	0.0					263.0	283.0	Lp. 29	Lp. 29	ICE3D



Tabela 5 cd. Specyfikacja problemów analizowanych eksperymentów i obliczeń numerycznych

Lp. #	Geo-metria	Ciecz modelowa	Badanie	Kąt	PIV	PIT	Posiew	Warunki brzegowe			Warunki początkowe		Uwagi
				$\alpha$ [°]				$T_h$ [K]	$T_c$ [K]	$T_{ext}$ [K]	$T_0$ [K]	$q \times 10^6$ [m <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]	
29	PBP	SCN	W+T+K	45.0	●	○	Proszek Szklany	343.0	313.0		303.0	4.64	9
30	PBP	Woda	W+T+K	11.4	●	●	LC BM 250	276.0	263.0		280.0	4.64	4,6
31	PBP	Woda	W+T+K	11.4	●	●	LC BM 250	276.0	258.0 268.5		283.0	4.64	4,6
32	PBP	Woda	W+T+K	82.0	●	○	Lycopodium	278.0	258.0		276.0	4.64	7
33	PBP	Woda	W+T+K	11.4	●	○	Pyłki sosny	284.0	263.0		280.0	180.00	7,8
34	PBP	Woda	W+K	11.4	●	○	Pyłki sosny	284.0	263.0		280.0	180.00	8
35	PBP	Woda	W+K	11.4	●	○	Pyłki sosny	285.0	263.0		280.0	180.00	5
36	PBP	Woda	W+K	11.4	●	○	Pyłki sosny	285.4	263.0		280.0	180.00	6
37	PBP	Woda	W+K	11.4	●	○	Pyłki sosny	286.0	263.0		280.0	180.00	v
38	PBP	Woda	W+T+K	11.4	●	●	Mix C	286.0	263.0		280.0	4.64	6
39	PBP	Woda	W+T	45.0	●	●	TM 445	294.0	276.0		287.0	4.64	t,v
40	PBP	Woda	W+T+K	11.4	●	●	Mix C	297.0	263.0		280.0	0.91	t,v,s
41	PBP	Woda	W+T+K	11.4	●	●	LC BM 250	298.0	263.0		280.0	4.64	4
42	PBP	Woda	W+T+K	11.4	●	●	Mix C	276.0	258.0		276.0	4.57	t,v,s
43	PBP	Woda	W+T+K	11.4				293.0	263.0		298.0	83.60	FLUENT
44	PBP	Woda	W+T+K	11.4				298.0	265.0		298.0	354.00	FLUENT
45	PZP	Gliceryna	W+K	45.0				323.0	283.0		303.0	71.20	FLUENT
46	PZP	Woda	W+T+K	82.0	●	○	Pyłki sosny	274.0	263.0		280.0	1.33	2,6
47	PZP	Woda	W+T+K	82.0	●	○	Pyłki sosny	274.0	259.4		276.0	1.33	v,s
48	SP	Woda	W+T+K	0.0	●	○	Pyłki sosny	295.0		257.0	277.0	266.90	v,s
49	SP	Woda	K	0.0		○	Atrament	276.0		258.0	277.0		s
50	SP	Woda	W+T+K	0.0	●	○	Pyłki sosny	277.6		262.5	280.0	266.90	v
51	SP	Woda	W+T+K	0.0	●	○	Pyłki sosny	274.2		262.6	280.0	266.90	1
52	SP	Woda	W+T+K	0.0	●	○	Pyłki sosny	276.4		263.0	280.0	266.90	1
53	SP	Woda	T+K	0.0						258.0	276.0		FLUENT

## Legenda do Tabeli 5

### Geometria

- PBP – prostopadłościan bez przegród;
- PZP – prostopadłościan z przegrodami;
- SRG – sześcián grzany różnicowo;
- SIG – sześcián z izotermiczną ścianką górną;
- SP – sześcián ze swobodną powierzchnią.

### Badanie

- W – wypełnianie;
- T – konwekcja;
- K – krzepnięcie.

### PIV oraz PIT

- – badanie przeprowadzone;
- – brak badań.

**Warunki początkowe** – wartości oznaczone przez „Lp. XX” należy interpretować jako wartości określone dla stanu końcowego problemu opisanego przez wiersz „XX” tabeli. Symbol Z. start (*zimny start*) oznacza warunki początkowe o zerowym polu prędkości i jednorodnej temperaturze. W fizycznym eksperymencie jest to tylko przybliżenie, gdyż resztkowe gradienty temperatury zawsze wywołują niekontrolowany ruch płynu.

Problemy analizowane doświadczalnie – kolumna **Uwagi** zawiera ocenę:

Wyniki uznane za wzorcowe w części dotyczącej:

- t – pola temperatury;
- v – pola prędkości;
- s – kształtu granicy faz.

Wyniki nie uznane za wzorcowe z powodu:

- 0 – przygotowania eksperymentu;
- 1 – zmiennych warunków w czasie eksperymentu;
- 2 – braku rejestracji temperatury termoparami;
- 3 – niestabilności w polu przepływu;
- 4 – braku rozkładu barw w świetle odbitym od znaczników;
- 5 – ciemnych obrazów;
- 6 – niskiej rozdzielczości;
- 7 – niewłaściwego posiewu;
- 8 – badania powtarzalności;
- 9 – krzepnięcia na ściankach;
- 10 – inne.

Problemy analizowane numerycznie – kolumna **Uwagi** zawiera nazwę programu użytego dla uzyskania rozwiązania (FRECON, FLUENT lub ICE3D).

### Komentarz szczegółowy:

W wierszu 1, w kolumnie Uwagi, symbol „FFFSS” oznacza, że problem rozwiązany był programami: FRECON, FLUENT, FIDAP, SOLVSTR, SOLVMEF.

W wierszu 31 podano dwie wartości temperatur  $T_c$ , gdyż różne były temperatury okładek naczynia – górna wartość mierzona była na górnej, odpowiednio dolna na dolnej okładce.

W wierszu 53 ze względu na przeprowadzoną symulację z wyłączeniem modelowania wypełniania naczynia typu SP, podano jedynie temperaturę  $T_0$  przyjętą jako temperaturę początkową w naczyniu.

## 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

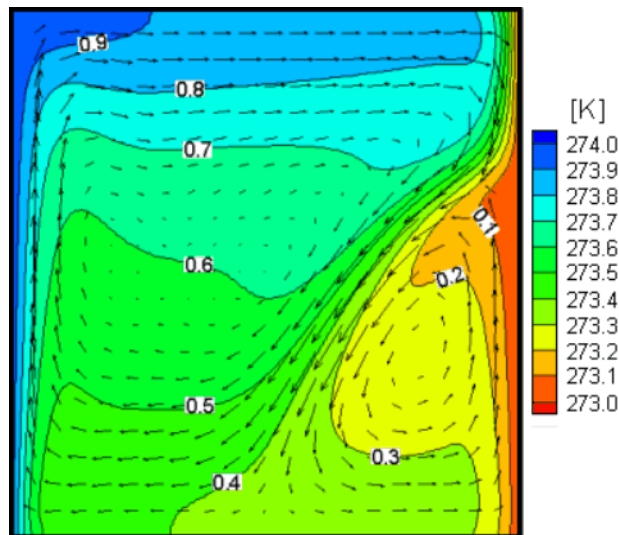
Do rozwiązania powyżej sformułowanego problemu użyto pięć opisanych wcześniej kodów numerycznych opartych na różnych metodach dyskretyzacji (metoda różnic skończonych, metoda objętości skończonych, metoda elementów skończonych, metoda bezsiatkowa). Porównania dokonano po weryfikacji każdego z kodów numerycznych 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  $21 \times 21$  do  $301 \times 301$  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  $201 \times 201$  (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)

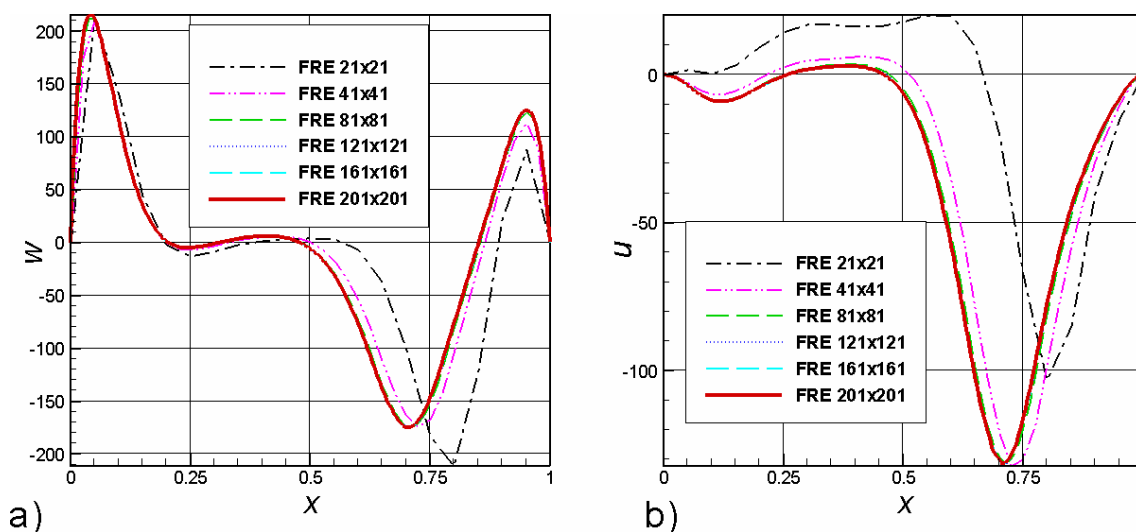
### 6.2.5. SOLVMEF (metoda bezsiatkowa, aproksymacja DAM)

Powyżej sformułowany problem rozwiązano również metodą bezsiatkową z wykorzystaniem opisanej 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  $100 \times 100$  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  $40 \times 40$  (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.



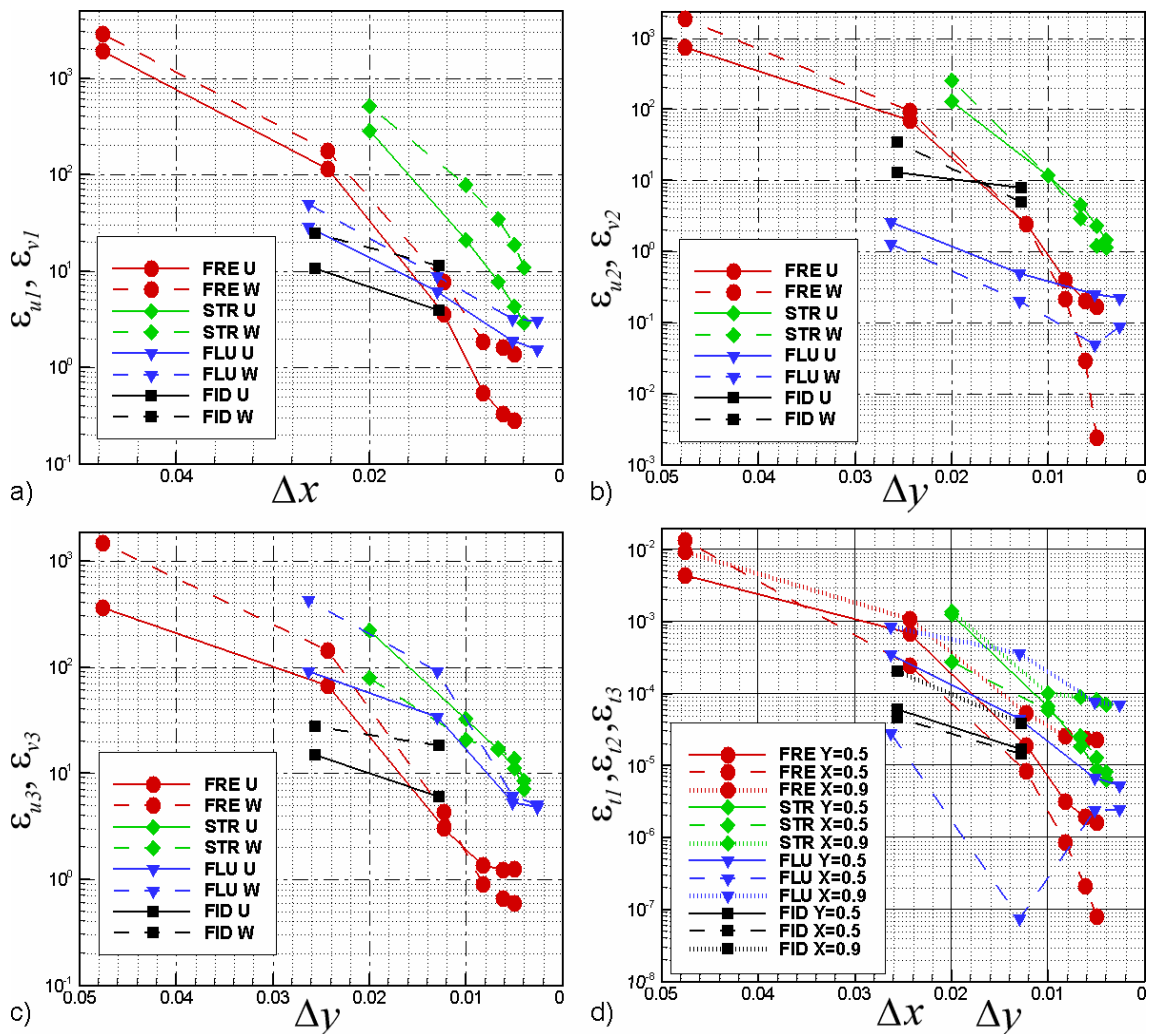
Rys. 36. Wartości składowych prędkości dla poziomego centralnego przekroju naczynia typu SRG uzyskane kodem FRECON ( $Y=0.5$ ). (a) – pionowa składowa prędkości, (b) – pozioma składowa prędkości (Tabela 5, #1)

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 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  $\varepsilon$  składowych prędkości  $U$ ,  $V$  i temperatury  $T$  opisuje dziewięć wskaźników:  $\varepsilon_{u1}$ ,  $\varepsilon_{w1}$ ,  $\varepsilon_{l1}$ ,  $\varepsilon_{u2}$ ,  $\varepsilon_{w2}$ ,  $\varepsilon_{l2}$ ,  $\varepsilon_{u3}$ ,  $\varepsilon_{w3}$  oraz  $\varepsilon_{l3}$ . 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 jakie 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).



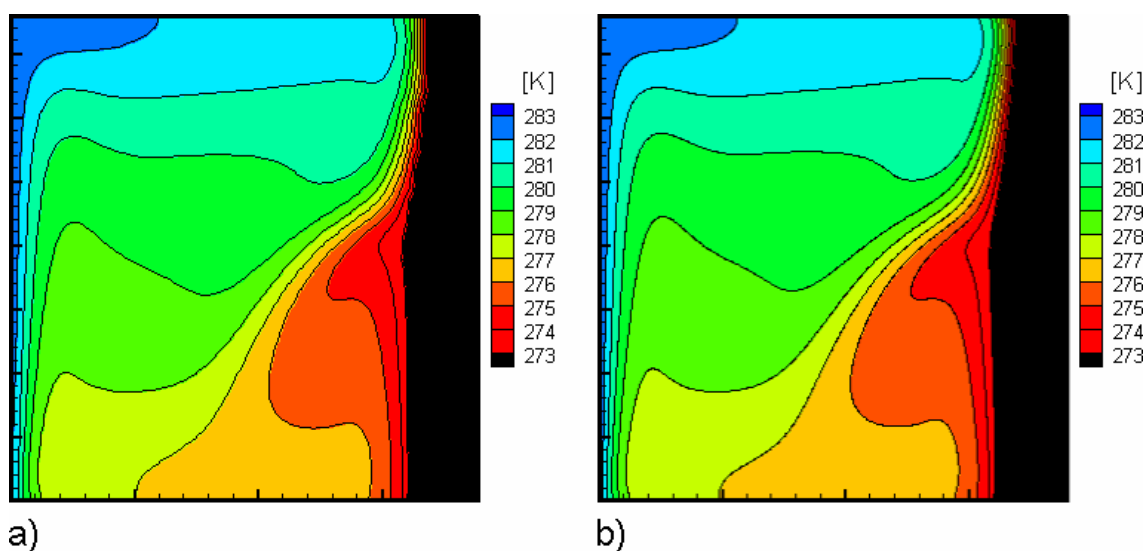
### 6.3.1. Modelowanie krzepnięcia

#### (1) Sześcian grzany różnicowo, wypełniony wodą

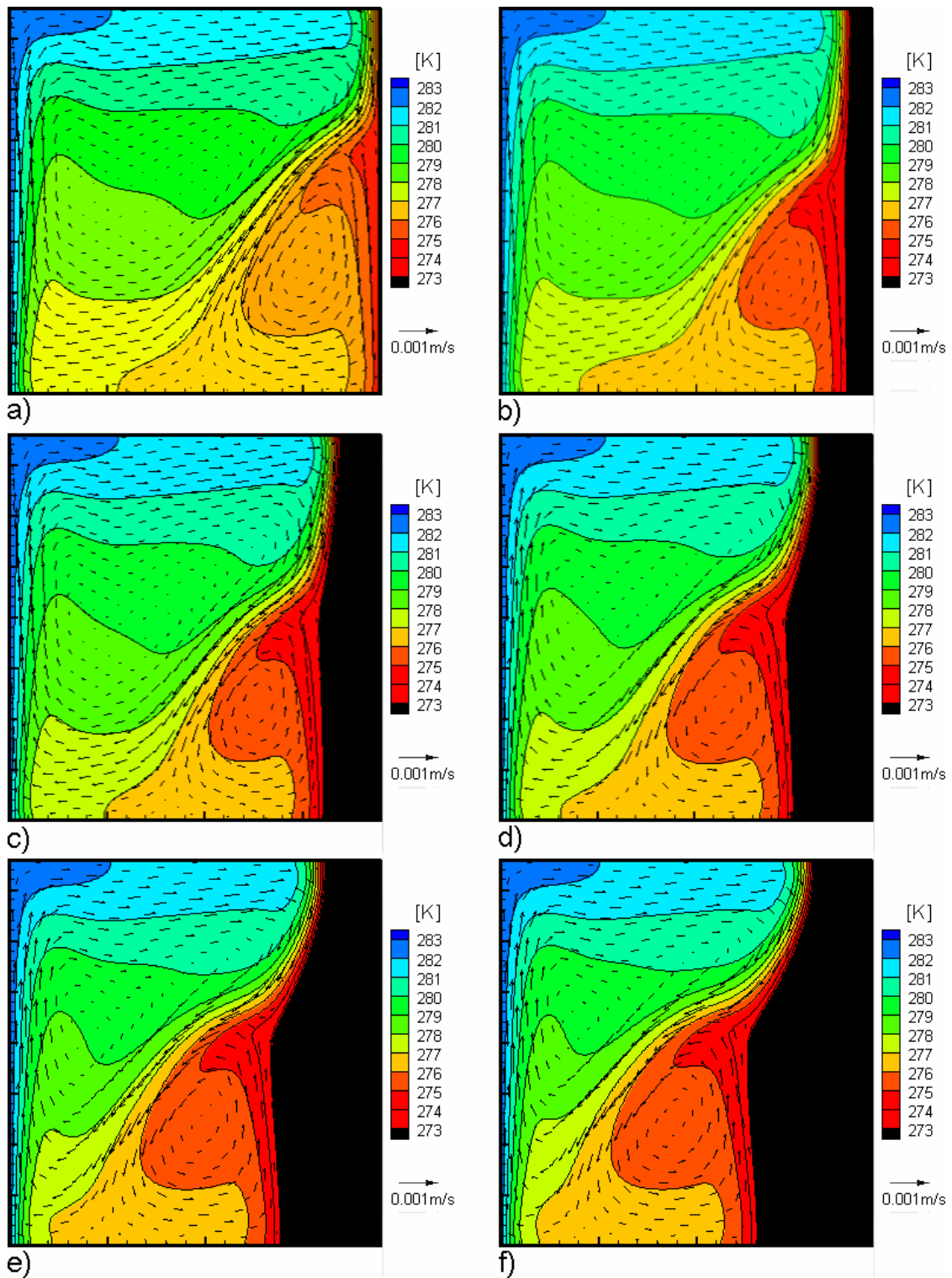
Jednym z podstawowych wzorców numerycznych i eksperymentalnych przepływów z krzepnięciem jest zamarzanie wody w różnicowo grzonym naczyniu sześciennym. W niniejszej pracy analizowano zjawisko krzepnięcia oraz towarzyszącą mu konwekcję naturalną w dwuwymiarowym przekroju sześcianu. Pionowe ściany modelowano 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)  $76 \times 76$  i (b)  $380 \times 380$



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], Giangi [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) Sześciennym naczyniu oznaczonym skrótem SIG, wypełniony PEG-900

W sześciennym naczyniu oznaczonym skrótem SIG, ruch konwekcyjny jest wywołany różnicą temperatur  $\Delta T$  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 SIMPLIC, 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  $\alpha$  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.

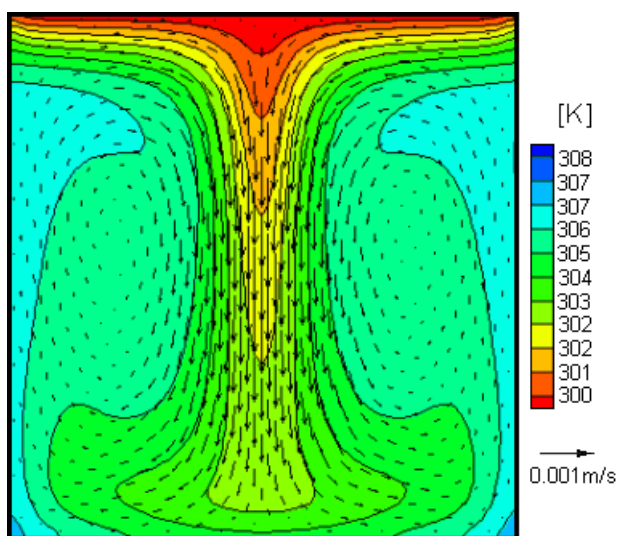
Wprowadzona modyfikacja pozwoliła na otrzymanie zadowalającej zgodności wyników eksperymentalnych i numerycznych, zarówno pod względem jakościowym, jak i ilościowym. Do takiego wniosku prowadzą przykładowo struktury przepływu pokazane na rys. 42 i 43, a także porównanie temperatur przedstawionych wyżej 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  $2\text{mm}$  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  $1\text{mm}$  (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

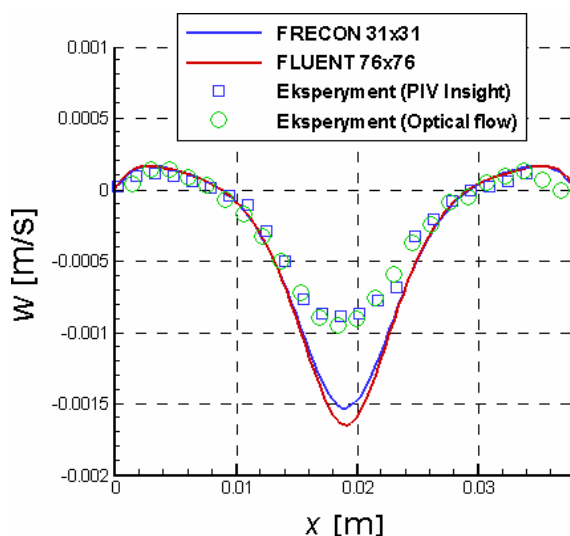
Temperatura	[K]	299	307	308	309	310	312	314	318	319
Lepkość	[kg/ms]	0.4	0.12	0.113	0.108	0.103	0.095	0.086	0.073	0.07

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.

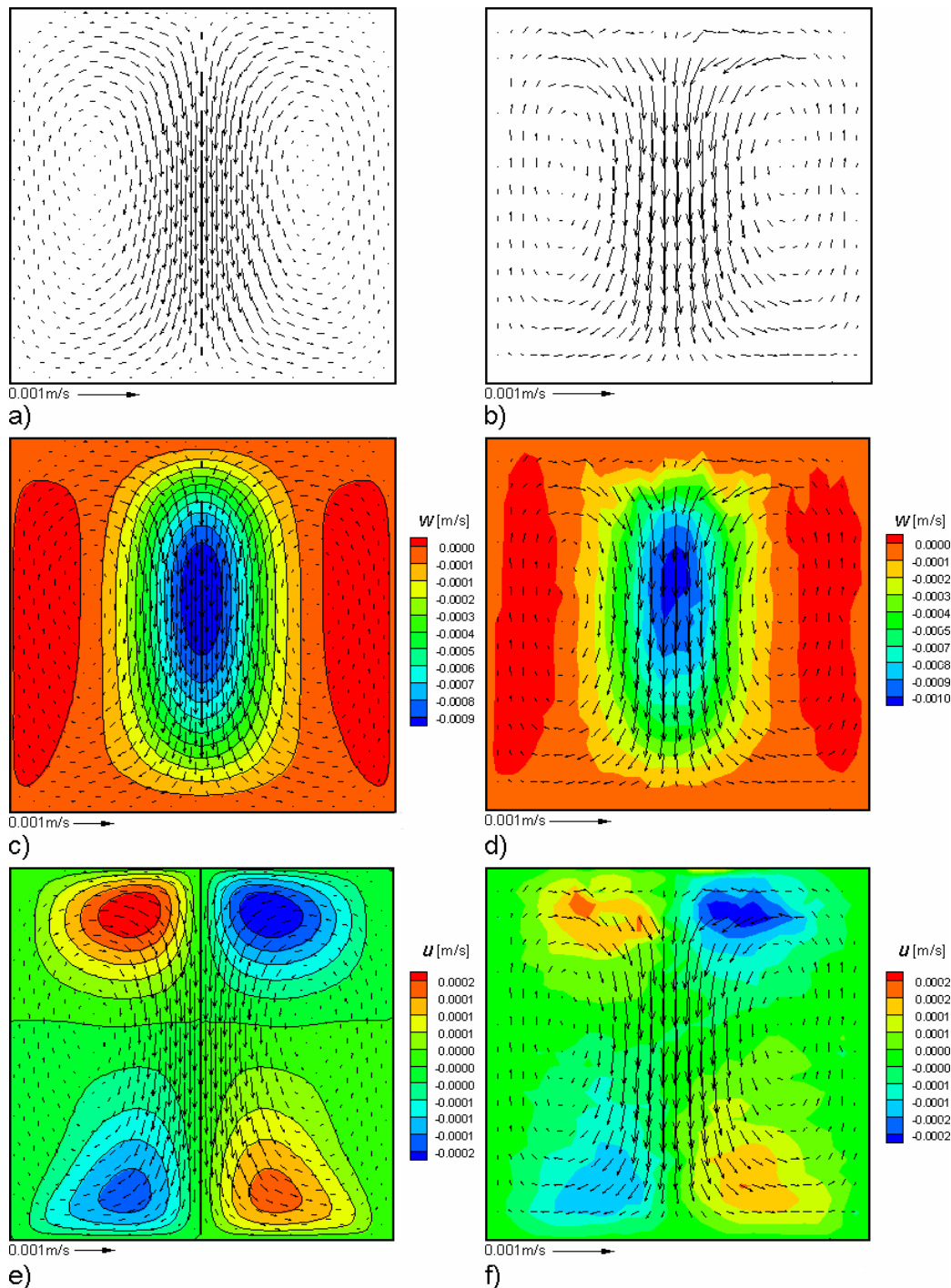
Obliczenia	Siatka	$W_{\min} \cdot 10^3$ [m/s]	$W_{\max} \cdot 10^3$ [m/s]	$T_{\min}$ [K]	TP1 [K]	TP2 [K]	TP3 [K]	TP4 [K]
FLU3D1	19x19x19	-0.905	0.111	302.55	307.3	306.4	306.1	304.5
FLU3D2	38x38x38	-0.964	0.123	302.03	307.3	306.4	306.2	303.7
FLU3D3	76x76x76	-0.963	0.125	302.00	307.3	306.5	306.2	303.5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



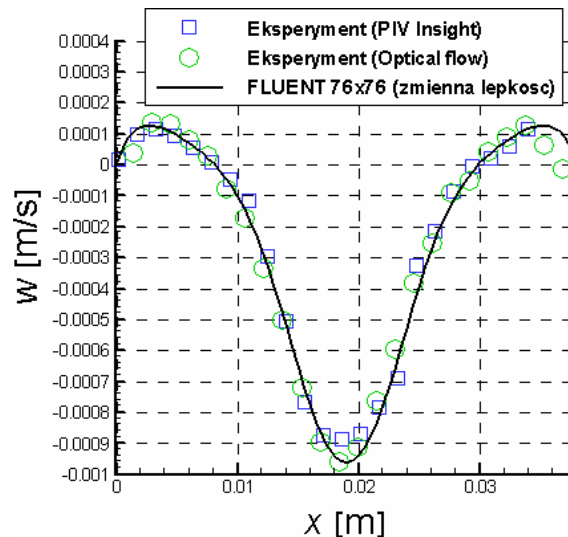
Rys. 41. Profile pionowej składowej prędkości wyznaczone wzdłuż prostej  $Z = 0.019$  przekroju centralnego. Wartości zmierzone dwiema metodami (Tabela 5, #15) porównano z wynikami numerycznymi (linie ciągłe), uzyskanymi dla stałego współczynnika lepkości (Tabela 5, #19) kodami FRECON3V i FLUENT.



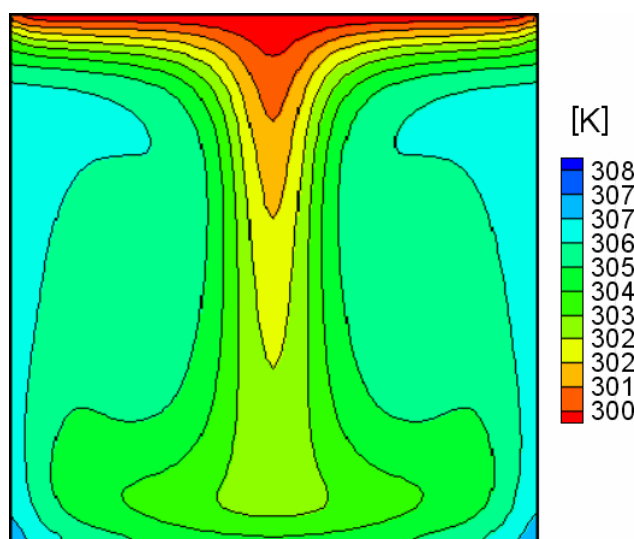
Rys. 42. Porównanie pól prędkości dla procesu przepływu konwekcyjnego glikolu polietylenowego w naczyniu typu SIG w płaszczyźnie  $Z = 0.019$ , otrzymanych eksperymentalnie (b), (d), (f) (Tabela 5, #15) z wynikami obliczeń (a), (c), (e) (Tabela 5, #19)

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

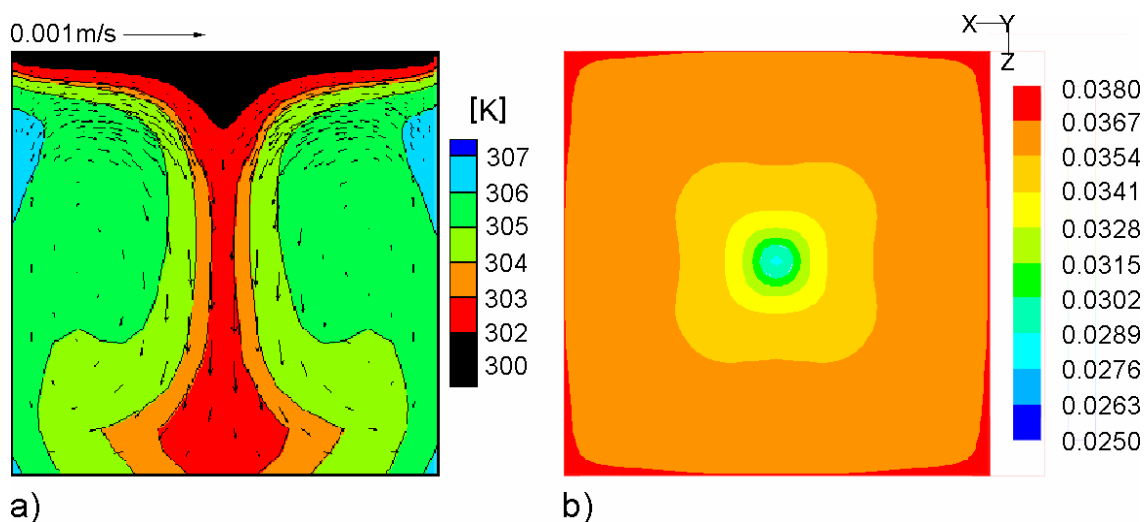
obserwowany eksperymentalnie proces krzepnięcia, w obliczeniach numerycznych konieczne było obniżenie tych temperatur ( $T_s = 300K$ ,  $T_l = 302K$ ), uzyskując faktycznie przesunięcie granicy krzepnięcia i topnienia. Wszystkie pozostałe warunki materiałowe, jak również warunki brzegowe, pozostawiono 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.



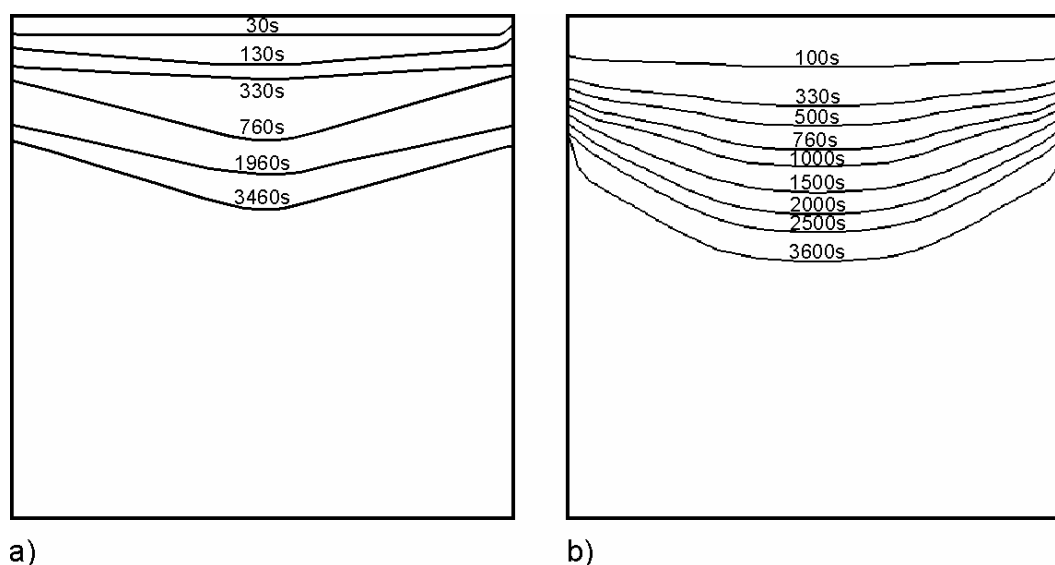
Rys. 44. Pole temperatury w przepływie konwekcyjnym glikolu polietylenowego w naczyniu typu SIG (Tabela 5, #19)



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.

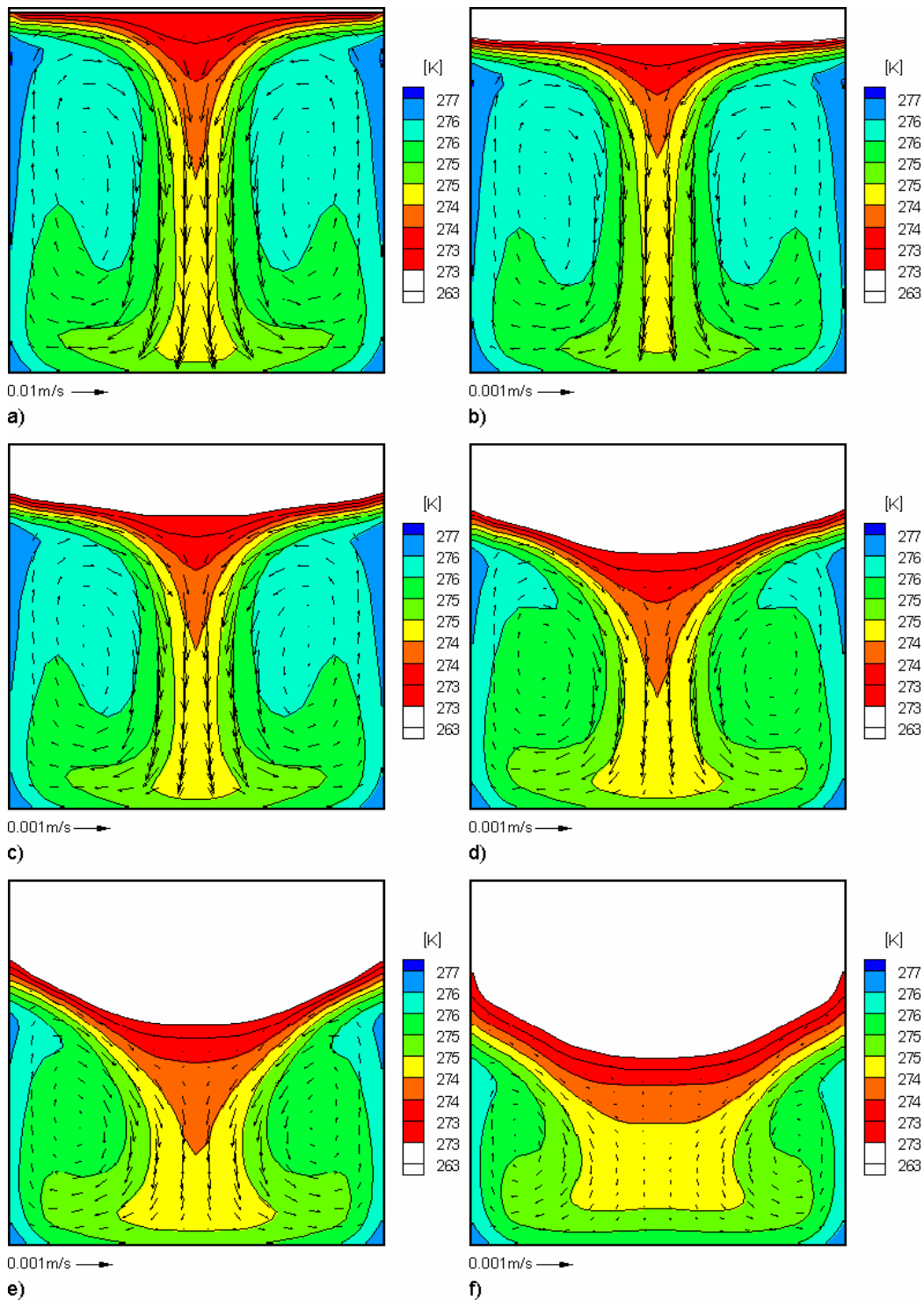
### (3) Sześcian z izotermiczną ścianką górną, wypełniony wodą

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 równolegle 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).

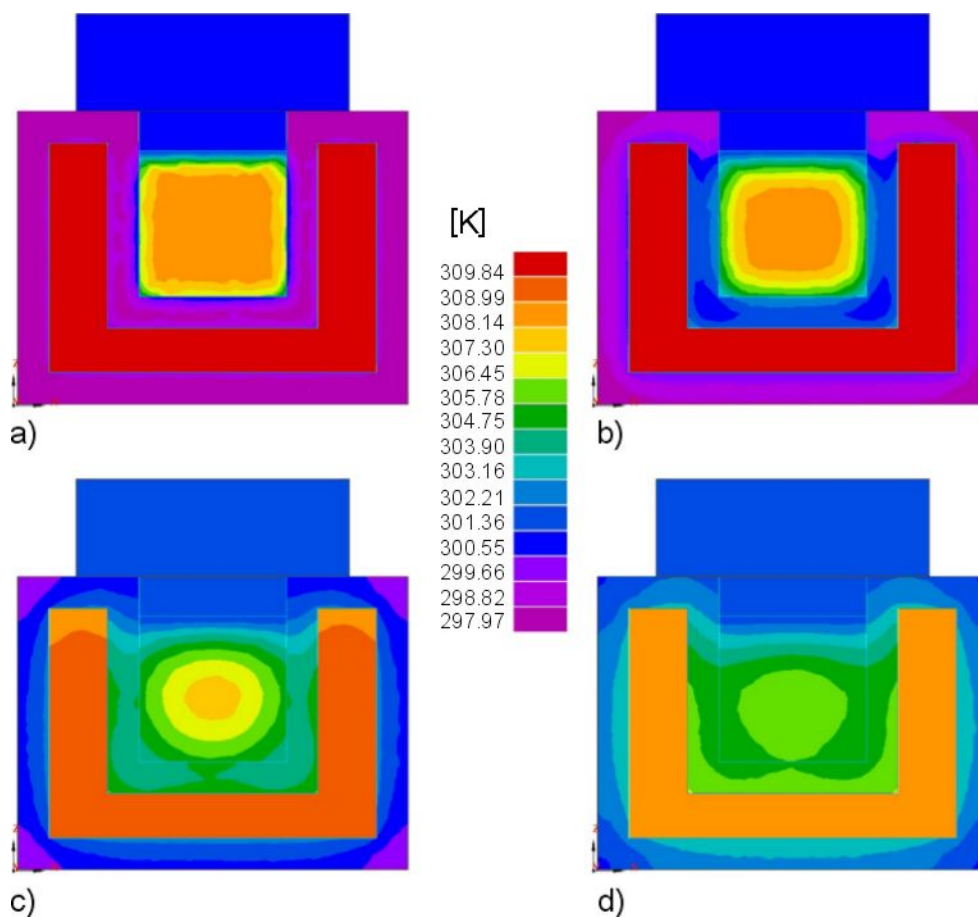
#### **(4) Sześcian z izotermiczną ścianką górną, symulacja programami odlewniczymi krzepnięcia PEG-900**

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:

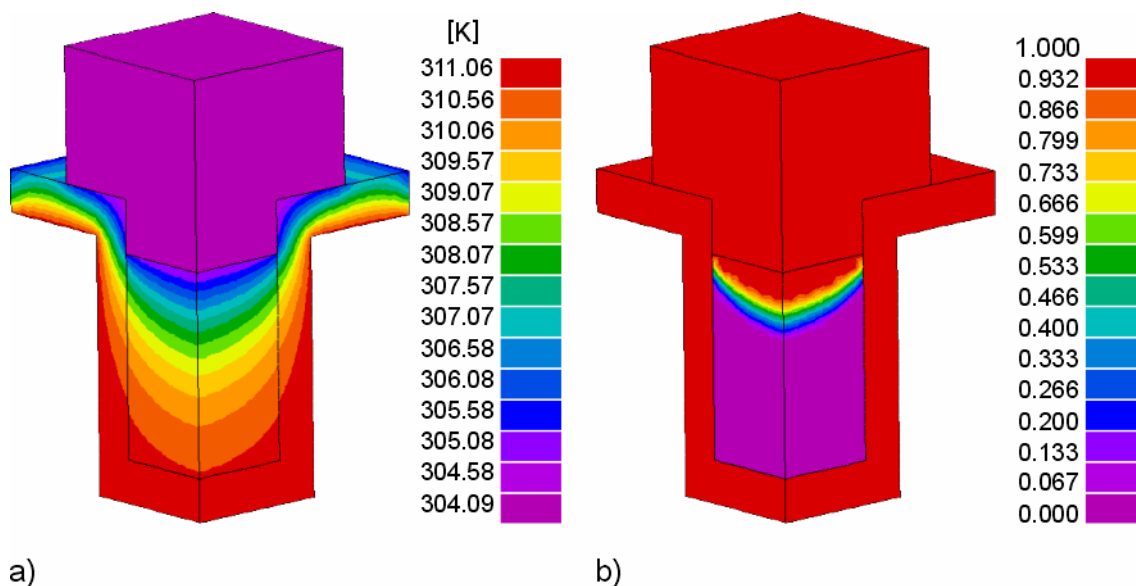
- poliglicol – aluminium :  $100 W/m^2 K$
- woda – pleksiglas :  $1000 W/m^2 K$
- pleksiglas – aluminium :  $100 W/m^2 K$
- aluminium – powietrze :  $10 W/m^2 K$

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

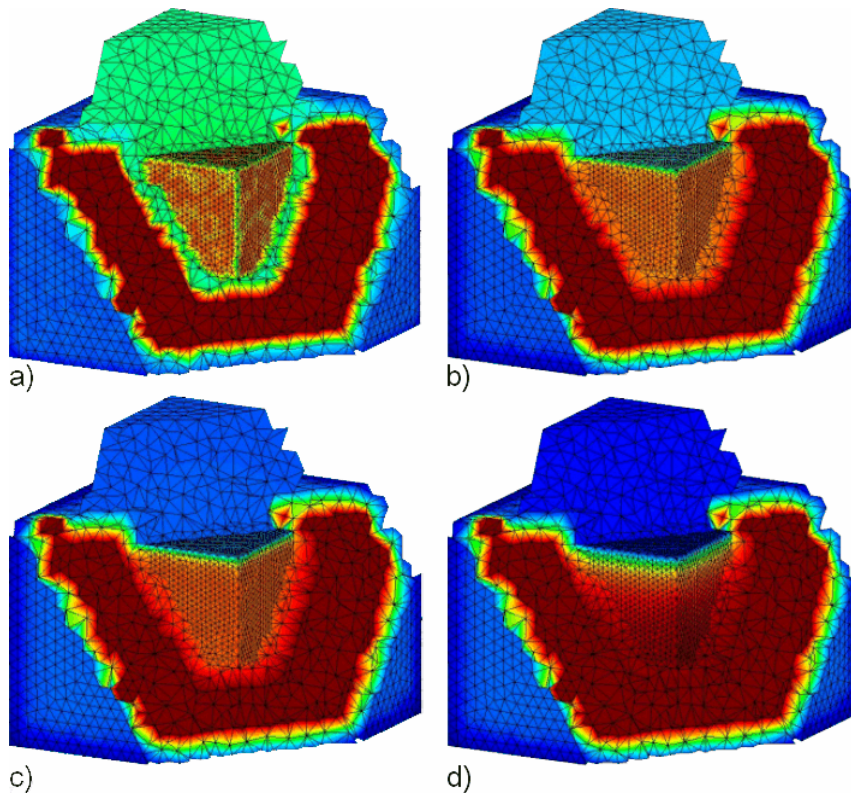
Specyfika programów odlewniczych utrudnia porównanie otrzymanych wyników z rezultatami innych programów, czy eksperymentem. Wiąże się to z ograniczonymi możliwościami modyfikowania własności materiałowych, warunków brzegowo-początkowych, jak i trudnościami z uzyskaniem pełnej informacji o interesujących 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 płaszczu 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 płaszczu 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.



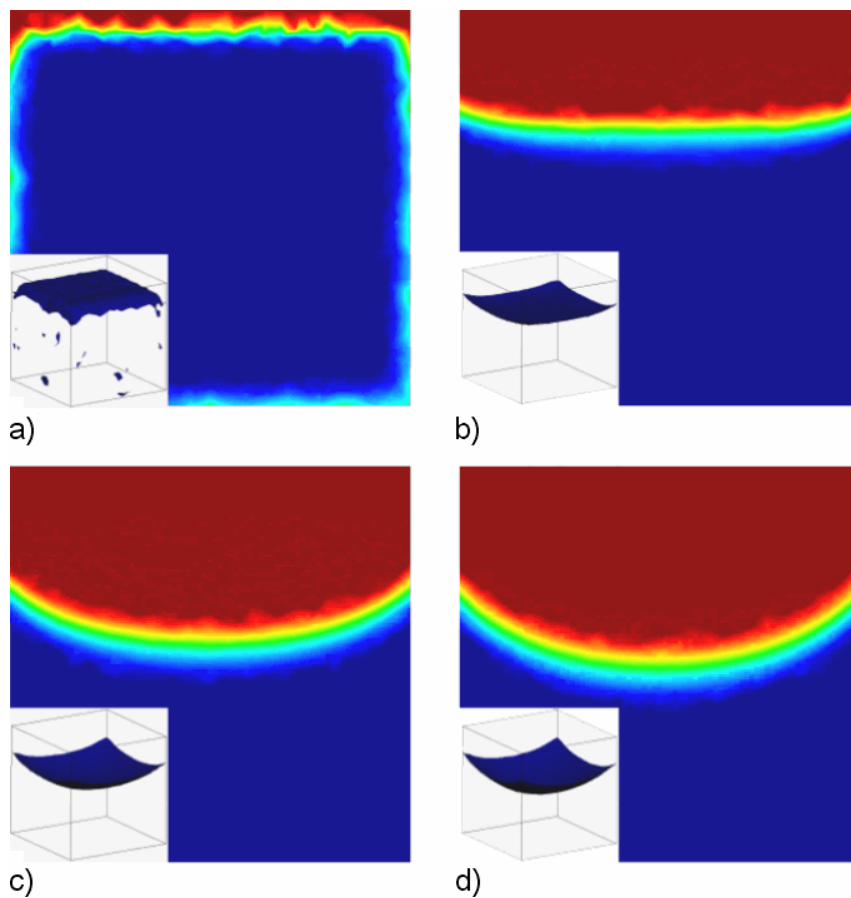
Rys. 48. Proces krzepnięcia PEG900 symulowany programem PROCAST przy braku wymiany ciepła z otoczeniem. Izotermy ilustrujące cztery fazy przesuwania się frontu krzepnięcia glikolu pokazane w płaszczyźnie symetrii układu (dzięki uprzejmości p. M. Sokolnickiego IWiT)



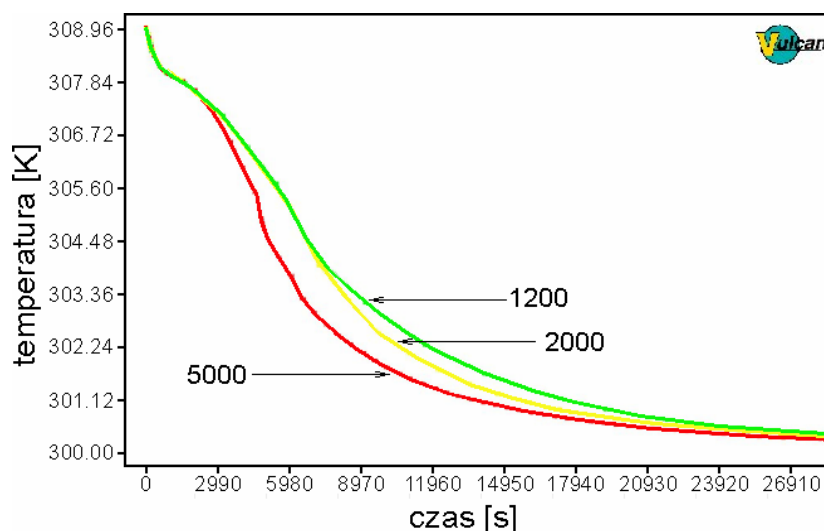
Rys. 49. Proces krzepnięcia PEG900 symulowany programem PROCAST dla izotermicznych warunków brzegowych (stała temperatura płaszcza wodnego i górnej ścianki). a) – izotermy, b) udział fazy stałej w krzepącym glikolu (dzięki uprzejmości prof. W. Kapturkiewicza AGH)



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



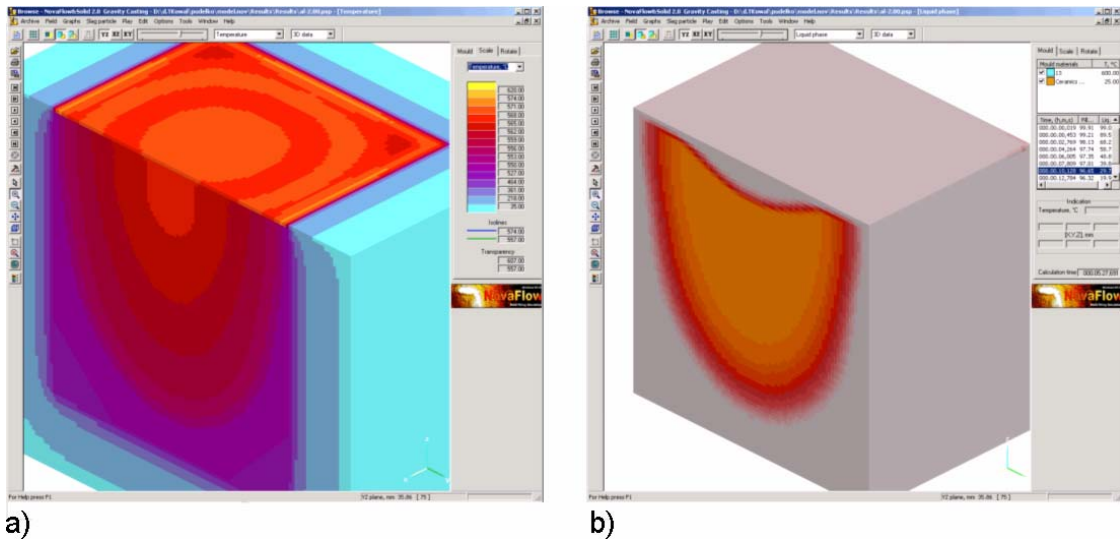
Rys. 52. Proces stygnięcia wybranego punktu cieczy w funkcji kroków czasowych symulacji programem VULCAN; geometria typu SIG. Porównanie wpływu współczynnika przyjmowania ciepła ścianek bocznych

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.

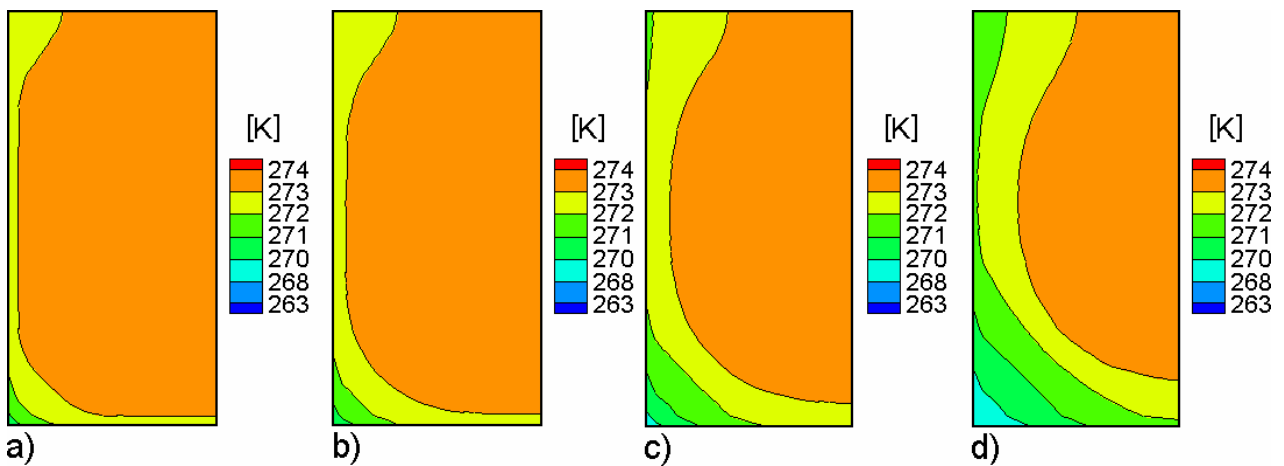
#### (5) Sześcián z górną powierzchnią swobodną (SP), symulacja programem NOVAFLOW krzepnięcia wody i aluminium

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.

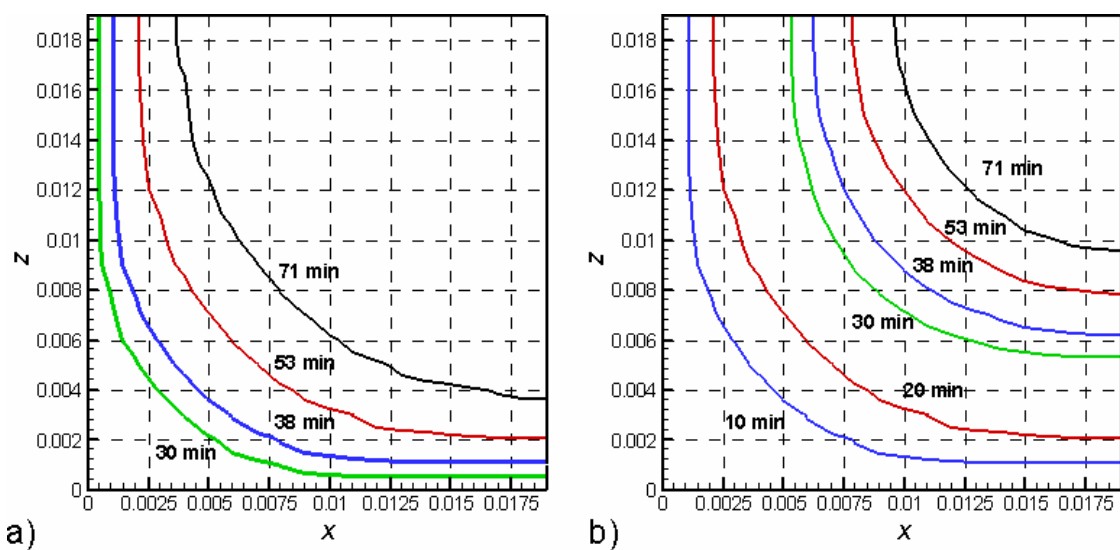
Właściwe obliczenia dotyczące procesów zachodzących w naczyniu z górną powierzchnią swobodną obejmowały modelowanie krzepnięcia wody w obecności konwekcji naturalnej. W eksperymentach laboratoryjnych w naczyniu z otwartą powierzchnią (SP) badano proces zalewania wraz z zamarzaniem wody (szczegóły eksperymentu #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. Własności 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, zanedbywany 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  $6 \times 10^6$  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  $0.2$ .

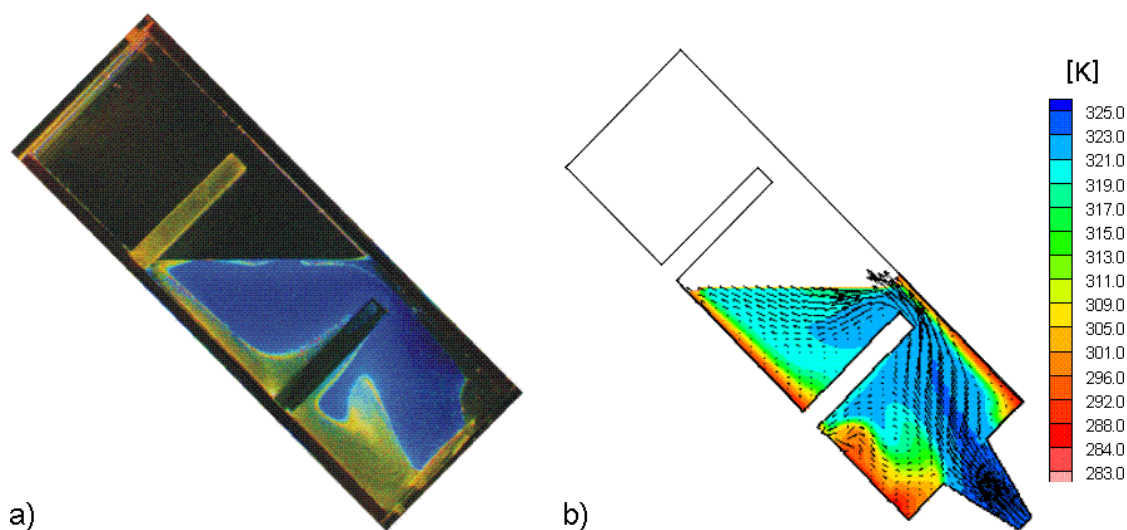
Przebieg eksperymentu symulowano programem FLUENT, przyjmując w równaniach transportu laminarny, lepki i nieściśliwy model przepływu płynu o zmiennej lepkości i gęstości. Opisana wcześniej metoda VoF została użyta do śledzenia powierzchni rozdziału pomiędzy fazą ciekłą (gliceryna), a fazą gazową (powietrze).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

Dwuwymiarowe, niestacjonarne rozwiązanie zostało uzyskane na siatce  $38 \times 114$  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.

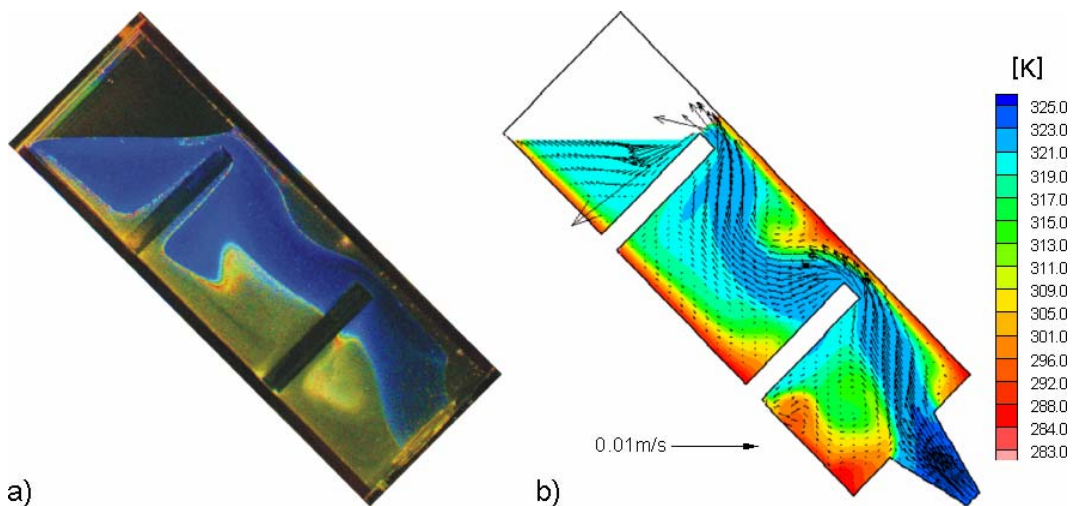


Proces modelowania podzielono na dwa etapy: fazę wtlaczania gliceryny oraz fazę jej chłodzenia. Pierwsza część obejmowała symulację przepływu z powierzchnią rozdziału, w której dominującą rolę odgrywała konwekcja wymuszona przez napływ cieczy na wlocie formy. W drugiej fazie, następującej bezpośrednio 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.

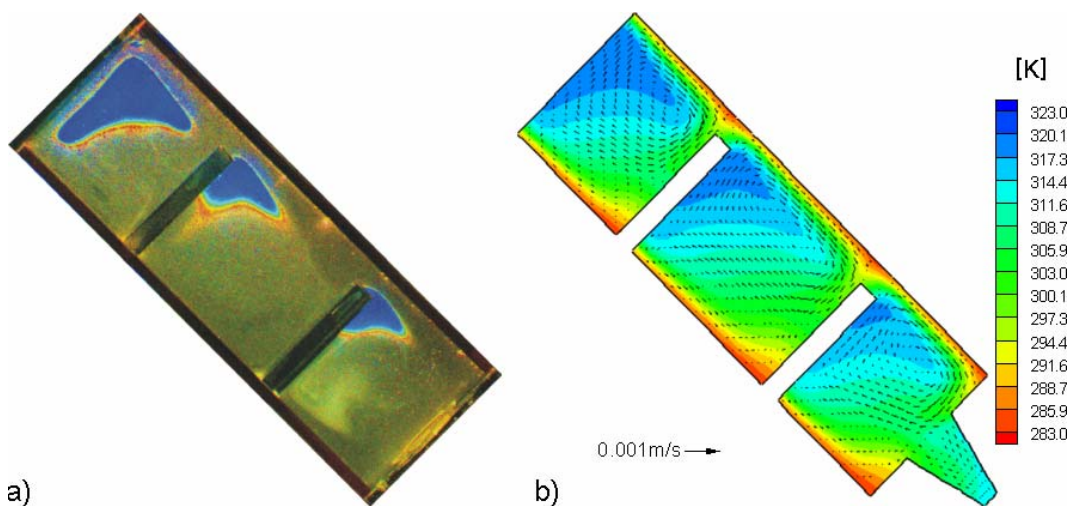
Eksperyment rozpoczyna się od otwarcia zaworu z dopływem gliceryny do otworu w dolnej części zalewanego prostopadłościanu. Początkowo gliceryna płynęła wzdłuż dolnej izotermicznej ścianki, gdzie następowało jej chłodzenie. Po wypełnieniu około jednej czwartej pierwszej komory naczynia zaobserwowano pojawienie 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).



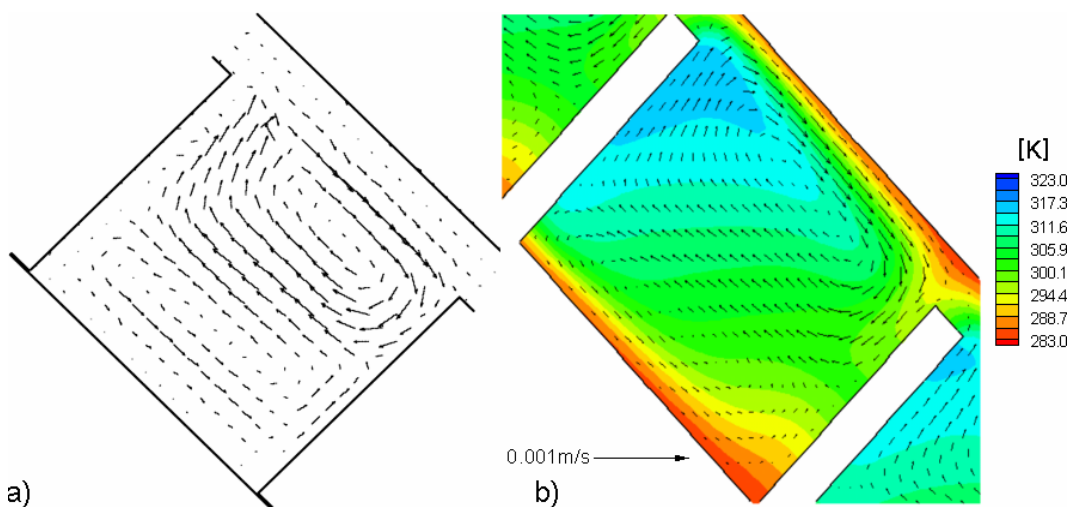
Rys. 56. Faza wypełniania naczynia typu PZP. Porównanie wyników eksperymentalnych z symulacją numeryczną dla  $t=100.5$  s (a) eksperyment, pole temperatury (PIT); (b) pole temperatury i prędkości (Tabela 5, #45)



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**

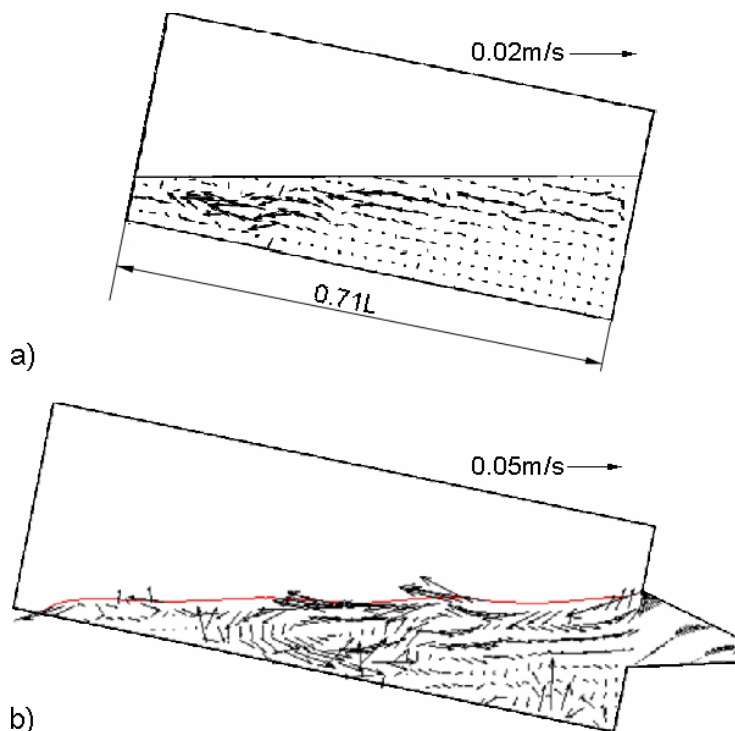
Kolejna konfiguracja eksperymentalna obejmowała zarówno modelowanie przepływu z powierzchnią rozdziału, jak i modelowanie procesu krzepnięcia. Jako materiał płynny zastosowano wodę. Przedmiotowa konfiguracja odpowiada eksperymentowi numer 41 (Tabela 5), w którym temperatura ścianek była ustawiona poniżej 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 grzonym 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.

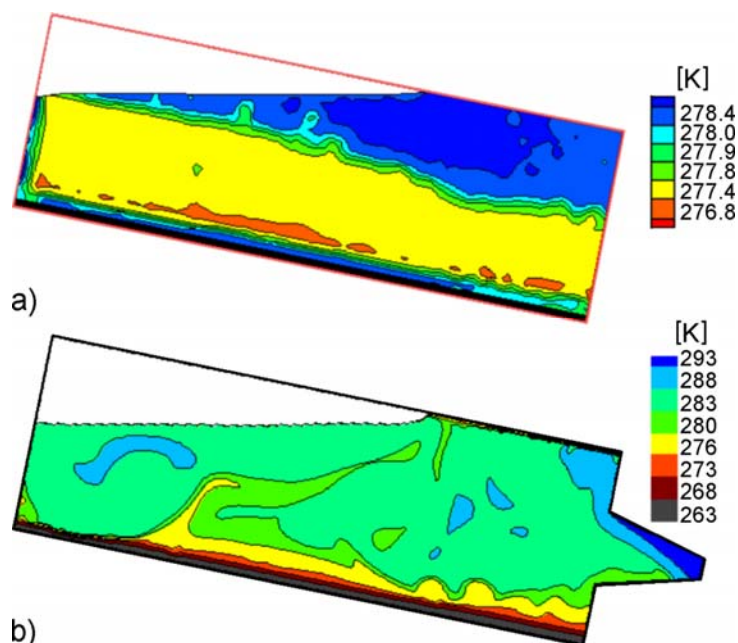
Dwuwymiarowe, niestacjonarne rozwiązanie uzyskano przy użyciu węzłów rozmieszczonych w siatkach obliczeniowych 38x114 oraz 76x228. Symulacja okazała się bardzo czasochłonna, szczególnie pierwsza faza obliczeń. Kroki czasowe rzędu  $10^{-3}$  sekundy były konieczne w pierwszej fazie obliczeń, aby zapobiec 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.



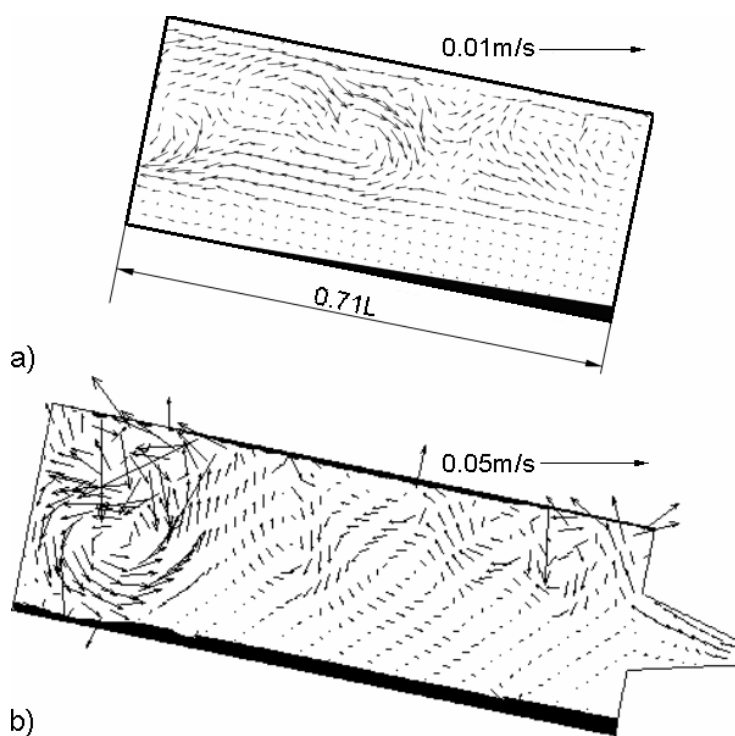
Rys. 60. Porównanie pól prędkości dla  $t = 65$  s w naczyniu typu PBP (a) pomiar metodą PIV (Tabela 5, #40); (b) symulacja numeryczna (Tabela 5, #43)



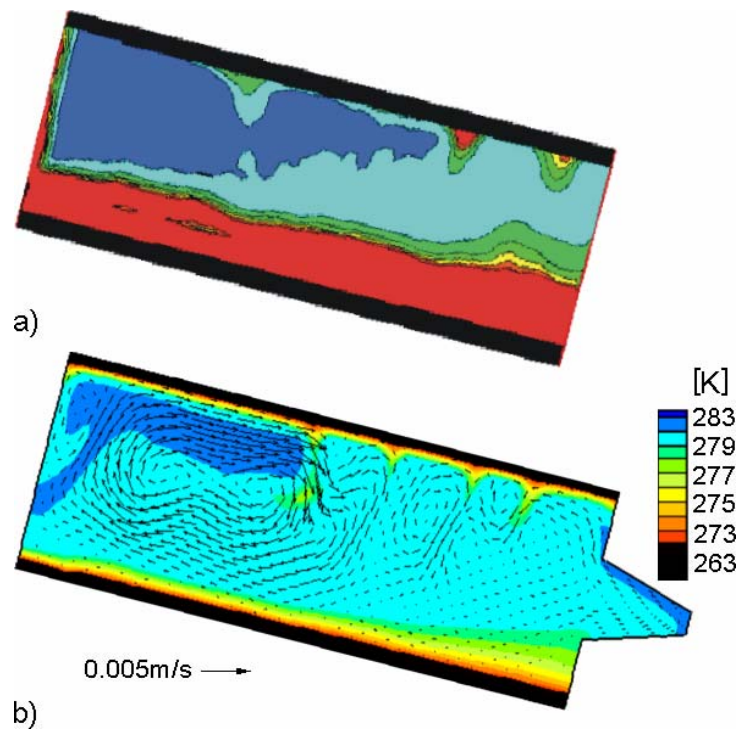
Rys. 61. Porównanie pól temperatury dla  $t = 150$  s w naczyniu typu PBP (a) pomiar metodą PIT (Tabela 5, #40); (b) symulacja numeryczna (Tabela 5, #43)

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

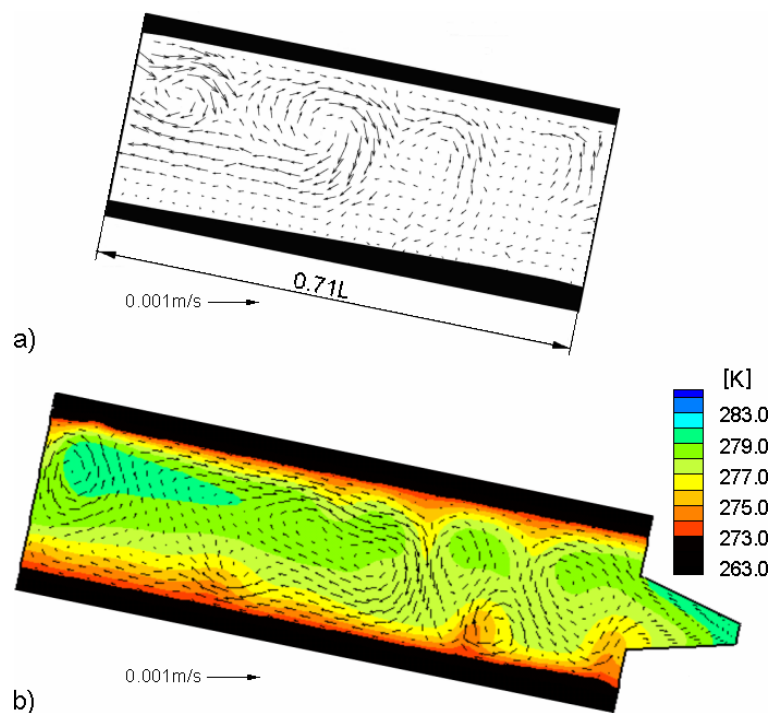
płyn przemieszczał się wzdłuż powierzchni swobodnej ze stosunkowo dużą prędkością, podczas gdy w pobliżu dolnej chłodnej ścianki, na której obserwowano narastanie fazy stałej, wartości prędkości były znacznie niższe. Symulacja numeryczna poprawnie oddała ten charakter przepływu, co jest widoczne na rys. 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)



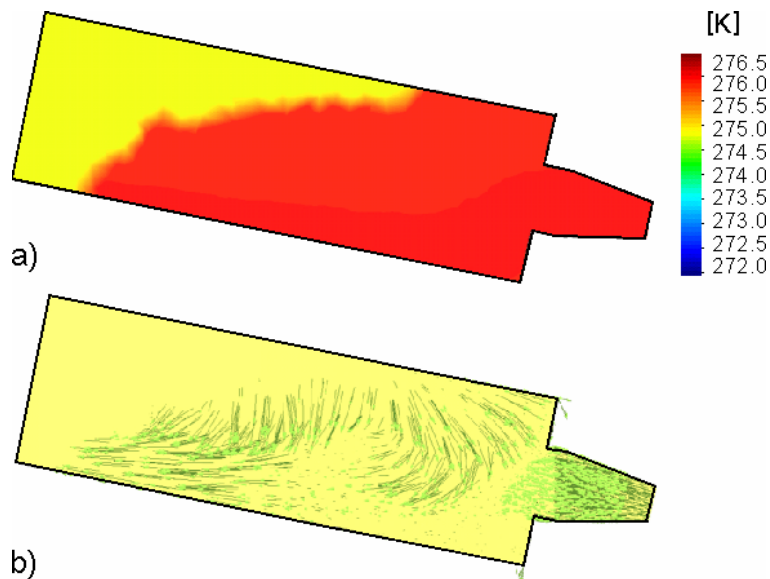
Rys. 64. Porównanie pól prędkości dla  $t = 560$  s w naczyniu typu PBP (a) pomiar metodą PIV (Tabela 5, #40) (b) symulacja numeryczna (Tabela 5, #43)

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).

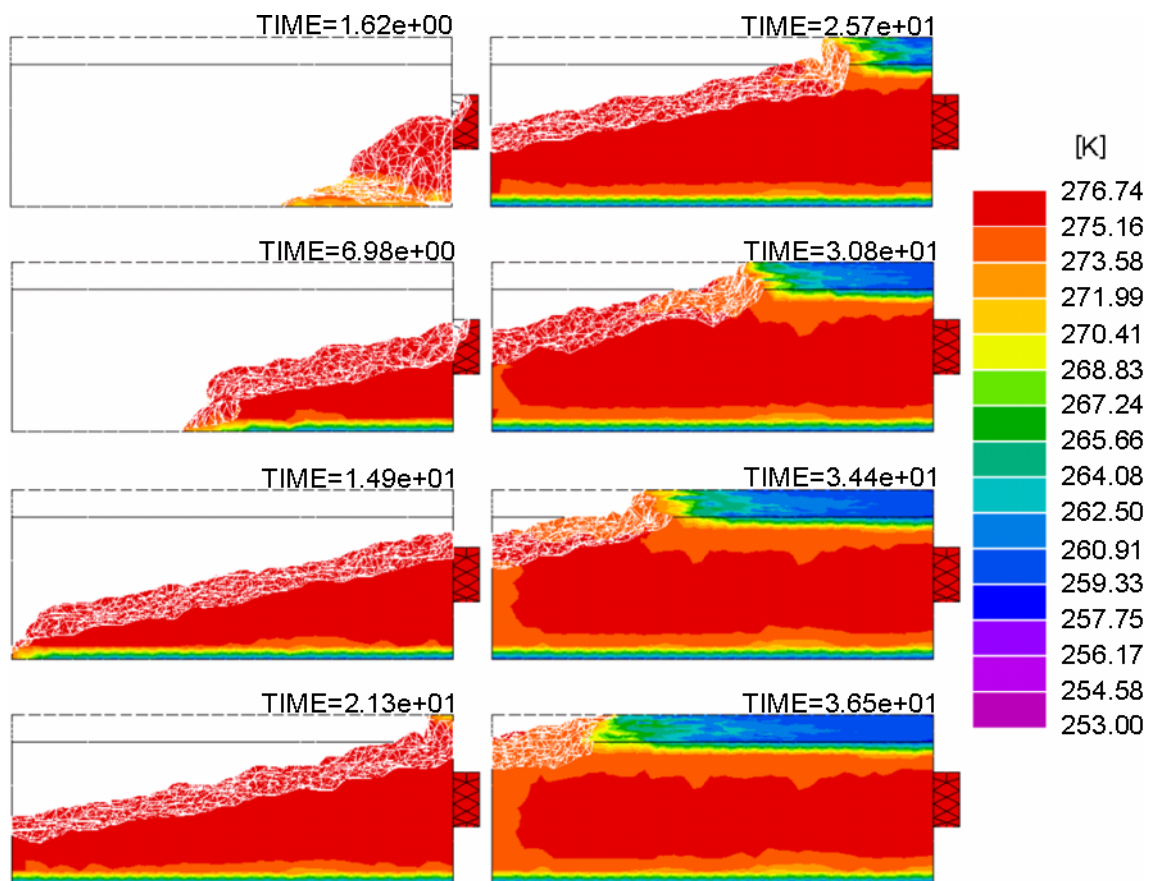
Struktura przepływu podczas procesu krzepnięcia charakteryzowała się obecnością wirów skierowanych zgodnie ze wskazówkami zegara. Prowadziły one do tworzenia się „termików” z prawej do lewej strony wzdłuż górnej granicy międzyfazowej. Obliczenia numeryczne prawidłowo odtwarzały tego typu struktury, co 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)

## 7. Wnioski końcowe

Projektowanie i sterowanie instalacjami przemysłowymi w odlewnictwie związane jest z dużymi kosztami i z dużym współczynnikiem ryzyka. Jest to spowodowane, między innymi, wciąż niedostateczną jakością koniecznych do przeprowadzenia w takiej sytuacji symulacji numerycznych procesu fizycznego. Weryfikacja rezultatów takich symulacji w warunkach przemysłowych jest jednak bardzo trudna i często możliwa jedynie dla globalnych parametrów. Jeszcze mniej przydatne wydają się próby wykorzystania różnego typu korelacji, czy analogii, oparte na poszukiwaniu związków liczb kryterialnych charakteryzujących przepływy. Zaproponowana w tej pracy metoda uwiarygodnienia, czy certyfikacji stosowanych metod i programów numerycznych na podstawie wzorcowych eksperymentów laboratoryjnych stanowi więc próbę uzupełnienia dotychczas praktykowanych w przemyśle metodologii planowania i testowania wprowadzanych rozwiązań technologicznych.

Przedstawione wzorce eksperymentalne bazują na optycznych metodach pomiaru i komputerowej analizie otrzymanych obrazów przepływu. Dzięki wykorzystaniu technik anemometrii i termometrii obrazowej (PIV&T), obok informacji jakościowych, zgromadzono zestawy ilościowych informacji o pełnym polu temperatury i prędkości, istotnie ułatwiając interpretację bardzo złożonych procesów przepływowych. Uzupełnieniem tej informacji są rezultaty dodatkowych badań, ograniczone do wybranych elementów problemu przepływowego, czy nawet do jakościowego opisu obserwowanego zjawiska. Połączenie tych informacji stanowi rezultat, który, zdaniem autorów pracy, może być wykorzystany przez twórców i użytkowników numerycznych programów symulacyjnych.

Opisana w pracy metoda laboratoryjnej certyfikacji symulacji numerycznych wiąże się z drastycznymi ograniczeniami. Zastąpienie złożonej geometrii przemysłowej uproszczonym modelem, zmiana skali problemu i wreszcie zastosowanie zupełnie innych materiałów to główne źródła odstępstw między modelem eksperymentalnym a jego przemysłowym wzorcem. Z drugiej strony wydaje się oczywiste, że symulacja numeryczna procesów fizycznych obserwowanych we wzorcu laboratoryjnym musi wiernie odtworzyć te uproszczone warunki, jeśli miałyby służyć pomocą w dużo bardziej złożonych warunkach przemysłowych. Z tą myślą przygotowano zestawy pomiarów wykonanych dla stosunkowo prostych procesów fizycznych, zawierających jednak elementy istotne dla problematyki odlewniczej. W pracy podjęto też próbę wykorzystania niektórych dostępnych autorom programów numerycznych do symulacji przebiegu prezentowanych eksperymentów laboratoryjnych, ilustrując przy tym trudności jakie często pojawiają się przy tego rodzaju porównaniach.

Informacje dostarczane przez badania eksperymentalne rzadko mają charakter uniwersalny. Nawet gdyby było możliwe zastosowanie w danym eksperymencie wszystkich dostępnych technik pomiarowych, mogą pojawić się niezaprogramowane w doświadczeniu lub niemożliwe do zmierzenia parametry fizyczne danego procesu. Z tego względu nie należy odrzucać *a priori* jednostkowych informacji empirycznych, które być może są obciążone dużym, przypadkowym błędem. Należałoby raczej próbować wnioskować o poprawności symulacji numerycznej przez wielokrotne porównania różnych zestawów danych eksperymentalnych, optymalnie, jeśli są to pomiary uzyskane w różnych warunkach i różnymi metodami. Oczywiście rzadko istnieje możliwość korzystania z dowolnie szerokiej bazy empirycznej. Kierując się powyższą argumentacją, w przedstawionej pracy starano się obok prezentacji tzw. wzorców eksperymentalnych, pozostawić informacje o innych podobnych eksperymentach, w których z różnych powodów nie wszystko przebiegało tak jak było to zaplanowane. Można sobie wyobrazić wykorzystanie tych informacji nie tylko jako wskazówki, pomocnej przy planowaniu przyszłych prac eksperymentalnych, ale też jako danych wejściowych do analizy dokładności i wrażliwości zjawiska na różnego rodzaju efekty uboczne i niedokładności. Traktując „zakłócone” dane empiryczne jako bazę odniesienia można poszukiwać ich odpowiedników numerycznych, weryfikując zarówno wrażliwość samego kodu

numerycznego, jak i jego zdolność do odtworzenia zjawiska na podstawie niepełnej, czy nawet częściowo przekłamaną informacją.

Na bazie uzyskanych w tej pracy doświadczeń można stwierdzić konieczność wprowadzenia systemu certyfikacji wiarygodności przemysłowych symulacji numerycznych. Potwierdzają to wykonane próby uzyskania poprawnych rozwiązań dla wybranych konfiguracji laboratoryjnych. Mimo, że analizowano proste przepływy z powierzchnią swobodną i przemianami fazowymi (krzepnięcie), w prostych geometrycznie modelach, wyniki symulacji numerycznych wykonanych kilkoma dostępnymi programami odlewniczymi poważnie odbiegały od rzeczywistości.

Problematyka walidacji, a następnie certyfikacji symulacji numerycznych jest bardzo szeroka i znacznie wykracza poza zakres tej pracy. Przewodnym celem przeprowadzonych tutaj prac pozostaje raczej zasygnalizowanie problemów i wskazanie możliwych dróg dla opracowania jednoznacznych metod uwiarygodnienia kodów numerycznych. Znaczenie problemu walidacji szczególnie ujawnia się, gdy symulacje komputerowe wykorzystywane są do analizy niezwykle skomplikowanych fizycznie procesów, jakie zachodzą przy produkcji odlewniczej. Wydaje się, że jedyną realną drogą jest podzielenie analizowanego problemu na bloki tematyczne, zaprojektowanie laboratoryjnych wzorców eksperymentalnych odpowiadających zjawiskom fizycznym każdego z takich bloków i przeprowadzenie walidacji symulacji dla każdego z wzorców eksperymentalnych. Taką procedurę próbowano wprowadzić w obecnej pracy, analizując dla rozpatrywanych modeli fragmenty zjawisk fizycznych (zalewanie formy, konwekcja naturalna, krzepnięcie itd). Po pozytywnej walidacji fragmentów zjawiska, połączenie tych zjawisk cząstkowych w jeden eksperyment walidacyjny, niekoniecznie tak dokładny jak te w poszczególnych blokach, powinno zakończyć procedurę walidacyjną. Odniesienie uzyskanych rezultatów do warunków przemysłowych to już następny etap, wymagający określenia z jednej strony koniecznej dokładności odwzorowania zjawisk, z drugiej zaś, zdefiniowania zakresu tolerancji w określeniu parametrów odpowiedzialnych za przebieg procesu (np. danych materiałowych, warunków brzegowych, początkowych itp.).

## 8. Literatura

- [1] Adrian R. J., "Statistical Properties Of Particles Image Velocimetry Measurements In Turbulent Flow In Fluid Mechanics", *Ladoan – Instituto Superior Técnico*, pp. 115 –129, Lisbon, 1999.
- [2] Anthony T. R., Cline H. E., "Surface Rippling Induced By Surface-Tension Gradients During Laser Surface Melting And Alloying", *Appl. Physics*, **48**, pp. 3888-3894, 1977.
- [3] Atluri S. N., Shen S., "The Meshless Local Petrov-Galerkin (MLPG) Method", *Tech Science Press*, Encino, 2002.
- [4] Banaszek J., Jaluria Y., Kowalewski T. A., Rebow M., "Semi Implicit FEM Analysis Of Natural Convection In Freezing Water", *Num. Heat Transfer, Part A*, **36**, pp. 449-472, 1999.
- [5] Banaszek J., Kowalewski T. A., Furmański P., Rebow M., Cybulski A., Wiśniewski T. S., "Konwekcja naturalna z przemianą fazową w układach jednoskładnikowych i binarnych", *Prace IPPT*, **3**, 2000.
- [6] Bennon W. D., Incropera F. P., "A Continuum Model For Momentum, Heat And Species Transport In Binary Solid-Liquid Phase Change System I, Model Formulation", *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, **30**, pp. 2161-2170, 1987.
- [7] Bennon W. D., Incropera F. P., "Numerical Analysis Of Binary Solid-Liquid Phase Change Using A Continuum Model", *Num. Heat Transfer*, **13**, pp. 277-296, 1988.
- [8] Brackbill J. U., Kothe D. B., Zemach C., "A Continuum Method For Modeling Surface Tension", *J. Comput. Physics*, **100**, pp. 335-354, 1992.
- [9] Crank J., "Free and Moving Boundary Problems", *Clarendon Press*, Oxford, 1984.
- [10] De Vahl Davis G., "Natural Convection Of Air In A Square Cavity: A Benchmark Numerical Solution" *Int. Journal for Numerical Methods in Fluids*, **3**, pp. 249-264, 1983.
- [11] De Vahl Davis G., "Finite Difference Methods For Natural And Mixed Convection In Enclosures", *Heat Transfer*, pp. 101-109, Hemisphere, Washington, 1982
- [12] Draper C. W., "Laser surface alloying: the state of the art", *Journal of Metals*, **34**, pp. 24-43, 1982.
- [13] Fabbri M., Voller V. R., "The Phase-Field Method In The Sharp Interface Limit: A Comparison Between Model Potential", *J. Comput. Physics*, **130**, pp. 256-265, 1987.
- [14] Ferziger J.H., Peric M., "Computational Methods for Fluid Dynamics", 2<sup>nd</sup> Edition, *Springer-Verlag*, Berlin, 1999.
- [15] Fidap 8.7., "Users Guide", *Fluent Inc.*, Lebanon, NH 2002.
- [16] Fluent 6.0., "Users Guide", *Fluent Inc.*, Lebanon, NH 2002.
- [17] Giangi M., Kowalewski T. A., Stella F., Leonardi E., "Natural Convection During Ice Formation: Numerical Simulation Vs. Experimental Results", *Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences*, **7**, pp. 321-342, 2000.
- [18] Giangi M., Stella F., Kowalewski T. A., "Phase Change Problems With Free Convection: Fixed Grid Numerical Simulation", *Comput. Visual Sci.*, **2**, pp. 123-130, 1999.
- [19] Gnanamuthu L. S., "Laser Surface Treatment", *Optical Engineering*, **19**, pp. 783-792, 1980.
- [20] Gouriet J. B., Stitou A., Riethmuller M. L., "Practical Implications Of Camera Resolution And Peak Locking In Actual Measurements", 4<sup>th</sup> *International Symposium on Particle Image Velocimetry*, paper 1012, PIV 01, 2/3, September 17-19, Göttingen, Germany, 2001.

- [21] Hesselink L., "Digital Image Processing in Flow Visualization", *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **20**, pp. 421-485, 1988.
- [22] Hiller W., Koch S., Kowalewski T. A., Stella F., "Onset of Natural Convection in a Cube", *Int. J. Heat Mass Transfer*, **36**, pp. 3251-3263, 1993.
- [23] Hiller W., Kowalewski T. A., "Simultaneous Measurement of the Temperature and Velocity Fields In Thermal Convective Flows", *Flow Visualization IV, Hemisphere*, pp. 617-622, Paris, 1987.
- [24] Hirt C. W., Nichols B. D., "Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries", *J. Comput. Physics*, **39**, pp. 201-225, 1981.
- [25] Issa R. I., "Solution of Implicitly Discretized Fluid Flow Equations by Operator-Splitting", *J. Comput. Physics*, **62**, pp. 40-65, 1983.
- [26] Jaszczur M., "Modelowanie procesów konwekcji naturalnej płynów newtonowskich w cylindrycznej przestrzeni zamkniętej", *Rozprawa doktorska*, AGH, Kraków, 1999.
- [27] Kovacevic I., Poredos A., Sarler B., "Solving the Stefan Problem with the Radial Basis Function Collocation Method", *Numerical Heat Transfer, Part B*, **44**, pp. 1-24, 2003.
- [28] Kowalewski T. A., "Application of Liquid Crystal Tracers for Full Field Temperature and Velocity Measurements", *Proc. of the 2001 International Symposium on Environmental Hydraulics*, ISEH, 2001.
- [29] Kowalewski T. A., Cybulski A., "Experimental and Numerical Investigations of Natural Convection in Freezing Water", *Int. Conf. on Heat Transfer with Change of Phase*, Kielce, Dec. 8-10, 1996, in *Mechanics*, Vol. **61/2**, pp.7-16, 1996.
- [30] Kowalewski T. A., Cybulski A., "Konwekcja naturalna z przemianą fazową", *Prace IPPT*, **8**, 1997.
- [31] Kowalewski T. A., Cybulski A., Rebow M., "Particle Image Velocimetry and Thermometry in Freezing Water", *Proc. 8<sup>th</sup> Int. Symposium on Flow Visualization*, CD-ROM Proceedings ISBN 0953399109, pp. 24.1-24.8, Edinburgh, 1998.
- [32] Kowalewski T. A., Cybulski A., Sobiecki T., "Experimental Model for Casting Problems", *Computational Methods and Experimental Measurements*, **1**, pp. 179-188, WIT Press, Southampton, 2001.
- [33] Kowalewski T. A., Rebow M., "Freezing of Water in the Differentially Heated Cubic Cavity", *Int. J. of Comp. Fluid Dyn.*, **11**, pp. 193-210, 1999.
- [34] Larroude P., Quazzani J., Alexander J. I. D., "Numerical Study of Thermosolutal Convection in a 2D Directional Solidification Model, Bridgman-Stockbarger Vertical System", *Heat Transfer in Phase-Change Processes Melting and Solidification, Proc. 30<sup>th</sup> Eurotherm Seminar*, pp. 113-116, Orsay, France, 1992.
- [35] Leonard B. P., "A Stable and Accurate Convective Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **19**, pp. 59-98, 1979.
- [36] Leonardi E., Kowalewski T. A., Timchenko V., De Vahl Davis G., "Effects of Finite Wall Conductivity on Flow Structures in Natural Convection", *Proc. of Int. Conf. Comp. Heat and Mass Transfer, Eds. A.A. Mohamad & I. Sezai*, pp. 182-188, Eastern Mediterranean University Printinghouse, Cyprus, 1999.
- [37] Liu G. R., "Mesh-free Methods", *CRC Press*, Boca Raton, 2003.

- [38] Magirl C. S., Incropera F. P., "Flow and Morphological Conditions Associated with the Directional Solidification of Aqueous Ammonium Chloride", *Report No DOE/ER/13759-6*, School of Mechanical Engineering, Purdue University, West Lafayette, 1993.
- [39] Magirl C. S., Incropera F. P., "Multidirectional Solidification of an Aqueous Ammonium Chloride Solution", *Proc. 10<sup>th</sup> Int. Heat Transfer Conf.*, **4**, pp. 79-84, Brighton, England, 1994.
- [40] Mallinson G. D., De Vahl Davis G., "Three Dimensional Natural Convection in a Box: A Numerical Study", *J. Fluid Mech.*, **83**, pp. 1-31, 1977.
- [41] Michalek T., Kowalewski T. A., Saler B., "Natural Convection for Anomalous Density Variation of Water: Numerical Benchmark", *Progress In Computational Fluid Dynamics*, 2005, (w druku).
- [42] Morvan D., Bournot P., Garino A., "Oscillatory Flow Transition of Thermocapillary Convection in a Melted Pool", *Proc. 10<sup>th</sup> International Heat Transfer Conference*, Brighton, UK, 1994.
- [43] Ni J., Beckermann C., "A Volume-Averaged Two-Phase Model for Transport Phenomena During Solidification", *Met. Trans. B*, **22**, pp. 349-361, 1991.
- [44] Nordike B. L. "Laser Gas Alloying, Laser Surface Treatment", *Dordrecht*, pp. 389-412, 1986.
- [45] Ouyang H., Shyy W., Levit V. I., Kaufmann M. J., "Simulation and Measurement of a Vertical Bridgman Growth System for  $\beta$ -NiAl Crystal", *Int. J. Heat Mass Transfer*, **40**, pp. 2293-2305, 1997.
- [46] Patankar S. V., "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", *Hemisphere*, Washington, D.C. 1980.
- [47] Piegl L., Tiller W., "The NURBS Book", *Springer*, Berlin, Heidelberg, New York, 1997.
- [48] Prax C., Salagnac P., Sadat H., "Diffuse Approximation and Control-Volume-Based Finite-Element Methods: A Comparative Study", *Numerical Heat Transfer, Part B*, **34**, pp. 303-321, 1998.
- [49] Quénot G. M., "Image Matching Using Dynamic Programming: Application to Stereovision and Image Image Interpolation", *Proc. IMAGE' COM*, pp. 265-270, 1996.
- [50] Quénot G. M., Pakleza J., Kowalewski T. A., "Particle Image Velocimetry Using Optical Flow for Image Analysis", *Proc. 8<sup>th</sup> International Symposium on Flow Visualisation*, Sorrento, Italy, 1998.
- [51] Rahaim C. P., "The AIAA Committee on Standards for CFD: Update to QNET-CFD Conference", *QNET-CFD Network Newsletter*, **1** (2), 2001.
- [52] Rebow M., "Badanie procesów konwekcji swobodnej w obszarze stopionym dla wybranych geometrii", *Praca doktorska*, Politechnika Warszawska, 2001.
- [53] Rebow M., Dekajło K., Banaszek J., "Experimental Investigation of the Double Diffusive Convection During Solidification of Aqueous Solutions of Ammonium Chloride", *XII Symposium Wymiany Ciepła I Masy*, **2**, pp. 687-699, Kraków, 2004.
- [54] Sadat H., Couturier S., "Performance and Accuracy of a Meshless Method For Laminar Natural Convection", *Numerical Heat Transfer, Part B*, **37**, pp. 455-467, 2000.
- [55] Sarler B., "Towards Mesh-free Computation of Transport Phenomena", *Engineering Analysis with Boundary Elements*, **26**, pp. 731-738, 2002.
- [56] Scarano F., Riethmuller M. L., "Iterative Multigrid Approach in PIV Image Processing with Discrete Window Offset", *Exp. Fluids*, **26**, pp. 513-523, 1999.

- [57] Sirrell B., Holliday M., Campbell J., “The Benchmark Test 1995”, *Proc. 7<sup>th</sup> Conference on the Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes*, Eds. Cross M. and Campbell J., pp. 915-931, 1995.
- [58] Sobiecki T., “Modelling of the Mould Filling Process”, *Praca magisterska*, Politechnika Warszawska, Płock, 2000.
- [59] Ursu I., Mihailescu I. N., Nanu L., Prokhorov A. M., Konov V. I., Raichenko V. G., “Nitridation of Zirconium by cw CO<sub>2</sub> Laser Irradiation in Ambient Atmosphere”, *Appl. Phys. Lett.*, **46** (2), pp. 110–112, 1985.
- [60] Van der Graaf G. B., Van den Akker H. E. A., Nieswaag H., “Flow of Molten Metal into Vertical Sandmoulds for Thin-Wall Castings”, *Heat Transfer in Phase-Change Processes Melting and Solidification, Proc. of 30<sup>th</sup> Eurotherm Seminar*, pp. 61-64, Orsay, France, 1992.
- [61] Voller V. R., “An Overview of Numerical Methods for Solving Phase-Change Problems”, *Advances in Numerical Heat Transfer*, **1**, pp. 341-380, 1997.
- [62] Voller V. R., Cross M., Markatos N. C., “An Enthalpy Method for Convection-Diffusion Phase Change”, *Int. J. Num. Meth. Eng.*, **24**, pp. 271-284, 1987.
- [63] Westerweel J., “Digital Particle Image Velocimetry – Theory and Application”, *Delft University Press*, 1993.
- [64] Westerweel J., Nieuwstadt F. T. M., Flor J. B., “Measurement of Dynamics of Coherent Flow Structures Using Particle Image Velocimetry”, *Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics*, pp. 476-499, 1990.
- [65] Willert C. E., Gharib M., “Digital Particle Image Velocimetry”, *Experiments in Fluids*, **10**, pp. 181-193, 1991.
- [66] *WTEC Panel Report on Advanced Casting Technologies in Japan and Europe*.
- [67] Yeoh G. H., Behnia M., De Vahl Davis G., Leonardi E., “A Numerical Study of Three-Dimensional Natural Convection During Freezing of Water”, *Int. J. Num. Meth. Eng.*, **30**, pp. 899-914, 1990.
- [68] Yeoh G.H., “Natural Convection in a Solidifying Liquid”, *PhD Thesis, School of Mechanical and Manufacturing Engineering*, Sydney, Australia, 1992.
- [69] Żmija J., “Otrzymywanie monokryształów”, *PWN*, Warszawa, 1988.

## Dodatek A

### Uzupełnienie opisu eksperymentalnej części badań

Niżej przedstawiony opis stanowi dodatkowe zestawienie informacji o eksperymentach uznanych za wzorce dla weryfikacji programów numerycznych i uzupełnienie informacji zawartych w Tabeli 5, w szczególności określenie parametrów dostępnych wyników eksperymentalnych. W pracy dla większej przejrzystości materiału, szereg rezultatów badań zostało omówionych jedynie skrótowo, pozostawiając możliwość szczegółowej prezentacji wybranych danych w sposób dostosowany do potrzeb ewentualnego ich użytkownika. Zestaw danych zamieszczony poniżej zawiera podstawowe informacje dla każdego wzorca. W tabelach A.1-A.14 powtórzono podstawowe dane opisujące problemy eksperymentalne i dalej opisano będące do dyspozycji lub możliwe do przygotowania na żądanie wyniki pomiarów, skatalogowane według następującego podziału:

1. Pole wektorowe prędkości PIV (wykres);
2. Pole wektorowe prędkości PIV (tabela składowych prędkości);
3. Profile prędkości w wybranych przekrojach pola wektorowego prędkości;
4. Tabela z wartościami składowych prędkości  $u$ ,  $v$  z wybranych profili prędkości;
5. Kształt fazy zakrzepłej;
6. Zmiana położenia powierzchni przemiany fazowej w czasie;
7. Zmiana położenia powierzchni swobodnej fazy ciekłej w funkcji czasu;
8. Rozkład temperatury mierzony termoparami w funkcji czasu;
9. Rozkład temperatury w cieczy;
10. Tory cząstek;
11. Linie prądu.

Tabela A1. Wzorzec z eksperymentu #6

Geometria	Ciecz modelowa	Badanie	Kąt	PIV	PIT	Posiew
			$\alpha$ [°]			
SIG	PEG-900	T+K	0.0	•	brak	Proszek Szklany
Warunki brzegowe			Warunki początkowe		Uwagi	v
$T_h$ [K]	$T_c$ [K]	$T_{ext}$ [K]	$T_o$ [K]	$q \times 10^8$ [m <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]		
	283.0		Lp. 3	Lp. 3		

- Ad.1. dwa cykle rejestracji po 45 obrazów w seriach po 5 co 68s. Cykl I obejmuje fragment eksperymentu w przedziale od 300s do 840s po rozpoczęciu pomiarów, cykl II fragment od 2860s do 3400s. Korelacje PIV: co czwarty w odstępnie 0.34;
- Ad.2 dostępne w postaci korelacji PIV obrazów z pkt. 1;
- Ad.3 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.4 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.5 dostępne osiem kształtów dla fazy II eksperymentu;
- Ad.6 dostępne osiem położenia powierzchni przemiany fazowej po czasach 2860s, 2927s, 2994s, 3061s, 3128s, 3195s, 3262s, 3329s, 3396s;
- Ad.7 nie dotyczy;
- Ad.8 rozkład temperatury rejestrowanej przez termopary w czasie eksperymentu;
- Ad.9 nie dotyczy;
- Ad.10 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.11 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników.



Tabela A2. Wzorzec z eksperymentu #15

Geometria	Ciecz modelowa	Badanie	Kąt	PIV	PIT	Posiew
			$\alpha$ [°]			
SIG	PEG-900	T+K	0.0	•	•	BM100/R29C4W
Warunki brzegowe			Warunki początkowe		Uwagi	
$T_h$ [K]	$T_c$ [K]	$T_{ext}$ [K]	$T_0$ [K]	$q \times 10^8$ [m <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]		
	298.0	309.0	309.0	Pole	v,s	

- Ad.1 rejestracja 10 obrazów co 1s. Korelacje PIV: co drugi w odstępie 2s;  
 Ad.2 dostępne dla korelacji PIV z pkt.1;  
 Ad.3 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;  
 Ad.4 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;  
 Ad.5 jeden kształt fazy zakrzepłej;  
 Ad.6 nie rejestrowana;  
 Ad.7 nie dotyczy;  
 Ad.8 temperatury mają wartości stałe – stan ustalony;  
 Ad.9 poza zakresem możliwości zastosowanej metody;  
 Ad.10 suma dziesięciu obrazów;  
 Ad.11 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników.

Tabela A3. Wzorzec z eksperymentu #16

Geometria	Ciecz modelowa	Badanie	Kąt	PIV	PIT	Posiew
			$\alpha$ [°]			
SIG	PEG-900	T+K	0.0	•	•	BM100/R90F2W
Warunki brzegowe			Warunki początkowe		Uwagi	
$T_h$ [K]	$T_c$ [K]	$T_{ext}$ [K]	$T_0$ [K]	$q \times 10^8$ [m <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]		
	300.0	311.0	311.0	Pole	v,s	

- Ad. 1 rejestracja 10 obrazów co 2s. Korelacje PIV: co drugi w odstępie 4s – stan ustalony;  
 Ad. 2 dostępne dla korelacji PIV z pkt. 1;  
 Ad. 3 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;  
 Ad. 4 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;  
 Ad. 5 jeden kształt fazy zakrzepłej;  
 Ad. 6 nie rejestrowana;  
 Ad. 7 nie dotyczy;  
 Ad. 8 temperatury mają wartości stałe – stan ustalony;  
 Ad. 9 poza zakresem możliwości zastosowanej metody;  
 Ad. 10 suma dziesięciu obrazów (niska jakość);  
 Ad. 11 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników.

Tabela A4. Wzorzec z eksperymentu #18

Geometria	Ciecz modelowa	Badanie	Kąt	PIV	PIT	Posiew
			$\alpha$ [°]			
SIG	PEG-900	T+K	0.0	•	•	BM100/R29C4W
Warunki brzegowe			Warunki początkowe		Uwagi	
$T_h$ [K]	$T_c$ [K]	$T_{ext}$ [K]	$T_0$ [K]	$q \times 10^8$ [m <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]		
	302.0	311.0	313.0	Pole	v,s	

Ad. 1 rejestracja 10 obrazów co 2s, korelacje PIV dla co drugiego obrazu w odstępie 4s – stan ustalony;

Ad. 2 dostępne dla korelacji PIV z pkt. 1;

Ad. 3 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;

Ad. 4 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;

Ad. 5 brak krzepnięcia;

Ad. 6 brak krzepnięcia;

Ad. 7 nie dotyczy;

Ad. 8 temperatury mają wartości stałe – stan ustalony;

Ad. 9 poza zakresem możliwości zastosowanej metody;

Ad. 10 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;

Ad. 11 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników.

Tabela A5. Wzorzec z eksperymentu #22

Geometria	Ciecz modelowa	Badanie	Kąt	PIV	PIT	Posiew
			$\alpha$ [°]			
SIG	SCN	T+K	0.0	•	brak	Proszek Szklany
Warunki brzegowe			Warunki początkowe		Uwagi	
$T_h$ [K]	$T_c$ [K]	$T_{ext}$ [K]	$T_0$ [K]	$q \times 10^8$ [m <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]		
	273.0	309.0	Lp. 23	Lp. 23	v,s	

Ad.1 rejestracja 149 obrazów w różnych odstępach czasowych 100ms, 500ms, 1000ms, 2000ms w 15 seriach. Korelacje PIV: dla różnych odstępów czasowych, najkorzystniejsze dla 500ms;

Ad.2 dostępne dla korelacji PIV z pkt.1;

Ad.3 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;

Ad.4 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;

Ad.5 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników; dla 15 czasów;

Ad.6 wykres zmian położenia powierzchni przemiany fazowej dla 18s, 319s, 621s, 874s, dla innych czasów według uzgodnień z użytkownikiem wyników;

Ad.7 nie dotyczy;

Ad.8 raport zmiany temperatury termopar (niewielkie zmiany);

Ad.9 nie dotyczy;

Ad.10 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;

Ad.11 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników.

Tabela A6. Wzorzec z eksperymentu #25

Geometria	Ciecz modelowa	Badanie	Kąt	PIV	PIT	Posiew
			$\alpha$ [°]			
SIG	SCN	T+K	0.0	•	•	BM100/R90F10W
Warunki brzegowe			Warunki początkowe		Uwagi	
$T_h$ [K]		$T_c$ [K]	$T_{ext}$ [K]	$T_0$ [K]	$q \times 10^8$ [m <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]	
		298.0	333.0	333.0	Pole	v,s

- Ad.1 rejestracja 14 s stanu ustalonego, wykonano 29 obrazów co 500 ms, odpowiada im 29 korelacji PIV obrazów sąsiednich (wszystkie wyniki korelacji są podobne);
- Ad.2 dostępne dla korelacji PIV z pkt.1;
- Ad.3 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.4 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.5 w trakcie eksperymentu kształt zakrzepły nie ulega zmianie, dostępny według uzgodnień z użytkownikiem wyników;
- Ad.6 brak zmian;
- Ad.7 nie dotyczy;
- Ad.8 (niewielkie) zmiany temperatury termopar dostępne według uzgodnień z użytkownikiem wyników ;
- Ad.9 poza zakresem możliwości zastosowanej metody;
- Ad.10 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.11 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników.

Tabela A7. Wzorzec z eksperymentu #37

Geometria	Ciecz modelowa	Badanie	Kąt	PIV	PIT	Posiew
			$\alpha$ [°]			
PBP	Woda	W+K	11.4	•	brak	Pyłki sosny
Warunki brzegowe			Warunki początkowe		Uwagi	
$T_h$ [K]		$T_c$ [K]	$T_{ext}$ [K]	$T_0$ [K]	$q \times 10^8$ [m <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]	
286.0		263.0		280.0	180.00	v

- Ad.1 rejestracja 44 obrazów wysokorozdzielczych (1296x640) co 85 ms w seriach po 5 w fazie zalewania. Korelacje PIV obrazów: dla czasów 3s, 16s, 31s, 47s, 61s, 76s, 91s, 106s, 121s.
- Ad.2 dostępne dla korelacji PIV z pkt.1;
- Ad.3 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.4 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.5 lód przy ściankach w czasach podanych w pkt.1;
- Ad.6 zmiana grubości lodu po czasach jak w pkt.1;
- Ad.7 zmiana położenia powierzchni swobodnej po 3s, 16s, 31s, 47s, 76s;
- Ad.8 zmiany temperatury termopar dostępne według uzgodnień z użytkownikiem wyników;
- Ad.9 nie dotyczy;
- Ad.10 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.11 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników.

Tabela A8. Wzorzec z eksperymentu #39

Geometria	Ciecz modelowa	Badanie	Kąt	PIV	PIT	Posiew
			$\alpha$ [°]			
PBP	Woda	W+K	45.0	•	•	TM 445
Warunki brzegowe			Warunki początkowe		Uwagi	
$T_h$ [K]		$T_c$ [K]	$T_{ext}$ [K]	$T_0$ [K]	$q \times 10^8$ [m <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]	
294.0		276.0		287.0	4.64	t,v

- Ad.1 rejestracja przepływu w trzech etapach: (1) - początek zalewania naczynia, 28 obrazów co 500 ms; (2) - koniec zalewania naczynia 28 obrazów co 500 ms; (3) - proces stygnięcia, 28 obrazów co 2000 ms. Komplet korelacji PIV dla ww. trzech etapów;
- Ad.2 dostępne dla korelacji PIV z pkt.1;
- Ad.3 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.4 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.5 bez przemiany fazowej;
- Ad.6 bez przemiany fazowej;
- Ad.7 dane dla czasów rejestracji dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.8 zmiany temperatury termopar dostępne według uzgodnień z użytkownikiem wyników;
- Ad.9 rozkłady temperatur w płaszczyźnie centralnej dla czasów rejestracji dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.10 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.11 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników.

Tabela A9. Wzorzec z eksperymentu #40

Geometria	Ciecz modelowa	Badanie	Kąt	PIV	PIT	Posiew
			$\alpha$ [°]			
PBP	Woda	W+T+K	11.4	•	•	Mix C
Warunki brzegowe			Warunki początkowe		Uwagi	
$T_h$ [K]		$T_c$ [K]	$T_{ext}$ [K]	$T_0$ [K]	$q \times 10^8$ [m <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]	
297.0		263.0		280.0	4.64	t,v,s

- Ad.1 rejestracja w okresie zalewania naczynia i w stanie początkowym po zalaniu 0 – 632s, 100 obrazów w 20 seriach po 5 obrazów z odstępem 0.2s, 0.4s, 1s, 2s, stan rozwinięty po zalaniu 767s-1399s, 100 obrazów w 20 seriach po 5 obrazów z odstępem 0.2s, 0.4s, 1s, 2s. Korelacje PIV dla 16 wybranych czasów;
- Ad.2 dostępne dla korelacji PIV z pkt.1;
- Ad.3 profile prędkości w płaszczyźnie centralnej dla 5 odległości i 16 wybranych czasów;
- Ad.4 dostępne dla profili z pkt. 3;
- Ad.5 warstwa lodu przy ściankach;
- Ad.6 wykres i tabela zmiany grubości warstwy lodu;
- Ad.7 wykres zmiany położenia powierzchni swobodnej;
- Ad.8 raport ze zmiany w czasie temperatury termopar;
- Ad.9 wykres konturowy i tabela temperatury w płaszczyźnie centralnej po 570s;
- Ad.10 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad. 11 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników.

Tabela A10. Wzorzec z eksperymentu #42

Geometria	Ciecz modelowa	Badanie	Kąt	PIV	PIT	Posiew
			$\alpha$ [°]			
PBP	Woda	W+T+K	11.4	•	•	Mix C
Warunki brzegowe			Warunki początkowe		Uwagi	
$T_h$ [K]	$T_c$ [K]	$T_{ext}$ [K]	$T_0$ [K]	$q \times 10^8$ [m <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]		
276.0	258.0		276.0	4.64	t,v,s	

- Ad.1 rejestracja przepływu w trzech okresach: zalewanie 50 obrazów co 1s, początkowe narastanie lodu 50 obrazów co 1s, rozwinięte narastanie lodu 50 obrazów co 1s. Korelacje PIV dla wszystkich czasów rejestracji;
- Ad.2 dostępne dla korelacji PIV z pkt.1;
- Ad.3 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.4 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.5 kształt lodu przy ściankach dla wybranych czasów rejestracji;
- Ad.6 zmiana grubości lodu przy ściankach;
- Ad.7 dostępne według uzgodnień z użytkownikiem wyników;
- Ad.8 raport zmiany temperatur termopar dostępny według uzgodnień z użytkownikiem wyników;
- Ad.9 rozkłady temperatury w cieczy w płaszczyźnie centralnej dla wybranych czasów dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.10 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.11 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników.

Tabela A11. Wzorzec z eksperymentu #47

Geometria	Ciecz modelowa	Badanie	Kąt	PIV	PIT	Posiew
			$\alpha$ [°]			
PZP	Woda	W+T+K	82.0	•	brak	Pyłki sosny
Warunki brzegowe			Warunki początkowe		Uwagi	
$T_h$ [K]	$T_c$ [K]	$T_{ext}$ [K]	$T_0$ [K]	$q \times 10^8$ [m <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]		
274.0	259.4		276.0	1.33	v,s	

- Ad.1 rejestracja przepływu w okresie zalewania: 100 obrazów w 20 seriach po 5 obrazów w odstępach 0.2s, 0.4s, 0.4s, 0.4s; w okresie krzepnięcia: 100 obrazów w 20 seriach po 5 obrazów w odstępach 0.52s, 1.12s, 1.12s, 1.12s. Korelacje PIV dla wybranych czasów, wykresy pól prędkości i konturów prędkości;
- Ad.2 dostępne dla korelacji PIV z pkt.1;
- Ad.3 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.4 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.5 warstwa lodu przy ściankach;
- Ad.6 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.7 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.8 raport ze zmiany temperatury termopar dostępny według uzgodnień z użytkownikiem wyników;
- Ad.9 nie dotyczy;
- Ad.10 tory cząstek, dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.11 wykresy dla 15 wybranych czasów.

Tabela A12. Wzorzec z eksperymentu #48

Geometria	Ciecz modelowa	Badanie	Kąt	PIV	PIT	Posiew
			$\alpha$ [°]			
SP	Woda	W+T+K	0.0	•	brak	Pyłki sosny
Warunki brzegowe			Warunki początkowe		Uwagi	
$T_h$ [K]	$T_c$ [K]	$T_{ext}$ [K]	$T_0$ [K]	$q \times 10^8$ [m <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]		
295.0		257.0	277.0	266.90	v,s	

- Ad.1 rejestracja przepływu w fazie początkowej zalewania: 10 obrazów co 500 ms; rejestracja przepływu i kształtu lodu: 1440s, 2640s, 3840s, 4680s, 6120s od chwili zalania; serie po 6 obrazów co 2s, 5 obrazów po 6720s co 2s z kształtem lodu. Korelacje PIV dla wszystkich czasów rejestracji;
- Ad.2 dostępne dla korelacji PIV z pkt.1;
- Ad.3 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.4 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.5 dla czasów rejestracji;
- Ad.6 dla czasów rejestracji;
- Ad.7 dla zalewania;
- Ad.8 raport zmiany temperatury termopar dostępny według uzgodnień z użytkownikiem wyników;
- Ad.9 nie dotyczy;
- Ad.10 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.11 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników.

Tabela A13. Wzorzec z eksperymentu #49

Geometria	Ciecz modelowa	Badanie	Kąt	PIV	PIT	Posiew
			$\alpha$ [°]			
SP	Woda	K	0.0	brak	brak	Atrament
Warunki brzegowe			Warunki początkowe		Uwagi	
$T_h$ [K]	$T_c$ [K]	$T_{ext}$ [K]	$T_0$ [K]	$q \times 10^8$ [m <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]		
276.0		258.0	277.0		s	

- Ad.1 nie dotyczy;
- Ad.2 nie dotyczy;
- Ad.3 nie dotyczy;
- Ad.4 nie dotyczy;
- Ad.5 kształt lodu po 30, 38, 53, 71 min. od zalania naczynia;
- Ad.6 wykres zmiany w czasie grubości lodu, dostępny według uzgodnień z użytkownikiem wyników;
- Ad.7 nie dotyczy;
- Ad.8 nie dotyczy;
- Ad.9 nie dotyczy;
- Ad.10 nie dotyczy;
- Ad.11 nie dotyczy.

Tabela A14. Wzorzec z eksperymentu #50

Geometria	Ciecz modelowa	Badanie	Kąt	PIV	PIT	Posiew
			$\alpha$ [°]			
SP	Woda	W+T+K	0.0	•	brak	Pyłki sosny
Warunki brzegowe			Warunki początkowe		Uwagi	
$T_h$ [K]	$T_c$ [K]	$T_{ext}$ [K]	$T_0$ [K]	$q \times 10^8$ [m <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]		
277.6		262.5	280.0	266.90	v	

- Ad.1 sekwencja zalewania łącznie 28s, 250 obrazów/s korelacje PIV wybranych obrazów;
- Ad.2 dostępne dla korelacji PIV z pkt.1;
- Ad.3 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.4 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.5 nie rejestrowany;
- Ad.6 nie dotyczy;
- Ad.7 wykres dla wybranych czasów, dostępny według uzgodnień z użytkownikiem wyników;
- Ad.8 nie rejestrowany;
- Ad.9 nie dotyczy;
- Ad.10 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników;
- Ad.11 dostępne po uzgodnieniu z użytkownikiem wyników.

## Dodatek B

### Uzupełnienie opisu numerycznej części badań

**B1:** Weryfikacja obliczeń dla wzorca numerycznego modelowania konwekcji naturalnej w różnicowo grzany sześcianie.

Poniżej został przedstawiony test wrażliwości siatki obliczeniowej dla problemu modelowania konwekcji naturalnej wody w zakresie występowania anomalii gęstości; naczynie typu SRG (Tabela 5, #1).

Tabela B1. Globalne wartości ekstremów dla składowych prędkości oraz średnia wartość liczby Nusselta obliczona na prawej ścianie naczynia typu SRG

Lp	Siatka	$U_{min}$	$U_{max}$	$V_{min}$	$V_{max}$	$Nu_c$
FRE1	21x21	-141.9	101.4	-225.6	215.2	7.05
FRE2	41x41	-156.1	101.1	-177.0	213.1	6.98
FRE3	81x81	-158.7	102.9	-175.7	217.3	6.60
FRE4	121x121	-158.8	103.1	-175.8	221.4	6.52
FRE5	161x161	-159.1	103.3	-175.9	222.0	6.49
FRE6	201x201	-159.2	103.3	-175.9	221.9	6.48
FRE7	301x301	-159.2	103.4	-176.0	222.5	6.47
FLU0	38x38	-158.94	105.31	-172.38	208.12	6.59
FLU1	76x76	-159.39	103.57	-173.61	220.60	6.47
FLU2	190x190	-159.77	103.51	-174.57	223.21	6.51
FLU3	380x380	-159.73	103.55	-174.73	223.52	6.50
FID1	39x39	-155.10	104.30	-178.07	227.02	6.64
FID2	77x77	-159.03	105.38	-174.93	225.17	6.44
STR1	50x50	-178.51	116.425	-191.450	248.063	6.63
STR2	100x100	-168.73	108.743	-183.605	237.538	6.78
STR3	150x150	-165.34	106.777	-180.327	232.612	6.73
STR4	200x200	-163.60	105.728	-179.554	229.670	6.67
STR5	250x250	-162.45	105.047	-177.356	227.635	6.65
MEF1	100x100	-161.87	103.78	-167.58	225.94	6.22

Tabela B2. Wartości ekstremów prędkości oraz ich położenia wzdłuż  $X=0.5$  i  $Y=0.5$ , w funkcji stopnia dyskretyzacji testowanych programów numerycznych

Lp	Y=0.5				X=0.5			
	$U_{min}/X$	$U_{max}/X$	$V_{min}/X$	$V_{max}/X$	$U_{min}/Y$	$U_{max}/Y$	$V_{min}/Y$	$V_{max}/Y$
FRE1	-103.0/80	20.4/55	-211.0/80	215.0/05	-96.6/15	82.0/90	0.75/95	9.72/30
FRE2	-132.0/72	6.25/42	-174.0/72	209.0/05	-75.4/25	84.2/90	-68.9/25	5.54/60
FRE3	-131.0/71	3.65/39	-174.0/71	213.0/04	-76.8/28	86.0/89	-84.5/26	6.28/64
FRE4	-131.0/71	3.21/38	-175.0/71	216.0/04	-77.4/28	86.5/89	-86.6/26	6.40/65
FRE5	-131.0/71	3.06/38	-175.0/70	216.0/04	-77.6/29	86.6/89	-87.2/26	6.44/65
FRE6	-131.0/71	3.00/38	-175.0/70	216.0/04	-77.7/29	86.6/89	-87.5/26	6.46/65
FRE7	-131.0/71	2.94/38	-175.0/70	217.0/04	-77.8/29	86.7/89	-87.7/26	6.48/65
FLU0	-136.04/71	2.46/39	-171.09/71	202.15/053	-80.35/29	88.92/89	-87.17/26	6.25/63
FLU1	-134.08/71	2.83/38	-172.41/71	215.36/039	-78.87/29	87.18/89	-87.90/26	6.39/64
FLU2	-132.72/71	2.92/38	-173.40/70	217.53/040	-78.22/28	86.90/89	-87.62/26	6.44/64
FLU3	-131.68/70	2.93/38	-173.62/70	217.84/042	-78.11/28	86.85/89	-87.37/26	6.42/64
FID1	-130.47/71	4.36/39	-177.15/71	218.50/05	-77.05/29	94.14/92	-83.74/26	6.03/60
FID2	-131.50/70	5.28/38	-174.31/70	219.71/04	-81.60/29	87.57/89	-99.19/26	7.19/68
STR1	-147.20/67	1.15/37	-191.45/67	237.34/04	-95.57/31	96.26/90	-119.59/29	7.10/67
STR2	-139.71/71	2.43/37	-183.04/70	230.38/04	-84.74/28	90.93/89	-95.47/26	6.64/64
STR3	-137.10/70	2.61/38	-179.69/70	226.18/04	-82.09/28	89.38/89	-91.34/25	6.55/64
STR4	-135.64/71	2.68/38	-177.74/70	223.58/04	-80.78/28	88.54/89	-89.75/26	6.51/64
STR5	-134.14/71	2.44/38	-176.64/70	221.48/04	-79.62/28	87.96/89	-87.31/26	6.52/64
MEF1	-125.34/68	5.81/34	-166.91/64	218.89/04	-79.87/35	88.29/89	-132.03/31	6.56/71



**B2:** Współczynniki wielomianów aproksymujących rozwiązanie wzorcowe.

Wartości współczynników wielomianów interpolujących profil składowych prędkości  $U$ ,  $V$  oraz temperatury  $T$  wzdłuż prostych  $X = 0.5$ ,  $Y = 0.5$  i  $X = 0.9$  zostały przedstawione w tabelach B3-B5. Profile te stanowią numeryczne rozwiązanie wzorcowe dla zagadnienia modelowania konwekcji naturalnej wody w naczyniu typu SRG (Tabela 5, eksperyment Nr 1). Współczynniki zostały otrzymane przy pomocy nieliniowej metody najmniejszych kwadratów (algorytm Marquardt-Levenberg). Stopień wielomianów oraz dokładność współczynników zostały wybrane w ten sposób, aby błąd interpolacji (odchylenie standardowe do maksymalnej wartości) był mniejszy niż 1 %.

Tabela B3. Wartości współczynników dla profilu wzdłuż prostej  $X = 0.5$ 

	$U$	$W$	$T$
a <sub>0</sub>	0.653255375988277	-0.0182133390825522	0.375731268271168
a <sub>1</sub>	-236.702203764653	-0.534506952806084	0.0646566206852292
a <sub>2</sub>	1443.71621734046	-4649.62374660758	-3.44261930694882
a <sub>3</sub>	-13999.9971459506	9166.34090898581	80.5716617494023
a <sub>4</sub>	-48978.2873061909	184756.318840003	-849.389178138508
a <sub>5</sub>	769502.177696391	-2267214.57474188	5426.31856180659
a <sub>6</sub>	-2826411.42861687	13921830.6389979	-20619.6870300723
a <sub>7</sub>	5049355.25968998	-50905496.7836152	47584.9389176856
a <sub>8</sub>	-4889309.49455426	117326421.048108	-66982.5680747791
a <sub>9</sub>	2473294.32955038	-175454949.94745	54146.8042661755
a <sub>10</sub>	-514661.642022168	170542299.447756	-18312.94874948
a <sub>11</sub>		-104264882.357183	-5638.00828334596
a <sub>12</sub>		36505160.4951902	6840.33395345218
a <sub>13</sub>		-5592440.58260601	-1672.49783568399

Tabela B4. Wartości współczynników dla profilu wzdłuż prostej  $Y = 0.5$ 

	$U$	$W$	$T$
a <sub>0</sub>	-0.971923736403444	1.00212115245059	0.999467521831559
a <sub>1</sub>	435.542611756185	12877.9988611009	-6.23069515529224
a <sub>2</sub>	-35897.4472988611	-259340.543848846	-18.9999577130502
a <sub>3</sub>	1124550.4608794	2053796.14649148	433.527770212382
a <sub>4</sub>	-19836290.5781327	-5602841.78532119	7318.66314332766
a <sub>5</sub>	217415780.824244	-30304885.3151783	-180265.707163689
a <sub>6</sub>	-1573770830.54861	358963997.276281	1714792.57838228
a <sub>7</sub>	7864305725.45593	-1697089432.98434	-9862261.15685317
a <sub>8</sub>	-27964717917.5742	4892293454.42925	38472869.7475459
a <sub>9</sub>	72090244360.2021	-9357882052.45715	-106665059.51901
a <sub>10</sub>	-135881981012.186	12081139841.5678	214297962.730994
a <sub>11</sub>	187042192305.203	-10321221406.5473	-313025047.586471
a <sub>12</sub>	-185722571203.416	5462280648.88341	328987879.084903
a <sub>13</sub>	129406337902.134	-1489621427.86707	-242193161.156869
a <sub>14</sub>	-59987319824.8771	62096039.6233113	118435075.266555
a <sub>15</sub>	16604163672.9515	43140732.9300454	-34530031.2923873
a <sub>16</sub>	-2075551754.938	0.321619021644532	4539519.05438302

Tabela B5. Wartości współczynników dla profilu wzdłuż prostej  $X = 0.9$ 

	$U$	$W$	$T$
a <sub>0</sub>	1.37834316239398	1.11560341761746	0.308900034946171
a <sub>1</sub>	869.803859921856	-682.103162659822	-0.574121199057708
a <sub>2</sub>	74379.0946531731	64546.3444091368	74.382226060503
a <sub>3</sub>	-3924258.51426546	-2657731.00888943	-3161.22612928187
a <sub>4</sub>	89435741.7003693	60098287.7693382	74817.9579968359
a <sub>5</sub>	-1217186200.6406	-822661490.080435	-1125745.01070913
a <sub>6</sub>	10971526417.6405	7425487150.03986	11435967.2156945
a <sub>7</sub>	-69219909243.1401	-46729243229.224	-81662746.1201518
a <sub>8</sub>	316473663407.374	212583413470.936	421890116.068198
a <sub>9</sub>	-1072529330832.37	-715751344227.008	-1608940868.43137
a <sub>10</sub>	2732146343933.84	1809508968294.41	4588612041.2787
a <sub>11</sub>	-5267137304120.64	-3459353036180.82	-9850623665.12099
a <sub>12</sub>	7684697385210.4	5001906037363.17	15919604870.6355
a <sub>13</sub>	-8422179003474.85	-5429815720822.07	-19229337194.963
a <sub>14</sub>	6816871501820.86	4350956298121.35	17073562106.7329
a <sub>15</sub>	-3949555692631.44	-2494534120078.54	-10804649895.8457
a <sub>16</sub>	1548473261831.82	967384927672.173	4608652340.13695
a <sub>17</sub>	-367847357872.57	-227214939183.605	-1186818611.97188
a <sub>18</sub>	39966515019.2774	24398428716.3919	139329555.368117

**B3:** Wartości estymatora błędu dla testowanych programów numerycznych

Poniżej podano wyliczone dla przetestowanych programów wartości estymatora  $\varepsilon$  zdefiniowanego w Rozdziale 6.2.1, określającego względny błąd badanego rozwiązania od rozwiązania wzorcowego dotyczącego modelowania konwekcji naturalnej wody w naczyniu typu SRG (Tabela 5, eksperyment Nr 1).

Tabela B6. Wartości estymatorów dla składowych prędkości  $U$ ,  $V$  oraz temperatury  $T$  wzdłuż prostych  $Y = 0.5$ ,  $X = 0.5$  oraz  $X = 0.9$ 

	$Y=0.5$			$X=0.5$			$X=0.9$		
	$\varepsilon_{u1}$	$\varepsilon_{w1}$	$\varepsilon_{t1}$	$\varepsilon_{u2}$	$\varepsilon_{w2}$	$\varepsilon_{t2}$	$\varepsilon_{u3}$	$\varepsilon_{w3}$	$\varepsilon_{t3}$
FRE6	0.2831	1.3876	1.64E-06	0.1670	0.0024	8.03E-08	1.2667	0.6012	2.28E-05
FRE5	0.3284	1.6127	1.94E-06	0.2045	0.0293	2.14E-07	1.2213	0.6626	2.35E-05
FRE4	0.5411	1.8601	3.20E-06	0.4004	0.2127	8.77E-07	1.3658	0.9012	2.57E-05
FRE3	3.5512	7.7287	1.94E-05	2.4778	2.4683	8.55E-06	3.0392	4.3332	5.45E-05
FRE2	114.45	178.24	6.98E-04	69.645	95.363	2.48E-04	67.3915	144.683	1.10E-03
FRE1	1893.7	2857.7	4.40E-03	753.31	1874.6	1.36E-02	364.095	1492.25	9.50E-03
FLU3	1.5510	3.0529	5.32E-06	0.2201	0.0892	2.50E-06	4.8378	5.1385	7.08E-05
FLU2	1.8745	3.1868	6.84E-06	0.2514	0.0488	2.43E-06	5.3223	6.1924	7.79E-05
FLU1	6.1705	8.8068	4.52E-05	0.4913	0.2016	7.51E-08	34.2911	91.7224	3.68E-04
FLU0	28.760	49.564	3.55E-04	2.5880	1.2864	2.88E-05	91.4327	433.448	8.58E-04
FID2	3.8785	11.347	1.70E-05	7.7958	5.0095	1.48E-05	5.9907	18.3377	3.87E-05
FID1	10.678	24.737	6.03E-05	13.056	35.092	4.70E-05	15.0269	27.8671	2.04E-04
STR5	2.8876	10.924	8.17E-06	1.4492	1.1331	6.39E-06	7.0646	8.5051	7.10E-05
STR4	4.3005	18.850	8.95E-06	2.3089	1.2263	1.30E-05	11.1198	13.5929	8.40E-05
STR3	7.6570	34.860	1.87E-05	4.5268	2.9492	2.61E-05	16.8484	17.3370	9.09E-05
STR2	20.769	77.964	6.67E-05	11.768	11.837	5.88E-05	32.4156	20.6114	1.01E-04
STR1	283.48	506.50	1.26E-03	127.88	251.92	2.83E-04	221.818	79.4415	0.0014
MEF1	586.31	1176.3	3.48E-03	214.57	799.64	5.34E-04	267.977	481.019	0.0038

**B4:** Weryfikacja obliczeń numerycznych dla problemu krzepnięcia wody w różnicowo grzonym sześciianie (SRG).

Poniżej podano maksymalne i minimalne wartości prędkości dla kolejnych rozwinięć czasowych (Tabele B7, B8) oraz procentową zawartość fazy stałej (Tabela B9) uzyskane przy weryfikacji obliczeń dla problemu krzepnięcia w naczyniu typu SRG (Tabela 5, #2).

Tabela B7. Maksymalne i minimalne wartości prędkości ( $t = 100s$  i  $t = 500s$ ).

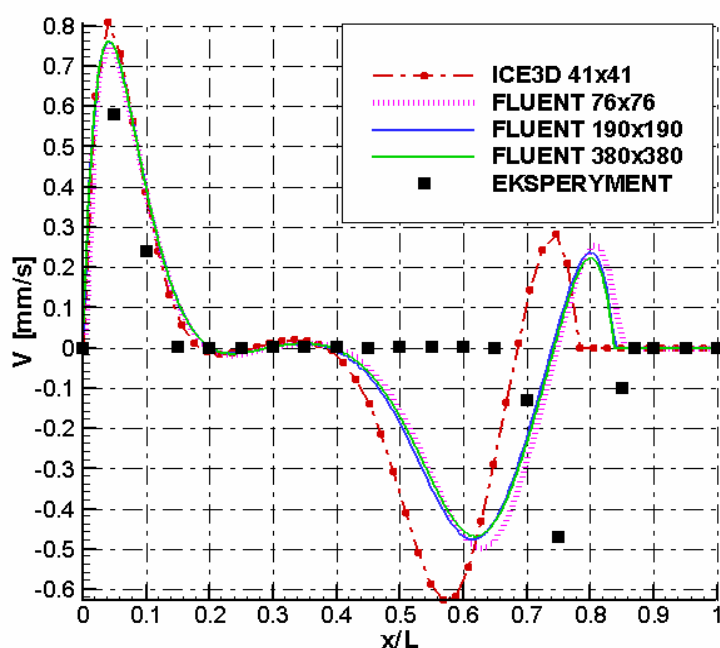
Lp	Siatka	$t=100s$				$t = 500s$			
		$u_{min} * 10^3$	$u_{max} * 10^3$	$v_{min} * 10^3$	$v_{max} * 10^3$	$u_{min} * 10^3$	$u_{max} * 10^3$	$v_{min} * 10^3$	$v_{max} * 10^3$
FLU1	76x76	-0.485487	0.351770	-0.642417	0.763399	-0.530405	0.359999	-0.647957	0.764042
FLU2	190x190	-0.497132	0.346788	-0.638878	0.771464	-0.526474	0.356894	-0.641320	0.776151
FLU3	380x380	-0.491817	0.345074	-0.637311	0.772661	-0.520075	0.356328	-0.643491	0.776047
ICE3D	41x41	-0.50868	0.387633	-0.645269	0.81012	-0.560490	0.398937	-0.678240	0.82896

Tabela B8. Maksymalne i minimalne wartości prędkości ( $t = 1000s$  i  $t = 3000s$ ).

Lp	Siatka	$t=1000s$				$t = 3000s$			
		$u_{min} * 10^3$	$u_{max} * 10^3$	$v_{min} * 10^3$	$v_{max} * 10^3$	$u_{min} * 10^3$	$u_{max} * 10^3$	$v_{min} * 10^3$	$v_{max} * 10^3$
FLU1	76x76	-0.534228	0.360175	-0.612221	0.771861	-0.54970	0.36280	-0.53733	0.769598
FLU2	190x190	-0.538087	0.360722	-0.604262	0.783254	-0.54657	0.36199	-0.53766	0.781748
FLU3	380x380	-0.52953	0.357309	-0.61151	0.77632	-0.54281	0.36078	-0.53642	0.779787
ICE3D	41x41	-0.6123	0.396582	-0.74418	0.84309	-0.79128	0.36644	-0.72534	0.791280

Tabela B9. Procentowa zawartość objętości fazy stałej  $f_s$  w kolejnych krokach czasowych.

Lp	Siatka	$t=100s$	$t=500s$	$t=1000s$	$t=2000s$	$t=3000s$
FLU1	76x76	6.51 %	13.97 %	18.69 %	24.37 %	28.06 %
FLU2	190x190	6.89 %	14.20 %	18.89 %	24.58 %	28.32 %
FLU3	380x380	6.96 %	14.29 %	18.92 %	24.56 %	28.25 %
ICE3D	41x41	9.3 %	19.08 %	25.6 %	34.46 %	40.44 %
Eksperyment [32]		-	15 %	21 %	27 %	32 %



Rys.B1. Profile pionowej składowej prędkości wyznaczone dla linii  $Y = 0.5L$  w pionowym przekroju centralnym sześciannie (SRG) dla czterech rozwiązań numerycznych (Tabele B7-9) i porównane z wynikami eksperymentalnymi [32] (por. Tabela 5, #2).