

**J. Banaszek, T.A. Kowalewski,
P. Furmański, M. Rebow,
A. Cybulski, T. S. Wiśniewski**

**Konwekcja naturalna
z przemianą fazową w układach
jednoskładnikowych i binarnych**

3/2000

Prace IPPT - IFTR Reports

Warszawa 2000

Niniejsza praca została zrealizowana w ramach grantu KBN Nr 3T09c00212 - *Eksperymentalne i numeryczne badanie konwekcji naturalnej z przemianą fazową w układach binarnych*

J. Banaszek*, T.A. Kowalewski**,
P. Furmański*, M. Rebow*,
A. Cybulski**, T. S. Wiśniewski*

*Instytut Techniki Ciepłej, Politechnika Warszawska

**Zakład Mechaniki i Fizyki Płynów IPPT PAN

Konwekcja naturalna z przemianą fazową w układach jednoskładnikowych i binarnych

Streszczenie

W pracy przedstawiono wyniki badań eksperymentalnych i analiz teoretycznych konwekcji swobodnej w zamarzających układach jednoskładnikowych (woda, n-octadecan) i binarnych (wodne roztwory soli). Celem tych studiów było dokładniejsze, jakościowe i ilościowe, poznanie fizyki złożonych mechanizmów wymiany ciepła w procesach przemian fazowych ciec-ciało stałe, występujących powszechnie w naturze i technice. Na zbudowanym stanowisku pomiarowym przeprowadzono wnikliwe badania procesu zamarzania czystej wody poprzez wizualizację chwilowych pól prędkości i temperatury, przy wykorzystaniu zawiesziny ciekłych kryształów jako cząstek wskaźnikowych, sekwencyjnej korelacji i komputerowej rejestracji obrazów przepływu oraz termografii w podczerwieni do pomiaru i rejestracji pola temperatury ścianek bocznych kuwety pomiarowej. Uzyskane szczegółowe obrazy struktury przepływu, pól prędkości i temperatury oraz chwilowych położenia granicy rozdziału faz dają obraz znaczącej roli konwekcji swobodnej w przebiegu analizowanego zjawiska. Mogą być też wykorzystane jako eksperymentalny wzorzec do weryfikacji dokładności i wiarygodności modeli symulacji komputerowej procesów przemian fazowych w układach jednoskładnikowych. Badania wizualizacyjne konwekcji swobodnej w zamarzających wodnych roztworach chlorku sodu pokazują stagnację przepływu w stanie ustalonym. W celu lepszego poznania przyczyn tego efektu dokonano pomiaru stężenia soli NaCl metodą sond rezystancyjnych z jednoczesną rejestracją pola prędkości oraz analizy frontu zmiany gęstości, wywołanej zmianą koncentracji NaCl, przy użyciu techniki smugowej Schlierena. Wstępne rezultaty pomiarów pola prędkości i koncentracji wskazują na wyraźną stratyfikację przepływu. Zaproponowano nową metodę opisu procesów wymiany ciepła i składnika w obszarze dwufazowym („mushy zone”), pojawiającym się przy krzepnięciu układów binarnych, w której makroskopowe, efektywne właściwości termofizyczne wyznaczane są na podstawie uśrednień po zbiorze różnych realizacji mikrostruktury ośrodka. Opracowano modele numeryczne i bibliotekę programów metody elementów skończonych do symulacji nieustalonych zjawisk krzepnięcia i topnienia z konwekcją w fazie ciekłej dla układów binarnych o złożonej, dwuwymiarowej geometrii. Oparto je na modelu pojedynczego kontinuum, teorii roztworów, entalpowym opisie procesu przemiany fazowej oraz modelowaniu obszaru dwufazowego jako anizotropowego medium porowatego. Obliczeniowo-efektywne algorytmy tych programów uzyskano przez zastosowanie sekwencyjnego i iteracyjnego rozwiązania sprzężonych układów równań zachowania masy, pędu, składnika i energii oraz różnych technik rozdziału w czasie. Wykorzystano je następnie w analizie wpływu anizotropii przepuszczalności i przewodności cieplnej oraz dyspersji ciepła na procesy transportu w obszarze dwufazowym, na przykładzie rozcieńczonych roztworów wodnych chlorku amonu.

Natural convection with phase change in one-component and binary systems

Abstract

The paper presents results of both experimental and theoretical analyses of natural convection in solidifying one-component (pure water, n-octadecan) and binary (aqueous solutions of salt) systems. The main purpose of this study was to explicate qualitative and quantitative aspects of complex transport phenomena accompanying the solid-liquid phase transition of single- and two-component systems. Experimental set-up had been designed and constructed, where the visualization of temporal flow patterns and temperature fields in the solidifying pure water, enclosed in a cubic cavity, was then carried out for diverse thermal boundary conditions. Thermochromic Liquid Crystals were there used as tracers along with the Particle Image Velocimetry and Thermometry techniques and the infrared thermography was applied to measure temperature distribution within the walls confining the experimental cavity. Thus obtained pictures of flow pattern, velocity and temperature fields and temporal positions of the interface show a significant influence of natural convection and thermal boundary conditions on the progress of the liquid-solid phase transition. Moreover, these detailed data of local temperature and velocity fields create the experimental benchmark, which can be used as a reference standard in the code validation procedure of various computer simulation models for the phase change phenomena of a one-component system driven by conduction and convection. Visualization of flow structure and temperature distribution in solidifying dilute solutions of water and sodium chloride shows the flow stagnation at the steady state. To clarify the phenomenon, this experimental analysis was supplemented with the estimation of the local solute concentration changes, through measuring the electrical resistance of the liquid by small electrodes placed in the fluid, and with the measurement of the liquid density changes through the use of the Schlieren's method. The preliminary results show the effect of flow stratification. New model of complex heat and species transport occurring in the two-phase region ("mushy zone") was developed. The macroscopic equations (energy and solute conservation equations and the basic macroscopic constitutive relations) describing the process of solidification in binary systems were obtained on the basis of the ensemble averaging technique rather than via commonly used the volume averaging technique. In general these relations are non-local and they account for non-equilibrium processes. The state of the local thermodynamic equilibrium was comprehensively discussed and formulae for enthalpy and porosity of the mushy zone were developed. Numerical models and their FEM programs have been created to simulate transient solid-liquid phase change phenomena with convection in fluid for binary systems of complex two-dimensional geometry. They are based on the single continuum model, theory of mixtures, the enthalpy approach and the anisotropic porous medium model of the mushy zone. Computationally effective algorithms of these computer simulation codes were obtained through the use of the sequential and iterative solution of the set of coupled mass, momentum, energy and species conservation equations and through the use of some time-splitting techniques. Thus developed computational tool was applied to show the significant impact of permeability and thermal conductivity of the mushy zone and negligible influence of thermal dispersion on the transport processes occurring in the two-phase region of the solidifying dilute solutions of water and ammonium chloride.

Spis treści	str.
Streszczenie	3
1. Wprowadzenie	7
2. Badania eksperymentalne, metodyka, zakres pomiarów, wyniki	15
2.1 Metodyka badań eksperymentalnych i zakres pomiarów	15
2.1.1 Stanowisko badawcze	16
2.1.2 Opis geometrii kanału pomiarowego	18
2.1.3 Metoda wyznaczania pola temperatury	19
2.1.4 Metoda wyznaczania pola prędkości	21
2.1.5 Tory cząstek	24
2.1.6 Wyznaczanie położenia i kształtu fazy stałej	25
2.1.7 Pomiar koncentracji chlorku sodu	26
2.1.8 Zastosowanie termografii do pomiaru temperatury ścianek kuwety	32
2.2 Wyniki badań eksperymentalnych	34
2.2.1 Badania konwekcji naturalnej	38
2.2.2 Badania konwekcji naturalnej z przemianą fazową	42
2.2.3 Badanie przemiany fazowej w roztworach binarnych	56
3. Modelowanie procesów transportu energii i składników w obszarze dwufazowym	61
3.1 Podstawowe pojęcia i definicje w metodzie uśrednień statystycznych po zbiorze realizacji mikrostruktury ośrodka dwufazowego	63
3.2 Makroskopowe równanie stężenia substancji rozpuszczonej	64
3.2.1 Lokalna równowaga fazowa w obszarze dwufazowym przy makroskopowym opisie procesu transportu składników	66
3.3 Równanie energii	68
3.3.1 Makroskopowy opis lokalnej równowagi termicznej w obszarze dwufazowym	70
3.4 Entalpia i porowatość obszaru dwufazowego w warunkach lokalnej równowagi termodynamicznej	70
3.5 Uwagi i wnioski końcowe	72
4. Symulacja komputerowa procesów przemian fazowych ciecz-ciało z konwekcją w układach jednoskładnikowych i binarnych	75
4.1 Cel i zakres modelowania, uzyskane rezultaty	75
4.2 Równania MES, algorytmy obliczeniowe	79
4.2.1 Model matematyczny	79
4.2.2 Dyskretyzacja przestrzenna MES	82
4.2.3 Efektywne schematy całkowania w czasie	84
4.3 Weryfikacja dokładności modelu numerycznego	89
4.4 Analiza wiarygodności modelu symulacji komputerowej metodą MES	93
4.5 Numeryczna analiza anizotropii własności obszaru dendrytycznego w solidyfikacji binarnych roztworów rozcieńczonych	103
4.6 Symulacja komputerowa procesów makro-segregacji i mikro-segregacji składników roztworu binarnego	114
5. Wnioski końcowe, kierunki dalszych prac	123
6. Literatura	127
6.1 Literatura do rozdziału 2	127
6.2 Literatura do rozdziału 3	128
6.3 Literatura do rozdziału 4	130

1. Wprowadzenie

Stosowane w technice stopy metali, kryształy materiałów półprzewodnikowych, czy spotykane w naturze substancje zanieczyszczone są co najmniej układami binarnymi, a procesy zmiany fazy przebiegają w warunkach złożonej wymiany masy, ciepła i składnika rozpuszczonego, często przy braku lokalnej równowagi termodynamicznej obu faz. Podczas krzepnięcia dwuskładnikowego roztworu rejony fazy ciekłej i stałej rozdziela obszar dwufazowy, który w przypadku stopów metali ma strukturę dendrytyczną. Zachodzące w nim procesy transportu mają decydujące znaczenie na przebieg solidyfikacji i jej finalny produkt.

Ze względu na bardzo skomplikowaną mikrostrukturę rozłożenia fazy ciekłej i stałej oraz różnice właściwości faz, obszar dwufazowy jest ośrodkiem silnie niejednorodnym, w którym udział fazy stałej ulega silnym zmianom (od wartości równej jedności w pobliżu powierzchni obszaru całkowicie zestalonego do zera na powierzchni oddzielającej obszar dwufazowy od czystej fazy ciekłej). Występują w nim też lokalne źródła ciepła, związane z wydzielaniem ciepła utajonego na mikroskopowej, geometrycznie złożonej granicy ciecz-ciało stałe. Ponadto, różnice rozpuszczalności składników w fazie stałej i ciekłej powodują usuwanie jednego z komponentów na wspomnianych mikroskopowych powierzchniach kontaktu. Ten nadmiar usuniętego składnika jest transportowany w płynie na drodze ruchów konwekcyjnych, wywołanych gradientami temperatury i stężeń, i w mniejszym stopniu przez dyfuzję w obu fazach. W konsekwencji w różnych częściach obszaru pojawiają się rejony bogatsze i uboższe w składnik rozpuszczony. Te różnice mogą być znaczne, sięgać 30% i więcej. Proces segregacji obserwowany jest w dwóch skalach. W skali podziałki ramion dendrytów mówimy o *mikrosegregacji*, zjawisku istotnym szczególnie w fazie stałej, gdzie jedynym mechanizmem przenoszenia jest dyfuzja. W większej skali występuje *makrosegregacja*. Rozpoznaną już dziś przyczyną tego zjawiska jest ruch płynu lub ciała stałego w obszarze dwufazowym, spowodowany konwekcją płynu między-dendrytycznego na skutek lokalnych różnic temperatury i stężeń oraz w mniejszym stopniu skurczem solidyfikacyjnym i ruchem pojedynczych kryształów równoosiowych we wczesnej fazie procesu zestalania.

Zjawisko separacji jednej z faz i jej akumulacji w wybranych obszarach przepływu jest bardzo niekorzystne w procesach technologicznych - uważa się je za główną przyczynę niejednorodności odlewów i ich defektów strukturalnych. W naturalnych zbiornikach przepływu recyrkulacyjne, wywołane ruchami konwekcyjnymi, powodują nierównomierną dystrybucję wtrąceń i nadmierną koncentrację zanieczyszczeń.

To praktyczne znaczenie złożonych mechanizmów ruchu płynu, wymiany ciepła i transportu substancji rozpuszczonej, towarzyszące solidyfikacji układów dwuskładnikowych i decydujące o jakości produktu finalnego, stymuluje od kilkunastu lat prace nad głębszym poznaniem jakościowym i ilościowym tych procesów. W przypadku stopów metali poszukuje się takich sposobów sterowania rozkładami koncentracji, przez właściwe warunki prowadzenia procesu odlewniczego, by zmniejszyć niekorzystne skutki makrosegregacji i uzyskać możliwie jednorodną strukturę odlewu. Równie ważne, z aplikacyjnego punktu widzenia, są badania konwekcji swobodnej z przemianą fazową ciecz-ciało stałe w układach jednoskładnikowych - krzepnących w stałej temperaturze, oraz w substancjach bezpostaciowych, które topią się lub zestalają w skończonym przedziale temperatur, nie mają jednak wyraźnego „ostrego” frontu fazowego i obszaru dwufazowego. Istotnie, np. woda i lód są powszechnie stosowanymi substancjami w układach klimatyzacyjnych z wykorzystaniem akumulatorów energii cieplnej w postaci „zimna” (np. w USA i Japonii pracuje ok. 8000 takich instalacji), zaś parafiny i woski rozpatruje się jako obiecujące media w mniejszych jednostkach magazynowania energii.

By jednak wpływać na procesy solidyfikacji, by optymalnie dobierać konstrukcje i materiały magazynów energii, nie wystarczają uproszczone związki kryterialne, tak często stosowane w zagadnieniach wymiany ciepła. Konieczne jest poznanie lokalnych pól prędkości, temperatury i koncentracji w obszarach ciała stałego, cieczy i rejonie współistnienia obu faz. Najbardziej bezpośrednią drogą gromadzenia takich informacji są eksperymenty w pełnej skali. Niestety są one najczęściej bardzo drogie, trudne i czasochłonne, szczególnie dla stopów metali krzepnących w wysokich temperaturach. Z drugiej strony ogólna dostępność komputerów i rozwój współczesnych metod numerycznych, gwarantujących coraz większą dokładność obliczeń, uzasadnia poszukiwanie odpowiedzi jakościowych i ilościowych na drodze obliczeń numerycznych. Są one jednak trudne ze względu na sprzężenia pól prędkości, ciśnienia, temperatury i koncentracji, złożone wielowymiarowe geometrie rzeczywistych obiektów oraz nieliniowe powiązania koncentracji, temperatury i entalpii w dodatkowych związkach konstytutywnych. Tym należy chyba tłumaczyć fakt, że mimo ogromnego i wciąż rosnącego zainteresowania tą problematyką, wciąż brak jest możliwie kompleksowych wyników eksperymentów, wiarygodnych i precyzyjnych modeli obliczeniowych oraz efektywnych kodów symulacji komputerowej.

Dlatego głównym celem opisywanych w niniejszym opracowaniu badań były jakościowe i ilościowe studia złożonych mechanizmów konwekcyjnej wymiany ciepła w układach jednoskładnikowych (czysta woda w zakresie temperatur obejmujących anomalię gęstości), bezpostaciowych (n-oktadekan, parafina – materiały magazynujące) oraz binarnych (wodne roztwory NaCl i chlorku amonu) w warunkach przemiany fazowej ciecz-ciało stałe. Obejmowały one eksperymentalne badanie i wizualizację pól prędkości, temperatury i koncentracji, budowę nowych modeli teoretycznych obszaru dwufazowego oraz symulację komputerową konwekcyjnej wymiany ciepła i transportu składnika w procesach krzepnięcia.

Zbudowano stanowisko pomiarowe do trójwymiarowej wizualizacji linii przepływu i pól temperatury oraz wyznaczania rozkładu koncentracji substancji rozpuszczonej w kanale prostopadłościennym przy zastosowaniu zawieszin ciekłych kryształów, kamer wideo i cyfrowego przetwornika obrazu (cyfrowa anemometria i termometria obrazu). Zastosowano tu:

- cyfrową metodę pomiaru pól prędkości wykorzystującą cząstki wskaźnikowe (Digital Particle Image Velocimetry – DPIV) i sekwencyjną korelację obrazów przepływu
- cyfrową metodę pomiaru pola temperatury, opartą na zawiesinie ciekłych kryształów jako cząstek wskaźnikowych
- komputerową rejestrację obrazów przepływu z odpowiednim doбором ich sekwencji (liczba obrazów, ich odstęp czasowy)
- wyznaczanie rozkładu koncentracji substancji rozpuszczonej (soli NaCl w roztworze wodnym) poprzez pomiar przewodnictwa elektrycznego cieczy przy pomocy miniaturowych elektrod umieszczonych w przepływie i na ściankach przestrzeni pomiarowej
- termografię w podczerwieni do pomiaru i rejestracji pola temperatury ściany bocznej kuwety pomiarowej, które istotnie wpływa na przebieg procesów wymiany ciepła i kształtujące się struktury przepływu w układach binarnych.

Opracowano własne programy do filtracji uzyskanych obrazów, analizy pól wektorowych, barwy obrazu oraz torów cząstek.

Na zbudowanym stanowisku pomiarowym przeprowadzono wnikliwe badania procesu zamarzania czystej wody dla różnych warunków wymiany ciepła przez ścianki ograniczające kuwetę pomiarową (rozdział 2). Uzyskane szczegółowe obrazy struktury przepływu, pól prędkości i temperatury oraz chwilowych położeń granicy rozdziału faz dają obraz znaczącej roli konwekcji swobodnej w przebiegu analizowanego zjawiska.

Zebrane wyniki badań, dzięki dużej „gęstości” informacji, stanowią też cenny materiał porównawczy do weryfikacji dokładności i wiarygodności modeli obliczeniowych dla procesów

przemian fazowych w układach jednoskładnikowych. Takie oceny, uzyskiwane na podstawie porównań wyników precyzyjnych eksperymentów i obliczeń dla wybranych, wzorcowych procesów i geometrii, stosunkowo łatwych w realizacji eksperymentu w skali laboratoryjnej, są niezbędne by uwiarygodnić kod symulacji komputerowej przed jego dalszym użyciem w bardziej złożonych, praktycznych przypadkach, dla których badania doświadczalne są zbyt kosztowne i trudne. Brak jest jednak takich wzorców (w literaturze angielskiej określanych mianem „*benchmarks*”) dla zagadnień ruchu płynu i wymiany ciepła w procesach przemian fazowych ciecz-ciało stałe. Dlatego autorzy projektu proponują wykorzystanie tu szczegółowych wyników ich badań wizualizacyjnych konwekcji swobodnej wody, zamarzającej w kuwecie sześcienniej. Jest to bardzo wymagający test sprawdzający dla modelu obliczeniowego, ze względu na złożoną strukturę przepływu (dwa wiry o odwrotnych kierunkach cyrkulacji), będącą wynikiem anomalii gęstości wody w niskich temperaturach.

Jako modelowy układ w badaniach eksperymentalnych dla substancji dwuskładnikowych przyjęto, ze względu na ograniczony zakres temperatur, w którym można wykorzystać zawieszinę ciekłych kryształów, roztwory wodne chlorku sodu. Przeprowadzono badania wizualizacyjne konwekcji naturalnej podczas zamarzania tych mieszanin (rozdział 2). Zaobserwowano obszar, w którym następuje stagnacja przepływu w stanie ustalonym. W celu lepszego poznania przyczyn tego efektu dokonano pomiaru stężenia soli NaCl w roztworze wodnym metodą sond rezystancyjnych z jednoczesną rejestracją pola prędkości. Badania te poszerzono o analizę frontu zmiany gęstości, wywołanej zmianą koncentracji NaCl przy użyciu techniki smugowej Schlirena. Wstępne, rezultaty pomiarów, głównie pola prędkości i koncentracji wskazują na wyraźną stratyfikację przepływu. Poszerzenie zakresu tych badań pozwoli na stworzenie kolejnego wzorca, który będzie mógł być wykorzystany w przyszłej weryfikacji kodów numerycznych modelujących zjawiska transportu ciepła i masy w układach binarnych, przed ich zastosowaniem do „trudnych eksperymentalnie” substancji stosowanych w technice, takich jak ciekłe metale czy kryształy krzemu.

W ramach prac teoretycznych zaproponowano nową metodę opisu złożonych procesów wymiany ciepła i składników w obszarze dwufazowym ("*mushy zone*") układu binarnego podlegającego przemianie ciecz - ciało stałe (rozdział 3).

Złożona mikrostruktura tego obszaru powoduje, że do analizy przepływu ciepła i masy w takim ośrodku używa się zwykle opisu makroskopowego, w którym wygładzane są lokalne różnice w wartościach temperatur i stężeń składników, spowodowane np. obecnością dendrytów. W związku z tym, zanim przeprowadzone zostaną jakiekolwiek przewidywania teoretyczne dotyczące rozkładu komponentów w obszarze dwufazowym, konieczne jest opracowanie odpowiedniego modelu opisującego zjawiska transportu energii i masy na poziomie makroskopowym. Zastępowanie mikroskopowych procesów transportu w obszarze dwufazowym makroskopowym opisem ośrodka o efektywnych właściwościach, nazywane jest homogenizacją. Stosowane są tu różne metody, takie jak spektralne, wariacyjne, objętościowe - oparte na uśrednieniu po objętości elementarnej, statystyczne - oparte na uśrednianiu po zbiorze różnych realizacji mikrostruktury ośrodka. Ostatnią z technik z sukcesem stosowano w analizie zjawisk transportu zachodzących w ośrodkach niejednorodnych. Nie była ona jednak dotąd wykorzystywana w zagadnieniach krzepnięcia układów dwuskładnikowych.

W niniejszym opracowaniu przedstawiono pierwszą próbę jej aplikacji do sformułowania równań makroskopowego opisu procesów transportu w obszarze dwufazowym wypełnionym roztworem binarnym. Ten niejednorodny obszar (poziom mikroskopowy) modelowany jest zastępczym ośrodkiem ciągłym o pewnych efektywnych właściwościach (poziom makroskopowy), przez wykorzystanie statystycznych uśrednień wielkości polowych po zbiorze dopuszczalnych konfiguracji (*ensemble averaging*). Przejście od opisu mikroskopowego do makroskopowego prowadzi do pojawiania się dodatkowych efektów (zjawisk dyspersji

składników i ciepła, występowania sprzężeń między przepływem ciepła i składników - efekt Dufoura, sprzężeń między przewodzeniem ciepła a źródłami ciepła występującymi na granicach międzyfazowych). W przeprowadzonych rozważaniach (rozdział 3) wykazano, że forma związków konstytutywnych, wiążących wielkości makroskopowe, nie musi być postulowana, ale może być wyprowadzona z odpowiednich związków dla wielkości mikroskopowych, niezależnie od założenia dotyczącego skal długości wpływających na rozpatrywane procesy.

Wykazano również, że omawiane związki konstytutywne są nielocalne. Ten aspekt opisu procesów transportu w obszarze dwufazowym nie był dotychczas poruszany w literaturze. Nielokalność związana jest z problemem braku lokalnej równowagi termodynamicznej makroskopowych procesów zachodzących w obszarze dwufazowym. Nie jest w związku z tym konieczne do opisu procesów nierównowagowych przyjmowanie dodatkowych, uzupełniających modeli (np. tzw. modeli dyfuzji) noszących często charakter postulatywny. Jeśli spektrum skal, związanych z opisem mikrostruktury „*mushy zone*”, jest rozłączne ze spektrum skal związanych z przestrzennym rozkładem i zmiennością czasową makroskopowych pól stężeń i temperatury, możliwe jest stosowanie uproszczonej, lokalnej formy związków konstytutywnych, które mają postać podobną do prawa Ficka czy Fouriera, słusznego dla ośrodków jednorodnych. Związki te odnoszą się do procesów, w których warunki równowagi cieplnej czy fazowej są zachowane.

Badania eksperymentalne dostarczają informacji o zachowaniu układów fizycznych o prostych geometriach, możliwych do analizy w warunkach laboratoryjnych. Tymczasem w rzeczywistych problemach inżynierskich obszary mają krzywoliniowe, złożone brzegi. Przeniesienie wyników pomiarów z prostych geometrii na złożone kształty jest często bardzo zgrubnym przybliżeniem, które w przypadku ruchu płynu może gubić istotne cechy przepływu (np. lokalne zawirowania wywołane krzywiznami brzegów), zważywszy, że charakterystyczną cechą zagadnień teorii pola jest wrażliwość ich rozwiązań na nawet nieznaczne zmiany kształtu brzegu obszaru. Pogłębiona analiza zjawisk transportu masy, pędu i energii w rzeczywistych układach wypełnionych roztworem dwuskładnikowym lub substancją jednoskładnikową wymaga więc wykorzystania współczesnych zaawansowanych technik symulacji numerycznej. Zastosowanie tu komercyjnych, powszechnie dziś dostępnych, kodów komputerowych jest ograniczone i nieefektywne, ze względu na ich ogólność, czasochłonność i często brak możliwości poszerzenia użytych w nich modeli. Dlatego w symulacji komputerowej złożonych, wciąż nie do końca poznanych, procesów transportu w układach binarnych ze zmianą fazy zasadne jest tworzenie oprogramowania zorientowanego tematycznie, elastycznego w którym implementacja nowych modeli nie stanowi problemu, a wyniki uzyskuje się w rozsądnym czasie. Jest to szczególnie istotne, gdy narzędzie obliczeniowe służyć ma poznaniu zjawisk przez uzupełnienie, często kosztownych i żmudnych, badań doświadczalnych.

Dlatego jednym z podstawowych zadań badań teoretycznych było stworzenie efektywnych modeli numerycznych oraz biblioteki programów do komputerowej symulacji nieustalonych zjawisk krzepnięcia i topnienia z konwekcją w fazie ciekłej dla układów jednoskładnikowych i binarnych w złożonych dwuwymiarowych obszarach geometrycznych.

W ramach jego realizacji opracowano dwa programy metody elementów skończonych (MES) oparte na modelu pojedynczego kontinuum, teorii roztworów, entalpowym opisie procesu przemiany fazowej na stałej siatce dyskretyzacji oraz modelowaniu obszaru dwufazowego jako anizotropowego medium porowatego (rozdział 4.2).

Obliczeniowo-efektywne algorytmy tych programów uzyskano przez zastosowanie procedur sekwencyjnego i iteracyjnego rozwiązania sprzężonych układów równań zachowania masy, pędu i energii oraz różnych technik rozdziału w czasie (rozdział 4.2). W pierwszym programie wykorzystano metodę rzutu (*projection method*) Chorina i Gresho, tj. technikę rozdziału obliczeń pól prędkości i ciśnienia wraz z jawnym trójpoziomowym schematem Adamsa-Basfortha kroczenia w czasie. W algorytmie obliczeniowym drugiego programu użyto metodę

rozdziału operatorów transportu konwekcyjnego i dyfuzyjnego w dwóch następujących po sobie etapach całkowania w czasie niejawnym schematem Eulera. Metody te nie były dotychczas stosowane w analizie procesów zmiany fazy z konwekcją.

Poszukiwanie obliczeniowo-efektywnych technik rozwiązywania układów sprzężonych nieliniowych równań różniczkowych cząstkowych (lub ich dyskretnych odpowiedników w postaci równań algebraicznych) jest przedmiotem zainteresowań matematyków i numeryków w wielu ośrodkach naukowych na świecie. Powszechnie akceptuje się zastępowanie teoretycznie dokładnych metod jednoczesnego rozwiązywania przez przybliżone techniki sekwencyjnego i iteracyjnego dochodzenia do rozwiązania. Te dokładne bowiem mają trudne do zaakceptowania koszty obliczeń (zwłaszcza w realnych zadaniach trójwymiarowych), przybliżone zaś są wielokrotnie szybsze, nie wymagają dużych pamięci operacyjnych czy zewnętrznych.

Jednakże, zastosowanie takich modeli symulacji numerycznej w realnych zagadnieniach inżynierskich wymaga ich uwiarygodnienia. Proces ten składa się z dwóch etapów. W pierwszym dokonuje się weryfikacji dokładności rozwiązania numerycznego przez analizę wpływu gęstości siatek podziału i/lub porównanie tego rozwiązania z innymi dostępnymi w literaturze rozwiązaniami analitycznymi, albo uzyskanymi innymi technikami dyskretyzacji (*benchmarks*). Przedmiotem takiej analizy jest odpowiedź na pytanie: jak dobrze model numeryczny przybliży dyskretyzowane równania modelu ciągłego. Drugi etap to jednoczesne uwiarygodnienie obu modeli: matematycznego (ciągłego) i jego odpowiednika dyskretnego (proces określa się w literaturze angielskiej mianem „*code validation procedure*”) przez szczegółowe porównania rozwiązań numerycznych z precyzyjnymi pomiarami dla pewnych wybranych, wzorcowych geometrii i zjawisk. Tutaj poszukuje się odpowiedzi na pytanie jak symulacja numeryczna oddaje rzeczywistość. W ostatnich latach coraz powszechniejsza staje się świadomość, że weryfikacja dokładności nie jest wystarczająca, bo nawet dokładne rozwiązanie równań nie gwarantuje jeszcze dobrej symulacji komputerowej analizowanych zjawisk. Musimy mieć jeszcze pewność, że te „dokładnie” rozwiązane równania dobrze opisują fizykę analizowanych zjawisk i procesów. Rozwija się więc „*benchmarki*” eksperymentalne, jako wzorce do porównań.

Opracowane modele obliczeniowe MES poddano więc najpierw wszechstronnej weryfikacji, przez porównanie ich rozwiązań z dostępnymi w literaturze wynikami innych analiz numerycznych wybranych problemów wzorcowych (*benchmarks*), takich jak laminarny przepływ płynu lepkiego w kanale, konwekcja swobodna Boussinesq’a, solidyfikacja stopu Al-5%Cu przy braku konwekcji. We wszystkich tych przypadkach uzyskane wyniki były bardzo bliskie rezultatom publikowanym przez innych badaczy (rozdział 4.3).

W kolejnym więc kroku procedury oceny proponowanych modeli MES przeprowadzono obliczenia rozkładów pól temperatury i prędkości oraz chwilowych położań frontu fazowego dla przypadku czystej wody ochładzanej i krzepnącej, w zakresie temperatur obejmujących punkt anomalii gęstości wody. W celu odpowiedzi na pytanie czy uzyskane tą drogą wyniki poprawnie modelują rzeczywistość wykorzystano, proponowany w rozdziale 2, wzorzec eksperymentalny. Porównano więc obliczenia z wynikami wizualizacji przepływu i pola temperatury (przy wykorzystaniu posiewu ciekłych kryształów oraz technik DPIV i DPIT). Potwierdziły one wiarygodność proponowanego modelu symulacji komputerowej. Nieznaczne rozbieżności, zwłaszcza w chwilowych polach prędkości oraz kształtach frontu fazowego, wywołane były brakiem dokładnych informacji o termicznych warunkach brzegowych na wewnętrznych ścianach kuwety pomiarowej. Założenie adiabatyczności nieizotermicznych ścianek pleksiglasowych, powszechnie przyjmowane na termicznie izolowanych powierzchniach, okazało się niezbyt precyzyjne w analizowanym przypadku, gdzie, jak potwierdził eksperyment (rozdział 2.2), przebieg zachodzących procesów silnie zależy od niewielkich nawet zmian warunków wymiany ciepła przez ścianki kuwety.

Stosunkowo łatwo i dokładnie można natomiast zdefiniować warunki brzegowe na zewnętrznych powierzchniach tych ścianek (współczynnik przejmowania ciepła i temperatura płynu omywającego powierzchnie). Rozbudowano więc model symulacji komputerowej w kierunku jednoczesnej analizy sprzężonej wymiany ciepła, obejmującej konwekcję swobodną wywołaną siłami wyporu i zmianę fazy w płynie wypełniającym przestrzeń pomiarową oraz przewodzenie ciepła w ściankach ograniczających kuwetę. Uzyskane w ten sposób wyniki obliczeń są bardzo bliskie wartościom prędkości i temperatury rejestrowanym technikami DPIV/DPIT (rozdział 4.4).

Przeprowadzono także implementację nowych, teoretycznych modeli obszaru dwufazowego, opartych na metodzie „ensemble averaging”, w rozwijanych kodach obliczeniowych MES. Wykorzystano je następnie do analizy wpływu anizotropii przepuszczalności i przewodności cieplnej oraz dyspersji ciepła w obszarze dendrytycznym, modelowanym jako porowaty ośrodek Darcy’ego (rozdział 4.5). Obliczenia przeprowadzono dla dwóch rozcieńczonych roztworów chlorku amonu, dwuskładnikowego czynnika, który krzepnie podobnie jak binarny stop metalu. Wykazano znaczny wpływ anizotropowego charakteru przepuszczalności materiału i pomijalne oddziaływanie dwóch pozostałych efektów na kształtujące się pola prędkości oraz chwilowe kształty i położenie obszaru dendrytycznego.

Ze względu na niewielki udział substancji rozpuszczonej pominięto w tej analizie konwekcję wywołaną gradientem stężeń (siły wyporu wywołane były tylko gradientem temperatury) i zależność parametrów termofizycznych obszaru dwufazowego (w tym entalpii) od koncentracji tego składnika. W rzeczywistych układach binarnych, zwłaszcza w stopach metali, uproszczenia takie nie są możliwe. Nie tylko gradienty temperatury, ale przede wszystkim gradienty koncentracji wywołują ruchy konwekcyjne, które zmieniają rozkłady substancji rozpuszczonej w obszarze odlewu – występuje makro- i mikrosegregacja.

Dlatego, kod symulacji numerycznej, rozbudowano dalej na przypadki, gdzie występują silne sprzężenia pól temperatury, koncentracji i entalpii całkowitej (rozdział 4.6). Opracowano iteracyjny model analizy MES dla sprzężonych równań ciągłości i ruchu płynu nieściśliwego oraz transportu entalpii i koncentracji składnika dla dwuwymiarowej laminarnej konwekcji swobodnej wywołanej, gradientami stężeń i temperatury, występujących w procesie krzepnięcia układu dwuskładnikowego. Każde ze wspomnianych równań rozwiązano techniką, w której człony dyfuzyjne całkowano w czasie niejawnym schematem Eulera, zaś człony konwekcyjne jawnym schematem Adamsa-Basfortha. Potrzebne związki między koncentracją substancji rozpuszczonej i temperaturą roztworu uzyskano z wykresu fazowego, przy założeniu lokalnej równowagi termodynamicznej na granicy fazowej. W obliczeniach entalpii roztworu zastosowano proponowany w rozdziale 3 algorytm, w którym w wyznaczaniu entalpii fazy stałej i fazy ciekłej wykorzystuje się znany fakt niezależności przyrostu parametru termodynamicznego od drogi przemiany. W celu uwzględnienia skończonej dyfuzji składnika w fazie stałej (mikrosegregacja) wprowadzono do modelu numerycznego uśrednioną lokalną koncentrację substancji rozpuszczonej w tej fazie.

Zasadniczym problemem jest zbieżność procesu iteracyjnego dopasowania pól koncentracji, temperatury i udziału objętościowego lub masowego fazy ciekłej w obszarze dwufazowym. Choć analityczne związki (wynikające z zależności udziału składnika od koncentracji i temperatury oraz z równania linii *likwidusa* na wykresie fazowym) są jednoznaczne, to ich bezpośrednie użycie prowadzi do rozbieżności (zwłaszcza przy dużych ciepłach przemiany fazowej, typowych dla ciekłych metali). Zaproponowano tu algorytm oparty na rozwinięciu kolejnej iteracji udziału fazy ciekłej w szereg Taylora względem poprzedniego przybliżenia. Potrzebne pochodne cząstkowe oblicza się ze wspomnianych wyżej związków analitycznych.

Algorytm ten, choć obiecujący, nie został jeszcze do końca przebadany, w szczególności nie uzyskano jeszcze zadawalających wyników dla rzeczywistych stopów metali.

Szczegółowy opis stanowiska pomiarowego do wizualizacji pól temperatury i prędkości, metodyki badań i ich zakresu oraz uzyskanych wyników przedstawiono w rozdziale 2 opracowania. W następnej jego części omówiono proponowany model teoretyczny obszaru dendrycznego, oparty na statystycznych uśrednieniach wielkości polowych po zbiorze dopuszczalnych konfiguracji. Kolejny rozdział poświęcono szczegółowemu opisowi modelu numerycznego i jego efektywnych algorytmów obliczeniowych, weryfikacji jego dokładności i zgodności z fizyką analizowanych zjawisk oraz rozszerzeniu modelu na problemy solidyfikacji układów binarnych, gdzie występuje anizotropia własności obszaru dwufazowego i segregacja składników roztworu. Opracowanie zakończono krótkim podsumowaniem i rozważaniami nad kierunkami dalszych prac.

2. Badania eksperymentalne, metodyka, zakres pomiarów, wyniki

2.1. Metodyka badań eksperymentalnych i zakres pomiarów

Celem badań eksperymentalnych było wyznaczenie istotnych charakterystyk przepływu konwekcyjnego z przemianą fazową ciało stałe $\leftrightarrow$ ciecz (topnienie lub zestalanie). Podstawowa część badań dotyczy badań przemiany fazowej dla układu jednoskładnikowego (woda). Przemianę fazową takiego układu charakteryzuje dobrze zdefiniowana powierzchnia fazowa o stałej, dobrze znanej temperaturze. Przy zastosowaniu substancji o dobrze zbadanych własnościach fizycznych i termodynamicznych, fizyczne warunki eksperymentalne mogą być precyzyjnie określone. Ma to szczególne znaczenie dla późniejszych porównań z obliczeniami numerycznymi.

W omawianych badaniach skoncentrowano się na wyznaczeniu pól prędkości, temperatury oraz torów cząstek dla wybranych przekrojów oraz położenia frontu przemiany fazowej (lodu). Do wizualizacji pól temperatury i prędkości wykorzystano zawieszinę ciekłych kryształów unoszoną przez przepływ. Zastosowane metody analizy obrazów przepływu pozwalają na jednoczesny pomiar pól prędkości i temperatury w całym wybranym przekroju naczynia. Stanowisko badawcze pozwala na zmianę tego przekroju w ciągu kilku-kilkunastu sekund. Ponieważ badane przyprływy charakteryzuje stosunkowo długa skala czasowa, poprzez szereg takich pomiarów wykonanych w krótkim czasie sekwencyjnie dla kilkunastu przekrojów przepływu, możliwe było również wykonanie quasi-trójwymiarowych badań charakterystyk przepływu. Zebrane wyniki badań dzięki dużej „gęstości” informacji stanowią cenny materiał porównawczy do weryfikacji i walidacji kodów numerycznych symulujących zjawiska przemiany fazowej w układach jednoskładnikowych [1-3, 7, 8, 12-20].

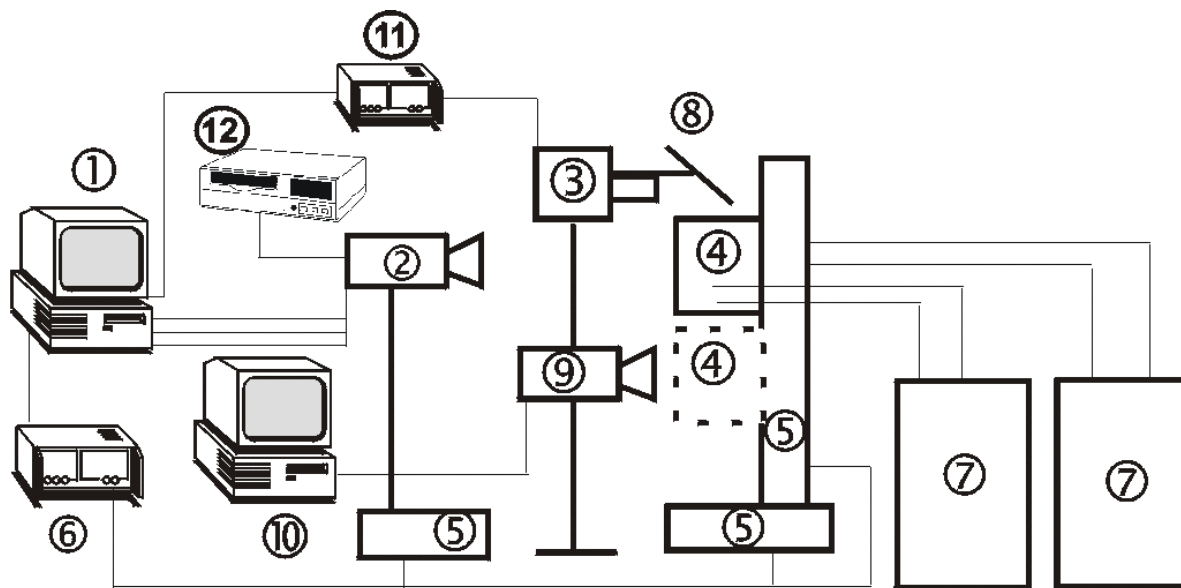
W większości procesów fizycznych rzadko mamy jednak do czynienia z czystymi substancjami. Zarówno w procesach zamarzania zbiorników wodnych jak i krzepnięcia metali czy tworzenia kryształów materiałów półprzewodnikowych obok konwekcji termicznej duże znaczenie odgrywa również konwekcja wywołana gradientami koncentracji (solutal convection). Jej wpływ powoduje zarówno modyfikacje struktur przepływu jak i modyfikacje składu czynnika płynnego i powstającej fazy stałej. Przemianę fazową dla takich substancji charakteryzuje szeroki zakres temperatur w którym następuje zarówno zmiana fazy jak i składu czynników. W związku z tym powierzchnia granicy faz jest na ogół rozmyta. Cechuje ją obszar pośredni (tzw. „mushy region”), który jest mieszaniną fazy ciekłej i stałej. Procesy wieloskładnikowe wskutek dużej złożoności są trudne do analizy matematycznej jak i eksperymentalnej. Często jednak zjawiska tam zachodzące można z dużą dokładnością uznać za binarne, ograniczając się do analizy zachowania jej dwu podstawowych składników. Takim modelowym układem są roztwory, w których jednym ze składników jest sól a drugim woda. Przemiana fazowa ciecz - ciało stałe (krystalizacja lub topnienie) takiego układu jest w tej pracy modelem procesów zachodzących dla układów binarnych. Przeprowadzone tutaj badania doświadczalne dotyczyły pomiaru pól prędkości, temperatury, koncentracji oraz kształtu frontu fazowego. Zastosowane metody pomiaru koncentracji soli pozwoliły na obecnym etapie określić jakościowo zmiany koncentracji w badanym przepływie (metoda Schlierena). Przeprowadzone również punktowe pomiary przewodnictwa elektrycznego ułatwiają ilościową interpretację tych obrazów. Obecne rezultaty pomiarów, głównie pola prędkości i koncentracji wskazują na wyraźną stratyfikację przepływu. Informacje te mogą być wykorzystane dla przyszłej weryfikacji kodów numerycznych modelujących zjawiska transportu ciepła i masy w układach binarnych, przed ich zastosowaniem do „trudnych eksperymentalnie” substancji stosowanych w technice, takich jak ciekłe metale czy kryształy krzemu.

2.1.1. *Stanowisko badawcze*

Metodyka prowadzonych badań wymaga rejestracji barwnych obrazów przepływu wywołanego precyzyjnie kontrolowanym gradientem temperatury. Rejestracje te umożliwia kamera barwna 3xCCD sprzężona z 24-bitowym przetwornikiem obrazu typu IC-PCI. Pomiar torów cząstek wykonywano na ogół korzystając z kamery monochromatycznej i specjalnie oprogramowanego w tym celu przetwornika obrazu typu VFG [17]. Do przemieszczania wiązki światła i zmiany położenia kamery względem naczynia wykorzystano silniki krokowe. Dodatkowe punktowe pomiary temperatury jak i pomiar przewodnictwa elektrycznego umożliwiał przetwornik analogowo-cyfrowy. Poniżej zebrano podstawowe charakterystyki elementów stanowiska wykorzystywanych do badań eksperymentalnych:

- Cyfrowe kamery wideo:
 - a) Kamera barwna typu 3xCCD wyposażona w 3 sensory o rozmiarze 1/3", typ XC003/P firmy SONY o rozdzielczości 3x756x582 pikseli. Kamera pozwala na rejestracje obrazów barwnych „true colour”, tzn. w formacie RGB 3x8-bit.
 - b) Kamera monochromatyczna CCD typ JAI M10BX o rozdzielczości 1x782x582 pikseli. Dzięki technologii Progresiv Scan, kamera pozwala uzyskać pełną rozdzielczość obrazów (non-interlace), konieczną do rejestracji torów cząstek.
- Kuwety pomiarowe, wypełniane wodą, materiałem ulegającym przemianie fazowej lub roztworem soli. Ścianki boczne naczyń wykonane z pleksiglasu lub szkła, ścianki izotermiczne wykonane z poczernionego aluminium.
- Karty komputerowe akwizycji obrazu:
 - a) 24-bitowa karta IC-PCI firmy Imaging Technology Inc. z modulem AM-STD stosowana do akwizycji obrazów barwnych.
 - c) 12-bitowa karta VFG100 firmy Imaging Technology Inc., pamięć video formatu 1024x1024 piksele, 4 wejścia video sterowane multiplexerem, stosowana do rejestracji obrazów torów cząstek.
- System trzech prowadnic i sterowanych programowo silników krokowych firmy ISEL, system pozwala na swobodną zmianę konfiguracji źródło światła – kamera - komora pomiarowa w czasie kilku sekund.
- Zestaw dwóch termostatów firmy PolyScience pozwalających na stabilizację temperatury ścianek izotermicznych w zakresie -30°C - $+100^{\circ}\text{C}$.
- Karta przetwornika analogowo cyfrowego ADDA firmy Advantech Co., Ltd. PCL717B (8 kanałów) wraz z multiplexerem i wzmacniaczem PCLD-779 firmy Advantech Co., Ltd. do punktowych pomiaru temperatury m. in. ścianek kuwet pomiarowych, wykorzystywana również do pomiaru przewodnictwa soli.
- Specjalnie skonstruowane i stosowane wymiennie źródła światła: system wyposażony w rurową lampę halogenową z układem optycznym pozwalającym na formowanie płaszczyzny świetlnej o średniej grubości ok. 1,5mm i szerokości 10cm oraz układ rurowej lampy błyskowej. Systemy oświetlenia wyposażono w sterowniki elektroniczne, umożliwiające programowe sterowanie procesu włączania. Pozwala to na pełną automatyzację procesów rejestracji i uniknięcie wpływu ewentualnych efektów cieplnych wywołanych zbyt długim naświetlaniem obszaru pomiarowego światłem halogenowym (typowy czas naświetlania wynosi 0.8s).
- Magnetowid S-VHS, stosowany do dodatkowej rejestracji obrazów przepływu i archiwizacji przebiegu eksperymentu.
- Zestaw zwierciadeł nakierowujących płaszczyznę świetlną.
- Kamera na promieniowanie podczerwone AGEMA Thermovision 900 LW z detektorem MCD (Mercury Cadmium Telluride) chłodzona ciekłym azotem, stosowana dla zbadania wpływu zewnętrznych warunków termicznych na nie-izotermicznych ściankach naczynia.

Podstawowe elementy stanowiska pomiarowego pokazano schematycznie na rys. 2.1. Badany przepływ obserwowano w wybranym pionowym przekroju, wykorzystując technikę warstwy świetlnej (tzw. light sheet). Warstwa świetlna wytwarzana lampą halogenową miała szerokość 100 mm i grubość ok. 1-2 mm. Obserwacje prowadzono za pomocą kamery CCD umieszczonej prostopadłe do oświetlanej płaszczyzny. Dzięki umieszczeniu kamery i kuwety pomiarowej na prowadnicach silników krokowych istniała możliwość szybkiej rejestracji obrazów dla wielu płaszczyzn pionowych, co przy długich czasach relaksacji przepływu pozwala zarejestrować informacje o przestrzennej strukturze pól prędkości i temperatury.



Rys. 2.1. Schemat stanowiska do badań konwekcji naturalnej z przemianą fazową:

- 1) komputer z kartą akwizycji obrazu, 2) kamera 3CCD, 3) lampa halogenowa, 4) kuweta pomiarowa, 5) prowadnice z silnikami krokowymi, 6) sterownik silników krokowych, 7) termostaty, 8) lustro, 9) kamera na podczerwień, 10) sterownik kamery na podczerwień, 11) sterownik lampy halogenowej lub błyskowej, 12) magnetowid

System akwizycji obrazów bazujący na komputerze klasy Pentium II 233 MHz z 64MB pamięci RAM, został sprzężony z komputerowo sterowanym systemem przesuwu, oświetlenia i ewentualnie rejestracji temperatur i przewodnictwa roztworu. Zadanie to umożliwiają opracowane programy komputerowe PCISTD (akwizycja obrazów, sterowanie kartą IC-PCI AM-STD) oraz VFGLAB (akwizycja obrazów i sterowanie kartą VFG100). Dzięki specjalnym protokołom komputer współpracujący z kartą (procesorem) akwizycji obrazu zapewniał obok rejestracji obrazów również pełną kontrolę czasową przebiegu eksperymentu. Jest to szczególnie ważne w badaniach rozwoju czasowego zjawiska, umożliwiając precyzyjne ustalenia poszczególnych kroków czasowych obserwacji. Program VFGLAB, wykorzystywany głównie do akwizycji obrazów czarno-białych, wyposażono w możliwość sumowania obrazów „on-line” w pamięci karty procesora. Procedura ta, we współpracy z odpowiednio dobranymi procedurami filtracyjnymi i dyskryminującymi umożliwia w pełni zautomatyzowaną rejestrację torów cząstek, będących cennym uzupełnieniem obrazów wykorzystywanych do pomiaru pól prędkości i temperatury [13,17,20]. Wykorzystanie programowych możliwości w pełni automatycznego sterowania całym eksperymentem, synchronizację włączenia oświetlenia, sterowanie silnikami krokowymi położenia komory i kamery cyfrowej, jak również punktową rejestrację temperatury i przewodnictwa ułatwia specjalnie opracowany system komend podawanych w formie danych wejściowych wewnętrznego interpretera programu.

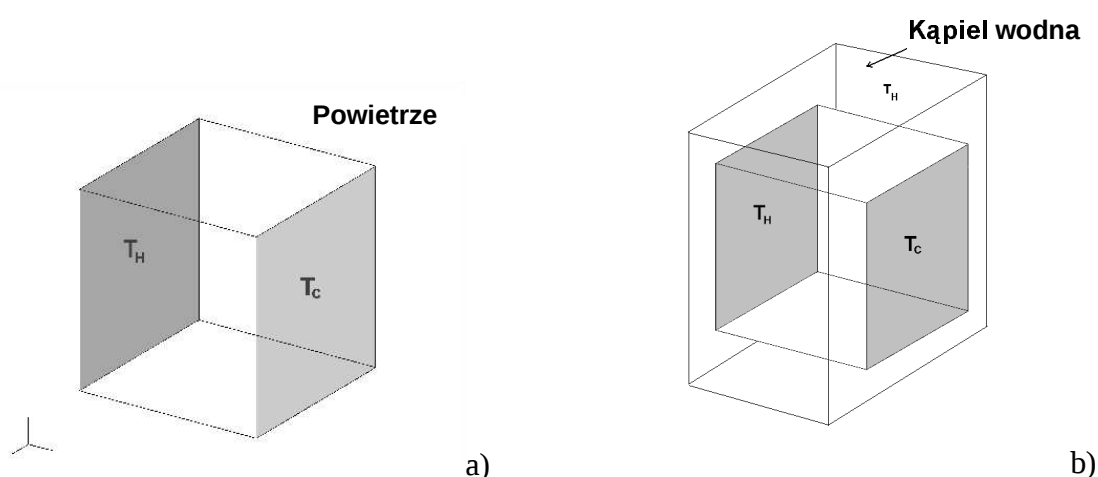
Obrazy czarno-białe i kolorowe z kamery RGB są zapisywane jako pliki binarne z nagłówkami. Obrazy kolorowe rejestrowane są jako trzy oddzielne pliki z rozbiem na kolory podstawowe zapisu RGB (czerwony, zielony i niebieski). Maksymalna rozdzielczość rejestrowanych w czasie rzeczywistym 24-bitowych obrazów komputerowych wynosiła 768x524 pikseli. Jeden taki obraz RGB zajmuje ok. 1,2 MB pamięci. Do pełnej rejestracji zmian w czasie dla jednego eksperymentu (ok. 200-300 par obrazów) potrzeba do 1 GB pamięci masowej (dysk twardy komputera). Po zakończeniu danej serii eksperymentów wyniki w postaci obrazów były archiwizowane na płytach kompaktowych CD-R. Równoległym sposobem rejestracji obrazów był zapis na taśmie video za pomocą magnetowidu połączonego z kamerą CCD. Istnieje możliwość przesłania zapisanych na taśmie obrazów z magnetowidu do procesora obrazu i poddanie ich obróbce cyfrowej, a następnie zapisanie na dysku komputera, powoduje to jednak znaczne obniżenie jakości obrazów.

2.1.2. Opis geometrii kanału pomiarowego

Do badań wybrano kuwetę (kanał) pomiarową (rys. 2.2), w której poziomy gradient temperatury między przeciwległymi ściankami wymuszał przepływ konwekcyjny. Wykonano ją w formie prostopadłościanu z czterema bocznymi ściankami z pleksiglasu o grubości 6 mm lub 9 mm (dwa typy ścianek o różnej grubości). Przewodność cieplna λ tego materiału została wyznaczona eksperymentalnie za pomocą aparatu płytowego jako 0,19 W/(mK).

Wysokość H tego kanału wynosiła 38 mm, stosunek wysokości do szerokości H/W mógł być zmieniany, tak by wynosił 1 lub 0,69. Dwie pozostałe przeciwległe, pionowe ścianki zostały wykonane z metalu (aluminium) i podłączone do termostatów (woda lub glikol), które utrzymywały je w stałej temperaturze T_H i T_C . Ustalając różne wartości tych temperatur można było zrealizować w kanale różne procesy wymiany ciepła: konwekcję, zestalanie i topnienie. W celu zbadania wpływu warunków brzegowych na przepływ cieczy w kuwecie rozpatrzono dwa przypadki:

- kuweta ze ściankami bocznymi o grubości 6 mm otoczona powietrzem atmosferycznym o temperaturze 25°C (rys. 2.2.a)
- kuweta ze ściankami bocznymi o grubości 9 mm otoczona płaszczem wodnym (pojemnik z przezroczystymi ściankami, przez który przepływa wody o stałej temperaturze - rys. 2.2.b).



Rys. 2.2. Geometria kuwety pomiarowej: a) kuweta prostopadłościenna o grubości ścianek bocznych równej 6 mm, b) kuweta prostopadłościenna o grubości ścianek bocznych równej 9 mm

2.1.3. Metoda wyznaczania pola temperatury

Jednym z podstawowych parametrów charakteryzujących przepływy konwekcyjne jest pole temperatury. Klasyczne metody pomiaru temperatury opierają się na zbieraniu punktowych informacji z możliwie dużej liczby czujników rozmieszczonych w przepływie. Metoda ta jest prosta w zastosowaniu i zapewnia stosunkowo dużą dokładność. Jednak niewielka liczba punktów kontrolnych utrudnia interpretację zebranych danych, szczególnie w przypadku istotnie zmieniających się w czasie rozkładów temperatury. Wprowadzanie czujników temperatury dodatkowo zakłóca przepływ, a w wypadku przejść fazowych czujniki takie mogą lokalnie modyfikować warunki przemiany fazowej. W związku z tym w niniejszej pracy do wyznaczenia zarówno pól prędkości jak i temperatury została wykorzystana zawiesina ciekłokrystalicznej (TLC □ Thermochromic Liquid Crystal), pozwalająca w sposób praktycznie nieinwazyjny monitorować temperaturę płynu [12-20]. Niewielka ilość tej substancji (koncentracja ok. 0,05%) w postaci zawiesiny cząstek o rozmiarach ok. 50µm dodana do badanej cieczy w charakterze posiewu nie powoduje zmiany charakteru przepływu i nie zmienia własności stosowanych cieczy. Po oświetleniu takiego przepływu płaszczyzną świetlną, możemy zarejestrować kolorowy obraz powstały w wyniku selektywnego rozpraszania światła przez materiał ciekłokrystaliczny. Przemieszczając się w przepływie zawiesina dostarcza informacji o polu prędkości, podobnie jak klasyczny posiew.

Zmiana barwy światła rozproszonego na ciekłych kryształach jest źródłem informacji o lokalnej temperaturze otaczającej go cieczy. Kolor rozpraszanego światła zmienia się ze wzrostem temperatury od niskoenergetycznych barw długofalowych (czerwonej) do barw górnego zakresu widma światła widzialnego (kolor niebieski). Poza zakresem aktywnym (poniżej i powyżej temperatury granicznej) zawiesina jest optycznie niemal przezroczysta. Zakres zmian koloru (tzw. *colour play range*) zależy od stosowanego materiału ciekło-kryształicznego i musi być dopasowany do warunków eksperymentu. Zależność koloru od temperatury jest silnie nieliniowa i jej ustalenie wymaga zastosowania procedury kalibracyjnej. Rejestrowane obrazy przepływu przedstawiają zbiór barwnych plamek nieregularnie rozmieszczonych w przepływie. Analiza obrazów barwnych polega w pierwszej kolejności na ustaleniu koloru dominującego tych plamek.

Rejestrowany obraz kolorowy jest reprezentowany przez trzy barwy podstawowe: *czerwoną, zieloną i niebieską (RGB)* i zapisywany w trakcie eksperymentu w postaci trzech plików odpowiadających wyciągom z każdego kanału barwnego kamery. Celem przeanalizowania koloru jako wartości fizycznej, należy przekształcić zawartą w obrazie informację barwną RGB na jej składowe HSI: *kolor dominujący (Hue)*, *nasycenie (Saturation)* i *jasność (Intensity)*. Interesującą nas wielkością jest wartość *hue*, będąca odpowiednikiem długości fali świetlnej w spektrometrii. Wyznaczenie tej wartości jest możliwe na wiele sposobów. Ponieważ stosowana metoda wymaga kalibracji zmian koloru (*hue*) w funkcji temperatury, istotne jest konsekwentne stosowanie tej samej transformacji przestrzeni barwnej RGB do HSI.

W początkowej fazie pomiarów zastosowano następujące przekształcenie przestrzeni RGB do HSI:

$$S = 255 \cdot (1 - \min(R, G, B) / I)$$

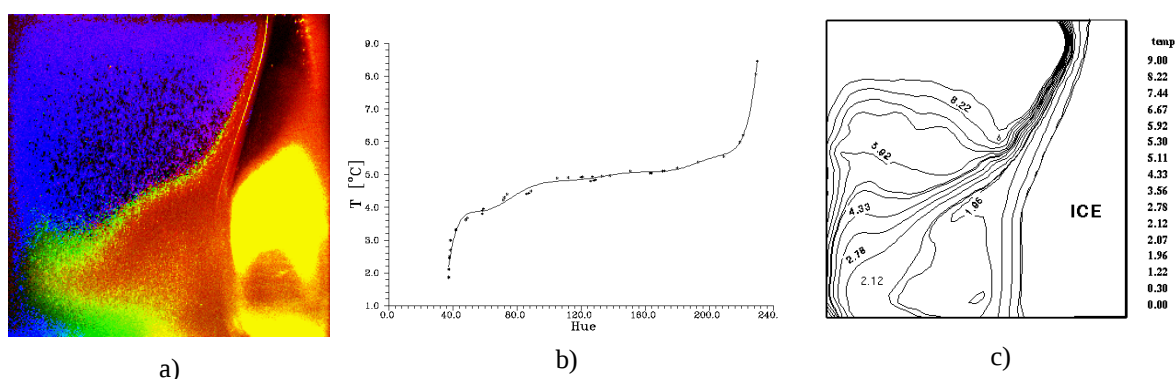
$$I = \sqrt{(R^2 + G^2 + B^2)} / \sqrt{3}$$

$$H = \begin{cases} 63 + ((G' - R') \cdot 63) / (G' + R') & \text{dla } B' = 0 \\ 189 + ((B' - G') \cdot 63) / (B' + G') & \text{dla } R' = 0 \end{cases}$$

gdzie: $R' = R - \min(R,G,B)$, $G' = G - \min(R,G,B)$, $B' = B - \min(R,G,B)$

Zaletą powyższego algorytmu jest projekcja zmiennej H do 8-bitowego zakresu (dokładnie 0-252) liczb całkowitych, ograniczająca się jedynie do barw spektralnych (tzn. do zakresu $R-B$). Czystej barwie czerwonej odpowiada więc $H=0$, zielonej $H=126$ a barwie niebieskiej $H=252$. Pozwala to na zwiększenie rozdzielczości metody i prostą eliminację „fałszywych” barw, nie mieszczących się w założonym zakresie. Praktyka pokazała jednak, że w warunkach pomiarowych wskutek nieliniowości charakterystyk kamery, odbić i rozproszenia światła, czy niedoskonałości materiału ciekłokrystalicznego, rejestrowane przez kamerę barwy często zawierają składowe poza-spektralne, tzn. z zakresu $B-R$. Tego typu barwy są oczywiście powszechne w przyrodzie jako wynik nakładania się barwy czerwonej i niebieskiej. W rezultacie do analizy części obrazów zastosowano rozszerzoną wersję powyższego algorytmu, w której wartości H wyznaczane są dla całego „koła barw” $R-G-B-R$.

Dokładność pomiaru temperatury omawianą metoda zależy od szeregu czynników. W pierwszej kolejności jest ona uwarunkowana dokładnością procesu kalibracji, który należy przeprowadzić w warunkach identycznych lub bardzo zbliżonych do właściwego pomiaru. W praktyce polega to na utrzymywaniu stałej temperatury w kanale pomiarowym, rejestracji obrazów RGB i wyznaczaniu barwy dominującej (*hue*). Ponieważ w warunkach kalibracji małe gradienty temperatury powodują bardzo powolne ustalanie się temperatury, dla zapewnienia jej równomierności w badanej objętości konieczne było dodatkowe wymuszanie konwekcji cieczy (mieszadło elektryczne). Poprzez skokowe zmiany temperatury (co $0,2^{\circ}\text{C}$ $\square$ $0,5^{\circ}\text{C}$) wyznaczano krzywą kalibracji *temperatura - hue*. Dla obliczeń temperatury krzywa ta jest przybliżana wielomianem wyższego rzędu. Łatwo zauważyć na podstawie rys. 2.3b, że wskutek silnej nieliniowości dokładność wyznaczenia temperatury zależy od analizowanego zakresu. I tak dla skrajnych zakresów, tzn. barw na granicy czerwieni i dla barwy niebieskiej, dokładność pomiaru jest najniższa i wynosi $\pm 10\%$. W zakresie przejścia barwy czerwonej w zieloną do początku barwy niebieskiej czułość metody jest bardzo wysoka i pozwala wyznaczyć temperaturę z dokładnością ok. 2%. Dodatkowe czynniki, takie jak nierównomierność barwy światła padającego, pochłanianie i rozpraszanie się światła wewnątrz kanału, stałe zniekształcenia barw spowodowane przez optykę kamery i cechy przetwornika CCD, powodują obniżenie precyzji pomiaru. Należy jednak podkreślić, że omawiana metoda mimo mniejszej dokładności określenia wartości temperatury w porównaniu z metodami klasycznymi, ma bardzo istotną zaletę, jaką jest możliwość jednoczesnego pomiaru w całym badanym przekroju. Rysunek 2.3a przedstawia przykład obrazu barwnego dla przepływu w badanej kuwecie z chłodzoną powierzchnią boczną (zamarzanie wody) i analizę wartości *hue* tego obrazu, która pozwala znaleźć rozkład temperatur w oświetlonym przekroju w postaci izoterm (rys. 2.3c).

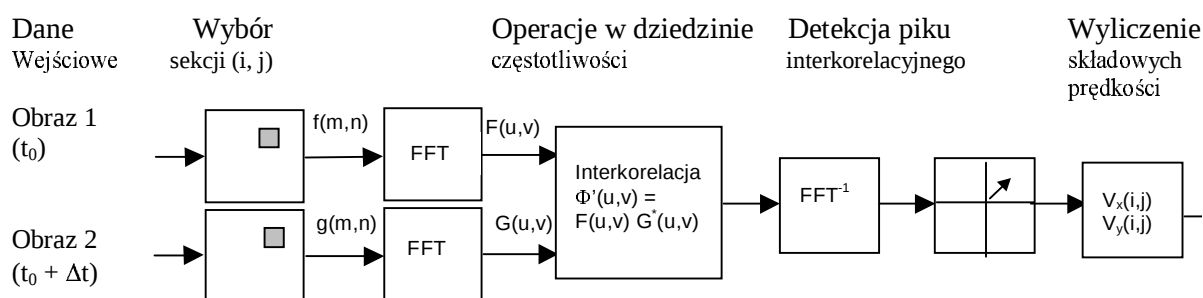


Rys. 2.3. Konwekcja naturalna z przemianą fazową w kuwecie sześciokątnej. Metoda wyznaczania pola temperatury: a) obraz RGB przepływu, b) typowa krzywa kalibracji temperatury dla zawiesiny ciekłokrystalicznej, c) pole temperatury (obliczone izoterm)

2.1.4. Metoda wyznaczania pola prędkości

Dwuwymiarowe pola prędkości przepływu zostały wyznaczone przy użyciu cyfrowej anemometrii obrazowej (Digital Particle Image Velocimetry - DPIV). Technika ta polega na znalezieniu przemieszczenia poruszających się razem z cieczą cząstek znacznikowych (TLC lub pyłki roślin) metodą korelacji dwóch fragmentów obrazów dla dwu kolejnych rejestracji dokonanych w znanym odstępie czasu. Do obliczania funkcji korelacji pomiędzy fragmentami analizowanych obrazów wykorzystuje się szybkie transformaty Fouriera (FFT). Typowy algorytm takiego programu przedstawiono na rys. 2.4.

Aby uwidocznić na obrazie cząstki znacznikowe (posiew) w postaci zbioru jasnych punktów, trzeba badany przepływ oświetlić wąską warstwą świetlną, podobnie jak to miało miejsce przy wyznaczaniu pola temperatury za pomocą DPIT. Analizując zmiany położenia cząstek dla uprzednio zdefiniowanych sekcji obrazu, metoda daje możliwość wyznaczenia średniego przemieszczenia dla wybranego fragmentu (okna), a więc i średniej prędkości przepływu. Rozdzielczość metody jest limitowana wielkością tak zdefiniowanego okna. Dolną granicę ogranicza minimalna ilość cząstek w zarejestrowanym fragmencie obrazu, konieczna dla wyznaczania funkcji korelacji. Statystyczny charakter analizy wymaga odpowiednio dużej próbki pikseli.



Rys. 2.4. Schemat algorytmu do wyznaczania pól prędkości za pomocą FFT

Praktycznie minimalny rozmiar okna wynosi 16x16 pikseli obrazowych. Z drugiej strony maksymalne zarejestrowane przemieszczenie, a więc maksymalna prędkość jest proporcjonalna do wielkości okna obrazowego i nie przekracza połowy wielkości tego okna. Konieczny jest więc kompromis zapewniający wymaganą dynamikę metody rejestracji pól prędkości. Inne ograniczenia, które należy uwzględnić to:

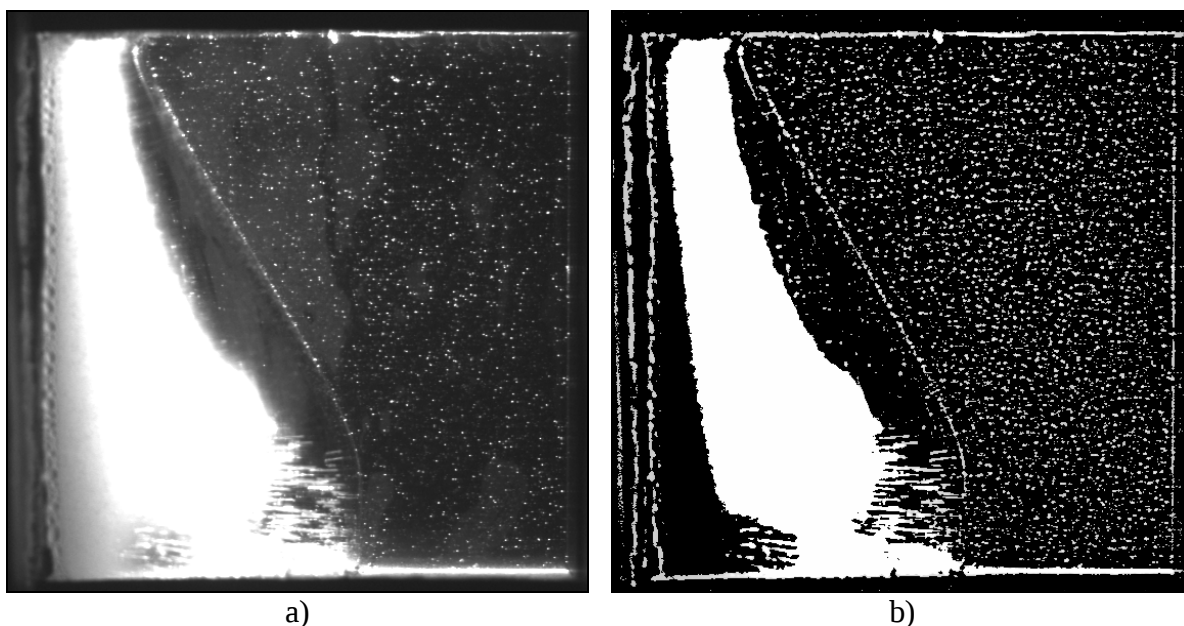
- ograniczona rozdzielczość kamery: minimalne rejestrowane przemieszczenie względne wynosi ok. 1/2 wymiaru piksela obrazowego.
- trójwymiarowy charakter przepływu: maksymalne przemieszczenie cząstek prostopadłe do analizowanej płaszczyzny musi być mniejsze od grubości płaszczyzny świetlnej – tak by większość cząstek pozostawała w trakcie rejestracji w danej płaszczyźnie świetlnej.

W niniejszej pracy zostały dokonane próby ulepszenia klasycznej metody PIV pomiaru prędkości, przede wszystkim poprzez zwiększenie jej dokładności i rozdzielczości. Celem minimalizacji wpływu zmian intensywności oświetlenia, przed wykonaniem operacji korelacji analizowane obrazy przepływu były poddawane tzw. „lokalnej binaryzacji” (specjalnie opracowany program komputerowy), dzięki której można było wyraźnie wydobyć strukturę posiewu. Polega to na przemieszczeniu przez cały obraz małego „okna” o wymiarach 5x5 pikseli i na przeanalizowaniu intensywności punktów. Punkty, które są jaśniejsze od średniego poziomu są zapisywane do nowego obrazu. Przykład zastosowania proponowanej metody „lokalnej

binaryzacji” dla obrazu zawiesiny pyłków sosny w przepływie konwekcyjnym w zamarzającej wodzie pokazano na rys. 2.5.

Innym sposobem zwiększenia rozdzielczości wyznaczania przemieszczeń cząstek wskaźnikowych jest zastosowana metoda „over-sampling”. Polega ona na podwojeniu macierzy rejestrowanych pikseli i interpolacji intensywności pomiędzy wartościami pikseli obrazu wyjściowego. Dzięki temu można uzyskać rozdzielczości ok. 0,5 piksela, a dokładność pomiaru maksymalnych prędkości rzędu 3%. Niestety dzieje się to kosztem czasu obliczeń, który wydłuża się czterokrotnie.

Poprawę rozdzielczości dla małych przemieszczeń można uzyskać rejestrując nie dwa, ale kilka obrazów (praktycznie seria 4-5 obrazów) w znanych odstępach czasowych. Korelując ze sobą dwa skrajne obrazy w serii można dokładnie wyznaczyć małe przemieszczenia, a więc zidentyfikować obszary o małej prędkości przepływu. Dla obszarów o dużej prędkości przepływu analizuje się obrazy sąsiednie. Zilustrujmy to przykładem ze stanowiska badawczego. Dla typowej szerokości kuwety pomiarowej równej 38 mm odpowiadająca jej maksymalna liczba pikseli obrazu wynosiła 576. Maksymalna rozdzielczość (najmniejsze przemieszczenie odpowiadające 1 pikselowi) wynosiła 0,0659 mm/piksel. Przyjmując, że typowy stały odstęp czasowy pomiędzy dwoma kolejnymi rejestracjami obrazów wynosił 1 s, to minimalna prędkość możliwa do wyznaczenia na tym stanowisku badawczym równała się 0,0659 mm/s. Aby wyznaczyć mniejsze prędkości należałoby, albo zwiększyć rozdzielczość metody poprzez wykorzystanie kamery cyfrowej o większej rozdzielczości sensora CCD albo zmniejszyć obszar obserwacji przy zachowanej maksymalnej liczbie pikseli obrazu. Inny sposób to korelacja np. pierwszego obrazu z czwartym w danej serii, pomiędzy którymi odstęp wynosił 3 s. Wtedy minimalna, możliwa do zarejestrowania prędkość równała się 0,0220 mm/s. Niestety wadą takiego sposobu korelacji obrazów jest generacja błędnych wektorów w miejscach o dużych przemieszczeniach, ponieważ cząstki wskaźnikowe opuszczają obszary poddawane korelacji. Wymaga to więc „składania” wyników uzyskanych w obszarach o wolnych przepływach z tymi które uzyskano dla innej kombinacji par w serii analizując obszary o dużych prędkościach przepływu.

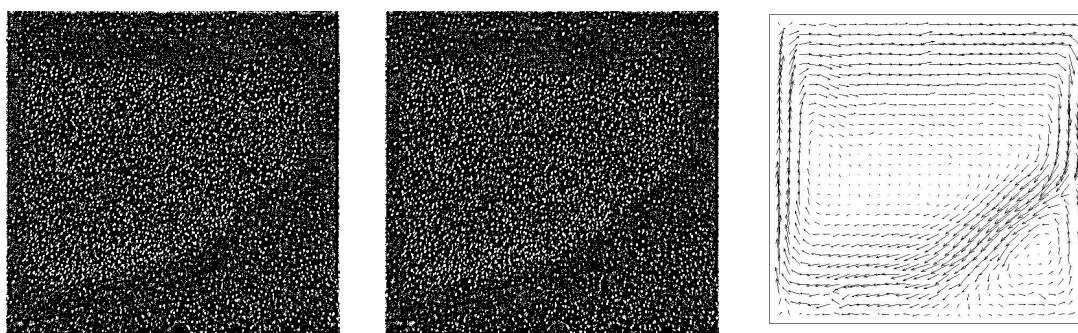


Rys. 2.5. Przykład zastosowania proponowanej metody „lokalnej binaryzacji” dla obrazu zawiesiny w przepływie konwekcyjnym w zamarzającej wodzie; a) obraz przed binaryzacją, b) obraz po binaryzacji

Jak wspomniano, poprawę rozdzielczości przestrzennej klasycznej metody PIV można uzyskać zmniejszając rozmiar analizowanego okna. Pozwala to na lepsze uwidocznienie małych struktur przepływu, ale pogarsza dokładność rejestracji wektorów prędkości dla obszarów o szybkich zmianach przepływu. Dla typowych metod korelacyjnych dobór okna, a także kolejności analizowania obrazów z serii (odstęp czasu) zawsze zależy od charakteru przepływu (szybki lub wolny) i jest szczególnie utrudniony, gdy występują obszary o niejednorodnym rozkładzie prędkości. Optymalnym rozwiązaniem jest lokalne dostosowywanie wielkości okna oraz kroku analizy w zależności od wstępnie wyznaczonych wielkości przemieszczeń (okno dynamiczne).

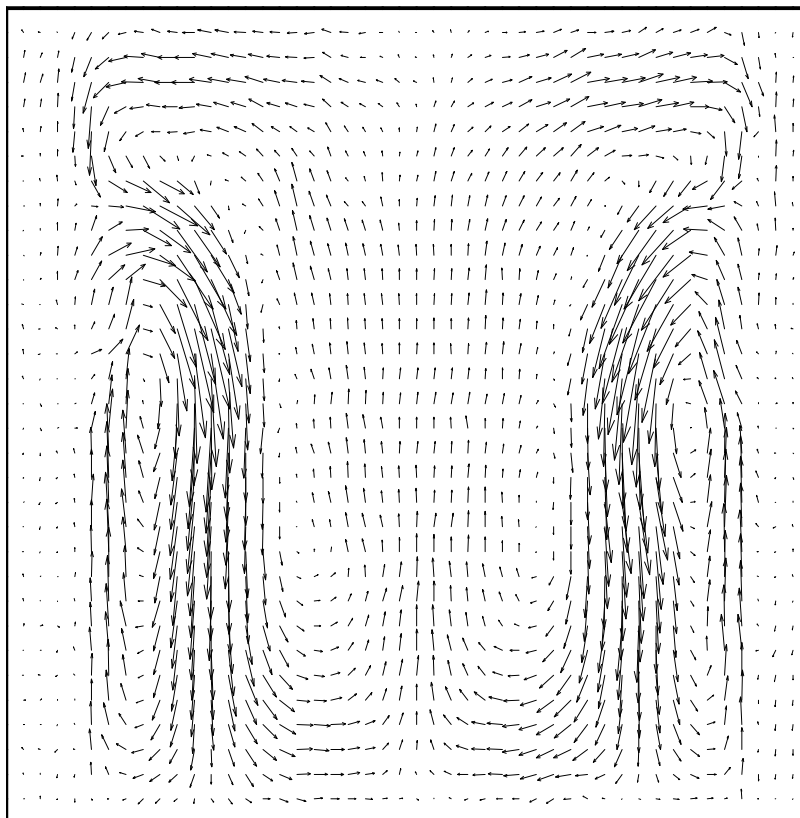
Rysunek 2.6 przedstawia przykład pary obrazów wejściowych (po binaryzacji lokalnej) i rezultat obliczeń pola prędkości otrzymany dla tej pary opisaną metodą PIV.

Jednym z możliwych rozwiązań problemu rozdzielczości przestrzennej metody korelacji obrazów jest analiza przemieszczeń fragmentów obrazów oparta na tzw. programowaniu dynamicznym. Metoda taka stosowana przy analizie ruchu obiektów dla tzw. potoków optycznych ("optical flow") została odpowiednio zaadaptowana dla obrazów przepływów [27]. W rezultacie tej nowej procedury obliczeniowej przemieszczenie jest określone dla każdego piksela obrazu. Powstaje więc "gęste" pole wektorowe, pozwalające na znalezienie subtelnych struktur przepływu i precyzyjną analizę obszarów o dużych gradientach prędkości. Przeprowadzone testy wskazują, że dokładność metody w określaniu wartości wektora prędkości wynosi 0,2 piksela, co dla typowych przemieszczeń wielkości 20 pikseli oznacza błąd rzędu 1%. Wysoka dokładność, możliwość odtwarzania pola prędkości dla rejonów o dużych gradientach oraz duża rozdzielczość przestrzenna metody są szczególnie przydatne przy eksperymentalnej weryfikacji rezultatów obliczeń numerycznych. Dodatkową zaletą opracowanej metody jest możliwość analizy sekwencji wielu obrazów jednocześnie. Pozwala to w automatyczny sposób rozwiązać problem zachowania podobnej dokładności pomiaru dla rejonów o dużych i małych prędkościach. Przykład pola wektorowego uzyskanego tą nową metodą (ODP-PIV) pokazano na rys. 2.7.



dwa czarno-białe obrazy $\Rightarrow$ korelacja $\Rightarrow$ pole prędkości

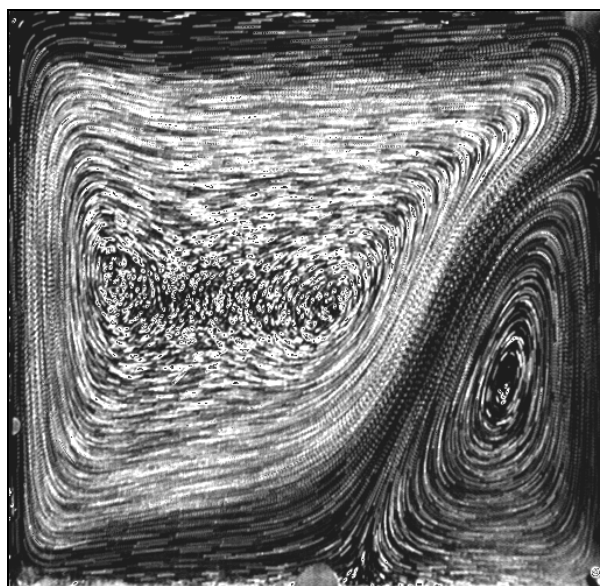
Rys. 2.6. Metoda DPIV. Przykład wyznaczenia wektorów prędkości dla przepływu konwekcyjnego w kuwecie sześcienniej



Rys. 2.7. Metoda ODP-PIV. Przykład wyznaczenia wektorów prędkości dla przepływu konwekcyjnego w kuwecie prostopadłościowej z podwójnym frontem fazowym w zamarzającej wodzie.

2.1.5. *Tory cząstek*

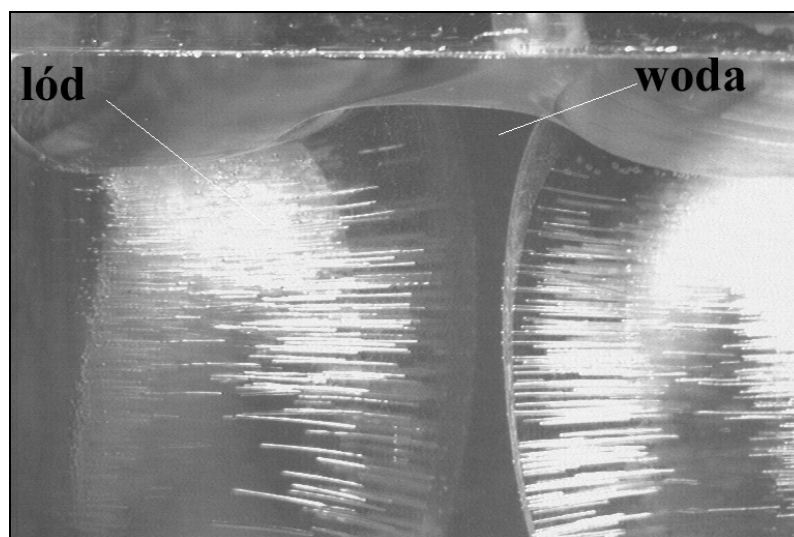
Jednym z istotnych elementów analizy struktury przepływu jest wizualizacja torów cząstek wskaźnikowych umieszczonych w przepływie. Analiza torów stanowi cenne uzupełnienie obrazu pola prędkości, pozwalając zidentyfikować drobne zmiany kierunku przepływu, obszary martwe i rejony o bardzo małych prędkościach. Realizacja komputerowej rejestracji torów odbywa się przez zsumowanie kilkunastu obrazów przepływu wykonanych w znanych odstępach czasu. Przy małej koncentracji posiewu dają się wyróżnić fragmenty pojedynczych torów, przy większych koncentracjach i przemieszczeniach widoczna jest ogólna struktura przepływu. Zmiana odstępu czasowego między poszczególnymi obrazami pozwala, podobnie jak przy pomiarach pól prędkości, bardziej uwypuklić rejony o dużych lub małych prędkościach. Sumowane obrazy wymagają wcześniej przygotowania, tak by zminimalizować niekorzystne narastanie jasności tła obrazu. Sam proces sumowania przeprowadzono off-line dla serii uprzednio zarejestrowanych pojedynczych obrazów zgromadzonych w pamięci masowej, jak i on-line dodając poszczególne obrazy podczas akwizycji w pamięci komputera i rejestrując jedynie wypadkową sumę. Pierwsza z metod pozwala na dodatkowe zabiegi filtracyjne, poprawiające kontrast rezultatu, konieczne jest jednak wtedy zablokowanie wielu megabajtów pamięci masowej dla obrazów cząstkowych. Na rys. 2.8 pokazano strukturę przepływu dla przepływu konwekcyjnego w kuwecie sześcienniej. W prawym dolnym rogu widoczny jest wir spowodowany anomalią gęstości wody.



Rys. 2.8. Struktura przepływu konwekcyjnego w kuwecie sześcienniej z dwoma izotermicznymi ściankami bocznymi

2.1.6. Wyznaczanie położenia i kształtu fazy stałej

Innymi ważnymi parametrami przepływu z przemianą fazową, które można wyznaczyć z zarejestrowanych obrazów są: kształt frontu fazowego i wielkość fazy stałej, jak również prędkość jej narastania. Rejestracja kształtu fazy stałej (lodu), a zwłaszcza struktury jej powierzchni wymaga zastosowania innych technik oświetleniowych. Przykład takiej rejestracji pokazano na rys. 2.9. Widoczne na tym rysunku jasne palmy to powietrze uwalniające się z wody podczas procesu zamarzania. Obecność tych wtrąceń starano się wyeliminować poprzez specjalne przygotowanie wody destylowanej polegające na jej odgazowaniu w instalacji próżniowej.

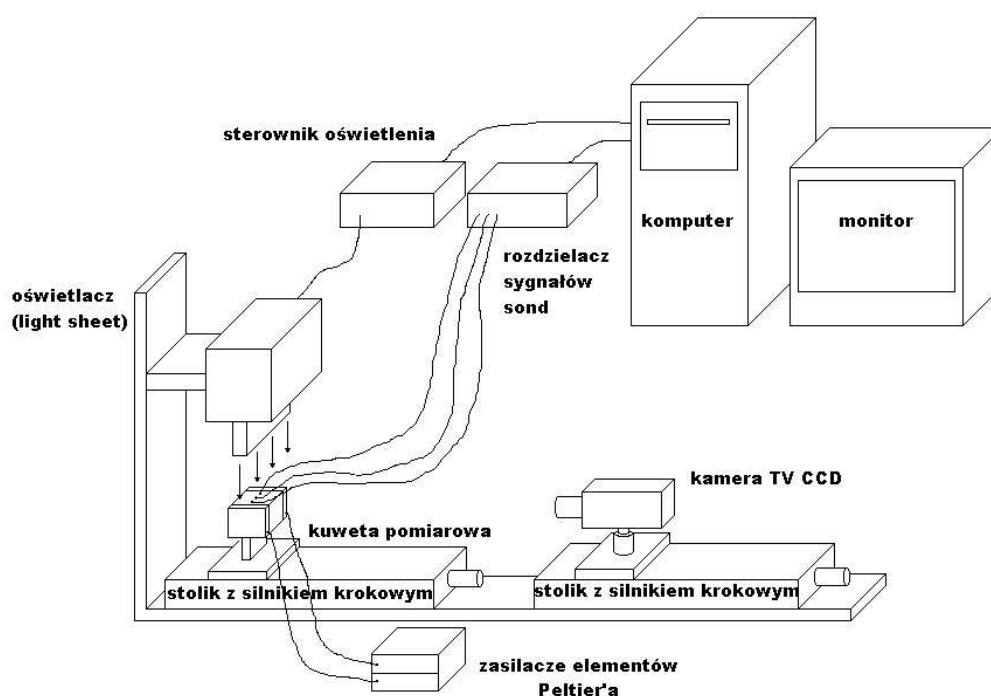


Rys. 2.9. Kształt lodu (podwójny front fazowy w zamarzającej wodzie z powierzchnią swobodną) w kuwecie prostopadłościenniej

2.1.7. Pomiar koncentracji chlorku sodu

Badania konwekcji naturalnej i konwekcji z przemianą fazową dla układu binarnego przeprowadzono dla wodnych roztworów chlorku soli. Badania przeprowadzono dla przepływu w naczyniu sześciennym o dwóch pionowych izotermicznych ściankach przeciwległych. Pozostałe cztery ścianki wykonane są z pleksiglasu o niskim przewodnictwie cieplnym. Do pomiaru koncentracji soli wykorzystano dwie uzupełniające się metody: metodę punktową polegającą na pomiarze rezystancji elektrycznej roztworu i metodę obrazową (Schlierena) pozwalającą na pomiar rozkładu pól koncentracji w przekroju kanału. Metoda punktowa służyła jednocześnie do kalibracji istotnej z punktu widzenia weryfikacji kodów numerycznych informacji obrazowej.

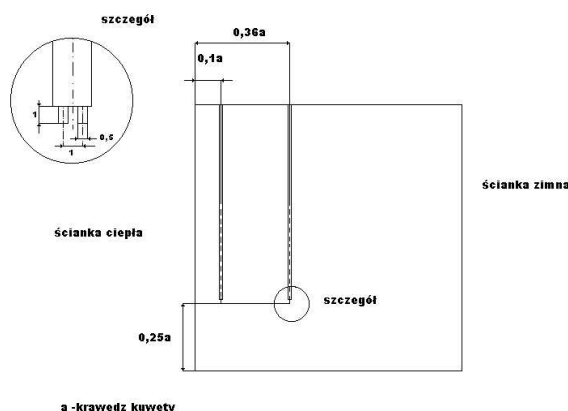
Rezystancyjna metoda pomiaru koncentracji



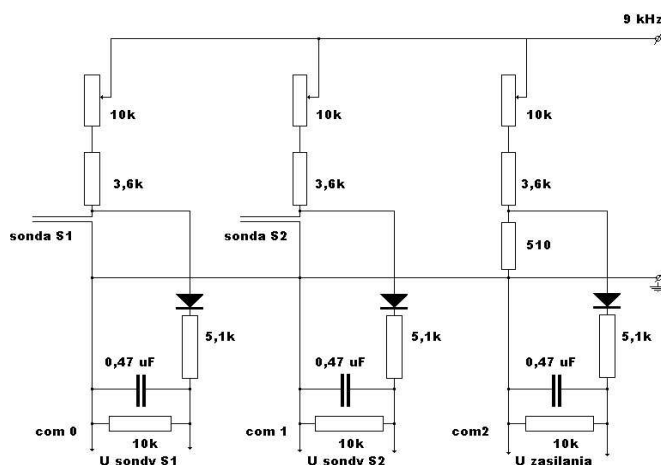
Rys.2.10. Stanowisko pomiarowe do jednoczesnego pomiaru rozkładu prędkości i względnego pomiaru stężenia

Podstawowy układ pomiarowy, składający się z zestawu termostatów, silników krokowych, kamery i przetwornika obrazu (rys. 2.1) uzupełniono układem do punkowego pomiaru koncentracji soli (rys. 2.10). Pomiar przewodnictwa roztworu wykonywano przy pomocy specjalnie skonstruowanych elektrod. Elektrody umieszczono w pionowej płaszczyźnie symetrii kanału w czterech punktach leżących w odległości jednej czwartej wysokości od dna naczynia. Rozmieszczenie elektrod w komorze wybrano w taki sposób, aby można było obserwować względną zmianę stężenia w miarę zbliżania się do kolejnej elektrody frontu przemiany fazowej. Jednoczesne obserwacje przepływu pozwalały na interpretację i korelację sygnałów elektrycznych pochodzących z elektrod z odpowiednimi obrazami przepływu, frontu fazowego i zmierzonymi metodą PIV&T rozkładami pól prędkości i temperatury. Elektrody do pomiaru przewodnictwa elektrycznego (rys. 2.11) zostały wykonane w dwóch wariantach z drutu srebrzonego o średnicy 0.35 mm oraz z prętów grafitowych o średnicy 0,5 mm. Dla kompensacji wpływu temperatury, równoległe do elektrod wprowadzono termopary rejestrujące lokalną temperaturę roztworu. Celem wyeliminowania wpływu elektrolizy i polaryzacji elektrod do ich zasilania wykorzystano stabilizowany prądowo (12.7mA) generator napięcia o częstotliwości

9kHz. Układ elektroniczny do pomiaru przewodnictwa składa się z układu prostowników i dzielników oporowych dostarczających napięcie proporcjonalne do rezystancji roztworu między elektrodami (rys. 2.12). Napięcia te były zbierane periodycznie przez analogowo-cyfrową (AD) kartę akwizycyjną PCL717B (8 kanałów) wraz z multiplexerem i wzmacniaczem PCLD-779 firmy Advantech Co.. Ta ośmiokanałowa karta służyła jednocześnie do rejestracji napięcia dostarczanego przez cztery termopary umieszczone w pobliżu elektrod.



Rys. 2.11. Widok sondy z elektrodami grafitowymi i rozmieszczenie sond w komorze pomiarowej



Rys. 2.12. Układ elektroniczny podłączenia sond do karty akwizycyjnej

Jednoczesną akwizycję obrazów, kontrolę ruchu silników krokowych i rejestrację napięć z elektrod i termopar ułatwiał specjalnie przygotowany program komputerowy VFGLab. Program ten współpracuje z kartą akwizycji obrazów VFG100 f-my Imaging Inc. Technology obsługując jednocześnie karty AD PCLD. Specjalnie przygotowany plik sterujący (skrypt) pozwala na sekwencyjną realizację kolejnych podprogramów, rejestrację i zapisywanie obrazów i wyników pomiarów napięcia oraz przesuwanie kamery i komory silnikami krokowymi.

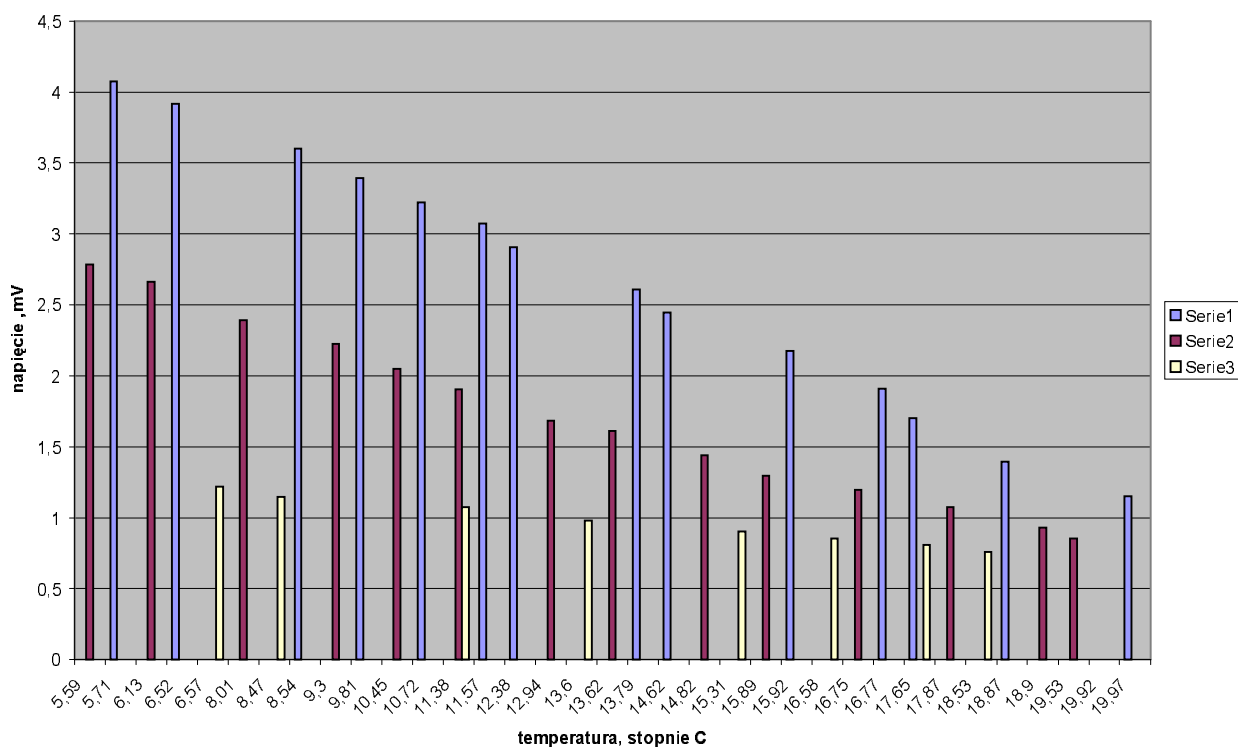
Kalibrację układ pomiarowy koncentracji soli wykonano dla zestawu siedmiu przygotowanych roztworów NaCl o znanych stężeniach. Pomiar wykonano w stałej temperaturze 20°C. W tabeli 2.1 zebrano wartości przewodności właściwej roztworów wyznaczone jako średnie z wielu pomiarów.

Tabela 2.1

Stężenie wagowe %	stężenie w mol/kg	przewodność właściwa σ S/m
1	0,172	1,430
2	0,345	2,570
3	0,517	3,720
4	0,690	4,685
5	0,862	5,700
6	1,034	6,360
7	1,027	7,045

Pomiary te są zbieżne z wynikami podanymi przez Martona [26] dla 0.1 molowego roztworu soli. Wskazuje to na generalną poprawność procedury kalibracyjnej. Dla porównania przewodnictwo czystej wody w temperaturze 26°C jest niemal sześć rzędów wielkości mniejsze i wynosi $6,70 \cdot 10^{-6}$ S/m [11].

Wartość spadku napięcia na sondach pomiarowych zależy zarówno od koncentracji soli jak i od temperatury roztworu. Przy jednoczesnej znajomości temperatury w punktach umieszczenia sond i wcześniejszym przeskalowaniu możliwe było uwzględnianie wpływu temperatury na wyznaczone stężenia roztworu. Kalibracje temperaturową dla kilku wybranych koncentracji przeprowadzoną dla stosowanych w eksperymentach sond przedstawia wykres na rys. 2.13. Jak można zauważyć, zależność ta ma w przybliżeniu charakter liniowy. Jednak nachylenie charakterystyki zmian jest wyraźnie zależne od koncentracji roztworu. Wymaga to iteracyjnego korygowania rezultatów w obszarach o dużych zmianach zarówno koncentracji i temperatury.



Rys. 2.13. Wpływ temperatury na spadek napięcia wskazywany przez sondy (wyniki uśrednione z kilku pomiarów); seria 1 - stężenie 1% , 2 - stężenie 3%, 3 - stężenie 4%.

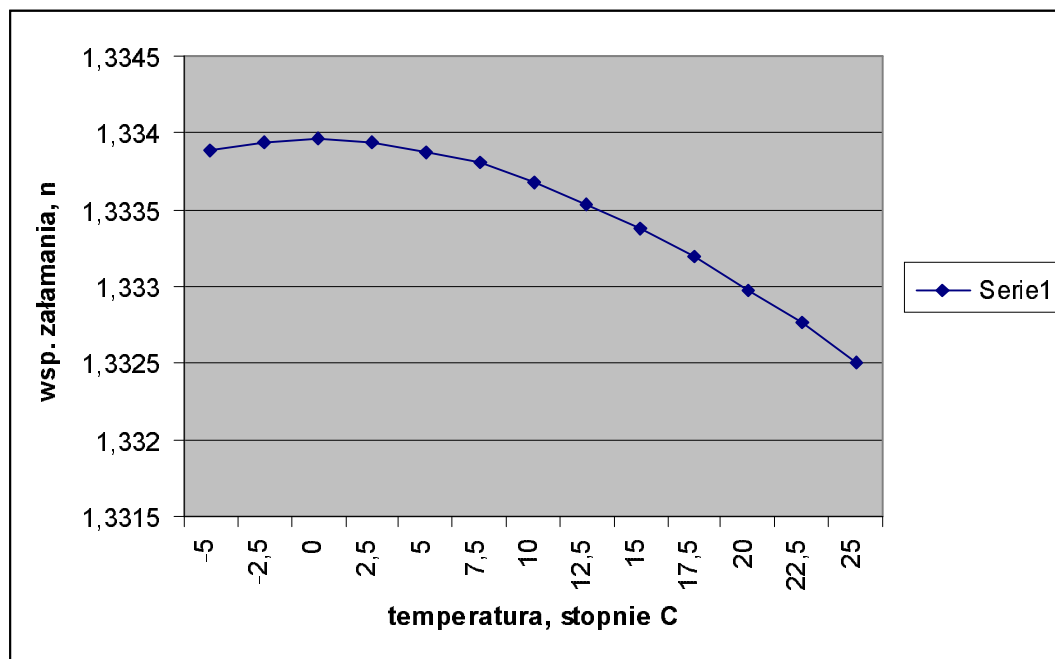
Optyczna metoda pomiaru koncentracji

Opisana wyżej metoda rezystancyjna pozwala jedynie na pomiar koncentracji soli w kilku wybranych punktach przepływu. Zwiększenie ilości elektrod nie jest wskazane, gdyż powoduje zakłócenie samego przepływu i zwiększa błędy pomiaru spowodowane wzajemnym oddziaływaniem elektrod. W związku z tym dla zobrazowania rozkładów koncentracji wykorzystano optyczną metodę Schlierena. Metoda ta bazuje na zmianie współczynnika załamania światła w badanym ośrodku. Zmiana taka może mieć miejsce wskutek zmiany temperatury, gęstości czy też koncentracji roztworu. W naszym przypadku, dla płynu nieściśliwego zmiany współczynnika załamania badanego ośrodka są wywołane zmianami koncentracji i temperatury. Badane przepływy charakteryzują zarówno gradienty temperatury jak i koncentracji. Rozdzielenie obu tych efektów jest jednak możliwe, gdyż w badanym zakresie zmian temperatury jej wpływ na współczynnik załamania światła jest stosunkowo niewielki i w badanym zakresie temperatur zmiana wynosi około $2 \cdot 10^{-5}/^{\circ}\text{C}$ (patrz rys. 2.14). Według naszych pomiarów współczynnik załamania światła n przy oczekiwanych w eksperymencie zmianach stężenia roztworów NaCl wynosi odpowiednio:

dla 1% roztworu NaCl 1,3342

dla 3% roztworu NaCl 1,3375

Zatem jeśli lokalne stężenie roztworu NaCl zmieni się z 1% na 3%, współczynnik załamania wzrośnie o $3,3 \cdot 10^{-3}/^{\circ}\text{C}$, czyli o niemal dwa rzędy wielkości przekroczy zmianę wywołaną polem temperatury w cieczy. Efekt temperaturowy może być jeszcze dodatkowo skompensowany na podstawie danych z pomiaru pola temperatury w przepływie uzyskanych metodą DPIT.



Rys. 2.14. Współczynnik załamania światła w wodzie dla $\lambda = 0,5893 \mu\text{m}$ w funkcji temperatury [9].

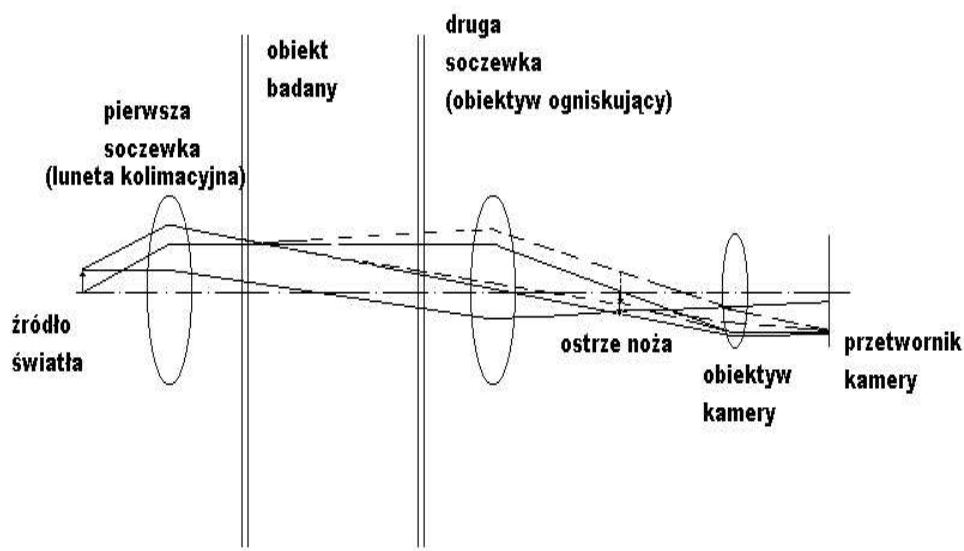
Typowy schemat układ optycznego Schlierena pokazano na rys. 2.15. Równoległa wiązka światła przechodzi przez badany obiekt a następnie jest ogniskowana przez obiektyw. Obraz źródła światła jest tworzony w ognisku obiektywu. Ostrze noża (prostopadłe do płaszczyzny rysunku) jest umieszczone w płaszczyźnie obrazu źródła światła dla wycinania części

przepuszczonego światła. Obiektyw kamery TV ogniskuje badany obiekt na przetworniku kamery, gdzie padające światło ma już zredukowaną intensywność proporcjonalnie do tego, ile światła odcina nóż. Optyczne zaburzenia (zmiany gęstości) w badanym obiekcie będą wytwarzały zmiany intensywności światła, które doznaje ugięcia.

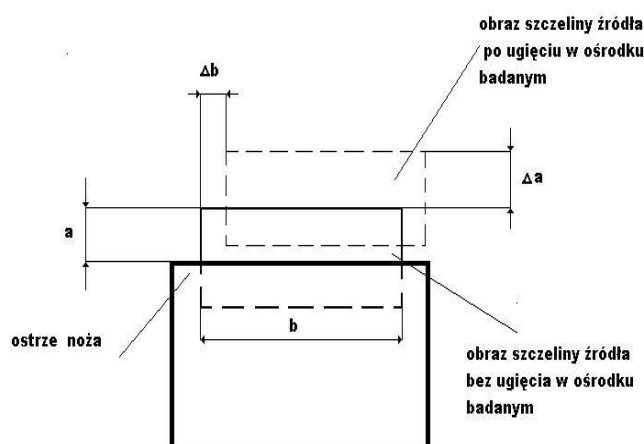
Rolę noża w układzie ilustruje rys. 2.16 [26]. Wysokość tej części obrazu źródła światła, która nie jest zaciemniana przez ostrze noża oznaczamy a ; b - określa szerokość obrazu źródła w kierunku brzegu noża. W jednorodnym badanym obiekcie (bez gradientów gęstości) intensywność światła w punkcie (x, y) płaszczyzny rejestracji opisuje zależność:

$$I(x, y) = \text{const} (ab/f_c^2),$$

gdzie f_c jest długością ogniskowej obiektywu kamery. Stały współczynnik w równaniu zależy od początkowej luminancji źródła światła i późniejszego pochłaniania w badanym obiekcie. W powyższym zakładamy, że aberracje geometryczne układu optycznego są pomijalnie małe. Kiedy pewna ilość promieni świetlnych ugina się w zaburzonym polu pomiarowym pod kątem ε obraz źródła światła tworzony przez te promienie w płaszczyźnie ostrza noża będzie przesunięty na odległość Δa i Δb prostopadle i równoległe do ostrza.



Rys. 2.15. Układ optyczny układu Schlierena



Rys. 2.16. Ostrze noża w układzie Schlierena

Konieczne jest jedynie rozważenie pionowego przesunięcia Δa wytwarzanego przez pionową składową ε_y kąta ugięcia. Przy małym kącie ugięcia mamy:

$$\Delta a = f_2 \tan \varepsilon_y \cong \varepsilon_y f_2,$$

gdzie f_2 długość ogniskowej obiektywu ogniskującego układu Schlierena. Intensywność światła w odpowiednich punktach obrazu (x,y) płaszczyzny rejestracji opisujemy:

$$\Delta I = \text{const} (b \Delta a / f_c^2),$$

ze stałym współczynnikiem jak poprzednio. W obserwowanym obrazie Schlierena oko (kamera) wyróżnia raczej zmiany względnej intensywności, a nie jej wielkość absolutną. Zmiana względnej intensywności $\Delta I/I$ wytwarzana przez zaburzający obiekt badany w punkcie (x,y) płaszczyzny rejestracji jest dana przez :

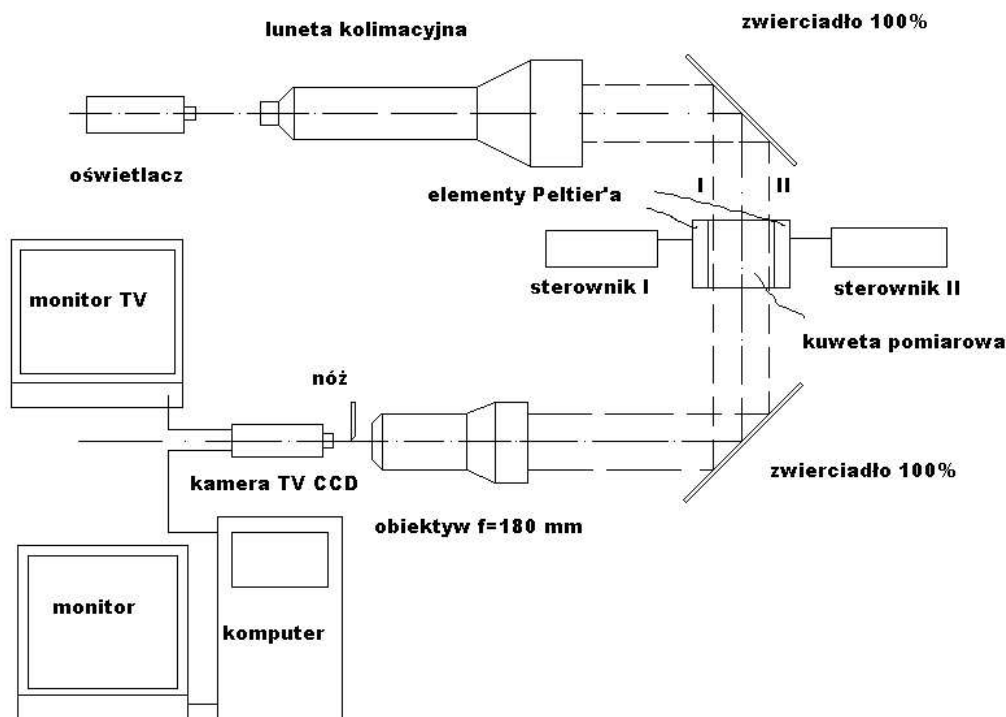
$$\Delta I/I = (\Delta a/a) = \varepsilon_y (f_2/a),$$

Jeśli ostrze noża jest równoległe do kierunku x , to na podstawie rysunku staje się jasne, że przesunięcie Δb nie działa na oświetlenie w płaszczyźnie zapisu. Przez odpowiednie podstawienia uzyskujemy:

$$\Delta I/I = (f_2/a) \int_{\xi_1}^{\xi_2} \left(\frac{1}{n} \right) (\delta n / \delta y) dz,$$

gdzie: ξ_1, ξ_2 są współzrędnymi “ z ” punktów gdzie promień wchodzi i wychodzi z badanego obiektu n - współczynnik załamania światła w badanym obiekcie.

Analiza intensywności światła obrazu Schlierena może zatem być wykorzystana do wyznaczenia zmian współczynnika załamania w badanym obiekcie. Kierunek prostopadły do krawędzi noża systemu definiuje oś wizualizowanych gradientów współczynnika załamania światła. Obracając nóż możemy wybrać interesujący nas kierunek. Układ Schlierena reaguje na pierwszą pochodną funkcji rozkładu współczynnika załamania, zatem wykazuje stosunkowo dużą czułość w rejonach silnych zmian koncentracji soli.



Rys. 2.17. Schemat stanowiska do wizualizacji gradientu gęstości w roztworze metodą Schlierena

Czułość układu zależy od możliwości rejestracji względnej zmiany intensywności światła w płaszczyźnie rejestracji $\Delta I/I$. Zakładając, że względna zmiana intensywności rzędu 10% jest jeszcze wykrywalna, to najmniejszy kąt ugięcia, który może być wykrywany w takim układzie Schlierena, jest $\varepsilon_{\min} = 0,1(a/f_2)$. Często brak możliwości dopasowania długości ogniskowej f_2 obiektywu ogniskującego w układzie, wtedy dla regulacji czułości pozostaje tylko zmiana apertury (im mniejsza apertura tym większa czułość). Istnieje jednak kilka ograniczeń dla minimalnej apertury. Czułość przetwornika kamery jest jednym z nich. Drugie ograniczenie wynika z żądania, aby system był zdolny mierzyć ugięcie światła dla dodatniej i ujemnej wartości ε . W pokazanym układzie dodatni ε powoduje wzrost intensywności światła, ujemny ε spadek intensywności. Największą możliwą zmianą intensywności dla ujemnego ε jest jej całkowity zanik. Jeśli $\varepsilon_{\max}$ jest w danym polu gęstości największym możliwym kątem ugięcia, to mamy: $\Delta I = -I$ dla $\varepsilon = -\varepsilon_{\max}$, i najmniejszą możliwą wartość a : $a_{\min} = \geq f_2 \varepsilon_{\max}$.

Opierając się na powyższych założeniach skonstruowano stanowisko badawcze wyposażone w system optyczny typu Schlierena, pozwalające na rejestrację zmian współczynnika załamania wody rzędu 10^{-4} . Równoległa wiązka światła załamywana w przepływie pada na ostrze noża przesłaniającego częściowo ognisko w układzie projekcyjnym. W płaszczyźnie projekcji na przetworniku kamery CCD stan przepływu jest wizualizowany przez jasne i ciemne struktury. Metoda jest czuła na pierwszą pochodną przestrzenną gęstości cieczy. Schemat układu zastosowanego w eksperymentach jest pokazany na rys. 2.17.

Układ optyczny składa się z halogenowego źródła światła, systemu kolimacyjnego, zwierciadeł kierujących wiązkę światła i kamery CCD rejestrującej obraz ograniczany nożem. Obrazy schlierenowskie przepływu rejestrowano za pomocą przetwornika obrazu i komputera, podobnie jak obrazy stosowane do pomiaru pól prędkości i temperatury. Ze względu na ograniczenia techniczne pomiary schlierenowskie wykonano niezależnie od pozostałych badań obrazowych. Jednoczesny pomiar jest jednak możliwy, po zastosowaniu zwierciadeł półprzepuszczalnych i dobudowaniu drugiego toru optycznego dla kamery rejestrującej obraz cząstek wskaźnikowych.

Pomiary przeprowadzono dla komory sześcienniej, o czterech ściankach wykonanych z plexiglasu, i dwu przeciwległych ściankach metalowych. Stałą temperaturę metalowych ścianek zapewniały dwa elementy Peltier'a.

2.1.8. Zastosowanie termografii do pomiaru temperatury ścianek kuwety

Jedną z przyczyn niezgodności pomiędzy wynikami badań eksperymentalnych procesów konwekcji naturalnej a wynikami modelowania numerycznego tych zjawisk jest niedokładność zamodelowania warunków brzegowych na „biernych”, tj. nieizotermicznych ścianach ograniczających badaną przestrzeń. Jak wykazały wyniki wcześniejszych badań [20,25], nawet niewielkie zmiany powyższych warunków brzegowych powodują znaczące zmiany struktury i kierunku ruchu płynu w przestrzeni eksperymentalnej. Ruch płynu może być zatem poprawnie zamodelowany numerycznie pod warunkiem zaimplementowania zmierzonych w warunkach eksperymentu pól temperatury na nieizotermicznych ścianach.

Do tego celu zastosowano termografię w podczerwieni, pozwalającą na rejestrację pola temperatury na powierzchni wspomnianych ścian, bezstykowo, w czasie rzeczywistym, przy bardzo wysokiej czułości i dokładności [5,32]. Ponieważ pomiar pola temperatury dokonywany był na zewnętrznej powierzchni ścian kuwety eksperymentalnej, to ściany ograniczające płyn zostały włączone do obszaru, w którym dokonywano obliczeń numerycznych pól temperatury.

Podczas badań eksperymentalnych wykorzystano układ pomiarowy opisany wcześniej (Rys. 2.1). Skaner kamery termowizyjnej został umieszczony poniżej kamery RGB, w odległości 110 mm od ścianki kuwety. Rejestracji pola temperatury dokonywano w dwóch krokach - dla górnej i dolnej części kuwety - po opuszczeniu kuwety za pomocą silników krokowych na odpowiedni poziom.

Zastosowano system termowizyjny AGEMA Thermovision 900 LW. Obrazuje on pole temperatury praktycznie w czasie rzeczywistym, odświeżając obraz 20 razy na sekundę. Skaner 900 LW (zasadnicza część zestawu) posiada detektor wykonany z tellurku kadmowo-rtęciowego, chłodzony ciekłym azotem. Pracuje on w zakresie spektralnym od 8 do 12 μm . W rezultacie uzyskuje się niski poziom szumów przy pomiarze temperatur zbliżonych do temp. pokojowej a także wysoką czułość; 0.08°C przy temperaturze 30°C. Odpowiednia, staranna procedura korekcyjna - pozwalająca dokładnie określić emisyjność badanej powierzchni - pozwoliła na uzyskanie dokładności lepszej niż 0.3°C. Termogramy badanej powierzchni rejestrowane są w postaci barwnych obrazów o rozdzielczości 272x136 pikseli. Wybranemu aktualnie zakresowi temperatury odpowiada pełna paleta barw (możliwe są do wyboru palety kolorów tęczy, odwróconej tęczy, gorącego żelaza itp.). Możliwe jest zaznaczenie - przy wykorzystaniu oprogramowania zestawu termowizyjnego - dwóch kolorowych izoterm o dowolnej wartości.

Zastosowanie obiektywu 20° x 10° wraz z nasadką makroskopową (close-up) pozwoliło uzyskać rozdzielczość 0.23 mrad. Aby polepszyć rozdzielczość uzyskiwanych pól temperatury dokonywano - jak wspomniano powyżej - rejestracji termogramów w dwóch krokach; dla górnej i dolnej części ścianki kuwety. Sterowany komputerowo system silników krokowych pozwalał na precyzyjne przesuwanie kuwety i wykonanie zdjęć w odstępie 2 s., a zatem w czasie, w którym pole temperatury zmieniało się nieznacznie. Następnie dokonywano „zszycia” dwóch termogramów, uzyskując pole temperatury ścianki bocznej kuwety o rozdzielczości 272 x 272 pikseli.

2.2. Wyniki badań eksperymentalnych

Zebrana podczas badań olbrzymia ilość wyników eksperymentalnych w postaci cyfrowych obrazów, a przetworzona za pomocą wyżej opisanych technik (DPIV, DPIT, sond do pomiaru stężeń, układu Schlierena) do postaci pól temperatury, prędkości, położenia frontu przemiany fazowej oraz fronty zmiany gęstości związane ze zmianą stężenia NaCl, jest bardzo trudna do całościowego zaprezentowania. W niniejszym rozdziale podsumowano rezultaty przeprowadzonych badań eksperymentalnych. Ze względu na dużą liczbę przebadanych przypadków, różnorodność warunków początkowych, brzegowych i materiałowych przedstawienie rezultatów ograniczono tylko dla wybranych charakterystycznych przypadków. Ominięto też część rezultatów, które są szerzej przedstawione w załączonych publikacjach.

Badania wykonano dla kuwety pomiarowej, której schematy pokazano na rys. 2.2. Rozważono dwie różne grubości ścianek bocznych wykonanych z pleksiglasu (6 mm i 9 mm) i dwie różne wartości stosunku H/W (H - wysokość, W - szerokość). Dla kuwety prostopadłościennej zrealizowano dwa różne warunki brzegowe poprzez otoczenie jej powietrzem atmosferycznym (z i bez wymuszonego opływu) oraz płaszczem wodnym (wymuszony, turbulentny opływ). Zestawienie głównych charakterystyk przeprowadzonych pomiarów zawiera tabela 2.2. Wymieniono w niej najważniejsze parametry każdego eksperymentu:

- rodzaj badanej substancji: woda, n-oktadekan, roztwór NaCl w wodzie
- temperatura dwóch przeciwległych pionowych ścianek: ciepłej T_h i zimnej T_c
- rodzaj ścianek bocznych dla naczyń prostopadłościennych: plexiglas 6mm, 9mm
- rodzaj zewnętrznego ośrodka opływającego ścianki kuwety z badanym przepływem: powietrze lub woda
- warunki początkowe: tzw. start - „zimny” tzn. początkowy bezruch cieczy o temperaturze bliskiej 0°C z nagłą zmianą temperatur obu ścianek izotermicznych; start „ciepły” tzn. zamarzanie od stanu konwekcji ustalonej dla temperatury zimnej ścianki 0°C przez nagłe obniżenie tej temperatury.
- stosowana metoda pomiarowa: PIV – pomiar pól prędkości, PIT – pomiar pól temperatury przy pomocy zawiesiny ciekłych kryształów, wyznaczenie torów cząstek, pomiar kształtu frontu fazowego, pomiar stężenia soli dla roztworu – punktowy (elektrody) i w całym obszarze (Schlieren), IR – pomiar temperatury ścianek zewnętrznych kamerą termowizyjną
- rodzaj cząstek wskaźnikowych: typ ciekłych kryształów, pyłki roślin
- wartość stosunku wysokości do szerokości kanałów prostopadłościennych H/W

Wyjaśnienia wymagają tu wprowadzone terminy „ciepły i zimny start”, użyte do definicji startu eksperymentu, czyli warunku początkowego. W trakcie wstępnych badań stwierdzono, że ustalanie się przepływu przy nagłej zmianie temperatury obu ścianek izotermicznych (tzw. „zimny start”), powoduje powstawanie trudnych do zdefiniowania stanów pośrednich, utrudniając ich porównanie z obliczeniami numerycznymi. Jest to związane z jednej strony, ze skończonym czasem narastania (i spadku) temperatury ścianek izotermicznych, z drugiej strony ze stanami nierównowagowymi w komorze pomiarowej przed rozpoczęciem eksperymentu. Celem poprawienia kontroli warunków eksperymentalnych zaproponowano wprowadzenie tzw. „startu ciepłego”, tzn. zamarzanie w badanym ośrodku od stanu stacjonarnej, rozwiniętej konwekcji naturalnej przy temperaturze ścianki zimnej równej temperaturze przejścia fazowego. W takich warunkach obniżenie temperatury tylko ścianki zimnej, powoduje jedynie powstanie pierwszej warstwy lodu, nie

zmieniając zasadniczo warunków termicznych w kanale (temperatura frontu fazowego zastępuje temperaturę zimnej ścianki).

Trzeba tu podkreślić, że nie jest to wykaz wszystkich eksperymentów przeprowadzonych w trakcie projektu badawczego, ale tylko te najważniejsze, wnoszące najwięcej informacji o wpływie konwekcji naturalnej na przebieg procesu przemiany fazowej (zestalania lub topnienia).

Większość otrzymanych wyników dotyczących zamarzania wody w kuwecie prostopadłościennej można podzielić na dwa rodzaje:

- dla jednej ścianki pionowej utrzymywanej w temperaturze T_c poniżej temperatury przejścia fazowego równej 0°C , a drugiej, przeciwległej w temperaturze T_h powyżej $T_f = 0^\circ\text{C}$, przeważnie T_c była równa -10°C a T_h $+10^\circ\text{C}$. Temperatury te tak dobrano, aby najlepiej uwidocznić wpływ inwersji gęstości wody na pole przepływu,
- dla dwóch przeciwległych ścianek pionowych utrzymywanych w temperaturze poniżej temperatury przejścia fazowego lub powyżej, w tym przypadku realizowano zamarzanie lub topienie z podwójnym frontem fazowym (lód poruszający się symetrycznie z obu stron do środka kuwety lub symetryczne topienie lodu z obu stron), kuwetę wypełniono wodą całkowicie lub w 3/4 objętości (zamarzanie z powierzchnią swobodną)

Badano również samo zjawisko konwekcji bez przemiany fazowej w kuwecie prostopadłościennej. Celem tych eksperymentów było ustalenie wpływu warunków brzegowych (temperatury T_h , rodzaju wymiany ciepła na ściankach bocznych) na strukturę przepływu konwekcyjnego. Termografia w podczerwieni (IR) została zastosowana w badaniach eksperymentalnych konwekcji naturalnej i zamarzania w wodzie do rejestracji pola temperatury na powierzchni bocznych ścianek, w sposób bezstykowy, w czasie rzeczywistym, przy bardzo wysokiej czułości i dokładności. Do badań wybrano również inny materiał (n-oktadekan). W przeciwieństwie do wody, materiał ten charakteryzuje się liniową zmianą gęstości z temperaturą. Stwarza to dodatkową możliwość porównania wpływów efektu anomalii gęstości na geometrię frontu fazowego. Wybór n-oktadekanu związany jest z jego powszechnym stosowaniem do badań procesów przemiany fazowej ciecz - ciało stałe, ze względu na bardzo dobrze poznane jego właściwości termofizyczne, jak i temperaturę przejścia fazowego zbliżoną do temperatury otoczenia.

Oddzielny zakres zainteresowań dotyczył badania procesu zamarzania substancji binarnych, a właściwie wodnego roztworu soli NaCl. W badaniach tych skoncentrowano się na wyznaczeniu pól prędkości i temperatury, struktur przepływu i stężenia soli. Te ostatnie pomiary wykonano za pomocą punktowych sond lub układu smugowego Schlierena.

Tabela 2.2. Zestawienie głównych charakterystyk przeprowadzonych pomiarów

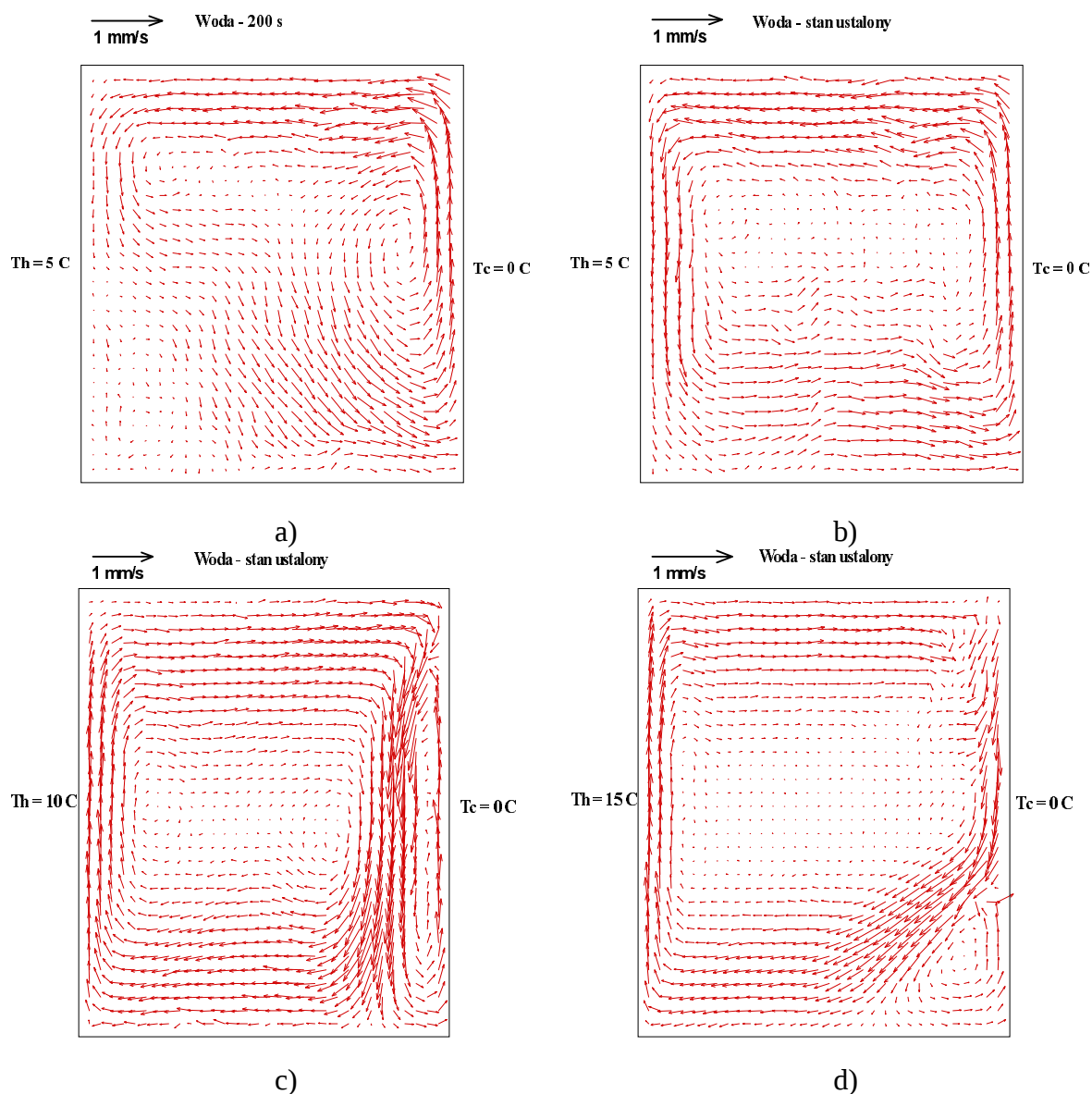
Numer eksperymentu	Grubość ścianek bocznych (czynnik opływający)	Rodzaj startu	Rodzaj eksperymentu	Temperatura T_h [°C]	Temperatura T_c [°C]	Rodzaj cząstek wskaźnikowych	Parametr W/H
#1 (woda)	6 mm (powietrze)	“zimny”	PIV	+10°C	□10°C	Pyłek sosny	1
#2 (woda)	6 mm (powietrze)	“zimny”	PIV	+10°C	□10°C	Pyłek sosny	1
#3 (woda)	6 mm (powietrze)	“zimny”	PIV + PIT	+10°C	□10°C	TLC-B	1
#4 (woda)	6 mm (powietrze)	“ciepły”	PIV + PIT + IR	+10°C	□10°C	TLC-D	1
#5 (woda)	9 mm (woda)	“ciepły”	PIV + PIT	+10°C	□10°C	TLC-C	1
#6 (woda)	9 mm (woda)	“ciepły”	PIV + PIT	+10°C	□10°C	TLC-B	1
#7 (woda)	9 mm (woda)	“ciepły”	PIV + PIT	+10°C	□10°C	TLC-D	1
#8 (woda)	9 mm (woda)	“ciepły”	PIV	+10°C	□10°C	Lycopodium	1
#9 (woda)	9 mm (woda)	“ciepły”	Kształt lodu	+10°C	□10°C	□	1
#10 (woda)	9 mm (woda)	“ciepły”	Tory cząstek	+10°C	□10°C	Pyłek sosny	1
#11 (woda)	6 mm (powietrze)	“zimny”	PIV + PIT + IR	+10°C	0°C	TLC-C	1
#12 (woda)	6 mm (powietrze)	“zimny”	PIV	+5°C	0°C	Pyłek sosny	1
#13 (woda)	6 mm (powietrze)	“zimny”	PIV	+15°C	0°C	Pyłek sosny	1
#14 (woda)	9 mm (woda)	“ciepły”	PIV	+10°C	□10°C	Pyłek sosny	1
#15 (woda)	9 mm (woda)	“ciepły”	PIV + PIT	+10°C	□10°C	Lycopodium + TLC-D	1
#16 (woda)	9 mm (woda)	“zimny”	PIV	+10°C	□10°C	Pyłek sosny	1

Tabela 2.2. cd.

#17 (woda)	9 mm (woda)	□	PIV + PIT	+10°C	□10°C	TLC-D	1
#18 (woda)	9 mm (woda)	“zimny”	PIV + PIT	□10°C	□10°C	TLC-2,8	0,69
#19 (woda)	9 mm (woda)	□	PIV + PIT	+10°C	□10°C	TLC-4,0	0,69
#20 (n-oktadekan)	9 mm (woda)	“ciepły”	PIV	+33°C	+18°C	Pyłek sosny	1
#21 (1% NaCl)	6 mm (powietrze)	“zimny”	PIV	+10°C	□15°C	Pyłek sosny	1
#22 (1.5% i 7,5% NaCl)	6 mm (powietrze)	“zimny”	PIV	+5°C	0°C	Pyłek sosny	1
#23 (7,5% NaCl)	6 mm (powietrze)	“zimny”	PIV	+15°C	0°C	Pyłek sosny	1
#24 (1% NaCl)	6 mm (powietrze)	“zimny”	elektrody	+5°C	□5°C	□	1
#25 (1% NaCl)	6 mm (powietrze)	“zimny”	elektrody	+10°C	□5°C	□	1
#26 (1% NaCl)	6 mm (powietrze)	“zimny”	elektrody	+10°C	□□5°C	□	1
#27 (1% NaCl)	6 mm (powietrze)	“zimny”	Schlieren	+10°C	□□5°C	□	1

2.2.1. Badanie konwekcji naturalnej

Na początku nasze zainteresowania zostały ukierunkowane na zrozumienie nieustalonego zjawiska konwekcji naturalnej w wodzie, bliskiej przemianie fazowej. Większość eksperymentów (nr 11, nr 12, nr 13) rozpoczynała się, gdy temperatura zimnej ścianki T_c obniżała się gwałtownie do 0°C . Wewnątrz kuwety rozwijał się przepływ, aż do stanu ustalonego (ok. 1500-2000 s). Badania przeprowadzono dla różnych wartości temperatury ścianki ciepłej ($T_h = 5, 10$ i 15°C). Podczas eksperymentów badano wpływ efektu inwersji gęstości wody oraz termicznych warunków brzegowych na nieizotermicznych ściankach na strukturę przepływu konwekcyjnego.

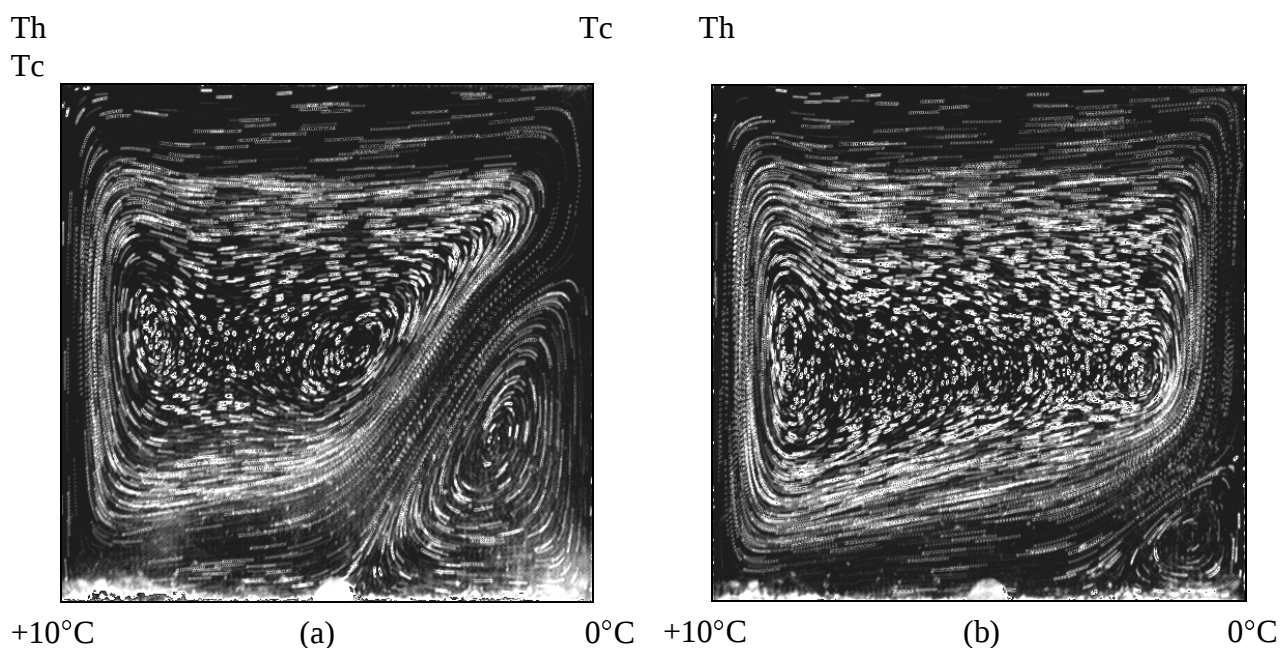


Rys 2.18. Pole prędkości zmierzone metoda DPIV dla konwekcji w wodzie: a) w chwili 200s dla $T_h = 5^\circ\text{C}$, b) w stanie ustalonym dla $T_h = 5^\circ\text{C}$, c) w stanie ustalonym dla $T_h = 10^\circ\text{C}$, d) w stanie ustalonym dla $T_h = 15^\circ\text{C}$. Temperatura $T_c = 0^\circ\text{C}$ dla wszystkich przypadków.

Wpływ różnicy temperatur ($\Delta T = T_h - T_c$) na strukturę przepływu ilustruje rys. 2.18. Zebrano tam wyniki pomiarów pól prędkości w stanie nieustalonym dla $T_h = 5^\circ\text{C}$ oraz w stanie ustalonym dla $T_h = 5^\circ\text{C}$, 10°C i 15°C . Temperatura zimnej ścianki T_c była we wszystkich wypadkach stała i

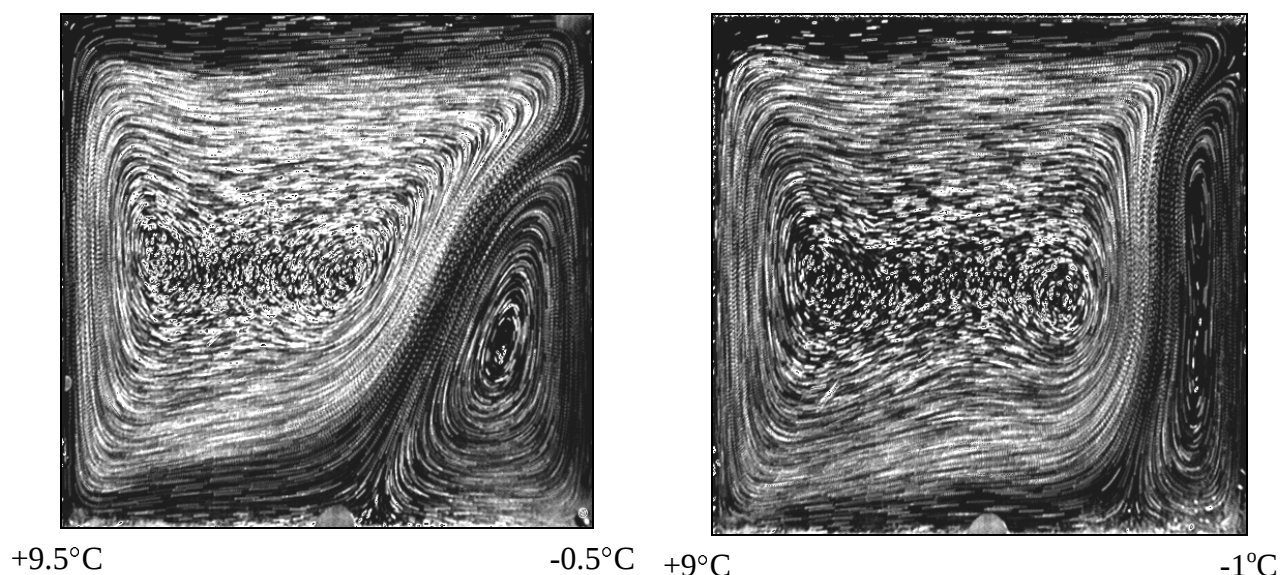
wynosiła 0°C . Typowa struktura przepływu zawiera dwa regiony o przeciwnej cyrkulacji cieczy. Dla czystej wody obserwujemy podwójną cyrkulację cieczy, „normalną” w której ciecz o wyższej temperaturze unosi się wzdłuż ścianki ciepłej, i „anomalną”, gdzie ciecz chłodna unosi się wzdłuż zimnej ścianki (lub frontu przemiany) (por. rys. 2.18c,d). Oddziaływanie obydwu cyrkulacji następuje w centralnej części kanału, w przybliżeniu wzdłuż linii diagonalnej. Konwekcyjny transport ciepła od ścianki jest więc ograniczony głównie do obszaru o cyrkulacji „normalnej”. Do odseparowanej od ciepłej ścianki cieczy uwięzionej w obszarze cyrkulacji „anomalnej” ciepło dostarczane jest głównie w drodze dyfuzji, spotęgowanej wzdłuż linii wzajemnego oddziaływania obu cyrkulacji. Zmiana temperatury ścianki ciepłej pozwala na sterowanie w przepływie wzajemną relacją cyrkulacji „normalnej” i „anomalnej”. Warto zwrócić uwagę na jakościową zmianę struktury przepływu obserwowanego dla $T_h = 5^{\circ}\text{C}$, gdy prawie zanika jedna z cyrkulacji przepływu i pozostaje tylko wir związany z inwersją gęstości wody.

W trakcie eksperymentów stwierdzono silną zależność tworzącej się w warunkach anomalii gęstości wody struktury przepływu od termicznych warunków brzegowych. Układ dwóch oddziaływujących cyrkulacji ewidentnie wykazuje dużą wrażliwość struktury przepływu na niewielkie zmiany warunków termicznych dla ścianek bocznych. Jest to bardzo istotny wniosek, porównywanie rezultatów eksperymentów z symulacjami numerycznymi wymaga dokładnego sprecyzowania temperatur i warunków termicznych dla wszystkich ścianek. Rysunek 2.19 ilustruje ten efekt dla przepływu konwekcyjnego obserwowanego w stanie ustalonym w kuwecie sześcienniej. Kuweta otoczona jest powietrzem o temperaturze pokojowej (25°C). Zrealizowano dwa przypadki opływu ścianek bocznych przez powietrze: swobodny (bez włączonego wentylatora) i wymuszony (z włączonym wentylatorem). Jak można zauważyć ta pozornie niewielka zmiana zewnętrznych warunków termicznych (ścianki boczne wykonane z dobrego izolatora jakim jest plexiglas), wywołują istotną zmianę struktury przepływu. Po włączeniu wentylatora (wymuszony opływ powietrzem) cyrkulacja „anomalna” ulega znacznej redukcji (rys. 2.19b) i jej wpływ na całkowitą wymianę ciepła jest niewątpliwie poważnie ograniczony.

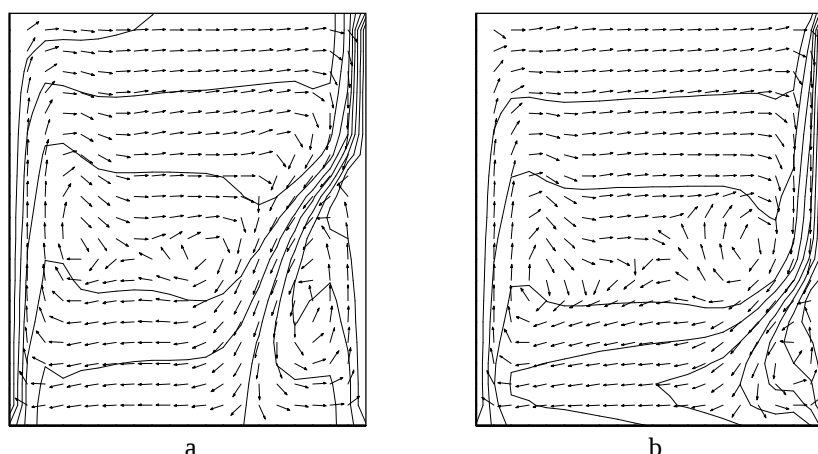


Rys. 2.19. Tory cząstek dla konwekcji naturalnej w stanie ustalonym w kuwecie sześcienniej, 6mm ścianki boczne z plexiglasu. Dwa rodzaje opływu kuwety przez powietrze o temperaturze pokojowej (25°C): (a)- swobodny; (b) - wymuszony wentylatorem (2m/s).

Ze względu na dużą wrażliwość struktur badanego przepływu, również istotne okazuje się precyzyjne określenie temperatur ścianek izotermicznych, decydujących o przepływie. Nawet niewielkie przesunięcie zakresu temperatur (przy zachowaniu tej samej różnicy temperatur), powoduje bardzo wyraźne przemieszczenie obszaru wzajemnego oddziaływania obu cyrkulacji (rys. 2.20). Taka zmiana struktury przepływu w oczywisty sposób wpływa na całkowity bilans cieplny w badanym kanale i w przypadku zamarzania będzie miała istotny wpływ na kształt i szybkość propagacji frontu fazowego.



Rys. 2.20. Tory cząstek dla konwekcji naturalnej w stanie ustalonym w kuwecie sześcienniej (ścianka 6 mm, w otoczeniu powietrze, swobodny opływ). Wpływ niewielkiej modyfikacji temperatur ścianek izotermicznych przy niezmienionej różnicy temperatur.

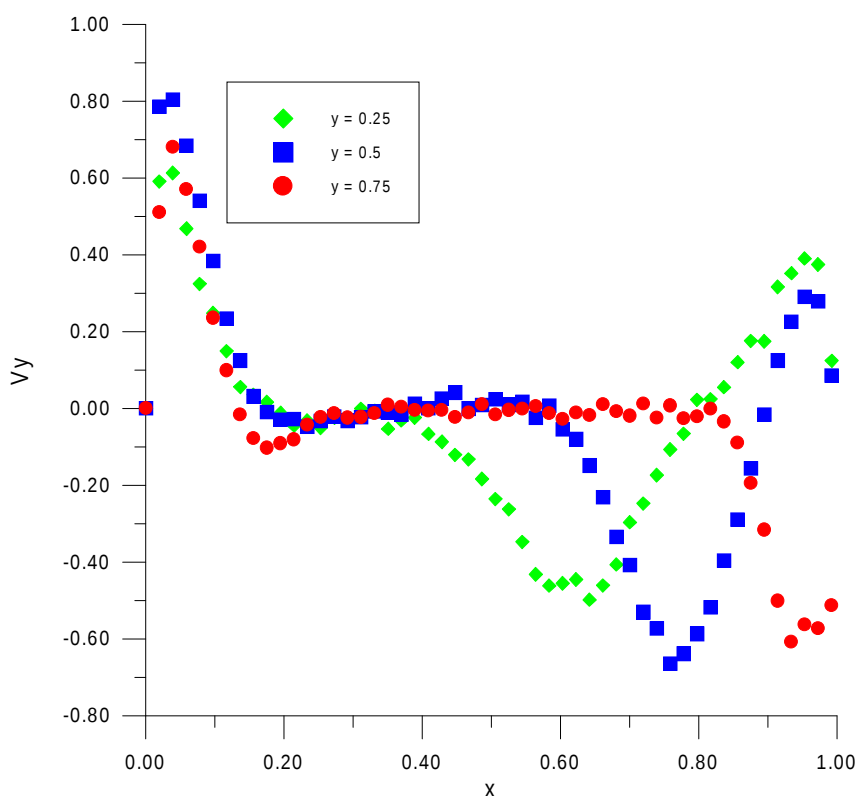


Rys. 2.21. Konwekcja naturalna, obliczenia numeryczne pola prędkości przy założeniu warunków adiabatycznych dla ścianek bocznych (a) i nie-adiabatycznych warunków ze strumieniem ciepła odpowiadającym wymuszonemu opłwowi powietrza (b). $T_h=10^{\circ}\text{C}$, $T_c=0^{\circ}\text{C}$.

Pola prędkości dla konwekcji naturalnej wyznaczone metodą PIV stanowią materiał do porównań i weryfikacji kodów numerycznych w warunkach anomalii gęstości. Sprecyzowanie termicznych warunków brzegowych okazało się być istotnym warunkiem poprawności modelowania. Rysunek 2.21 ilustruje efekt zmiany strumienia ciepła przez nie-izotermiczne ścianki na rezultaty obliczeń. Przeprowadzona symulacja potwierdza zaobserwowaną w

eksperymentcie wrażliwość struktur przepływu od warunków termicznych na ściankach bocznych „izolujących” kuwetę od zewnętrznej atmosfery.

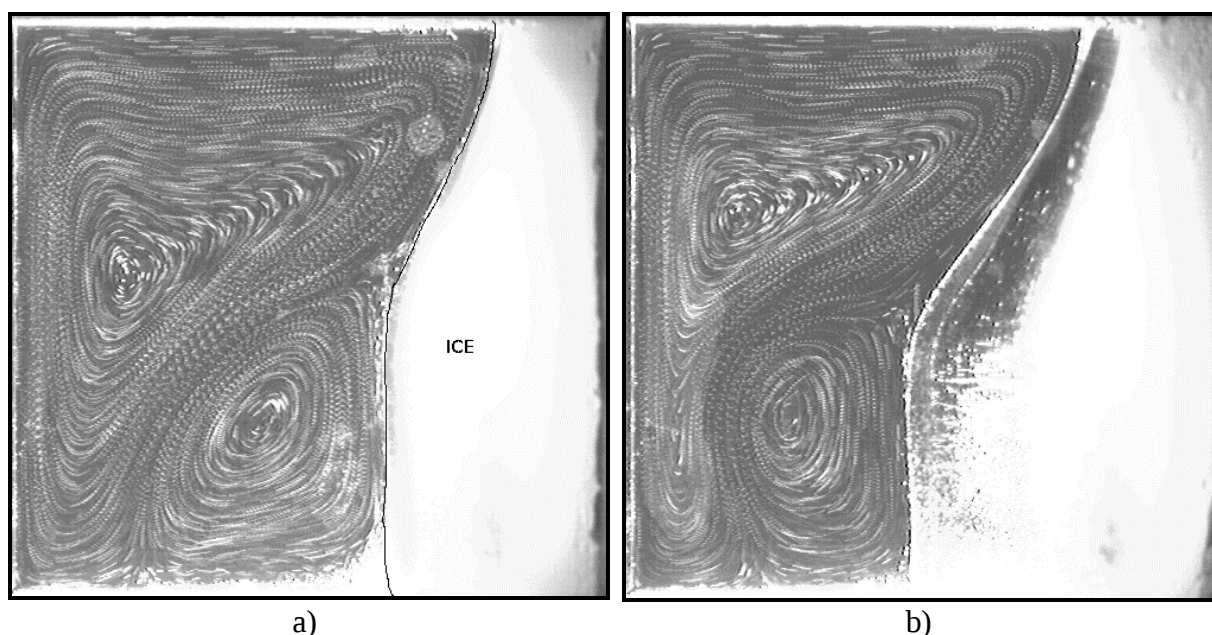
Przypadek #11 (tabela 3.1) ustalonego przepływu konwekcyjnego w układzie 38mm kuwety sześcienniej, o ściankach wykonanych z pleksiglasu o grubości 6mm, umieszczonej w powietrzu w swobodnym opływie przyjęto jako wzorzec („benchmark”) do porównań z obliczeniami numerycznymi. Własności termofizyczne ścianek i użytej wody zostały zmierzone lub określone na podstawie tablic. Do porównań została stworzona baza danych zawierająca pola prędkości i temperatury wyznaczone metodą PIV dla centralnego przekroju kanału pomiarowego. Celem lepszego uwidocznienia podobieństw i różnic wybrano trzy profile prędkości pionowej wyekstrahowane ze zmierzonych pól prędkości: dla bezwymiarowej wysokości $y=0.25$ od dna naczynia, dla osi poziomej naczynia i symetrycznie w odległości 0.75 od dna (rys. 2.21). Wydaje się, że tak wybrane profile charakteryzują większość struktur typowych dla obserwowanego przepływu. W pobliżu ścianki ciepłej wyraźnie widoczne maksimum prędkości związane jest z cyrkulacją „normalną”. Drugie maksimum, w pobliżu ścianki zimnej, to efekt „anomalnej” cyrkulacji. Minimum prędkości pojawia się w pewnej odległości od ścianki zimnej, gdzie obie cyrkulacje tworzą charakterystyczny obszar wzajemnego oddziaływania (por. rys. 2.19).



Rys. 2.22. Konwekcja naturalna - stan ustalony dla ścianki 6 mm i swobodnego opływu powietrza na zewnątrz. Profile pionowej składowej prędkości zebrane dla 3 wysokości kuwety (0.25, 0.5 i 0.75). Temperatura $T_c = 0^\circ\text{C}$, $T_h = 10^\circ\text{C}$.

2.2.2. *Badanie konwekcji naturalnej z przemianą fazową*

Przeprowadzone badania dotyczą w dużej części przemiany fazowej w wodzie (zamarzanie i topnienie lodu). Zjawiska tu występujące są charakterystyczne dla izotermicznej przemiany fazowej cieczy jednoskładnikowej. Ze względu na anomalie gęstości wody, badany przepływ charakteryzuje złożona struktura, o dwóch konkurujących cyrkulacjach. Obserwując geometrię frontu fazowego zauważymy charakterystyczne wybrzuszenia powierzchni lodu, powstałe wskutek oddziaływań obu cyrkulacji (rys. 2.23). Ten złożony obraz przepływu wydaje się być dodatkowym wyzwaniem dla testowanych kodów numerycznych, pozwalającym zweryfikować ich stabilność w rejonach dużych gradientów temperatury i deformacji powierzchni fazowej.



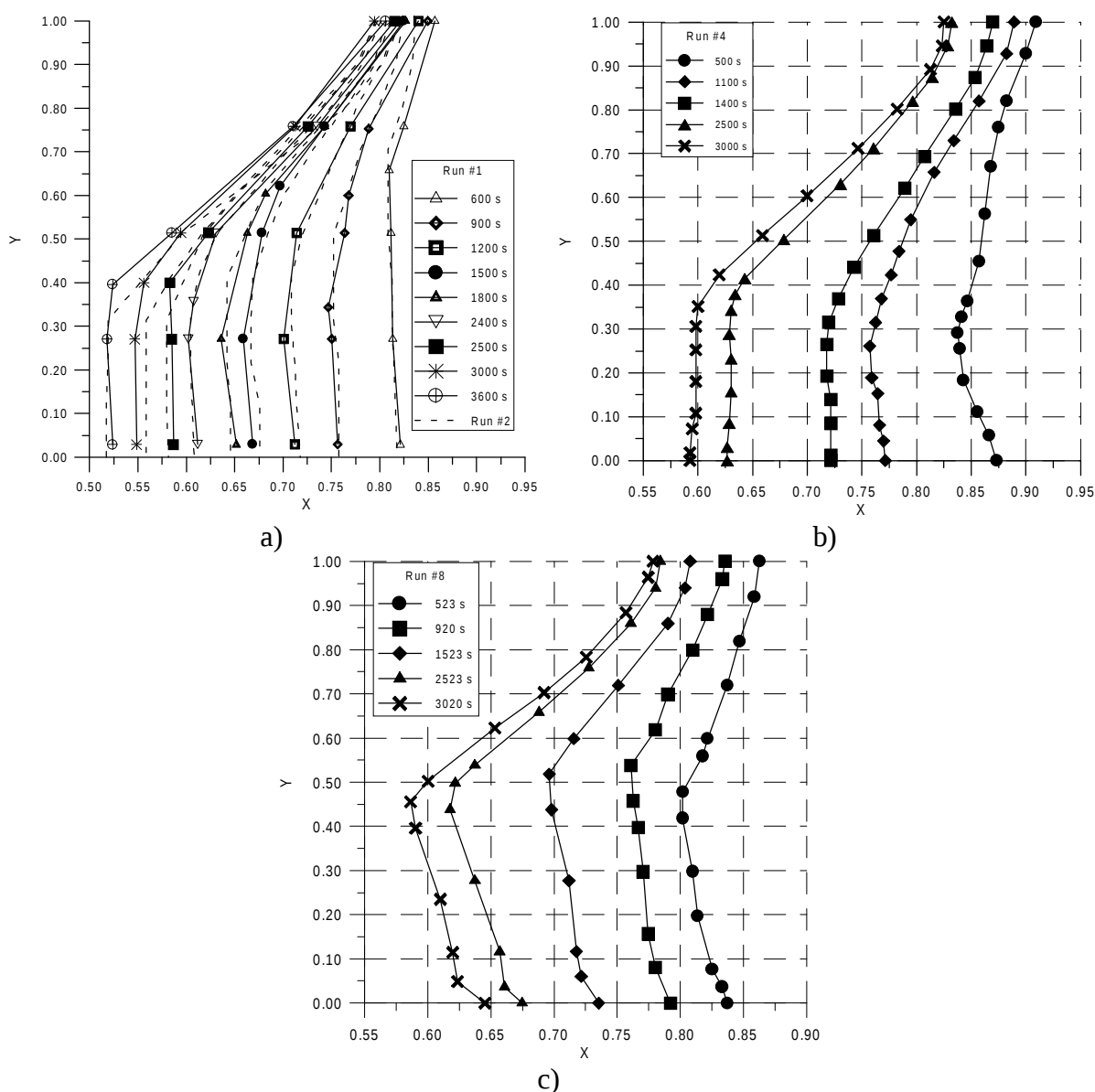
Rys. 2.23. Położenie fazy stałej (lodu) obserwowane dla eksperymentu nr 1 po czasie a) 2340 s, b) 6000 s od momentu startu. Superpozycja 10 obrazów zarejestrowanych co 0,4s.

Konwekcja naturalna w zamarzającej wodzie z pojedynczym frontem fazowym

Większość dostępnych danych eksperymentalnych dotyczących procesu zestalania, a służących między innymi sprawdzaniu fizycznej poprawności kodu numerycznego, dotyczy obserwacji jakościowych położenia frontu przemiany fazowej i punktowych lub lokalnych pomiarów zarówno prędkości, jak i temperatury. Głównym celem przedstawionych tutaj badań było stworzenie problemu testowego („benchmark”) dla procesu zamarzania wody sprężonego z konwekcją naturalną. Na proponowany test składają się ilościowe informacje dotyczące zmiany położenia frontu fazowego w czasie, pola temperatury i prędkości wyznaczone dla całego badanego obszaru (pionowy przekrój centralny kuwety pomiarowej).

Aby stwierdzić, czy otrzymywane wyniki eksperymentalne są powtarzalne, przeprowadzano po kilka eksperymentów dla tych samych warunków brzegowo-początkowych. Wyznaczone profile frontu fazowego mieszczą się w granicy błędu od 5 do 8% (Rys. 2.24a). Największe różnice kształtu frontu fazowego obserwowane dla kilku powtarzanych eksperymentów pojawiają się w chwili początkowej w górnej części kuwety. Powoduje to pewną niedokładność ustalenia reprezentatywnego profilu frontu fazowego dla czasów poniżej 500s. Efekt ten związany jest z trudnościami precyzyjnego ustalenia i utrzymania warunków początkowych dla eksperymentów z

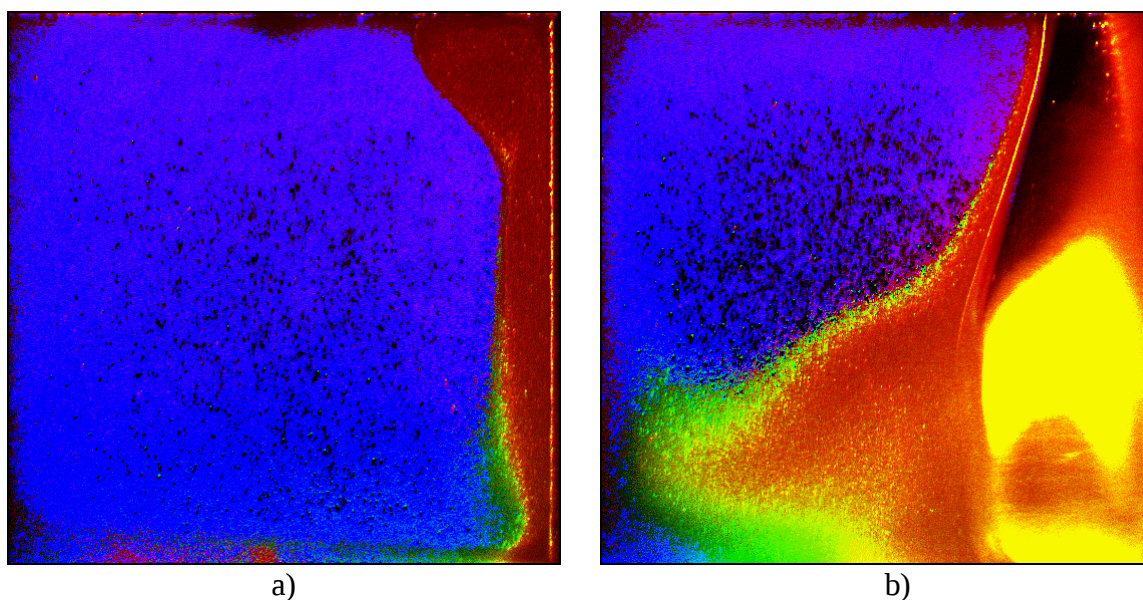
tw. „zimnym startem”. Istniejące zawsze w komorze resztkowe pola prędkości i gradienty temperatury w niekontrolowany sposób modyfikują początkowy rozwój przepływu.



Rys. 2.24. Położenie frontu przemiany fazowej dla wybranych czasów w przypadku: kuwety umieszczonej: a) w powietrzu eksperyment nr 1 i 2 – „zimny start”, b) w powietrzu eksperyment nr 4 – „ciepły start”, c) w kąpeli wodnej eksperyment nr 8 – „ciepły start”.

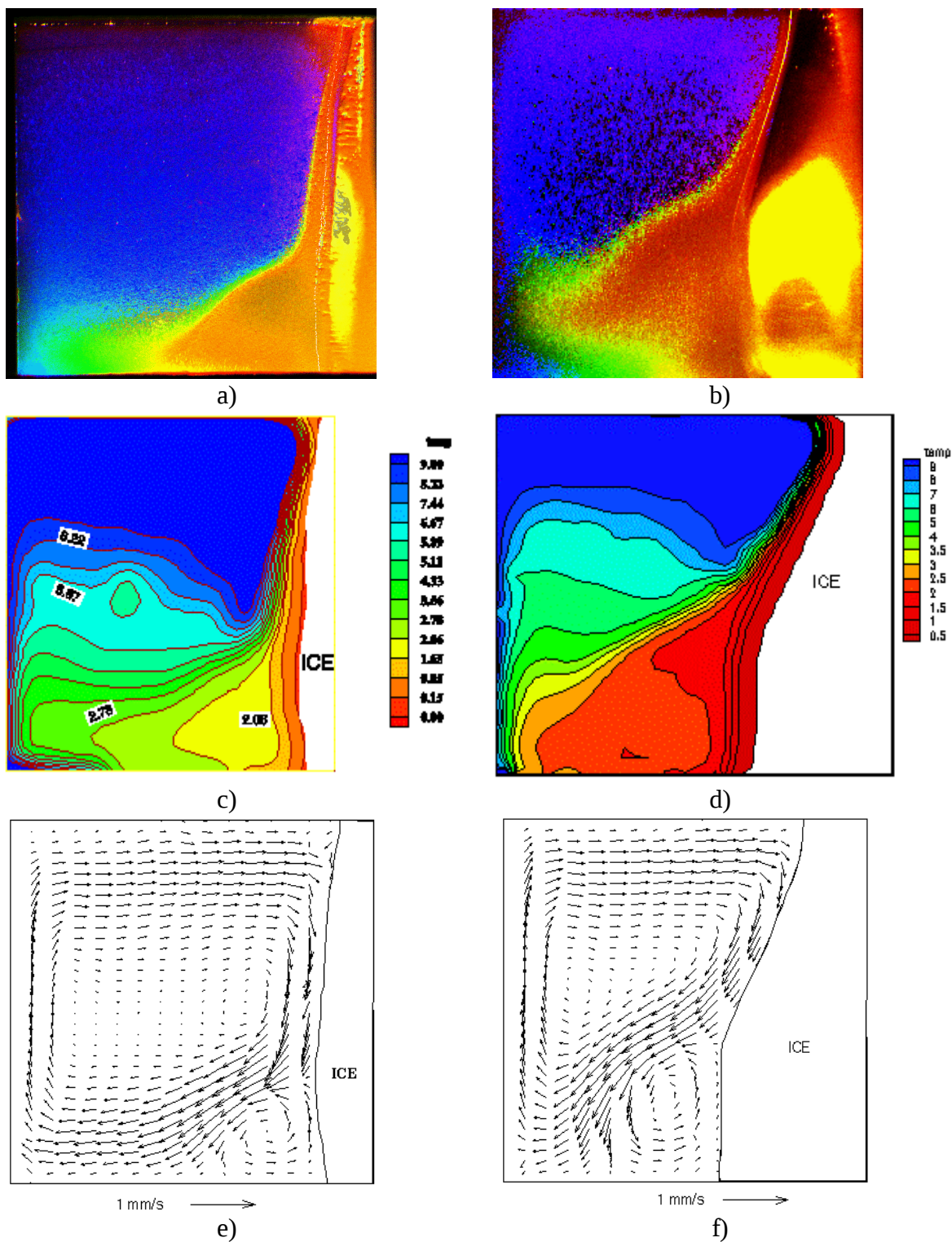
Dodatkowym zakłóceniem warunków początkowych jest zjawisko przechłodzenia wody, nie uwzględniane w naszych modelach numerycznych. Względnie czysta woda w normalnych warunkach wymaga przechłodzenia do ok. -7°C aby zapoczątkować przemianę fazową z pierwszych zarodków lodu. Efekt ten jest dobrze widoczny w eksperymentach. Po obniżeniu temperatury zimnej ścianki do -10°C wyraźnie obserwujemy wzdłuż tej ścianki intensywny przepływ przechłodzonej cieczy do górnej powierzchni (por. rys. 2.25a). Powoduje to spowolnienie procesu tworzenia się pierwszej warstewki lodu i modyfikuje przepływ cieczy w górnej części kuwety. Temperatura przechłodzonej wody, zwizualizowanej ciemno czerwonym kolorem unoszonej zawiesiny ciekłych kryształów, wynosi ok. -7°C . Poruszająca się struga

przechłodzonej wody czasami pokrywa aż 30% powierzchni górnej ścianki. Proces ten trwa ok 40-60 s. W krótkim czasie (100-200s) pojawiają się pierwsze zarodki nukleacji i lód szybko wypełnia przechłodzoną część kuwety. Unieruchomiona na górze warstwa lodu jest szybko (po 10-15 s) topiona przez ciecz przepływającą od cieplejszej ścianki ($T_h = 10^\circ\text{C}$), a cienka, równomierna warstwa lodu pokrywa pionową ściankę. Dopiero taki stan można uznać za wystarczająco dobrze zdefiniowany dla porównań z obliczeniami numerycznymi. Jednak to początkowe zaburzenie pola przepływu i temperatury może przez dłuższy okres czasu nadal wpływać na dalszy rozwój przepływu i kształt tworzącego się frontu fazowego.



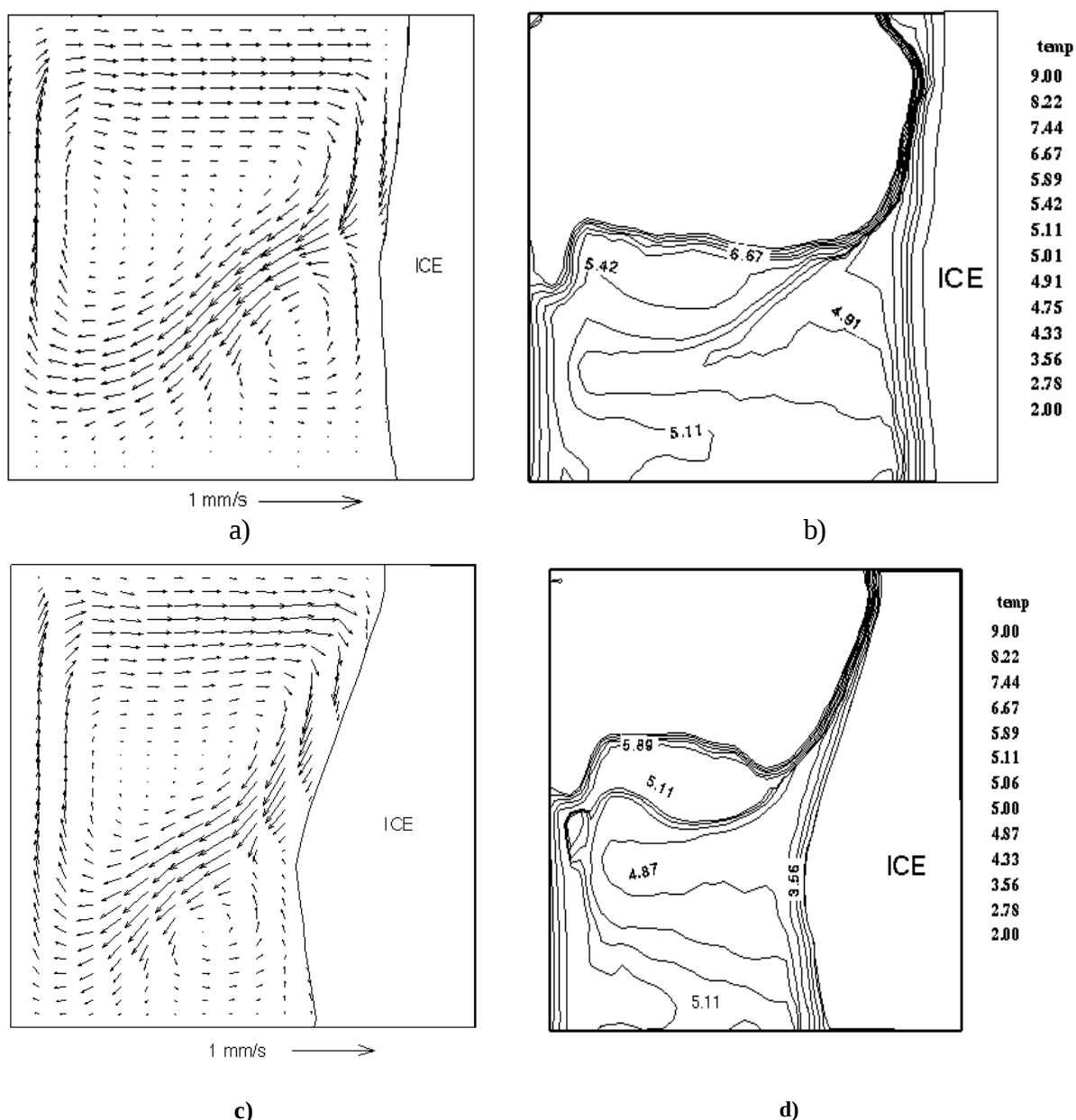
Rys. 2.25. Położenie fazy stałej (lodu) obserwowane dla eksperymentu nr 7 po czasie
a) 120 s, widoczne początkowe przechłodzenie, b) 2500 s – rozwinięty przepływ.
Temperatura wizualizowana za pomocą znaczników TLC, granica czerwonego i zielonego koloru obrazuje w przybliżeniu temperaturę 4°C .

Rysunek 2.26 przedstawia przykładowe wyniki pomiarów pól prędkości i temperatury otrzymane dla dwóch kroków czasowych. Tworząca się płaska warstwa lodu, widoczna dobrze już po 500s od początku eksperymentu, ulega w krótkim czasie silnej deformacji. Jest to wynik niejednorodności pola prędkości i temperatury, widocznych na wyznaczonych polach temperatur i prędkości (por. rys.2.26d,f). Przeprowadzone eksperymenty pokazały, że wybrany przypadek procesu przemiany fazowej ciecz-ciało stałe nie jest prosty i na pewno wart szczegółowych badań i analiz. Efekty dodatnich i ujemnych sił wyporu i oddziaływujących ze sobą warstw zimnej i ciepłej cieczy (por rys. 2.23), tworzą interesujące i trudne do modelowania wzorce przepływów. Podobnie jak w omawianym wcześniej przypadku konwekcji wody bez przemiany fazowej, można zaobserwować oddziaływanie dwóch cyrkulacji: górnej, która transportuje w kierunku zgodnym z ruchem wskazówek zegara ciepłą ciecz do górnej ścianki, a następnie z powrotem wzdłuż izotermi o największej gęstości (ok. 4°C) i dolnej poruszającej ciecz w przeciwnym kierunku w obszarze chłodniejszym przyległym do powierzchni lodu. Konwekcyjna wymiana ciepła pomiędzy tymi dwoma obszarami jest ograniczona głównie do górnego prawego rogu, gdzie mieszające się ze sobą warstwy zimnej i ciepłej cieczy intensyfikują wymianę ciepła i efektywnie obniżają wzrost fazy stałej (lodu). Pozostała centralna i dolna część frontu przemiany fazowej jest prawie równoległa do ścianki zimnej i zmienia swój kształt tylko nieznacznie.



Rys. 2.26. Obrazy RGB, wyznaczone pola temperatury i prędkości w przypadku kuley umieszczonej w powietrzu dla czasu 500 s (a, c, e) i 3000 s (b, d, f). Eksperyment nr 4.

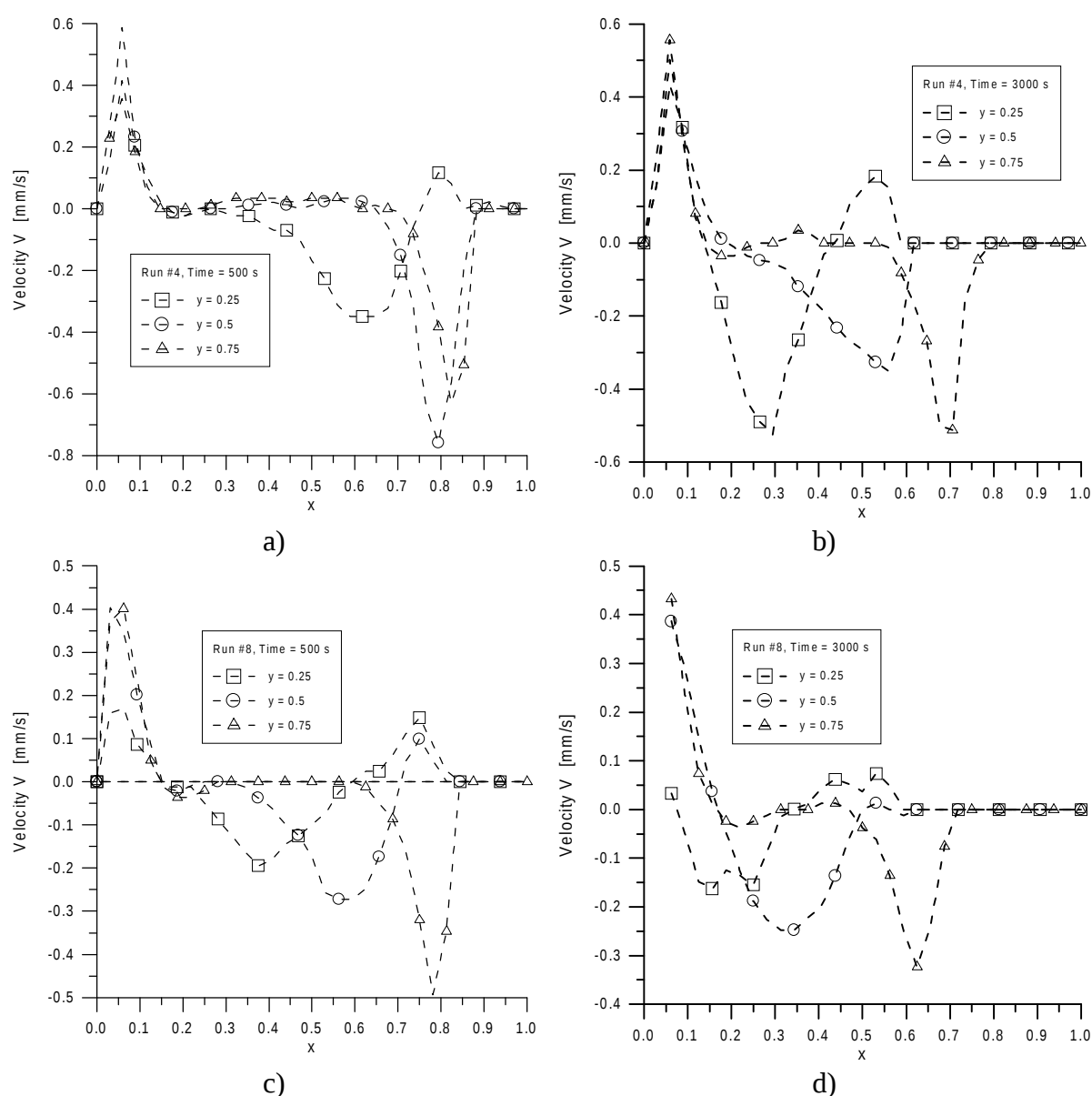
Wydaje się, że ta „anomalna” konwekcja naturalna nie wpływa w znaczący sposób na proces zamarzania. Chłodniejsza woda o temperaturze poniżej 4°C pozostaje „uwięziona” w dolnym obszarze w sąsiedztwie lodu, co jest bardzo dobrze widoczne na rys. 2.23. Gdy front fazowy przemieszcza się z czasem, niższy wir (o cyrkulacji przeciwnej do ruchu wskazówek zegara) przemieszcza się po przekątnej w stronę górnej części kuwety. Maksymalna grubość warstwy lodu pokrywa się z miejscem, w którym stykają się dwa wiry. Wpływ warunków początkowych (rys. 2.24a i 2.24b) jest zauważalny głównie w okresie początkowym. Gdy przepływ stabilizuje się, fronty fazowe dla obu przypadków zbiegają się do tego samego kształtu.



Rys. 2.27. Wyznaczone pola prędkości i temperatury w przypadku kuwety umieszczonej w kąpeli wodnej dla czasu 500 s (a, b) i 2600 s (c, d). Eksperyment nr 5.

Omówiony w poprzednim podrozdziale silny wpływ zewnętrznych warunków termicznych na strukturę przepływu utrudnia porównanie rezultatów eksperymentalnych i numerycznych. Wyznaczenie współczynników przejmowania ciepła od otaczającego powietrza przez ścianki boczne jest obciążone trudnymi do oszacowania błędami. Nawet dla opływu wymuszonego,

różnice opływu powietrza dla ścianek bocznych, górnej i dolnej mogą być znaczne i trudne do precyzyjnego określenia. W związku z tym, celem lepszego sprecyzowania warunków termicznych dla bocznych ścianek, wykonane serię dodatkowych eksperymentów (od nr 5 do 9 Tabl.2.2), umieszczając badaną komorę pomiarową w kąpeli wodnej o zadanej, stałej temperaturze, równej temperaturze ciepłej ścianki (na ogół 10°C). Ze względu na wymuszony obieg wody w kąpeli i dużą wartość współczynnika przejmowania ciepła dla takiej konfiguracji (ok. 1000W/m^2), możemy przyjąć, że temperatura zewnętrznej powierzchni bocznych ścianek jest dokładnie określona przez temperaturę wody opływającej kufwę.

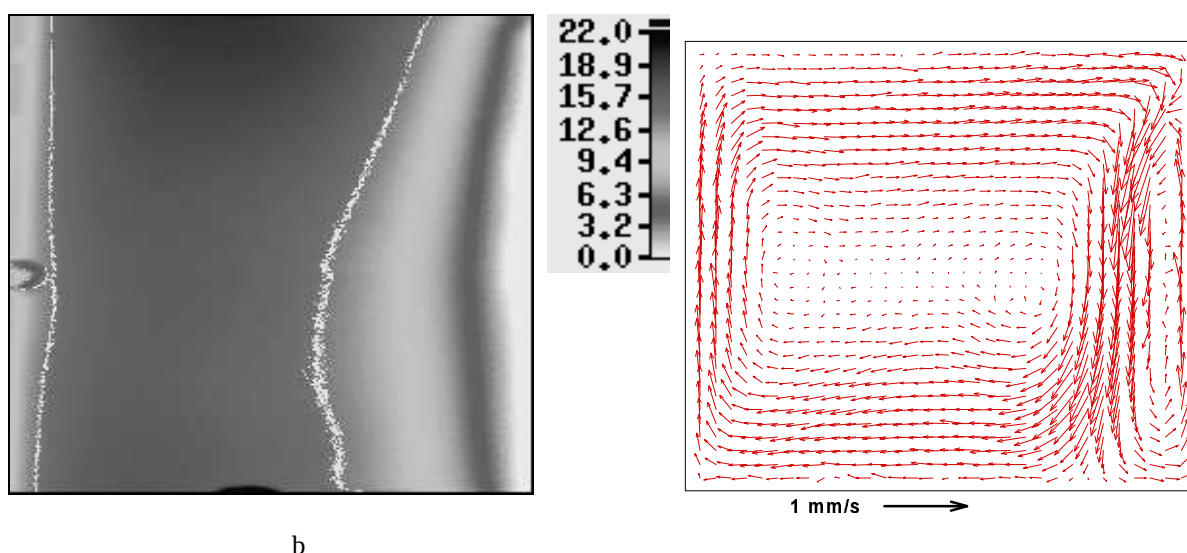


Rys. 2.28. Wyznaczone eksperymentalnie składowe pionowe prędkości dla różnych czasów. Profile prędkości wzdłuż szerokości kufwy dla 0,25, 0,5 i 0,75 wysokości kufwy. Eksperyment nr 4, a) 500 s i b) 3000 s. Eksperyment nr 8, c) 500 s i b) 3000 s.

Rysunek 2.27 przedstawia przykładowe wyniki pomiarów pól prędkości i temperatury otrzymane dla dwóch kroków czasowych. Podobnie jak w poprzednim przypadku, w początkowym okresie czasu tworząca się warstwa lodu jest niemal płaska. W miarę rozwoju przepływu wpływ „anomalnej” cyrkulacji wody staje się widoczny, przyrost fazy stałej w dolnej części naczynia jest znacznie szybszy niż ma to miejsce w górnej części. W porównaniu z

eksperymentami przeprowadzonymi dla kanału w otoczeniu atmosferycznym, obserwowany przyrost masy lodu jest w tym wypadku nieco wolniejszy (por. rys. 2.24b,c). Zaskakujące jest natomiast, że mimo tak znacznej zmiany warunków termicznych dla bocznych ścianek (również dna i ścianki górnej), kształt lodu uległ niewielkiej modyfikacji. Świadczy to o stosunkowo niewielkim strumieniu ciepła jaki jest dostarczany do kanału przez dość grube ścianki (9mm) wykonane z plexiglasu. Z drugiej strony duża grubość ścianek sprzyja intensyfikacji przewodnictwa cieplnego wzdłuż ścianki, zmniejszając silne niejednorodności temperatury w pobliżu styku z frontem fazowym co powoduje jego „podtopienie” dla dolnej ścianki. Zaskakująco, relatywnie małe zmiany w kształcie frontu przemiany fazowej są natomiast zauważalne w górnej i środkowej części.

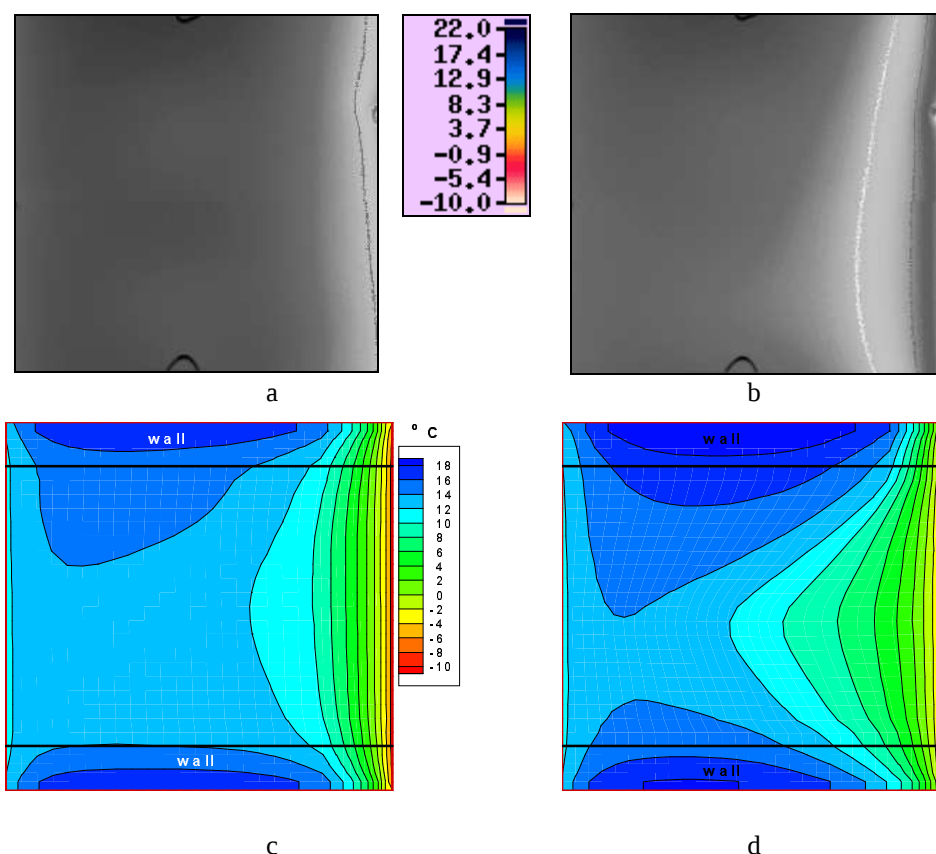
Uzyskane metodą PIV pola prędkości pozwalają na wykreślenie profili prędkości dla dowolnie wybranych obszarów kanału. Na rys. 2.28 pokazano profile pionowej składowej prędkości dla trzech wybranych przekrojów kanału. W chwili początkowej profile te są zbliżone kształtem do analogicznych profili prędkości wyekstrahowanych dla konwekcji naturalnej (rys. 2.22). W miarę upływu czasu deformacja frontu fazowego wyraźnie modyfikuje strukturę przepływu. Odzwierciedlają to zmiany widoczne dla profili prędkości zamieszczonych na rys. 2.28.



Rys. 2.29. Termogram zewnętrznej powierzchni ściany bocznej kuwety z izotermami 6°C (zielona) i 14°C (żółta) (a) oraz pole prędkości dla pionowej, środkowej płaszczyzny ($z = 0.5$) (b) dla konwekcji naturalnej wody po 2400 s od rozpoczęcia chłodzenia;
 $T_c = 0^\circ\text{C}$, $T_h = 10^\circ\text{C}$, $T_{\text{ext}} = 23.8^\circ\text{C}$.

Jak wspomniano wcześniej jedną z przyczyn niezgodności pomiędzy wynikami badań eksperymentalnych procesów konwekcji naturalnej a wynikami modelowania numerycznego są problemy w precyzyjnym określeniu termicznych warunków brzegowych na tzw. „biernych” ściankach, tzn. nieizotermicznych ścianach ograniczających badaną przestrzeń. Bezpośredni pomiar termicznych warunków brzegowych na zewnętrznych ściankach naczynia umożliwia termografia w podczerwieni. Obrazy termograficzne przedstawiają zmienne w czasie pole temperatury w całej płaszczyźnie ścianki. Ta dodatkowa informacja pozwala na weryfikację założeń czynionych w obliczeniach numerycznych, a w kombinacji z pomiarem temperatury na wewnętrznych ściankach (przy pomocy DPIT), umożliwia obliczenie strumieni ciepła przez te ścianki. W niniejszej pracy termografia w podczerwieni została zastosowana do wyznaczenia temperatury zewnętrznej powierzchni bocznej ścianki w badaniach eksperymentalnych konwekcji naturalnej w wodzie przy temperaturach bliskich 0°C oraz podczas zamarzania.

Na rys. 2.29 pokazano termogram zewnętrznej powierzchni ściany bocznej kuwety z izotermami 6°C (zielona) i 14°C (żółta) (a) oraz pole prędkości dla pionowej, środkowej płaszczyzny ($z = 0.5$) (b) dla konwekcji naturalnej wody po 2400 s od rozpoczęcia chłodzenia ($T_c = 0^\circ\text{C}$, $T_h = 10^\circ\text{C}$, $T_{\text{ext}} = 23.8^\circ\text{C}$). Zauważyć można zmienne gradienty temperatury wzdłuż nieizotermicznych ścianek kuwety, a zatem niejednorodny rozkład gęstości strumienia ciepła. Może być to jedna z przyczyn różnic pomiędzy wynikami badań eksperymentalnych a wynikami obliczeń numerycznych, gdzie zakładane są stałe gęstości strumieni ciepła lub stałe temperatury na zewnętrznych powierzchniach tych ścianek. Inne możliwe przyczyny niezgodności są szerzej omawiane w dalszych częściach opracowania.



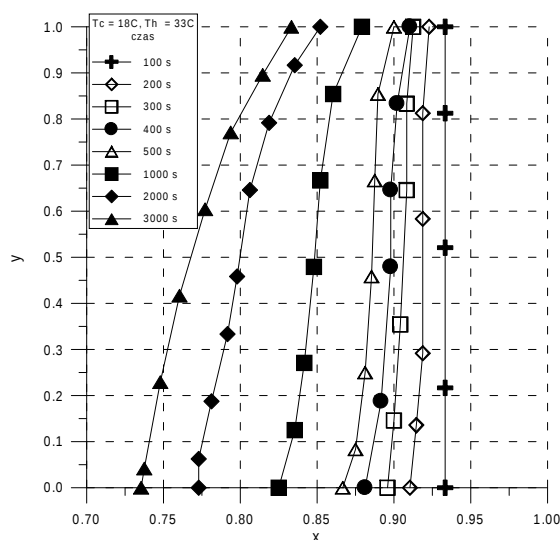
Rys. 2.30 Zamrażanie wody. Termogram zewnętrznej powierzchni ściany bocznej kuwety z izotermami 0°C (zielona) i 6°C (żółta) (a) i (b) oraz pola temperatury dla tej powierzchni obliczone numerycznie (c) i (d) po czasie 500 s (a) i (c) oraz 3600 s (b) i (d) od rozpoczęcia chłodzenia ($T_c = -10^\circ\text{C}$, $T_h = 10^\circ\text{C}$, $T_{\text{ext}} = 23.8^\circ\text{C}$)

Na rys. 2.30 zilustrowano wyniki pomiarów temperatury bocznej ścianki przy zamrażaniu wody. Przedstawiono termogram zewnętrznej powierzchni ściany bocznej kuwety z izotermami 0°C (zielona) i 6°C (żółta) (a) i (b) oraz pola temperatury dla tej powierzchni obliczone numerycznie (c) i (d) po czasie 500 s oraz 3600 s od rozpoczęcia chłodzenia. Temperatura ścianek izotermicznych wynosi $T_c = -10^\circ\text{C}$, $T_h = 10^\circ\text{C}$, temperatura powietrza $T_{\text{ext}} = 23.8^\circ\text{C}$. Widoczny jest wpływ górnej i dolnej ścianki kuwety na pole temperatury w badanej przestrzeni. Modelowanie numeryczne daje podobny jakościowo wynik (podobny kształt i ułożenie izoterm) jak w przypadku eksperymentu, zwłaszcza po dłuższym czasie. Należy jednak zwrócić uwagę, że w badaniach eksperymentalnych w tych samych punktach uzyskiwane są wyższe temperatury niż w symulacji numerycznej (rys. 2.30c,d).

Badania wykonane z wykorzystaniem termografii w podczerwieni wskazują na dużą przydatność takiej metody pomiaru rozkładu temperatury na zewnętrznych powierzchniach nieizotermicznych ścianek kuwety pomiarowej. Najważniejszą zaletą jest bezinwazyjny i bezstykowy sposób pomiaru temperatury powierzchni. Alternatywą dla tej metody może być termografia ciekłokrystaliczna, a zatem pokrycie ścianek warstwą roztworu ciekłych kryształów lub przykładanie do nich cienkiej folii pokrytej takim roztworem. Rozwiązanie to posiada istotną wadę: uniemożliwiłoby lub utrudniło obserwację wnętrza kuwety. Manipulacja folią z ciekłymi kryształami spowodowałaby zmianę warunków wymiany ciepła. Warto ponadto zauważyć, że termografia w podczerwieni pozwoliła na uzyskanie wyższej dokładności, lepszej niż 0.3°C , w porównaniu z wartościami od 0.2°C do 0.6°C (w zależności od zakresu barw) dla ciekłych kryształów. Możliwa była obserwacja pola temperatury w czasie rzeczywistym i rejestracja w dowolnej chwili czasowej.

Ponieważ zbudowany układ eksperymentalny pozwala na jednoczesne przeprowadzenie pomiarów temperatury powierzchni kamerą termograficzną i pomiarów pól prędkości i temperatury cieczy, zebrane informacje pozwalają na odtworzenie niemal pełnego obrazu warunków termicznych i kinematycznych w badanym przepływie.

Konwekcja naturalna z przemianą fazową bez anomalii gęstości (n-oktadekan)



Rys. 2.31. Położenie i kształt frontu fazowego zmierzone dla krzepnięcia n-oktadekanu w kanale sześciennym umieszczonym w kąpeli wodnej. $T_c = 18^{\circ}\text{C}$, $T_h = 33^{\circ}\text{C}$, $T_{\text{ext}} = 33^{\circ}\text{C}$.

Celem porównania wpływu anomalii gęstości wody na kształt frontu przemiany fazowej wykonano serie eksperymentów dla n-oktadekanu, niskotopliwej substancji o liniowej charakterystyce gęstości w funkcji temperatury. Rys. 2.31 ilustruje rezultaty pomiarów z profili frontu fazowego wykonanych dla kilku kroków czasowych. Warto zauważyć, że początkowy przyrost fazy stały jest stały wzdłuż powierzchni zimnej ścianki i tworzący się front jest niemal równoległy do ścianki. Rozwój konwekcji naturalnej spowalnia ten proces w górnych częściach naczynia, stopniowo nadając profilowi frontu fazowego typowy dla takich substancji kształt płaszczyzny nachylonej dolną krawędzią w kierunku ścianki ciepłej.

Konwekcja naturalna wody z podwójnym frontem zamarzania

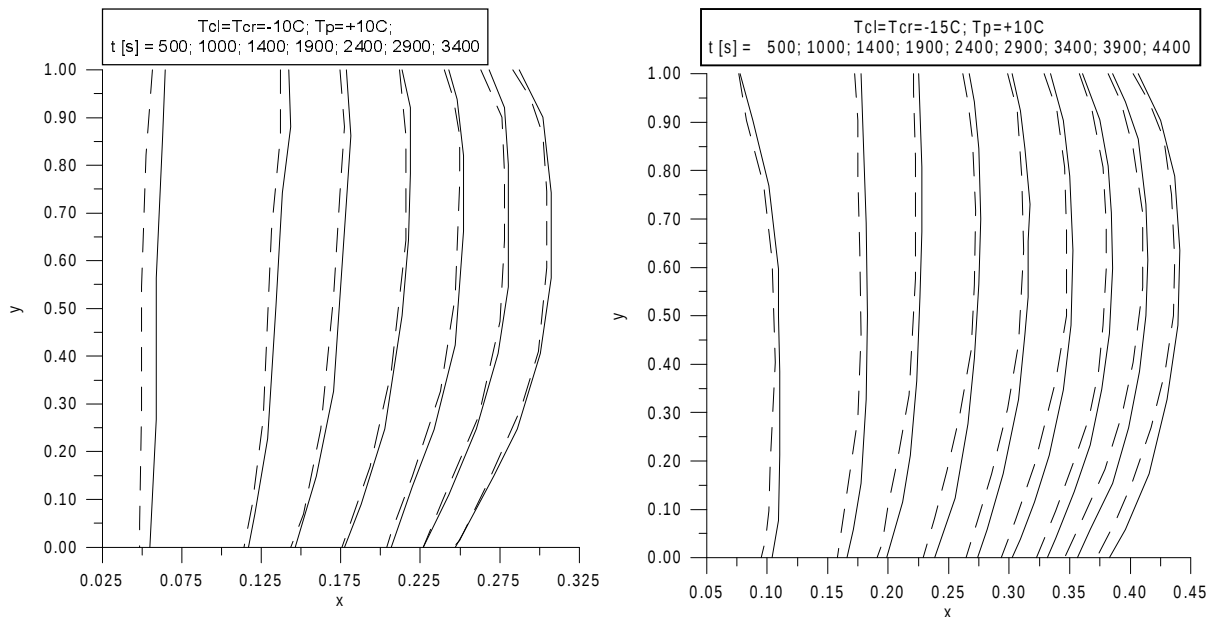
W wielu zastosowaniach praktycznych (np. krzepnięcie metali), proces przemiany fazowej jest zapoczątkowywany na powierzchni wielu ścianek, stopniowo wypełniając fazą stałą całą objętość.

W konfiguracji takiej często brak zewnętrznego źródła ciepła powoduje, że przebieg procesu w dużej mierze wyznaczany jest przez bilans energii własnej, ciepła utajonego krzepnącej cieczy i strumienia ciepła przez ścianki zamykające naczynie. Proces o podobnym charakterze symulowano w obecnych badaniach obserwując krzepnięcie lub zamarzanie wody zamkniętej w naczyniu o dwóch pionowych ściankach izotermicznych, utrzymywanych w tej samej temperaturze. Badania przeprowadzono w prostopadłościenniej kuwecie pomiarowej schematycznie pokazanej na rys.2.2. Stosunek szerokości tej kuwety S do jej wysokości W wynosi 1.5 ($W = 38$ mm). Cztery ścianki kuwety zostały wykonane z pleksiglasu o grubości 9 mm, zaś dwie pozostałe, przeciwległe, pionowe ścianki z miedzi i podłączone do termostatu, który utrzymywał je w stałej temperaturze T_s . Aby zapewnić dobrze zdefiniowany warunek brzegowy na pozostałych ściankach bocznych, całą kuwetę pomiarową otoczono płaszczem wodnym o stałej temperaturze T_p kontrolowanej przez drugi termostat. Przeprowadzono badania eksperymentalne konwekcji swobodnej dla dwóch przypadków krzepnięcia wody:

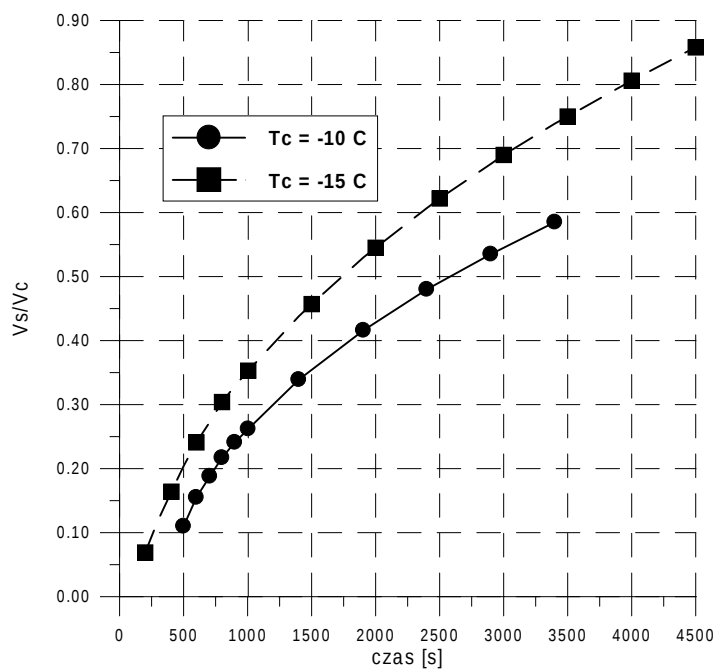
- a) prostopadłościenna kuweta wypełniona w całości
- b) kuweta wypełniona do 3/4 wysokości, przypadek ze swobodną górną powierzchnią

Badania przeprowadzono dla dwóch różnych warunków brzegowych. W pierwszym przypadku dwie przeciwległe pionowe ścianki (por. rys. 2.2) były podłączone do wspólnego termostatu i chłodzone, tak aby utrzymywały stałą temperaturę $T_s = T_c = -10^\circ\text{C}$ lub $T_s = T_c = -15^\circ\text{C}$, tj. poniżej temperatury krzepnięcia wody $T_f = 0^\circ\text{C}$. Pozostałe ścianki otaczał płaszcz wodny (wymuszony przepływ) o temperaturze $T_p = +10^\circ\text{C}$, zapewniający spełnienie na tych ściankach konwekcyjnych termicznych warunku brzegowych. Przed eksperymentami wodę w kuwecie pomiarowej wychładzano do temperatury początkowej $T_0 = T_p$, aby można było przyjąć zerowy rozkład prędkości w chwili startu. Przepływ konwekcyjny rozpoczynał się w chwili $t = 0$, gdy temperaturę zimnych ścianek T_c obniżano gwałtownie do -10°C lub -15°C (otwarcie zaworu termostatu). W drugim przypadku badano proces odwrotny, podwyższając temperaturę bocznych ścianek izotermicznych do $+10^\circ\text{C}$ obserwowano proces topnienia lodu w całkowicie zamrożonej kuwecie pomiarowej.

Na rys. 2.32 przedstawiono zmierzone położenie podwójnego frontu fazowego (linia ciągła - lewy front, linia przerywana - prawy front) dla wybranych czasów dla dwóch różnych temperatur $T_c = -10^\circ\text{C}$ lub -15°C . Tylko dla początkowych czasów istnieją pewne rozbieżności w prędkości rozchodzenia się frontów, spowodowane prawdopodobnie małymi różnicami temperatury T_c ścianek izotermicznych (nie udało się zapewnić idealnie tej samej temperatury obu ścianek). Prowadziło to do różnicy w czasie w powstawaniu frontu lodu na obu ściankach. Później fronty rozchodziły się prawie symetrycznie, a ich krzywizna była nieznaczna. Zwiększenie wymuszenia $T_c = -10^\circ\text{C}$ do -15°C przy stałym T_p powoduje nie tylko szybsze wnikanie frontu zamarzania, ale także, co jest istotne w praktyce, jego spłaszczenie.



Rys. 2.32. Zamarzanie wody w kuwecie prostokątnej ($T_c = -10^\circ\text{C}$ - lewa strona; $T_c = -15^\circ\text{C}$ - prawa strona). Zmierzone położenie frontów lodu dla wybranych czasów (linia ciągła lewy front, linia przerywana prawy front)

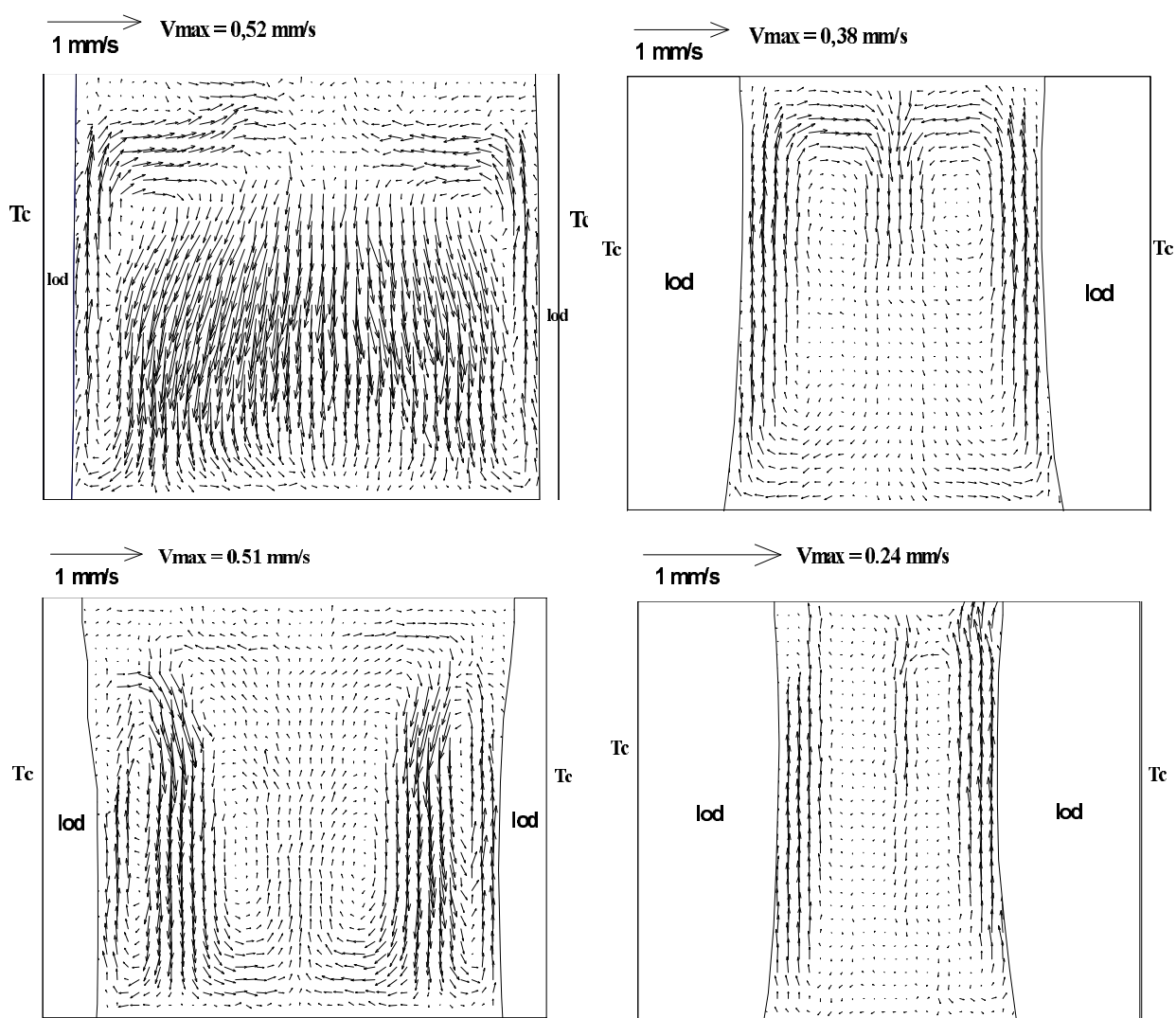


Rys. 2.33. Zmiana objętości fazy stałej (lodu) do całej objętości kuwety pomiarowej w czasie dla dwóch warunków brzegowych $T_c = -10^\circ\text{C}$ i -15°C

Dodatkowo na rys. 2.33 pokazano zmianę objętości fazy stałej (lodu) do całej objętości kuwety pomiarowej w czasie dla dwóch warunków brzegowych $T_c = -10^\circ\text{C}$ i -15°C . Różnice w objętości powstałego lodu (suma objętości z lewej i prawej strony) narastają w miarę postępowania procesu krzepnięcia i dochodzą po 3400 s do 25%.

Rysunek 2.34 ilustruje zmierzone w dwóch chwilach czasowych metodą DPIV wektorowe pola przepływu dla dwóch różnych temperatur ścianek izotermicznych ($T_c = -10^\circ\text{C}$ i -15°C). Dla $t = 500$ s struktury tych pól znacznie się różnią, chociaż można zauważyć w obu przypadkach

dwa wiry, które unoszą się wzdłuż obu frontów lodu. Związane jest to ze zmianą gęstości wody w funkcji temperatury (gęstość wody osiąga maksimum dla 4°C). Struktury pola prędkości dla czasów późniejszych są już identyczne - dwa symetryczne wiry cyrkulujące w przeciwnych kierunkach. O ile dla czasów początkowych maksymalne prędkości wody są do siebie zbliżone i wynoszą około 0.5 mm/s , to już dla czasów późniejszych np. 1900 s dla $T_c = -10^{\circ}\text{C}$ prędkość ta wynosi ok. 0.4 mm/s a dla $T_c = -15^{\circ}\text{C}$ ok. 0.25 mm/s . Oczywiście wiąże się to z postępującym zamarzaniem wody i zmniejszaniem szczeliny pomiędzy frontami lodu, co powoduje zanik cyrkulacji wody - brak konwekcji swobodnej. W końcowym etapie procesu obustronnego zamarzania dominującą rolę odgrywa tylko przewodzenie ciepła.

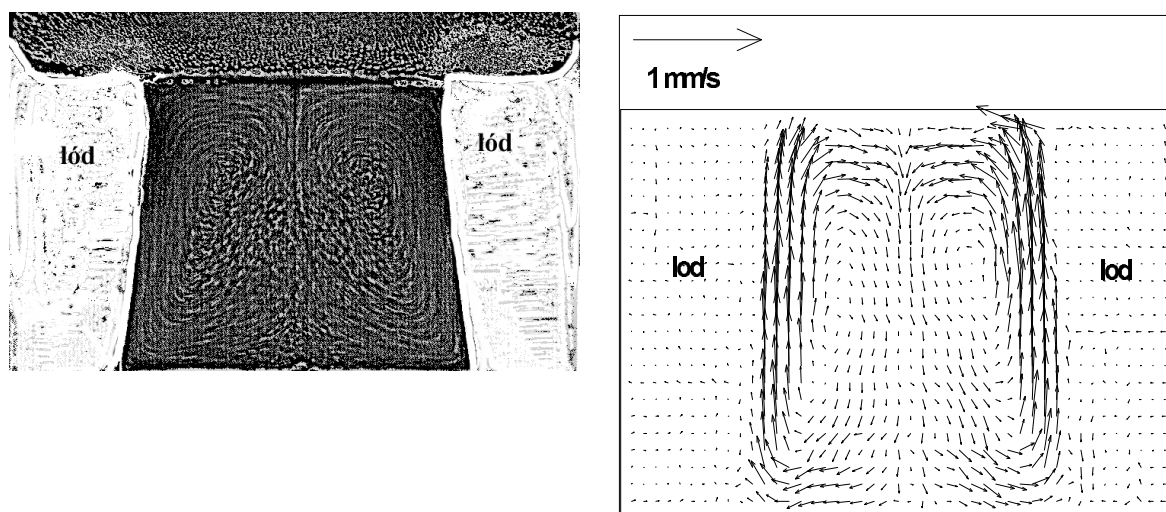


Rys. 2.34. Pole prędkości zmierzone metodą DPIV dla zamarzającej wody w kuwecie prostopadłościenniej ($T_c = -10^{\circ}\text{C}$ - górny rząd i $T_c = -15^{\circ}\text{C}$ dolny rząd) w chwili 500 s (lewa strona) i 1900 s (prawa strona) od uruchomienia chłodzenia ścianek izotermicznych T_c .

Wyniki badania konwekcji swobodnej w obecności podwójnego frontu fazowego w prostopadłościenniej kuwecie wypełnionej wodą w $3/4$ objętości (przypadek z powierzchnią swobodną) zaprezentowano na rys. 2.35. Temperatura T_c ścianek izotermicznych wynosiła -10°C . Na lewej stronie tego rysunku widoczne są tory cząstek powstałe z sumowania 15 obrazów

komputerowych wykonanych co 0,8 s, a na prawej pole prędkości zmierzone metodą DPIV w chwili 1900 s od uruchomienia chłodzenia ścianek izotermicznych. Struktura pola prędkości, jest bardzo podobna do przypadku z kuleką wypełnioną w całości wodą - podwójna cyrkulacja wody. Znaczne różnice są widoczne dla kształtu frontów lodu. Z powodu powierzchni swobodnej lód powstaje również nad tą powierzchnią wypierając do góry wodę. Na rys. 2.9 pokazano kształt powierzchni fazowych tuż przed całkowitym zamarznięciem wody - widać wyraźnie krzywiznę tych powierzchni.

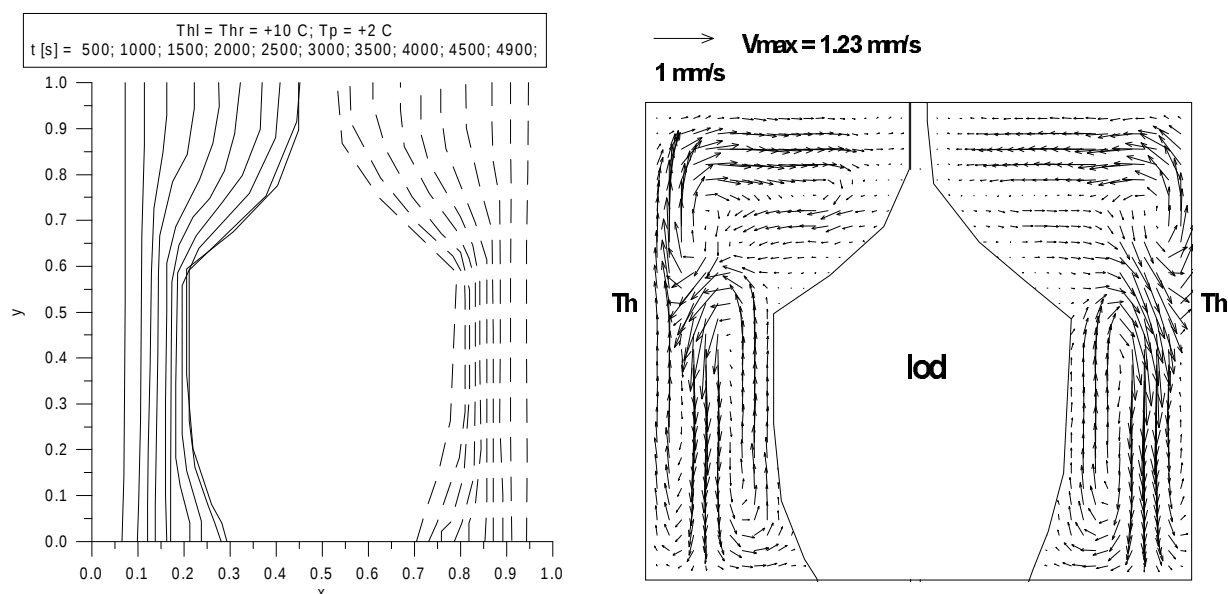
Na rys. 2.36 pokazano wstępne wyniki analizy procesu topnienia lodu w kuwecie prostopadłościowej, której temperatura ścianek izotermicznych $T_s = T_h = +10^\circ\text{C}$, zaś temperatura płaszcza wodnego $T_p = +2^\circ\text{C}$. Przedstawiono zmierzone położenie podwójnego frontu fazowego (linia ciągła - lewy front, linia przerywana - prawy front) dla wybranych czasów oraz pole prędkości zmierzone metodą DPIV w chwili 4900 s od uruchomienia grzania ścianek izotermicznych. Z kształtu frontów fazowych można wnioskować, że konwekcja swobodna „stratuje” dopiero po ok. 1500 s od momentu uruchomienia grzania ścianek izotermicznych T_h . Po obu stronach lodu są widoczne dwa wiry cyrkulujące w przeciwnych stronach. W dolnej części kuwety chłodna woda o temperaturze poniżej 4°C porusza się do góry wzdłuż frontu fazowego. Przy ściankach izotermicznych porusza się woda cieplejsza, która wytapia lód w górnej części kuwety. Powoduje to nierównomierność w topnieniu lodu i znaczną krzywiznę jego frontu.



Rys. 2.35. Tory cząstek - suma 15 obrazów komputerowych wykonanych co 0.8 s (lewa strona) i pole prędkości zmierzone metodą DPIV (prawa strona) dla zamarzającej wody z powierzchnią swobodną w kuwecie prostopadłościowej ($T_c = -10^\circ\text{C}$) w chwili 1900 s od uruchomienia chłodzenia ścianek izotermicznych T_c .

Przeprowadzone badania eksperymentalne, pozwalają lepiej zrozumieć i poznać złożone mechanizmy transportu masy i ciepła występujące podczas konwekcji swobodnej z przemianą fazową (krzepnięcie i topnienie) w prostopadłościowej kuwecie pomiarowej wypełnionej wodą. Pokazane różnice w rozchodzeniu się podwójnego frontu fazowego, objętości fazy stałej (lodu) i struktury przepływu (pole prędkości) dla dwóch różnych temperatur chłodzonych ścianek kuwety $T_c = -10^\circ\text{C}$ i $T_c = -15^\circ\text{C}$. Różnice w objętości powstałego lodu dochodziły po 3400 s do 25%. Zaobserwowano różnice w rozchodzeniu się frontów lodu dla kuwety z powierzchnią swobodną w stosunku do kuwety wypełnionej wodą w całej objętości. W przypadku topnienia lodu w kuwecie prostopadłościowej, której dwie ścianki izotermiczne mają temperaturę $T_h = +10^\circ\text{C}$, ze zmierzonych frontów fazowych można wnioskować, że konwekcja swobodna „stratuje” dopiero po ok. 1500 s od momentu uruchomienia grzania tych ścianek. Zaprezentowane dane mogą być

pomocne do weryfikacji kodów numerycznych zjawiska konwekcji swobodnej z podwójnym frontem fazowym (obustronne, symetryczne chłodzenie lub grzanie) w geometrii prostopadłościennnej.



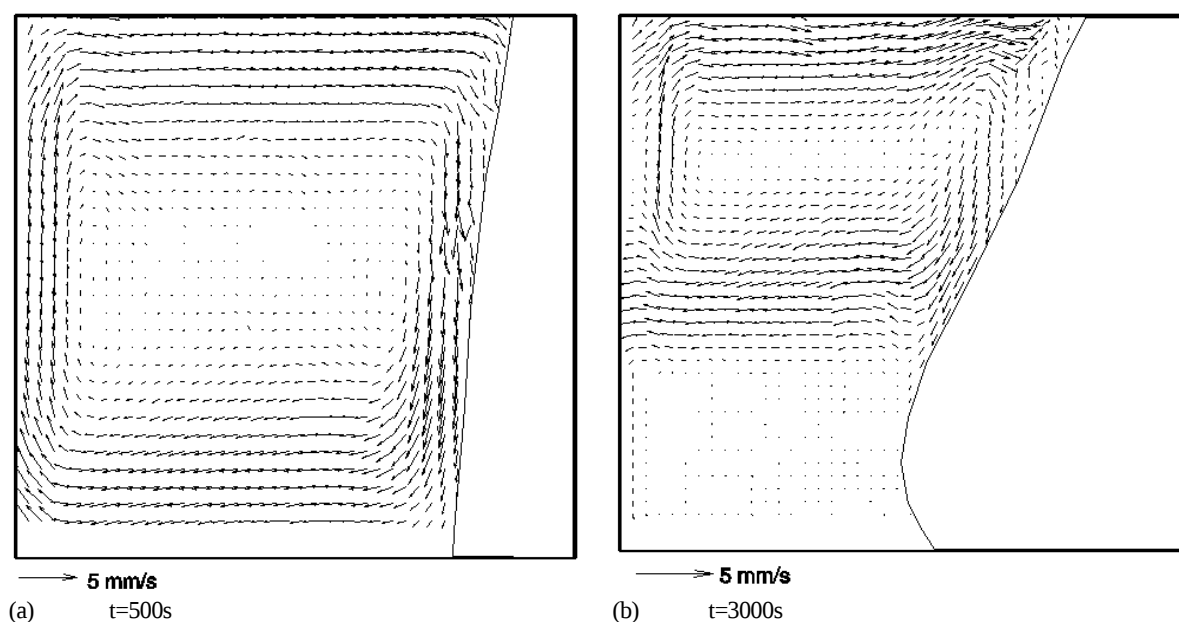
Rys. 2.36. Topnienie lodu w kuwecie prostopadłościennnej ($T_h = +10^{\circ}\text{C}$); zmierzone położenie frontów lodu dla wybranych czasów (linia ciągła lewy front, przerywana prawy front) - lewa strona oraz pole prędkości zmierzone metodą DPIV w chwili 4900 s od uruchomienia grzania ścianek izotermicznych T_h - prawa strona.

Zasadniczym celem wyżej omówionych eksperymentów było stworzenie wzorca eksperymentalnego dla symulacji numerycznych procesów konwekcji naturalnej z przemianą fazową dla układach jednoskładnikowych. Dla porównania rezultatów eksperymentów z obliczeniami numerycznymi zdecydowano się na wybór pierwszej z omówionych konfiguracji, tzn. 38mm kuweta sześcienna w otoczeniu atmosferycznym, o jednej z izotermicznych ścianek utrzymywanej w temperaturze $+10^{\circ}\text{C}$ i przeciwległej ściance o temperaturze -10°C (przypadek #4 w tabeli 3.1). Podobnie jak dla konwekcji naturalnej bez przemiany fazowej, zostały zmierzone lub ustalone na podstawie danych literaturowych własności fizyczne i termodynamiczne elementów układu (woda, lód, ścianki z plexiglasu). Wybrano tzw. „start ciepły” jako warunek początkowy. Wcześniejsza weryfikacja kodów numerycznych dla ustalonej konwekcji pozwala przyjąć, że taki warunek początkowy ułatwi porównanie procesu zamarzania między rezultatami pomiarów i symulacji numerycznych. Pola prędkości, temperatury i położenia frontu fazowego zmierzone w centralnym przekroju kanału dla kroków czasowych 100s, 200s, 1000s, 2000s, 2500s, 3000s i 3600s zostały wybrane jako wzorce do porównań struktur przepływu. Ilościowe porównania prędkości przepływu zaproponowano, podobnie jak dla czystej konwekcji, dla składowej pionowej wyekstrahowanej wzdłuż osi poziomej dla trzech wysokości od dna kanału: 0.25, 0.5 i 0.75. Niektóre z tych rezultatów zostały przedstawione na rys. 2.24, 2.26 i 2.28.

2.2.3. Badanie przemiany fazowej w roztworach binarnych

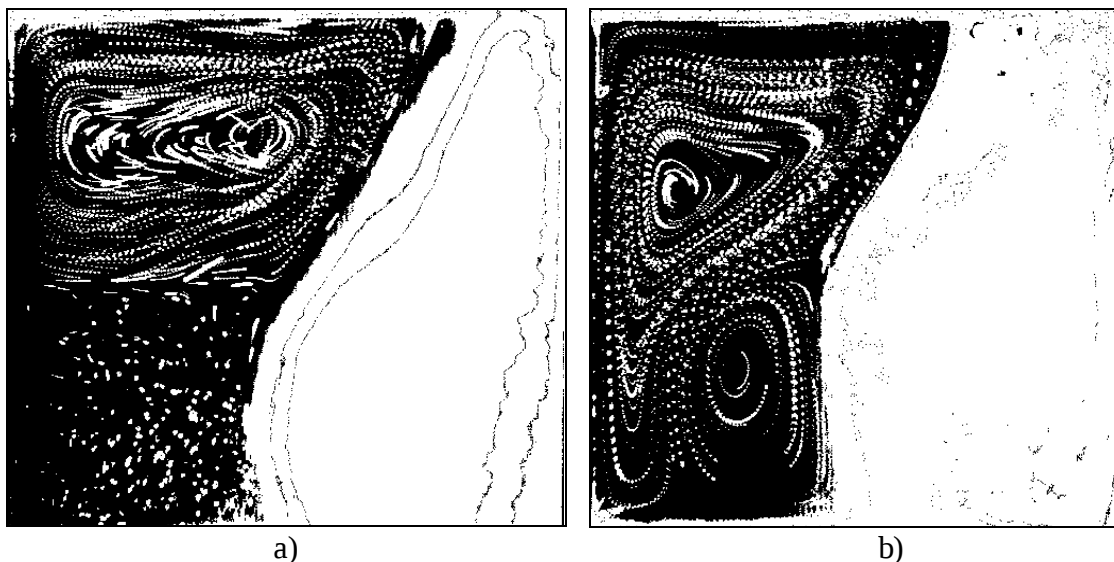
Badania konwekcji naturalnej i konwekcji z przemianą fazową (zamarzanie) przeprowadzono dla 1% roztworu soli kuchennej w naczyniu o geometrii sześcienniej. Pomiary pól prędkości, temperatury i torów cząstek wykonano analogicznie do wyżej opisanych pomiarów dla czystej cieczy. Pomiary stężenia wykonano w osobnych eksperymentach, powtórzonych w analogicznych warunkach.

Stwierdzono złożony charakter przepływu, związany z anomalią gęstości wody, jak również z gradientem koncentracji składnika stałego (soli). Rezultaty badań wskazały na istnienie istotnych różnic w strukturze przepływu roztworu w porównaniu z czystą cieczą. Wskutek obecności soli następuje nie tylko zmiana gęstości i punktu zamarzania cieczy, ale co jest nie mniej istotne, przesunięcie punktu anomalii gęstości.



Rys.2.37 Pola prędkości zmierzone dla zamarzającego 1% roztworu soli (500s i 3000s od chwili początkowej); $T_h=10^{\circ}C$, $T_c=-15^{\circ}C$. Tworzenie się warstwy stagnacyjnej w dolnej części naczynia.

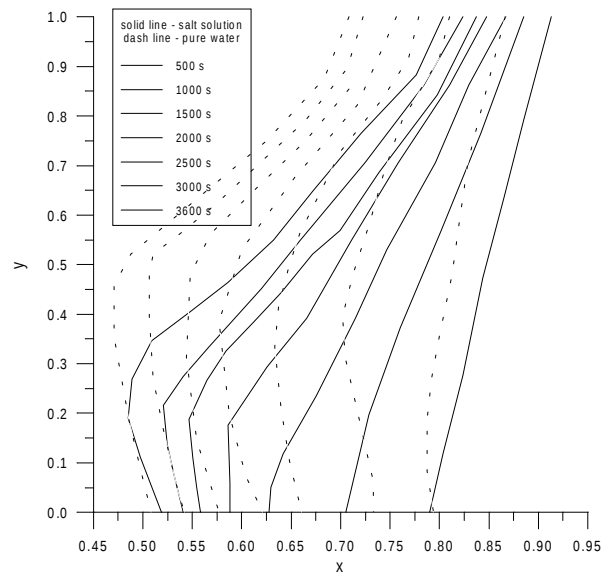
Dla wody maksimum gęstości występuje dla około $4^{\circ}C$, a więc niemal symetrycznie dla badanego zakresu temperatur $0^{\circ}C$ - $10^{\circ}C$, między ścianką zimną a ciepłą. Dla roztworu soli temperatura zamarzania obniża się znacznie wolniej niż punkt maksimum gęstości. I tak dla 1% roztworu soli maksimum gęstości przesuwają się do $2^{\circ}C$, a temperatura zamarzania do $-0.5^{\circ}C$, a dla 2.5% koncentracji obie temperatury wynoszą $-1.5^{\circ}C$ co oznacza brak anomalii gęstości. W rezultacie obserwowany przepływ konwekcyjny dla roztworu charakteryzuje się znacznie silniej rozwiniętą cyrkulacją "normalną" niemal całkowicie wypierającą charakterystyczną cyrkulację anomálną w pobliżu zimnej ścianki. W początkowej fazie zamarzania front fazowy jest płaski z wyraźnym nachyleniem w kierunku ciepłej ścianki (por. rys. 2.37a). Pole prędkości charakteryzuje typowa cyrkulacja cieczy nie posiadającej anomalii gęstości. Wynika to z obniżenia temperatury anomalii gęstości dla roztworu, minimalizującego jak to widać jej wpływ na rozwój przepływu. W miarę upływu czasu widoczna staje się deformacja frontu fazowego dolnej części naczynia. Pole prędkości (rys. 2.37b) wskazuje na wyraźne ograniczenie cyrkulacji cieczy do górnej części naczynia, a tym samym konwekcyjną wymianę ciepła między gorącą ścianką i lodem. Zjawisko to jest związane ze zmianami pola koncentracji soli w przepływie.



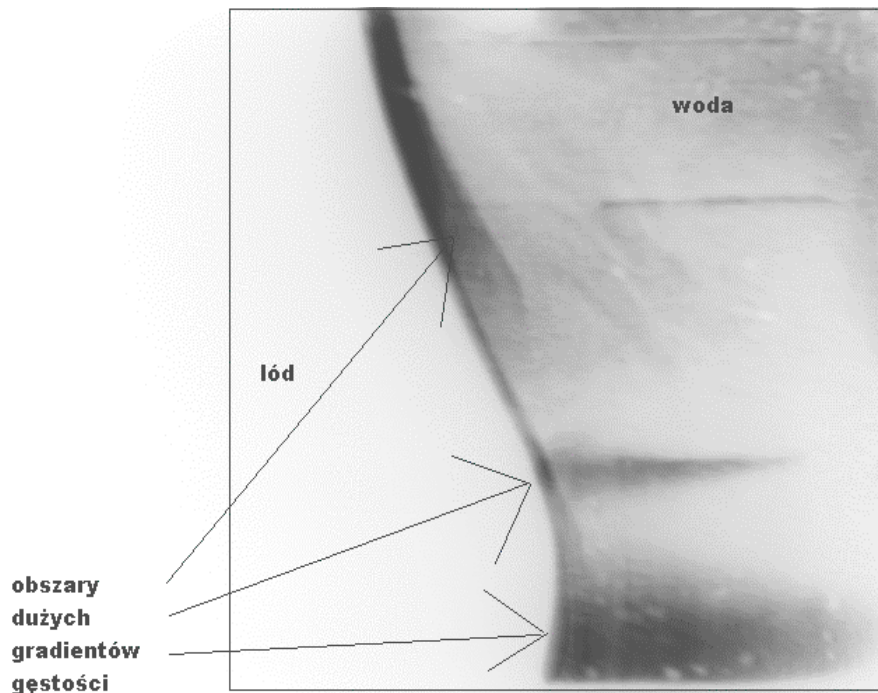
Rys.2.38 Zamarzanie wody (3600s od chwili początkowej); $T_h=10^{\circ}\text{C}$, $T_c=-15^{\circ}\text{C}$; a) tory cząstek dla 1% roztworu soli; b) tory cząstek dla czystej wody. Suma 10 obrazów komputerowych wykonanych co 0.4 s. Wyraźnie widać powstanie warstwy stagnacyjnej w dolnej części naczynia.

Podczas przemiany fazowej ma miejsce dodatkowy efekt, wypierania soli z lodu do roztworu. Powoduje to dodatkowy wzrost koncentracji soli w pobliżu frontu fazowego. Z tym wiąże się lokalny wzrost gęstości roztworu i pojawienie się konwekcji solutalnej, o kierunku przeciwnym do konwekcji termicznej. Oddziaływanie obu przepływów tworzy układ o wyraźnej stratyfikacji. Ilustruje to rys.2.38a, pokazujący obraz torów cząstek dla 1% procentowego roztworu soli obserwowany po 3600s od początku procesu zamarzania. Obraz frontu fazowego wskazuje wyraźnie na istnienie silnej cyrkulacji “normalnej” gorącej cieczy, odpowiedzialnej za znaczne spowolnienie tworzenia się lodu w górnej części komory. W dolnej części komory zarówno anomalna konwekcja termiczna jak i konwekcji solutalna tworzą obszar ograniczający wymianę ciepła. Dodatkowo, w porównaniu z czystą wodą, stosunkowo ciężki roztwór soli wypychanej z lodu gromadzi się w okolicy dna naczynia tworząc grubą warstwę stagnacyjną. Na pokazanym zdjęciu, warstwa ta osiąga niemal połowę wysokości komory. Zamieszczony obok (rys. 2.38b) dla porównania obraz torów cząstek w czystej cieczy otrzymany dla tych samych warunków eksperymentalny pokazuje występowanie podwójnej konwekcji, z anomalną i normalną cyrkulacją. Tą typową dla problemu zamarzania wody konfigurację omawiano w poprzednim rozdziale.

Obserwując kształt frontu fazowego i jego zmiany w czasie wyraźnie widać zmiany wywołane wpływem zmian koncentracji i konwekcji solutalnej. Rys. 2.39 pokazuje różnice kształtu frontu fazowego jakie zarejestrowano w eksperymentach przeprowadzonych w tych samych warunkach dla czystej wody i 1% roztworu soli. Całkowity przyrost masy lodu dla czystej wody jest w tych warunkach wyraźnie większy. Uwidacznia się to głównie w górnej i środkowej części frontu fazowego, gdzie konwekcyjny transport ciepła odgrywa decydującą rolę w bilansie ciepłym na granicy faz. W dolnej części naczynia, konwekcyjny transport ciepła od ścianki gorącej jest istotnie ograniczony wskutek anormalnej cyrkulacji wody (dla czystej cieczy) lub stratyfikacji cieczy dla roztworu. Powoduje to, że przyrost fazy stałej regulowany w dolnej części głównie dyfuzyjnym transportem ciepła jest niemal identyczny dla obu przypadków.



Rys.2.39. Zmiana w czasie frontu zamarzania zmierzona dla czystej wody (linie przerywane) i 1% roztworu soli (linie ciągłe).

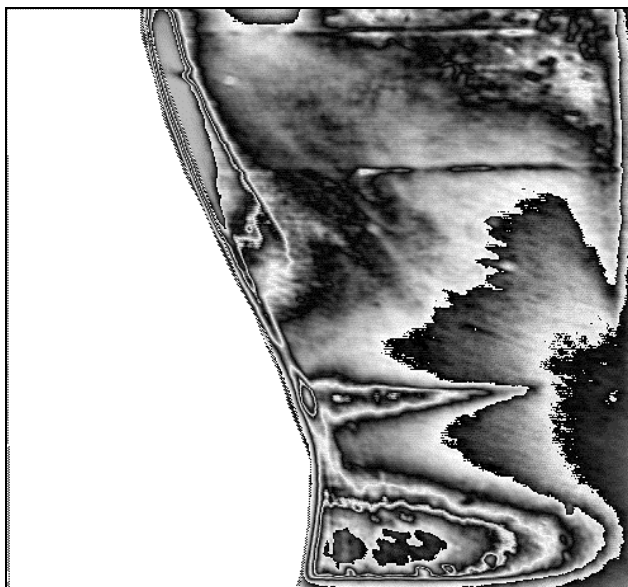


Rys. 2.40 Obraz Schlierena dla konwekcji 1% roztworu soli. Tworząca się warstwa lodu powoduje wypieranie soli i wzrost jej koncentracji w pobliżu frontu fazowego. Stan dla $t=3000s$ od chwili początkowej; $T_h=10^\circ C$, $T_c=-15^\circ C$.

Obrazy Schlierena otrzymane w analogicznych warunkach potwierdzają obecność silnych gradientów koncentracji soli w pobliżu frontu fazowego i dna naczynia. Rys. 2.40 pokazuje obraz otrzymany tą techniką dla 1% roztworu soli dla 3000s od chwili rozpoczęcia procesu zamarzania.

Obraz Schlierena jest wynikiem uśrednienia efektów zmian współczynnika załamania światła wzdłuż drogi optycznej. Ilościowa interpretacja obrazów Schlierena wymaga zatem przyjęcia, że rozkład ten nie zmienia się w trzecim wymiarze, tzn. w kierunku prostopadłym do płaszczyzny obserwacji. Duże znaczenie ma również równomierność i równoległość wiązki

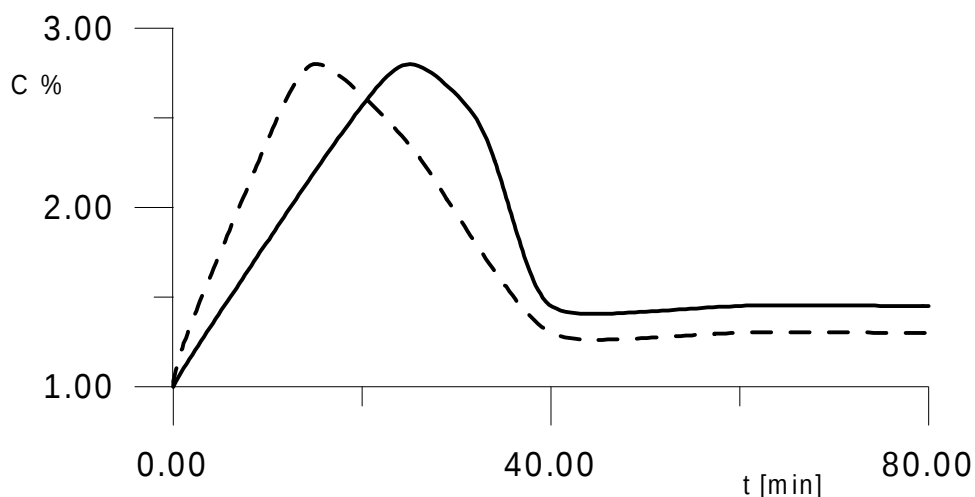
światła oświetlającej obiekt. W przeprowadzonych eksperymentach warunki optyczne nie pozwoliły na uzyskanie jednoznacznej interpretacji stopni szarości obrazów w funkcji stężenia soli. Z tego też względu ich analizę ograniczono do informacji jakościowych. Dla zwizualizowania obszarów dużych zmian koncentracji zastosowano komputerowe metody obróbki obrazów, głównie przez dobór odpowiedniej filtracji i zastosowanie nieliniowych charakterystyk intensywności obrazu.



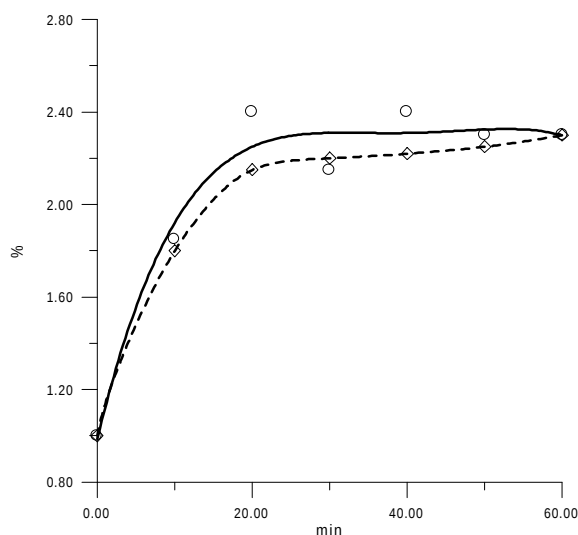
Rys 2.41. Przetworzony obraz Schlierena, izolinie gradientu koncentracji soli wskazują na tworzenie się obszarów stratyfikacji roztworu.

Rys.2.41 pokazuje przetworzony obraz Schlierena, podkreślając obszary o dużych gradientach koncentracji. Można zauważyć, że wzrost koncentracji ma miejsce nie tylko w pobliżu dna naczynia, ale i w jego centralnej części oraz w mniejszym stopniu na $\frac{1}{4}$ wysokości od górnej ścianki. Świadczy to o powstaniu lokalnych obszarów koncentrowania się soli wskutek bilansowania się cyrkulacji termicznej i solutalnej.

Ilościowe określenie koncentracji soli metodą obrazową nie jest możliwe bez dodatkowych informacji lokalnych. Dane takie dostarczyły pomiary rezystancyjne wykonane dla kilku wybranych punktów przepływu. Pomiary kalibracyjne wykonano z zastosowaniem sond z elektrodami z drutu srebrzonego w serii badań dla przepływu w komorze sześcienniej, w której temperatura ścianek izotermicznych wynosiła odpowiednio $T_h=5^{\circ}\text{C}$ i $T_c=-5^{\circ}\text{C}$. Stężenie początkowe roztworu wynosiło 1% NaCl w H_2O wagowo. Przykładowy wynik tych pomiarów pokazano na rys.2.42. Możemy zauważyć, że podczas procesu zamarzania wskutek wypierania soli z tworzącego się lodu koncentracja soli w roztworze początkowo gwałtownie wzrasta. Jednak po około 30 minutach koncentracja w punktach pomiarowych ponownie maleje. Ten spadek koncentracji jest prawdopodobnie wywołany silną stratyfikacją przepływu, ze stagnacyjną warstwą wysokiej koncentracji zalegającej dno naczynia i obszarem intensywnej cyrkulacji cieczy o mniejszej koncentracji soli w górnej części naczynia. Intensywność przyprływu konwekcyjnego jest funkcją wymiaru obszaru i różnicy temperatur (liczba Rayleigh'a). Dla zakresu temperatur występującego w tych badaniach ($T_h=5^{\circ}\text{C}$ i $T_c=-5^{\circ}\text{C}$), przepływ konwekcyjny praktycznie zamiera po utworzeniu się początkowej warstwy lodu, znacznie zmniejszając proces mieszania się obszarów o różnej koncentracji soli.



Rys.2.42. Wyniki pomiaru stężeń w funkcji czasu dla dwu elektrod umieszczonych na bezwymiarowej wysokości 0.25 od dna naczynia. Elektroda 1 (linia przerywana) umieszczona jest w bezwymiarowej odległości 0.1 od ścianki gorącej; elektroda 2 (linia ciągła) w bezwymiarowej odległości 0.36 od tej ścianki. $T_H = 5^\circ\text{C}$, $T_C = -5^\circ\text{C}$ i koncentracji soli $C_o = 1\%$



Rys. 2.43 Zmiana koncentracji soli w funkcji czasu dla dwu elektrod umieszczonych na wysokości 0.25 od dna naczynia. Elektroda 1 (linia przerywana) umieszczona jest w odległości 0.1 od ścianki gorącej; elektroda 2 (linia ciągła) w odległości 0.36 od tej ścianki. $T_H = 10^\circ\text{C}$, $T_C = -15^\circ\text{C}$ i koncentracji soli $C_o = 1\%$.

Pomiary zmian koncentracji soli w czasie podczas tworzenia się lodu powtórzono dla zakresu temperatur $T_H = 10^\circ\text{C}$, $T_C = -15^\circ\text{C}$ i koncentracji soli $C_o = 1\%$ uzyskując rezultat pokazany na rys.2.43. W tym przypadku po początkowym wzroście koncentracji roztworu, jego wartość utrzymuje się na stałym poziomie. Przepływ konwekcyjny ustala się po około 30 min, dalszy przyrost lodu a więc wzrost koncentracji soli ustaje. Niemniej intensywna konwekcja termiczna w górnej części naczynia (por. rys. 2.38a) zapobiega zbyt silnej stratyfikacji roztworu w tym obszarze.

3. Modelowanie procesów transportu energii i składników w obszarze dwufazowym

Podczas krzepnięcia roztworów dwuskładnikowych bardzo często tworzy się obszar dwufazowy (tzw. "mushy zone") zawierający w różnych proporcjach fazę ciekłą i stałą. Obszar ten może wypełniać znaczną część objętości układu dwuskładnikowego [1], [23], [24]. Rozkład składników we wspomnianym obszarze dwufazowym, w przypadku stopów, decyduje o jakości wyrobu końcowego. Na rozkład składników w "mushy zone" wpływa rozkład temperatury, procesy transportu energii i składników, jak również charakter przepływu fazy ciekłej w tym obszarze. Ze względu na bardzo złożoną mikrostrukturę rozłożenia fazy ciekłej i stałej oraz różnice właściwości faz obszar dwufazowy traktowany jest jako ośrodek niejednorodny. Ma on jednak pewną specyfikę odróżniającą go od innych materiałów niejednorodnych (kompozytów, ośrodków ziarnistych czy porowatych), a mianowicie udział fazy stałej w tym obszarze ulega silnym zmianom od wartości równej jedności w pobliżu powierzchni obszaru całkowicie zestalonego do zera na powierzchni oddzielającej obszar dwufazowy od czystej fazy ciekłej [1], [16]. Ponadto procesom transportu występującym wewnątrz poszczególnych faz w "mushy zone" towarzyszy wzajemne oddziaływanie faz oraz występowanie przemiany fazowej z wydzielaniem ciepła na granicach międzyfazowych. A zatem omawiany obszar dwufazowy może być traktowany jako ośrodek niejednorodny z wewnętrznymi, lokalnymi źródłami ciepła [9].

Złożona mikrostruktura obszaru dwufazowego powoduje, że do analizy przepływu ciepła i masy w takim ośrodku używa się zwykle opisu makroskopowego, w którym wygładzane są lokalne różnice w wartościach temperatur i stężeń składników spowodowane np. obecnością dendrytów. W związku z tym, zanim przeprowadzone zostaną jakiekolwiek przewidywania teoretyczne dotyczące rozkładu składników w obszarze dwufazowym, konieczne jest opracowanie odpowiedniego modelu opisującego zjawiska transportu energii i masy na poziomie makroskopowym. Proces zastępowania mikroskopowych procesów transportu w obszarze dwufazowym opisem makroskopowym procesów transportu, zachodzących w ośrodku o stałych lub zmiennych w sposób ciągły efektywnych właściwościach, nazywany jest homogenizacją [8]. Przy zastosowaniu tej metody opisu należy rozwiązać dwa podstawowe problemy: (1) jaką postać mają równania opisujące makroskopowe procesy transportu w "mushy zone" oraz (2) jak wyznaczyć efektywne właściwości zastępczego ośrodka ciągłego?

Stosowane są różne metody tworzenia równań opisujących procesy transportu w ośrodkach niejednorodnych na poziomie makroskopowym, takie jak metody spektralne, wariacyjne, objętościowe - oparte na uśrednieniu po objętości elementarnej, statystyczne - oparte na uśrednianiu po zbiorze różnych realizacji mikrostruktury ośrodka. Spośród wymienionych metod dwie ostatnie zasługują na specjalną uwagę.

Metoda oparta o uśrednienia objętościowe ("volume averaging") po objętości elementarnej jest najczęściej używana w zagadnieniach krzepnięcia roztworów dwuskładnikowych [2], [12], [16], [17], [19]. Metoda ta wykorzystuje pojęcie objętości elementarnej reprezentatywnej dla całego "mushy region" (representative elementary volume - REV). Dla ośrodków niejednorodnych o strukturze periodycznej REV odpowiada komórce elementarnej. Dla ośrodków niejednorodnych o nieregularnej strukturze jest ona definiowana nieprecyzyjnie jako dużo większa od wielkości opisujących strukturę ośrodka niejednorodnego na poziomie mikroskopowym (wielkość ziarn, dendrytów, itp.) i jednocześnie dużo mniejsza od wymiarów całego ośrodka niejednorodnego. Makroskopowe wielkości polowe występujące w równaniach przepływu energii i składników są rozumiane jako uśrednione objętościowo po objętości

elementarnej i odnoszone do jej geometrycznego środka. Przy stosowaniu tej metody mówienie o zmienności polowych wielkości makroskopowych (temperatura, stężenie) na odległości mniejszej od wymiaru REV jest pozbawione sensu. Ograniczenia metody opartej na uśrednianiu objętościowym uświadamiane są przez niektórych badaczy i proponowane są różne sposoby usunięcia tych ograniczeń [18]. W przypadku obszaru dwufazowego, występującego w zagadnieniu krzepnięcia roztworów, ograniczenia te są silniejsze. W "mushy zone" trudno jest bowiem znaleźć objętość elementarną reprezentatywną dla całego obszaru dwufazowego, gdyż udział faz ulega w nim ciągłej zmianie. Ponadto wymiary REV, podawane w literaturze [1], sięgają centymetrów, co w praktyce może być zbliżone do wymiarów całego rozpatrywanego obszaru dwufazowego. Dodatkową trudność sprawia wyznaczenie efektywnych właściwości zależnych od mikrostruktury obszaru dwufazowego i właściwości faz. Z tego powodu wykorzystywane są najprostsze zależności nie uwzględniające wpływu mikrostruktury.

Jednym z naistotniejszych problemów, na które natrafia metoda oparta na uśrednieniu objętościowym w REV jest uwzględnienie, w równaniach makroskopowych, braku lokalnej równowagi termodynamicznej (termicznej lub fazowej) w obszarze dwufazowym. Proponowane są więc różne dodatkowe modele uproszczone, tzw. *modele dyfuzji*, wiążące średnie stężenia składników z ich udziałem objętościowym i temperaturą. Modele te nie uwzględniają na ogół faktu, że pojęcie równowagi termicznej i fazowej w przypadku mikro- i makroskopowym nieco się różni. W przypadku opisu *mikroskopowego* równowaga termodynamiczna wymaga równomierności rozkładu stężenia składników i temperatury w obu fazach przy spełnianiu równości temperatury i odpowiedniej relacji stężeń składników na granicy międzyfazowej. W przypadku opisu *makroskopowego*, dotyczącego zastępczego ośrodka ciągłego o pewnych efektywnych właściwościach, warunek lokalnej równowagi termodynamicznej wymaga jedynie równości średnich temperatur faz oraz odpowiedniej relacji między średnimi stężeniami składników w obu fazach tak, aby nie występowała między nimi wymiana netto ciepła i masy. Warunek ten może być spełniony nawet jeśli na poziomie mikroskopowym występują rozkłady temperatury i stężeń składników w obszarze elementarnym wiążące się z wymianą ciepła i masy w fazach i między nimi.

Metoda oparta o uśrednieniu statystycznym po zbiorze różnych realizacji mikrostruktury ośrodka ("ensemble averaging") [5], [8], [11], [20] wywodzi się z teorii procesów stochastycznych i pól losowych [3], [4], [13], [14]. Była ona z sukcesem zastosowana do analizy różnych zjawisk transportu zachodzących w ośrodkach niejednorodnych. Nie była jednak dotąd wykorzystywana w zagadnieniach krzepnięcia układów dwuskładnikowych. Podczas realizacji badań podjęto pierwszą próbę jej aplikacji w celu znalezienia równań makroskopowego opisu procesów transportu w obszarze dwufazowym wypełnionym roztworem dwuskładnikowym. Omawiana metoda nie wymaga istnienia objętości elementarnej reprezentatywnej dla całego ośrodka. Zarówno makroskopowe wielkości polowe jak i właściwości efektywne ośrodka są w tej metodzie traktowane jako średnie statystyczne (wartości oczekiwane). Nawet w przypadku gdy w ośrodku niejednorodnym można wyróżnić REV, metody oparte o uśrednienie objętościowe i statystyczne na ogół prowadzą do innych wyników.

W następnych podrozdziałach tej części opracowania przedstawiono kolejno: podstawowe pojęcia i definicje metody opartej na uśrednieniach statystycznych, wyprowadzenie makroskopowych równań opisujących przepływ składników w obszarze dwufazowym, problem lokalnej równowagi fazowej przy opisie makroskopowy procesu krzepnięcia, wyprowadzenie makroskopowego równania energii dla obszaru dwufazowego oraz dyskusję lokalnej równowagi termicznej. W przedostatnim podrozdziale omówiono teoretyczny sposób wyznaczania udziału objętościowego faz w "mushy zone" w warunkach równowagi termodynamicznej, który może zastąpić dotychczasowe modele (opisane w literaturze), gdzie udziały objętościowe wyznaczane

były z empirycznej zależności entalpii (lub gęstości roztworu w obszarze dwufazowym) od temperatury. Rozdział zamknięto najistotniejszymi wnioskami wynikającymi z przeprowadzonych rozważań.

3.1. Podstawowe pojęcia i definicje w metodzie uśrednień statystycznych po zbiorze realizacji mikrostruktury ośrodka dwufazowego

Założono, że proces krzepnięcia roztworu dwuskładnikowego zachodzi w objętości V zawierającej dwie fazy - stałą (S) i ciekłą (L). Pewien zestaw charakterystycznych punktów, które mogą być traktowane jako miejsca nukleacji nowej fazy, jest rozmieszczony w całej rozpatrywanej objętości roztworu. Jakikolwiek przestrzenny rozkład tych punktów jest uważany za odrębną konfigurację Ω tak, że utworzony jest zbiór konfiguracji charakterystycznych punktów. Gęstość prawdopodobieństwa związaną z tym zbiorem konfiguracji oznaczono jako $p(\Omega)$.

Miejsce nukleacji, w odpowiednich warunkach, może stać się miejscem powstania fazy stałej. Dla dowolnej chwili czasu t i dowolnej konfiguracji Ω rozkładu punktów charakterystycznych, rozkład faz w układzie opisany jest przez tzw. *funkcję struktury* [8]

$$\theta_i = \theta_i(t, \mathbf{x}|\Omega) = \begin{cases} 1 & \text{for } \mathbf{x} \in V_i \\ 0 & \text{for } \mathbf{x} \notin V_i \end{cases}$$

gdzie symbol V_i oznacza objętość wypełnioną i -tą fazą.

Następnie wprowadzono pewną uogólnioną zmienną zdefiniowaną jako

$$f(t, \mathbf{x}|\Omega) = \theta_S(t, \mathbf{x}|\Omega) f_S(t, \mathbf{x}|\Omega) + \theta_L(t, \mathbf{x}|\Omega) f_L(t, \mathbf{x}|\Omega) \quad (3.1)$$

która pozwala zapisać rozpatrywane dalej równania w jednolitej formie.

Przed wyprowadzeniem równań opisujących makroskopowe procesy transportu składników i energii użyteczne jest zdefiniowanie dwóch wielkości średnich. Pierwszą z nich jest *wielkość makroskopowa funkcji* f

$$\{f(t, \mathbf{x})\} = \int f(t, \mathbf{x}|\Omega) p(\Omega) d\Omega \quad (3.2)$$

która jest rozumiana jako wielkość oczekiwana w sensie statystycznym. Jeśli za funkcję f przyjmie się funkcję struktury θ_i wtedy jej wielkość makroskopowa jest równa udziałowi objętościowemu i -tej fazy

$$\{\theta_i(t, \mathbf{x})\} = \varepsilon_i(t, \mathbf{x}) \quad (3.3)$$

Drugą średnią stanowi *fazowa wielkość makroskopowa* $\{f\}_i$ zdefiniowana wyrażeniem

$$\{\theta_i(t, \mathbf{x}) f(t, \mathbf{x})\} = \varepsilon_i(t, \mathbf{x}) \{f(t, \mathbf{x})\}_i \quad (3.4)$$

która odpowiada wartości oczekiwanej funkcji f ale w i -tej fazie.

Makroskopowe wielkości podstawowych zmiennych termodynamicznych jak temperatura T i masowe stężenie substancji rozpuszczonej C mogą być zatem wyrażone jako

$$\{T(t, \mathbf{x})\} = \varepsilon_S(t, \mathbf{x}) \{T(t, \mathbf{x})\}_S + \varepsilon_L(t, \mathbf{x}) \{T(t, \mathbf{x})\}_L \quad (3.5)$$

$$\{C(t, \mathbf{x})\} = \varepsilon_S(t, \mathbf{x}) \{C(t, \mathbf{x})\}_S + \varepsilon_L(t, \mathbf{x}) \{C(t, \mathbf{x})\}_L \quad (3.6)$$

podczas gdy makroskopowa prędkość fazy ciekłej w ośrodku, kiedy faza stała uważana jest za nieruchomą, opisana jest zależnością

$$\{\mathbf{w}(t, \mathbf{x})\} = \varepsilon_L(t, \mathbf{x}) \{\mathbf{w}(t, \mathbf{x})\}_L$$

Jedną ze specyficznych cech metody uśredniania po zbiorze konfiguracji jest to, że operator uśredniania statystycznego jest przemienny z operatorami różniczkowania po zmiennej przestrzennej $\mathbf{x}$ i po czasie t [11]. Spowodowane jest to niezależnością gęstości prawdopodobieństwa $p(\Omega)$ od położenia i czasu.

Problem relacji między wielkościami makroskopowymi otrzymywanymi przy pomocy metody uśredniania statystycznego i metody uśredniania objętościowego rozpatrywano w wielu pracach [4], [8], [11], [13], [20], [22]. Stwierdzono, że w tych przypadkach, gdy istnieje reprezentatywna, elementarna objętość ośrodka (REV) jest możliwe porównanie rezultatów uzyskanych z zastosowania wymienionych metod korzystając z tzw. *twierdzenia ergodycznego* [3], [11], [20]. Wtedy kiedy ono obowiązuje, tzn. gdy makroskopowe pola są stacjonarne, wielkości makroskopowe otrzymane przy pomocy uśredniania objętościowego mogą być przyrównane do wielkości uzyskanych poprzez uśrednianie statystyczne. Występuje jednak wiele przypadków kiedy warunek stacjonarności pola nie jest prawdziwy i to nawet wtedy gdy w rozpatrywanym ośrodku można wyróżnić elementarną objętość reprezentatywną. Na przykład podczas występowania stanów nieustalonych wymiany ciepła (kiedy nie cała objętość REV podlega oddziaływaniu cieplnemu), w pobliżu zewnętrznych granic ośrodka lub blisko powierzchni solidus czy liquidus (gdzie mikroskopowe właściwości ośrodka ulegają silnej zmianie, w miejscach gdzie występują lokalne źródła ciepła lub gdzie ulega zmianie mikrostruktura ośrodka („mushy zone”). W tych wszystkich przypadkach, w celu prawidłowego zastosowania twierdzenia ergodycznego, konieczne jest znalezienie miejsc gdzie obowiązuje warunek stacjonarności. Mogą to być, na przykład, powierzchnie równoległe do powierzchni solidus czy liquidus, po których należy przeprowadzić całkowanie przestrzenne [8], [22].

3.2. Makroskopowe równanie stężenia substancji rozpuszczonej

Przy założeniu obowiązywania prawa Ficka równanie opisujące dyfuzję substancji rozpuszczonej w każdej z faz można zapisać w sposób następujący

$$\partial_t(\rho C) + \nabla \cdot (\mathbf{w}\rho C + \mathbf{j}) = 0 \quad (3.7)$$

Ponieważ stężenie C substancji rozpuszczonej jest nieciągłe na granicach międzyfazowych, wygodne jest użycie pojęcia rozpuszczalności tego składnika M zdefiniowanej jako

$$M(t, \mathbf{x}|\Omega) = \theta_S(t, \mathbf{x}|\Omega) \kappa + \theta_L(t, \mathbf{x}|\Omega) \quad (3.8)$$

gdzie κ stanowi współczynnik podziału na granicy międzyfazowej (“partition factor”) równy $\kappa = C_S / C_L$. Iloczyn rozpuszczalności i stężenia pozostaje funkcją ciągłą przy przejściu przez granicę międzyfazową. Spostrzeżenie to pozwala na zapisanie prawa Ficka na gęstość strumienia $\mathbf{j}$ masy substancji rozpuszczonej w następującej, alternatywnej formie:

$$\mathbf{j} = -(D/M) \nabla(MC) \quad (3.9)$$

gdzie

$$D(t, \mathbf{x}|\Omega) = \theta_S(t, \mathbf{x}|\Omega) D_S + \theta_L(t, \mathbf{x}|\Omega) D_L$$

stanowi uogólniony współczynnik dyfuzji substancji rozpuszczonej.

Po uśrednieniu statystycznym równanie (3.7) przyjmuje postać

$$\partial_t\{\rho C\} + \nabla \cdot \{\mathbf{w}\rho C + \mathbf{j}\} = 0 \quad (3.10)$$

W celu otrzymania ostatecznej formy równania na makroskopowe stężenie substancji rozpuszczonej wielkości uśrednione statystycznie, występujące w powyższym równaniu, powinny być uzależnione od makroskopowego stężenia $\{C\}$. Związki te można by było łatwo uzyskać

jeśliby znana była zależność mikroskopowego stężenia C składnika od odpowiedniego stężenia makroskopowego. Aby otrzymać taką zależność mikroskopowe stężenie przedstawiono jako

$$C = P_{eq}\{C\} + C' \quad (3.11)$$

gdzie P_{eq} jest *funkcją równowagi fazowej* a C' oznacza fluktuację stężenia. Formalną zależność między C i $\{C\}$ może być wyprowadzona, przy pomocy teorii funkcji Greena, w sposób identyczny jak przedstawiony w [8] a końcowe wyrażenie przedstawione w postaci

$$(MC) = \{MC\} + \int_0^t \int_V \varphi_C \cdot \nabla' \{MC\} dV' d\tau + \int_0^t \int_V \psi_C \partial_\tau \{MC\} dV' d\tau \quad (3.12)$$

Funkcje φ_C i ψ_C spełniają następujące równania całkowo-różniczkowe:

$$\begin{aligned} \varphi_C = & \int_0^t \int_V \nabla G \cdot [(\mathbf{w}\rho)' \varphi_C - D'(\mathbf{1}\delta_t \delta_x + \nabla \varphi_C) - \{(\mathbf{w}\rho)' \varphi_C - D'(\mathbf{1}\delta_t \delta_x + \nabla \varphi_C)\}] dV' d\tau + \\ & - \int_0^t \int_V G [(\mathbf{w}\rho)' \delta_t \delta_x + \rho'(\partial_\tau \varphi_C + \varphi_C \delta_\tau) - \{(\mathbf{w}\rho)' \delta_t \delta_x + \rho'(\partial_\tau \varphi_C + \varphi_C \delta_\tau)\}] dV' d\tau \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} \psi_C = & \int_0^t \int_V \nabla G \cdot [(\mathbf{w}\rho)' \psi_C - D' \nabla \psi_C] - \{(\mathbf{w}\rho)' \psi_C - D' \nabla \psi_C\} dV' d\tau + \\ & - \int_0^t \int_V G [\rho'(\partial_\tau \psi_C + \psi_C \delta_\tau + \delta_\tau \delta_x) - \{\rho'(\partial_\tau \psi_C + \psi_C \delta_\tau + \delta_\tau \delta_x)\}] dV' d\tau \end{aligned} \quad (3.14)$$

gdzie:

$$(\mathbf{w}\rho)' = \mathbf{w}\rho / M - \mathbf{w}_r \rho_r,$$

$$D' = D / M - D_r,$$

$$\rho' = \rho / M - \rho_r$$

Indeks dolny r , w powyższych definicjach, oznacza pewną wielkość odniesienia związaną z funkcją Greena G podczas gdy δ_t, δ_x stanowią pseudofunkcje Dirac'a.

Używając równań (3.11) i (3.12) oraz założenia $\{MC\} = \text{const}$ możliwe jest wyprowadzenie następującego wyrażenia na funkcję równowagi fazowej

$$P_{eq}(t, \mathbf{x} | \Omega) = \theta_s(t, \mathbf{x} | \Omega) \kappa / (\varepsilon_L + \kappa \varepsilon_s) + \theta_L(t, \mathbf{x} | \Omega) / (\varepsilon_L + \kappa \varepsilon_s) \quad (3.15)$$

Podstawienie zależności (3.12) do wielkości uśrednionych statystycznie i występujących w równaniu (3.10) pozwala ostatecznie na przedstawienie tych wielkości w formie

$$\{\mathbf{w}\rho C + \mathbf{j}\} = \{\mathbf{w}\}(\rho P_{eq})_L \{C\} - \int_0^t \int_V D_{ef} \cdot \nabla' \{C\} dV' d\tau - \int_0^t \int_V \nu_{Cef} \partial_\tau \{C\} dV' d\tau \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} \{\rho C\} = & \{MP_{eq}\}[\{\rho / M\}\{C\} + \int_0^t \int_V \zeta_{ef} \cdot \nabla' \{C\} dV' d\tau + \\ & + \int_0^t \int_V \mu_{ef} \partial_\tau \{C\} dV' d\tau] \end{aligned} \quad (3.17)$$

gdzie

$$D_{ef} = \{DP_{eq}(\mathbf{1}\delta_x \delta_t + \nabla \varphi_C)\} - (\rho / M)_L \{MP_{eq}\} \{\theta_L \mathbf{w} \varphi_C\} \quad (3.18)$$

$$\nu_{Cef} = \{DP_{eq} \nabla \psi_C\} - (\rho / M)_L \{MP_{eq}\} \{\theta_L \mathbf{w} \psi_C\}$$

$$\zeta_{ef} = \{\rho / M \varphi_C\}$$

$$\mu_{ef} = \{\rho / M \psi_C\}$$

Związki (3.16) i (3.17) między omawianymi wielkościami uśrednionymi a makroskopowym stężeniem są zatem nielokalne. Nielokalność oznacza, na przykład, że makroskopowy strumień masy w rozpatrywanym punkcie ośrodka dwufazowego zależy nie tylko od makroskopowego stężenia substancji rozpuszczonej w tym samym punkcie i chwili czasu ale od rozkładu makroskopowego stężenia tego składnika w całej objętości ośrodka występującego zarówno w tej samej chwili czasu jak i od rozkładu makroskopowego stężenia występującego w przeszłości (tzn. zależy od historii procesu) [8], [14]. Człony w związkach (3.16) i (3.17), które zawierają

pochodne $\partial_t\{C\}$ są związane z zjawiskami relaksacyjnymi makroskopowej gęstości strumienia masy substancji $\{j\}$ i objętościowego stężenia $\{\rho C\}$. Należy podkreślić, że pewna część konwekcyjnego strumienia masy jest rozpraszana i na poziomie opisu makroskopowego prędkość cieczy pojawia się w wyrażeniach (3.18). Symbole $D_{ef}, v_{ef}, \zeta_{ef}, \mu_{ef}$ stanowią efektywne właściwości obszaru dwufazowego (“mushy zone”) i, zgodnie z definicją, mogą być wyznaczone ze znajomości właściwości ciała stałego i cieczy oraz mikrostruktury obszaru dwufazowego, która ukryta jest w funkcjach mikrostruktury φ_C, ψ_C .

W obszarze dwufazowym występuje wiele skal długości. Związane są one ze szczegółami mikrostruktury ośrodka i ze zmiennością makroskopowego stężenia substancji rozpuszczonej. Specyficzną cechą nielokalnej formy związków konstytutywnych, przedstawionych powyżej i w rozdziale 4, jest to, że uwzględniają one wszystkie wspomniane skale długości i nie jest konieczne przeprowadzanie analizy rzędu wielkości tych skal.

Zjawiska nielokalne opisują procesy nierównowagi fazowej. Proces nierównowagowy, w przypadku transportu substancji rozpuszczonej, oznacza, że na poziomie makroskopowym, występuje wymiana rozpatrywanego składnika między fazami. Jednym z przybliżonych sposobów uwzględnienia braku równowagi fazowej są tzw. modele dyfuzji, które stanowią związki między makroskopowymi fazowymi stężeniami substancji rozpuszczonej w fazie stałej i ciekłej (lub między makroskopowym stężeniem w obszarze dwufazowym a makroskopowym fazowym stężeniem substancji rozpuszczonej w fazie ciekłej). Modele te, które są czasami dodatkowo przyjmowane w literaturze mają charakter postulatywny [12], [19], [23]. Innym sposobem uwzględniania braku równowagi fazowej na poziomie makroskopowym jest zastosowanie tzw. modelu dwurównaniowego (podwójnego kontinuum) [1], w którym uśrednianie w obszarze dwufazowym przeprowadzane jest odrębnie dla każdej z faz i uwzględniana jest, na poziomie makroskopowym, wymiana substancji rozpuszczonej między fazami.

3.2.1. Lokalna równowaga fazowa w obszarze dwufazowym przy makroskopowym opisie procesu transportu składników

Jak wspomniano w poprzednim rozdziale w obszarze dwufazowym (“mushy zone”) można zaobserwować wiele skal długości. W niektórych przypadkach możliwe jest przeprowadzenie analizy rzędów wielkości tych skal opisujących zarówno mikrostrukturę ośrodka jak i zmienność makroskopowych wielkości fizycznych. Prowadzi to do uproszczenia postaci związków konstytutywnych podanych zależnościami (3.16) i (3.17). Taka analiza może być przeprowadzona po rozwinięciu funkcji mikrostruktury φ_C, ψ_C w szereg rosnących potęg charakterystycznego mikrowymiaru struktury obszaru dwufazowego ℓ . Przez mikrowymiar ten rozumiana jest największa ze skal długości opisujących lokalną mikrostrukturę obszaru dwufazowego (na przykład odległość dendrytów). Zachowanie najniższego rzędu członów we wspomnianych rozwinięciach prowadzi do przybliżenia lokalnej równowagi fazowej na poziomie makroskopowym.

W celu bliższego przedyskutowania tego problemu obliczono makroskopowe wielkości fazowe stosując definicję (3.4) do zależności (3.12). W wyniku otrzymano wyrażenie:

$$\{MC\}_i = \{MC\} + \underbrace{\int_0^t \int_V \{\varphi_C\}_i \cdot \nabla' \{MC\} dV' d\tau + \int_0^t \int_V \{\psi_C\}_i \partial_\tau \{MC\} dV' d\tau}_{\text{część nierównowagowa}} \quad (3.19)$$

Jeśli w powyższym wyrażeniu przyjmie się, że $\{\varphi\}_i = 0$ i $\{\psi\}_i = 0$ to obowiązuje lokalna równowaga fazowa. Wtedy, z równania (3.19), wynika, że makroskopowe fazowe stężenia substancji rozpuszczonej są uzależnione od makroskopowego stężenia w następujący sposób:

$$\{C\}_S = \frac{\kappa}{(\varepsilon_L + \kappa \varepsilon_S)} \{C\}, \quad \{C\}_L = \frac{1}{(\varepsilon_L + \kappa \varepsilon_S)} \{C\} \quad (3.20)$$

W celu znalezienia postaci związków konstytutywnych w tym przypadku należy rozwinąć funkcję $\varphi_C(t, \mathbf{x}; \tau, \mathbf{y}|\Omega)$ (i ψ_C) w nieskończony szereg rosnących potęg mikrowymiaru (tzn. różnego rzędu ℓ)

$$\varphi_C(t, \mathbf{x}; \tau, \mathbf{y}|\Omega) = \varphi_{C0}(t, \mathbf{x}|\Omega) \delta(t, \tau) \delta(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \ell \varphi_{C1}(t, \mathbf{x}|\Omega) \delta(t, \tau) \nabla \delta(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + O(\ell^2)$$

Ten rodzaj rozwinięcia pozwala na analizę rzędu wielkości różnych skal występujących w procesie transportu substancji rozpuszczonej w obszarze “mushy zone”. Zachowanie pierwszego członu z prawej strony tego rozwinięcia odpowiada założeniu, że gradienty (i pochodne czasowe) makroskopowego stężenia są wolno (pod względem przestrzennym lub czasowym) zmienne, tzn. skale długości związane z tymi zmianami są dużo większe od mikrowymiaru ℓ . Założenie to jest zatem równoważne założeniu o tzw. dobrej separacji spektrum skal długości opisujących mikrostrukturę obszaru dwufazowego i spektrum skal długości opisujących zmiany makroskopowych stężeń (czy temperatury) w tym obszarze.

Biorąc pod uwagę właściwości funkcji φ_C and ψ_C , wynikające z równań (3.13) i (3.14), mikroskopowe stężenie, w przypadku występowania lokalnej równowagi fazowej na poziomie makroskopowym, zmienia się w obszarze dwufazowym zgodnie z zależnością

$$MC(t, \mathbf{x}|\Omega) = \{MP_{eq}(t, \mathbf{x})\} [\{C(t, \mathbf{x})\} + \varphi_{C0}(t, \mathbf{x}|\Omega) \cdot \nabla \{C(t, \mathbf{x})\}] \quad (3.21)$$

a związki na statystycznie uśrednione człony, występujące w równaniu (3.10), przyjmują uproszczoną lokalną formę:

$$\{\mathbf{w}\rho C + \mathbf{j}\} = \{\mathbf{w}\}(\rho P_{eq})_L \{C\} - D_{ef} \cdot \nabla \{C\} \quad (3.22)$$

$$\{\rho C\} = \{\rho P_{eq}\} \{C\} \quad (3.23)$$

Efektywny współczynnik dyfuzji substancji rozpuszczonej D_{ef} jest wtedy zdefiniowany jako

$$D_{ef} = \{DP_{eq}(\mathbf{1} + \nabla \varphi_{C0})\} - \underbrace{(\rho/M)_L \{MP_{eq}\} \{\theta_L \mathbf{w} \varphi_{C0}\}}_{\text{dyspersja substancji rozpuszczonej}} \quad (3.24)$$

i ciągle zawiera człon odpowiedzialny za dyspersję (rozpraszanie) tego składnika w obszarze dwufazowym spowodowaną przepływem fazy ciekłej w tym obszarze. Odpowiednie równanie całkowo-różniczkowe na φ_{C0} może być łatwo wyprowadzone z równania (3.13) i przyjmuje postać:

$$\begin{aligned} \varphi_{C0} = & \int_V \nabla G^* \cdot [(\mathbf{w}\rho)' \varphi_{C0} - D'(\mathbf{1} + \nabla \varphi_{C0}) - \{(\mathbf{w}\rho)' \varphi_{C0} - D'(\mathbf{1} + \nabla \varphi_{C0})\}] dV' \\ & - \int_V G^* [(\mathbf{w}\rho)' - \{(\mathbf{w}\rho)'\}] dV' \end{aligned}$$

Należy podkreślić, że możliwe jest również uzyskanie czysto różniczkowej formy równania na funkcję φ_{C0} [7], [8].

Na końcu tego rozdziału należy również wspomnieć, że można wykazać, patrz [6], że równania i efektywne właściwości modelu dwurównaniowego (tzn. podwójnego kontinuum) [1] mogą być otrzymane poprzez zachowanie członów rzędu ℓ^2 w rozwinięciach typu (3.20).

Zgodnie z klasyfikacją wprowadzoną przez Kunina [15] model dwurównaniowy opisuje zatem zjawiska słabo nielokalne.

3.3. Równanie energii

Przy założeniu stałości ciśnienia i zastosowaniu definicji uogólnionej entalpii (patrz rozdział 2) równanie bilansu energii w obszarze dwufazowym może być zapisane jako

$$\partial_t(\rho h) + \nabla \cdot (\mathbf{w} \rho h + \mathbf{q}) = 0 \quad (3.25)$$

gdzie gęstość strumienia ciepła związana jest z gradientem temperatury poprzez prawo Fouriera

$$\mathbf{q}(t, \mathbf{x}|\Omega) = -k(\mathbf{x}|\Omega) \nabla T(t, \mathbf{x}|\Omega) \quad (3.26)$$

a k oznacza uogólnioną przewodność cieplną zdefiniowaną wzorem

$$k(t, \mathbf{x}|\Omega) = \theta_s(t, \mathbf{x}|\Omega) k_s + \theta_L(t, \mathbf{x}|\Omega) k_L$$

Uśrednianie statystyczne równania (3.25) prowadzi do następującego wyrażenia

$$\partial_t\{\rho h\} + \nabla \cdot \{\mathbf{w} \rho h + \mathbf{q}\} = 0 \quad (3.27)$$

W celu wyprowadzenia końcowej, makroskopowej wersji równania energii człony uśrednione, występujące w powyższym równaniu, powinny zostać wyrażone jako funkcje makroskopowej temperatury $\{T\}$ i makroskopowego stężenia substancji $\{C\}$. Można to osiągnąć jeśliby zależność między mikroskopową temperaturą T a jej wartością makroskopową $\{T\}$ byłaby znana. Wspomniany związek wyprowadzono po wstępnym przekształceniu równań (3.25) i (3.26) do postaci

$$k_r \nabla^2 T - \rho_r c_r (w_r T + \partial_t T) = \nabla \cdot [(\mathbf{w} \rho h - \rho_r c_r \mathbf{w}_r T) - k' \nabla T] + \partial_t(\rho h - \rho_r c_r T) \quad (3.28)$$

gdzie $k' = k - k_r$. Dolny indeks r oznacza tu pewną wielkość odniesienia, która traktowana jest jako niezależna od określonego sposobu rozłożenia (konfiguracji) faz w obszarze “mushy zone”. Zastosowanie teorii funkcji Greena w sposób identyczny z przedstawionym w [9] prowadzi do wyrażenia na mikroskopową temperaturę. Uogólniona entalpia występująca w równaniu (3.28), pozostająca funkcją T i aktywności MC , została następnie zlinearyzowana względem zmiennych makroskopowych $\{T\}$ i $\{MC\}$

$$\rho h(t, \mathbf{x}, T, MC|\Omega) = \rho h^0(t, \mathbf{x}, \{T\}, \{MC\}|\Omega) + \partial_T \rho h^0(t, \mathbf{x}, \{T\}, \{MC\}|\Omega) (T - \{T\}) + \partial_{MC} \rho h^0(t, \mathbf{x}, \{T\}, \{MC\}|\Omega) (MC - \{MC\}) \quad (3.29)$$

i ostatecznie związek między mikroskopową i makroskopową temperaturą przedstawiony w formie

$$T = \{T\} + S + \int_0^t \int_V \varphi_T \cdot \nabla' \{T\} dV' d\tau + [\int_0^t \int_V \varphi_{TC} \cdot \nabla' \{MC\} dV' d\tau + \int_0^t \int_V \psi_{TC} \partial_\tau \{MC\} dV' d\tau] \quad (3.30)$$

gdzie funkcje S i φ_T spełniają następujące równania:

$$S = -\int_0^t \int_V \nabla G \cdot [k \nabla S - \mathbf{w} \partial_T(\rho h^0) S + \mathbf{w}_r \rho_r c_r S - \mathbf{w}(\rho h^0) - \{k \nabla S - \mathbf{w} \partial_T(\rho h^0) S + \mathbf{w}_r \rho_r c_r S - \mathbf{w}(\rho h^0)\}] dV' d\tau + \int_0^t \int_V G \partial_\tau [\partial_T(\rho h^0) S + \rho_r c_r S + (\rho h^0) - \{\partial_T(\rho h^0) S + \rho_r c_r S + (\rho h^0)\}] dV' d\tau, \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} \varphi_T = & -\int_0^t \int_V \nabla G \cdot [k'(\mathbf{1}\delta_t\delta_x + \nabla\varphi_T) - \mathbf{w}\partial_T(\rho h^0)\varphi_T + \mathbf{w}_r\rho_r c_r\varphi_T - \\ & + \{k'(\mathbf{1}\delta_t\delta_x + \nabla\varphi_T) - \mathbf{w}\partial_T(\rho h^0)\varphi_T + \mathbf{w}_r\rho_r c_r\varphi_T\}] dV'd\tau + \\ & - \int_0^t \int_V G \partial_\tau [\partial_T(\rho h^0)\varphi_T - \rho_r c_r\varphi_T - \{\partial_T(\rho h^0)\varphi_T - \rho_r c_r\varphi_T\}] dV'd\tau \end{aligned} \quad (3.32)$$

Natomiast funkcję φ_{TC} można wyznaczyć z następującego wyrażenia

$$\begin{aligned} \varphi_{TC} = & \int_0^t \int_V \nabla G \cdot [\mathbf{w}\partial_{MC}(\rho h^0)\varphi_C - \{\mathbf{w}\partial_{MC}(\rho h^0)\varphi_C\}] dV'd\tau + \\ & - \int_0^t \int_V G \partial_\tau [\partial_{MC}(\rho h^0)\varphi_C - \{\partial_{MC}(\rho h^0)\varphi_C\}] dV'd\tau \end{aligned} \quad (3.33)$$

w którym funkcja φ_C stanowi rozwiązanie równania (3.13).

Funkcja ψ_{TC} , występująca również w równaniu (3.30), może być wyznaczona z wyrażenia identycznego z (3.33) po zastąpieniu φ_C przez ψ_C .

Przy pomocy wyrażeń (3.26), (3.29) i (3.30) łatwo można wyprowadzić poszukiwane związki między uśrednionymi członami występującymi w równaniu (3.27) a makroskopową temperaturą i stężeniem. Przyjmują one ostatecznie następującą formę:

$$\begin{aligned} \{\mathbf{w}\rho h + \mathbf{q}\} = & \{\mathbf{w}\}(\rho h^0)_L - \int_0^t \int_V k_{ef} \cdot \nabla'\{T\} dV'd\tau + \\ & - [\int_0^t \int_V D_{Tef} \cdot \nabla'\{C\} dV'd\tau - \int_0^t \int_V \nu_{Tef} \partial_\tau\{C\} dV'd\tau] + \mathbf{q}_{HS} \end{aligned} \quad (3.34)$$

$$\begin{aligned} \{\rho h\} = & \{\rho h^0\} + h_{HS} + \int_0^t \int_V \chi_{Tef} \cdot \nabla'\{T\} dV'd\tau + \\ & + [\int_0^t \int_V \chi_{Cef} \cdot \nabla'\{C\} dV'd\tau + \int_0^t \int_V \mu_{Cef} \partial_\tau\{C\} dV'd\tau] \end{aligned} \quad (3.35)$$

gdzie

$$\begin{aligned} k_{ef} = & \{k(\mathbf{1}\delta_x\delta_t + \nabla\varphi_T)\} - \varepsilon_L \partial_T(\rho h^0)_L \{\mathbf{w}\varphi_T\}_L \\ D_{Tef} = & \{MP_{eq}\}[\{k\nabla\varphi_{TC}\} - \partial_T(\rho h^0)_L \{\theta_L \mathbf{w}\varphi_{TC}\} - \partial_{MC}(\rho h^0)_L \{\theta_L \mathbf{w}\varphi_C\}] \\ \nu_{Tef} = & \{MP_{eq}\}[\{k\nabla\psi_{TC}\} - \partial_T(\rho h^0)_L \{\theta_L \mathbf{w}\psi_{TC}\} - \partial_{MC}(\rho h^0)_L \{\theta_L \mathbf{w}\psi_C\}] \\ \chi_{Tef} = & \{\partial_T(\rho h^0)\varphi_T\} \\ \chi_{Cef} = & \{MP_{eq}\}[\{\partial_T(\rho h^0)\varphi_{TC}\} - \{\partial_{MC}(\rho h^0)\varphi_C\}] \\ \mu_{Cef} = & \{MP_{eq}\}[\{\partial_T(\rho h^0)\psi_{TC}\} - \{\partial_{MC}(\rho h^0)\psi_C\}] \\ \mathbf{q}_{HS} = & \{k\nabla S\} - \partial_T(\rho h^0)_L \{\theta_L \mathbf{w}S\} \\ h_{HS} = & \{\partial_T(\rho h^0) S\} \end{aligned} \quad (3.36)$$

Należy podkreślić, że oba związki (3.34) i (3.35) są nielokalne [25], [26]. Pokazują one, że makroskopowa gęstość strumienia ciepła i makroskopowa entalpia przypadająca na jednostkę objętości zależą nie tylko od makroskopowej temperatury ale również od makroskopowego stężenia. Wynika to z zależności mikroskopowej entalpii od stężenia substancji rozpuszczonej, wzory (3.44) i (3.45). Nielokalność oznacza, że makroskopowy strumień ciepła i entalpia w rozpatrywanym punkcie obszaru dwufazowego zależą nie tylko od makroskopowej temperatury i stężenia w tym samym punkcie i momencie czasu ale i od rozkładu temperatury i stężenia w całym obszarze dwufazowym i to zarówno w rozpatrywanej chwili jak i w przeszłości [8], [14]. Ponadto, część energii cieplnej, z powodu krętej drogi przepływu cieczy w obszarze dwufazowym, jest rozpraszana. Ten ostatni wniosek jest uzasadniony pojawianiem się prędkości cieczy w wyrażeniach na efektywne właściwości k_{ef} , D_{Tef} i ν_{Tef} . Człon $\mathbf{q}_{HS}$, występujący w związku (3.34), związany jest z obecnością zależnych od temperatury, lokalnych źródeł ciepła

na granicy międzyfazowej ciecż-ciało stałe. Źródła te, związane z procesem zmiany fazy, lokalnie deformują pole temperatury przyczyniając się do wystąpienia dodatkowego transportu ciepła [4].

3.3.1. Makroskopowy opis lokalnej równowagi termicznej w obszarze dwufazowym

Zagadnienie lokalnej równowagi termicznej w obszarze dwufazowym, przy stosowaniu opisu makroskopowego, może być przedyskutowana w analogii do równowagi fazowej. Jeśli równanie (3.30) zostanie pomnożone przez funkcję struktury, odpowiednią dla każdej fazy, i statystycznie uśrednione otrzymuje się następujące wyrażenie na makroskopową temperaturę każdej z faz

$$\begin{aligned} \{T\}_i = \{T\} + \{S\}_i + \int_0^t \int_V \{\varphi_T\}_i \cdot \nabla' \{T\} dV' d\tau + \\ + \underbrace{\left[\int_0^t \int_V \{\varphi_{TC}\}_i \cdot \nabla' \{MC\} dV' d\tau + \int_0^t \int_V \{\psi_{TC}\}_i \partial_\tau \{MC\} dV' d\tau \right]}_{\text{część nierównowagowa}} \end{aligned} \quad (3.37)$$

W przypadku lokalnej równowagi termicznej temperatury fazowe powinny być takie same i równe temperaturze makroskopowej. Można stąd wywnioskować, że wszystkie człony po prawej stronie wzoru (3.37), począwszy od drugiego, powinny być zerowe. W celu przeanalizowania tego problemu rozwinęto funkcje φ_T , φ_{TC} , ψ_{TC} oraz φ_C , ψ_C w szereg typu omówionego w rozdziale dotyczącym równowagi fazowej. Rozwinięcia te są ważne dla przypadku kiedy makroskopowa temperatura i stężenie wolno zmieniają się w przestrzeni (i czasie) względem mikrowymiaru ℓ . W tym przypadku mikroskopowa temperatura zmienia się zgodnie z zależnością:

$$T(t, \mathbf{x}|\Omega) = \{T(t, \mathbf{x})\} + S(t, \mathbf{x}|\Omega) + \varphi_{T0}(t, \mathbf{x}|\Omega) \cdot \nabla \{T(t, \mathbf{x})\} + \varphi_{TC0}(t, \mathbf{x}|\Omega) \cdot \nabla \{MC(t, \mathbf{x})\} \quad (3.38)$$

a wyrażenia na uśrednione statystycznie człony, występujące w równaniu (3.27), ulegają uproszczeniu do lokalnej formy:

$$\{\mathbf{w}\rho h + \mathbf{q}\} = \{\mathbf{w}\}(\rho h^0)_L - k_{ef} \cdot \nabla \{T\} - D_{Tef} \cdot \nabla \{C\} \quad (3.39)$$

$$\{\rho h\} = \{\rho h^0\} \quad (3.40)$$

Efektywna przewodność cieplna k_{ef} jest wtedy zdefiniowana wyrażeniem

$$k_{ef} = \{k(1 + \nabla \varphi_{T0})\} - \varepsilon_L \underbrace{\partial_T(\rho h^0)_L \{\mathbf{w}\varphi_{T0}\}_L}_{\text{dyspersja termiczna}} \quad (3.41)$$

podczas gdy współczynnik Dufour'a wzorem

$$D_{Tef} = \{MP_{eq}\}[\{k\nabla \varphi_{TC0}\}] - \varepsilon_L \partial_T(\rho h^0)_L \{\mathbf{w}\varphi_{TC0}\}_L - \varepsilon_L \partial_{MC}(\rho h^0)_L \{\mathbf{w}\varphi_{C0}\}_L \quad (3.42)$$

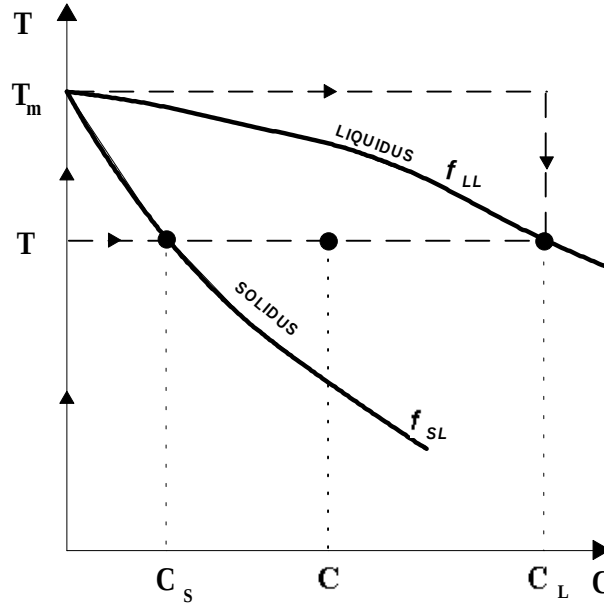
Odpowiednie równania całkowo-różniczkowe na funkcje φ_{T0} , φ_{TC0} mogą być łatwo wyprowadzone z równań (3.32) i (3.33).

3.4. Entalpia i porowatość obszaru dwufazowego w warunkach lokalnej równowagi termodynamicznej

W celu zamknięcia układu równań, które były omawiane w poprzednich rozdziałach, konieczne jest podanie wyrażen na makroskopową entalpię przypadającą na jednostkę objętości $\{\rho h^0\}$ i entalpię $(\rho h^0)_L$ fazy ciekłej. Makroskopowa entalpia może być, przy pomocy równań (3.1) i (3.4), uzależniona od udziałów objętościowych faz w następujący sposób [27]

$$\{\rho h^o\} = \varepsilon_S(t, \mathbf{x}) \rho_S h_S(\{T\}, \{C\}) + \varepsilon_L(t, \mathbf{x}) \rho_L h_L(\{T\}, \{C\}) \quad (3.43)$$

Fazowe entalpie, jako potencjały termodynamiczne, są obliczane w stosunku do pewnego stanu odniesienia temperatury i stężenia ($T_r, 0$) ale droga osiągnięcia ich wartości może być różna.



Rys.3.1. Poglądowy fragment wykresu fazowego układu binarnego

W przypadku określania entalpii cieczy $(\rho h^o)_L = \rho_L h_L(\{T\}, \{C\})$ celowe jest nie przekraczanie przy tym obszaru dwufazowego ("mushy zone") jako, że entalpia w tym obszarze zależy od składu fazowego a udział objętościowy cieczy (porowatość) nie jest *a priori* znany. Zamiast tego wygodnie jest podążać drogą zaznaczoną na załączonym wykresie (rys.3.1). Fazowe entalpie mogą być wtedy przedstawione jako

$$\rho_S h_S(\{T\}, \{C\}) = \int_{T_r}^{\{T\}} \rho_S c_S(T, 0) dT + \int_0^{\{C\}_S} \rho_S h_{Sp}(\{T\}, C) dC \quad (3.44)$$

$$\begin{aligned} \rho_L h_L(\{T\}, \{C\}) = & \int_{T_r}^{T_m} \rho_S c_S(T, 0) dT + \rho_S L(T_m) + \\ & + \int_0^{\{C\}_L} \rho_L h_{Lp}(T_m, C) dC + \int_{T_m}^{\{T\}} \rho_L c_L(T, \{C\}) dT \end{aligned} \quad (3.45)$$

gdzie c_S , c_L oznaczają ciepła właściwe, podczas gdy T_m i $L(T_m)$ są, odpowiednio, temperaturą i ciepłem krzepnięcia czystego rozpuszczalnika. Symbole h_{Sp} i h_{Lp} oznaczają pochodne cząstkowe entalpii względem stężenia substancji rozpuszczonej.

W przypadku równowagi fazowej i termicznej makroskopowe fazowe stężenia są uzależnione od makroskopowego stężenia wzorami (3.20), które mogą zostać użyte do znalezienia udziałów objętościowych faz w obszarze dwufazowym

$$\varepsilon_L(t, \mathbf{x}) = 1 - \varepsilon_S(t, \mathbf{x}) = [\{C\} - f_{SL}^{-1}(\{T\})] / [f_{LL}^{-1}(\{T\}) - f_{SL}^{-1}(\{T\})] = \varepsilon_L(\{T\}, \{C\}) \quad (3.46)$$

Oznaczenia f_{SL}^{-1} i f_{LL}^{-1} , występujące w powyższym wzorze, oznaczają funkcje odwrotne opisujące odpowiednio przebieg linii solidus i liquidus na wykresie fazowym.

Należy podkreślić, że zgodnie ze wzorem (3.46), udziały objętościowe faz są zależne wyłącznie od makroskopowej temperatury i stężenia substancji rozpuszczonej i po wprowadzeniu wyrażeń na nie, razem z wyrażeniami (3.44) i (3.45), do wzoru (3.43) pozwalają wyrazić

makroskopową entalpię, przypadającą na jednostkę objętości, jako funkcję wyłącznie $\{T\}$ i $\{C\}$. Alternatywą w stosunku do powyżej opisanej procedury analitycznej może być przyjęcie empirycznej zależności wiążącej entalpię mieszaniny dwufazowej z temperaturą i stężeniem substancji rozpuszczonej dla rozpatrywanego układu dwuskładnikowego [21].

3.5. Uwagi i wnioski końcowe

Metoda, przedstawiona w powyższych rozdziałach, stanowi alternatywę, do metody opartej na uśrednianiu objętościowym, przy formułowaniu równań opisujących makroskopowe procesy transportu w obszarze dwufazowym podczas krzepnięcia roztworów dwuskładnikowych. Wykorzystuje się w niej technikę uśrednień statystycznych po zbiorze dopuszczalnych realizacji mikrostruktury ośrodka dwufazowego. Makroskopowe wielkości pojawiające się w wyniku zastosowania omówianej metody mają inną interpretację fizyczną niż otrzymywane techniką uśredniania objętościowego po REV.

W powyższych rozważaniach wykazano, że forma związków konstytutywnych wiążących wielkości makroskopowe nie potrzebuje być postulowana, ale może być wyprowadzona z odpowiednich związków dla wielkości mikroskopowych niezależnie od założenia dotyczącego skal długości wpływających na rozpatrywane procesy. Wykazano również, że omawiane związki konstytutywne są nielokalne. Nielokalny aspekt opisu procesów transportu w obszarze dwufazowym nie był dotychczas poruszany w literaturze. Nielokalność związana jest z problemem braku lokalnej równowagi termodynamicznej makroskopowych procesów zachodzących w obszarze dwufazowym. Nie jest w związku z tym konieczne do opisu procesów nierównowagowych przyjmowanie w tym przypadku dodatkowych, uzupełniających modeli (np. tzw. modeli dyfuzji) noszących często charakter postulatywny. Jeśli spektrum skal, związanych z opisem mikrostruktury “mushy zone”, jest rozłączne ze spektrum skal związanych z przestrzennym rozkładem i zmiennością czasową makroskopowych pól stężeń i temperatury, możliwe jest stosowanie uproszczonej, lokalnej formy związków konstytutywnych, które mają postać podobną do prawa Ficka czy Fouriera słusznego dla ośrodków jednorodnych. Związki te odnoszą się do procesów, w których warunki równowagi cieplnej czy fazowej są zachowane.

Związki konstytutywne zawierają efektywne właściwości obszaru dwufazowego, odpowiedzialne za transport składników i energii. Wyrażenia (3.18) i (3.36) podają definicję właściwości efektywnych występujących w nielokalnych związkach konstytutywnych (odpowiadających procesom nierównowagowym), podczas gdy wyrażenia (3.24), (3.41) i (3.42) definicję właściwości efektywnych występujących w związkach lokalnych (odpowiadającym procesom makroskopowej równowagi termodynamicznej). Wszystkie te wyrażenia pokazują, że właściwości efektywne obszaru dwufazowego mogą być wyznaczone ze znajomości funkcji mikrostruktury φ_C , ψ_C , φ_T , φ_{TC} i ψ_{TC} oraz właściwości fazy ciekłej i stałej w obszarze “mushy zone”, takich jak: współczynniki dyfuzji D_S, D_L ; gęstości ρ_S, ρ_L ; rozpuszczalności M_S, M_L ; przewodności cieplne k_S, k_L i entalpie h_S, h_L . Właściwości efektywne obszaru dwufazowego, określone przez powyższe definicje powinny być rozumiane jako wartości oczekiwane w sensie statystycznym. Strategia obliczania tych właściwości jest zatem następująca: dla znanej mikrostruktury obszaru dwufazowego wyznaczone są funkcje mikrostruktury z równań (3.13), (3.14), (3.31), (3.32), (3.33) i następnie wykorzystywane w definicjach (3.18), (3.36), (3.24), (3.41), (3.42) do obliczenia właściwości efektywnych. Podobny algorytm wykorzystywano w przewidywaniu właściwości materiałów kompozytowych i ośrodków porowatych [7], [8]. Należy podkreślić, że symbol uśredniania statystycznego, występujący po prawej stronie wymienionych definicji, może być zastąpiony, w przypadkach gdy obowiązuje

twierdzenie ergodyczne, przez uśrednianie przestrzenne po pewnych objętościach lub powierzchniach (np. równoległych do powierzchni solidus czy liquidus).

W dalszych badaniach dotyczących tematyki formułowania równań opisujących makroskopowe procesy transportu w obszarze dwufazowym należy dążyć do oszacowania wpływu takich zjawisk jak dyspersja oraz wzajemne oddziaływanie akumulacji energii i źródeł ciepła związanych z przemianą fazową na procesy makroskopowego transportu energii i składników w obszarze dwufazowym. Inne człony równań makroskopowych, dotyczące wpływu źródeł ciepła na intensywność przenoszenia energii oraz efektu Dufoura, powinny być również dokładniej przebadane. Model makroskopowego opisu procesów transportu w obszarze dwufazowym może być także wykorzystany do analizy wpływu lokalnej nierównowagi termodynamicznej faz na proces krzepnięcia poprzez pozostawienie dalszych członów w rozwinięciach omówionych w rozdziałach poświęconych równowadze fazowej i termicznej.

4. Symulacja komputerowa procesów przemian fazowych cieczer-ciało z konwekcją w układach jednoskładnikowych i binarnych

4.1 Cel i zakres modelowania, uzyskane rezultaty

Badania eksperymentalne dostarczają informacji o zachowaniu układów fizycznych o prostych geometriach, możliwych do analizy w warunkach laboratoryjnych. Tymczasem w rzeczywistych problemach inżynierskich obszary mają krzywoliniowe, złożone brzegi. Przeniesienie wyników pomiarów z prostych geometrii na złożone kształty jest często bardzo zgrubnym przybliżeniem, które w przypadku ruchu płynu może gubić istotne cechy przepływu (np. lokalne zawirowania wywołane krzywiznami brzegów), zważywszy, że charakterystyczną cechą zagadnień teorii pola jest wrażliwość ich rozwiązań na nawet nieznaczne zmiany kształtu brzegu obszaru. Pogłębiona analiza zjawisk transportu masy, pędu i energii w rzeczywistych układach wypełnionych roztworem dwuskładnikowym lub substancją jednoskładnikową wymaga więc wykorzystania współczesnych zaawansowanych technik symulacji numerycznej. Zastosowanie tu komercyjnych, powszechnie dziś dostępnych, kodów komputerowych jest ograniczone i nieefektywne, ze względu na ich ogólność i często brak możliwości poszerzenia użytych w nich modeli. Dlatego w symulacji komputerowej złożonych, wciąż nie do końca poznanych, procesów transportu w układach binarnych ze zmianą fazy zasadne jest tworzenie oprogramowania zorientowanego tematycznie, elastycznego, w którym implementacja nowych modeli nie stanowi problemu, a wyniki uzyskuje się w rozsądnym czasie. Jest to szczególnie istotne, gdy narzędzie obliczeniowe służyć ma poznaniu zjawisk przez uzupełnienie, często kosztownych i żmudnych, badań doświadczalnych.

Dlatego jednym z podstawowych celów badań było stworzenie biblioteki programów do komputerowej symulacji nieustalonych zjawisk krzepnięcia i topnienia z konwekcją w fazie ciekłej dla układów jednoskładnikowych i binarnych w złożonych dwuwymiarowych obszarach geometrycznych.

W ramach realizacji tego zadania opracowano dwa programy metody elementów skończonych (MES). Ich obliczeniowo-efektywne algorytmy uzyskano przez zastosowanie procedur sekwencyjnego i iteracyjnego rozwiązywania sprzężonych układów równań zachowania masy, pędu i energii, entalpowego opisu efektów ciepła utajonego na stałej siatce podziału oraz różnych technik rozdziału w czasie (rozdział 4.2). W pierwszym programie wykorzystano metodę rzutu (projection method) Chorina i Gresho [1,2] – rozdziału obliczeń pól prędkości i ciśnienia wraz z jawnym trójpoziomym schematem Adamsa-Basfortha kroczenia w czasie. W algorytmie obliczeniowym drugiego programu zastosowano metodę rozdziału operatorów transportu konwekcyjnego i dyfuzyjnego w dwóch następujących po sobie etapach całkowania w czasie niejawnym schematem Eulera [3,4,5].

Poszukiwanie takich, obliczeniowo efektywnych, technik rozwiązywania układów sprzężonych nieliniowych równań różniczkowych cząstkowych (lub ich dyskretnych odpowiedników w postaci równań algebraicznych) jest przedmiotem zainteresowań matematyków i numeryków w wielu ośrodkach naukowych na świecie. Powszechnie akceptuje się zastępowanie teoretycznie dokładnych metod jednoczesnego rozwiązywania przez przybliżone techniki sekwencyjnego i iteracyjnego dochodzenia do rozwiązania. Te dokładne bowiem mają trudne do zaakceptowania koszty obliczeń (zwłaszcza w realnych zadaniach trójwymiarowych),

przybliżone zaś są wielokrotnie szybsze, nie wymagają dużych pamięci operacyjnych czy zewnętrznych, a ich dokładność jest wystarczająca w praktycznych obliczeniach.

Zastosowanie modeli symulacji numerycznej i ich efektywnych algorytmów przybliżonych obliczeń wymaga najpierw ich uwiarygodnienia. Proces ten składa się z dwóch etapów. W pierwszym dokonuje się weryfikacji dokładności rozwiązania numerycznego przez analizę wpływu gęstości siatek podziału i/lub porównanie tego rozwiązania z innymi dostępnymi w literaturze rozwiązaniami analitycznymi albo uzyskanymi innymi technikami dyskretyzacji. Wzorce te znane są w literaturze angielskiej pod nazwą „benchmarks”. Przedmiotem takiej analizy jest odpowiedź na pytanie: jak dobrze model numeryczny przybliża dyskretyzowane równania modelu ciągłego. Drugi etap to jednoczesne uwiarygodnienie obu modeli: matematycznego (ciągłego) i jego odpowiednika dyskretnego (proces określa się w literaturze angielskiej mianem „code validation procedure”) przez szczegółowe porównania rozwiązań numerycznych z precyzyjnymi pomiarami dla pewnych wybranych, wzorcowych geometrii i zjawisk. Tutaj poszukuje się odpowiedzi na pytanie jak symulacja numeryczna oddaje rzeczywistość. W ostatnich latach coraz powszechniejsza staje się świadomość, że weryfikacja dokładności nie jest wystarczająca, bo nawet dokładne rozwiązanie równań nie gwarantuje jeszcze dobrej symulacji komputerowej analizowanych zjawisk. Musimy mieć jeszcze pewność, że te „dokładnie” rozwiązane równania dobrze opisują fizykę analizowanych zjawisk i procesów. Rozwija się więc „benchmarki” eksperymentalne, jako wzorce do porównań. Jeden z nich zaproponowano w rozdziale 2 opracowania i wykorzystano do porównań w dalszej części tego rozdziału (punkt 4.4).

Opracowane modele obliczeniowe MES poddano więc najpierw weryfikacji pod kątem dokładności uzyskiwanych rozwiązań (rozdział 4.3), przez ich porównanie z dostępnymi w literaturze wynikami obliczeń innych analiz numerycznych (przepływ w kanale, konwekcja swobodna Boussinesqa, etc.). Potwierdziły one zadawalającą dokładność obu algorytmów rozdziału w czasie dla rozważanych problemów modelowych (dla „benchmarks”). W obu przypadkach uzyskano znaczne przyspieszenie obliczeń w porównaniu z klasyczną techniką jednoczesnego rozwiązania całego układu sprzężonych równań ruchu i transportu energii. Nie stwierdzono natomiast wyraźnych różnic w efektywności obliczeniowej obu technik rozdziału. Z tych względów dalsze analizy ograniczono do modelu opartego na metodach rzutu Chorina [1] i Gresho [2] przyjmując go za podstawowe narzędzie symulacji komputerowej procesów przemian fazowych ciec-z ciała stałe z konwekcją w układach jednoskładnikowych i binarnych.

W celu odpowiedzi na pytanie czy uzyskane tą drogą obliczenia poprawnie modelują złożone procesy konwekcji swobodnej i zamarzania układu jednoskładnikowego, wykorzystano proponowany w rozdziale 2 wzorec eksperymentalny. Porównano więc obliczone rozkłady pól temperatury i prędkości oraz chwilowych położań frontu fazowego z wynikami wizualizacji przepływu i pola temperatury (przy wykorzystaniu posiewu ciekłych kryształów oraz technik DPIV i DPIT) dla przypadku czystej wody ochładzanej i krzepnącej, w zakresie temperatur obejmujących punkt anomalii gęstości wody (rozdział 4.4). Potwierdziły one wiarygodność proponowanego modelu symulacji komputerowej.

Nieznaczne rozbieżności, zwłaszcza w chwilowych polach prędkości oraz kształtach frontu fazowego, wywołane były brakiem dokładnych informacji o termicznych warunkach brzegowych na wewnętrznych ścianach kuwety pomiarowej. Założenie adiabatyczności nieizotermicznych ścianek pleksiglasowych, powszechnie przyjmowane na termicznie izolowanych powierzchniach, okazało się niezbyt precyzyjne w analizowanym przypadku, gdzie, jak potwierdził eksperyment (rozdział 2.2), przebieg zachodzących procesów silnie zależy od

niewielkich nawet zmian warunków wymiany ciepła przez ścianki kuwety. Stosunkowo łatwo i dokładnie można natomiast zdefiniować warunki brzegowe na zewnętrznych powierzchniach tych ścianek (współczynnik przejmowania ciepła i temperaturę płynu omywającego powierzchnie). Rozbudowano więc model symulacji komputerowej w kierunku jednoczesnej analizy sprzężonej wymiany ciepła, obejmującej konwekcję swobodną wywołaną siłami wyporu i zmianę fazy w płynie wypełniającym przestrzeń pomiarową oraz przewodzenie ciepła w ściankach ograniczających kuwetę. Uzyskane w ten sposób wyniki obliczeń są bardzo bliskie wartościom prędkości i temperatury rejestrowanym technikami DPIV/DPIT (rozdział 4.4).

Fizyczny mechanizm procesów zmiany fazy w układach dwuskładnikowych jest znacznie bardziej złożony niż w przypadku czystych substancji. Przebiega on w skończonym przedziale temperatur, co prowadzi do powstawania obszaru dwufazowego ciekły metal - ciało stałe (mushy region). W dwuskładnikowym stopie obszar dwufazowy ma zwykle strukturę dendrytyczną. Zasadniczym problemem jest tu poprawne modelowanie dyskretnie procesów transportu masy, pędu i energii w obszarze dwufazowym oraz opis struktury tego obszaru. Budowa kodu komputerowego musi więc być poprzedzona wnikliwą analizą literaturową dostępnych technik dyskretyzacji i wyborem właściwej z nich. Studia takie przeprowadzono rozważając zalety i wady modeli pojedynczego- i dwóch-kontinuów, metod entalpowych na stałej siatce elementów skończonych i śledzenia frontu fazowego na siatce ruchomej, oraz sztucznej lepkości i modelu ośrodka porowatego w opisie ruchu płynu w obszarze dwufazowym. W rezultacie tych rozważań wybrano:

- model pojedynczego kontinuum, oparty na teorii roztworów, którego równania otrzymuje się na podstawie sumowania odpowiednich równań zachowania dla poszczególnych faz. Jego konkurent, w którym każdą z faz rozważa się niezależnie, jest trudny w implementacji w układach dwuskładnikowych, gdzie nie występuje wyraźnie widoczna pojedyncza powierzchnia frontu fazowego. Zasadniczym problemem jest też określenie właściwych wartości parametrów wymiany na granicy dwóch faz. Wybór modelu pojedynczego kontinuum, gdzie jeden układ równań zachowania opisuje zjawiska transportu w całej rozważanej przestrzeni, jest zgodny z obecnymi trendami światowymi w zakresie modelowania przemian fazowych ciec-ciało stałe w układach binarnych [6,7,8].
- metodę entalpową w opisie efektów uwalniania bądź pochłaniania ciepła przemiany fazowej na stałej siatce dyskretyzacji. Wybór ten podyktowany był głównie charakterem rozważanych procesów przemiany fazowej, w których występuje obszar dwufazowy (stopy) lub rozmyty front fazowy (parafina, woski). W takich przypadkach metody oparte na śledzeniu frontu fazowego na ruchomej siatce są nieprzydatne (nie ma bowiem ostrej, jednoznacznej linii frontu).
- modelowanie dwufazowego obszaru jako ośrodka porowatego [6,7,9]. Odrzucono tu metodę zmiennej lepkości jako czysto numeryczny zabieg stopniowego wygaszania prędkości płynu w miarę wzrostu udziału fazy stałej w obszarze dwufazowym. Traktowanie tego obszaru jako medium porowatego, jest bliższe fizyce zjawisk, szczególnie w odniesieniu do dendrytycznej struktury tej przestrzeni dla stopów metali. Pozwala też na analizę anizotropowego charakteru przewodności cieplnej i przepuszczalności ośrodka, wynikających ze sposobu wzrostu dendrytów, oraz wykorzystanie własnych teoretycznych modeli obszaru dwufazowego opisanych w rozdziale 3 opracowania.

W tak rozwijanych kodach obliczeniowych MES, przeprowadzono implementację nowych teoretycznych modeli obszaru dwufazowego, opartych na metodzie „ensemble averaging”

(rozdział 3 opracowania). Wykorzystano je następnie do analizy wpływu anizotropii przepuszczalności i przewodności cieplnej oraz dyspersji ciepła w obszarze dendrytycznym, modelowanym jako porowaty ośrodek Darcy'ego [10]. Obliczenia przeprowadzono dla dwóch rozcieńczonych roztworów chlorku amonu, dwuskładnikowego czynnika, który krzepnie podobnie jak binarny stop metalu. Wykazano znaczny wpływ anizotropowego charakteru przepuszczalności materiału i pomijalne oddziaływanie dwóch pozostałych efektów na kształtujące się pola prędkości oraz chwilowe kształty i położenie obszaru dendrytycznego [10]. W analizie tej pominięto, ze względu na małe udziały substancji rozpuszczonej, zarówno wpływ jej koncentracji na własności termofizyczne obszaru dwufazowego jak i konwekcję wywołaną gradientem stężeń.

W rzeczywistych układach binarnych, zwłaszcza stopach metali, uproszczenia takie nie są możliwe. Nie tylko gradienty temperatury, ale przede wszystkim gradienty koncentracji wywołują ruchy konwekcyjne, które zmieniają rozkłady substancji rozpuszczonej w obszarze odlewu. Jest to zjawisko *makro-segregacji*, główna przyczyna niejednorodności, mikro-porowatości i innych defektów odlewu. Ponadto, podczas solidyfikacji faza substancji rozpuszczonej jest usuwana z dendrytów i lokalnie zmienia swój rozkład na skutek dyfuzji - jest to zjawisko *mikro-segregacji*. Ogólnie, przepływy recyrkulacyjne, wywołane ruchami konwekcyjnymi, charakteryzuje tendencja do nierównomiernej dystrybucji wtrąceń. Powoduje to, że z upływem czasu jednorodny rozkład wtrąceń ulega ewolucji prowadząc do separacji jednej z faz i jej akumulacji w wybranych obszarach przepływu. Zjawisko to jest na ogół bardzo niekorzystne w procesach technologicznych (osłabianie stopów czy krysztalów poprzez niejednorodny skład), jak i w zbiornikach naturalnych (nadmierna koncentracja zanieczyszczeń). Głębsze zrozumienie tych procesów i oceny ilościowe, zwłaszcza w rzeczywistych złożonych geometrycznie obszarach, wymaga rozbudowy kodu symulacji komputerowej na przypadki, gdzie występują silne sprzężenia pól temperatury, koncentracji i entalpii całkowitej.

Opracowano więc iteracyjny model analizy MES dla sprzężonych równań ciągłości (ograniczenie do przypadków, gdy gęstość roztworu jest stała – bardzo często przyjmowane uproszczenie, które eliminuje możliwość analizy konwekcji wywołanej skurczem solidyfikacyjnym) i ruchu płynu oraz transportu entalpii i koncentracji składnika dla dwuwymiarowej laminarnej konwekcji swobodnej, wywołanej gradientami stężeń i temperatury, występujących w procesie krzepnięcia układu dwuskładnikowego. Każde ze wspomnianych równań rozwiązano techniką, w której człony dyfuzyjne całkowano w czasie niejawnym schematem Eulera, zaś człony konwekcyjne jawnym schematem Adamsa-Basfortha [4,11]. Potrzebne związki między koncentracją substancji rozpuszczonej i temperaturą roztworu uzyskano z wykresu fazowego, przy założeniu lokalnej równowagi termodynamicznej na granicy fazowej. W obliczeniach entalpii roztworu zastosowano proponowany w rozdziale 3 algorytm, w którym w wyznaczaniu entalpii fazy stałej i fazy ciekłej wykorzystuje się znany fakt niezależności przyrostu parametru termodynamicznego od drogi przemiany. W celu uwzględnienia skończonej dyfuzji składnika w fazie stałej (mikrosegregacja) wprowadzono do modelu numerycznego uśrednioną lokalną koncentrację substancji rozpuszczonej w tej fazie [7,8]. Zasadniczym problemem jest zbieżność procesu iteracyjnego dopasowania pól koncentracji, temperatury i udziału objętościowego lub masowego fazy ciekłej w obszarze dwufazowym. Choć analityczne związki (wynikające z zależności udziału składnika od koncentracji i temperatury oraz z równania linii likwidusa na wykresie fazowym) są jednoznaczne, to ich bezpośrednie użycie prowadzi do rozbieżności (zwłaszcza przy dużych ciepłach przemiany fazowej, typowych dla ciekłych metali). Konieczne są więc specjalne środki w celu obejścia tych trudności, np. przedefiniowanie równania energii tak by człon związany z efektem ciepła utajonego przenieść częściowo do członu pojemności cieplnej układu [12] lub zastosowanie specjalnej techniki uaktualniania udziału

masowego fazy ciekłej w mieszaniu przez wykorzystanie funkcyjnej zależności temperatury roztworu od wspomnianego udziału oraz koncentracji substancji rozpuszczonej [7]. Autorzy projektu zaproponowali tu własny algorytm oparty na rozwinięciu kolejnej iteracji udziału fazy ciekłej w szereg Taylora względem poprzedniego przybliżenia. Jest to rozszerzenie koncepcji Vollera [13], zaproponowanej w sytuacji, gdy entalpia roztworu (udział fazy ciekłej) jest jedynie funkcją temperatury, na przypadek funkcji dwóch zmiennych (udział fazy ciekłej jest funkcją koncentracji i temperatury). Potrzebne tu pochodne cząstkowe oblicza się ze wspomnianych wyżej związków analitycznych. Algorytm ten, choć obiecujący, nie został jeszcze do końca przeanalizowany, w szczególności nie uzyskano jeszcze zadawalających wyników dla rzeczywistych stopów metali.

4.2 Równania MES, algorytmny obliczeniowe

4.2.1 Model matematyczny

W zapisie równań zachowania masy, pędu, energii i składnika układu binarnego, podlegającego przemianom fazowej ciecz-ciało stałe, wykorzystano model pojedynczego kontinuum (nazywany też modelem mieszanki lub jednofazowym) Bennona i Incropera [6,7], w którym wszystkie zmienne polowe odnoszą się do roztworu, a równania zachowania dla mieszanki otrzymuje się przez sumowanie odpowiednich równań opisujących prawa zachowania dla każdej z dwóch faz. Przyjęto też następujące (powszechnie stosowane) założenia podstawowe:

- dwuwymiarowość obszaru geometrycznego, powszechnie przyjmowana na etapie tworzenia i testowania nowych modeli obliczeniowych, w celu ograniczenia kosztów tych obliczeń. W zastosowanej w pracy metodzie MES i dalej opisanych jej algorytmach rozszerzenie programu na złożone trójwymiarowe obszary jest niemal automatyczne, wiąże się jedynie ze zmianą biblioteki elementów.
- model nieściśliwego płynu newtonowskiego. Założenie to prowadzi do wymogu stałej gęstości mieszanki, co dla dowolnych udziałów objętościowych fazy ciekłej (i w konsekwencji też stałej) implikuje równość gęstości obu faz. Założenie takie jest rozsądne w wielu przypadkach praktycznych [7,8], choć uniemożliwia analizę skurczu solidyfikacyjnego i ruchów konwekcyjnych wywołanych zmianami objętości. W naszych rozważaniach jest ono podstawowym warunkiem zastosowania metody rzutu w rozdzielaniu obliczeń pól prędkości i ciśnienia.
- laminarny charakter ruchów konwekcyjnych
- model anizotropowego medium porowatego dla obszaru dwufazowego i warunki nasycenia dla roztworu wypełniającego ten obszar (brak porów, suma udziałów fazy stałej i ciekłej równa jedności)
- zerowa prędkość fazy stałej w tym obszarze (typowe dla struktur dendrytów iglastych lub równoosiowych)
- stałe, choć na ogół różne, ciepła właściwe obu faz.
- warunki lokalnej równowagi termodynamicznej na granicy obu faz – możliwość wykorzystania wykresu fazowego w celu wyznaczenia koncentracji w fazie ciekłej dla danej temperatury roztworu.

Wprowadzenie tych założeń do modelu Bennona i Incropera prowadzi do następującego układu równań zachowania

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial v_i}{\partial x_i} &= 0 \\ \rho \frac{\partial v_i}{\partial t} + \rho v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} &= -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_1 \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) + \rho g B_i + S_{v_i} \\ \frac{\partial(\rho H)}{\partial t} + v_j \frac{\partial(\rho H_1)}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) \\ \frac{\partial(\rho C)}{\partial t} + v_j \frac{\partial(\rho C_1)}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial C_1}{\partial x_j} \right) \end{aligned} \right\} \quad (4.1)$$

gdzie x_i, t, μ_1 i g oznaczają odpowiednio i -tą współrzędną globalnego układu kartezjańskiego ($i=1,2$ dla przypadku dwuwymiarowego), czas, dynamiczną lepkość płynu i przyspieszenie ziemskie.

W powyższym wzorze i wszystkich dalszych zastosowano skrócony zapis sumacyjny (konwencję Einsteina), gdzie powtarzające się indeksy oznaczają sumowanie w całym zakresie ich zmienności.

Gęstość mieszaniny,

$$\rho = r_s \rho_s + r_l \rho_l = \text{const.} \quad (4.2)$$

gdzie r_α jest udziałem objętościowym jednej z faz ($\alpha = l$ lub $\alpha = s$), zaś indeksy „s” i „l” oznaczają odpowiednio fazę stałą i ciekłą, jest stała zgodnie z założeniem nieściśliwości płynu, co prowadzi do $\rho_s = \rho_l$ dla dowolnego udziału r_l .

Składowe pozornej prędkości w obszarze dwufazowym (rzeczywistej w cieczy)

$$v_i = f_s(v_s)_i + f_l(v_l)_i = f_l(v_l)_i \quad (4.3)$$

wobec założenia $(v_s)_i = 0$, gdzie f_α jest udziałem masowym fazy stałej lub ciekłej.

Udziały masowe i objętościowe spełniają relacje

$$\left. \begin{aligned} f_s + f_l &= 1 \\ r_s + r_l &= 1 \end{aligned} \right\} \quad (4.4)$$

$$\text{oraz} \quad \left. \begin{aligned} f_s &= \frac{\rho_s}{\rho} r_s \\ f_l &= \frac{\rho_s}{\rho} r_l \end{aligned} \right\}, \quad \text{co wobec } \rho_s = \rho_l = \rho \quad \text{daje} \quad \left. \begin{aligned} f_s &= r_s \\ f_l &= r_l \end{aligned} \right\} \quad (4.5)$$

Entalpia mieszaniny może być wyznaczona ze związku

$$(\rho H) = \rho(f_s H_s + f_l H_l) = \rho_s r_s H_s + \rho_l r_l H_l = \rho(r_s H_s + r_l H_l) \quad (4.6)$$

gdzie H jest entalpią właściwą (tj. na kg roztworu), H_s entalpią właściwą fazy stałej, zaś H_l całkowitą (z efektem ciepła utajonego) entalpią właściwą fazy ciekłej w temperaturze T roztworu. Sposób wyznaczania wielkości H_s oraz H_l przedstawiono w części 3 opracowania i w dalszej części tego rozdziału. Ogólnie, w układach binarnych entalpia roztworu jest funkcją temperatury i koncentracji, $H = H(T, C)$. Związek taki może być wyznaczony eksperymentalnie [14] lub na podstawie analiz teoretycznych, w których wykorzystuje się założenie lokalnej równowagi termodynamicznej na granicy fazowej [6,7,15]. Koncentracja C , rozumiana jako uśredniony udział masowy substancji rozpuszczonej w roztworze, zależy od składu fazowego i może być określona ze związku [8,15]

$$C = f_s \bar{C}_s + f_l C_l \quad (4.7)$$

Analizowane dalej substancje mogą mieć w obszarze dwufazowym jedną z dwóch struktur, rozróżnianych na poziomie makroskopowym [15]. W pierwszym z możliwych tu przypadków, charakterystycznym dla materiałów bezpostaciowych takich jak szkło, woski, parafiny itp., faza stała jest całkowicie rozproszona w ciekłej, obie mają te same prędkości i każdy fragment fazy stałej pozostaje w równowadze z otaczającą go cieczą. Obowiązuje reguła dźwigni, a równanie (4.7) sprowadza się do

$$C = f_s C_s + f_l C_l \text{ oraz } C_s = \kappa_p C_l \quad (4.8)$$

gdzie: κ_p jest współczynnikiem podziału równowagowego (partition coefficient), zaś koncentracje poszczególnych faz odczytane są z wykresu fazowego dla danej temperatury roztworu. W drugim modelu, charakterystycznym dla struktury dendrytów iglastych uzyskiwanej w procesie krzepnięcia stopów metali, obie fazy są wyraźnie rozróżnialne i mają różne prędkości. Zgodnie z przyjętym wyżej założeniem ograniczamy się tu do statycznej solidyfikacji, w której faza stała jest nieruchoma, tj. $(v_s)_i = 0$. Ta makroskopowa struktura może mieć jednak różne formy na poziomie mikroskopowym [15]. Gdy faza stała jest rozproszona w ciekłej, występuje lokalna równowaga termodynamiczna na tym poziomie (choć brak jej na poziomie makroskopowym), obowiązuje też reguła dźwigni i równanie (4.8). Wynika to z przestrzennego uśrednienia koncentracji C roztworu w mikroskopowej objętości (volume probe) $V^* = V_s^* + V_l^*$

$$C = \frac{\int \rho_s C_s dV_s^* + \int \rho_l C_l dV_l^*}{\rho V^*} \quad (4.9)$$

co, wobec jednorodności C_s i C_l oraz $\rho_s = \text{const.}$ i $\rho_l = \text{const.}$ w mikrostrukturze rozproszonej, prowadzi do (4.8). Jeśli jednak na poziomie mikroskopowym obie fazy są rozróżnialne, wielkość C zależy od założonych mechanizmów lokalnego transportu substancji rozpuszczonej [15]. Gdy dyfuzja tego składnika jest nieskończona w obu fazach, rozkłady koncentracji C_s i C_l są jednorodne. Oznacza to, że każdy fragment fazy stałej jest w równowadze z otaczającą cieczą. Zatem i w tym przypadku obowiązuje (4.8). Jeśli jednak dyfuzja składnika w cieple stałym jest pomijana, a w cieczy pozostaje nieskończona (znany w metalurgii model Scheila [16]) wówczas, wobec jednorodności C_l oraz $dV_s^* = V^* dr_s$, równanie (4.9) prowadzi do

$$C = \frac{1}{\rho} \int_0^{f_s} \rho_s C_s dr_s + f_l C_l = \int_0^{f_s} C_s df_s + f_l C_l = f_s \bar{C}_s + f_l C_l \quad (4.10)$$

W praktyce, przemiana fazowa substancji dwuskładnikowej często przebiega tak, że nie jest na tyle powolna by zdążyła się ustalić jednorodna kompozycja w obu fazach (zgodna z wykresem fazowym), nie jest też na tyle szybka by uniemożliwić dyfuzję w fazie stałej. W konsekwencji występuje skończony proces dyfuzyjnego przenoszenia substancji rozpuszczonej w zestalonym materiale, proces mikrosegregacji. Powyższy wzór, zawierający lokalną średnią koncentrację składnika w fazie stałej $\bar{C}_s$, umożliwia analizowanie również tego przypadku [8].

Dyfuzyjny transport substancji rozpuszczonej zdefiniowany jest przez współczynnik dyfuzji D w równaniu (4.1). W modelu mieszaniny Bennona i Incropera [6] przyjmuje on postać

$$D = \left(\frac{\rho_s}{\rho} r_s D_s \kappa_p + \frac{\rho_l}{\rho} r_l D_l \right) = f_s D_s \kappa_p + f_l D_l \quad (4.11)$$

gdzie D_α jest współczynnikiem dyfuzji substancji rozpuszczonej w fazie stałej ($\alpha = s$) lub ciekłej ($\alpha = l$). W przypadku pomijalnej dyfuzji w fazie stałej (model Scheila) (4.11) redukuje się do $D = f_l D_l$

Przewodność cieplną λ w obszarze dwufazowym ciec-ciało stałe definiuje się powszechnie [6,7,8,15,17] (podobnie jak inne wielkości dla roztworu) jako średnią ważoną z wartości dla obu faz, gdzie wagami są udziały objętościowe r_α

$$\lambda = r_s \lambda_s + r_l \lambda_l \quad (4.12)$$

Zależność ta jest poprawna dla substancji jednoskładnikowych i materiałów bezpostaciowych. Rodzi natomiast pewne wątpliwości w odniesieniu do obszaru dendrytów o wyraźnie kierunkowej strukturze. Intensywność przewodzenia ciepła jest w tym przypadku wyraźnie różna wzdłuż głównego kierunku wzrostu dendrytów i prostopadle do niego. Dlatego, zdaniem autorów projektu, izotropowy model (4.12) należy zastąpić anizotropowym z tensorem przewodności cieplnej λ_{ij} . Szerszą dyskusję tego problemu przeprowadzono w dalszej części niniejszego rozdziału (punkt 4.5).

Składowe siły wyporu, będące wynikiem gradientów gęstości i koncentracji definiuje się względem pewnego stanu odniesienia, zdefiniowanego przez $T_{ref.}$, $\rho_{ref.}$ oraz $C_{ref.}$

$$\rho g B_i = \rho_{ref.} g \cos \theta_i (\beta_T (T - T_{ref.}) + \beta_s (C_l - C_{ref.})) \quad (4.13)$$

gdzie β_T i β_s są współczynnikami rozszerzalności termicznej i stężeniowej, zaś g i $\cos \theta_i$ odpowiednio przyspieszeniem ziemskim i kosinusem kierunkowym nachylenia wektora siły wyporu. Przyjęto tu model Boussinesqa [18], tzn. założenie o stałej gęstości ($\rho \approx \rho_{ref.}$) z wyjątkiem członu siły wyporu w równaniu pędu, gdzie zmienia się ona liniowo ze zmianami temperatury i koncentracji substancji rozpuszczonej. Model Boussinesqa nie zawsze jest prawdziwy. W szczególności nie może on być przyjęty w obliczeniach konwekcji swobodnej wody w niskich temperaturach, obejmujących punkt anomalii gęstości czynnika (około 4°C), gdzie następuje zmiana znaku pochodnej gęstości po temperaturze. W tym przypadku termiczne siły wyporu definiuje się jako [18,11]

$$(\rho g B_i)_T = g \cos \theta_i (\rho_{ref.} - \rho) \quad (4.14)$$

Dodatkowy człon źródłowy S_{v_i} w równaniach ruchu wynika z przyjętego modelu przepływu w obszarze dwufazowym traktowanym jako porowate medium Darcy'ego, w którym spadek ciśnienia jest proporcjonalny do prędkości płynu i jego gęstości oraz odwrotnie proporcjonalny do przepuszczalności ośrodka – fizycznej własności porowatego medium określającej jego opór przepływu

$$S_{v_i} = \mu_l K_{ij}^{-1} v_j \quad (4.15)$$

gdzie μ_l jest dynamiczną lepkością płynu. W przypadku substancji jednoskładnikowych wykorzystuje się model ośrodka porowatego jako zabieg czysto matematyczny wygaszania prędkości w objętościach kontrolnych zawierających obie fazy [15,19]. Zastępuje się tensor przepuszczalności K_{ij} współczynnikiem przepuszczalności K , który zgodnie z modelem przepuszczalności Kozeny-Carmana [6,19] jest następującą funkcją udziału objętościowego fazy ciekłej

$$K = K_0 \frac{r_l^3}{(1 - r_l)^2} \quad (4.16)$$

Dla substancji jednoskładnikowych o izotermicznej zmianie fazy oraz substancji bezpostaciowych współczynnik K_0 dobiera się w sposób arbitralny (najczęściej rzędu 10^6). Bowiem głównym zadaniem członu źródłowego (4.15) wraz z (4.16) jest wymuszanie spadku prędkości płynu w objętości zawierającej dwie fazy - od fizycznej prędkości cieczy gdy $r_l = 1$ do zera, gdy objętość jest wypełniona tylko fazą stałą. Osiąga się to przez zwiększanie udziału członu S_{v_i} w równaniu pędu w stosunku do pozostałych składowych tego równania gdy $r_l \rightarrow 0$. W obszarach o

strukturze dendrytycznej, charakterystycznych dla solidyfikacji stopów metali, tensor przepuszczalności ma znaczenie fizyczne. Wartości jego składowych uzyskuje się z rzutowania na kierunek układu współrzędnych istotnie różniących się od siebie przepuszczalności wzdłuż dwóch kierunków: głównego kierunku wzrostu dendrytów (normalnego do lokalnej izotermi) oraz prostopadłego do niego. Wielkości tych przepuszczalności określa się na podstawie analizy morfologii obszaru dendrytycznego, w szczególności odległości pomiędzy głównymi i podrzędnymi gałęziami dendrytów [20,21].

4.2.2 Dyskretyzacja przestrzenna MES

W modelu przestrzennej dyskretyzacji MES wyróżnia się w rozważanym obszarze i na jego powierzchniach granicznych dużą lecz skończoną liczbę punktów, zwanych węzłami. Wartości poszukiwanych funkcji polowych w tych punktach opisują w sposób przybliżony (dyskretny) zachowanie się układu w danej chwili czasu. By określić wartości fizycznych zmiennych polowych w dowolnym miejscu przestrzeni, „rozpiną” się na tych węzłach niewielkie podobszary, zwane elementami skończonymi, tak by nie zachodziły na siebie i by pokryły cały rozważany obszar. W każdym elemencie definiuje się, w jego lokalnych współrzędnych, interpolacje wielomianowe poszukiwanych funkcji. Ich klasy ciągłości dobiera się tak by opis pola zmiennej w całym obszarze był sumą wielomianowych przybliżeń w poszczególnych elementach [22]. Zatem, poszukiwane ciśnienie p , składowe prędkości v_i , temperaturę T , entalpię H i koncentrację substancji rozpuszczonej C , w chwili czasu t , zakłada się w postaci iloczynów wielomianowych funkcji geometrycznych P_m^e i N_k^e , zwanych funkcjami kształtu, a zdefiniowanych w lokalnych współrzędnych elementowych $\bar{\zeta}^e$, oraz wartości odpowiednich zmiennych p_m, v_{ik}, T_k, H_k i C_k w węzłach elementu

$$\left. \begin{aligned} p(\bar{x}, t) &= \sum_e P_m^e(\bar{\zeta}^e(\bar{x})) p_m(t) & \text{dla } m = 1, 2, \dots, N_p \\ v_i(\bar{x}, t) &= \sum_e N_k^e(\bar{\zeta}^e(\bar{x})) v_{ik}(t) \\ T(\bar{x}, t) &= \sum_e N_k^e(\bar{\zeta}^e(\bar{x})) T_k(t) \\ H(\bar{x}, t) &= \sum_e N_k^e(\bar{\zeta}^e(\bar{x})) H_k(t) \\ C(\bar{x}, t) &= \sum_e N_k^e(\bar{\zeta}^e(\bar{x})) C_k(t) \end{aligned} \right\} \quad \text{dla } k = 1, 2, \dots, N_v \quad (4.17)$$

Współrzędne globalne $\bar{x}$, o składowych x_i ($i=1,2,3$ w geometrii trójwymiarowej lub $i=1,2$ w dwuwymiarowej), związane są ze współrzędnymi lokalnymi $\bar{\zeta}^e$, o składowych ζ_i^e , wzajemnie jednoznacznie transformacją

$$x_i(\bar{\zeta}^e) = N_k^e(\bar{\zeta}^e) x_{ik} \quad \text{dla } k = 1, 2, \dots, N_v \quad (4.18)$$

Funkcje kształtu P_m^e i N_k^e oraz liczby węzłów interpolacji ciśnienia N_p i pozostałych zmiennych N_v mogą być jednakowe (interpolacja jednakowego stopnia) lub różne (interpolacja niejednakowego stopnia). Drugi z przypadków stosuje się dla uniknięcia niefizycznych rozkładów ciśnienia (tak zwanych checkerboard pressure mode) - odpowiada on znanej w różnicach skończonych technice siatek przesuniętych.

Wstawiając (4.17) zarówno do układu równań różniczkowych (4.1) jak i uzupełniających je warunków brzegowych na powierzchniach Γ ograniczających rozważany obszar Ω , otrzymuje

się reziduum $\text{Re } z_\Omega$ dla każdego z równań oraz reziduum $\text{Re } z_\Gamma$ dla odpowiednich warunków brzegowych. Zgodnie z metodą reszt ważonych Galerkina, proces minimalizacji tych błędów, wynikających z zastąpienia niewiadomych wielkości polowych interpolacjami MES, polega na zerowaniu ważonych, w całym obszarze i na jego granicach, reziduów $\text{Re } z_\Omega$ i $\text{Re } z_\Gamma$

$$\int_{\Omega} N_k \text{Re } z_\Omega d\Omega - \int_{\Gamma} N_k \text{Re } z_\Gamma d\Gamma = 0 \quad \text{dla } k = 1, 2, \dots, N_v \quad (4.19)$$

Funkcje wagowe są tożsame z funkcjami kształtu. Zdefiniowane są one „kawałkami” w lokalnej bazie elementów, co pozwala każdą z całek wzoru (4.19) wyznaczać przez sumowanie odpowiednich całek elementowych [22]. Stosując (4.19) do każdego z równań układu (4.1), oraz wykorzystując tożsamość Greena i twierdzenie Gaussa-Greena [22] (w celu obniżenia klasy ciągłości funkcji kształtu), układ 5-ciu równań różniczkowych cząstkowych (4.1) sprowadza się do układu $5 \cdot N_v$ równań różniczkowych zwyczajnych (wciąż nie scałkowanych w czasie), który ma następującą, zwartą postać macierzową

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{D} \cdot \mathbf{v} &= 0 \\ \mathbf{M} \cdot \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} + (\mathbf{K}_v^c(\mathbf{v}) + \mathbf{K}_v^d) \cdot \mathbf{v}_i &= -\mathbf{G} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{F}_i \quad \text{dla } i = 1, 2, 3 \\ \mathbf{C}_H \cdot \frac{d\mathbf{H}}{dt} + \mathbf{K}_H^c(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{H}_i + \mathbf{K}_T^d \cdot \mathbf{T} &= \mathbf{F}_T \\ \mathbf{C}_C \cdot \frac{d\mathbf{C}}{dt} + \mathbf{K}_C^c(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{C}_i + \mathbf{K}_C^d \cdot \mathbf{C} &= \mathbf{F}_C \end{aligned} \right\} \quad (4.20)$$

gdzie: $\mathbf{D}, \mathbf{G}, \mathbf{M}, \mathbf{K}_v^c$ i $\mathbf{K}_v^d$ to odpowiednio macierze dywergencji, gradientu ciśnienia, masy, dyfuzji i adwekcji pędu, $\mathbf{C}_H, \mathbf{K}_H^c$ i $\mathbf{K}_H^d$ macierze pojemności cieplnej, konwekcji i przewodzenia. Podobnie, $\mathbf{C}_C, \mathbf{K}_C^c$ i $\mathbf{K}_C^d$ to tablice pojemności, konwekcji i dyfuzji substancji rozpuszczonej. Wektory prawych stron równań (4.20), odpowiednio $\mathbf{F}_i, \mathbf{F}_T$ i $\mathbf{F}_C$, wynikają z członów źródłowych równań (4.1) oraz warunków brzegowych drugiego i trzeciego rodzaju. $\mathbf{p}, \mathbf{v}_i, \mathbf{T}, \mathbf{H}, \mathbf{H}_i, \mathbf{C}, \mathbf{C}_i$ to wektory wartości węzłowych odpowiednio: ciśnienia, składowych prędkości, temperatury, entalpii roztworu i entalpii fazy ciekłej, koncentracji substancji rozpuszczonej w roztworze i w fazie ciekłej.

4.2.3 Efektywne schematy całkowania w czasie

Drugim etapem budowy modelu dyskretnego równań (4.1) jest ich całkowanie w czasie, które prowadzi do końcowego układu równań algebraicznych tego modelu. Wybór właściwej techniki „kroczenia” w czasie odgrywa zasadniczą rolę w poszukiwaniu obliczeniowo-efektywnych algorytmów rozwiązania układu (4.20). Najlepsze byłoby jednoczesne traktowanie całego zbioru tych sprzężonych nieliniowych równań różniczkowych zwyczajnych, najlepiej przy pomocy niejawnego schematu całkowania w czasie. Zauważmy bowiem, że w modelu płynu nieściśliwego ciśnienie jest naturalną wielkością niejawną. Nie można więc użyć jawnego schematu zarówno w odniesieniu do tej wielkości jak i równania ciągłości. Bowiem w każdej chwili czasu dopasowują się niejawnie pola ciśnienia i prędkości poprzez warunek nieściśliwości. Naturalnym byłoby traktowanie w podobny sposób pozostałych członów równań zachowania (4.1). Niestety, takie podejście wymaga jednoczesnego rozwiązywania całego układu (4.20), co w praktycznych, wielowymiarowych przypadkach jest bardzo kosztowne i czasochłonne (bardzo duże czasy CPU). Dlatego powszechna jest obecnie tendencja poszukiwania algorytmów iteracyjnych, w których w każdym kroku czasowym rozpręga się równania, rozwiązując każde oddzielnie w określonej sekwencji. Znaczne obniżenie kosztów obliczeń uzyskuje się też przez traktowanie nieliniowych członów równań zachowania, tj. członów konwekcyjnych, w sposób jawny, tzn biorąc ich

wartości z poprzedniego kroku czasowego, natomiast człony dyfuzyjne całkuje się niejawnie. Otrzymuje się w ten sposób jawno-niejawne schemat całkowania w czasie.

Jawno-niejawny schemat Adamsa–Bashforth–Eulera

W jednej z dwóch wersji programów MES, opracowanych w ramach realizacji projektu badawczego, do scałkowania równań (4.20) zastosowano (podobnie jak w [4]) całkowicie niejawny schemat Eulera w odniesieniu do członów dyfuzyjnych równań pędu, energii i koncentracji oraz jawny trójpoziomowy schemat Adamsa-Bashfortha do członów konwekcyjnych tych równań. Uzyskany tą drogą układ równań algebraicznych ma następującą postać macierzową

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{D} \cdot \mathbf{v}^{n+1} &= \mathbf{0} \\ \mathbf{M} \cdot \frac{\mathbf{v}_i^{n+1} - \mathbf{v}_i^n}{\Delta t} + \mathbf{K}_v^d \cdot \mathbf{v}_i^{n+1} &= \mathbf{F}_i - \mathbf{G} \cdot \mathbf{p}^{n+1} - \left(\frac{3}{2} \mathbf{K}_v^c(\mathbf{v}^n) \cdot \mathbf{v}^n - \frac{1}{2} \mathbf{K}_v^c(\mathbf{v}^{n-1}) \cdot \mathbf{v}^{n-1} \right) \\ \mathbf{C}_H \cdot \frac{\mathbf{H}^{n+1} - \mathbf{H}^n}{\Delta t} + \mathbf{K}_T^d \cdot \mathbf{T}^{n+1} &= \mathbf{F}_T - \left(\frac{3}{2} \mathbf{K}_H^c(\mathbf{v}^n) \cdot \mathbf{H}^n - \frac{1}{2} \mathbf{K}_H^c(\mathbf{v}^{n-1}) \cdot \mathbf{H}^{n-1} \right) \\ \mathbf{C}_C \cdot \frac{\mathbf{C}^{n+1} - \mathbf{C}^n}{\Delta t} + \mathbf{K}_C^d \cdot \mathbf{C}^{n+1} &= \mathbf{F}_C - \left(\frac{3}{2} \mathbf{K}_C^c(\mathbf{v}^n) \cdot \mathbf{C}^n - \frac{1}{2} \mathbf{K}_C^c(\mathbf{v}^{n-1}) \cdot \mathbf{C}^{n-1} \right) \end{aligned} \right\}$$

gdzie Δt jest krokiem czasowym, zaś górne indeksy oznaczają odpowiednie chwile czasowe.

Algorytm rozdzielania pól prędkości i ciśnienia – metoda rzutu

Dalsze zmniejszenie czasu CPU można uzyskać poprzez rozprzęgnięcie obliczeń (niejawnie sprzężonych) pól prędkości i ciśnienia. W ostatnich latach powstało wiele tego typu algorytmów. W kontekście metody elementów skończonych najbardziej obiecujące są metody rzutu [1,2,11]. W opracowanym programie wykorzystano opcjonalnie jeden z dwóch wariantów tej techniki:

- metodę “Projection_1” Chorina [1] i Gresho [2], gdzie w pierwszym kroku równanie pędu rozwiązywane jest przy pominięciu gradientu ciśnienia. Tak uzyskane wstępne pole prędkości, którego dywergencja nie jest równa zero, powinno być zmodyfikowane przez uwzględnienie wpływu gradientu ciśnienia na przyspieszenia płynu oraz warunku nieściśliwości. Prowadzi to do równania Poissona dla ciśnienia. Po obliczeniu tej wielkości połowej wykorzystuje się jej gradient do korekty wstępnego pola prędkości.
- metodę “Projection_2” Gresho [2], gdzie w pierwszym etapie rozwiązuje się równanie pędu z gradientem ciśnienia z poprzedniego kroku czasowego. Tak uzyskane wstępne pole prędkości, które nie spełnia warunku nieściśliwości, rzutuje się na podprzestrzeń bezdywergentnego pola wektorowego, co prowadzi do równania Poissona dla mnożnika Lagrange’a Ψ [2]. Jego gradient daje korektę pola prędkości, po której następuje aktualizacja ciśnienia.

Zatem, dla znanego (z poprzedniego kroku czasowego) ciśnienia kinematycznego p^n / ρ oraz

bezdywergentnego pola prędkości $\mathbf{v}_i^n$, przy $\frac{\partial \mathbf{v}_i^n}{\partial x_i} = 0$:

1. rozwiązywane jest równanie pędu w celu obliczenia wstępnego pola prędkości $\tilde{\mathbf{v}}_i^{n+1}$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}_i^{n+1}}{\partial t} + \mathbf{v}_j^n \frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}_i^{n+1}}{\partial \mathbf{x}_j} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} \left(\frac{\mu_1}{\rho} \frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}_i^{n+1}}{\partial \mathbf{x}_j} \right) + \mathbf{S}_i \\ \text{gdzie: } \mathbf{S}_i &= -\mathbf{a}_\Psi \frac{1}{\rho} \frac{\partial \mathbf{p}^n}{\partial \mathbf{x}_i} - \frac{\mu_1}{\rho} \mathbf{K}_{ij}^{-1} \mathbf{v}_j^n + \mathbf{gB}_i \\ \text{oraz } \tilde{\mathbf{v}}_i &= \mathbf{v}_{ib} \quad \text{na } \Gamma \end{aligned} \right\} \quad \text{gdzie}$$

$$\mathbf{a}_\Psi = \begin{cases} 0 & \text{dla Projection_1} \\ 1 & \text{dla Projection_2} \end{cases}$$

2. Wektor prędkości $\tilde{\mathbf{v}}_i^{n+1}$ jest rzutowany na wspomnianą przestrzeń bezdywergentnego pola wektorowego, co prowadzi do równania Poissona dla mnożnika Lagrange'a Ψ

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{x}_i} \right) = \frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}_i^{n+1}}{\partial \mathbf{x}_i} \quad \text{przy } \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad \text{na } \Gamma$$

3. Po obliczeniu wartości Ψ dokonuje się korekty składowych prędkości zgodnie z

$$\mathbf{v}_i^{n+1} = \tilde{\mathbf{v}}_i^{n+1} - \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{x}_i}$$

oraz ciśnienia kinematycznego

$$(\mathbf{p}^{n+1} / \rho) = \begin{cases} \frac{\Psi}{\Delta t} & \text{Projection_1} \\ (\mathbf{p}^n / \rho) + \frac{2}{\Delta t} \Psi & \text{Projection_2} \end{cases}$$

co kończy pojedynczy cykl obliczeniowy w metodzie rzutu.

Zastosowanie tego algorytmu w jawno-niejawnym modelu MES dla równań pędu i ciągłości prowadzi do następującego układu równań macierzowych

$$\left. \begin{aligned} (1) \quad \mathbf{M} \cdot \frac{\tilde{\mathbf{v}}_i^{n+1} - \mathbf{v}_i^n}{\Delta t} + \mathbf{K}_v^d \cdot \tilde{\mathbf{v}}_i^{n+1} &= \mathbf{F}_i - \mathbf{a}_p \mathbf{G} \cdot \mathbf{p}^n \\ &\quad - \left(\frac{3}{2} \mathbf{K}_v^c(\mathbf{v}^n) \cdot \mathbf{v}^n - \frac{1}{2} \mathbf{K}_v^c(\mathbf{v}^{n-1}) \cdot \mathbf{v}^{n-1} \right) \\ (2) \quad \mathbf{G}^T \mathbf{M}^{-1} \mathbf{G} \cdot \Psi &= -\mathbf{G}^T \cdot \tilde{\mathbf{v}}_i^{n+1} \\ (3) \quad \mathbf{v}^{n+1} &= \tilde{\mathbf{v}}_i^{n+1} - \mathbf{M}^{-1} \mathbf{G} \cdot \Psi \\ \mathbf{p}^{n+1} / \rho &= \begin{cases} \frac{\Psi}{\Delta t} & \text{Projection_1} \\ \mathbf{p}^n / \rho + \frac{2}{\Delta t} \Psi & \text{Projection_2} \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (4.22)$$

Algorytm rozdzielania operatorów dyfuzji i konwekcji

Analiza zachowania się rozwiązań MES na siatkach o umiarkowanych gęstościach podziału, w której rozważa się warunki poprawnej, dyskretnej reprezentacji głównych cech fizycznych zjawisk transportu konwekcyjno-dyfuzyjnego [23,5], może być także użytecznym środkiem poszukiwania obliczeniowo efektywnych algorytmów MES. Przedmiotem jej analiz jest pojedyncze równanie konwekcyjno-dyfuzyjnego transportu skalarnej wielkości Φ , o postaci

$$a_{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(a_{\Phi} v_j \Phi - b_{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \right) = S_{\Phi} \quad (4.23)$$

gdzie a_{Φ} , b_{Φ} i S_{Φ} oznaczają odpowiednio współczynniki pojemności, dyfuzji i człon źródłowy. Każde z równań (4.1) ma formę analogiczną do (4.23). Zatem (4.23) może być traktowane jako równanie modelowe, zaś jego efektywna dyskretyzacja na siatce elementów skończonych jest niezbędnym prerekwizytem w skutecznym i poprawnym rozwiązywaniu całego układu (4.1). Analiza warunków realizacji zasad zachowania i maksimum, jednokierunkowości (wzdłuż wektora prędkości) transportu konwekcyjnego oraz eliminacji numerycznego rozpraszania i dyspersji [23,5] prowadzi do wniosku, że dokładność i efektywność modeli MES zależy od intensywności obu form transportu, tj. dyfuzji i konwekcji. Modele efektywne w sytuacjach, gdy dominuje jedna z tych form, nie są dobrym wyborem, gdy drugi z mechanizmów przeważa. Dotyczy to w szczególności wyboru formy macierzy pojemności i kroków przestrzenno-czasowego podziału. Zatem inny powinien być wybór w problemach dominującej konwekcji, inny gdy dominuje dyfuzja. Tymczasem, w realnych zagadnieniach ruchu płynu i wymiany ciepła występuje sprzężony transport konwekcyjno-dyfuzyjny, a intensywność tych form zmienia się w obszarze i w czasie (np. z odległością od ścianki ograniczającej przepływ). Zatem, by wykorzystać wnioski z analizy błędów zachowań rozwiązań MES konieczna jest dekompozycja operatorów dyfuzji i konwekcji. Idea takiego algorytmu została przedstawiona w [3], gdzie wyjściowy problem opisany równaniem różniczkowym

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \mathbf{A}(\Phi) &= 0 \\ \Phi(0) &= \Phi_0 \end{aligned} \right\} \text{ gdzie: } \mathbf{A}(\Phi) = \sum_{\alpha=1}^n \mathbf{A}_{\alpha}(\Phi) \text{ i } \mathbf{A}_{\alpha}(\Phi) \geq 0 \quad (4.24)$$

jest zastępowany szeregiem następujących po sobie problemów

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \Phi_{\alpha}}{\partial t} + \mathbf{A}_{\alpha}(\Phi_{\alpha}) &= 0 \\ \Phi_{\alpha}^j(0) &= \Phi_{\alpha-1}^{j+1} \end{aligned} \right\} \quad (4.25)$$

gdzie końcowe rozwiązanie poprzedniego jest początkowym dla następnego.

Zgodnie z (4.24) i (4.25) opracowano, w ramach realizacji projektu badawczego, algorytm MES, w którym równanie (4.23) jest rozdzielane względem fizycznych procesów, tj. konwekcji i dyfuzji, a udział każdego z nich jest kolejno analizowany. W każdym kroku czasowym Δt rozwiązywany jest najpierw problem konwekcyjny

$$a_{\Phi} \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (a_{\Phi} v_i \tilde{\Phi}) = 0 \quad (4.26)$$

Zastosowano tu metodę Taylor-Galerkina [24,25], w której wykorzystuje się wyższe pochodne czasowego szeregu Taylora w przybliżeniu $\partial \Phi / \partial t$. Technika ta daje dobrą dokładność rozwiązań MES na rzadkiej siatce podziału, przez ograniczenie numerycznej dyssypacji i dyspersji konwekcyjnie przenoszonego skalaru na siatce [24,25,23,5] oraz eliminację przestrzennych oscylacji i poprzecznej dyfuzji rozwiązania. Jej użycie, wraz z modelem przestrzennej

dyskretyzacji elementami skończonymi (równania (4.17-4.18)), sprowadza (4.26) do układu równań algebraicznych ([5,23]) o postaci

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left(N_k N_j + \frac{\Delta t^2}{6} \left(\frac{\partial N_k}{\partial x_1} v_1 + \frac{\partial N_k}{\partial x_2} v_2 \right) \left(\frac{\partial N_j}{\partial x_1} v_1 + \frac{\partial N_j}{\partial x_2} v_2 \right) \right) d\Omega \cdot \frac{\tilde{\Phi}_j^{n+1} - \Phi_j^n}{\Delta t} = \\ - \int_{\Omega} \left(N_k + \frac{v_1 \Delta t}{2} \frac{\partial N_k}{\partial x_1} + \frac{v_2 \Delta t}{2} \frac{\partial N_k}{\partial x_2} \right) \left(\frac{\partial N_j}{\partial x_1} v_1 + \frac{\partial N_j}{\partial x_2} v_2 \right) d\Omega \cdot \Phi_j^n + (\text{cz.w.b.}) \end{aligned} \quad (4.27)$$

gdzie: (cz.w.b) oznacza całkę po brzegu Γ dla warunków brzegowych drugiego bądź trzeciego rodzaju, zaś $k, j = 1, 2, \dots, N_v$. W celu rozwiązania tych równań zastosowano efektywną technikę faktoryzacji macierzy [25]. Tak obliczone przybliżone wartości węzłowe $\tilde{\Phi}_j^{n+1}$ w nowej chwili czasu $(n+1)$ są dalej użyte jako początkowe w nieustalonym problemie dyfuzyjnym

$$a_{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(b_{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \right) = S_{\Phi} \quad (4.28)$$

który rozwiązywany jest klasyczną metodą Galerkiną (4.19), z interpolacjami (4.17-4.18) i diagonalnym modelem macierzy pojemności [22,23] oraz niejawnym schematem Eulera w czasie. Prowadzi to do układu równań algebraicznych

$$\int_{\Omega} a_{\Phi} N_k d\Omega \cdot \frac{\Phi_k^{n+1} - \tilde{\Phi}_k^{n+1}}{\Delta t} + \int_{\Omega} b_{\Phi} \left(\frac{\partial N_k}{\partial x_1} \frac{\partial N_j}{\partial x_1} + \frac{\partial N_k}{\partial x_2} \frac{\partial N_j}{\partial x_2} \right) d\Omega \cdot \Phi_j^{n+1} = \int_{\Omega} S_{\Phi} d\Omega + (\text{cz.w.b.}) \quad (4.29)$$

który, ze względu na symetryczność i dodatnią-określoność jego macierzy, może być rozwiązany efektywną techniką iteracyjną – w opracowanym programie zastosowano metodę gradientów sprzężonych, ze wstępnym uwarunkowaniem SOR [23].

Opisany powyżej algorytm użyto kolejno do rozwiązywania równań (4.1) dla składowych pędu, gdzie: $\Phi \equiv v_i$; $a_{\Phi} = \rho$; $b_{\Phi} = \mu_i$; $S_{\Phi} = -\partial p / \partial x_i + S_{v_i} + \rho g B_i$, oraz równania energii (4.1), gdzie: $\Phi = H$; $a_{\Phi} = \rho$; $b_{\Phi} = \lambda / c_p$, i połączono z metodą rzutu Chorina, w celu rozłączenia obliczeń pól prędkości i ciśnienia.

Algorytm linearyzacji równania energii

Nieliniowość równania energii (trzecie z równań układu (4.1)) wynika z temperaturowej zależności entalpii całkowitej H oraz własności termofizycznych w obszarze ciec-z stała. Jego linearyzację przeprowadzono przez zastosowanie w każdym kroku czasowym procedury iteracyjnej, zaproponowanej w [15]. Jej algorytm jest następujący:

Dla znanej zależności entalpia-temperatura $H(T)$ i znanej temperatury T^m w poprzedniej m -tej iteracji, przy $T^0 = T^n$, gdzie T^n jest końcowym przybliżeniem w poprzednim kroku czasowym

1. obliczane są macierze $\mathbf{K}_T^d(T^m)$ i $\mathbf{C}_H(T^m)$ układu (4.20)
2. nieznaną, bieżącą iterację $(m+1)$ całkowitej entalpii właściwej H_k^{m+1} w k -tym węźle siatki wyznacza się przez jej rozwinięcie w szereg Taylora względem poprzedniego przybliżenia H_k^m , to znaczy

$$H_k^{m+1} = H_k^m + \left(\frac{dH_k}{dT} \right)_m (T_k^{m+1} - T_k^m) \quad \text{przy} \quad T_k^m = H^{-1}(H_k^m) \quad (4.30)$$

co prowadzi do zlinearyzowanej formy równania energii (4.20). W przypadku zastosowania jawno-niejawnego schematu Adamsa-Bashforth-Eulera przybiera ona postać

$$\left(\mathbf{K}_T^d(\mathbf{T}^m) + \frac{1}{\Delta t} \mathbf{C}_H(\mathbf{T}^m) \cdot \left(\frac{d\mathbf{H}}{dT} \right)_m \right) \cdot \mathbf{T}^{m+1} = \frac{1}{\Delta t} \mathbf{C}_H(\mathbf{T}^m) \cdot \left(\mathbf{H}^n - \mathbf{H}^m + \left(\frac{d\mathbf{H}}{dT} \right)_m \cdot \mathbf{T}^m \right) + \mathbf{F}_T - \left(\frac{3}{2} \mathbf{K}_H^c(\mathbf{v}^n) \cdot \mathbf{H}_1^n - \frac{1}{2} \mathbf{K}_H^c(\mathbf{v}^{n-1}) \cdot \mathbf{H}_1^{n-1} \right) \quad (4.31)$$

natomiast, gdy algorytm rozwiązania oparty jest na technice rozdziału operatorów konwekcji i dyfuzji i niejawnym schemacie Eulera, wówczas zlinearyzowane równanie energii

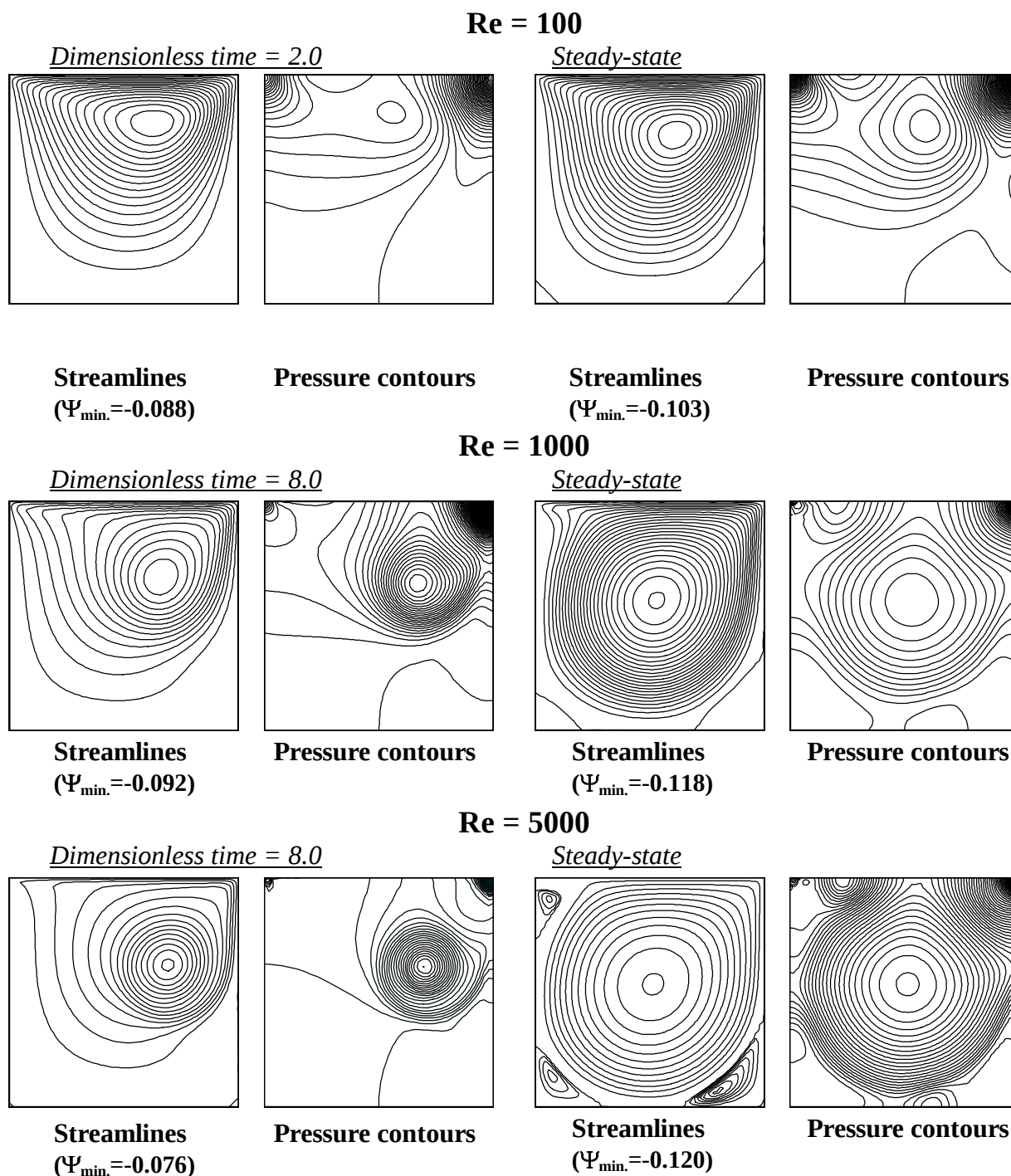
$$\left(\mathbf{K}_T^d(\mathbf{T}^m) + \frac{1}{\Delta t} \mathbf{C}_H(\mathbf{T}^m) \cdot \left(\frac{d\mathbf{H}}{dT} \right)_m \right) \cdot \mathbf{T}^{m+1} = \frac{1}{\Delta t} \mathbf{C}_H(\mathbf{T}^m) \cdot \left(\mathbf{H}^n - \mathbf{H}^m + \left(\frac{d\mathbf{H}}{dT} \right)_m \cdot \mathbf{T}^m \right) + \mathbf{F}_T - \mathbf{K}_H^c(\mathbf{v}^{n+1}) \mathbf{H}_1^m \quad (4.32)$$

jest rozwiązywane w dwóch kolejno następujących po sobie etapach (4.26-4.29).

3. u
zyskane z tych równań nowe przybliżenie pola temperatury $\mathbf{T}_k^{m+1}$ jest wykorzystywane do obliczenia nowej iteracji entalpii $\mathbf{H}_k^{m+1}$ z (4.30).
4. proces powtarzany jest tak długo, aż różnica dwóch kolejnych przybliżeń entalpii jest mniejsza od zadanej tolerancji ε_H , tzn.: $\max(\text{abs}((\mathbf{H}_i^{m+1} - \mathbf{H}_i^m) / \mathbf{H}_i^m)) < \varepsilon_H$.

4.3 Weryfikacja dokładności modelu numerycznego

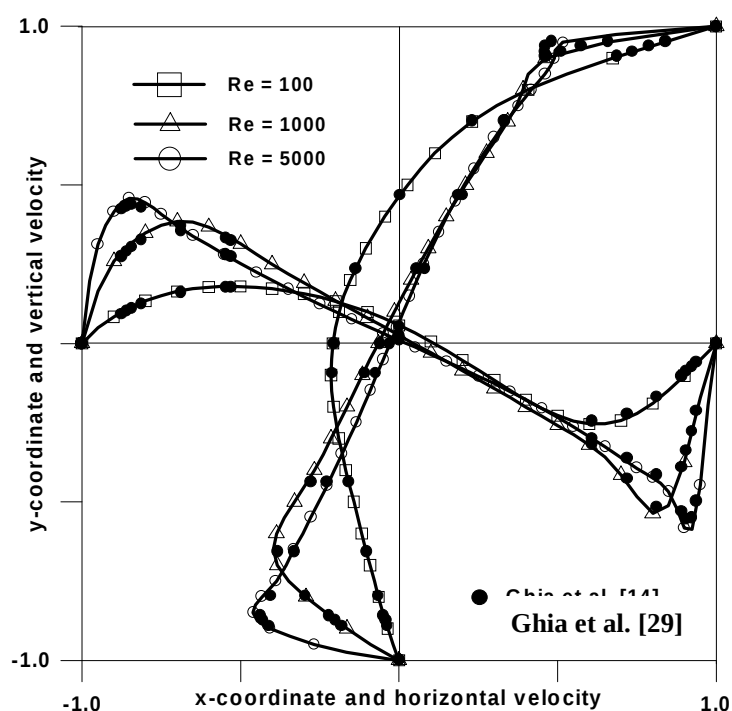
Przedmiotem tej analizy jest odpowiedź na pytanie: jak dobrze opisane powyżej modele numeryczne przybliżają dyskretyzowane równania modelu ciągłego (4.1). Oceny takiej dokonano przez porównanie ich rozwiązań z innymi, dostępnymi w literaturze, rozwiązaniami analitycznymi lub numerycznymi dla pewnych wzorcowych problemów, tak zwanych “benchmarków”, powszechnie uznawanych za wymagające testy dokładności modeli przybliżonych.



Rys. 4.1. Linie prądu i kontury ciśnienia w początkowych czasach i w ustanie ustalonym dla przepływu płynu lepkiego w kanale

Pierwszym analizowanym problemem wzorcowym był przepływ recyrkulacyjny w kanale o przekroju kwadratowym, wypełnionym lepkim, nieściśliwym płynem, wywołany ruchem górnej powierzchni kanału przesuwającej się poziomo ze stałą prędkością U . Obliczenia przeprowadzono metodą *Projection_1* dla dwóch różnych siatek elementów skończonych i różnych wartości liczby Reynoldsa, $Re = 10^2, 10^3, 5 \cdot 10^3$, zdefiniowanej jako $Re = U\mu L_c / \mu_1$, gdzie L_c jest wysokością kanału. Pierwsza siatka składała się z 30×30 4-ro węzłowych elementów, w których pola ciśnienia i prędkości interpolowano dwuliniowymi wielomianami Lagrange'a (interpolacja jednakowego stopnia). Podział był nierównomierny, zagęszczony w pobliżu ścianek kanału. W drugim przypadku użyto siatki 15×15 9-cio węzłowych elementów, w których pole prędkości

interpolowano dwu-parabolicznymi wielomianami Lagrange'a [22], zaś ciśnienie wielomianami dwuliniowymi (interpolacja niejednakowego stopnia). Dla $Re = 5 \cdot 10^3$ zagęszczono podział obszaru – w pierwszym przypadku była to siatka 50×50 elementów 4-ro węzłowych, w drugim 25×25 9-cio węzłowych. Uzyskane pola linii prądu i konturów stałego ciśnienia przedstawiono na rys.4.1 dla wybranych czasów początkowych i w stanie ustalonym. Używany na rys.4.1 czas bezwymiarowy zdefiniowany był jako $\tau = Ut / L_c = (\mu_1 Re)t / (\rho L_c^2)$. Rozwiązania uzyskane na obu siatkach są graficznie nierozróżnialne. Nie obserwuje się też niefizycznych przebiegów linii stałego ciśnienia. Oznacza to, że, w algorytmie metody Chorina (Projection_1) [1,2] możliwe jest użycie interpolacji tego samego stopnia, to znaczy możliwe jest obejście warunku stabilności Babuski-Brezzi [22]. Taka interpolacja znacznie przyspiesza obliczenia, gdyż wykorzystuje wielomiany niższego stopnia (takie same dla ciśnienia i prędkości) i prowadzi do macierzy o znacznie rzadszej strukturze. Powyższy wniosek pozostaje jednak prawdziwy przy kroku czasowym Δt ograniczonym od dołu, tzn. nie może być on zbyt mały [27]. Obliczone pola prędkości i ciśnień są w bardzo dobrej zgodności z wynikami prezentowanymi w innych publikacjach [4,28]. Potwierdzają to przedstawione na rys.4.2 i w Tabelcy 4.1 porównanie własnych obliczeń z wynikami Ghia et. al [29] dla ustalonych profili prędkości wzdłuż poziomej i pionowej linii centralnej przekroju kanału oraz dla wartości funkcji prądu $\Psi_{\max}$ w epicentrum głównego wiru.

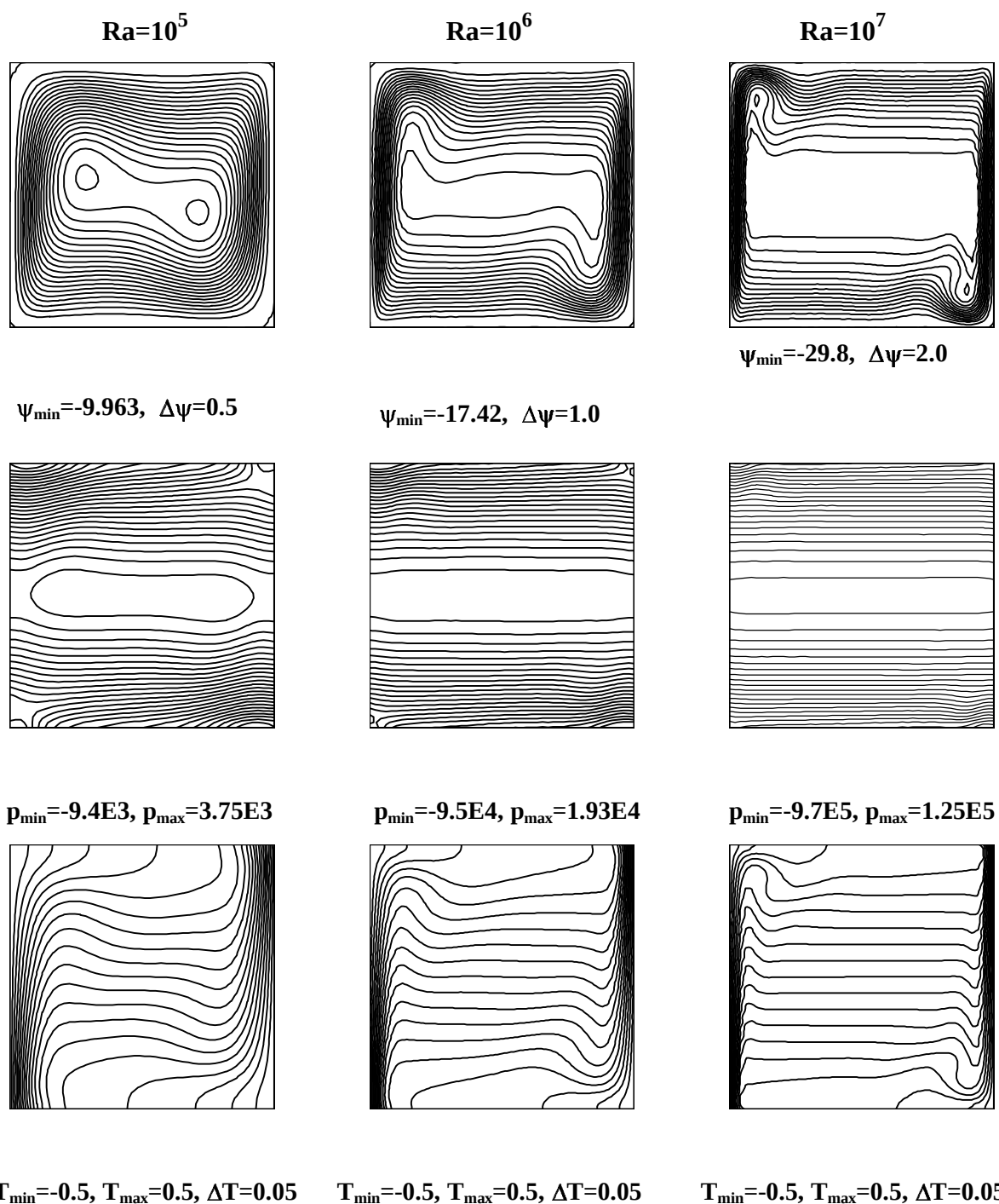


Rys.4.2. Profile prędkości poziomej i pionowej wzdłuż środkowych kanału dla różnych Re

Tabela 1. Ekstremalne wartości funkcji prądu dla głównego wiru

	$Re=10^2$	$Re=10^3$	$Re=5 \cdot 10^3$
<u>Opracowany model</u>	-0.103	-0.119	-0.119
<u>Ramaswamy et al. [28]</u>	-0.103	-0.118	-0.117
Ghia et al. [29]	-0.103	-0.118	-0.119

W celu weryfikacji modelu MES i jego algorytmu dla bardziej złożonego przypadku, tj. wzajemnie powiązanych wymiany ciepła i ruchu płynu, rozwiązano problem laminarnej konwekcji swobodnej w kanale o przekroju kwadratowym dla różnych liczb Rayleigha, zdefiniowanych jako $Ra = (g\beta_T L_c^3 (T_h - T_c) \rho^2 c_p) / (\lambda \mu_1)$.

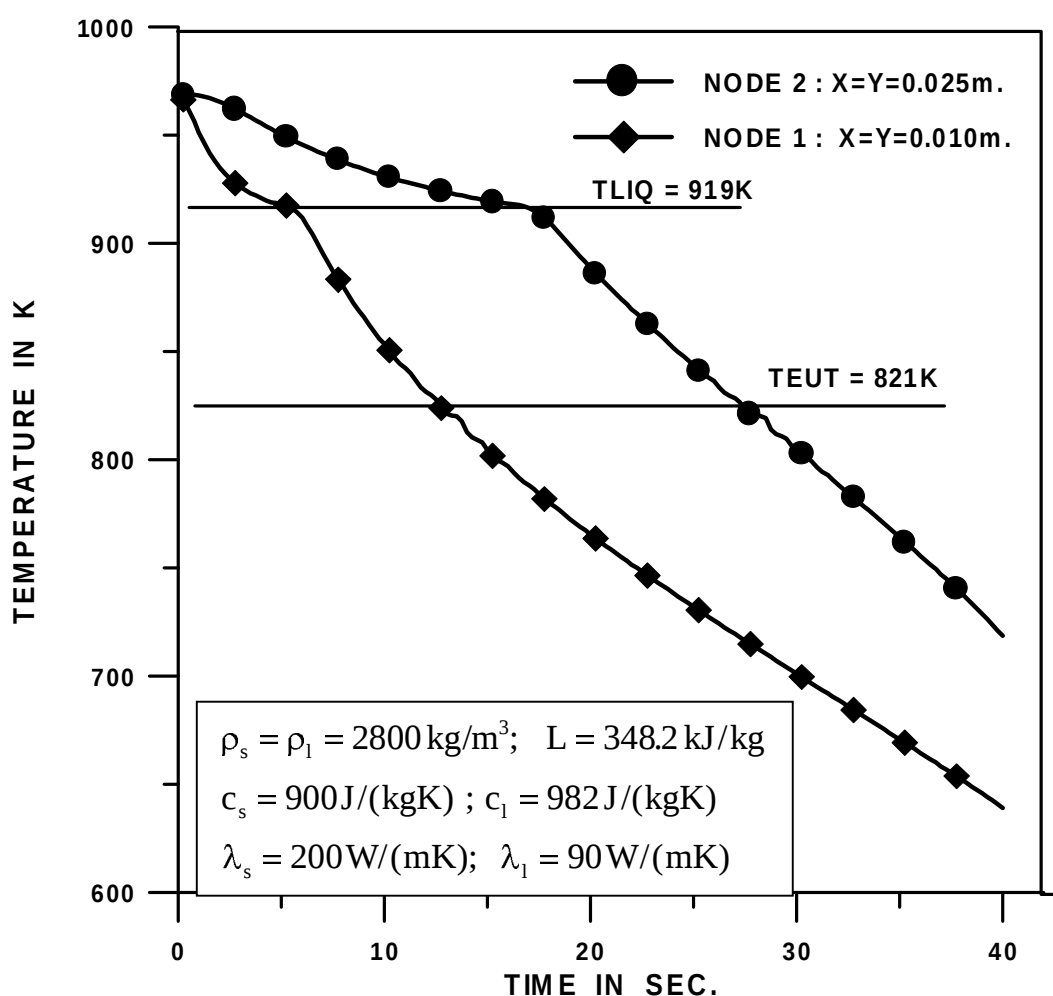


Rys.4.3. Linie prądu, kontury ciśnienia i pola izoterm dla ustalonej konwekcji swobodnej w kanale o przekroju kwadratowym

W tym powszechnie stosowanym „benchmarku” przyjęto model Boussinesqa [18,4], tj. założenie stałej gęstości płynu i liniowej zależności sił wyporu od temperatury, górne i dolne

ścianki kanału adiabatyczne, zaś pionowe o stałych lecz różnych temperaturach T_h i T_c . Bezwymiarowa temperatura $\tilde{T} = (T - \Delta T_{av.}) / (T_h - T_c)$, gdzie: $\Delta T_{av.} = (T_h + T_c) / 2$, wynosiła odpowiednio $\tilde{T}_h = 0.5$ i $\tilde{T}_c = -0.5$. Geometryczny obszar przekroju kanału pokryto nieregularną (gęściejszą w pobliżu ścianek) siatką 40*40 dwuliniowych elementów skończonych. Uzyskane, ustalone struktury przepływu (linie prądu), pola ciśnienia i temperatury przedstawiono na rys.4.3. Są one bardzo bliskie wynikom uzyskanym przez innych badaczy [4,28].

Weryfikację dokładności modelowania nieizotermicznej przemiany fazowej na stałej siatce elementów skończonych oraz poprawności algorytmu obliczeniowego tej techniki dokonano przez analizę solidyfikacji stopu Al-5%Cu o początkowej temperaturze 969K, tj. przegrzanego o 50K powyżej temperatury likwidusu, oraz porównanie uzyskanych wyników z obliczeniami techniką bilansów elementarnych na siatce różnicowej [28]. Przyjęto stałość własności termofizycznych ciekłego stopu. Podano je na rys.4.4.



Rys.4.4. Czasowe zmiany temperatury w wybranych punktach przekroju odlewu

Założono model Scheila [16] uwalniania ciepła przemiany fazowej, dany następującą zależnością udziału objętościowego fazy ciekłej r_l od temperatury stopu:

$$\left. \begin{array}{ll} r_l = 0 & \text{dla } T < T_{eut} \\ 0 \leq r_l \leq r_{l,eut} & \text{dla } T = T_{eut} \\ r_l = ((T_M - T) / (T_M - T_L))^\beta & \text{dla } T_{eut} < T \leq T_L \\ r_l = 1 & \text{dla } T > T_L \end{array} \right\} \text{gdzie: } \begin{cases} \beta = -1,163 \\ T_M = 933 \text{ K} \\ r_{l,eut} = 0,089 \end{cases}$$

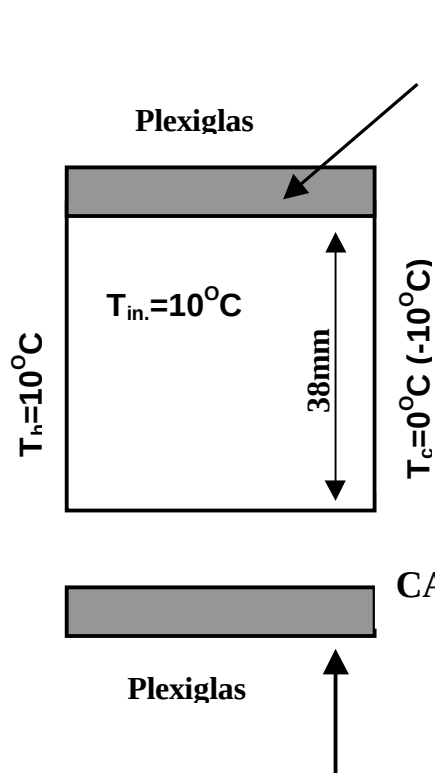
Rozważono kwadratowy przekrój odlewu o wymiarach 0,1m*0,1m, którego ścianki chłodzone były płynem o temperaturze 290K. Współczynnik przejmowania ciepła na tych powierzchniach wynosił 2000W/(m²K). Ze względu na symetrię geometrii i warunków wymiany ciepła obliczenia przeprowadzono dla ¼ obszaru, przy jego podziale na 20*20 równomiernych elementów dwuliniowych. Uzyskane rozwiązanie jest zgodne z zaprezentowanym w [14].

4.4 Analiza wiarygodności modelu symulacji komputerowej metodą MES

Pierwszym etapem w tworzeniu komputerowej symulacji procesów fizycznych jest budowa modelu matematycznego. Powinien on precyzyjnie opisywać zachowanie się układu, zachodzące w nim zjawiska. Niestety ich złożoność uniemożliwia budowę tak wszechstronnego opisu matematycznego, zmusza do pewnych uproszczeń, pomijania mniej znaczących efektów, wprowadzenia założeń. Dotyczą one modelu płynu (np. nieściśliwy, newtonowski), własności termofizycznych medium (np. stałe ciepła właściwe, stała lepkość, założone postaci funkcji entalpia-temperatura-koncentracja) oraz zachowania układu i zachodzących w nim procesów (np. laminarny ruch płynu, model Boussinesqa, model medium porowatego Darcy’ego w opisie oporu przepływu w obszarze dwufazowym, pomijanie ruchów konwekcyjnych wywołanych różnicą gęstości fazy stałej i ciekłej). Na podstawie tak stworzonego modelu matematycznego buduje się następnie jego odpowiednik numeryczny, przez wykorzystanie technik dyskretyzacji w przestrzeni i w czasie. Przybliżony charakter tych metod wymaga weryfikacji dokładności modelu dyskretnego przez porównanie z rozwiązaniami analitycznymi lub innymi przybliżonymi, tak jak pokazano w poprzednim punkcie tego rozdziału. Jednakże, taka analiza, dająca jedynie odpowiedź na pytanie jak dobrze model dyskretny przybliża ciągły, nie jest wystarczająca. Należy jeszcze rozwiązać wątpliwości czy przyjęte uproszczenia i przybliżenia, zarówno na etapie budowy opisu matematycznego jak i tworzenia jego odpowiednika dyskretnego, nie powodują nadmiernych rozbieżności między wynikami symulacji komputerowej a opisywaną rzeczywistością. Wykorzystuje się tu „benchmarki” eksperymentalne - wyniki precyzyjnych pomiarów wybranych zjawisk modelowych porównuje się z obliczeniami.

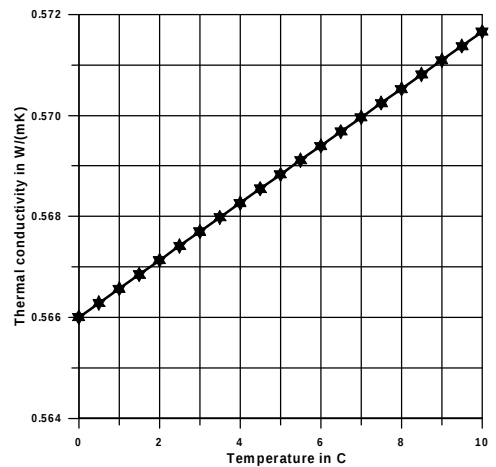
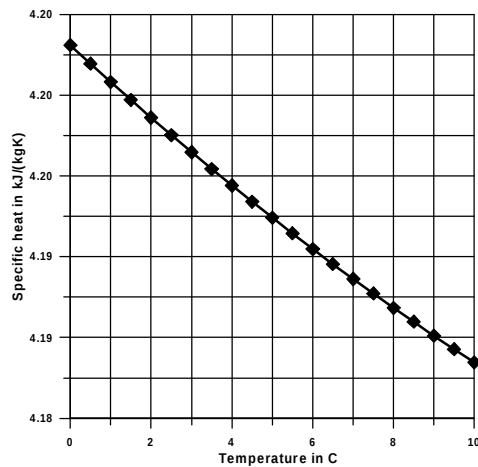
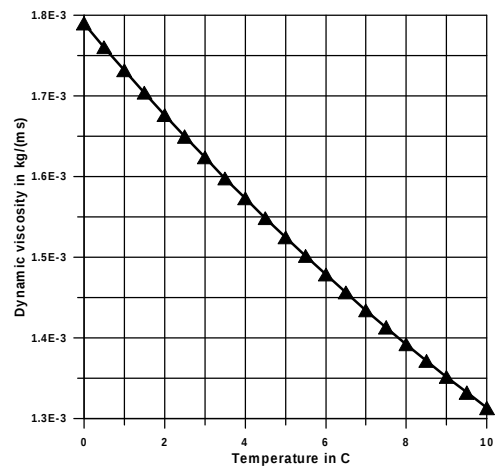
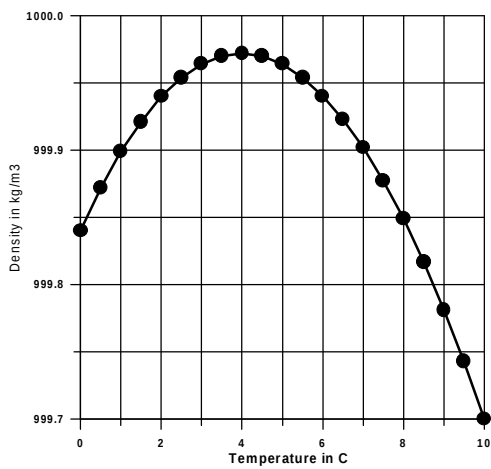
W ramach realizacji części eksperymentalnej projektu (rozdział 2 opracowania) zebrano dokładne dane o chwilowych polach prędkości i temperatury oraz kształtach i położeniach frontu lodu dla złożonego zagadnienia konwekcji swobodnej w ochładzanej (w zakresie niskich temperatur obejmujących punkt anomalii gęstości wody) i następnie zamarzającej wodzie zamkniętej w kuwecie sześcienniej. Wyniki tych eksperymentów wykorzystano do weryfikacji wiarygodności opracowanego modelu MES symulacji komputerowej nieustalonych zjawisk krzepnięcia i topnienia z konwekcją w fazie ciekłej dla układów jednoskładnikowych.

Przedmiotem obliczeń były chwilowe pola temperatury i prędkości w środkowym przekroju kuwety pokazanym na rys. 4.5. Przeprowadzono je dla dwóch różnych przypadków termicznych warunków brzegowych. W pierwszym obszar rozważań ograniczono do wnętrza kuwety przy założeniu adiabatyczności poziomych ścianek (wykonanych z pleksiglasu). W drugim przypadku przeprowadzono obliczenia sprzężonej wymiany ciepła – jednoczesnej konwekcji swobodnej ze zmianą fazy w wodzie oraz przewodzenia ciepła przez ścianki pleksiglasowe, omywane z zewnątrz powietrzem o znanej stałej temperaturze i współczynniku przejmowania ciepła (rys.4.5).



Rys.4.5. Geometria obszaru i warunki brzegowe

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = h(T - T_{env.}) \quad \text{gdzie: } h = 20 \text{ W} / \text{m}^2 \text{K}; \quad T_{env.} = 25^\circ \text{C}$$



Rys.4.6. Własności termofizyczne wody w funkcji temperatury

Woda jest płynem, który w niskich temperaturach ($0^{\circ}\text{C} \div 10^{\circ}\text{C}$) nie spełnia założenia Boussinesqa o liniowej zmianie gęstości i sił wyporu z temperaturą. Gęstość wody w pobliżu 4°C jest nieliniową funkcją temperatury (rys.4.6). Ponadto, występująca w tej temperaturze anomalia gęstości (zmiana znaku pochodnej) wywołuje złożoną strukturę przepływu, zawierającą dwa wiry konwekcyjne cyrkulujące w przeciwnych kierunkach (rozdział 2, rys.2.10). Drugie z założeń modelu Boussinesqa, tj. nieściśliwość płynu może być jednak zaakceptowane, bowiem zmiany gęstości wody są mniejsze od 0,03% a więc są pomijalnie małe (poza członem sił wyporu). Oznacza to, że proponowany algorytm obliczeniowy (rozdział 4.2.3), poprawny tylko dla płynów nieściśliwych, może być tu użyty. Pozostałe własności termofizyczne wody, takie jak lepkość, przewodność cieplna i ciepło właściwe są także funkcjami temperatury [30]. Pokazano je na rys.4.6.

Konwekcja naturalna czystej wody

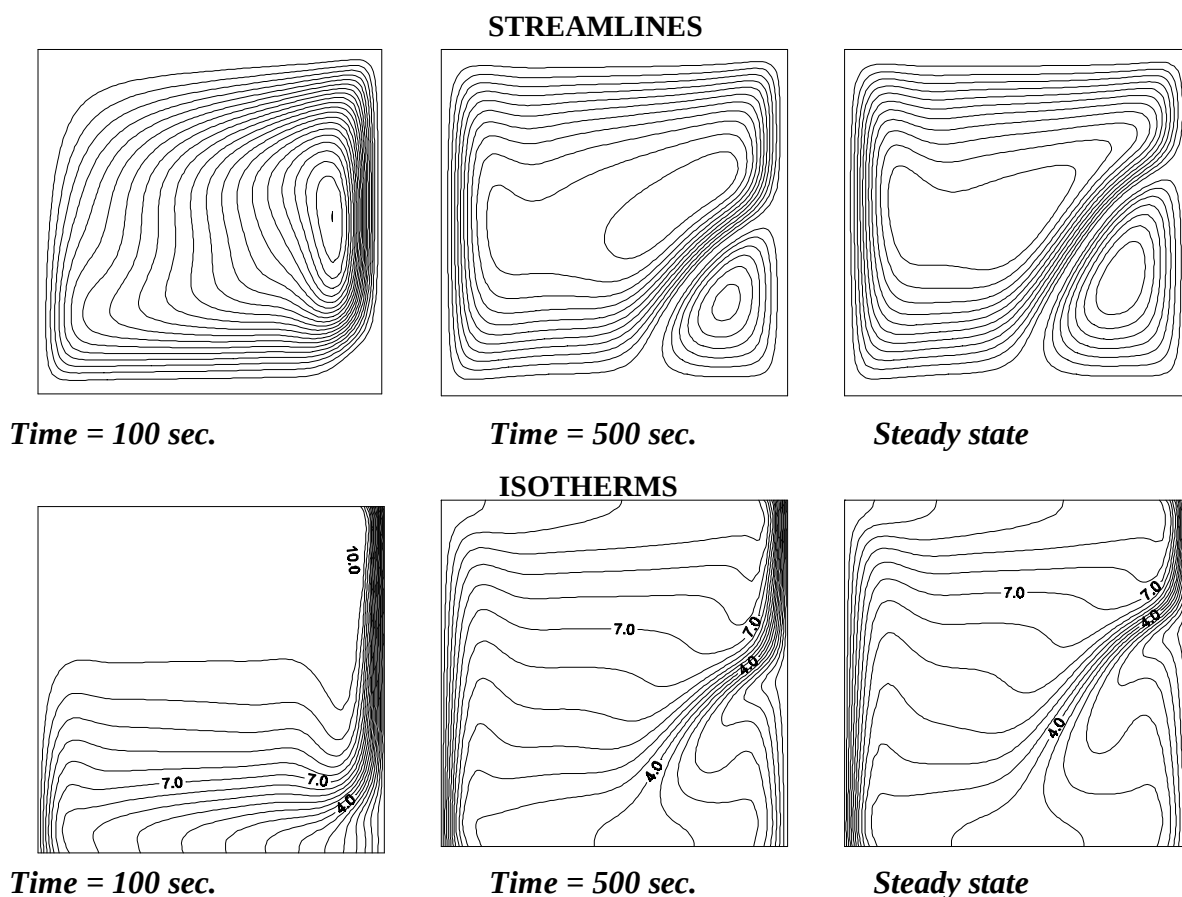
Najpierw rozważono problem konwekcji swobodnej czystej wody w zakresie temperatur $0^{\circ}\text{C} \div 10^{\circ}\text{C}$. Początkowa temperatura płynu w kuwecie wynosiła 10°C . Gwałtowne jej obniżenie do 0°C na prawej bocznej ścianie (rys.4.5) wywołało powstanie termicznych sił wyporu. W modelu obliczeniowym założono brak przepływu ciepła przez poziome ścianki naczynia (adiabatyczność, CASE_1 na rys.4.5). Wyniki obliczeń, uzyskane na regularnej siatce 40×40 elementów dwuliniowych, przy wykorzystaniu algorytmu Projection_1 (rozdział 4.2.3 opracowania), pokazano na rys. 4.7 w postaci chwilowych struktur przepływu i pól temperatury dla wybranych czasów procesu. Regularna termiczna konwekcja, charakteryzująca się dużym pojedynczym wirem o cyrkulacji zgodnej ze wskazówkami zegara występuje w początkowych czasach. Ale już po około 100 sekundach pojawia się w prawym dolnym (zimnym) rogu duży wir kręcący w przeciwnym kierunku. Wskutek anomalii gęstości zimny wir porusza się w górę wzdłuż prawej ścianki. Jego oddziaływanie z cieplejszym płynem w górnej części kuwety odwraca kierunek sił wyporu, które wymuszają ruch cieplejszej wody w kierunku do dołu i do zimnej ścianki (rys.4.7). Ta cyrkulacja, ograniczona początkowo do niewielkiego obszaru, rośnie w czasie, penetrując coraz bliżej środka kuwety. W ciągu kilku minut wir ten wypycha główny ruch konwekcyjny (ten zgodny ze wskazówkami zegara) w kierunku ciepłej ścianki. Po około 20 minutach tej „walki” osiągany jest stan ustalony. Charakteryzuje go obecność dwóch wirów, głównego, w którym ogrzana woda idzie do góry oraz mniejszego (wypełniającego około 25% kuwety), który przenosi do góry płyn ochłodzony na zimnej ścianie.

Przyjęte w modelu obliczeniowym założenie, że dolna i górna ścianki kuwety są adiabatyczne nie jest zbyt precyzyjne. W eksperymencie bowiem, te pleksiglasowe ścianki nie były dobrze izolowane termicznie. Mimo, że strumień ciepła przepływający przez nie był duży (mała przewodność materiału ścianki), to miał on istotny wpływ na uzyskiwane pola temperatury i prędkości. Wynika to z silnej zależności zjawisk zachodzących w kuwecie od termicznych warunków brzegowych na jej granicach. Stwierdzono to w badaniach eksperymentalnych (rozdział 2). Zatem, by wprowadzić do modelu obliczeniowego realistyczne warunki wymiany ciepła na granicach analizowanej przestrzeni, rozbudowano kod numeryczny w kierunku jednoczesnej analizy zjawisk ruchu płynu i wymiany ciepła wewnątrz kuwety oraz przewodzenia ciepła przez jej ścianki. Na zewnętrznych powierzchniach tych brzegów przyjęto warunek trzeciego rodzaju ze stałym współczynnikiem przejmowania ciepła i stałą temperaturą powietrza omywającego zewnętrzne powierzchnie kuwety (rys.4.5, CASE_2). Uzyskane wyniki obliczeń dla tej sprzężonej wymiany ciepła przedstawiono na rys.4.8. Ich porównanie z polami funkcji prądu i temperatury dla CASE_1 (rys.4.7) potwierdza znaczącą rolę wymiany ciepła przez powierzchnie brzegowe. Od początku procesu chłodzenia zimny wir jest wyraźnie mniejszy od tego, który

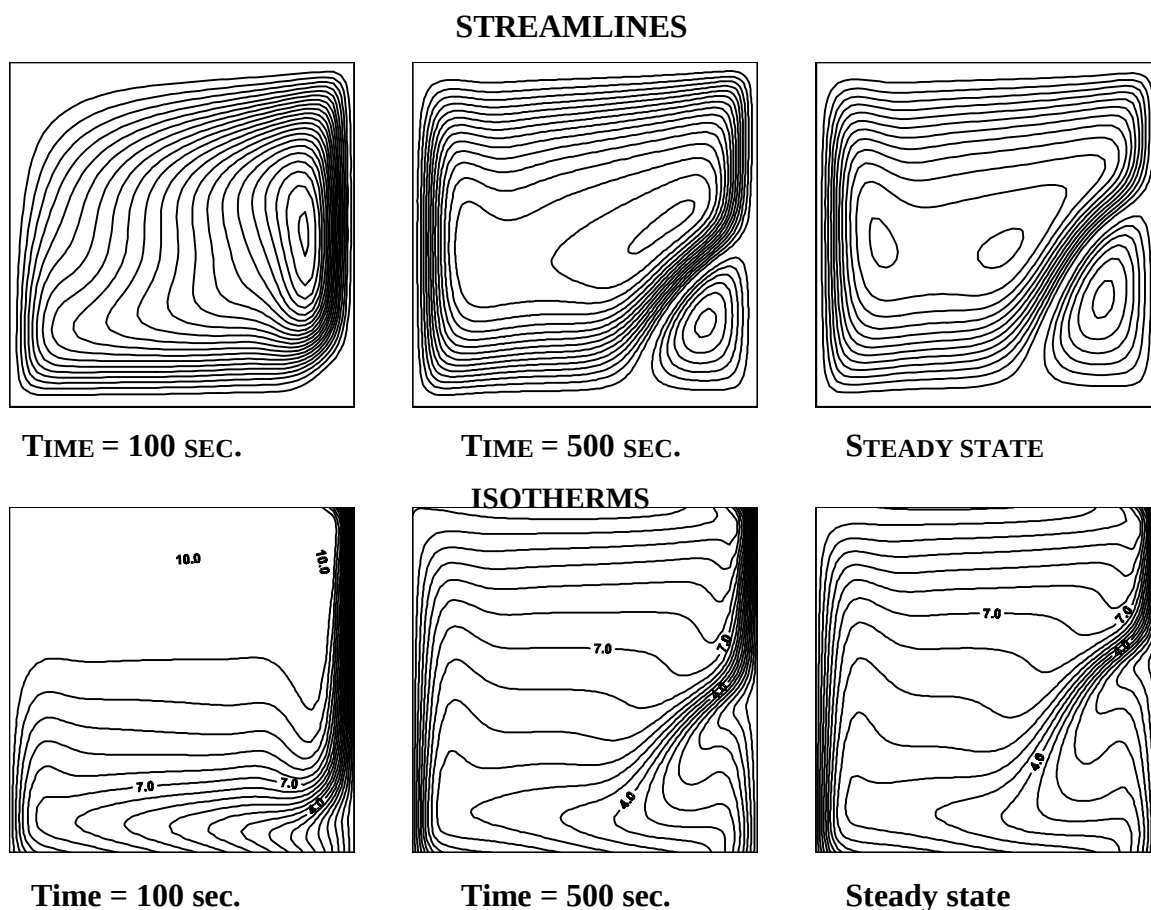
obserwuje się dla CASE_1 i bliższy obrazom uzyskiwanym z eksperymentu (rys.4.9). To ostatnie spostrzeżenie potwierdza szczegółowe porównanie obliczonych i pomierzonych rozkładów lokalnej prędkości pionowej wzdłuż bezwymiarowej współrzędnej poziomej $X=x/L_c$, gdzie L_c jest charakterystycznym wymiarem przekroju kuwety ($L_c=0.038\text{m}$). Rozkłady tej prędkości w stanie ustalonym pokazano na rys.4.10 dla trzech wybranych poziomych przekrojów kuwety ($Y=y/L_c=0,25;0,5;0,75$). Ich wnikliwa analiza pokazuje, że w przypadku założenia adiabatyczności ścianek pleksiglasowych obliczone prędkości odbiegają od tych uzyskanych z eksperymentu, zwłaszcza w centralnej części analizowanego obszaru. Z drugiej strony, wyniki obliczeń sprzężonej wymiany ciepła bardzo dobrze przystają do rezultatów precyzyjnych eksperymentów (rys.4.10, rys.4.9).

Konwekcja naturalna w zamarzającej wodzie

W celu weryfikacji entalpowego modelu zmiany fazy w połączeniu z algorytmem obliczeniowym MES dla równań ruchu płynu i energii (Projection_2, jawno-niejawny schemat Adamsa-Basfhorta-Eulera, rozdział 4.2.3) rozwiązano znacznie trudniejszy przypadek konwekcji swobodnej w zamarzającej wodzie, a wiarygodność uzyskanych wyników zweryfikowano przez porównanie z rezultatami uzyskanymi na stanowisku eksperymentalnym (rozdział 2). Końcowy, ustalony stan z poprzednich obliczeń (konwekcja bez zmiany fazy w ochładzanej wodzie) przyjęto za początkowy w chwili, gdy gwałtowne obniżenie temperatury zimnej (prawej) ścianki z 0°C do -10°C wywołuje powstawanie fazy stałej (lodu) w pobliżu tej powierzchni i powoduje odpychanie dwóch “walczących” wirów w kierunku gorącej ścianki bocznej.

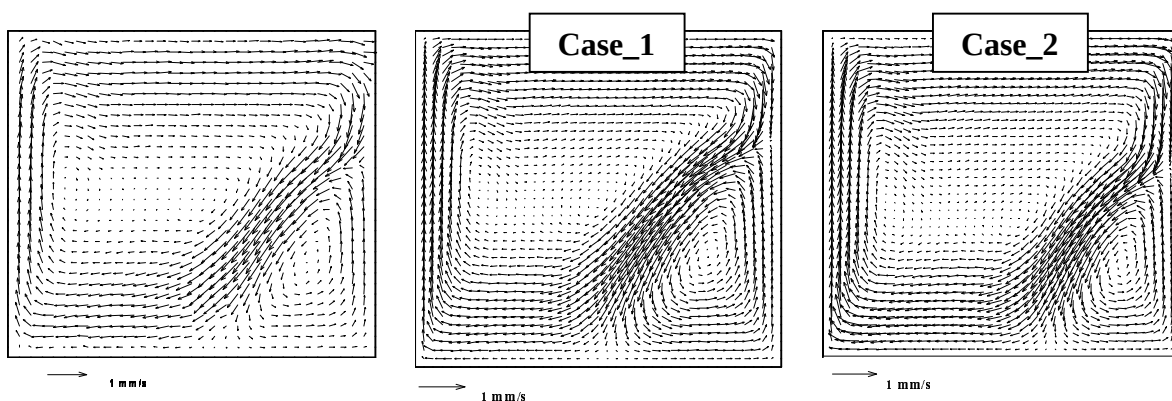


Rys.4.7. Konwekcja naturalna wody - adiabatyczne ścianki poziome kuwety (CASE_1)



Rys.4.8. Sprężona konwekcja wody w kuwecie i przewodzenie w ściankach poziomych (CASE_2)

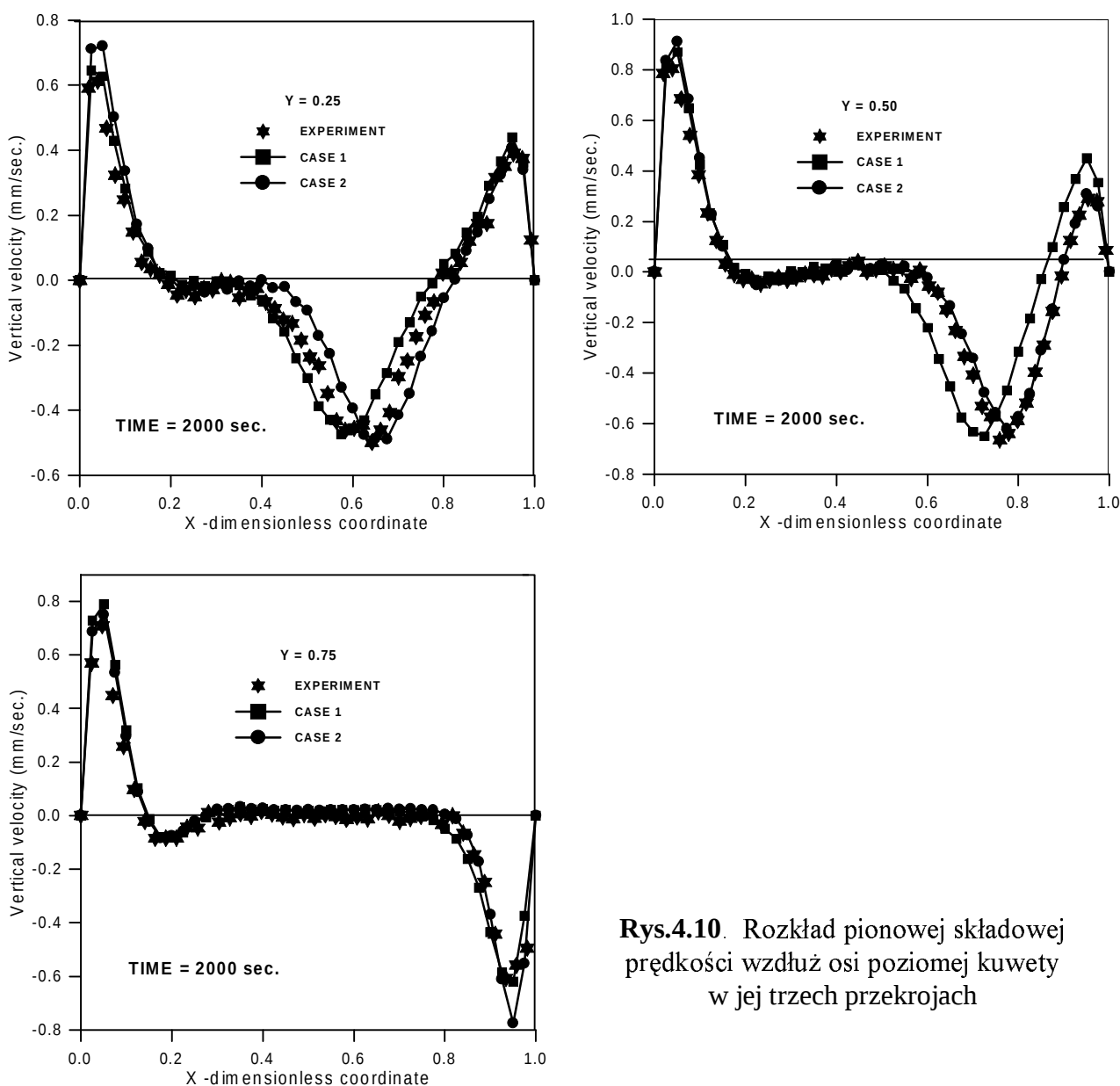
Wyniki obliczeń dla CASE_1 i CASE_2 przedstawiono odpowiednio na rys.4.11 i rys.4.12, w postaci chwilowych linii prądu i pól temperatury z zaznaczonym położeniem granicy woda/lód (wyznaczanej jako krzywa, na której wartość całkowitej entalpii jest równa $\frac{1}{2}$ ciepła topnienia i gdzie $f_l=0,5$).



Rys.4.9. Obraz ustalonego pola prędkości – porównanie obliczeń i eksperymentu

Zimny wir lokujący się w dolnym prawym rogu kuwety odgrywa zasadniczą rolę w formowaniu obszaru zamrożonej wody. Izuluje on w tym rejonie powierzchnię lodu od ciepłej wody. Dlatego początkowo płaski front lodu deformuje się w czasie procesu, zwiększa się ilość fazy stałej w dolnej, prawej części kuwety. Podobnie jak poprzednio zimny wir jest mniejszy, a

kształt lodu inny w modelu sprężonej wymiany ciepła (CASE_2) w porównaniu z CASE_1. W przypadku CASE_2 wyniki obliczeń są bliższe eksperymentalnym, a struktura przepływu optycznie bardzo podobna do rejestrowanej techniką DPIV (rozdział 2). Jest to widoczne na rys.4.13 i 4.14, gdzie porównano lokalne rozkłady pionowej składowej prędkości oraz kształty frontu fazowego we wczesnym czasie procesu (po 500 sekundach) oraz w stanie ustalonym (osiąganym po około 3000sekund).



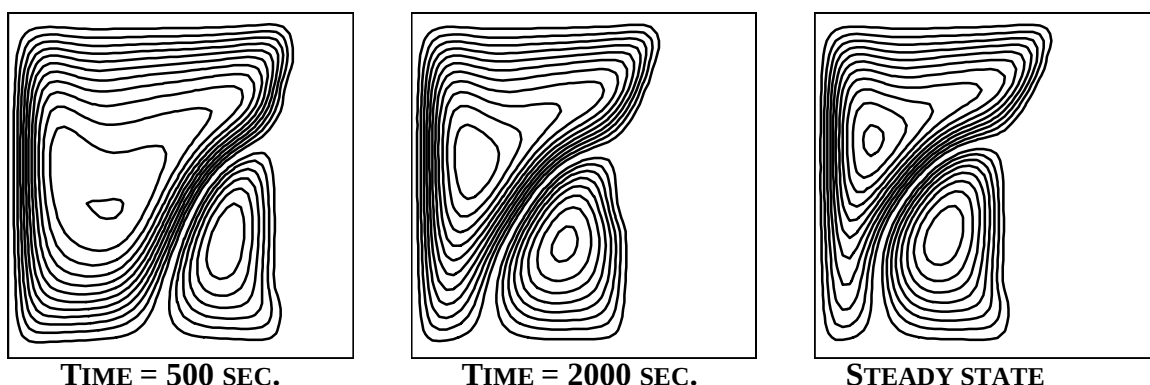
Rys.4.10. Rozkład pionowej składowej prędkości wzdłuż osi poziomej kuwety w jej trzech przekrojach

Wnioski i uwagi końcowe

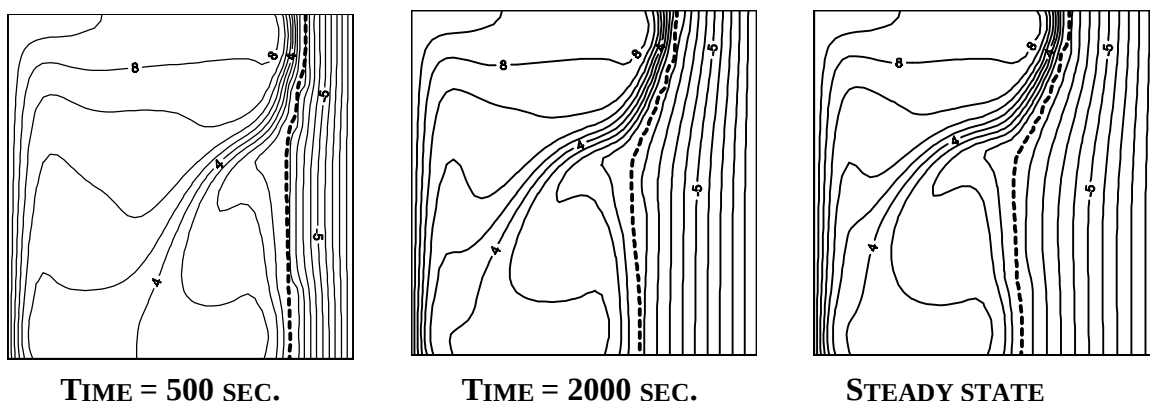
Dokładniejsza analiza rys.4.13 i rys.4.14 pokazuje, że mimo generalnie akceptowalnych wyników symulacji numerycznej (rys.4.13), chwilowe kształty granicy woda-lód i lokalne prędkości odbiegają w widoczny sposób od danych eksperymentalnych, zwłaszcza w środkowej części kuwety. Jedną z możliwych przyczyn tych rozbieżności może być efekt przechłodzenia cieczy, obserwowany w eksperymencie (rozdział 2), a nie uwzględniony w modelu obliczeniowym. Woda o temperaturze poniżej zera (nawet do -7°C) może w początkowych czasach procesu wypełniać znaczną część objętości kuwety (w jej górnej części). Ulega ona

gwałtownemu zamarzaniu, a tak powstały lód w pobliżu górnego prawego naroża ulega stopieniu na skutek omywania cieplejszą wodą, niesioną przez główny wir konwekcyjny. Po około 300 sekundach procesu chłodzenia regularna (oczekiwana) propagacja frontu od ścianki zimnej w kierunku gorącej zostaje przywrócona. To opóźnienie procesu krzepnięcia rzutuje na strukturę przepływu i pola temperatury, zwłaszcza we wczesnych czasach procesu. Ponadto, gdy woda zamarza w małej objętości kuwety obserwuje się silny wpływ własności termofizycznych, warunków początkowych i brzegowych na pola przepływu i temperatury. Oznacza to, że obliczenia bardzo silnie zależą od niedokładności w dostępnych danych termofizycznych materiału, współczynników wymiany ciepła na granicach, niejednorodności i uwarstwienia struktury fazy stałej, kontaktu termicznego na granicy lód-zimna ścianka, etc. Pewne rozbieżności między obliczeniami i pomiarami mogą też wynikać z ograniczenia modelu numerycznego do dwuwymiarowej geometrii (w eksperymencie obserwowano pewne efekty ścianek bocznych) oraz z dość arbitralnie (w przypadku jednoskładnikowego medium jakim jest czysta woda) przyjmowanych własności porowatego medium (współczynnik K_0 w równaniu 4.15). Okazuje się jednak, co wynika z rys.4.15, gdzie pokazano wpływ założonej wielkości K_0 na strukturę przepływu w kuwecie, lokalne prędkości i położenia frontu woda-lód, że wielkość stałej porowatości ma niewielkie znaczenie w przypadku izotermicznej solidyfikacji wody.

Streamlines



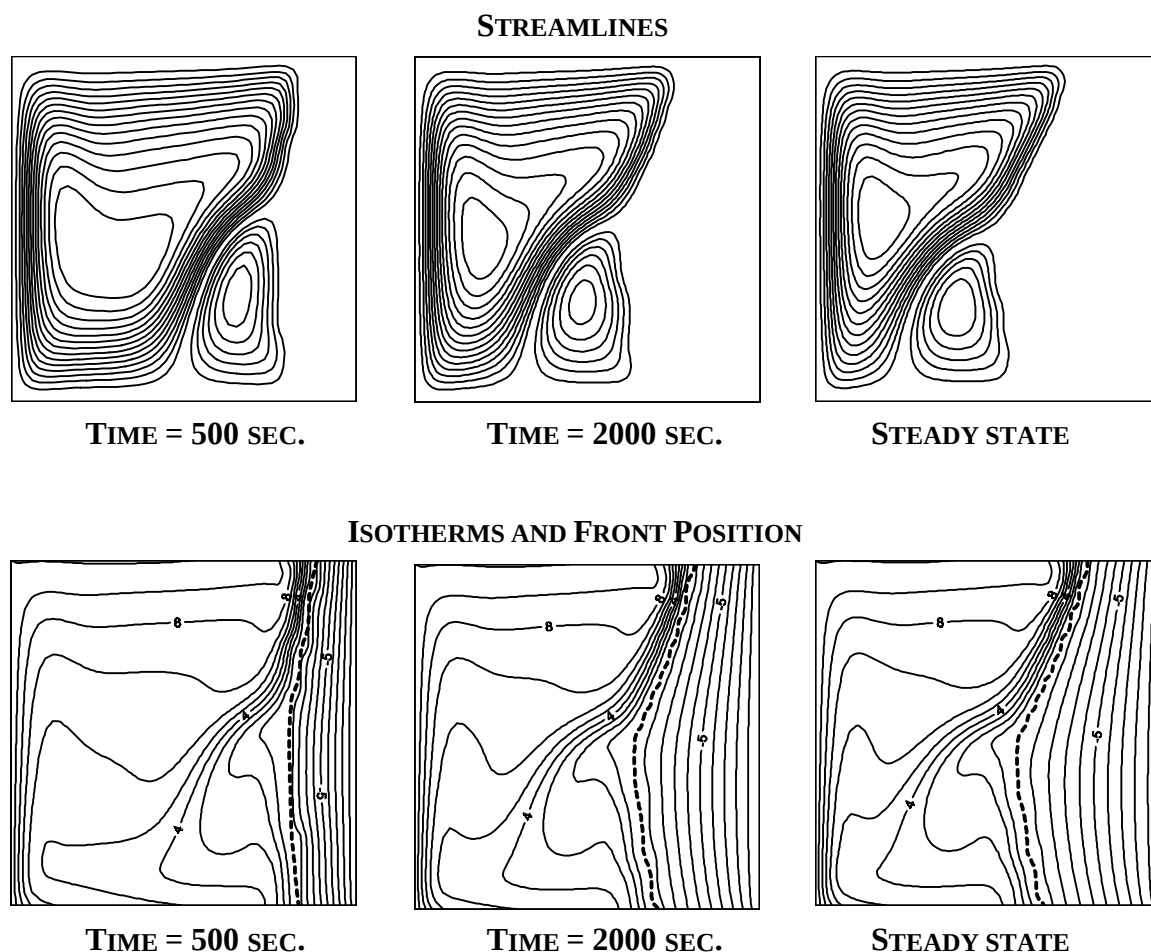
ISOTHERMS AND FRONT POSITION



Rys.4.11. Konwekcja naturalna w zamarzającej wodzie – poziome ścianki kuwety adiabatycznej (CASE_1)

Z powyższych rozważań wynika, że gdy przedmiotem analizy jest weryfikacja kodu numerycznego przez bardzo szczegółowe porównania lokalnych i chwilowych przebiegów zmiennych fizycznych procesu z wynikami dokładnych badań eksperymentalnych, podstawową

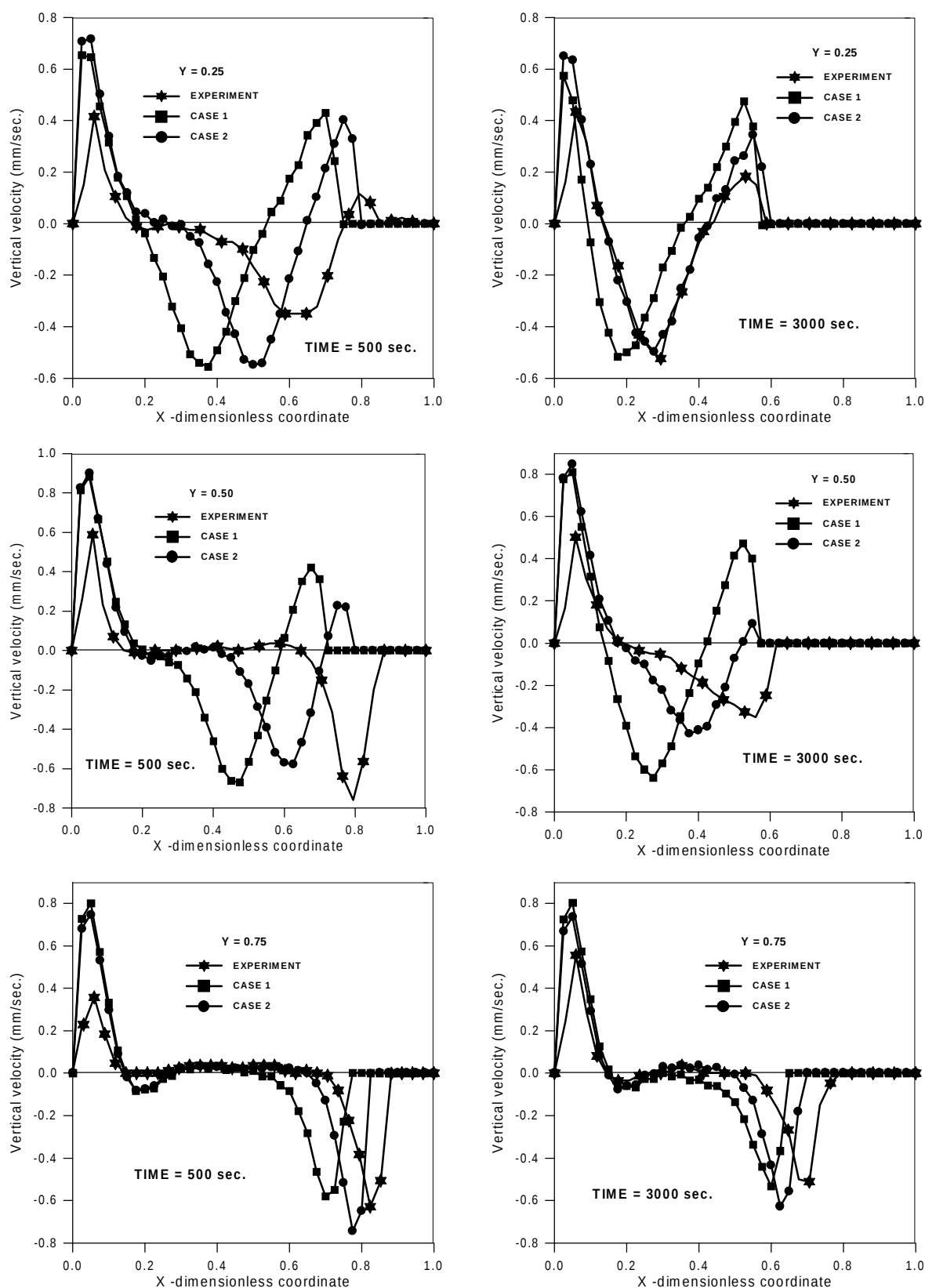
sprawą jest wprowadzenie do modelu obliczeniowego wiarygodnych danych materiałowych i warunków brzegowych przy których realizowany jest eksperyment. Takie informacje muszą być zatem niezbędną częścią składową „benchmarku” eksperymentalnego służącego za wzorzec do oceny wiarygodności kodów symulacji komputerowej.



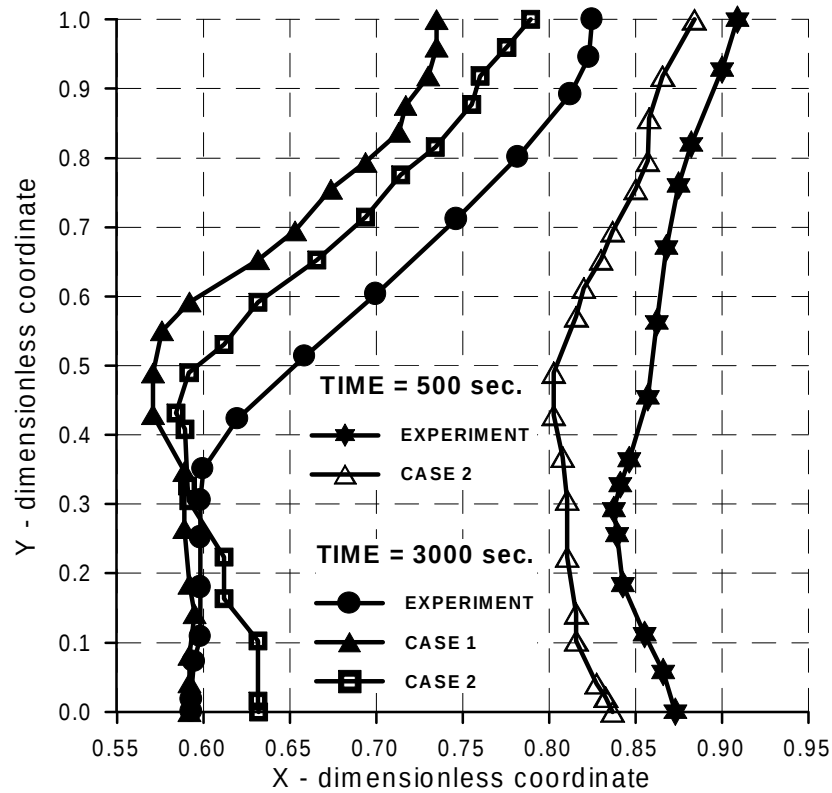
Rys.4.12. Konwekcja naturalna w zamarzającej wodzie sprzężona z przewodzeniem w poziomych ściankach kuwety (CASE_2)

Przedstawione porównania między wynikami analiz eksperymentalnych i numerycznych pokazują, że obliczeniowo efektywny model MES, którego algorytm oparty jest na metodzie rzutu, jawno-niejawnym schemacie całkowania w czasie i modelu ośrodka porowatego jest wiarygodnym narzędziem ilościowej analizy procesów przemian fazowych z konwekcją w układach jednoskładnikowych. Daje on bardzo dobrą zgodność obliczeń z eksperymentem w przypadku konwekcji czystej wody. Jego dokładność jest też zadawalająca (choć nie bardzo dobra) w symulacji procesu konwekcji swobodnej połączonej z izotermiczną zmianą fazy czystej wody. Pewne, obserwowane tu, rozbieżności mogą być w znacznym stopniu efektem niedokładności dostępnych danych materiałowych i warunków granicznych. Nie deprecjonują więc one modelu obliczeniowego.

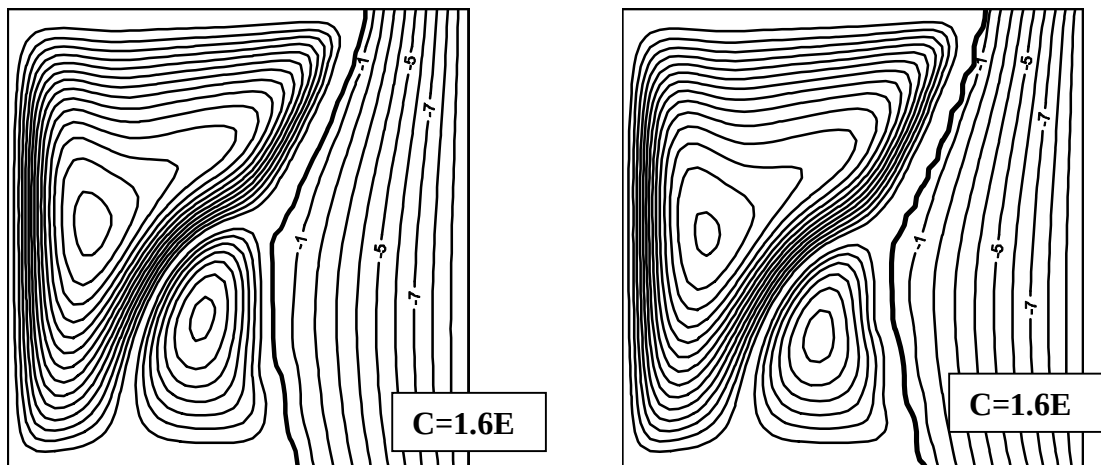
Mając powyższe na uwadze, model MES i jego kod komputerowy wykorzystano dalej w analizie numerycznej procesów przemian fazowych ciec-ciało stałe z konwekcją w układach binarnych. Szczegółowe studia nad dokładnością i wiarygodnością tego narzędzia obliczeniowego w przypadku układów dwuskładnikowych jest trudne ze względu na brak odpowiednich teoretycznych lub eksperymentalnych wzorców („benchmarks”).



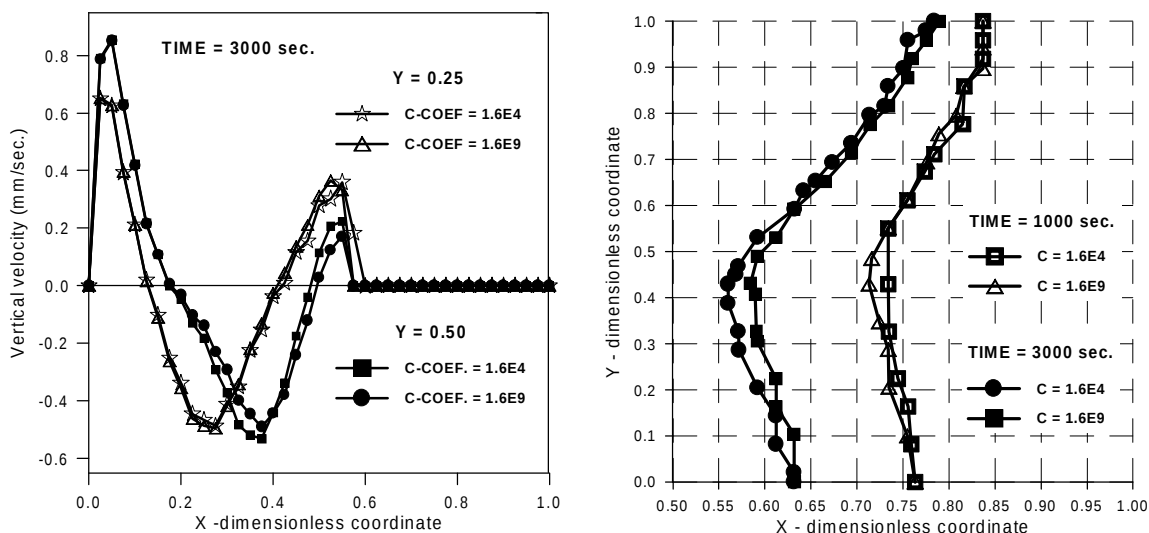
Rys.4.13. Rozkład pionowej składowej prędkości wzdłuż osi poziomej kuwety w jej trzech przekrojach – porównanie obliczeń i eksperymentu dla zamarzającej wody



Rys.4.14. Chwilowe położenia frontu woda/lód – porównanie obliczeń i eksperymentu



Rys.4.15a. Wpływ stałej porowatości C na strukturę przepływu w cieczy i pole temperatury w lodzie w izotermicznym procesie zamarzania wody



Rys.4.15b Wpływ stałej porowatości na pole prędkości, położenie i kształt frontu fazowego w izotermicznym procesie zamarzania wody; $C \equiv C_COEF = 1/K_0$

4.5 Numeryczna analiza anizotropii własności obszaru dendrytycznego w solidyfikacji binarnych roztworów rozcieńczonych

Izobaryczna solidyfikacja układu binarnego przebiega w skończonym przedziale temperatur (w odróżnieniu od iztermicznej zmiany fazy substancji jednoskładnikowej), co powoduje powstawanie obszaru dwufazowego rozdzielającego ciecz od ciała stałego. W rejonie dwufazowym (mushy zone) faza stała formuje się najczęściej w postaci gęstej krystalicznej osnowy o bardzo złożonej naturze, w której preferowane mechanizmy i wyselekcjonowane kierunki wzrostu struktury zależą od lokalnej temperatury i składu. Ponadto, ponieważ proces uwalniania ciepła przemiany fazowej zachodzi na mikro-powierzchniach rozdziału faz, transport energii zależy od złożonej morfologii tych wspólnych granic. Dodatkową komplikacją jest silna zależność przebiegu procesu solidyfikacji od ruchu płynu zarówno w strefie cieczy jak i w obszarze współistnienia dwóch faz. W tym ostatnim własności termodynamiczne nie są stałe, lecz zmieniają się w sposób ciągły ze zmianą lokalnego składu i temperatury. Ponadto, silnie kierunkowa natura tworzących się struktur dendrytycznych prowadzi do anizotropii oporów przepływu i własności termicznych obszaru dwufazowego. Dla dużych udziałów objętościowych fazy ciekłej przepływowi wzdłuż głównych kierunków wzrostu dendrytów towarzyszy przepływ normalny. Powoduje to spadek ciśnienia większy niż przewidywany w powszechnie stosowanym modelu Blake-Kozeny'ego. Poirier [21] pokazał, że przepuszczalność, cecha medium porowatego charakteryzująca jego opór przepływu, różni się znacznie na kierunkach równoległych i normalnych do kierunku pierwotnych dendrytów. Należy też oczekiwać, że silnie kierunkowa morfologia obszaru dendrytycznego może wpływać na proces transportu ciepła w tym dwufazowym rejonie, że pojawić się może anizotropia przewodności cieplnej i dyspersja.

W poprawnym opisie matematycznym i jego odpowiedniku numerycznym efekty te powinny być uwzględnione, by nie zatracić fizyki złożonych procesów transportu w obszarze dwufazowym. Tymczasem aspekty te mają jak dotychczas bardzo skromną literaturę. Problem silnej kierunkowości przepuszczalności ośrodka porowatego rozważany był jedynie w kilku pracach [17,20,21]. Natomiast, nie są znane autorom projektu publikacje dotyczące wpływu anizotropii przewodności cieplnej i termicznej dyspersji na procesy transportu ciepła w obszarze dendrytycznym.

Dlatego, w celu przebadania ich wpływu na przebieg solidyfikacji roztworu dwuskładnikowego, przeprowadzono analizę numeryczną, z wykorzystaniem opracowanego modelu MES, dla dwóch rozcieńczonych roztworów wody i chlorku amonu – mieszaniny która krzepnie tworząc, podobnie jak stopy metali, dwufazowy obszar o charakterze dendrytycznym.

Model matematyczny i numeryczny

W poszukiwaniu odpowiedzi na pytanie czy anizotropia oporów przepływu i własności termicznych obszaru dwufazowego jest istotnym parametrem w analizie procesu solidyfikacji, przyjęto następujące założenia

- płyn jest newtonowski i nieściśliwy a przepływ laminarny
- obowiązuje model Boussinesqa dla konwekcji swobodnej, tzn. liniowa zależność sił wyporu od temperatury (równanie 4.13) i stała gęstość czynnika
- pomija się transport substancji rozpuszczonej i siły wyporu pochodzące od gradientu stężeń. W ogólnym przypadku zjawiska te mogą istotnie wpływać na procesy przepływowe i wymianę ciepła w obszarze dwufazowym. Ich rola jest jednak znacznie mniejsza w roztworach rozcieńczonych, gdzie koncentracja substancji rozpuszczonej jest bardzo mała.
- rozważa się tylko roztwory rozcieńczone dla których przyjmuje się, że entalpia i własności termiczne są tylko funkcją temperatury
- obszar dendrytyczny traktowany jest jako porowate medium
- faza stała nie ulega deformacjom, nie ma w niej naprężeń wewnętrznych a brzegi analizowanego obszaru są nieprzepuszczalne. Prowadzi to do założenia jednakowych gęstości w obu fazach
- faza stała jest stacjonarna, tzn. $(v_s)_i = 0$.

Przy tych założeniach model matematyczny dany jest trzema pierwszymi równaniami układu (4.1) oraz związkami (4.3), (4.13) z $\beta_s = 0$ i (4.15). Odpowiadające mu równania analogu dyskretnego MES, opartego na metodzie reszt ważonych Galerkina (4.19) oraz jawno-niejawnym schemacie Adamsa-Bashfortha-Eulera to pierwsze trzy równania (4.21). W ich rozwiązaniu wykorzystano metodę rzutu (4.22) oraz algorytm linearyzacji równania energii (4.30÷4.31).

Własności obszaru dwufazowego

Zgodnie z powyższym założeniem gęstość w obszarze dwufazowym jest stała $\rho = \rho_l = \rho_s$. Przepuszczalność i przewodność termiczna roztworu zależą od lokalnej kierunkowej struktury dendrytycznej, co prowadzi do ich anizotropii.

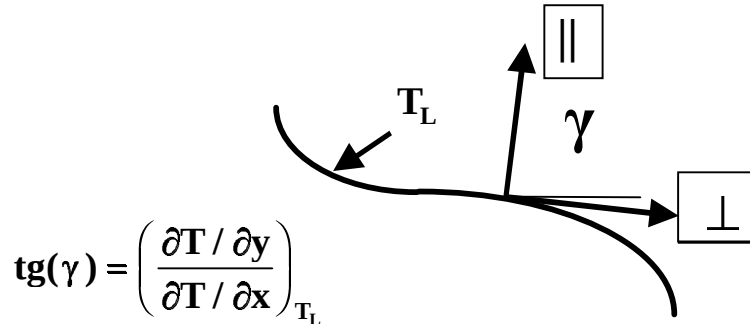
Poirier [21] pokazał, że wielkość oporu przepływu może być o rzędy różna w kierunku wzrostu dendrytów i prostopadle do tego kierunku. Modelując strukturę dendrytyczną jako zbiór cienkich walców oraz wykorzystując model przepływu w porowatym medium Blake-Kozenego, otrzymał on następujące wyrażenia na przepuszczalność wzdłuż dendrytów i prostopadle do nich

$$K_{\parallel} = \frac{mr_l^3}{(1-r_l)^2}; \quad K_{\perp} = \frac{mr_l^3}{(1-r_l)^{3/4}} \quad (4.33)$$

gdzie m jest parametrem zależnym od morfologii obszaru dwufazowego. Wyznacza się go na podstawie analizy geometrii pierwotnych i wtórnych dendrytów (ich podziałki) [21]. Powszechnie przyjmuje się, że dendryty rosną wzdłuż normalnej do izotermy przechodzącej w danej chwili przez rozważany punkt obszaru [16,20,21]. W obliczeniach zaproponowano model w którym podstawowy kierunek wzrostu dendrytu jest wzdłuż normalnej do izotermy *likwidusa* (rys.4.16). Określa się go w momencie gdy izoterma *likwidusa* przechodzi przez rozpatrywany punkt i utrzymuje tak długo, aż pojawi się w tym miejscu izoterma *solidusa*. W ten sposób lokalny kierunek wzrostu nie ulega zmianie w czasie pomiędzy przejściem obu wspomnianych izoterm,

przyrasta zaś udział fazy stałej. Składowe odwrotności tensora przepuszczalności przyjmują postać

$$\left. \begin{aligned} K_{xx}^{-1} &= \frac{1}{2} \left[(K_{\parallel}^{-1} + K_{\perp}^{-1}) + (K_{\parallel}^{-1} - K_{\perp}^{-1}) \cos(2\gamma) \right] \\ K_{xy}^{-1} &= K_{yx}^{-1} = \frac{1}{2} (K_{\perp}^{-1} - K_{\parallel}^{-1}) \sin(2\gamma) \\ K_{yy}^{-1} &= \frac{1}{2} \left[(K_{\parallel}^{-1} + K_{\perp}^{-1}) - (K_{\parallel}^{-1} - K_{\perp}^{-1}) \cos(2\gamma) \right] \end{aligned} \right\} \text{gdzie (rys.4.16): } \operatorname{tg}(\gamma) = \left(\frac{\partial T / \partial y}{\partial T / \partial x} \right)_{T_L} \quad (4.34)$$



Rys.4.16. Główne kierunki wzrostu dendrytów i oporów przepływu

Przewodność cieplną w obszarze dwufazowym można wyrazić jako sumę dwóch składowych

$$\lambda_e = \lambda_e^0 + \lambda_e^d \quad (4.35)$$

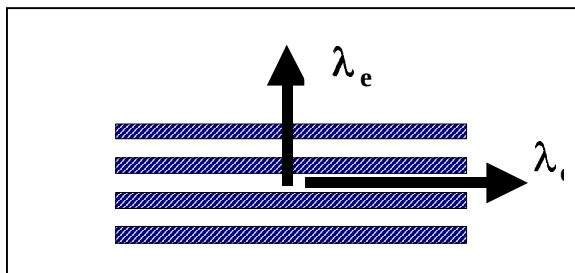
gdzie: λ_e^0 and λ_e^d są odpowiednio członami statycznym i dyspersyjnym.

Trzy różne modele statycznej przewodności cieplnej zostaną dalej przedyskutowane.

Pierwszym, oznaczanym przez Model_1, jest model mieszaniny (4.12), w którym

$$\lambda_e^0 = (1 - r_1) \lambda_s + r_1 \lambda_l \quad (4.36)$$

Jest on stosowany w modelu izotropowej przewodności cieplnej (rys.4.17), gdzie powszechnie zakłada się, że (4.36) obowiązuje na obu wzajemnie prostopadłych kierunkach [6,7,20]. Tymczasem z teorii heterogenicznych mediów porowatych wiadomo, że (4.36) jest prawdziwe na obu kierunkach tylko w szczególnych przypadkach [31] konfiguracji warstwowych lub składających się z wiązek współkierunkowych cylindrów, tj. wtedy gdy dominuje przepływ ciepła wzdłuż warstw lub osi cylindrów.



Rys.4.17. Izotropowy model mieszaniny

Dendrytyczna solidyfikacja prowadzi do kierunkowej struktury. Zasadne więc wydaje się zastosowanie modelu anizotropowej przewodności (rys.4.18), oznaczanego dalej Model_2, gdzie składowe tensora mają postać:

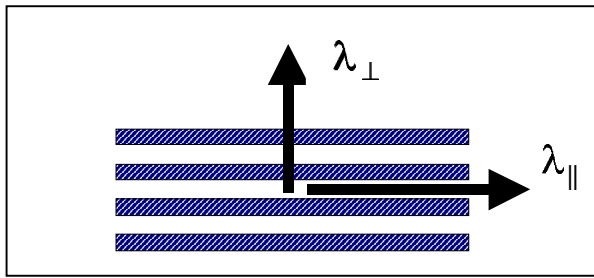
$$\left. \begin{aligned} \lambda_{xx}^0 &= \frac{1}{2}[(\lambda_{\parallel} + \lambda_{\perp}) + (\lambda_{\parallel} - \lambda_{\perp})\cos(2\gamma)] \\ \lambda_{xy}^0 &= \lambda_{yx}^0 = \frac{1}{2}(\lambda_{\parallel} - \lambda_{\perp})\sin(2\gamma) \\ \lambda_{yy}^0 &= \frac{1}{2}[(\lambda_{\parallel} + \lambda_{\perp}) - (\lambda_{\parallel} - \lambda_{\perp})\cos(2\gamma)] \end{aligned} \right\} \quad (4.37)$$

Przewodność równoległa do głównego kierunku wzrostu dendrytów dana jest przez

$$\lambda_{\parallel} = (1 - r_1)\lambda_s + r_1 \lambda_1 \quad (4.38)$$

zaś przewodność w kierunku normalnym określana jest z dolnego ograniczenia Wienera dla przewodności materiału heterogenicznego [32]

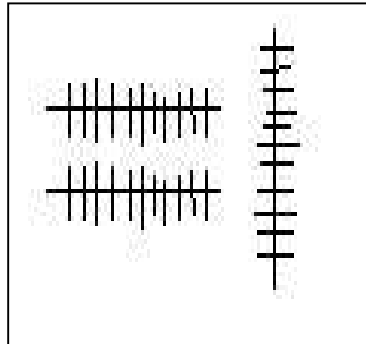
$$\lambda_{\perp} = \frac{1 - r_1}{\lambda_s} + \frac{r_1}{\lambda_1} \quad (4.39)$$



Rys.4.18. Anizotropowy model przewodności w obszarze dendrytycznym

By uwzględnić mniej regularną strukturę, gdy dendryty rosną wzdłuż różnych kierunków (co symbolicznie pokazano na rys.4.19), proponuje się izotropowy model uśrednionej, efektywnej przewodności (Model_3), gdzie

$$\left. \begin{aligned} \lambda_{\parallel} &= (1 - r_1)\lambda_s + r_1 \lambda_1 \\ \lambda_{\perp} &= \frac{1 - r_1}{\lambda_s} + \frac{r_1}{\lambda_1} \\ \lambda_e^0 &= \sqrt{\lambda_{\parallel} \cdot \lambda_{\perp}} \end{aligned} \right\} \quad (4.40)$$



Rys.4.19. Model izotropowego materiału symetrycznego

Termiczna dyspersja jest efektem dwóch mechanizmów [31,32], tj.: mieszania lokalnych strumieni płynu, gdy przepływa on krętą drogą wokół dendrytów oraz zwiększeniem wzajemnego oddziaływania termicznego ciało stałe-ciecz na skutek wzrostu lokalnego gradientu temperatury wywołanego ruchem płynu. Efekt dyspersji termicznej uwzględnia się w modelu matematycznym przez wprowadzenie dodatkowego członu (patrz 4.35) w równaniu energii, zależnego od lokalnej

prędkości płynu. Ten człon jest tensorem, gdyż dyspersja jest zjawiskiem o charakterze kierunkowym [31]. Składowe dyspersyjnej części tensora przewodności definiuje się jako

$$\left. \begin{aligned} \lambda_{xx}^d &= \lambda_{\perp}^d + (\lambda_{\parallel}^d - \lambda_{\perp}^d) \frac{v_x v_x}{|\mathbf{v}|^2} \\ \lambda_{xy}^d &= \lambda_{yx}^d = (\lambda_{\parallel}^d - \lambda_{\perp}^d) \frac{v_x v_y}{|\mathbf{v}|^2} \\ \lambda_{yy}^d &= \lambda_{\perp}^d + (\lambda_{\parallel}^d - \lambda_{\perp}^d) \frac{v_y v_y}{|\mathbf{v}|^2} \\ \text{gdzie } |\mathbf{v}| &= \sqrt{v_x^2 + v_y^2} \end{aligned} \right\} \quad (4.41)$$

Osie główne tensora λ_{ij}^d są określone przez kierunek wektora lokalnej prędkości płynu $\mathbf{v} (v_x, v_y)$. Gdy dominującym mechanizmem jest mieszanie strumieni płynu wówczas $\lambda_{\parallel}^d$ i $\lambda_{\perp}^d$ można wyznaczyć z

$$\left. \begin{aligned} \lambda_{\parallel}^d &= (\rho_L c_L) c_{\parallel} |\mathbf{v}| d \\ \lambda_{\perp}^d &= (\rho_L c_L) c_{\perp} |\mathbf{v}| d \end{aligned} \right\} \quad (4.42)$$

gdzie $c_{\parallel}$ i $c_{\perp}$ są funkcjami udziału objętościowego fazy ciekłej r_1 i morfologii porowatego medium, zaś d jest średnim wymiarem porów (główną podziałką struktury dendrytów). Zgodnie z [33] oraz wzorem (4.33) parametry te można obliczyć jako

$$\left. \begin{aligned} c_{\perp} &= 0.3718(1-f)^{2.4274} \\ c_{\parallel} &= 4c_{\perp} \\ d &= \sqrt{80\text{m}} \frac{f}{1-f} \end{aligned} \right\} \quad (4.43)$$

Entalpia mieszaniny obu faz określona jest równaniem (4.6). By je wykorzystać konieczny jest jednak związek między udziałem fazy ciekłej, temperaturą i koncentracją. W analizowanym uproszczonym przypadku roztworów rozcieńczonych, gdzie zmiany koncentracji są pomijalne a wykres fazowy nie może być użyty, konieczne jest dodatkowe założenie charakteru temperaturowej zależności entalpii całkowitej (lub udziału objętościowego fazy ciekłej). Przyjęto więc stałość ciepła właściwego obu faz i liniową zmienność entalpii z temperaturą w wąskim zakresie temperatur między krzywymi *likwidusa* i *solidusa* rozcieńczonego roztworu (rys.4.20). Zatem całkowita entalpia (na m^3) dana jest wzorem(4.6) zaś entalpie właściwe (na kg) poszczególnych faz oblicza się [7,20]

$$\left. \begin{aligned} H_S &= c_S T \\ H_L &= c_S T + L(T) \end{aligned} \right\} \quad (4.44)$$

gdzie ciepło solidyfikacji jest funkcją temperatury

$$L(T) = L(T_S) + (c_L - c_S)(T - T_S) \quad (4.45)$$

Z (4.6) oraz (4.44) i (4.45)

$$H(T) = (1-r_1)c_S T + r_1(c_S T + L(T_S) + (c_L - c_S)(T - T_S)) \quad (4.46)$$

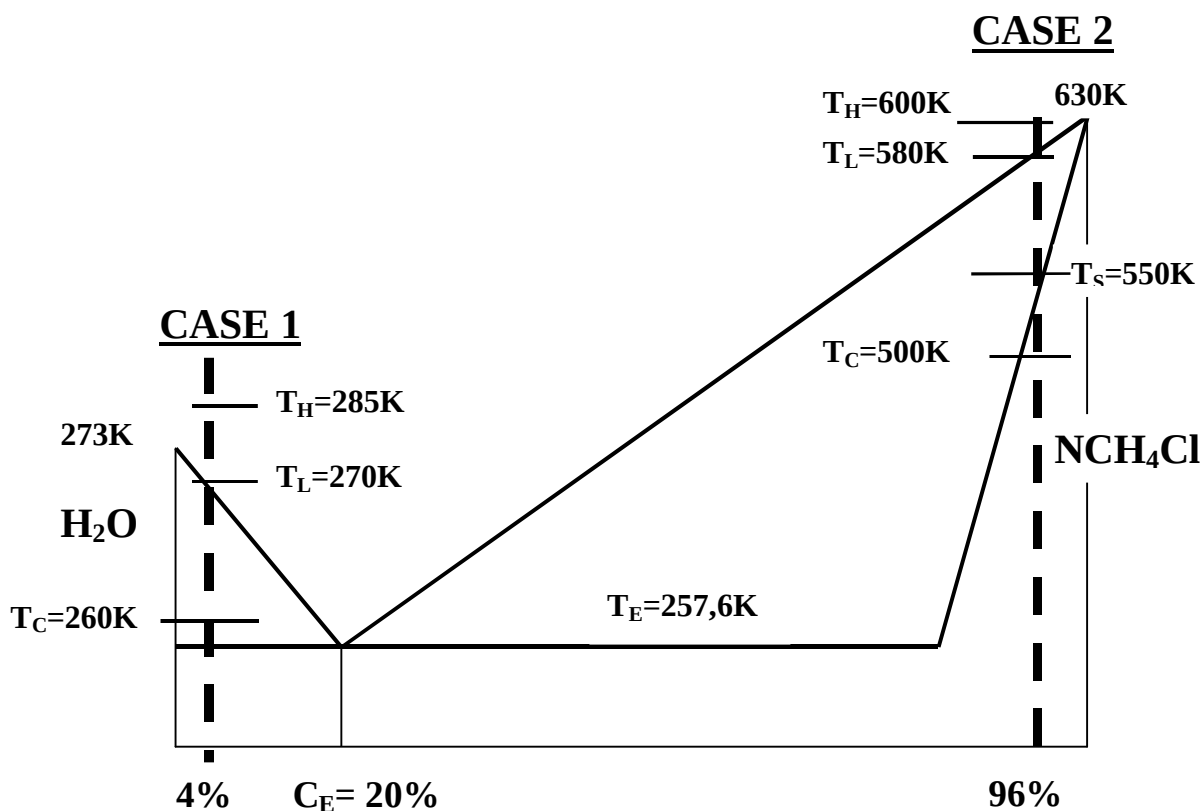
Wykorzystując założoną liniową zależność H od T po lewej stronie powyższego wzoru można obliczyć nieznaną udział objętościowy fazy ciekłej r_1 dla bieżącej temperatury T .

Wyniki obliczeń i dyskusja

Przedstawione powyżej modele oporów przepływu i współczynników wymiany ciepła w obszarze dwufazowym zostały wprowadzone do kodu symulacji komputerowej, który wykorzystano następnie by odpowiedzieć na pytanie jak anizotropia tego obszaru wpływa na pola prędkości i temperatury w procesie solidyfikacji.

Obliczenia przeprowadzono dla dwóch przykładowych układów dwuskładnikowych. Były to dwa różne ciekłe roztwory rozcieńczone chlorku amonu i wody krzepnące w kanale o przekroju kwadratowym. Założono adiabatyczność górnej i dolnej ścianki kanału oraz znane stałe temperatury na ściankach pionowych: T_H na prawej (gorącej) równe wartości początkowej T_i oraz T_C na lewej (zimnej). Gwałtowny spadek temperatury na tej powierzchni od początkowej wartości T_i do T_C powoduje, że w jej okolicy startuje proces solidyfikacji roztworu.

Najpierw rozważono roztwór wodny zawierający 4% chlorku amonu (znacznie mniej niż koncentracja eutektyki $C_E = 20\%$), dla którego temperatura *likwidusa* $T_L = 270\text{K}$, zaś temperatura *solidusa* równa jest eutektycznej (rys.4.20) i wynosi $T_S = T_E = 257,6\text{K}$. Gorąca ścianka utrzymywana była w $T_H = T_i = 285\text{K}$, zaś temperatura zimnej spadła gwałtownie od T_i do $T_C = 260\text{K}$, wartości nieco poniżej temperatury eutektyki.



Rys.4.20. Wykres fazowy NCH₄CL+H₂O z zaznaczonymi charakterystycznymi temperaturami dla dwóch analizowanych przypadków roztworów rozcieńczonych

W tym przypadku zatem, oznaczanym dalej CASE_1 (rys.4.20), nie występował obszar fazy stałej a jedynie obszary cieczy i dwufazowy.

W drugim przypadku przeprowadzono obliczenia dla roztworu zawierającego 96% chlorku amonu, dla którego $T_L = 580\text{K}$, zaś $T_S = 550\text{K}$. Gorąca ścianka była utrzymywana w temperaturze $T_H = T_i = 600\text{K}$, zaś $T_C = 500\text{K} < T_S$. W tej sytuacji, oznaczanej dalej CASE_2 (rys.4.20), można wyróżnić wszystkie trzy obszary, tj. cieczy, fazy stałej oraz obszar

współlistnienia obu faz. Charakterystyczne temperatury dla obu tych przypadków pokazano na wykresie fazowym roztworu (rys.4.20), zaś odpowiednie własności termofizyczne zebrano w Tablicy 4.2 dla obu roztworów rozcieńczonych. Wartość parametru m , występującego we wzorach (4.33) i (4.43), przyjęto z pracy [33] równą $5,56 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2$.

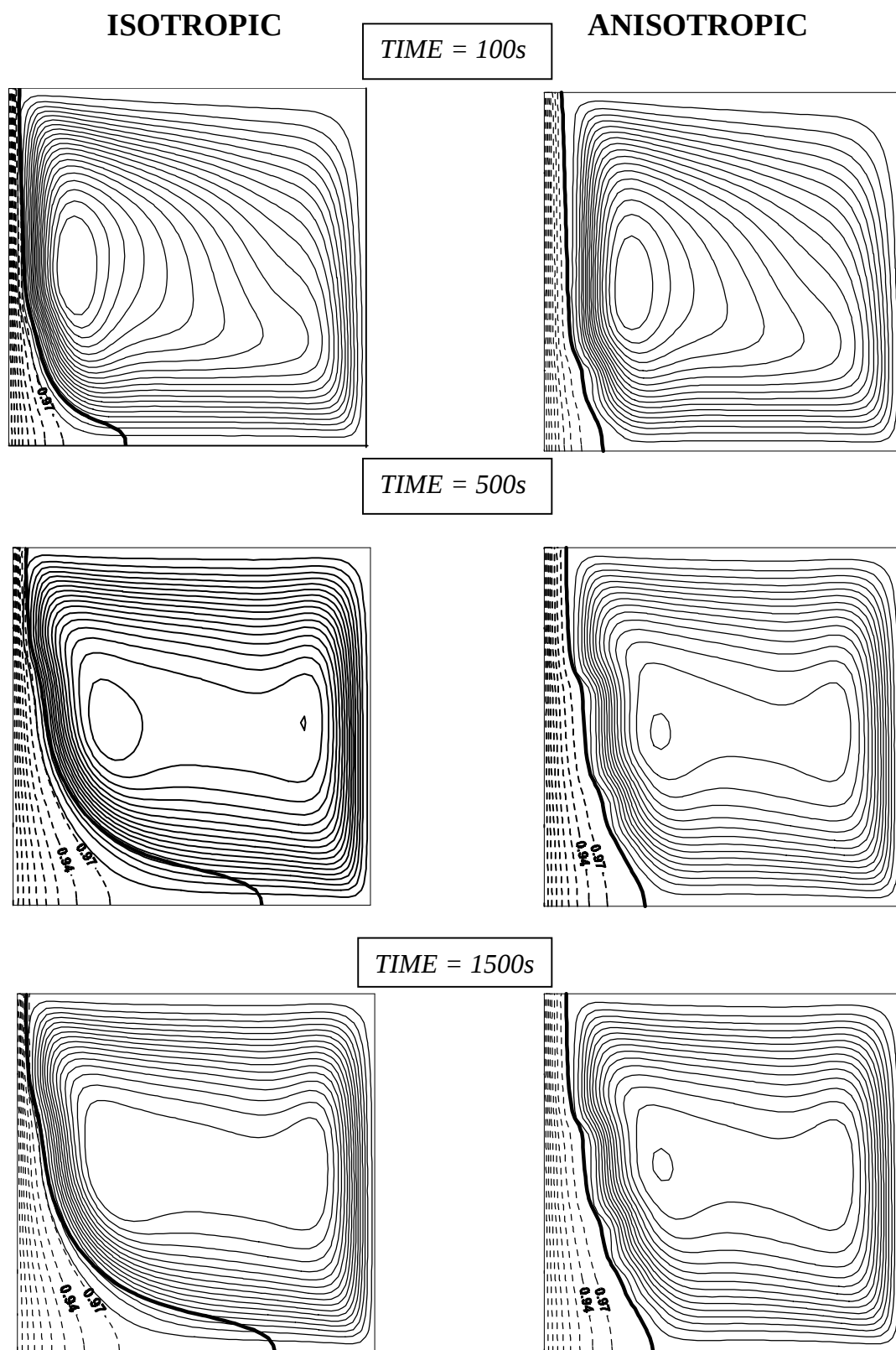
Tablica 4.2 Termofizyczne własności analizowanych roztworów

CASE_1	CASE_2
$\rho_L = \rho_S = 1016 \text{ kg / m}^3$	$\rho_L = \rho_S = 1078 \text{ kg / m}^3$
$c_{pL} = 4.187 \text{ kJ / (kgK)}$	$c_{pL} = 3.249 \text{ kJ / (kgK)}$
$c_{pS} = 1.567 \text{ kJ / (kgK)}$	$c_{pS} = 1.870 \text{ kJ / (kgK)}$
$\lambda_L = 0.582 \text{ W / (mK)}$	$\lambda_L = 0.486 \text{ W / (mK)}$
$\lambda_S = 2.500 \text{ W / (mK)}$	$\lambda_S = 0.393 \text{ W / (mK)}$
$L = 318 \text{ kJ / kg}$	$L = 307 \text{ kJ / kg}$

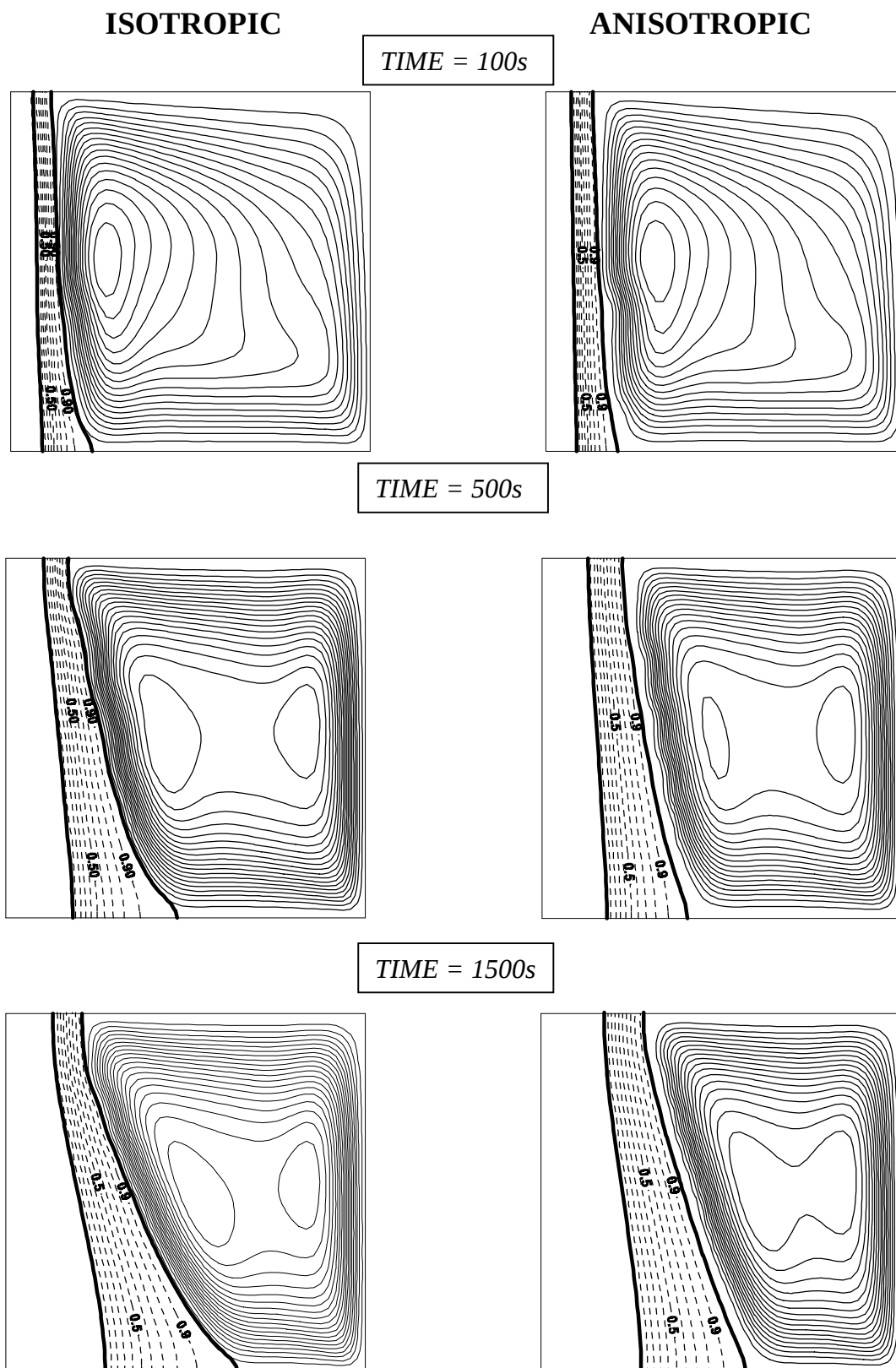
W celu oceny znaczenia anizotropowego charakteru oporów przepływu w obszarze dwufazowym porównano wyniki obliczeń procesu solidyfikacji rozcieńczonych roztworów chlorku amonu i wody dla anizotropowej przepuszczalności, opisanej związkami (4.33) i (4.34), z rezultatami uzyskanymi dla modelu izotropowego $K_{xx} = K_{yy} = K_{||}$, $K_{xy} = K_{yx} = 0$, gdzie $K_{||}$ dane jest wzorem (4.33). W obu przypadkach zastosowano izotropowy model uśrednionej efektywnej przewodności cieplnej (4.40) oraz pominięto dyspersję termiczną. Na rys.4.21 i rys.4.22 przedstawiono chwilowe struktury przepływu (w postaci pól linii prądu), kształty obszaru dwufazowego (ograniczonego przez izotermy *solidusa* i *likwidusa*) oraz linie stałych wartości udziału objętościowego fazy ciekłej, odpowiednio dla CASE_1 i CASE_2. Dodatkowo, na rys.4.23 porównano ewolucję układu dwufazowego w czasie dla obu modeli przepuszczalności obszaru dendrytycznego. Zestawienie uzyskanych wyników potwierdza istotną rolę efektu anizotropii oporów przepływu w ośrodku dwufazowym na jego chwilowe kształty, w szczególności na przebieg granicy między tym obszarem a rejonem cieczy. Anizotropia przepuszczalności powoduje mniejsze zakrzywienie tej granicy, zwłaszcza w dolnej części kanału (rys.4.21, rys.4.22, rys.4.23). Natomiast jej wpływ na kształt linii temperatury *solidusa* – granicy między obszarem dwufazowym i fazą stałą – jest niewielki (rys.4.22 i CASE_2 na rys.4.23). Na rys.4.24 i rys.4.25 pokazano rozkłady udziału objętościowego cieczy oraz pionowej składowej prędkości dla trzech wybranych przekrojów poziomych obszaru dendrytycznego, tj. w jednej czwartej, połowie i trzech czwartych wysokości kanału. Prędkość w tym obszarze jest znacznie mniejsza dla przypadku anizotropowego. Wynika to z faktu, że przepuszczalność ośrodka wzdłuż izoterm, tj. przybliżonych kierunków przepływu, jest znacznie mniejsza (patrz związki (4.33)) niż w przypadku izotropowym, gdzie na wszystkich kierunkach obowiązuje pierwszy ze związków (4.33).

Wnikliwa analiza rozwoju frontów solidyfikacji (rys.4.21÷4.23) pokazuje też rolę ruchów konwekcyjnych w przebiegu tego procesu w układach dwuskładnikowych. We wczesnych czasach solidyfikacji, gdy dominuje przewodzenie, krzywizna linii *likwidusa* jest niewielka. Jednakże w dalszych czasach procesu, gdy rozwija się konwekcja naturalna w obszarach fazy ciekłej i dwufazowym, linia rozdziału tych dwóch obszarów (linia temperatury *likwidusa*) silnie się zakrzywia. Natomiast granica między fazą stałą i obszarem dendrytycznym (linia temperatury *solidusa*) pozostaje płaska wobec niewielkich prędkości płynu w okolicach tej powierzchni. W

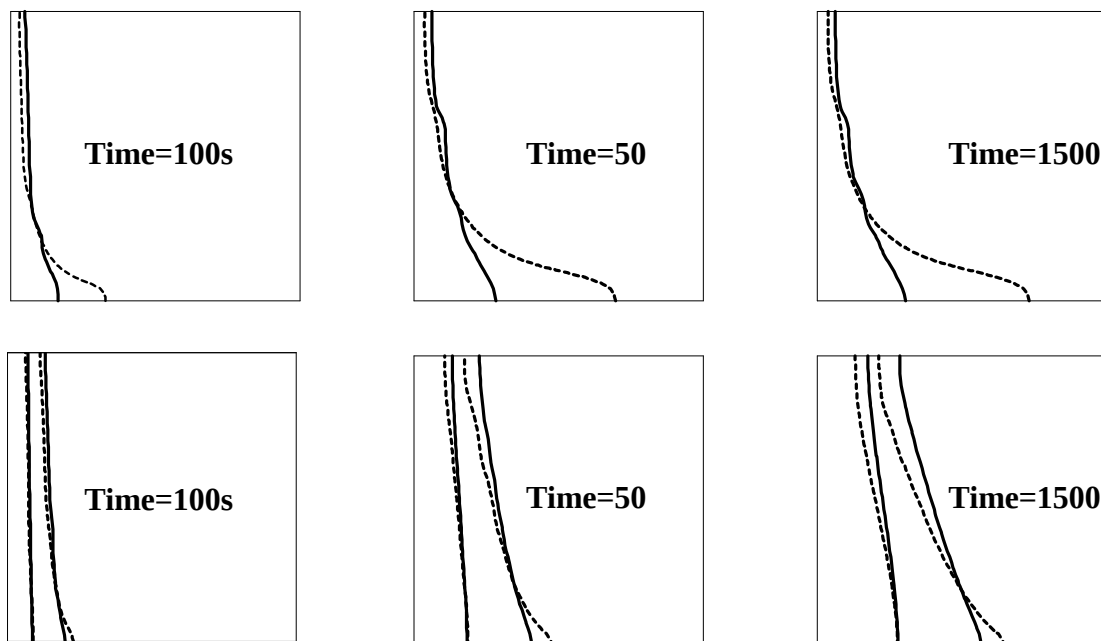
konsekwencji, konwekcja płynu, wywołująca szybszy ruch linii temperatury *likwidusa*, znacznie zwiększa wymiary obszaru dwufazowego.



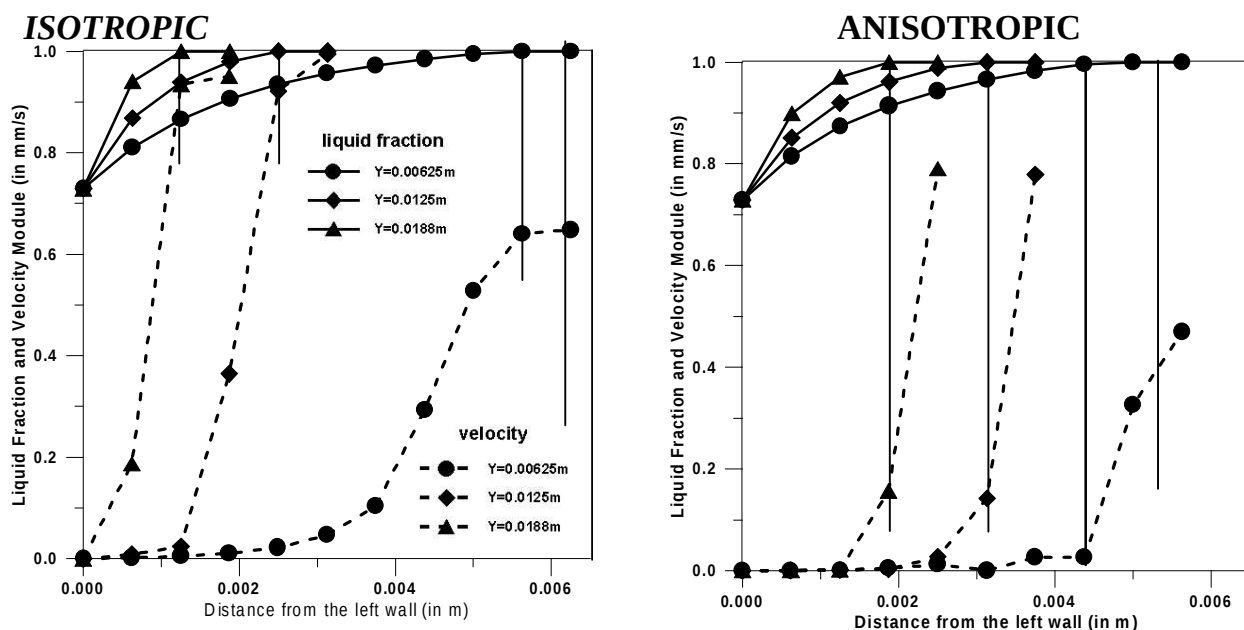
Rys. 4.21. Linie prądu (ciągłe) i linie stałych wartości udziału objętościowego cieczy (przerwane) w wybranych czasach solidyfikacji 5% wodnego roztworu chlorku amonu



Rys. 4.22. Linie prądu (ciągłe) i linie stałych wartości udziału objętościowego cieczy (przerywane) w wybranych czasach solidyfikacji 95% roztworu chlorku amonu i wody (obowiązuje na wszystkich kierunkach). Tym też należy tłumaczyć mniejsze zakrzywienie granic anizotropowego obszaru dwufazowego.



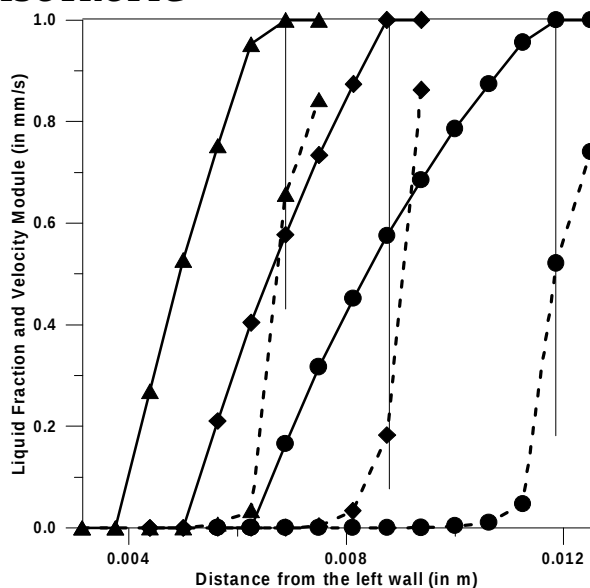
Rys.4.23. Chwilowe kształty obszaru dwufazowego – porównanie izotropowego i anizotropowego modelu przepuszczalności: CASE_1 – górny wiersz, CASE_2 – dolny wiersz



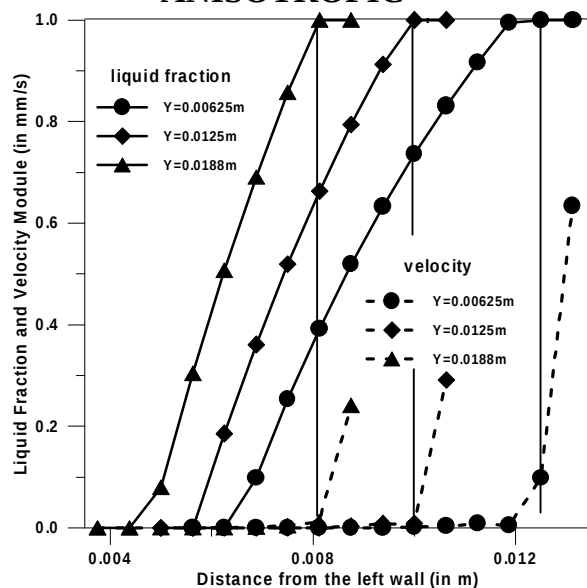
Rys.4.24. Ustalone rozkłady normalnej składowej prędkości i porowatości dla trzech wybranych przekrojów poziomych obszaru dendrytycznego w procesie solidyfikacji 5% wodnego roztworu chlorku amonu

Dalsze badania dotyczyły doboru statycznej przewodności cieplnej obszaru dwufazowego. Najpierw porównano wyniki obliczeń, dla obu rozważanych roztworów, otrzymane z izotropowego modelu mieszaniny (Model_1) i w pełni anizotropowego modelu przewodności (Model_2). Uzyskane pola temperatury były bardzo podobne – graficznie nierozróżnialne.

ISOTROPIC



ANISOTROPIC

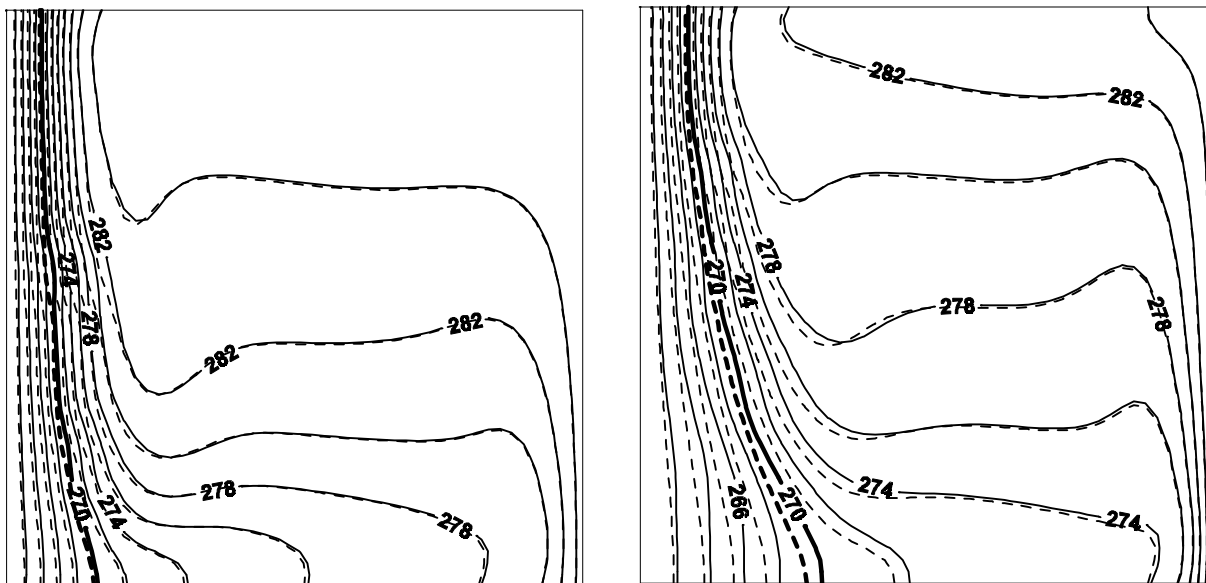


Rys.4.25. Ustalane rozkłady normalnej składowej prędkości i porowatości dla trzech wybranych przekrojów poziomych obszaru dendrytycznego w procesie solidyfikacji 95% roztworu chlorku amonu i wody

Dowodzi to, że w analizowanych roztworach dominowało przewodzenie wzdłuż głównych kierunków wzrostu dendrytów, że przewodzenie prostopadle do tego kierunku ma niewielki wpływ – nie jest więc istotny sposób jego modelowania. Następnie, by odpowiedzieć na pytanie jaki jest wpływ struktury obszaru dendrytycznego na pole temperatury, przeprowadzono podobne obliczenia z wykorzystaniem izotropowego modelu uśrednionej efektywnej przewodności termicznej (Model_3), który może być stosowany w sytuacjach, gdy obszar dwufazowy nie ma wyraźnie wyróżnionych kierunków (Model_3 – model symetrycznego obszaru, rys.4.19). Uzyskane wyniki porównano z obliczeniami dla anizotropowej przewodności (Model_2). W przypadku 95% roztworu chlorku amonu i wody (CASE_2), gdzie substancją rozpuszczoną jest woda a rozpuszczalnikiem NCH_4Cl , przewodności fazy stałej i ciekłej są porównywalne, bowiem $\lambda_s / \lambda_l = 0,84$ (prawa kolumna Tablicy 4.2). Uzyskane tu pola temperatury są graficznie prawie nierozróżnialne – oba modele, tj. Model_3 i Model_2 nie wykazują widocznych różnic. Jednakże w przypadku 5% roztworu chlorku amonu w wodzie, gdy przewodność fazy stałej jest ponad czterokrotnie wyższa niż fazy ciekłej (lewa kolumna Tablicy 4.2), przebiegi linii stałej temperatury zależą od wybranego modelu przewodności w obszarze dendrytycznym. Jest to widoczne na rys.4.26, gdzie porównano Model_2 i Model_3 dla izotropowej i anizotropowej przepuszczalności obszaru dwufazowego krzepnącego 5% roztworu chlorku amonu w wodzie (CASE_1).

W celu zbadania wpływu dyspersji termicznej na zachowanie się roztworu rozpuszczonego w procesie jego solidyfikacji, wykorzystano związki (4.35), (4.41) do (4.43). Obliczenia przeprowadzono dla obu rozważanych mieszanin wody i chlorku amonu. Okazało się, że we wszystkich analizowanych przypadkach zjawisko dyspersji termicznej nie miało widocznego wpływu na uzyskane pola prędkości i temperatury. Uzasadnić to można w następujący sposób.

Dyspersyjny człon przewodności cieplnej zależy od porowatości (udziału objętościowego fazy ciekłej, r_l) oraz modułu lokalnej prędkości (wzory (4.42) i (4.43)). Zależność ta może być zapisana w postaci $\lambda^d \sim F(r_l)|\mathbf{v}|$, gdzie $F(r_l) = r_l / (1 - r_l)^{1,4274}$. Funkcja $F(r_l)$ ma maksimum dla $r_l = 0,412$.



Rys.4.26. Porównanie ustalonych pól temperatury dla modeli: anizotropowej (linia ciągła) i uśrednionej izotropowej (linia przerywana) przewodności termicznej dendrytycznego obszaru o anizotropowej (lewy rysunek) i izotropowej (prawy rysunek) przepuszczalności w procesie solidyfikacji 5% roztworu NCH_4Cl w wodzie

Z drugiej strony, dla rozważanych roztworów $\text{NCH}_4\text{Cl}+\text{H}_2\text{O}$, gdzie parametr m jest bardzo mały, prędkość bardzo szybko zanika w miarę przyrostu fazy stałej w obszarze dendrytycznym. Istotnie, w okolicach izotermy *likwidusa* (gdzie r_1 jest bliskie jedności) prędkość jest rzędu 10^{-3} , ale spada o rząd dla $r_1=0,9$ i dalsze trzy rzędy dla mniejszych wartości r_1 (rys.4.24). Spadek prędkości jest znacznie szybszy w przypadku anizotropii przepuszczalności (rys.4.24) i dla roztworu zawierającego niewielką ilość wody (CASE_2, rys.4.25). Dlatego iloczyn $F(r_1)|\mathbf{v}|$ jest bardzo mały w całym obszarze dendrytycznym. W konsekwencji część dyspersyjna tensora przewodności cieplnej nie przekracza wartości $6 \cdot 10^{-4} \text{ W/(kgK)}$, co odpowiada 0,14% przewodności fazy ciekłej.

4.6 Symulacja komputerowa procesów makro-segregacji i mikro-segregacji składników roztworu binarnego

W procesie solidyfikacji ciekłych stopów, nawet tych o jednorodnej kompozycji początkowej, pojawia się zjawisko segregacji składników w obu fazach [16]. Wywołane jest ono różnicami ich rozpuszczalności w fazie stałej i ciekłej. Prowadzi to do selektywnego usuwania jednego z komponentów na mikroskopowych powierzchniach kontaktu faz. W przypadku binarnego roztworu składnikiem tym jest substancja rozpuszczona. Ten nadmiar usuniętego składnika jest transportowany w płynie na drodze ruchów konwekcyjnych, wywołanych gradientami temperatury i stężeń, i w mniejszym stopniu przez dyfuzję w obu fazach. W konsekwencji w różnych częściach obszaru pojawiają się rejony bogatsze i uboższe w składnik rozpuszczony. Te różnice mogą być znaczne, sięgać 30% i więcej [16]. Proces segregacji obserwowany jest w dwóch skalach. W skali podziałki ramion dendrytów mówimy o *mikrosegregacji*, zjawisku istotnym szczególnie w fazie stałej, gdzie jedynym mechanizmem przenoszenia jest dyfuzja. W większej skali występuje *makrosegregacja* [16]. Rozpoznaną już dziś przyczyną tego zjawiska jest ruch płynu lub ciała stałego w obszarze dwufazowym. Fizyczne przemieszczanie się faz prowadzi do makrosegregacji.

Jedną z dróg tego przemieszczania może być ruch i osiadanie pojedynczych kryształów równoosiowych, powstających we wczesnych czasach procesu solidyfikacji. Innym mechanizmem jest ruch płynu między-dendrytycznego jako wynik oddziaływań cieplnych oraz skurczu solidyfikacyjnego. Jest to główna przyczyna segregacji [16]. W obszarze roztworu ciekłego siły wyporu, wywołane różnicami temperatur i stężeń odpowiedzialne są (obok znacznie mniejszego udziału dyfuzji) za przenoszenie składnika. Te przepływy recyrkulacyjne, wywołane ruchami konwekcyjnymi, charakteryzuje zatem tendencja do nierównomiernej dystrybucji wtrąceń. Powoduje to, że z upływem czasu jednorodny rozkład stężeń ulega ewolucji prowadząc do separacji jednej z faz i jej akumulacji w wybranych obszarach przepływu. Zjawisko to jest bardzo niekorzystne w procesach technologicznych - uważa się je za główną przyczynę niejednorodności odlewów i ich defektów strukturalnych.

Wynika stąd konieczność głębszego zrozumienia i dokładniejszych analiz mechanizmów segregacji komponentów, roli tego zjawiska w kształtowaniu struktury odlewu i sposobów sterowania rozkładami koncentracji, poprzez właściwe warunki prowadzenia procesu odlewniczego. To praktyczne znaczenie problemu jest od kilku lat głównym bodźcem rozwoju modeli i algorytmów symulacji komputerowej tych zjawisk. Eksperymenty są tu bardzo drogie, trudne i czasochłonne, zaś ogólna dostępność komputerów i rozwój współczesnych metod numerycznych, gwarantujących coraz większą dokładność obliczeń, uzasadnia poszukiwanie odpowiedzi jakościowych i ilościowych na drodze obliczeń numerycznych. Są one złożone ze względu na sprzężenia pól prędkości, ciśnienia, temperatury i koncentracji w równaniach zachowania (4.1), a także ze względu na powiązania koncentracji, temperatury i entalpii w dodatkowych związkach konstytutywnych.

W celu ilościowej analizy dwuwymiarowych procesów transportu masy, pędu, energii i koncentracji substancji rozpuszczonej podczas solidyfikacji dwuskładnikowego roztworu opracowano model symulacji komputerowej, oparty na metodzie MES, oraz jego efektywny algorytm obliczeniowy.

Przyjmując podstawowe założenia dotyczące charakteru przepływu, modelu płynu i opisu obszaru dwufazowego jako medium porowatego, zgodnie z tym co przedstawiono w rozdziale 4.2.1, oraz wykorzystując jednofazowy model Bennona i Incropera [6] otrzymuje się równania zachowania masy, pędu, energii i koncentracji składnika w postaci (4.1).

Założenie stałej gęstości płynu (4.2) oznacza, że nie rozpatruje się dalej efektów zmiany objętości faz (np. skurczu solidyfikacyjnego) i wynikających stąd ruchów cieczy. Głównym zatem mechanizmem konwekcji w obszarze dwufazowym oraz w obszarze cieczy są siły wyporu wywołane gradientami temperatury i stężenia. Zgodnie z przyjętym dalej modelem Boussinesqa są one liniową funkcją temperatury i koncentracji substancji rozpuszczonej (4.13).

Pomija się także przemieszczanie się dendrytów, przyjmując, że ich początkowy ruch jest drugorzędym efektem w porównaniu do działania sił wyporu [16]. Obowiązuje zatem założenie o zerowej prędkości fazy stałej w obszarze dwufazowym oraz związek (4.3) dla pozornej prędkości w tym rejonie.

Koncentracja C , rozumiana jako uśredniony udział masowy substancji rozpuszczonej w roztworze, zależy od składu fazowego. Określa ją związek (4.7). Gdy dyfuzja składnika rozpuszczonego jest zerowa (model Scheila [16]) lub skończona w fazie stałej (mikrosegregacja) wykorzystuje się wzór (4.10) ze średnią lokalną koncentracją $\bar{C}_s$.

W układach binarnych entalpia roztworu jest funkcją temperatury i koncentracji, $H = H(T, C)$. Związek taki może być wyznaczony eksperymentalnie [15] lub na podstawie analiz teoretycznych, w których wykorzystuje się założenie lokalnej równowagi termodynamicznej na granicy fazowej [6,7,8]. Zgodnie ze wzorem (3.43) i wynikającym z niego związkiem (4.6) (gdzie $\varepsilon_L \equiv r_1$)

$$\rho H = \rho((1 - f_1)H_s(T, C) + f_1 H_l(T, C)) \quad (4.47)$$

Entalpie fazowe $H_s(T, C)$ i $H_l(T, C)$ wyznaczane są z (3.44) i (3.45), gdzie wykorzystano fakt, że przyrost entalpii (parametru stanu układu) nie zależy od drogi przemiany, omijając w ten sposób przejście przez obszar dwufazowy (rozdział 3).

W obszarze tym związek między temperaturą i koncentracją kontrolowany jest przez termodynamikę faz oraz lokalne, w skali mikroskopowej, procesy transportu. Numeryczne modelowanie tych związków składa się z dwóch etapów.

W pierwszym wyznacza się węzłowe wartości temperatury, prędkości i koncentracji spełniające makroskopowe równania transportu. Są to równania zachowania pędu (4.22), z członem źródłowym, w którym uwzględniono siły wyporu (4.13), wywołane zarówno gradientami temperatury jak i stężeń, oraz równanie koncentracji składnika rozpuszczonego w roztworze.

Zastosowanie modelu przestrzennej dyskretyzacji elementami skończonymi (4.17)÷(4.19) oraz jawno-niejawnego schematu Adamsa-Bashforth-Eulera do równania energii (4.1) prowadzi do macierzowego układu nieliniowych równań algebraicznych o postaci

$$\mathbf{K}_T^d \cdot \mathbf{T}^{n+1} = \mathbf{F}_T - \left(\frac{3}{2} \mathbf{K}_H^c(\mathbf{v}^n) \cdot \mathbf{H}_l^n - \frac{1}{2} \mathbf{K}_H^c(\mathbf{v}^{n-1}) \cdot \mathbf{H}_l^{n-1} \right) + \mathbf{C}_H \cdot \frac{\mathbf{H}^n - \mathbf{H}^{n+1}}{\Delta t} \quad (4.48)$$

Nieliniowość ta wynika z faktu, że występująca po prawej stronie entalpia roztworu w nowej chwili czasowej (n+1) jest niewiadomą zależną, zgodnie z (4.47), od dwóch poszukiwanych pól temperatury i koncentracji substancji rozpuszczonej w mieszaninie. Ponadto, H zawiera w sobie efekt ciepła utajonego (patrz wzór (3.45)), który ze względu na znaczne wartości, zwłaszcza dla ciekłych metali, może prowadzić do trudności obliczeniowych – kłopotów ze zbieżnością iteracyjnej procedury rozwiązania (4.48).

Sprawdzonym sposobem uniknięcia tych problemów jest przeniesienie części tego efektu na lewą stronę równania (4.48), a więc do macierzy $\mathbf{K}_T^d$ w procesie jego linearyzacji [7,8,14,15, 34,35]. Osiąga się to przez rozwinięcie (m+1) iteracji węzłowej wartości entalpii w szereg Taylora względem poprzedniej iteracji (m). Zatem

$$(\mathbf{H}_k^{n+1})^{m+1} \equiv \mathbf{H}^{m+1} = \mathbf{H}^m + \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{T}} \right)_C (\mathbf{T}^{m+1} - \mathbf{T}^m) + \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{C}} \right)_T (\mathbf{C}^{m+1} - \mathbf{C}^m) \quad (4.49)$$

i wstawiając do (4.48) otrzymuje się

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{K}_T^d + \frac{1}{\Delta t} \mathbf{C}_H \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{T}} \right)_{C_m} \right) \cdot \mathbf{T}^{m+1} = \frac{1}{\Delta t} \mathbf{C}_H \cdot \left(\mathbf{H}^n - \mathbf{H}^m + \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{T}} \right)_{C_m} \cdot \mathbf{T}^m \right) + \\ + \frac{1}{\Delta t} \mathbf{C}_H \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{C}} \right)_{T_m} (\mathbf{C}^{m+1} - \mathbf{C}^m) + \mathbf{F}_T - \left(\frac{3}{2} \mathbf{K}_H^c(\mathbf{v}^n) \cdot \mathbf{H}^n - \frac{1}{2} \mathbf{K}_H^c(\mathbf{v}^{n-1}) \cdot \mathbf{H}^{n-1} \right) \end{aligned} \quad (4.50)$$

gdzie poszczególne macierze są funkcją własności termofizycznych, które w obszarze dwufazowym mogą zmieniać się z temperaturą i koncentracją. Dodatkowy człon w macierzy lewej strony równania (4.50) spowalnia zmianę temperatury w węzłach z przemianą fazową, stabilizując w ten sposób algorytm. Pochodne cząstkowe entalpii roztworu oblicza się wykorzystując zależność (4.47) oraz (3.44) i (3.45). Zakładając że stała jest gęstość roztworu $\rho_s = \rho_l = \rho$ otrzymuje się

$$\left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{T}} \right)_C = (\mathbf{H}_l - \mathbf{H}_s) \left(\frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{T}} \right)_C + f_1 \left(\left(\frac{\partial \mathbf{H}_l}{\partial \mathbf{T}} \right)_C - \left(\frac{\partial \mathbf{H}_s}{\partial \mathbf{T}} \right)_C \right) + \left(\frac{\partial \mathbf{H}_s}{\partial \mathbf{T}} \right)_C \quad (4.51)$$

Występujący w tym wzorze udział masowy fazy ciekłej f_l jest funkcją temperatury i koncentracji i wynika z przyjętych założeń co do równowagi termodynamicznej oraz lokalnych efektów transportu substancji rozpuszczonej, o czym mowa w dalszej części rozdziału. Różniczkowanie (3.44) i (3.45) daje pochodne cząstkowe entalpii fazowych po temperaturze i koncentracji, przy założeniu natury roztworu – np. założenie roztworu idealnego znacznie upraszcza uzyskiwane zależności. To ścisłe podejście nie jest jednak konieczne na tym etapie algorytmu obliczeniowego. Wykorzystywana bowiem w (4.49) wartość entalpii roztworu H^{m+1} jest traktowana w procesie iteracyjnym jako wstępna. Głównym zadaniem tej procedury kolejnych przybliżeń jest dopasowanie do siebie pól temperatury, koncentracji i udziału substancji rozpuszczonej [34]. Po uzyskaniu takiej zbieżności można wyznaczyć entalpię ze wzoru (4.47). Mając to na uwadze, można podobnie jak w [34], zastosować przybliżenie

$$\left. \begin{aligned} H^{m+1} &\approx H^m + \left(\frac{\Delta H}{\Delta T} \right)_r (T^{m+1} - T^m) \\ \text{gdzie: } \left(\frac{\Delta H}{\Delta T} \right)_r &= \frac{H^m - H^{m-1}}{T^m - T^{m-1}} \end{aligned} \right\} \quad (4.52)$$

gdzie wartości entalpii w dwóch poprzednich iteracjach są wynikiem zmian zarówno temperatury jak i koncentracji. Akceptując (4.52) w równaniu energii (4.50), sprowadza się je do postaci

$$\begin{aligned} &\left(\mathbf{K}_T^d(\mathbf{T}^m, \mathbf{C}^m) + \frac{1}{\Delta t} \mathbf{C}_H(\mathbf{T}^m, \mathbf{C}^m) \cdot \left(\frac{\Delta H}{\Delta T} \right)_r \right) \cdot \mathbf{T}^{m+1} = \\ &\frac{1}{\Delta t} \mathbf{C}_H(\mathbf{T}^m, \mathbf{C}^m) \cdot \left(\mathbf{H}^n - \mathbf{H}^m + \left(\frac{\Delta H}{\Delta T} \right)_r \cdot \mathbf{T}^m \right) + \\ &\mathbf{F}_T - \left(\frac{3}{2} \mathbf{K}_H^c(\mathbf{v}^n) \cdot \mathbf{H}^n - \frac{1}{2} \mathbf{K}_H^c(\mathbf{v}^{n-1}) \cdot \mathbf{H}^{n-1} \right) \end{aligned} \quad (4.53)$$

Koncentrację C składnika rozpuszczonego w roztworze oblicza się z równania jego konwekcyjno-dyfuzyjnego transportu (trzecie równanie układu (4.1))

$$\frac{\partial(\rho C)}{\partial t} + \mathbf{v}_j \frac{\partial(\rho C_l)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial C_l}{\partial x_j} \right) \quad (4.54)$$

gdzie współczynnik dyfuzji dany jest przez (4.11). Często przyjmowanym założeniem jest pomijalna dyfuzja składnika w makroskopowej skali procesu solidyfikacji [34], co prowadzi do zerowej prawej strony tego równania.

Ze względu na powolne zmiany C w czasie, całkowanie równania (4.54) można przeprowadzić w sposób jawny [34,36], co znacznie przyspiesza obliczenia. W proponowanym kodzie symulacji komputerowej zastosowano jawną metodą Adamsa-Bashfortha dla członu konwekcyjnego w połączeniu z jawną metodą Eulera dla członu dyfuzyjnego. Zastąpiono więc trzecie z równań zbioru (4.21) przez

$$\mathbf{C}_C \cdot \frac{\mathbf{C}^{n+1} - \mathbf{C}^n}{\Delta t} = \mathbf{F}_C + \mathbf{K}_C^d \cdot \mathbf{C}_l^n - \left(\frac{3}{2} \mathbf{K}_C^c(\mathbf{v}^n) \cdot \mathbf{C}_l^n - \frac{1}{2} \mathbf{K}_C^c(\mathbf{v}^{n-1}) \cdot \mathbf{C}_l^{n-1} \right) \quad (4.55)$$

Diagonalizacja macierzy $\mathbf{C}_C$, przez sumowanie jej wyrazów w wierszach [22], rozprzęga poszczególne równania w (4.55), eliminując konieczność stosowania czasochłonnego „solvera” dla układu równań algebraicznych.

Pomijając dyfuzję składnika w fazie stałej równanie (4.54) można przedstawić w alternatywnej formie [6,7,12]

$$\frac{\partial(\rho C)}{\partial t} + \mathbf{v}_j \frac{\partial(\rho C)}{\partial \mathbf{x}_j} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} \left(\rho f_1 D_1 \frac{\partial C}{\partial \mathbf{x}_j} \right) + S_c \quad (4.56)$$

$$\text{gdzie: } S_c = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} \left(\rho f_1 D_1 \frac{\partial (C_1 - C)}{\partial \mathbf{x}_j} - \rho \mathbf{v}_j (C_1 - C) \right)$$

Stosując metodę Galerkina, model przestrzennej dyskretyzacji elementami skończonymi oraz jawno-niejawną procedurę Adamsa-Bashfortha-Eulera, otrzymuje się układ nieliniowych równań algebraicznych dla węzłowych wartości koncentracji C w mieszaninie

$$\mathbf{C}_c \cdot \frac{\mathbf{C}^{n+1} - \mathbf{C}^n}{\Delta t} + \mathbf{K}_c^d \cdot \mathbf{C}^{n+1} = \tilde{\mathbf{F}}_c^{n+1} - \left(\frac{3}{2} \mathbf{K}_c^c(\mathbf{v}^n) \cdot \mathbf{C}^n - \frac{1}{2} \mathbf{K}_c^c(\mathbf{v}^{n-1}) \cdot \mathbf{C}^{n-1} \right) \quad (4.57)$$

$$\text{gdzie: } \tilde{\mathbf{F}}_c^{n+1} = \mathbf{F}_c + \mathbf{S}_c(f_1^{n+1}, C^{n+1}, C_1^{n+1})$$

Rozwiązuje się go w procesie kolejnych przybliżeń dla zlinearyzowanej wersji (4.57), w której człon źródłowy $\mathbf{S}_c$ wyznacza się z poprzedniej (znanej) iteracji (f_1^m, C^m, C_1^m) .

Po obliczeniu bieżących przybliżeń temperatury T i koncentracji C składnika w mieszaninie (z równań 4.53 i 4.55 lub 4.57) realizuje się drugi etap modelowania numerycznego, w którym, w procesie iteracyjnym, dopasowuje się wzajemnie pola temperatury, koncentracji i udziału faz, tak by spełnione były lokalne więzy narzucone przez termodynamikę faz oraz lokalne, w skali mikroskopowej, procesy transportu. Związki te zapisać można w ogólnej postaci jako [34]

$$\left. \begin{aligned} H &= F_1(T^*, f_1^*) \\ C_1^* &= F_2(\rho C, f_1^*) \\ T^* &= F_3(C_1^*) \end{aligned} \right\} \quad (4.58)$$

gdzie wielkości oznaczone przez $*$ podlegają zmianom w procesie ich iteracyjnego dopasowywania. Funkcja F_1 wyraża związek między entalpią, temperaturą i udziałem fazy ciekłej (równanie 4.47), zaś F_2 zależność C_1 od procesów transportu składnika zachodzących w skali REV (reprezentatywnej objętości elementarnej [34]).

Poprawne modelowanie dyfuzji masy substancji rozpuszczonej w fazie stałej (w dendrytach) odgrywa tu zasadniczą rolę, bowiem wartość koncentracji w cieczy międzyciekowej zależy od tego efektu. W najprostszym przypadku, gdy zakłada się nieskończoną (całkowitą) dyfuzję w ciele stałym (jednorodny rozkład koncentracji) występuje lokalna równowaga termodynamiczna [6,7,8,34,36], obowiązuje *reguła dźwigni* oraz równanie (4.8), które można zapisać w postaci:

$$C_1 = \frac{(\rho C)}{\rho(\kappa_p + f_1(1 - \kappa_p))} = \frac{C}{f_1 + (1 - f_1)\kappa_p} \quad (4.59)$$

Reguła dźwigni i równanie (4.59) pozostają w mocy dla obszaru dendrytów kolumnowych z rozproszoną mikrostrukturą [15] oraz mikrostrukturą, w której fazy są rozróżnialne a dyfuzja w tej skali jest nieskończona w obu fazach [15]. Wówczas też:

$$C_s = \frac{C \kappa_p}{f_1 + (1 - f_1)\kappa_p} \quad (4.60)$$

oraz

$$f_1 = \frac{C - C_s}{C_1 - C_s} = \frac{C - \kappa_p C_1}{C_1(1 - \kappa_p)} \quad (4.61)$$

Znając zależność temperatury od koncentracji C na linii *likwidusa* $T_L = f_{LL}(C)$ powyższy wzór przekształca się do

$$f_l = \frac{C - \kappa_p f_{LL}^{-1}(T)}{(1 - \kappa_p) f_{LL}^{-1}(T)} \quad (4.62)$$

Natomiast w modelu Scheila [16], gdzie zakłada się nieskończoną dyfuzję w płynie międzydendrytycznym oraz zerową dyfuzję składnika w dendrytach, koncentracja w dowolnym punkcie fazy stałej pozostaje równa wartości jaka była, gdy w tym miejscu formowała się faza stała. W tym mikro-modelu koncentracja substancji rozpuszczonej w ciele stałym nie jest jednorodna lecz ma swój profil, a równanie (4.8) jest zastępowane przez (4.9) [15].

Ponadto, przy założeniu lokalnej równowagi termodynamicznej na mikrogeometrii granicy ciec-ciało stałe [6,7,8,34,36], linia *likwidusa* na wykresie fazowym (rys.3.1, rys.4.27) określa związek między koncentracją w cieczy i temperaturą, tzn: $F_3(C_1) = f_{LL}(C_1)$.

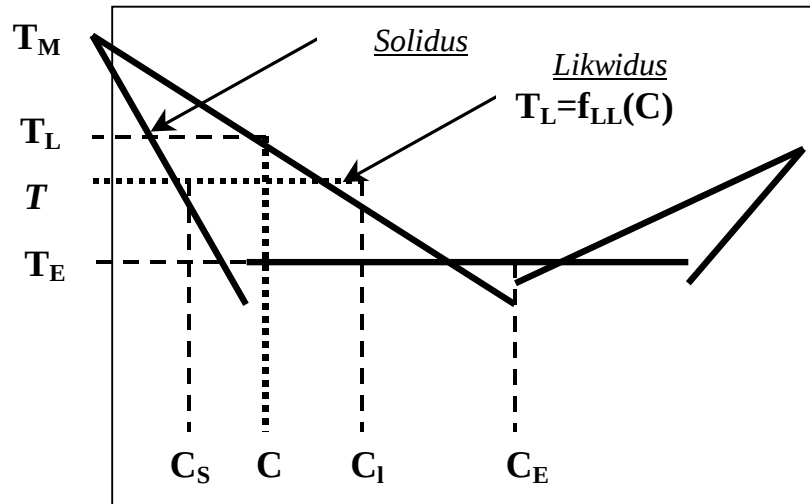
Przybliżając krzywe *solidusa* i *likwidusa* liniami prostymi (rys.4.27) powyższe związki przyjmują postacie

$$T_L = f_{LL}(C) = T_M + \frac{T_E - T_M}{C_E} C = T_M + \frac{T - T_M}{C_1} C \quad (4.63)$$

$$C_1 = \frac{T_M - T}{T_M - T_E} C_E = \frac{T_M - T}{T_M - T_L} C \quad (4.64)$$

$$f_l = \frac{C - \kappa_p C_1}{(1 - \kappa_p) C_1} = 1 - \frac{1}{1 - \kappa_p} \left(\frac{T - T_L}{T - T_M} \right) \quad (4.65)$$

T_L jest temperaturą na linii *likwidusa* dla koncentracji C w roztworze (rys.4.27). Zatem, jeśli $\kappa_p = \text{const.}$ to f_l sprowadza się do jawnej zależności tylko od temperatury, zależność od koncentracji pozostaje niejawną poprzez fakt, że $T_L = f_{LL}(C)$



Rys.4.27. Poglądowy wykres fazowy o prostych liniach *solidusa* i *likwidusa*

W ogólnym przypadku dyfuzja składnika w ramionach dendrytów jest skończona. Rzeczywistość jest, zatem, gdzieś między dwoma granicznymi przypadkami równowagowego modelu z regułą dźwigni i modelu Scheila. Konieczna jest tu dokładniejsza analiza procesów transportu w mikroskali komórki REV. Przyjmując idealne wymieszanie w fazie ciekłej

(nieskończona dyfuzja) koncentracja (ρC) w roztworze może być, zgodnie z (4.10), zapisana jako [34]

$$(\rho C) = \rho f_1 C_1 + \rho_s \int_0^{1-r_1} C_s dr \quad (4.66)$$

Różniczkując powyższy związek po czasie (z wykorzystaniem reguły Leibniza) przy założeniu, że na mikro-granicy faz obowiązuje $\kappa_p = C_s / C_1$, otrzymuje się,

$$\frac{\partial(\rho C)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(\rho f_1 C_1) + \rho_s \kappa_p C_1 \frac{\partial(1-r_1)}{\partial t} + \rho_s \int_0^{1-r_1} \frac{\partial C_s}{\partial t} dr \quad (4.67)$$

Ostatni człon (4.67) wyraża intensywność dyfuzji substancji rozpuszczonej w fazie stałej (określanej często mianem „back diffusion”) – kluczową wielkość modelowania procesów transportu w skali lokalnej. Najczęściej stosuje się tu jeden z dwóch następujących opisów intensywności przenoszenia dyfuzyjnego w ciele stałym [34]. W pierwszym zakłada się, że

$$\rho_s \int_0^{1-r_1} \frac{\partial C_s}{\partial t} dr = \beta \rho_s (1-r_1) \frac{\partial(\kappa_p C_1)}{\partial t} = \beta \rho (1-f_1) \frac{\partial(\kappa_p C_1)}{\partial t} \quad (4.68)$$

gdzie parametr $0 \leq \beta \leq 1$. Dla $\beta = 0$ otrzymuje się model Scheila (brak dyfuzji), zaś dla $\beta = 1$ dyfuzja masy przebiega nieskończenie szybko (jednorodny rozkład koncentracji w fazie stałej).

Podstawienie (4.68) do (4.67) prowadzi do

$$\frac{\partial(\rho C)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(\rho_1 r_1 C_1 + \beta \rho_s (1-r_1) \kappa_p C_1) - (1-\beta) \rho_s \kappa_p C_1 \frac{\partial r_1}{\partial t} \quad (4.69)$$

Stosując różnicowe przybliżenie pochodnych czasowych (4.69) sprowadza się do

$$\frac{(\rho C) - (\rho C)^n}{\Delta t} = \frac{\rho_1 (r_1 C_1 - (r_1 C_1)^n)}{\Delta t} + \beta \rho_s \frac{(1-r_1) \kappa_p C_1 - (1-r_1)^n \kappa_p (C_1)^n}{\Delta t} - (1-\beta) \rho_s \kappa_p C_1 \frac{r_1 - (r_1)^n}{\Delta t}$$

skąd wyznacza się

$$C_1 = \frac{(\rho C) - (\rho C)^n + [\rho_1 (r_1)^n + \beta \rho_s \kappa_p (1 - (r_1)^n)] (C_1)^n}{\rho_1 r_1 + \beta \rho_s (1-r_1) \kappa_p + (1-\beta) \rho_s \kappa_p (r_1 - (r_1)^n)} \quad (4.70)$$

gdzie $()^n$ oznacza znane wartości w poprzedniej chwili czasu. Uwzględniając związki (4.4) i (4.5) równanie (4.70) można też zapisać jako

$$C_1 = \frac{(C) - (C)^n + [(f_1)^n + \beta \kappa_p (1 - (f_1)^n)] (C_1)^n}{f_1 + \beta (1-f_1) \kappa_p + (1-\beta) \kappa_p (f_1 - (f_1)^n)} \quad (4.71)$$

Jeśli $\beta = 2\alpha(1 - e^{-1/\alpha}) - e^{-1/2\alpha}$, gdzie α dyfuzyjna liczba Fouriera dla REV [36], otrzymuje się ulepszony model dyfuzji Brody’ego i Flemingsa [34,36].

Inny opis całki we wzorze (4.67) zaproponowali Wang i Beckermann [34] przyjmując

$$\rho_s \int_0^{1-r_1} \frac{\partial C_s}{\partial t} dr = \rho_s \gamma (\kappa_p C_1 - \tilde{C}_s) \quad (4.72)$$

gdzie parametr γ zależny jest od morfologii REV i współczynnika dyfuzji masy w fazie stałej, zaś $\tilde{C}_s$ jest objętościowo uśrednioną koncentracją w fazie stałej [34]. Wstawiając tę zależność do (4.67) i przybliżając różnicowo pochodne czasowe otrzymuje się

$$C_1 = \frac{\left(1 + \frac{\gamma \Delta t}{1 - r_1}\right) (\rho C) - (\rho C)^n + \rho_1 (r_1)^n (C_1)^n}{\rho_1 r_1 + \rho_s (1 - r_1) \kappa_p + \frac{\gamma \Delta t}{1 - r_1} (\rho_s \kappa_p (1 - r_1) + \rho_1 r_1)} \quad (4.73)$$

Wzory (4.70) lub (4.73), którym można nadać wspólną ogólniejszą formę ([34])

$$C_1 = F((\rho C), r_1, (\rho C)^n, (r_1)^n) \quad (4.74)$$

zastępują (4.59) lub (4.64) w przypadkach, gdy dyfuzja masy w fazie stałej ma skończoną prędkość.

Algorytmy obliczeniowe

Sprzężony układ równań (4.1), wraz z dodatkowymi zależnościami pomiędzy polami entalpii, temperatury i koncentracji (zapisanymi ogólnie w formie (4.58), a szczegółowo przez (4.47), (4.59), (4.62) lub (4.63)÷(4.65), (4.70) lub (4.73)) rozwiązano sekwencyjnie z zastosowaniem metody rzutu, jawno-niejawnej metody całkowania w czasie oraz procedury iteracyjnego dopasowywania wspomnianych wielkości polowych w każdym kolejnym kroku czasowym. W poszukiwaniu najlepszych rozwiązań w sensie efektywności obliczeniowej (mierzonej czasem pracy i wielkością wymaganego pola pamięci maszyny cyfrowej) zaproponowano i poddano testowaniu dwa różne, wybierane opcjonalnie, algorytmy. W pierwszym wykorzystuje się równania MES dla makroskopowego bilansu koncentracji składnika w formie (4.57), w drugim zaś ich jawną postać (4.55).

Algorytm A.

Dla znanych w poprzedniej chwili czasowej t_n węzłowych wartości pól składowych prędkości v_i^n , temperatury T^n i koncentracji substancji rozpuszczonej w roztworze C^n oraz, wynikających ze związków (4.58), wartości entalpii mieszaniny $(\rho H)^n$, koncentracji w fazie ciekłej C_1^n i udziału masowego f_1^n przeprowadza się obliczenia dla czasu $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ w następującej kolejności:

1. Oblicza się nowe pole prędkości v_i^{n+1} z równań ciągłości i zachowania pędu. Wykorzystuje się tu procedurę rozłączenia pól prędkości i ciśnienia przez zastosowanie metody rzutu (4.22), linearyzację równań Navier-Stokesa przez całkowanie ich członów konwekcyjnych jawną techniką Adamsa Bashfortha (drugie z równań (4.21)) oraz niezależne, sekwencyjne rozwiązywanie równań dla każdej składowej pędu (tj. najpierw dla $i=1$, potem dla $i=2$).
2. Przyjmuje się wartości z poprzedniej chwili czasowej jako pierwsze przybliżenie $m=0$ dla nowego czasu, tj.:

$$(T^{n+1})^0 = T^n; (C^{n+1})^0 = C^n; (C_1^{n+1})^0 = C_1^n; (f_1^{n+1})^0 = f_1^n; (H^{n+1})^0 = H^n$$

3. Pole prędkości v_i^{n+1} oraz znane H^n i $(H^{n+1})^m$ wstawia się do równania energii, które całkowane jawno-niejawnym schematem Adamsa-Bashforth-Eulera (4.53) daje nowe przybliżenie pola temperatury $(T^{n+1})^*$.
4. Rozwiązuje się następnie równanie (4.57), ze zlinearyzowanym członem źródłowym o postaci: $S_c((f_1^{n+1})^m, (C^{n+1})^m, (C_1^{n+1})^m)$, otrzymując nowe przybliżenie koncentracji $(C^{n+1})^{m+1}$ składnika w roztworze.

5. Ze wzoru (4.49) oraz związków (3.44) i (3.45) oblicza się kolejną iterację entalpii $(H^{n+1})^{m+1}$ dla $(T^{n+1})^*$ i $(C^{n+1})^{m+1}$

$$(H^{n+1})^{m+1} = F((H^{n+1})^m, (T^{n+1})^{m+1}, (T^{n+1})^m, (C^{n+1})^{m+1}, (C^{n+1})^m)$$

a następnie z (4.47) nowe przybliżenie $(f_1^{n+1})^{m+1}$. Korzystając z (4.5) znajduje się $(r_1^{n+1})^{m+1}$.

6. Z (4.59) lub (4.70) lub (4.73) oblicza się koncentrację składnika w cieczy $(C_l^{n+1})^{m+1}$.

7. Następnie poprawia się przybliżenie temperatury $(T^{n+1})^*$, zgodnie z (4.58), tzn.:

$$(T^{n+1})^{m+1} = \begin{cases} f_{LL}((C_l^{n+1})^{m+1}) & \text{gdy } 0 < (f_1^{n+1})^m < 1 \\ (T^{n+1})^* & \text{gdy } (f_1^{n+1})^m = 0 \text{ lub } (f_1^{n+1})^m = 1 \end{cases}$$

8. Dla tak obliczonych nowych przybliżeń pól temperatury, koncentracji i udziału składnika w fazie ciekłej aktualizuje się dane termofizyczne i współczynniki równań. Następnie powtarza się kroki od 3 do 7 (zwiększając licznik iteracji m) tak długo aż $\|(f_1^{n+1})^{m+1} - (f_1^{n+1})^m\| < \varepsilon$, gdzie ε - zadana dokładność.

Algorytm B

W tej procedurze obliczeniowej równanie zachowania masy składnika rozpuszczonego ma jawną formę (4.55), której prawa strona określona jest przez znane wielkości dla poprzedniej chwili czasowej. Dlatego równanie to jest rozwiązywane tylko raz w kroku czasowym. Koncentracja składnika rozpuszczonego w roztworze C^{n+1} nie podlega więc iteracyjnemu poprawianiu w cyklu kolejnych przybliżeń. Zatem:

1. Pierwszy krok taki jak w algorytmie A.
2. Rozwiązuje się równanie (4.55) obliczając C^{n+1}
3. Krok jak w algorytmie A
4. Ze wzoru (4.49) (przy zerowym trzecim członie jego prawej strony) oraz związków (3.44) i (3.45) oblicza się kolejną iterację entalpii $(H^{n+1})^{m+1}$ dla $(T^{n+1})^*$ i C^{n+1}

$$(H^{n+1})^{m+1} = F((H^{n+1})^m, (T^{n+1})^{m+1}, (T^{n+1})^m, C^{n+1})$$

a następnie z (4.47) nowe przybliżenie $(f_1^{n+1})^{m+1}$. Korzystając z (4.5) znajduje się $(r_1^{n+1})^{m+1}$.

5. Pozostałe etapy cyklu jak w algorytmie A.

Obie procedury obliczeniowe i przyjęte modele są obecnie przedmiotem intensywnych badań. Szczególne kłopoty związane są ze stabilnością iteracyjnego dopasowania pól temperatury, koncentracji i udziału składnika w fazie ciekłej. Jednoznaczne zależności analityczne, gdy zastosowane bezpośrednio w algorytmie obliczeniowym, prowadzą do rozbieżności, zwłaszcza dla stopów metali o dużych wartościach ciepła przemiany fazowej [7,8,34].

5. Wnioski końcowe, kierunki dalszych prac

Przedmiotem zaprezentowanych badań doświadczalnych i analiz teoretycznych były złożone mechanizmy wymiany ciepła w procesie solidyfikacji wybranych substancji jedno- i dwuskładnikowych. Celem tych studiów było poszerzenie wiedzy o fizyce zjawisk oraz rozwój metod eksperymentalnych, modeli teoretycznych i symulacji komputerowej, pozwalających na precyzyjne oceny ilościowe analizowanych procesów, istotne w praktycznym wykorzystaniu tych zjawisk (odlewanie stopów metali, jednostki magazynowania energii, etc.).

Wynikiem prac nad rozwojem technik eksperymentalnych jest opracowanie i adaptacja metody jednoczesnego pomiaru pól prędkości i temperatury (Particle Image Velocimetry & Thermometry) oraz pomiaru koncentracji soli, poprzez korelacje optycznej metody Schlierena z pomiarami punktowymi przewodnictwa elektrycznego. Ich wykorzystanie w badaniach konwekcji swobodnej zamarzającej wody i wodnego roztworu chlorku sodu (jako przykładu substancji binarnej), w różnych konfiguracjach termicznych warunków brzegowych, pozwoliły na głębsze poznanie fizyki zjawiska, ocenę dokładności metod eksperymentalnych i technik przetwarzania obrazu oraz określenie warunków poprawnej realizacji eksperymentu.

Opracowane tu metody badawcze mogą być stosowane do analizy zjawisk cieplnych i przepływowych w skali laboratoryjnej jak również w skali przemysłowej, jeśli możliwy jest dostęp optyczny do badanego ośrodka.

Ponadto, zastosowane techniki rejestracji lokalnych pól temperatury i prędkości przy wykorzystaniu zawiesziny ciekłych kryształów dostarczają precyzyjnych danych, które, przez porównanie z wynikami obliczeń, mogą być wykorzystane do weryfikacji kodów symulacji komputerowej zjawisk transportu ciepła z przemianą fazową ciecz-ciało stałe. Dotyczy to w szczególności modeli obliczeniowych procesów solidyfikacji metali (odlewnictwo), wyciągania kryształów półprzewodnikowych (metody Bridgmana i Czochralskiego) czy modelowania zjawisk powstawania i topienia lodu w zbiornikach wodnych (elementy modeli prognozowania pogody).

Wynikiem prac nad rozwojem modeli teoretycznych i modeli symulacji komputerowej procesów solidyfikacji układów jedno- i dwuskładnikowych z konwekcją jest opracowanie nowej metody opisu złożonych procesów transportu ciepła i masy w obszarze dwufazowym („mushy zone”) oraz stworzenie kodów obliczeniowych, opartych na metodzie elementów skończonych, do ilościowej analizy tych zjawisk. Zaproponowano więc wykorzystanie statystycznych uśrednień wielkości polowych po zbiorze dopuszczalnych konfiguracji (ensemble averaging) do opisu niejednorodnego (poziom mikroskopowy) obszaru dwufazowego zastępczym ośrodkiem ciągłym o efektywnych właściwościach (poziom makroskopowy). W przeprowadzonych rozważaniach wykazano, że forma związków konstytutywnych wiążących wielkości makroskopowe nie musi być postulowana, ale może być wyprowadzona z odpowiednich związków dla wielkości mikroskopowych, niezależnie od założenia dotyczącego skal długości wpływających na rozpatrywane procesy. Ten nowy opis zjawisk transportu w obszarze dwufazowym wprowadzono do opracowanych programów MES, które zbudowano wykorzystując algorytmy sekwencyjnego i iteracyjnego rozwiązywania układu nieliniowych sprzężonych równań ruchu, energii i koncentracji składnika.

Tak utworzone narzędzie obliczeniowe może być wykorzystane w komputerowej symulacji procesów sprzężonej wymiany ciepła (przewodzenia i konwekcji połączonych z solidyfikacją lub topnieniem) w geometrycznie złożonych dwuwymiarowych obszarach.

Przeprowadzone badania konwekcji naturalnej wody z przemianą fazową w kanale prostopadłościennym wskazały na istnienie złożonych struktur przepływu. Spowodowane to jest

istnieniem anomalii gęstości wody w pobliżu temperatury przemiany fazowej. Skomplikowany charakter przepływu stanowi interesujące wyzwanie dla metod numerycznych, pozwalając na przetestowanie zachowania się algorytmów modelujących przemianę fazową w obecności silnych gradientów prędkości i temperatury. Z drugiej strony zaobserwowana eksperymentalnie „wrażliwość” struktur przepływu na zmiany termicznych warunków brzegowych stawia wysokie wymagania eksperymentowi. Dokładne określenie własności fizycznych materiałów, precyzyjny pomiar warunków termicznych, zarówno w obszarze badanej konwekcji jak i w otaczającym badaną domenę ośrodku, jest istotnym warunkiem dla zdefiniowania wzorców eksperymentalnych (benchmarks).

Osobnym zagadnieniem jest problem przechłodzenia wody, obserwowany w większości eksperymentów. Zjawisko przechłodzenia występuje w większości przemian fazowych, i jego uwzględnienie w obliczeniach numerycznych byłoby z pewnością pożądane. Jednak obecny stan wiedzy i metody diagnostyczne nie pozwalają na precyzyjne określenie charakterystyki początkowej substancji (koncentracji i wielkości zarodków przemiany). Bez takiej wiedzy modele termofizyczne charakteryzują się, w zależności od przyjętych założeń, rozwiązaniami różniącymi się o kilka rzędów wielkości. Wydaje się, że w takiej sytuacji konieczne jest opracowanie metody eksperymentalnej pozwalającej na minimalizację stopnia przechłodzenia (np. przy pomocy pola akustycznego czy elektrycznego inicjującego generację dużej liczby zarodków przemiany fazowej).

Przeprowadzone w ramach projektu badania potwierdziły też słusność wyboru metod pomiarowych i materiałów użytych do badań wzorcowych. Mimo komplikacji spowodowanych anomalią gęstości, wydaje się, że woda, jako jedna z najlepiej przebadanych substancji, stanowi dobry materiał dla weryfikacji kodów numerycznych. Zastosowana metoda rejestracji całych pól temperatury i prędkości przy wykorzystaniu zawiesziny ciekłych kryształów nie ma zasadniczo alternatywy dla przepływów o tak skomplikowanej strukturze. Jednak ograniczona dokładność tych metod, w szczególności metody pomiaru temperatury, wymaga dodatkowej weryfikacji wyników metodami klasycznymi. Zastosowana w pracy technika termografii podczerwonej do monitorowania zewnętrznych warunków termicznych wydaje się być bardzo obiecującym uzupełnieniem pozostałych metod pomiarowych. Jak pokazały obecne badania precyzyjne określenie rozkładów temperatur dla zewnętrznych płaszczyzn ścian ograniczających przepływ pozwala w prosty sposób zweryfikować słusność założeń w modelu numerycznym termicznych warunków brzegowych.

Osobnym zagadnieniem jest problem weryfikacji modeli opisujących zjawiska przemiany fazowej dla konwekcji naturalnej w układach binarnych. Opracowane metody eksperymentalne pozwalają w chwili obecnej na pomiar pól prędkości i temperatury. Rozkład koncentracji mógł być jedynie określony jakościowo przy zastosowaniu metody Schlierena. Punktowe pomiary przewodnictwa elektrycznego roztworu dostarczają stosunkowo dokładnych danych ilościowych o lokalnej koncentracji soli. Jednak kilka punktów pomiarowych to ilość niewystarczająca dla pełnego zrozumienia obserwowanych rozkładów. Zwiększenie gęstości pomiarów przy pomocy dodatkowych sond nie jest możliwe bez zakłócenia całego przepływu. Konieczne wydaje się, rozszerzenie metodyki pomiarów przewodności elektrolitu na analizę tomograficzną. W takim wypadku, pomiary przeprowadzone przy pomocy kilkunastu elektrod rozmieszczonych w ściankach naczynia pozwolą na przestrzenną rekonstrukcję rozkładów koncentracji w całej komorze pomiarowej, nie zakłócając przepływu.

Badania te służyć mają nie tylko głębszemu poznaniu fizyki procesów przemian fazowych w układach wieloskładnikowych, ale także zgromadzeniu precyzyjnych danych o lokalnych polach temperatur, prędkości i stężeń w celu stworzenia wzorca eksperymentalnego do oceny kodów symulacji komputerowej tych zjawisk. Proponowany, jako efekt dotychczas zrealizowanych

badan, eksperymentalny „benchmark” oparty na wynikach pomiarów procesu krzepnięcia wody może być wzorcem jedynie dla symulacji zjawiska konwekcji naturalnej z przemianą fazową ciec-ciało stałe w układach jednoskładnikowych. Dla substancji binarnych, gdzie przebieg procesu solidyfikacji silnie zależy od różnicy stężeń składników w cieczy i fazie stałej, od zjawisk makro- i mikro-segregacji, konieczne jest stworzenie nowego „benchmarku”. Konieczność kontynuowania prac nad znalezieniem takiego wzorca wynika przede wszystkim z praktycznej potrzeby. Szybka i tania symulacja komputerowa procesów krzepnięcia stopów metali stopniowo wypiera drogie, czasochłonne i trudne badania techniką „trial and error” od lat przeprowadzane w laboratoriach odlewniczych. Obliczenia numeryczne wymagają jednak najpierw uwiarygodnienia, pokazania jak dokładnie przybliżają rzeczywistość. Nie jest możliwe opracowanie tu wzorca dla stopu dwóch metali, zarówno ze względu na warunki w jakich przebiega proces ich solidyfikacji (wysokie temperatury) jak i wykorzystywane techniki pomiarowe (ciepłe kruszaki). Można jednakże przeprowadzić precyzyjne badania doświadczalne dla wodnego roztworu chlorku sodu, a jeszcze lepiej dla wodnych roztworów chlorku amonu, które krzepną podobnie jak stopy metali tworząc obszar dendrytów rozdzielający fazę stałą i ciekłą. Taki wzorzec jest bardzo potrzebny i w tym kierunku powinny być kontynuowane prace eksperymentalne.

W dalszych badaniach dotyczących formułowania równań opisujących makroskopowe procesy transportu w obszarze dwufazowym należy dążyć do oszacowania wpływu takich zjawisk, jak dyspersja, wzajemne oddziaływanie akumulacji energii i źródeł ciepła związanych z przemianą fazową, na procesy makroskopowego transportu energii i składników w obszarze dwufazowym. Inne człony równań makroskopowych dotyczące wpływu źródeł ciepła na intensywność transportu energii czy efektu Dufoura powinny być również dokładniej przebadane. Model makroskopowego opisu procesów transportu w obszarze dwufazowym może być także wykorzystany do analizy wpływu lokalnej nierównowagi termodynamicznej faz na proces krzepnięcia poprzez rozważenie dalszych członów w rozwinięciach, omówionych w rozdziałach poświęconych równowadze fazowej i termicznej.

Znaczna część przedstawionych badań dotyczyła modelowania dyskretnego złożonych problemów ruchu płynu nieściśliwego i wymiany ciepła w procesach krzepnięcia i topnienia. Ich zasadniczym celem naukowym był rozwój współczesnych technik numerycznych i algorytmów obliczeniowych, głównie metody elementów skończonych, która w rozważanych problemach teorii pola wciąż pozostaje techniką o nie do końca poznanych możliwościach. Po raz pierwszy zaproponowano użycie efektywnych algorytmów obliczeniowych MES, opartych na technikach rozdziału w czasie, do analizy konwekcji ze zmianą fazy w układach jednoskładnikowych i binarnych. Opracowane algorytmy i programy mogą być wykorzystane w analizie ilościowej, wspomagając badania eksperymentalne służące poznaniu złożonych procesów transportu i zmiany fazy. Mogą też być użyte jako najtańsze i najszybsze źródło informacji o tych procesach w przypadkach, gdy badania doświadczalne są czasochłonne, żmudne lub wręcz niemożliwe (np. w solidyfikacji stopów metali w wysokich temperaturach) lub w praktycznych problemach inżynierskich, w krzywoliniowych dwuwymiarowych geometriach.

Przedstawione modele symulacji komputerowej i ich algorytmy obliczeniowe wymagają dalszych prac. Dotyczy to szczególnie poszukiwania efektywnych, łatwo zbieżnych, iteracyjnych technik dopasowania pól temperatury, koncentracji i udziału składnika w fazie ciekłej, zgodnie z termodynamiką lokalnych zjawisk na granicy fazowej oraz makroskopowych równań zachowania, a także rozszerzenia modeli płynu i jego ruchu (ściślność, turbulencja). Ważne jest też, głównie z praktycznego punktu widzenia, rozbudowanie opracowanego oprogramowania na trójwymiarowe geometrie, co wymaga weryfikacji algorytmów obliczeniowych pod kątem ich efektywności (dobór procedur rozprężenia, linearyzacji, rozwiązania układu równań algebraicznych).

6. Literatura

6.1 Literatura do rozdziału 2

1. Banaszek J., Jaluria Y., Kowalewski T.A., Rebow M.; *Semi-implicit FEM analysis of natural convection in freezing water*, Num. Heat Transfer Part A, vol. **36**, pp.449-472, 1999.
2. Banaszek J., Kowalewski T.A., Rebow M., Blogowska K., *Analysis of validation of the semi-implicit FEM algorithm for natural convection and freezing water*, ASME PVP-Vol. **377-1**, pp.119-126, 1998.
3. Banaszek J., Rebow M., Kowalewski T.A., *Fixed grid finite element analysis of solidification*, in Advances in Computational Heat Transfer, G. de Vahl Davis, E. Leonardi (eds), Begel House Inc., pp. 471-478, New York 1998
4. Blogowska K. Cybulski A., Kowalewski T.A.; *Pomiar stężenia soli dla konwekcji swobodnej zamarzającego roztworu NaCl*, XVII Zjazd Termodynamików, Zakopane 1999, Tom **1**, p.1-6
5. Carlomagno G.M. Infrared thermography and convective heat transfer. *Experimental Heat Transfer, Fluid Mech. & Thermodyn. Brussel*, Vol. **1**, pp.29-41, 1997.
6. Furmański P., *Non-local Modelling of Solid-Fluid Coupling During Laminar Fluid Flow*, Proceedings of ESF –AMIF International Conference, Barcelona, 1998.
7. Gangi G., Kowalewski T.A., Stella F., Leonardi E.; *Natural Convection During Ice Formation: Numerical Simulation vs. Experimental Results*, CAMES vol. **7**, pp.321-342, 2000.
8. Gangi M., Stella F., Kowalewski T.A.; *Phase-change problems with free convection: fixed grid simulation*; Comp. & Visual. in Scs. **2**, pp. 123-130, 1999.
9. Hamai, Bull. Chem. Soc. Japan. **8** 297-300, 1933
10. Kell G.S., Volume properties of ordinary water, Journal of Chemical and Engineering Data, **12**, 67-68, 1967
11. Kohlrausch F., u. Heidweiler A., Wied. Ann. **53** (1894) und Z. phys. Chem. **14** , 1894
12. Kowalewski T.A.; *Particle Image Velocimetry and Thermometry Using Liquid Crystals*, invited paper, FLUVISU 99, 8me colloque nationale de visualisation et de traitement d' images en mecanique des fluides, Toulouse, June 1-4, 1999, ENSICA, pp. 33-48, Image Service, 1999.
13. Kowalewski T.A.; *Measurement of Temperature and Velocity of Freezing Water using Liquid Crystal Tracers* in Advances in Cold-Region Thermal Engineering and Sciences, eds. K. Hutter, Y. Wang and H. Beer, Lecture Notes in Physics vol. **533**, pp. 83-90, Springer Verlag, Berlin 1999.
14. Kowalewski T.A., *Image processing in quantitative evaluation of two-phase flow problems*, in Euromech 406, Prace IPPT **4/1999**, pp.115-118, 1999.
15. Kowalewski T.A., Banaszek J., Rebow M., Furmański P., Wiśniewski T.S., *Study of free convection in binary systems with phase change*, Heat Transfer 1998, Kyongju, Korea, ed. by. J.S. Lee, vol. **7**, pp. 211-216, Taylor and Francis Inc., 1998.
16. Kowalewski T.A., Blogowska K., Rebow M., Banaszek J., *Badanie przepływów z konwekcją swobodną w ośrodkach jednorodnych i binarnych*. Symposium Wymiany Ciepła i Masy, Świeradów 1998, Prace Polit. Wrocław. **53/9**, vol. **1**, pp.425-432, Wrocław 1998.
17. Kowalewski T.A., Cybulski A., *Konwekcja naturalna z przemianą fazową*, Prace IPPT **8/1997**, IPPT PAN Warszawa 1997
18. Kowalewski T.A., Cybulski A.; *Particle Image Velocimetry and Thermometry in Freezing Water*, frontispiece (colour page) in J. of Visualization, vol. **1**, pp.335 , 1999.

19. Kowalewski T.A., Cybulski A, Rebow M., *Experimental Validation of Temperature and Velocity Fields for the Freezing Water*, ESF-AMIF PCC99 Workshop, Prace IPPT 5/1999, pp. 109-114, 1999.
20. Kowalewski T.A., Cybulski A., Rebow M., *Particle Image Velocimetry and Thermometry in Freezing Water*, w 8th Int. Symposium on Flow Visualization, Sorrento, eds. G.M. Carlomagno and I. Grant, CD ROM Proceedings ISBN 0953399109 , pp. 24.1-24.8, Edinburgh, 1998
21. Kowalewski T.A., de Vahl Davis G., Leonardi E., *Free surface natural convection in a differentially heated rectangular cavity*, in Advanced Computational Methods in Heat Transfer V, A.J. Nowak, C.A. Brebbia, R. Bialecki, M. Zerroukat (eds.), pp. 145-154, CMP 1998.
22. Kowalewski T.A., Rebow M., *An experimental benchmark for freezing water in the cubic cavity*, Advances in Computational Heat Transfer, G. de Vahl Davis, E. Leonardi (eds), Begel House Inc., pp.149-156, New York 1998.
23. Kowalewski T.A., Rebow M.; *Freezing of water in the differentially heated cubic cavity*; Int. J. of Comp. Fluid Dynamics; vol. **11**; no. 3-4, 1999.
24. Kowalewski T.A., Stasiek J., *Thermochromic liquid crystals in heat transfer research*, invited paper Heat Mass Transfer Conference, Swieradów, Sept. 1998, Prace Polit. Wrocław. 53/9, vol. **1**, pp. 401-424, Wrocław 1998.
25. Leonardi E., Kowalewski T.A., Timchenko V., de Vahl Davis G; *Effect of finite wall conductivity on flow structures in natural convection paper* at CHMT99, Proceedings of the International Conference on Computational Heat and Mass Transfer, Cyprus 26-29 April, 1999, eds. A.A. Mohamad & I. Sezai, pp. 182-188, Eastern Mediterranean University Printinghouse 1999.
26. Marton L., Marton C., *Methods of Experimental Physics: Editors-in-Chief vol. 18 Fluids Dynamics* Edited by R.J.Emrich , Part A, Academic Press 1981
27. Quénot G. , Pakleza J., Kowalewski T. A., *Particle Image Velocimetry with Optical Flow*, Experiments in Fluids **25**, 177-189, 1998
28. Stella F., Giangi M., Kowalewski T.A.; *Natural Convection During Ice Formation: Numerical Simulation vs. Experimental Results*, ESF-AMIF PCC99 Workshop, Prace IPPT 5/1999, pp.141-146, 1999.
29. Wettlaufer J.S., M. Grae Worster, H.E. Huppert , *Natural convection during solidification of an alloy from above with application to the evolution of sea ice*, J. Fluid Mechanics, vol. **344**, pp.291-316, 1997.
30. Wisniewski T., T.A. Kowalewski, M. Rebow, *Infrared and Liquid Crystal Thermography in Natural Convection*, w 8th Int. Symposium on Flow Visualization, Sorrento, eds. G.M. Carlomagno and I. Grant, CD ROM Proceedings ISBN 0953399109, pp. 212.1-212.8, Edinburgh, 1998.
31. Wiśniewski T.S., Kowalewski T.A., Rebow M., *Application of Infrared Thermography in Natural Convection study*. Accepted for oral presentation at QIRT' '2000-Quantitative Infrared Thermography V, Eurotherm Seminar, No 64, July 18-21, 2000, Universite de Reims, Champagne-Ardenne, France.
32. Wright K.A., Abbott A.D., Livertz V., Tartar H.V., J. Amer. Chem. Soc. **61**, 549, 1939.

6.2 Literatura do rozdziału 3

1. Beckermann C., Viskanta R.. *Mathematical modeling of transport phenomena during alloy solidification*. *Appl. Mech. Rev.*, **46**:1-27, 1993.

2. Bennon W.D., Incropera F.P.. A Continuum Model for Momentum, Heat and Species Transport in Binary Solid-Liquid Phase Change Systems - I and - II. *Int. J Heat & Mass Transfer*, **30**, 2161-2187, 1987.
3. Batchelor G.K.. Transport Properties of Two-Phase Materials with Random Structure. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **6**, 227-255, 1974.
4. Beran M.J., McCoy J.J.. Mean Field Variation in Random Media. *Quarterly of Applied Mathematics*, 245-258, 1970.
5. Buyevich Yu. A.. Heat and Mass Transfer in Disperse Media. I. Averaged Field Equations. *Int. J. Heat & Mass Transfer*, **35**, 2445-2452, 1992.
6. Furmański P., A Mixture Theory for Heat Conduction in Heterogeneous Media. *Int. J. Heat & Mass Transfer*, **37**, 2993-3002, 1994.
7. Furmański P., Influence of Laminar Convection of Fluid on Effective Thermal Conductivity of Some Porous Media. *Advances in Engineering Heat Transfer. Computational Mechanics Publications*, 513-524, Southampton, 1995.
8. Furmański P., Heat conduction in composites. Homogenization and macroscopic behavior. *Appl. Mech. Rev.*, **50**, 327-356, 1997.
9. Furmański P., Thermal Properties and Local Heat Sources in Composite Materials. *Thermal Conductivity*, **24**, 581-594, 1999.
10. Ganesan S., Chan C.L., Poirier D.R.. Permeability for Flow Parallel to Primary Dendrite Arms. *Mater. Sci. and Eng.*, **A151**, 97-105, 1992.
11. Herczynski R., Pienkowska I.. Toward a Statistical Theory of Suspensions. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **12**, 237-269, 1980.
12. Hills R.N., Loper D.E., Roberts P.H.. On Continuum Models for Momentum, Heat and Species Transport in Solid-Liquid Phase Change Systems. *Int. Comm. Heat & Mass Transfer*, **19**, 585-594, 1992.
13. Hinch E.J.. An Averaged-Equation Approach to Particle Interactions in a Fluid Suspension. *J. Fluid Mech.*, **83**, 695-720, 1977.
14. Koch D.L., Brady J.F.. A Non-local Description of Advection-Diffusion with Application to Dispersion in Porous Media. *J. Fluid Mech.*, 1980, 387-403, 1987.
15. Kunin I.A.. On Foundations of the Theory of Elastic Media with Microstructure. *Int. J. Engng Sci.*, Vol.22, 969-978, 1984.
16. Naterer G.F., Schneider G.E.. Phases model for binary-constituent solid-liquid phase transition. Part 1: Numerical method. *Numerical Heat Transfer, Part B*, **28**, 111-126, 1995.
17. Poirier D.R., Nandapurkar P.J., Ganesan S.. The Energy and Solute Conservation Equations for Dendritic Solidification. *Metall. Trans.*, **22B**, 889-900, 1991.
18. Quintard M., Whitaker S.. One and Two Equations Models for Transient Diffusion Processes in Two Phase Systems. *Advances in Heat Transfer*, **23**, 369-464, 1993.
19. Rappaz M., Voller V.R.. Modeling of Micro-Macrosegregation in Solidification Processes. *Metall. Trans.*, **21A**, 749-753, 1990.
20. Somoroff A.. A Variational Approach to Statistically Nonhomogeneous Fields. *Quarterly of Applied Mathematics*, 219-236, 1970.
21. Swaminathan C.R., Voller V.R.. General Enthalpy Method for Modeling Solidification Processes. *Metall. Trans.*, **23B**, 651-65, 1992.
22. Tozeren A., Skalak R.. Stress in a Suspension Near Rigid Boundaries. *J. Fluid Mech.*, **82**, 289-307, 1977.
23. Voller V.R., Brent A.D.. The modeling of heat, mass and solute transport in solidification systems. *Int. J. Heat & Mass Transfer*, **32**, 1719-1731, 1989.
24. Timchenko V., Chen P.Y.P., de Vahl Davies G., E. Leonardi. Directional solidification in microgravity. *Proceedings of 11th IHTC*, **7**, 241-246, August 23-28, Kyongju, Korea, 1998.

25. Furmański P., Non-local Modelling of Solid-Fluid Coupling During Laminar Fluid Flow, *Proceedings of ESF –AMIF International Conference*, Barcelona, 1998.
26. Furmański P., Nonlocal Modeling of Thermal Dispersion for Forced Fluid Flow Through a Porous Medium. *J. of Comp. and Visualization Science*, **3**, 13-17, 2000.
27. Furmański P., Modeling of Transport Phenomena During Solidification of Binary Systems. *Computer Assisted Mech. and Eng. Sciences*, **7**, 391-402, 2000.

6.3 Literatura do rozdziału 4

1. Chorin J. Numerical Solution of Navier-Stokes Equations. *Math. Comp.*, **22**: 745-762, 1968.
2. Gresho P.M. On the Theory of Semi-Implicit Projection Methods for Viscous Incompressible Flow and Its Implementation via a Finite Element Method That Also Introduces a Nearly Consistent Mass Matrix. Part 1: Theory. *Numerical Heat Transfer, Part A*, **29**: 49-63, 1996.
3. Marchuk G.I., *Methods of Numerical Mathematics*. Springer Verlag, Berlin, 1975.
4. Ramaswamy B., Jue T.C., Akin J.E. Semi-Implicit and Explicit Finite Element Schemes for Coupled Fluid/Thermal Problems. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, **34**: 675-692, 1992.
5. Banaszek J., Projection FEM for Liquid-Solid Phase Change Controlled by Convection and Conduction. *Scientific Papers of Kielce University of Technology, Mechanics*, vol.**67**, pp.23-34, 1999.
6. Bennon W.D., F.P. Incropera F.P., A Continuum Model for Momentum, Heat and Species Transport in Binary Solid-Liquid Phase Change Systems – I. Model Formulation. *Int.J. Heat Mass Transfer*, **30**: 2161-2170, 1987.
7. Prakash C., Voller V.R., On the Numerical Solution of Continuum Mixture Model Equations Describing Binary Solid-Liquid Phase Change. *Numerical Heat Transfer, Part B*, **15**: 171-189, 1989.
8. Felicelli S.D., Heinrich J.C., Poirier D.R., Numerical Model for Dendritic Solidification of Binary Alloys. *Numerical Heat Transfer, Part B*, **23**: 461-481, 1993.
9. Voller V.R., Brent A.D., Prakash C., The Modeling of Heat, Mass and Solute Transport in Solidification Systems. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **32**: 1719-1731, 1989.
10. Banaszek J., Furmański P., FEM Analysis of Binary Dilute System Solidification Using the Anisotropy Porous Medium Model of a Mushy Zone. *Computer assisted Mechanics and Engineering Sciences*, vol.**7**, pp.343-362, 2000.
11. Banaszek J., Jaluria Y., Kowalewski T.A., Rebow M., Semi-Implicit FEM Analysis of Natural Convection in Freezing Water. *Numerical Heat Transfer - Part A*, vol.**36**, pp.449-472, 1999.
12. Bennon W.D., Incropera F.P., Numerical Analysis of Binary Solid-Liquid Phase Change Using a Continuum Model. *Numerical Heat Transfer*, vol.**13**, pp.277-296, 1988.
13. Voller V.R., Swaminathan C.R., General Source-Based Method for Solidification Phase Change, *Numerical Heat Transfer - Part B*, vol.**19**, pp.175-189, 1991.
14. Swaminathan C.R., Voller V.R., General Enthalpy Method for Modeling Solidification Processes. *Metallurgical Transactions B*, vol.**23B**, pp.651-664, 1992.
15. Voller V.R., Brent A.D., Prakash C., The Modeling of Heat, Mass and Solute Transport in Solidification Systems. *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol.**32**, No.9, pp.1719-1731, 1989.
16. Flemings M.C., *Solidification Processing, Material Science and Engineering Series*, McGraw-Hill Book Company, 1974.
17. Naterer G.F., Schneider G.E., Phases Model for Binary-Constituent Solid-Liquid Phase Transition. Part 1: Numerical method. *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol.**28**: 111-126, 1995.
18. Gebhart B., Jaluria Y., Mahajan R.L., Sammakia B., *Buoyancy Induced Flows and Transport*. Hemisphere Publishing Corporation, New York, 1988.

19. Brent A.D., Voller V.R., Reid K.J., Enthalpy-Porosity Technique for Modeling Convection Diffusion Phase Change: Application to the Melting of Pure Metal. *Numerical Heat Transfer*, vol.13, pp.297-318, 1988.
20. Sinha S.K., Sundarajan T., A Variable Property Analysis of Alloy Solidification Using the Anisotropic Porous Medium Approach. *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol.35, pp.2865-2877, 1992.
21. Poirier D.R.. Permeability for Flow of Interdendritic Liquid in Columnar-Dendritic Alloys. *Metallurgical Transactions B*, **18B**, pp.245-255, 1987
22. Zienkiewicz O.C. and Taylor R.L., *Finite Element Method. Fourth Edition*, McGraw-Hill Company, London, 1989.
23. Banaszek J., Analiza fizycznej poprawności modeli elementów skończonych dla zagadnień wymiany ciepła. *Wydawnictwa Politechniki Warszawskiej*, Warszawa, 1991.
24. Donea J., Giuliani S., Laval H., Time Accurate Solution of Advection Diffusion Problems by Finite Elements. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, vol.45, pp.123-145, 1984.
25. Donea J., A Taylor-Galerkin Method for Convective Transport Problems. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, vol. 20, pp.101-119, 1984.
26. Axelsson O., Baker V.A., *Finite Element Solution of Boundary Value Problems*, Academic Press, Orlando, Florida, 1984.
27. Guermond J.L., Quartapelle L., On Stability and Convergence of Projection Methods Based on Pressure Poisson Equation. *Int. J. Num. Meth. Fluids*, vol. 26, pp1039-1053, 1998.
28. Ramaswamy B., Kawahara M., An Efficient Finite Element Scheme for Incompressible Viscous Fluid Flow. *Indian J. Technology*, vol.126, pp.1-13, 1988.
29. Ghia U., Ghia K., Shin C., High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier Stokes Equations and Multi-Grid Method. *J. Comput. Phys.*, vol.48, pp.387-401, 1982.
30. Kohlrausch F., *Praktische Physik, Band 3, 22 Auflage, Table 22203*, p.1692-1693, B.G. Teubner, Stuttgart, 1968.
31. Amalhel G.A., Furmanski P., Problems of Modeling of Flow and Heat Transfer in Porous Media. *Bulletin of Institute of Heat Engineering*, vol.85, pp.55-88, 1997.
32. Furmański P., Heat Conduction in Composites: Homogenization and Macroscopic Behavior. *Applied Mechanics Reviews*, vol.50, pp.327-356, 1997.
33. Kamiuto K., Saitoh S., Combined Forced-Convection and Correlated-Radiation Heat Transfer in Cylindrical Patches Beds. *J. Thermophysics and Heat Transfer*, vol.8, pp.119-124, 1994.
34. Swaminathan C.R., Voller V.R., Towards a General Numerical Scheme for Solidification Systems. *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol.40, No 2, pp.2859-2868, 1997.
35. Zeng X., Faghri A., Temperature-Transforming Model for Binary Solid-Liquid Phase-Change Problems. Part I: Mathematical Modeling and Numerical Methodology. *Numerical Heat Transfer , Part B*, vol.25, pp.467-480,1994.
36. Voller V.R., A Numerical Scheme for Solidification of an Alloy. *Canadian Metallurgical Quarterly*, vol.37, No.3-4, pp. 169-177, 1998