

P. 3353/99

ROMUALD SZOPA

MODELOWANIE KRZEPNIĘCIA I KRYSTALIZACJI Z WYKORZYSTANIEM KOMBINOWANEJ METODY ELEMENTÓW BRZEGOWYCH

HUTNICTWO z. 54

GLIWICE 1999

POLITECHNIKA ŚLĄSKA ZESZYTY NAUKOWE Nr 1407

ROMUALD SZOPA

MODELOWANIE KRZEPNIĘCIA I KRYSTALIZACJI Z WYKORZYSTANIEM KOMBINOWANEJ METODY ELEMENTÓW BRZEGOWYCH



OPINIODAWCY

Dr hab. inż. Wojciech Kapturkiewicz - Prof. AGH Prof. dr inż. Józef Gawroński

KOLEGIUM REDAKCYJNE

REDAKTOR DZIAŁU

REDAKTOR NACZELNY - Prof. dr hab. Zygmunt Kleszczewski - Dr hab. inż. Stanisław Serkowski Profesor Politechniki Śląskiej

SEKRETARZ REDAKCJI - Mgr Elżbieta Leśko

REDAKCJA Mgr Roma Łoś

REDAKCJA TECHNICZNA Alicja Nowacka

> Wydano za zgodą Rektora Politechniki Śląskiej

> > PL ISSN 0324-802X

Wydawnictwo Politechniki Śląskiej ul. Akademicka 5, 44-100 Gliwice

Nakl. 110+83 Ark. druk. 11,125 Papier offset. kl. III 70 x 100, 80 g Ark. wyd. 14 Oddano do druku 7.01.1999 Podpis. do druku 7.01.1999 Druk ukończ. w styczniu 1999

Fotokopie, druk i oprawę wykonał "AMgraf" sc. Gliwice, ul.Jasna 8

SPIS	STREŚCI	
1. CE	EL, TEZA I ZAKRES PRACY	7
	Literatura do rozdziału 1	9
2. RĆ	ÓWNANIE DYFUZJI, METODA ODCHYŁEK WAŻONYCH	11
	2.1. Wstep	11
	2.2. Równanie dyfuzji	11
	2.3. Metoda odchyłek ważonych	16
	Literatura do rozdziału 2	19
2 00	NOT A MAY TEADETWORKE METADA VANDINAWANET	22
3. PU	2.1. Stermulantaria radania dualeraturania matada adahulak watanwah	22
	3.1. Stormułowanie zadania, dyskretyzacja, metoda odchyłek ważonych	22
	3.2. Metoda kompinowana dia zadania 1D	20
	3.3. Metoda kombinowana dia zadan 2D	30
	3.4. Przykład obliczen numerycznych - czasoprzestrzenny rozkład	20
	temperatury w krystalizatorze urządzenia COS	39
	3.5. Metoda komplinowana dia zadan 3D	44
	Literatura do rozdzialu 3	43
4. AE	DAPTACJA ALGORYTMU METODY KOMBINOWANEJ DLA	
01	BSZARÓW PROSTOKĄTNYCH DO OBLICZEŃ PRZEPŁYWU	
CI	EPŁA W OBSZARACH WALCOWYCH I SFERYCZNYCH	47
	4.1. Wprowadzenie	47
	4.2. Przepływ ciepła w obszarach walcowych i sferycznych	48
	4.3. Metoda sztucznego źródła	50
	4.3.1. Rozwiązania jednowymiarowe	51
	4.3.2. Rozwiązanie dwuwymiarowe (walec skończony)	56
	Literatura do rozdziału 4	63
5. MI	ETODA KOMBINOWANA DLA OBSZARÓW SFERYCZNYCH	65
	5.1 Rozwiązanie fundamentalne dla obszaru sfervcznego	65
	5.2 Warstwa kulista	67
	5.3 Obszary niejednorodne	71
	5.4. Przykłady obliczeń	75
	Literatura do rozdziału 5	82
	Literatura do rozdzialu J	02

Q11 DA

PC		
	DDEJSCIE MAKROSKOPOWE	83
	6.1. Wstęp	83
	6.2. Modele makroskopowe	85
	6.3. Dobór zastępczej pojemności cieplnej	86
	6.4. Metody linearyzacji równania krzepnięcia	92
	6.4.1. Metoda zapasu temperatury	93
	6.4.2. Metoda przemiennej fazy	96
	6.4.3. Metoda korygowania chwilowego pola temperatury	108
	6.4.4. Uogólnienie metody korygowania chwilowego pola temperatury	123
	6.5. Modele makroskopowe a struktura pierwotna odlewu	128
	Literatura do rozdziału 6	129
	WEARE PROVIDE SERVICE CONTRACTOR PLATEROOM	
7. MO	DDELOWANIE KRYSTALIZACJI METALI I STOPÓW	
(M	ODELE MIKRO-MAKRO)	135
	7.1. Wstęp	135
	7.2. Krystalizacja na zarodkach homogenicznych i heterogenicznych	136
	7.3. Model krystalizacji czystych metali i stopów eutektycznych	140
	7.4. Model numeryczny procesu krystalizacji	146
	7.5. Krystalizacja stopów wielofazowych	166
	Literatura do rozdziału 7	170
0 00		
8. PU	DSUMOWANIE I WNIOSKI KONCOWE	173
8. PO	DSUMOWANIE I WNIOSKI KONCOWE	173
s. PO	SZCZENIE	173 176
s. PO	DSUMOWANIE I WNIOSKI KONCOWE SZCZENIE	173 176
8. PO	DSUMOWANIE I WNIOSKI KONCOWE SZCZENIE	173 176
8. PO	DSUMOWANIE I WNIOSKI KONCOWE SZCZENIE	173 176
8. PO	DSUMOWANIE I WNIOSKI KONCOWE SZCZENIE	173 176
8. PO	DSUMOWANIE I WNIOSKI KONCOWE SZCZENIE	173 176
8. PO	SZCZENIE	173 176
8. PO	DSUMOWANIE I WNIOSKI KONCOWE SZCZENIE	173 176
s. po	DSUMOWANIE I WNIOSKI KONCOWE SZCZENIE	173 176
s. po	DSUMOWANIE I WNIOSKI KONCOWE SZCZENIE	173
s. po	DSUMOWANIE I WNIOSKI KONCOWE SZCZENIE	173
s. po	DSUMOWANIE I WNIOSKI KONCOWE SZCZENIE	173
s. po	DSUMOWANIE I WNIOSKI KONCOWE SZCZENIE	173
s. po	DSUMOWANIE I WNIOSKI KONCOWE SZCZENIE	173
s. po	DSUMOWANIE I WNIOSKI KONCOWE SZCZENIE	173
s. po	DSUMOWANIE I WNIOSKI KONCOWE SZCZENIE	173
s. po	DSUMOWANIE I WNIOSKI KONCOWE SZCZENIE	173

And and the second s

CONTENTS

1. AIM, THESIS AND SCOPE OF WORK	7
References to the chapter 1	9
2. DIFFUSION EQUATION, WEIGHTED RESIDUAL METHOD	11
2.1. Introduction	11
2.2. Diffusion equation	11
2.3. Weighted residual method	16
References to the chapter 2	19
3. THEORETICAL BASES OF COMBINED METHOD	22
3.1. Formulation of the problem, discretization, weighted residual method	22
3.2. Combined method for 1D problem	25
3.3. Combined method for 2D problem	30
3.4. Example of numerical computations - time-spatial temperature distribution	
in continuous casting mould	39
3.5. Combined method for 3D problem	44
References to the chapter 3	45
4 ADAPTATION OF COMBINED METHOD FOR RECTANCILLAR DOMAINS	
TO THE HEAT TRANSFER CALCULATIONS FOR CYLINDRICAL	
AND SPHERICAL DOMAINS	47
4.1. Introduction	47
4.2. Heat transfer in cylindrical and spherical domains	48
4.3. Artificial source method	50
4 3.1 One-dimensional solutions	51
4.3.2. Two-dimensional solutions (finite cylinder)	56
References to the chapter 4	63
	00
5. COMBINED METHOD FOR SPHERICAL DOMAINS	65
5.1. Fundamental solution for spherical domain	65
5.2. Spherical shell	67
5.3. Heterogeneous domains	71
5.4. Examples of computations	75
References to the chapter 5	82

6. NUMERICAL MODELLING OF SOLIDIFICATION AND COOL	LING PROCESS.
MACROSCOPIC APPROACH	83
6.1. Introduction	83
6.2. Macroscopic models	85
6.3. Choice of substitute thermal capacity	86
6.4. The methods of linearization of solidification equation	92
6.4.1. Temperature recovery method	93
6.4.2. Alternating phase truncation method	96
6.4.3. Temperature field correction method	108
6.4.4. Generalization of the temperature field correction r	nethod 123
6.5. Macroscopic models and primary structure of casting	128
References to the chapter 6	129
. MODELLING OF CRYSTALLIZATION OF METALS AND ALI	LOYS
(MACRO/MICRO APPROACH)	135
7.1. Introduction	135
7.2. Crystallization on homogeneous and heterogeneous nuclei	136
7.3. Crystallization model of metals and eutectic alloys	140
7.4. Numerical model of crystallization process	146
7.5. Crystallization of alloys	166
References to the chapter 7	170
. SUMMARY AND FINAL REMARKS	173
UMMARY	176

1. CEL, TEZA I ZAKRES PRACY

Metoda brzegowych równań całkowych (metoda elementów brzegowych) należy do najbardziej efektywnych i dokładnych metod przybliżonego rozwiązywania zagadnień brzegowych i brzegowo-początkowych - w tym modelowania ustalonej i nieustalonej dyfuzji ciepła. W literaturze opisano kilka sposobów wykorzystania MEB do obliczeń niestacjonarnych pól temperatury, a w szczególności

- I schemat metody elementów brzegowych,

- II schemat metody elementów brzegowych,

- MEB z wykorzystaniem wielokrotnej zasady wzajemności,

,- kombinowany wariant metody elementów brzegowych (BEM using discretization in time).

I i II schemat MEB omówiono (w formie bardzo skondensowanej) w znanych książkach C.A.Brebbii, J.C.F.Tellesa i L.C.Wrobla "Boundary Element Techniques" [1] oraz P.K.Banerjee'go i R.Batterfielda "Boundary Element Methods in Engineering Science" [2], więcej informacji o tych wariantach metody można znaleźć w monografii E.Majchrzak [3] i w rozdziale VII książki B.Mochnackiego i J.S.Suchego [4].

Metoda elementów brzegowych z wykorzystaniem wielokrotnej zasady wzajemności rozwijana jest przez A.J.Nowaka i L.C.Wrobla, omówieniu aspektów teoretycznych i praktycznych tej odmiany MEB poświęcona jest między innymi monografia A.J.Nowaka [5].

W ramach niniejszej pracy prowadzono badania nad wykorzystaniem ostatniego z wymienionych wariantów MEB, czyli metody kombinowanej w problemach związanych z szeroko rozumianą termodynamiką procesów odlewniczych. Twórcami metody kombinowanej byli D.A.S.Curran, M.Cross i B.A.Lewis [6], praca ta była skrótowo omówiona w cytowanej już książce [1]. W 1989 roku W.Sichert wykonał pod kierunkiem prof. Kuhna (Erlangen, Niemcy) pracę doktorską [7], której część poświęcił wybranym aspektom zastosowań metody kombinowanej, natomiast w roku 1997 na Politechnice Częstochowskiej została obroniona praca doktorska E.Ładygi "Zastosowanie metody elementów brzegowych z dyskretyzacją czasu do modelowania nieustalonej dyfuzji" [8] (promotor: E.Majchrzak).

Zamiarem autora niniejszej monografii była adaptacja metody kombinowanej do modelowania problemów krzepnięcia metali i stopów, a więc zadań z ruchomymi granicami i źródłowymi polami temperatury, innymi słowy udowodnienie tezy o przydatności tej metody w rozwiązywaniu szerokiej klasy zagadnień termodynamiki procesów odlewniczych i metalurgii.

W zakresie podstaw metody kombinowanej udało się opracować jej algorytm dla obszarów sferycznych oraz algorytmy wykorzystujące koncepcję sztucznego źródła, która pozwoliła wykorzystać podstawowy wariant metody do obliczeń nieustalonego przepływu ciepła w obszarach sferycznych i walcowych. Przedstawiono również sposób łączenia metody kombinowanej z II schematem MEB, który może być wykorzystany w przypadku obszarów niejednorodnych (np. układ odlew-forma), a najbardziej istotną zaletą takiego podejścia jest fakt, że dyskretyzacja wnętrza wymagana jest tylko dla obszaru "ważniejszego", np. odlewu, natomiast okazuje się ona zbędna dla obszaru "peryferyjnego", np. formy odlewniczej. Inną ilustracją możliwości konstrukcji algorytmów hybrydowych, których jednym z elementów jest metoda kombinowana, może być podany w pracy przykład symulacji krzepnięcia kompozytu odlewanego z cząstkami (połączono tu metodę kombinowaną z metodą elementów skończonych).

Modele numeryczne krzepnięcia metali i stopów według klasyfikacji zaproponowanej przez Stefanescu [9] dzielą się na modele makroskopowe (I generacji) i modele mikro/makro (II generacji). W pracy rozważano zarówno modele I, jak i II generacji.

Modele makroskopowe polegają, ogólnie rzecz biorąc, na przyjęciu a'priori pewnej hipotezy dotyczącej zależności lokalnego i chwilowego udziału fazy stałej w krzepnącym odlewie od temperatury. Drogą formalnych przekształceń opis matematyczny procesu krzepnięcia sprowadza się do równania dyfuzji ciepła dla obszarów jednorodnych, w którym pojawia się parametr termofizyczny nazywany zastępczą pojemnością cieplną [10]. Równanie to jest silnie nieliniowe, w szczególności zastępcza pojemność zmienia się w bardzo szerokim zakresie. Ponieważ metodę elementów brzegowych, w tym również metodę kombinowaną, można stosować do rozwiązywania zadań opisanych równaniami, w których nieliniowości mogą występować jedynie w składniku źródłowym, więc bazowy algorytm MEB należy uzupełnić dodatkowymi procedurami linearyzującymi (na etapie obliczeń numerycznych) model matematyczny krzepnięcia [11, 12]. Autor przetestował zarówno efekty połączenia metody kombinowanej z opisanymi w literaturze procedurami modelowania krzepnięcia i stygnięcia, jak również przedstawił pewne własne rozwiązania dotyczące tych zagadnień.

Przedmiotem zainteresowań autora były także modele II generacji. Cechą charakterystyczną tych modeli jest uwzględnienie praw zarodkowania i wzrostu przy konstrukcji funkcji opisującej chwilowy i lokalny udział fazy stałej w krzepnącym odlewie. Tak więc modele drugiej generacji dotyczą nie tyle krzepnięcia, co krystalizacji. Podstawowe równianie dyfuzji jest w takim przypadku równaniem dla pól źródłowych, przy czym wydajność funkcji źródła wynika bezpośrednio z wymienionych wyżej praw dotyczących przebiegu procesu krystalizacji. Modele mikro/makro analizowane w niniejszej monografii bazują na opisie krystalizacji prezentowanym w publikacjach Longi, Frasia, Kapturkiewicza, Majchrzak i innych, szczegółowy wykaz tych prac przedstawiono w rozdziale 7. W rozdziałe tym omówiono algorytmy symulujące zarówno krystalizację czystych metali, jak i typowych stopów.

Monografia składa się z 8 rozdziałów. Rozdział 2 stanowi wprowadzenie do problematyki wykorzystania metody kombinowanej w modelowaniu nieustalonej dyfuzji. W rozdziale 3 przedstawiono podstawy teoretyczne metody kombinowanej (modele 1D, 2D i 3D) i z wyjątkiem przykładu zamieszczonego w jego końcowej części zawiera informacje dostępne w literaturze, przy czym autor podjął próbę pewnego uogólnienia i ujednolicenia opisu algorytmu numerycznego tej metody. W rozdziałach 4 i 5 zaprezentowano wyniki badań własnych, a w szczególności sposób wykorzystania podstawowego algorytmu metody do obliczeń dyfuzji ciepła w obszarach walcowych i sferycznych oraz oryginalny algorytm

metody kombinowanej dla obszarów kulistych. Problemom wykorzystania metody kombinowanej do modelowania procesów cieplnych w szeroko rozumianym układzie odlewforma-otoczenie poświęcone są rozdziały 6 i 7, przy czym pierwszy z nich zawiera informacje dotyczące modeli makroskopowych, a drugi modeli mikro/makro. Rozdział ostatni (ósmy) stanowi podsumowanie pracy i zawiera wnioski końcowe. Wykaz literatury zamieszczono bezpośrednio po każdym rozdziałe (w kolejności cytowania) i zebrano w nim prace dotyczące zagadnień prezentowanych w tym właśnie rozdziałe (niektóre pozycje powtarzają się w kilku rozdziałach).

Celem niniejszej pracy było zbadanie aspektów teoretycznych i praktycznych związanych z wykorzystaniem metody kombinowanej do modelowania typowych problemów termodynamiki procesów odłewniczych. Zdaniem autora ten wariant metody elementów brzegowych, który z formalnego punktu widzenia jest istotnie prostszy od innych jej odmian, w pełni potwierdził swoją przydatność w obliczeniach cieplnych związanych z krzepnięciem metali i stopów. Metoda kombinowana charakteryzuje się wszystkimi znanymi zaletami innych odmian metody elementów brzegowych, a liczne przykłady testujące pokazały jej dużą dokładność i efektywność.

Literatura do rozdziału 1

- 1. C.A.Brebbia, J.C.F.Telles, L.C.Wrobel, Boundary element techniques, Springer-Verlag, Berlin 1984.
- 2. P.K.Banerjee, R.Butterfield, Boundary element methods in engineering science, McGraw-Hill Book Company, 1981.
- 3. E. Majchrzak, Zastosowanie metody elementów brzegowych w termodynamice procesów odlewniczych, Z.N. Pol. Śląskiej, Mechanika, 102, 1991.
- B. Mochnacki, J.S. Suchy, Numerical methods in computations of foundry processes, PFTA, Cracow 1995.
- 5. A.J.Nowak, Metoda elementów brzegowych z zastosowaniem wielokrotnej zasady wzajemności, Z.N. Pol. Śląskiej, Energetyka, 116, 1993.
- D.A.S Curan, M.Cross, B.A.Lewis, Solution of parabolic differential equations by the boundary element method using discretisation in Time, Appl. Math. Modelling, No 4, 1980, 398-400.
- 7. W.Sichert, Berechnung von instationaren thermischen Problemen mittels der Randelementmethode, Dissertation, Erlangen 1989.

- 8. E.Ładyga, Zastosowanie metody elementów brzegowych z dyskretyzacją czasu do modelowania nieustalonej dyfuzji, Praca doktorska, Częstochowa 1997.
- D.M.Stefanescu, Critical review of the second generation of solidification models for sastings; Macro transport - transformation kinetics codes, Modelling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VI, Edited by T.S.Piwonka, V.Voller, L.Katgerman, The Minerals, Metals & Materials Society, 1993, 3-20.
- B.Mochnacki, J.S.Suchy, Modelowanie i symulacja krzepnięcia odlewów, PWN, Warszawa 1993.
- 11. E.Majchrzak, B.Mochnacki, Application of the BEM in the thermal theory of foundry, Engineering Analysis with Boundary Elements, 16, 1995, 99-121.
- E. Majchrzak, B. Mochnacki, The BEM application for numerical solution of nonsteady and nonlinear thermal diffusion problems, Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences, Vol.3, No 4, 1996, 327-346.
- 13. B. Mochnacki, J. Suchy, Numerical modelling of casting solidification: the concept of problem linearization, ASF Transactions, 96-11, 1997, 203-209.

2. RÓWNANIE DYFUZJI, METODA ODCHYŁEK WAŻONYCH

2.1. Wstęp

Z matematycznego punktu widzenia typowe zagadnienia termodynamiki procesów odlewniczych należą do grupy zadań brzegowo-początkowych z ruchomymi granicami (moving boundary problems). Opis matematyczny takiego zadania sprowadza się do równania lub układu równań różniczkowych o pochodnych cząstkowych uzupełnionych warunkami jednoznaczności (brzegowymi, początkowymi, geometrycznymi i fizycznymi). Jeżeli analizujemy przepływ ciepła w szeroko rozumianym układzie odlew - forma - otoczenie, to bazą do opisu procesu są równania dyfuzji dla pól źródłowych lub bezźródłowych, natomiast warunki zadane na ruchomych lub nieruchomych brzegach wynikają z rozpatrywanej technologii oraz materiału, z jakiego wytwarzany jest odlew. Warunki początkowe określają pole temperatury w układzie w chwili przyjętej jako t=0, geometryczne - kształt rozpatrywanego układu, a fizyczne są zbiorem parametrów termofizycznych materiału odlewu i podobszarów formy.

W pierwszej części niniejszego rozdziału przedstawione zostaną różne postacie równania dyfuzji oraz typowe warunki brzegowe, jakie występują w problemach przewodzenia ciepła. W drugiej jego części sformułowane zostanie kryterium metody odchyłek ważonych będące podstawą do konstrukcji algorytmu metody brzegowych równań całkowych, w tym oczywiście metody kombinowanej. Kryterium MOW pozwala przekształcić wyjściowy opis matematyczny rozważanego zadania brzegowo-początkowego do równania całkowego, nazywanego w pracy równaniem metody elementów brzegowych.

2.2. Równanie dyfuzji

Kondukcyjny przepływ ciepła w ośrodku izobarycznym i izotropowym Ω ze źródłami wewnętrznymi o wydajności q_v [W/m³] opisuje następujące równanie różniczkowe

$$x \in \Omega : \quad c(T) \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \operatorname{div}[\lambda(T) \operatorname{grad} T(x, t)] + q_V(x, t) \quad (2.1)$$

gdzie c jest właściwą pojemnością cieplną odniesioną do jednostki objętości, λ współczynnikem przewodzenia ciepła, T, x, t oznaczają temperaturę, współrzędne geometryczne i czas. Równanie (2.1) jest szczególnym przypadkiem równania energii [1]

$$x \in \Omega$$
: $c(T) \left[\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} + u \cdot \operatorname{grad} T(x, t) \right] = \operatorname{div} [\lambda(T) \operatorname{grad} T(x, t)] +$

+
$$q_V(x, t)$$
 + $\frac{\partial p(x, t)}{\partial t}$ + u · grad $p(x, t)$ (2.2)

gdzie u jest polem prędkości, p - ciśnieniem. Równanie (2.2) jest jednym z najbardziej ogólnych praw termokinetyki i nazywane jest równaniem Fouriera-Kirchhoffa.

Na brzegu zewnętrznym Γ obszaru Ω (założono, że $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$ - por. rys. 2.1) zadaje się warunki brzegowe determinujące przepływ ciepła między obszarem Ω a otoczeniem. W zależności od ich postaci nazywane są one warunkami I, II i III rodzaju (Dirichleta, Neumanna i Robina).





Jeżeli na fragmencie Γ_1 zadana jest bezpośrednio temperatura brzegowa, tzn.

 $x \in \Gamma_1$: $T(x, t) = T_b(x, t)$ (2.3)

to mówimy o warunku brzegowym I rodzaju. Warunek brzegowy II rodzaju dotyczy przypadku, gdy określony jest strumień ciepła normalny do brzegu w punktach $x \in \Gamma_2$, czyli

$$x \in \Gamma_2 : -\lambda \frac{\partial T(x, t)}{\partial n} = q_b(x, t)$$
 (2.4)

gdzie *n* jest wersorem normalnym do brzegu, q_b - zadanym strumieniem ciepła.

Warunek brzegowy Robina wynika z ciągłości strumienia ciepła dopływającego z wnętrza ciała do brzegu obszaru i oddawanego do otoczenia

$$\epsilon \in \Gamma_3 : -\lambda \frac{\partial T(x, t)}{\partial n} = \alpha [T(x, t) - T^*]$$
(2.5)

gdzie α [W/m² K] jest współczynnikiem wymiany ciepła między powierzchnią ciała a otoczeniem (uwzględnia się przy tym z reguły składową konwekcyjną i promienistą współczynnika α [2]), natomiast T^{∞} jest temperaturą otoczenia.

Jeżeli rozważa się obszary niejednorodne (rys. 2.2), to warunki na powierzchniach zewnętrznych należy uzupełnić warunkiem na powierzchni kontaktu (warunkiem IV rodzaju)

$$x \in \Gamma_4: \quad -\lambda_1 \frac{\partial T_1(x, t)}{\partial n} = \frac{T_1(x, t) - T_2(x, t)}{R(x, t)} = -\lambda_2 \frac{\partial T_2(x, t)}{\partial n}$$
(2.6)

gdzie R jest oporem cieplnym na styku podobszarów (np. szczelina gazowa, warstwa smarująca itp.).

W przypadku kontaktu idealnego, tzn. R=0, musi być również spełniony warunek $T_1=T_2$ i wówczas

$$\kappa \in \Gamma_4: \begin{cases} -\lambda_1 \frac{\partial T_1(x, t)}{\partial n} = -\lambda_2 \frac{\partial T_2(x, t)}{\partial n} \\ T_1(x, t) = T_2(x, t) \end{cases}$$
(2.7)

Tak więc dla R=0 pole temperatury w obszarze niejednorodnym jest funkcją ciągłą.



Rys. 2.2. Obszary Ω_1 i Ω_2 Fig. 2.2. Domains Ω_1 and Ω_2

W zadaniach dotyczących nieustalonego przepływu ciepła należy również sformułować warunek początkowy opisujący pole temperatury w chwili t=0:

$$t = 0$$
: $T(x, 0) = T_0(x)$ (2.8)

Jak wspomniano we wstępie, model matematyczny krzepnięcia bazuje na równaniu energii dla pól źródłowych. Przejście od stanu ciekłego w stan stały wiąże się z wydzieleniem utajonego ciepła przemiany (ciepła krzepnięcia). W termodynamice procesów odlewniczych składnik q_v nazywany jest funkcją źródła (por. [3, 4, 5, 6, 7]). Szczegóły dotyczące sposobu definiowania i obliczania chwilowych i lokalnych wartości q_v zostaną omówione w rozdziałach 6 i 7 niniejszej pracy.

Pewnym ,,odejściem'' od opisu standardowego jest model matematyczny krzepnięcia czystych metali i stopów eutektycznych (w ujęciu makroskopowym). Proces ten opisuje się układem równań dyfuzji dla ciekłej i zakrzepłej części odlewu oraz podobszarów formy odlewniczej. Równania te dotyczą bezźródłowych pól temperatury. Na ruchomej granicy ciecz

- ciało stałe wydziela się utajone ciepło krzepnięcia. Wynikający z bilansu energii oraz równości temperatur cieczy i ciała stałego warunek brzegowy na tej powierzchni nazywany jest w literaturze warunkiem Stefana (np. [8, 9, 10, 11, 12, 13])

$$\mathbf{x} = \Gamma_{kr} : \begin{cases} \lambda_1 \frac{\partial T_1(x, t)}{\partial x} - \lambda_2 \frac{\partial T_2(x, t)}{\partial x} = L_V w_n \\ T_1(x, t) = T_2(x, t) = T_{kr} \end{cases}$$
(2.9)

gdzie wskaźniki 1 i 2 dotyczą fazy ciekłej i stałej odpowiednio, L_v jest utajonym ciepłem krzepnięcia odniesionym do jednostki objętości, w_n - prędkością przyrostu fazy stałej w punkcie x w kierunku normalnym do powierzchni rozdziału faz, T_{kr} - temperaturą krzepnięcia.

Z formalnego punktu widzenia sformułowanie mniej lub bardziej złożonego modelu dyfuzji ciepła w układzie odlew - forma nie jest zadaniem trudnym, trudności pojawiają się dopiero na etapie rozwiązywania zadania. Możliwości analizy matematycznej są tutaj dość ubogie i zapewniają sukces jedynie w przypadkach obszarów o bardzo prostej geometrii, materiałów o stałych, niezależnych od współrzędnych i czasu (lub bezpośrednio od temperatury) parametrach termofizycznych oraz najprostszych warunków brzegowo-początkowych. Ogromna większość z opisanych w literaturze rozwiązań (por. [13, 14]) dotyczy klasycznego zadania Stefana, a więc krzepnięcia w stałej temperaturze. Rozwiązania te mają oczywiście pewne znaczenie praktyczne, ale nawet "skromne" próby skomplikowania opisu, np. wprowadzenie niejednorodnego warunku początkowego w obszarze odlewu traktowanego jako półprzestrzeń, prowadzą do niezwykle skomplikowanych sposobów rozwiązywania tego w sumie bardzo uproszczonego i dalekiego od warunków rzeczywistych problemu [15].

Tak więc jedynym efektywnym narzędziem analizy procesów przepływu ciepła w , realnych'' odlewach okazały się metody numeryczne. Badania nad metodami przybliżonego rozwiązywania zagadnień brzegowych i brzegowo-początkowych prowadzone były od dawna, ale szczególnie intensywny rozwój tych metod rozpoczął się w latach 70, co niewatpliwie wiązało się z coraz powszechniejszym wykorzystaniem komputerów w praktyce inżynierskiej Największą popularność w dziedzinie modelowania procesów odlewniczych zyskały sobie metoda różnic skończonych (MRS) i metoda elementów skończonych (MES). Wszystkie, obecnie dostępne na rynku programy narzędziowe wspomagające projektowanie technologii odlewniczych (a jest ich kilkadziesiąt [16]) opracowano wykorzystując algorytmy MRS lub MES. Metoda brzegowych równań całkowych nie jest tak popularna jak metody wymienione poprzednio, chociaż posiada wiele niezaprzeczalnych zalet i może być bardzo efektywnym narzędziem w modelowaniu przepływu ciepła, w tym również zadań termodynamiki procesów odlewniczych. Od początku lat 80 MEB jest przedmiotem prowadzonych bardzo intensywnie badań naukowych, większość z nich dotyczy jednak aplikacji w zakresie szeroko rozumianej mechaniki, "zimnej". Wykorzystanie MEB do przybliżonego rozwiazywania zadań przepływu ciepła i masy nie jest wprawdzie traktowane marginesowo, ale problemami tymi, a w szczególności stanami nieustalonymi zajmuje się stosunkowo niewielu badaczy. Należy w tym miejscu podkreślić duży i uznany w świecie wkład polskich naukowców do rozwoju tej gałezi zastosowań MEB (R.Białecki, E.Majchrzak, B.Mochnacki, A.Nowak), przy czym

bezpośrednim wykorzystaniem metody do symulacji przepływu ciepła w układzie odlew-forma zajmują się w Polsce E.Majchrzak i B.Mochnacki.

Omówiony pokrótce w pierwszej części niniejszego podrozdziału opis matematyczny nieustalonej dyfuzji ciepła nie jest jedynym możliwym opisem tego procesu. Jego modyfikacje (wykorzystywane również w niniejszej monografii) wynikają z wprowadzenia w miejsce temperatury parametru kalorycznego nazywanego entalpią fizyczną bądź tzw. funkcji Kirchhoffa.

Entalpię fizyczną odniesioną do jednostki objętości definiujemy jako

$$H(T) = \int_{T_{od}}^{T} c(\mu) d\mu$$
 (2.10)

gdzie T_{od} jest dowolnie przyjętym poziomem odniesienia (np. $T_{od}=0$). Gdy c jest stałe, to $H(T)=c(T-T_{od})$. Dla czystych metali i stopów eutektycznych krzepnących w stałej temperaturze entalpia fizyczna nie jest funkcją ciągłą:

$$H(T) = \int_{T_{min}}^{T} c(\mu) d\mu + L_{\nu} \eta(T)$$
 (2.11)

gdzie

$$\eta(T) = \begin{cases} 0, & T < T_{kr} \\ 1, & T \ge T_{kr} \end{cases}$$
(2.12)

Powyższą definicję można uogólnić na przypadek *n* ,,ostrych'' frontów krzepnięcia [17, 18]. Funkcję Kirchhoffa określa następujące równanie

$$U(T) = \int_{T} \lambda(\mu) d\mu \qquad (2.13)$$

Wynika stąd, że $\lambda(T) = dU(T)/dT$. Funkcja ta linearyzuje prawą stronę równania energii, ponieważ wyrażenie div(λ gradT) sprowadza się do div(gradU), stąd też podstawienie Kirchhoffa jest funkcją bardzo przydatną w przypadku obliczeń ustalonych pól temperatury. Podstawienie to również można wykorzystać w przypadku zadań dotyczących stanów nieustalonych [19], w tym problemów krzepnięcia [m.in. 20]. Przekształcenie równania dyfuzji do konwencji Kirchhoffa polega na wprowadzeniu do opisu przepływu ciepła funkcji będącej pochodną entalpii względem U. Można wykazać, że funkcja taka jest jednoznacznie określona, co wynika z faktu, że zarówno H(T), jak i U(T) są ściśle monotoniczne (rosnące), czyli istnieje funkcja H = H(U).

Szczegóły dotyczące wykorzystania entalpii fizycznej i funkcji Kirchhoffa w modelowaniu krzepnięcia i stygnięcia zostaną przedstawione w rozdziale 6.

2.3. Metoda odchyłek ważonych

Oznaczmy przez R różnicę między prawą i lewą stroną równania różniczkowego. Jeżeli przykładowo rozpatrujemy jednowymiarowe liniowe równanie paraboliczne

$$x \in \Omega$$
: $\frac{1}{a} \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2}$ (2.14)

gdzie $a = \lambda/c$, to

$$R = \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} - \frac{1}{a} \frac{\partial T(x, t)}{\partial t}$$
(2.15)

Jeżeli T(x, t) jest rozwiązaniem dokładnym rozpatrywanego zadania brzegowo-początkowego, to oczywiście R=0, natomiast jeśli T(x, t) jest rozwiązaniem przybliżonym, to $R \neq 0$. Kryterium metody odchyłek ważonych (*weighted residual method*) sprowadza się do postulatu

$$\int_{0}^{t^{\mu}} \int_{\Omega} R w d\Omega dt = 0 \qquad (2.16)$$

gdzie $[0, t^{F}]$ jest analizowanym przedziałem czasu, natomiast w - funkcją wagi.

W przypadku zadań ustalonych kryterium (2.16) sprowadza się do prostszego, a mianowicie

$$\int_{\Omega} R w \, \mathrm{d}\,\Omega = 0 \tag{2.17}$$

przy czym R odpowiada różnicy między prawą i lewą stroną równania eliptycznego. Należy w tym miejscu podkreślić, że omawiany w niniejszej pracy wariant metody brzegowych równań całkowych bazuje na uproszczonej postaci kryterium MOW, ponieważ jego zastosowanie poprzedza aproksymacja pochodnej temperatury względem czasu odpowiednim ilorazem różnicowym. Tak więc opisana w pracy metoda jest, z formalnego punktu widzenia, istotnie prostsza niż inne przedstawiane w literaturze warianty MEB dla zagadnień nieustalonej dyfuzji.

Do rozważań wprowadzamy siatkę czasu zdefiniowaną następująco

$$0 = t^{0} < t^{1} < \dots < t^{f-1} < t^{f} < t^{f+1} < \dots < t^{F} < \infty$$
(2.18)

o kroku $\Delta t = t^{f+1} - t^{f}$, który z reguły przyjmuje się jako stały.

W wariancie najprostszym równanie różniczkowe dyfuzji ciepła na odcinku $[t^{f}, t^{f+1}]$ zastępuje się równaniem [21, 22]

$$R = \frac{\partial^2 T(x, t^{f+1})}{\partial x^2} - \frac{1}{a} \frac{T(x, t^{f+1}) - T(x, t^f)}{\Delta t}$$
(2.19)

Należy w tym miejscu podkreślić, że rozkład funkcji $T(x, t^{f})$ jest znany bądź z warunku początkowego, bądź z wyznaczonego w poprzednim kroku obliczeń warunku pseudopoczątkowego, natomiast poszukiwane jest rozwiązanie $T(x, t^{f+1})$ zależne bezpośrednio od zmiennej przestrzennej, stąd też (o czym wspomniano poprzednio) defekt *R* nie zależy od czasu i kryterium MOW wymaga całkowania jedynie po obszarze geometrycznym. Tak więc kryterium metody odchyłek ważonych przyjmuje postać

$$\int_{0}^{L} \left[\frac{\partial^{2} T(x, t^{f+1})}{\partial t} - \frac{1}{a \Delta t} T(x, t^{f+1}) + \frac{1}{a \Delta t} T(x, t^{f}) \right] T^{*}(\xi, x) dx = 0 \quad (2.20)$$

gdzie [0, L] są granicami jednowymiarowego obszaru Ω (płyty). Cechą charakterystyczną metody elementów brzegowych jest to, że funkcję wagi stanowi tzw. rozwiązanie fundamentalne (podstawowe) $T^*(\xi, x)$ spełniające następujące równanie różniczkowe

$$\frac{\partial^2 T^*(\xi, x)}{\partial x^2} - \frac{1}{a\Delta t}T^*(\xi, x) = -\delta(\xi, x)$$
(2.21)

gdzie $\delta(\xi, x)$ jest funkcją delta Diraca. W ostatnich dwóch równaniach $\xi \in (0, L)$ jest tzw. punktem obserwacji (punktem, w którym przyłożono skupione źródło ciepła) [23, 24], natomiast x bieżącym punktem z obszaru [0, L]. Dla rozważanego problemu brzegowopoczątkowego rozwiązanie podstawowe wyraża się przez funkcję wykładniczą [21]

$$T^{*}(\xi, x) = \frac{\sqrt{a\Delta t}}{2} \exp\left(-\frac{|x-\xi|}{a\Delta t}\right)$$
(2.22)

z kolei

$$q^{*}(\xi, x) = -\lambda \frac{\partial T^{*}(\xi, x)}{\partial x} = \frac{\lambda \operatorname{sgn}(x-\xi)}{2} \exp\left(-\frac{|x-\xi|}{\sqrt{a \,\Delta t}}\right)$$
(2.23)

gdzie sgn $(x-\xi)$ jest funkcją znaku (por. rozdział 3). Kryterium metody odchyłek ważonych można przekszałcić do postaci

$$\left[\frac{1}{\lambda}q^{*}(\xi, x)T(x, t^{f^{*1}}) - \frac{1}{\lambda}T^{*}(\xi, x)q(x, t^{f^{*1}})\right]_{x=0}^{x=L} + \int_{0}^{L} \left[\frac{\partial^{2}T^{*}(\xi, x)}{\partial x^{2}} - \frac{1}{a\Delta t}T^{*}(\xi, x)\right]T(x, t^{f^{*1}})dx + \frac{1}{a\Delta t}\int_{0}^{L}T(x, t^{f})T^{*}(\xi, x)dx = 0$$
(2.24)

Wykorzystując własność rozwiązania fundamentalnego mamy

$$\left[\frac{1}{\lambda}q^{*}(\xi, x)T(x, t^{f+1}) - \frac{1}{\lambda}T^{*}(\xi, x)q(x, t^{f+1})\right]_{x=0}^{x=L}$$

$$-\int_{0}^{L} \delta(\xi, x) T(x, t^{f+1}) dx + \frac{1}{a \Delta t} \int_{0}^{L} T(x, t^{f}) T^{*}(\xi, x) dx = 0 \qquad (2.25)$$

czyli

-

$$T(\xi, x)T(x, t^{f+1}) - \frac{1}{\lambda}T^{*}(\xi, x)q(x, t^{f+1})\Big]_{x=0}^{x+L} +$$

$$T(\xi, t^{f+1}) + \frac{1}{a\Lambda t}\int_{0}^{L}T(x, t^{f})T^{*}(\xi, x)dx = 0$$
(2.26)

Po wstawieniu granic i uporządkowaniu otrzymuje się

 $\frac{1}{\lambda}q$

$$T(\xi, t^{f+1}) + \frac{1}{\lambda} T^{*}(\xi, L) q(L, t^{f+1}) - \frac{1}{\lambda} T^{*}(\xi, 0) q(0, t^{f+1}) =$$

$$= \frac{1}{\lambda} q^{*}(\xi, L) T(L, t^{f+1}) - \frac{1}{\lambda} q^{*}(\xi, 0) T(0, t^{f+1}) + \frac{1}{a \Delta t} \int_{0}^{L} T(x, t^{f}) T^{*}(\xi, x) dx$$
(2.27)

Biorac $\xi \rightarrow 0^+$ oraz $\xi \rightarrow L^-$ dochodzimy do układu równań

$$\begin{vmatrix} -\frac{1}{\lambda}T^{*}(0, 0) & \frac{1}{\lambda}T^{*}(0, L) \\ -\frac{1}{\lambda}T^{*}(L, 0) & \frac{1}{\lambda}T^{*}(L, L) \end{vmatrix} \begin{vmatrix} q(0, t^{f+1}) \\ q(L, t^{f+1}) \end{vmatrix} =$$

$$(2.28)$$

$$\frac{1}{\lambda}q^{*}(0^{*}, 0) - 1 & \frac{1}{\lambda}q^{*}(0^{*}, L) \\ \frac{1}{\lambda}q^{*}(L^{-}, 0) & \frac{1}{\lambda}q^{*}(L^{-}, L) - 1 \end{vmatrix} \begin{bmatrix} T(0, t^{f+1}) \\ T(L, t^{f+1}) \end{bmatrix}^{+} \begin{bmatrix} \frac{1}{a\Delta t}\int_{0}^{L}T(x, T^{f})T^{*}(0, x)dx \\ \frac{1}{a\Delta t}\int_{0}^{L}T(x, t^{f})T^{*}(L, x)dx \end{vmatrix}$$

Dla ustalenia uwagi załóżmy, że na lewym brzegu płyty zadany jest warunek II rodzaju: $q(0, t) = q_b$, natomiast na prawym warunek I rodzaju $T(L, t) = T_b$. W takim przypadku niewiadomymi w układzie równań (2.28) są temperatura $T(0, t^{f+1})$ oraz strumień ciepła $q(L, t^{f+1})$. Po ich wyznaczeniu temperatury w punktach wewnętrznych $\xi \in (0, L)$ obliczamy wykorzystując równanie

$$T(\xi, t^{f+1}) = \frac{1}{\lambda}q^{*}(\xi, L)T_{b} - \frac{1}{\lambda}q^{*}(\xi, 0)T(0, t^{f+1}) + \frac{1}{\lambda}T^{*}(\xi, L)q(L, t^{f+1}) + \frac{1}{\lambda}T^{*}(\xi, 0)q_{b} + \frac{1}{a\Delta t}\int_{0}^{L}T(x, t^{f})T^{*}(\xi, x)dx$$
(2.29)

Przedstawiony powyżej przykład pokazuje jeszcze jedną istotną cechę metody brzegowych równań całkowych. W pierwszym etapie obliczeń wyznacza się brakujące wartości brzegowe, a dopiero w drugim na ich podstawie wartości temperatur w węzłach wewnętrznych obszaru. Układ rozwiązujący związany jest jedynie z węzłami położonymi na brzegu obszaru, co powoduje, że liczba niewiadomych jest istotnie mniejsza niż w przypadku metody elementów skończonych czy też metody różnic skończonych w schemacie niejawnym. Temperatury wewnętrzne wylicza się ze wzoru (2.29) niezależnie od siebie w dowolnej liczbie punktów z obszaru Ω .

Inne warianty wykorzystania metody elementów brzegowych do obliczeń nieustalonej dyfuzji ciepła, a w szczególności I i II schemat MEB przedstawiony szczegółowo w monografii E.Majchrzak [25], książce B.Mochnackiego i J.S.Suchego [26] oraz w pracy doktorskiej A.Piaseckiej [27] prowadzą do bardziej rozbudowanych algorytmów numerycznych, co wiąże się przede wszystkim z koniecznością całkowania kryterium MOW zarówno po czasie, jak i obszarze Ω .

Literatura do rozdziału 2

- 1. E.Kącki, Termokinetyka, WNT, Warszawa 1967.
- 2. J.Szargut, Termodynamika, PWN, Warszawa 1976.
- 3. W.Longa, The problem of the generalization of crystallization heat source function for a homogeneous alloy with a constant number of nuclei, Metalurgia i Odlewnictwo, 18,4, 1990, 579-603.
- 4. W.Longa, Zagadnienie modelowania funkcji źródła ciepła krystalizacji, Z.N.AGH, Metalurgia i Odlewnictwo, 125, 1989, 103-110.
- 5. E.Fraś, Krystalizacja metali i stopów, PWN, Warszawa 1992.
- 6. E.Fraś, W.Kapturkiewicz, H.F.Lopez, Macro and micro modelling of the solidification cinetics of casting, AFS Transactions, 92-48, 1993, 583-591.
- S.Jura, Z.Jura, Krzywa kalorymetryczna i źródło ciepła w analizie termicznej i deriwacyjnej procesu krzepnięcia żeliwa, Krzepnięcie Metali i Stopów, 16, 1992, 126-139.
- 8. L.I. Rubinstein, Problema Stefana, Zvjazgnie, Riga 1967.

- 9. A.Flemings, Solidification processing, Mc Graw-Hill Book Co., New York 1974.
- 10. W.Longa, Krzepnięcie odlewów, Śląsk, Katowice 1985.
- 11. S.R.Idelsohn, M.A.Storti, L.A.Crivelli, Numerical methods in phase change problems, Archives of Computational Methods in Engineering, 1, 1994, 49-74.
- 12. R.W.Ruddle, The solidification of castings, Institute of Metals, London 1957.
- 13. N.A.Awdonin, Matematiceskoje opisanie kristalizacji, Zinatne, Riga 1980.
- 14. W.Longa, Krzepnięcie odlewów w formach piaskowych, Śląsk, Katowice 1974.
- L.N.Tao, The analiticity and general solution of the Cauchy-Stefan problem, J. Mech. Appl. Math., 35, 4, 1983, 487-504.
- 16. B. Mochnacki, J.S. Suchy, CASTEXPO'96 and 100th AFS Casting Congress, Philadelphia, 1996, Preprint No. 96-011.
- 17. B.Mochnacki, E.Majchrzak, A.Kapusta, Numerical model of heat transfer process in solidifying and cooling steel ingot, Computatinal Modelling of Free and Moving Boundary Problems, Comp.Mech.Publ., Walter de Gruyer, 1991, 177-189.
- 18. B. Mochnacki, E. Majchrzak, A. Kapusta, Linearyzacja matematycznego opisu procesu krzepnięcia i stygnięcia metalu w formie, Metalurgia, 42, 1992, 27-35.
- 19. E.Majchrzak, B.Mochnacki, The BEM application for numerical solution of nonsteady and nonlinear thermal diffusion problems, Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences, 3, 1996, 327-346.
- N.Scheerling, K.A.Fikiin et al. Numerical solution of phase change heat transfer problems with moving boundaries using an improved finited element enthalpy method, Moving Boundaries IV, Comp. Mech. Publ., Southampton, Boston 1997, 75-86.
- D.A.S.Curan, M.Cross., B.A.Lewis, Solution of parabolic differential equations by the boundary element method using discretisation in time, Appl. Math. Modelling, No 4, 1980, 398-400.
- 22. W.Sichert, Berechnung von instationaren thermischen Problemen mittels der Randelementmethode, Erlangen 1989.

- C.A.Brebbia, J.C.F.Telles, L.C.Wrobel. Boundary elements techniques, Springer-Verlag, Berlin, New York, Tokyo 1984.
- 24. P.K.Banerjee, R.Butterfield, Boundary element methods in engineering science, McGraw-Hill Company, London, New York 1981.
- 25. E.Majchrzak, Zastosowanie metody elementów brzegowych w termodynamice procesów odlewniczych, Wyd. Pol. Śl., Mechanika, Nr 102, Gliwice 1991.
- 26. B. Mochnacki B., J. Suchy, Numerical methods in computations of foundry processes, Polish Foundrymen's Technical Association, Cracow 1995.
- 27. A. Piasecka, Modelowanie procesu krzepnięcia metali i stopów za pomocą metody elementów brzegowych, Praca doktorska, Gliwice 1996.

and an and the second s

Concerns they private the first state in such that the state in the

And a rest of the second se

Line office ways we wanted that the shade of the second se

3. PODSTAWY TEORETYCZNE METODY KOMBINOWANEJ

3.1. Sformułowanie zadania, dyskretyzacja, metoda odchyłek ważonych

Rozpatrywać będziemy problem brzegowo-początkowy dotyczący nieustalonej dyfuzji ciepła w obszarach zorientowanych w prostokątnym układzie współrzędnych opisany następującym układem równań i warunków

$$\mathbf{x} \in \Omega : \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = a \nabla^2 T(x, t) + \frac{Q(x, t)}{c}$$

$$\mathbf{x} \in \Gamma_t : T(x, t) = T_b(x, t)$$

$$\mathbf{x} \in \Gamma_2 : -\lambda \frac{\partial T(x, t)}{\partial n} = q_b(x, t) \qquad (3.1)$$

$$\mathbf{x} \in \Gamma_3 : -\lambda \frac{\partial T(x, t)}{\partial n} = \alpha [T(x, t) - T^*]$$

$$t = 0 : T(x, 0) = T_0(x)$$

gdzie $T_b(x, t)$, $q_b(x, t)$ są znanymi brzegowymi wartościami temperatur i strumieni ciepła, α jest współczynnikiem wymiany ciepła, T^{∞} – temperaturą otoczenia, $\partial T/\partial n$ – pochodną w kierunku normalnym do brzegu obszaru, $T_0(x)$ - temperaturą początkową, wyrażenie

$$\nabla^{2}(\cdot) = \sum_{e=1}^{m} \frac{\partial^{2}(\cdot)}{\partial x_{e}^{2}}$$
(3.2)

jest operatorem Laplace'a, natomiast m - wymiarem zagadnienia.

Do rozważań wprowadzamy siatkę czasu zdefiniowaną następująco

$$0 = t^{0} < t^{1} < \dots < t^{f-1} < t^{f} < t^{f+1} < \dots < t^{F} < \infty$$
(3.3)

o kroku $\Delta t = t^{f+1} - t^{f}$, który z reguły przyjmuje się jako stały.

Równanie różniczkowe dyfuzji ciepła na odcinku $[t^{f}, t^{f+1}]$ lub $[t^{f-1}, t^{f+1}]$ zastępuje się równaniem wynikającym z różnicowej aproksymacji pochodnej temperatury względem czasu [1, 2, 3], czyli

$$t \in [t^{f}, t^{f+1}]: \quad \frac{T(x, t^{f+1}) - T(x, t^{f})}{\Delta t} = a \nabla^2 T(x, t^{f+1}) + \frac{Q(x, t^{f+1})}{c} \quad (3.4)$$

lub

$$t \in [t^{f-1}, t^{f+1}]: \quad \frac{3T(x, t^{f+1}) - 4T(x, t^{f} + T(x, t^{f-1}))}{2\Delta t} = a \nabla^2 T(x, t^{f+1}) + \frac{Q(x, t^{f+1})}{c}$$
(3.5)

Równanie (3.4) wynika z liniowej aproksymacji szybkości stygnięcia (nagrzewania), natomiast równanie (3.5) z aproksymacji kwadratowej (można tu wykorzystać między innymi II wzór interpolacyjny Newtona [4, 5]). Jeżeli składnik źródłowy Q jest bezpośrednio funkcją współrzędnych geometrycznych i czasu, to jego wartość w chwili t^{f+1} w punkcie x jest znana. Jeżeli natomiast składnik ten jest zależny od chwilowej i lokalnej temperatury, to wyznaczenie jego wartości w chwili t^{f+1} wymagałoby zastosowania określonych procedur iteracyjnych. W związku z powyższym można rozważać aproksymację wyjściowego równania różniczkowego w nieco innej postaci wynikającej z przyjęcia, że w rozważanym przedziale czasu funkcja $Q(x, t) = Q(x, t^{f})$. Założenie to jest bardzo wygodne na etapie realizacji numerycznej, a równocześnie biorac pod uwagę gestą siatkę czasu nie wprowadza istotnych błędów.

Tak więc równania (3.4) oraz (3.5) zapiszemy w postaci

$$\nabla^2 T(x, t^{f+1}) - \frac{1}{a\Delta t} T(x, t^{f+1}) + \frac{1}{a\Delta t} T(x, t^f) + \frac{1}{\lambda} Q(x, t^f) = 0 \quad (3.6)$$

oraz

$$\nabla^2 T(x, t^{f+1}) - \frac{3}{2a\Delta t} T(x, t^{f+1}) + \frac{4}{2a\Delta t} T(x, t^f) + \frac{1}{2a\Delta t} T(x, t^{f-1}) + \frac{1}{\lambda} Q(x, t^f) = 0$$
(3.7)

Dla liniowej aproksymacji po czasie wprowadzamy następujące oznaczenie

$$= \frac{1}{a\Delta t}, \qquad f(x) = \frac{1}{a\Delta t}T(x, t^{f})$$
(3.8)

natomiast dla aproksymacji kwadratowej

$$\beta = \frac{3}{2a\Delta t}, \qquad f(x) = \frac{1}{2a\Delta t} [4T(x, t^{f}) - T(x, t^{f-1})] \qquad (3.9)$$

Ostatecznie otrzymujemy zunifikowaną postać równań (3.6) oraz (3.7)

$$\nabla^2 T(x, t^{f+1}) - \beta T(x, t^{f+1}) + f(x) + \frac{Q(x, t^f)}{\lambda} = 0 \qquad (3.10)$$

Omówiony wyżej sposób przekształcania wyjściowego równania różniczkowego jest w swojej istocie podobny do algorytmu metody różnic skończonych dla zadań nieustalonych.

Drugi etap metody polega na zastosowaniu do równania (3.10) kryterium odchyłek ważonych (weighted residual method) [2, 3, 6], czyli

$$\int_{\Omega} \left[\nabla^2 T(x, t^{f+1}) - \beta T(x, t^{f+1}) + f(x) + \frac{Q(x, t^f)}{\lambda} \right] T^*(\xi, x) d\Omega = 0 \quad (3.11)$$

Rolę funkcji wagi spełnia tutaj tzw. rozwiązanie fundamentalne $T^*(\xi, x)$, gdzie ξ jest punktem obserwacji, natomiast x bieżącym punktem z obszaru Ω . Bardzo istotnym faktem jest zależność tego rozwiązania jedynie od współrzędnych geometrycznych, a co się z tym wiąże, całkowanie wynikające z kryterium MOW sprowadza się do całkowania wyłącznie po obszarze Ω. W klasycznym wariancie metody elementów brzegowych całkuje się w tym miejscu zarówno po obszarze, jak i po czasie.

Rozwiązanie fundamentalne musi spełniać następujące równanie

$$\nabla^2 T^*(\xi, x) - \beta T^*(\xi, x) = -\delta(\xi, x)$$
(3.12)

gdzie $\delta(\xi, x)$ jest funkcją delta Diraca.

Dla zadania 1D (płyta nieskończona) rozwiązaniem fundamentalnym jest funkcja [1, 3]

$$T^{*}(\xi, x) = \frac{1}{2\sqrt{\beta}} \exp\left(-r\sqrt{\beta}\right)$$
(3.13)

natomiast strumień ciepła wynikający z (3.13):

$$q^{*}(\xi, x) = -\lambda \frac{\partial T^{*}(\xi, x)}{\partial x} = \frac{\lambda \operatorname{sgn}(x - \xi)}{2} \exp\left(-r\sqrt{\beta}\right)$$
(3.14)

gdzie sgn $(x-\xi)$ jest funkcją znaku

$$\operatorname{sgn}(x-\xi) = \begin{cases} 1, & x-\xi > 0 \\ -1, & x-\xi < 0 \end{cases}$$
(3.15)

Dla zadania 2D (obszar płaski) mamy z kolei [2, 3]

 T^*

$$(\xi, x) = \frac{1}{2\pi} \operatorname{K}_{0}(r\sqrt{\beta}) \qquad (3.16)$$

oraz

$$q^{*}(\xi, x) = -\lambda \frac{\partial T^{*}(\xi, x)}{\partial n} = \frac{\lambda d\sqrt{\beta}}{2\pi r} K_{1}(r\sqrt{\beta})$$
(3.17)

gdzie $\xi = (\xi_1, \xi_2), x = (x_1, x_2), K_0(\cdot), K_1(\cdot)$ są zmodyfikowanymi funkcjami Bessela drugiego rodzaju, rzędu zerowego i pierwszego [7, 8] odpowiednio.

Dla zadania 3D (obszar przestrzenny) [2, 3]:

$$*(\xi, x) = \frac{1}{4\pi r} \exp(-r\sqrt{\beta})$$
(3.18)

natomiast

$$q^{*}(\xi, x) = \frac{\lambda d}{4\pi r^{2}} \exp(-r\sqrt{\beta}) \left(\frac{1}{r} + \sqrt{\beta}\right)$$
(3.19)

przy czym $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3), x = (x_1, x_2, x_3).$ W równaniach (3.13)-(3.19) wprowadzono następujące oznaczenia

r

T

$$= \sqrt{\sum_{e=1}^{m} (x_e - \xi_e)^2}$$
(3.20)

$$d = \sum_{e=1}^{m} (x_e - \xi_e) \cos \alpha_e$$
(3.21)

gdzie $\cos\alpha$, są cosinusami kierunkowymi wektora normalnego do brzegu Γ - rys. 3.1.





3.2. Metoda kombinowana dla zadania 1D

oraz

Kryterium metody odchyłek ważonych (3.11) dla zadania 1D przyjmuje postać

$$\int_{0}^{L} \left[\frac{\partial^2 T(x, t^{f+1})}{\partial x^2} - \beta T(x, t^{f+1}) + f(x) + \frac{Q(x, t^f)}{\lambda} \right] T^*(\xi, x) \, dx = 0 \quad (3.22)$$

Całkując dwukrotnie przez części pierwszy składnik tego równania mamy

$$\left[\frac{1}{\lambda}q^{*}(\xi, x)T(x, t^{f+1}) - \frac{1}{\lambda}T^{*}(\xi, x)q(x, t^{f+1})\right]_{x=0}^{x=L} + \int_{0}^{L} \left[\frac{\partial^{2}T^{*}(\xi, x)}{\partial x^{2}} - \beta T^{*}(\xi, x)\right]T(x, t^{f+1})dx + \int_{0}^{L} f(x)T^{*}(\xi, x)dx + (3.23) + \frac{1}{\lambda}\int_{0}^{L} Q(x, t^{f})T^{*}(\xi, x)dx = 0$$

Wykorzystanie własności rozwiązania fundamentalnego (3.12) oraz twierdzenia o całce z

iloczynu dwóch funkcji, z których jedna jest deltą Diraca, to znaczy

$$\int_{0}^{L} \left[\frac{\partial^{2} T^{*}(\xi, x)}{\partial x^{2}} - \beta T^{*}(\xi, x) \right] T(x, t^{f+1}) dx =$$

$$= -\int_{0}^{L} \delta(\xi, x) T(x, t^{f+1}) dx = -T(\xi, t^{f+1})$$
(3.24)

prowadzi do równania

$$T(\xi, t^{f+1}) + \left[\frac{1}{\lambda}T^{*}(\xi, x)q(x, t^{f+1})\right]_{x=0}^{x=L} =$$

$$= \left[\frac{1}{\lambda}q^{*}(\xi, x)T(x, t^{f+1})\right]_{x=0}^{x=L} + \int_{0}^{L}f(x)T^{*}(\xi, x)dx + \frac{1}{\lambda}\int_{0}^{L}Q(x, t^{f})T^{*}(\xi, x)dx$$
(3.25)

lub

$$T(\xi, t^{f+1}) + \frac{1}{\lambda} T^{*}(\xi, L)q(L, t^{f+1}) - \frac{1}{\lambda} T^{*}(\xi, 0)q(0, t^{f+1}) =$$

$$= \frac{1}{\lambda} q^{*}(\xi, L)T(L, t^{f+1}) - \frac{1}{\lambda} q^{*}(\xi, 0)T(0, t^{f+1}) + p(\xi) + z(\xi)$$
(3.26)

gdzie

$$p(\xi) = \int f(x) T^{*}(\xi, x) dx$$
 (3.27)

oraz

$$z(\xi) = \frac{1}{\lambda} \int_{0}^{L} Q(x, t^{f}) T^{*}(\xi, x) dx \qquad (3.28)$$

Zmierzając z punktem ξ do brzegu obszaru, tzn. biorąc $\xi \rightarrow 0^+$ oraz $\xi \rightarrow L^-$ otrzymujemy

$$T(0, t^{f+1}) + \frac{1}{\lambda}T^{*}(0, L)q(L, t^{f+1}) - \frac{1}{\lambda}T^{*}(0, 0)q(0, t^{f+1}) =$$

$$= \frac{1}{\lambda}q^{*}(0^{*}, L)T(L, t^{f+1}) - \frac{1}{\lambda}q^{*}(0^{*}, 0)T(0, t^{f+1}) + p(0) + z(0)$$
(3.29)

oraz

$$T(L, t^{f+1}) + \frac{1}{\lambda}T^{*}(L, L)q(L, t^{f+1}) - \frac{1}{\lambda}T^{*}(L, 0)q(0, t^{f+1}) =$$

$$= \frac{1}{\lambda}q^{*}(L^{-}, L)T(L, t^{f+1}) - \frac{1}{\lambda}q^{*}(L^{-}, 0)T(0, t^{f+1}) + p(L) + z(L)$$
(3.30)

Ostatnie równania można zapisać w postaci macierzowej

$$\begin{vmatrix} -\frac{1}{\lambda}T^{*}(0, 0) & \frac{1}{\lambda}T^{*}(0, L) \\ -\frac{1}{\lambda}T^{*}(L, 0) & \frac{1}{\lambda}T^{*}(L, L) \end{vmatrix} \begin{vmatrix} q(0, t^{f+1}) \\ q(L, t^{f+1}) \end{vmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} -\frac{1}{\lambda}q^{*}(0^{*}, 0) - 1 & \frac{1}{\lambda}q^{*}(0^{*}, L) \\ -\frac{1}{\lambda}q^{*}(L^{-}, 0) & \frac{1}{\lambda}q^{*}(L^{-}, L) - 1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} T(0, t^{f+1}) \\ T(L, t^{f+1}) \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} p(0) \\ p(L) \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} z(0) \\ z(L) \end{vmatrix}$$
(3.31)

lub

$$\begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q(0, t^{f+1}) \\ q(L, t^{f+1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T(0, t^{f+1}) \\ T(L, t^{f+1}) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix}$$
(3.32)

Po rozwiązaniu układu równań (3.32) znane są wszystkie wartości brzegowe (temperatury i strumienie ciepła dla x=0 oraz x=L w chwili t^{f+1}). Wartości temperatur w wewnętrznych punktach obszaru dla $\xi \in (0, L)$ wyznacza się na podstawie równania (por. wzór (3.26))

$$T(\xi, t^{f+1}) = \frac{1}{\lambda} q^{*}(\xi, L) T(L, t^{f+1}) - \frac{1}{\lambda} q^{*}(\xi, 0) T(0, t^{f+1}) + \frac{1}{\lambda} T^{*}(\xi, L) q(L, t^{f+1}) + \frac{1}{\lambda} T^{*}(\xi, 0) q(0, t^{f+1}) + p(\xi) + z(\xi)$$
(3.33)

Zastosowanie schematu rzędu wyższego wymaga znajomości pola temperatury z dwóch poprzednich poziomów czasu. W związku z powyższym pierwsze przejście $t^0 \rightarrow t^1$ realizuje się przy założeniu liniowej aproksymacji szybkości stygnięcia (nagrzewania), a dopiero kolejne kroki $t^1 \rightarrow t^2$, ..., $t^f \rightarrow t^{f+1}$ można przeliczać wykorzystując aproksymację kwadratową.

Realizacja numeryczna omawianego zadania zależy od sposobu aproksymacji funkcji T(x, t) w obszarze Ω . Wnętrze tego obszaru dzieli się na elementy skończone (j) wprowadzając siatkę geometryczną

$$0 = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{j-1} < x_j < x_{j+1} < \dots < x_n = L$$
(3.34)

najczęściej o stałym kroku $h^{(j)} = x_j - x_{j-1} = h$.

Na wyróżnionych elementach stosuje się różnego rodzaju aproksymację funkcji T(x, t). Rozważa się między innymi elementy stałe, liniowe lub kwadratowe. W przypadku elementów stałych - rys. 3.2 - przyjmuje się, że dła $x \in [x_{j-1}, x_j]$: $T(x, t^s) = \text{const}, s = f \text{ lub } s = f-1, f$. Przy powyższym założeniu całkę $p(\xi)$ określa zależność

$$p(\xi) = \sum_{j=1}^{n} \int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x) T^*(\xi, x) dx = \sum_{j=1}^{n} f\left(\frac{x_{j-1} + x_j}{2}\right) \int_{x_{j-1}}^{x_j} T^*(\xi, x) dx \quad (3.35)$$

Przyjęcie argumentu $0.5(x_{j-1}+x_j)$ dla funkcji f ma znaczenie formalne, ponieważ wartość tej funkcji na całym elemencie jest taka sama. Ze względu na prostą postać rozwiązania fundamentalnego całki po kolejnych elementach można w tym przypadku obliczyć analitycznie.



Rys. 3.2. Podział na elementy stałe Fig. 3.2. Division into constant elements

Na rys. 3.3 pokazano elementy liniowe - taki sposób aproksymacji funkcji $T(x, t^{s})$ jest z całą pewnością dokładniejszy, funkcja $T(x, t^{s})$ jest ciągła w obszarze Ω .





Wartość $p(\xi)$ oblicza się z zależności

x

$$p(\xi) = \sum_{j=1}^{n} \int_{x_{j-1}}^{x_{j}} f(x) T^{*}(\xi, x) dx \qquad (3.36)$$

przy czym całki po kolejnych elementach sprowadza się za pomocą podstawienia

$$\in [x_{j-1}, x_j]$$
: $x = \frac{1-\eta}{2} x_{j-1} + \frac{1+\eta}{2} x_j$ (3.37)

do całek znormalizowanych $\eta \in [-1, 1]$, natomiast funkcja f(x) na elemencie (j) przyjmuje postać

$$\eta \in [-1, 1]: \quad f(\eta) = \frac{1-\eta}{2} f(x_{j-1}) + \frac{1+\eta}{2} f(x_j)$$
(3.38)

czyli

$$\int_{\frac{x_{j}}{2}-1}^{x_{j}} f(x) T^{*}(\xi, x) dx = \frac{h}{2} \int_{-1}^{1} f(\eta) T^{*}(\xi, \eta) d\eta$$
(3.39)

Wartości całek (3.39) oblicza się metodami numerycznymi (kwadraturami Gaussa). W praktyce przyjmuje się najczęściej 6 punktów Gaussa [2, 4].

W realizacji numerycznej można również wykorzystać kwadratową aproksymację temperatury na elemencie wewnętrznym $x \in [x_p, x_k]$ - rys. 3.4. Podobnie jak poprzednio, całkę (3.27) zastępujemy sumą całek po elementach, czyli

$$p(\xi) = \sum_{(j)} \int_{(j)} f(x) T^{*}(\xi, x) dx \qquad (3.40)$$

Ze względu na sposób aproksymacji temperatury na elemencie (j) wprowadza się dodatkowo węzeł w środku tego elementu, który oznaczono x_r .



Rys. 3.4. Wyróżniony element kwadratowy Fig. 3.4. Distinguished parabolic element

Przedział $[x_n, x_k]$ normalizuje się do przedziału [-1, 1] przez podstawienie

$$x \in [x_p, x_k]$$
: $x = \frac{1-\eta}{2} x_p + \frac{1+\eta}{2} x_k$ (3.41)

Rozkład funkcji f(x) dla $x \in [x_p, x_k]$ można wyrazić za pomocą zmiennej $\eta \in [-1, 1]$, a mianowicie

$$f(\eta) = \frac{\eta(\eta-1)}{2}f(x_p) + (1-\eta)(1+\eta)f(x_s) + \frac{\eta(\eta+1)}{2}f(x_k)$$
(3.42)

skąd

$$\int_{(1)} f(x) T^*(\xi, x) dx = \frac{h}{2} \int_{-1}^{1} f(\eta) T^*(\xi, \eta) d\eta$$
(3.43)

Kolejny etap obliczenia tych całek polega na zastosowaniu kwadratur Gaussa [2, 3, 4].

3.3. Metoda kombinowana dla zadań 2D

Kryterium metody odchyłek ważonych (3.11) zapiszemy w postaci

$$\int_{\Omega} \nabla^2 T(x, t^{f^{*1}}) T^*(\xi, x) d\Omega - \int_{\Omega} \beta T(x, t^{f^{*1}}) T^*(\xi, x) d\Omega +$$

$$+ \int_{\Omega} f(x) T^*(\xi, x) d\Omega + \frac{1}{\lambda} \int_{\Omega} Q(x, t^f) T^*(\xi, x) d\Omega = 0$$
(3.44)

Stosując do pierwszego składnika tego wzoru drugą formułę Greena [6, 9] otrzymuje się $\int_{\Omega} \nabla^2 T^*(\xi, x) T(x, t^{f+1}) d\Omega + \int_{\Gamma} \left[T^*(\xi, x) \frac{\partial T(x, t^{f+1})}{\partial n} - T(x, t^{f+1}) \frac{\partial T^*(\xi, x)}{\partial n} \right] d\Gamma + \int_{\Omega} \beta T(x, t^{f+1}) T^*(\xi, x) d\Omega + \int_{\Omega} f(x) T^*(\xi, x) d\Omega + \frac{1}{\lambda} \int_{\Omega} Q(x, t^f) T^*(\xi, x) d\Omega = 0$ (3.45)

czyli

$$\int_{\Omega} \left[\nabla^2 T^*(\xi, x) - \beta T^*(\xi, x) \right] T(x, t^{f+1}) d\Omega - \frac{1}{\lambda} \int_{\Gamma} T^*(\xi, x) q(x, t^{f+1}) d\Gamma + \frac{1}{\lambda} \int_{\Gamma} q^*(\xi, x) T(x, t^{f+1}) d\Gamma + \int_{\Omega} f(x) T^*(\xi, x) d\Omega + \frac{1}{\lambda} \int_{\Omega} Q(x, t^f) T^*(\xi, x) d\Omega = 0$$
(3.46)

Wykorzystując własność (3.12) rozwiązania fundamentalnego oraz twierdzenie o całce z iloczynu dwóch funkcji, z których jedna jest deltą Diraca, mamy

$$T(\xi, t^{f+1}) + \frac{1}{\lambda} \int_{\Gamma} T^{*}(\xi, x) q(x, t^{f+1}) d\Gamma =$$

$$= \frac{1}{\lambda} \int_{\Gamma} T(x, t^{f+1}) q^{*}(\xi, x) d\Gamma + \int_{\Omega} f(x) T^{*}(\xi, x) d\Omega + \frac{1}{\lambda} \int_{\Omega} Q(x, t^{f}) T^{*}(\xi, x) d\Omega$$
(3.47)

Zmierzając z punktem $\xi \rightarrow \Gamma$ otrzymuje się brzegowe równanie całkowe w postaci

$$B(\xi)T(\xi, t^{f+1}) + \frac{1}{\lambda} \int_{\Gamma} T^{*}(\xi, x)q(x, t^{f+1})d\Gamma =$$

$$= \frac{1}{\lambda} \int_{\Gamma} T(x, t^{f+1})q^{*}(\xi, x)d\Gamma + \int_{\Omega} f(x)T^{*}(\xi, x)d\Omega + \frac{1}{\lambda} \int_{\Omega} Q(x, t^{f})T^{*}(\xi, x)d\Omega$$
(3.48)

gdzie $B(\xi)$ jest współczynnikiem z przedziału (0, 1).

Równanie (3.48) można rozwiązać w sposób przybliżony. W tym celu należy dokonać dyskretyzacji brzegu Γ oraz wnętrza obszaru Ω . Brzeg obszaru Γ dzieli się na N elementów brzegowych Γ_j , j=1, ..., N, mogą być to elementy stałe - rys. 3.5, liniowe lub kwadratowe, co oznacza założenie stałych wartości temperatur i strumieni ciepła dla każdego elementu brzegowego, liniowych lub parabolicznych zmian tych funkcji wzdłuż elementów. Wnętrze obszaru Ω dzieli się na L elementów wewnętrznych (najczęściej trójkątnych lub czworokątnych) Ω_i , l=1, 2, ..., L. Podobnie jak w przypadku elementów brzegowych, można rozpatrywać elementy stałe, liniowe lub kwadratowe.



Rys. 3.5. Stale elementy brzegowe i wewnętrzne Fig. 3.5. Constant boundary and internal elements

Dyskretna postać równania (3.48) jest następująca

$$B(\xi^{i})T(\xi^{i}, t^{f+1}) + \frac{1}{\lambda} \sum_{j=1}^{N} \int_{\Gamma_{j}} T^{*}(\xi^{i}, x)q(x, t^{f+1})d\Gamma_{j} =$$

$$= \frac{1}{\lambda} \sum_{j=1}^{N} \int_{\Gamma_{j}} q^{*}(\xi^{i}, x)T(x, t^{f+1})d\Gamma_{j} + \sum_{l=1}^{L} \int_{\Omega_{l}} f(x)T^{*}(\xi^{i}, x)d\Omega_{l} + (3.49)$$

$$+ \frac{1}{\lambda} \sum_{l=1}^{L} \int_{\Omega_{l}} Q(x, t^{f})T^{*}(\xi, x)d\Omega_{l}$$

W przypadku stałych elementów brzegowych i wewnętrznych zakładamy, że

 $x \in \Gamma_i$:

$$\begin{cases} T(x, t^{f+1}) = T(x^{j}, t^{f+1}) \\ q(x, t^{f+1}) = q(x^{j}, t^{f+1}) \end{cases}$$
(3.50)

oraz

 $x \in \Omega_l$: $f(x) = f(x^l)$

Równanie (3.49) sprowadza się do postaci

$$\frac{1}{2}T(\xi^{i}, t^{f+1}) + \frac{1}{\lambda} \sum_{j=1}^{N} q(x^{j}, t^{f+1}) \int_{\Gamma_{j}} T^{*}(\xi^{i}, x) d\Gamma_{j} =$$

$$= \frac{1}{\lambda} \sum_{j=1}^{N} T(x^{j}, t^{f+1}) \int_{\Gamma_{j}} q^{*}(\xi^{i}, x) d\Gamma_{j} + \sum_{l=1}^{L} f(x^{l}) \int_{\Omega_{l}} T^{*}(\xi^{i}, x) d\Omega_{l} + (3.52)$$

$$+ \frac{1}{\lambda} \sum_{l=1}^{L} Q(x^{l}, t^{f}) \int_{\Omega_{l}} T^{*}(\xi^{i}, x) d\Omega_{l}$$

a po wprowadzeniu następujących oznaczeń

$$g_{ij} = \frac{1}{\lambda} \int_{\Gamma_j} T^*(\xi^i, x) d\Gamma_j$$
(3.53)

$$\hat{h}_{ij} = \frac{1}{\lambda} \int_{\Gamma_j} q^* (\xi^i, x) d\Gamma_j$$
(3.54)

$$p_{il} = \int_{\Omega_i} T^*(\xi^i, x) \mathrm{d}\Omega_l$$
(3.55)

mamy (i=1, 2, ..., N)

$$\sum_{j=1}^{N} g_{ij} q(x^{j}, t^{f+1}) = \sum_{j=1}^{N} h_{ij} T(x^{j}, t^{f+1}) + \sum_{l=1}^{L} p_{il} f(x^{l}) + \sum_{l=1}^{l} z_{il} Q(x^{l}, t^{f}) \quad (3.56)$$

przy czym $z_{il} = p_{il} / \lambda$ oraz

$$h_{ij} = \begin{cases} \hat{h}_{ij}, & i \neq j \\ -\frac{1}{2}, & i = j \end{cases}$$
(3.57)

Stosując zapis macierzowy

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{q}^{f+1} = \mathbf{H} \cdot \mathbf{T}^{f+1} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{f}^f + \mathbf{Z} \cdot \mathbf{Q}^f$$
(3.58)

Układ równań (3.58) pozwala wyznaczyć "brakujące" wartości brzegowe (temperatury i strumienie ciepła) w chwili t^{f+1} .

W drugim kroku realizacji algorytmu wyznacza się wartości temperatur w węzłach wewnętrznych ξ^i (i=N+1, N+2, ..., N+L) wykorzystując zależność

$$T(\xi^{i}, t^{f+1}) = \sum_{j=1}^{N} h_{ij} T(x^{j}, t^{f+1}) - \sum_{j=1}^{N} g_{ij} q(x^{j}, t^{f+1}) + \sum_{l=1}^{L} p_{il} f(x^{l}) + \sum_{l=1}^{L} z_{il} Q(x^{l}, t^{f})$$
(3.59)

Otrzymany dla czasu t^{f+1} rozkład temperatury w rozpatrywanych węzłach stanowi warunek pseudopoczątkowy dla następnego kroku obliczeń.

W realizacji numerycznej algorytmu można stosować również liniowe elementy wewnętrzne i brzegowe - rys. 3.5, które zapewniają lepszą aproksymację całek występujących w równaniu (3.49).





Zmienność temperatury i strumienia ciepła na elemencie brzegowym opisuje się funkcją liniową

$$x \in \Gamma_j: \begin{cases} T(x, t^{f+1}) = \frac{1-\eta}{2} T(x^p, t^{f+1}) + \frac{1+\eta}{2} T(x^k, t^{f+1}) \\ q(x, t^{f+1}) = \frac{1-\eta}{2} q(x^p, t^{f+1}) + \frac{1+\eta}{2} q(x^k, t^{f+1}) \end{cases} (3.60)$$

gdzie $\eta \equiv [-1, 1], x^p, x^k$ są współrzędnymi początku i końca elementu Γ_j - rys. 3.7. Całki we wzorze (3.49) zapiszemy w postaci

$$\frac{1}{\lambda} \int_{\Gamma_i} q^*(\xi^i, x) T(x, t^{f+1}) d\Gamma_j = h_{ij}^p T(x^p, t^{f+1}) + h_{ij}^k T(x^k, t^{f+1})$$
(3.61)

$$\frac{1}{\lambda} \int_{\Gamma_j} T^*(\xi^i, x) q(x, t^{f+1}) d\Gamma_j = g_{ij}^p q(x^p, t^{f+1}) + g_{ij}^k q(x^k, t^{f+1})$$
(3.62)

33

$$h_{ij}^{p} = \frac{l}{2\lambda} \int_{-1}^{1} \frac{1-\eta}{2} q^{+} \left(\xi_{1}^{i}, \xi_{2}^{i}, \frac{1-\eta}{2}x_{1}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{1}^{k}, \frac{1-\eta}{2}x_{2}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{2}^{k}\right) d\eta \quad (3.63)$$

$$h_{ij}^{k} = \frac{l}{2\lambda} \int_{-1}^{1} \frac{1+\eta}{2} q^{+} \left(\xi_{1}^{i}, \xi_{2}^{i}, \frac{1-\eta}{2}x_{1}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{1}^{k}, \frac{1-\eta}{2}x_{2}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{2}^{k}\right) d\eta \quad (3.64)$$
oraz
$$g_{ij}^{p} = \frac{l}{2\lambda} \int_{-1}^{1} \frac{1-\eta}{2} T^{*} \left(\xi_{1}^{i}, \xi_{2}^{i}, \frac{1-\eta}{2}x_{1}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{1}^{k}, \frac{1-\eta}{2}x_{2}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{2}^{k}\right) d\eta \quad (3.65)$$

$$g_{ij}^{k} = \frac{l}{2\lambda} \int_{-1}^{1} \frac{1+\eta}{2} T^{*} \left(\xi_{1}^{i}, \xi_{2}^{i}, \frac{1-\eta}{2}x_{1}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{1}^{k}, \frac{1-\eta}{2}x_{2}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{2}^{k}\right) d\eta \quad (3.66)$$

$$\frac{x_{2}}{y_{1j}^{p}} = \frac{l}{2\lambda} \int_{-1}^{1} \frac{1+\eta}{2} T^{*} \left(\xi_{1}^{i}, \xi_{2}^{i}, \frac{1-\eta}{2}x_{1}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{1}^{k}, \frac{1-\eta}{2}x_{2}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{2}^{k}\right) d\eta \quad (3.66)$$

$$\frac{x_{2}}{y_{1j}^{p}} = \frac{l}{2\lambda} \int_{-1}^{1} \frac{1+\eta}{2} T^{*} \left(\xi_{1}^{i}, \xi_{2}^{i}, \frac{1-\eta}{2}x_{1}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{1}^{k}, \frac{1-\eta}{2}x_{2}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{2}^{k}\right) d\eta \quad (3.66)$$

$$\frac{x_{2}}{y_{1j}^{p}} = \frac{l}{y_{1j}^{p}} \int_{-1}^{1} \frac{1+\eta}{2} T^{*} \left(\xi_{1}^{i}, \xi_{2}^{i}, \frac{1-\eta}{2}x_{1}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{1}^{k}, \frac{1-\eta}{2}x_{2}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{2}^{k}\right) d\eta \quad (3.66)$$

$$\frac{x_{2}}{y_{2}^{p}} = \frac{l}{y_{2}^{p}} \int_{-1}^{1} \frac{1+\eta}{2} T^{*} \left(\xi_{1}^{i}, \xi_{2}^{i}, \frac{1-\eta}{2}x_{1}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{1}^{k}, \frac{1-\eta}{2}x_{2}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{2}^{k}\right) d\eta \quad (3.66)$$

$$\frac{x_{2}}{y_{2}^{p}} = \frac{l}{y_{2}^{p}} \int_{-1}^{1} \frac{1+\eta}{2} T^{*} \left(\xi_{1}^{i}, \xi_{2}^{i}, \frac{1-\eta}{2}x_{1}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{1}^{k}, \frac{1-\eta}{2}x_{2}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{2}^{k}\right) d\eta \quad (3.66)$$

$$\frac{x_{2}}{y_{2}} = \frac{1-\eta}{y_{2}^{p}} \int_{-1}^{1} \frac{1+\eta}{2} T^{*} \left(\xi_{1}^{i}, \xi_{2}^{i}, \frac{1-\eta}{2}x_{1}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{1}^{k}\right) d\eta \quad (3.66)$$

$$\frac{x_{2}}{y_{2}} = \frac{1-\eta}{y_{2}} \int_{-1}^{1} \frac{1+\eta}{2} T^{*} \int_{-1}^{1} \frac{1+\eta}{2} T^{*} \int_{-1}^{1} \frac{1-\eta}{2} T^{*} \int_{-1}^{1} \frac{1-\eta}{2} T^{*} \int_{-1}^{1} \frac{1+\eta}{2} T^{*} \int_{-1}^{1} \frac{1+\eta}{2}$$

W ostatnich zależnościach wykorzystano równanie parametryczne elementu brzegowego

$$x \in \Gamma_j: \begin{cases} x_1 = \frac{1-\eta}{2} x_1^p + \frac{1+\eta}{2} x_1^k \\ x_2 = \frac{1-\eta}{2} x_2^p + \frac{1+\eta}{2} x_2^k \end{cases}$$
(3.67)

dla którego element długości wyraża się wzorem

$$d\Gamma_{j} = \sqrt{\left(\frac{dx_{1}}{d\eta}\right)^{2} + \left(\frac{dx_{2}}{d\eta}\right)^{2}} d\eta = \frac{l}{2} d\eta \qquad (3.68)$$

W równaniu (3.68) l jest długością elementu Γ_i .

Zakładając triangulację wnętrza obszaru (podział tego obszaru na liniowe elementy trójkątne - rys. 3.6), to zmianę funkcji $T(x, t^s)$ (s=f lub s=f, f+1) na elemencie Ω_t opisuje równanie

 $\begin{vmatrix} T & x_1 & x_2 & 1 \\ T_p & x_1^p & x_2^p & 1 \\ T_s & x_1^s & x_2^s & 1 \\ T_k & x_1^k & x_2^k & 1 \end{vmatrix} = 0$ (3.69)

gdzie wskaźniki p, s, k identyfikują kolejne wierzchołki trójkąta (elementu wewnętrznego). Ostatnią zależność można również zapisać następująco

$$T(x_{1}, x_{2}, t^{s}) = \frac{1}{2|\Omega_{l}|} \begin{pmatrix} x_{1} & x_{2} & 1 \\ x_{1}^{s} & x_{2}^{s} & 1 \\ x_{1}^{k} & x_{2}^{k} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1} & x_{2} & 1 \\ x_{1}^{k} & x_{2}^{k} & 1 \\ x_{1}^{p} & x_{2}^{p} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1} & x_{2} & 1 \\ x_{1}^{p} & x_{2}^{p} & 1 \\ x_{1}^{s} & x_{2}^{p} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1} & x_{2} & 1 \\ x_{1}^{p} & x_{2}^{p} & 1 \\ x_{1}^{s} & x_{2}^{s} & 1 \end{pmatrix} (3.70)$$

gdzie $|\Omega_l|$ jest polem rozważanego trójkąta.

Dla elementów liniowych równanie (3.49) przyjmuje postać (i=1, 2, ..., N)

$$\sum_{j=1}^{N} g_{ij} q(x^{j}, t^{f+1}) = \sum_{j=1}^{N} h_{ij} T(x^{j}, t^{f+1}) + \sum_{l=1}^{L} p_{ll} + \sum_{l=1}^{L} z_{il}$$
(3.71)

gdzie

 $g_{ij} = g_{i,j-1}^{k} + g_{ij}^{p} \tag{3.72}$

oraz

$$h_{ii} = h_{i,i-1}^{k} + h_{ij}^{p} \tag{3.73}$$

przy czym j jest numerem węzła brzegowego.

Wartości p_{il} oraz z_{il} we wzorze (3.71) oblicza się z następujących zależności

$$p_{il} = \int_{\Omega_i} f(x) T^*(\xi^i, x) d\Omega_l$$
 (3.74)

oraz

$$z_{il} = \int_{\Omega_{i}} Q(x, t^{f}) T^{*}(\xi^{i}, x) d\Omega_{l}$$
(3.75)

Po wyznaczeniu wartości brzegowych, temperatury w węzłach wewnętrznych dla czasu t^{f+1} oblicza się z zależności

$$T(\xi^{i}, t^{f+1}) = -\sum_{j=1}^{N} g_{ij}q(x^{j}, t^{f+1}) + \sum_{j=1}^{N} h_{ij}T(x^{j}, t^{f+1}) + \sum_{l=1}^{L} p_{il} + \sum_{l=1}^{L} z_{il}$$
(3.76)

 $i=k_1, k_1+1, \ldots, k_2$, gdzie k_1 jest numerem piewszego, a k_2 - ostatniego węzła wewnętrznego.

Dla zwiększenia dokładności rozwiązania przybliżonego można również wykorzystać elementy wyższego rzędu - np. kwadratowe - rys. 3.8. Na elemencie brzegowym wyróżnia się trzy węzły (dwa na końcach i jeden w środku). Rozkład temperatury i strumienia ciepła przyjmuje się w postaci funkcji kwadratowej, czyli dla $x \in \Gamma_i$:

$$\begin{cases} T(x, t^{f+1}) = \frac{\eta(\eta - 1)}{2} T(x^{p}, t^{f+1}) + (1 + \eta)(1 - \eta) T(x^{s}, t^{f+1}) + \frac{\eta(\eta + 1)}{2} T(x^{k}, t^{f+1}) \\ q(x, t^{f+1}) = \frac{\eta(\eta - 1)}{2} q(x^{p}, t^{f+1}) + (1 + \eta)(1 - \eta)q(x^{s}, t^{f+1}) + \frac{\eta(\eta + 1)}{2} q(x^{k}, t^{f+1}) \end{cases}$$
(3.77)

gdzie $\eta = [-1, 1], x^p, x^s, x^k$ są współrzędnymi początku, środka i końca elementu Γ_j – rys. 4.19.





Równanie parametryczne kwadratowego elementu brzegowego jest następujące

$$x \in \Gamma_{j}: \begin{cases} x_{1} = \frac{\eta(\eta-1)}{2} x_{1}^{p} + (1+\eta)(1-\eta)x_{1}^{s} + \frac{\eta(\eta+1)}{2} x_{1}^{k} \\ x_{2} = \frac{\eta(\eta-1)}{2} x_{2}^{p} + (1+\eta)(1-\eta)x_{2}^{s} + \frac{\eta(\eta+1)}{2} x_{2}^{k} \end{cases}$$
(3.78)

natomiast

$$d\Gamma_{j} = \sqrt{\left(\frac{dx_{1}}{d\eta}\right)^{2} + \left(\frac{dx_{2}}{d\eta}\right)^{2}} d\eta$$
(3.79)



Fig. 3.9. Parabolic element

Dla prostoliniowych elementów parabolicznych (rys. 3.9) zależność (3.78) jest taka sama jak wzór (3.67) oraz $d\Gamma_j = l/2d\eta$, gdzie *l* jest długością elementu i wtedy całki występujące w zależności (3.49) przyjmują postać

37

$$\frac{1}{\lambda} \int_{\Gamma_{j}} q^{*}(\xi^{i}, x) T(x, t^{f+1}) d\Gamma_{j} = h_{ij}^{p} T(x^{p}, t^{f+1}) + h_{ij}^{s} T(x^{s}, t^{f+1}) + h_{ij}^{k} T(x^{k}, t^{f+1})$$
(3.80)

oraz

$$\frac{1}{\lambda} \int_{\Gamma_i} T^*(\xi^i, x) q(x, t^{f+1}) d\Gamma_j = g_{ij}^p q(x^p, t^{f+1}) + g_{ij}^s q(x^s, t^{f+1}) + g_{ij}^k q(x^k, t^{f+1})$$
(3.81)

gdzie

$$h_{ij}^{p} = \frac{l}{2\lambda} \int_{-1}^{1} \frac{\eta(\eta-1)}{2} q^{*} \left(\xi_{1}^{i}, \xi_{2}^{i}, \frac{1-\eta}{2} x_{1}^{p} + \frac{1+\eta}{2} x_{1}^{k}, \frac{1-\eta}{2} x_{2}^{p} + \frac{1+\eta}{2} x_{2}^{k} \right] d\eta$$
(3.82)

$$h_{ij}^{s} = \frac{l}{2\lambda} \int_{-1}^{1} (1+\eta)(1-\eta) q^{*} \left(\xi_{1}^{i}, \xi_{2}^{i}, \frac{1-\eta}{2} x_{1}^{p} + \frac{1+\eta}{2} x_{1}^{k}, \frac{1-\eta}{2} x_{2}^{p} + \frac{1+\eta}{2} x_{2}^{k} \right] d\eta$$
(3.83)

$$h_{ij}^{k} = \frac{l}{2\lambda} \int_{-1}^{1} \frac{\eta(\eta+1)}{2} q^{*} \left(\xi_{1}^{i}, \xi_{2}^{i}, \frac{1-\eta}{2} x_{1}^{p} + \frac{1+\eta}{2} x_{1}^{k}, \frac{1-\eta}{2} x_{2}^{p} + \frac{1+\eta}{2} x_{2}^{k} \right] d\eta$$
(3.84)

$$g_{ij}^{p} = \frac{l}{2\lambda} \int_{-1}^{1} \frac{\eta(\eta-1)}{2} T^{*} \left(\xi_{1}^{i}, \xi_{2}^{i}, \frac{1-\eta}{2} x_{1}^{p} + \frac{1+\eta}{2} x_{1}^{k}, \frac{1-\eta}{2} x_{2}^{p} + \frac{1+\eta}{2} x_{2}^{k} \right] d\eta$$
(3.85)

$$g_{ij}^{s} = \frac{l}{2\lambda} \int_{-1}^{1} (1+\eta)(1-\eta) T^{*} \left(\xi_{1}^{i}, \xi_{2}^{i}, \frac{1-\eta}{2}x_{1}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{1}^{k}, \frac{1-\eta}{2}x_{2}^{p} + \frac{1+\eta}{2}x_{2}^{k}\right] d\eta (3.86)$$

$$g_{ij}^{k} = \frac{l}{2\lambda} \int_{-1}^{1} \frac{\eta(\eta+1)}{2} T^{*} \left(\xi_{1}^{i}, \xi_{2}^{i}, \frac{1-\eta}{2} x_{1}^{p} + \frac{1+\eta}{2} x_{1}^{k}, \frac{1-\eta}{2} x_{2}^{p} + \frac{1+\eta}{2} x_{2}^{k}\right) d\eta \quad (3.87)$$

Sposób łączenia kwadratowych elementów brzegowych jest taki sam jak w przypadku elementów liniowych.

Zakładając, że wnętrze obszaru podzielono na elementy trójkątne, na których funkcję przybliżamy wielomianem dwóch zmiennych stopnia drugiego - rys. 3.10, mamy

$$T(x_1, x_2, t) = a_1 + a_2 x_1 + a_3 x_2 + a_4 x_1^2 + a_5 x_2^2 + a_6 x_1 x_2$$
(3.88)



Rys. 3.10. Element trójkatny rzędu drugiego Fig. 3. 10. Triangle element of second order

Współczynniki tego wielomianu wyznacza się z układu równań

 a_1

$$+ a_2 x_1^{i} + a_3 x_2^{i} + a_4 (x_1^{i})^2 + a_5 (x_2^{i})^2 + a_6 x_1^{i} x_2^{i} = T_i, \quad i = 1, 2, ..., 6 \quad (3.89)$$

Dla elementów kwadratowych równanie (3.49) przyjmuje postać (i=1, 2, ..., N)

$$\sum_{j=1}^{N} g_{ij}q(x^{j}, t^{f+1}) = \sum_{j=1}^{N} h_{ij}T(x^{j}, t^{f+1}) + \sum_{l=1}^{L} p_{il} + \sum_{l=1}^{L} z_{il}$$
(3.90)

gdzie współczynniki g_{ij} , $h_{i\bar{j}}$, p_{il} , z_{il} wyznacza się ze wzorów (3.72)-(3.75).

Po wyznaczeniu wartości brzegowych, temperatury w węzłach wewnętrznych dla czasu t^{f+1} oblicza się z zależności (3.76). Całkowanie po trójkątach realizuje się po ich normalizacji do trójkątów o wierzchołkach (0, 0), (1, 0), (0, 1) - podobnie jak w przypadku elementów stałych i liniowych.

3.4. Przykład obliczeń numerycznych - czasoprzestrzenny rozkład temperatury w krystalizatorze urządzenia COS

Rozpatrywać będziemy przekrój poprzeczny krystalizatora miedzianego przedstawiony na rys. 3.11. Ze względu na symetrię rozważanego obszaru wystarczy analizować 1/8 przekroju przedstawioną na rys. 3.12.



Rys. 3.11. Przekrój poprzeczny krystalizatora Fig. 3.11. Lateral section of conticasting mould

Nieustalone pole temperatury w obszarze krystalizatora opisuje równanie

$$\mathbf{x} \in \mathbf{\Omega} : \quad \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 T(\mathbf{x}, t)}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 T(\mathbf{x}, t)}{\partial x_2^2} \tag{3.91}$$

uzupełnione następującymi warunkami brzegowo-początkowymi.

Na brzegu Γ_1 można przyjąć warunek brzegowy II rodzaju (podany przez J.K.Brimacombe [10, 11])

$$x \in \Gamma_1$$
: $q = 4186, 8(640 - 53\sqrt{t})$ (3.92)

gdzie q [W/m²] jest średnim strumieniem cieplnym z powierzchni wlewka, natomiast tczasem przebywania wlewka w krystalizatorze. Wzór ten jest wzorem empirycznym i służy do przewidywania średnich strumieni cieplnych, które pokrywają się z rzeczywistymi dla różnych warunków odlewania, tj. krystalizatorów o różnych kształtach, różnych sposobów smarowania, różnych szybkości odlewania i wielkości wlewków ciągłych. Jeżeli przyjąć długość krystalizatora równą l=1 [m] oraz prędkość wyciągania wlewka (przesuwu wlewka) równą v=0.0183 [m/s], to czas przebywania wlewka w krystalizatorze wynosi t=l/v=54.6[s], natomiast strumień ciepła $q=10^6$ [W/m²]. Ostatecznie

$$x \in \Gamma_1 : \quad q \approx -10^6 [\text{ W/m}^2] \tag{3.93}$$

38



Rys. 3.12. Rozpatrywany obszar Fig. 3.12. Domain considered

Na fragmentach brzegu oznaczonych przez Γ_2 należy przyjąć warunek brzegowy III rodzaju w postaci

$$x \in \Gamma_2$$
: $q(x, t) = \alpha_w [T(x, t) - T_w]$ (3.94)

gdzie α_w jest współczynnikiem wymiany ciepła między krystalizatorem a wodą chłodzącą, natomiast T_w jest średnią temperaturą wody chłodzącej.

Współczynnik wymiany ciepła α_w wyznacza się na podstawie liczb kryterialnych (Reynoldsa i Prandtla) dla wymuszonego przepływu płynu w kanale [12, 13]

$$Nu = C \operatorname{Re}^{A} \operatorname{Pr}^{B}$$
(3.95)

Stałe A, B i C w tym równaniu dobiera się z tablic.

X

Korzystając z definicji liczby kryterialnej Nusselta otrzymujemy

$$\alpha_w = \frac{A_w}{L} C \operatorname{Re}^A \operatorname{Pr}^B$$
(3.96)

gdzie d [m] jest wewnętrzną średnicą kanału, λ_w - współczynnikiem przewodzenia ciepła wody chłodzącej.

Warunek brzegowy na zewnętrznej powierzchni krystalizatora wynika również z prawa Newtona

$$\in \Gamma_3$$
: $q(x, t) = \alpha_z [T(x, t) - T_{ot}]$ (3.97)

gdzie

$$\alpha_{\star} = \alpha_{\star} + \alpha_{\star} \tag{3.98}$$

jest zastępczym współczynnikiem wymiany ciepła (sumą składowej konwekcyjnej α_k oraz

składowej radiacyjnej α_r), natomiast T_{ot} - temperaturą otoczenia.

Warunki konwekcyjnej wymiany ciepła między krystalizatorem a otoczeniem odpowiadają warunkom konwekcji swobodnej. Równanie kryterialne pozwalające obliczyć konwekcyjny współczynnik wnikania ciepła ma w takim przypadku postać [12, 13]

$$\mathbf{u} = C(\operatorname{Gr} \operatorname{Pr})^A \tag{3.99}$$

gdzie Gr
 jest liczbą Grashofa, Pr - liczbą Prandtla, Nu - liczbą Nusselta. Stał
eCiAw równaniu kryterialnym (3.99) wynoszą

N

$$Gr Pr < 5 \cdot 10^2$$
: $C = 1.18$ $A = 0.125$
 $5 \cdot 10^2 \le Gr Pr \le 2 \cdot 10^7$: $C = 0.54$ $A = 0.25$ (3.100)
 $Gr Pr \ge 2 \cdot 10^7$: $C = 0.135$ $A = 0.33$

Promienisty współczynnik wymiany ciepła α , oblicza się z zależności

$$\mathbf{x}_{r} = \varepsilon C_{c} \frac{\left(\frac{T}{100}\right)^{4} - \left(\frac{T_{ot}}{100}\right)^{4}}{T - T_{ot}}$$
(3.101)

gdzie ϵ jest emisyjnością powierzchni (do obliczeń przyjęto ϵ =0.8), C_c - stałą promieniowania ciała doskonale czarnego: C_c =5.67 [W/m²K⁴].

Na fragmentach brzegu Γ_4 przyjęto warunek adiabatyczny, tzn. q(x, t) = 0.

W chwili t=0 temperatura w obszarze krystalizatora jest wyrównana i odpowiada temperaturze otoczenia.

Aby uniknąć żmudnych i nie polepszających w sposób widoczny wyników dodatkowych procedur iteracyjnego wyznaczania współczynnika α_z (jego wartość zależy również od temperatury powierzchni ciała), przyjęto, że w przedziale czasu $[t^f, t^{f+1}]$ współczynnik ten pozostaje niezmieniony i równy wartości odpowiadającej lokalnej temperaturze powierzchni w chwili t^f [14].

Do rozwiązania omawianego problemu wykorzystano metodę kombinowaną dla zadań 2D opisaną w podrozdziale poprzednim.

Na zewnętrznej powierzchni obszaru wyróżniono 53-liniowe elementy brzegowe, natomiast na powierzchni wewnętrznej - 12 elementów brzegowych. Wnętrze obszaru podzielono na 233liniowe elementy trójkątne - rys. 3.13. Rozpatrywano krystalizator wykonany z miedzi o grubości ścianki 0.05[m]. Obliczenia prowadzono z krokiem czasu $\Delta t = 10$ [s]. Na rys. 3.14, 3.15 i 3.16 pokazano chwilowe pola temperatury dla czasów 10, 30 i 60 [s].

Sprawdzeniem poprawności otrzymanego rozwiązania było jego porównanie z rozwiązaniem dla stanu ustalonego uzyskanym metodą brzegowych równań całkowych [2, 15]. Dokładność algorytmu MEB dla zadań ustalonych, szczegółowo opisanego w literaturze [15, 16, 17, 18], była wielokrotnie z powodzeniem weryfikowana przez licznych badaczy. Na rys. 3.17 nałożono rozwiązanie dla stanu ustalonego na rozwiązanie pokazane na rys. 3.16. Dla większej przejrzystości zrezygnowano z opisu izoterm (odpowiadają one wartościom zaznaczonym na rys. 3.16). Jak można zauważyć, graniczne pole temperatury otrzymane z rozwią-

40

Rys. 3.13. Dyskretyzacja Fig. 3.13. Discretization 22 22 65 42 5 75-85-65 56 -501 -85 115 35 125-135

> Rys. 3.14. Rozwiązanie dla t = 10 s Fig. 3.14. Solution for t = 10 s

160 180 190

Rys. 3.15. Rozwiązanie dla t = 30 s Fig. 3.15. Solution for t = 30 s



Rys. 3.16. Rozwiązanie dla t = 60 s Fig. 3.16. Solution for t = 60 s

42

zania dla stanu nieustalonego jest bardzo bliskie polu temperatury wyznaczonemu na podstawie algorytmu MEB dla zadań ustalonych.

100

110

40

110

120

- 180 -

- 190





3.5. Metoda kombinowana dla zadań 3D

Sposób wyprowadzenia brzegowego równania całkowego nie różni się w swojej istocie od metody przedstawionej w podrozdziale 3.3 dla zadań dwuwymiarowych i formalnie równanie całkowe ma taką samą postać jak wzór (3.48), czyli

$$B(\xi)T(\xi, t^{f+1}) + \frac{1}{\lambda} \int_{\Gamma} T^{*}(\xi, x)q(x, t^{f+1})d\Gamma =$$

$$\frac{1}{\lambda} \int_{\Gamma} T(x, t^{f+1})q^{*}(\xi, x)d\Gamma + \int_{\Omega} f(x)T^{*}(\xi, x)d\Omega + \frac{1}{\lambda} \int_{\Omega} Q(x, t^{f})T^{*}(\xi, x)d\Omega$$
(3.102)

Należy jednak pamiętać o tym, że całki brzegowe w tym równaniu są całkami powierzchniowymi, natomiast całki po obszarze Ω - całkami przestrzennymi. Inna jest również postać rozwiązania fundamentalnego.

Równanie (3.102) rozwiązuje się metodami numerycznymi. Podobnie jak w zadaniach 2D, obliczenie całek po powierzchni Γ oraz objętości Ω wiąże się z koniecznością dyskretyzacji brzegu oraz wnętrza analizowanego obszaru. Można tu stosować elementy stałe, liniowe lub kwadratowe, przy czym brzeg obszaru dzieli się najczęściej na elementy trójkątne lub czworokątne, natomiast wnętrze - na czworościany lub prostopadłościany.

Szczegóły algorytmu numerycznego przedstawiono w pracy [3], natomiast w pracach [19, 20, 21] - rozwiązania zadań brzegowo-początkowych dla zadań przestrzennych i brył o prostej geometrii, np. sześcianu.

Literatura do rozdziału 3

1.

3.

6.

- D.A.S Curan, M.Cross, B.A.Lewis, Solution of parabolic differential equations by the boundary element method using discretisation in time, Appl. Math. Modelling, No 4, 1980, 398-400.
- C.A.Brebbia, J.C.F.Telles, L.C.Wrobel, Boundary element techniques, Springer-Verlag, Berlin 1984.
 - E.Ładyga, Zastosowanie metody elementów brzegowych z dyskretyzacją czasu do modelowania nieustalonej dyfuzji, Praca doktorska, Częstochowa 1997.
- 4. E.Majchrzak, B.Mochnacki, Metody numeryczne. Podstawy teoretyczne, aspekty praktyczne i algorytmy, Wyd. Politechniki Śląskiej, Wyd. II, Gliwice 1996.
- 5. R.Szopa, Labolatorium metod numerycznych, Wyd. Pol. Śląskiej, Gliwice 1988.
 - E.Majchrzak, Zastosowanie metody elementów brzegowych w termodynamice procesów odlewniczych, Z.N. Pol. Śląskiej, Mechanika, 102, 1991.
- J.Spanier, K.B.Oldham, An atlas of functions, Hemisphere Publishing Corporation, Springer-Verlag, Berlin 1987.
- M. Abramowitz, I.A. Stegun, Handbook of mathematical functions, Dover Publication, New York 1965
- 9. A.Piskorek, Równania całkowe, WNT, Warszawa 1971.
- B.Mochnacki, J.S.Suchy, Designing of technological process and continuous casting properties on the basis of numerical simulation, Gietferk Perspektief, 13, 4, 1994, 22-28.
- 11. J.K.Brimacombe, F.Weinberg, Theoretical and measured liquid pool profiles in the mould region during the continuous casting of steel, Journal of the Iron and Steel Inst., 211, 1, 1973, 24-33.
- 12. J.Szargut, Termodynamika, PWN, Warszawa 1976.
- 13. S. Wiśniewski, Wymiana ciepła, PWN, Warszawa 1979.
- 14. J.Szargut, Obliczenia cieplne pieców przemysłowych, Śląsk, Katowice 1977

- 15. C.A.Brebbia, J.Dominiguez, Boundary elements an introductory course, Comp. Mech. Publications and Mc Graww-Hill Book Co., Southampton and Boston, 1992.
- 16. P.K.Banerjee, R.Butterfield, Boundary element methods in engineering science, McGraw-Hill Book Company, 1981.
- 17. R.Białecki, R.Nahlik, A.Nowak, Zastosowanie metody brzegowych równań całkowych w teorii przewodzenia ciepła, Mechanika i Komputer, t. 6, Warszawa 1986, 154-204.
- R.Białecki, R.Nahlik, Solving nonlinear steady state potential problems in 18. inhomogeneous bodies using the BEM, Numerical Heat Transfer, Part B, 16, 1989, 79-96.
- E.Majchrzak, Application of BEM for numerical modeling of 3D casting 19. solidification, IABEM'93, Int. Symp. on BEM in cooperation with GAMM, Braunschweig 1993.
- E.Majchrzak, B.Mochnacki, Application of the BEM in the thermal theory of 20. foundry, Engineering Analysis with Boundary Elements, 16, 1995, 99-121.

4. ADAPTACJA ALGORYTMU METODY KOMBINOWANEJ DLA **OBSZARÓW PROSTOKATNYCH DO OBLICZEŃ PRZEPŁYWU CIEPŁA W OBSZARACH WALCOWYCH I SFERYCZNYCH**

4.1. Wprowadzenie

Przy projektowaniu i analizie technologii odlewniczych zachodzi często potrzeba orientowania rozważanych obszarów odlewu i formy w innych niż kartezjański układach współrzędnych. W szczególności, liczne odlewy lub ich fragmenty charakteryzują się geometria osiowo-symetryczną (walcowy nadlew zasilający odlew, odlewy tulei, wieńców kół zębatych, wirników itp.) i w takim przypadku dogodnie jest wprowadzić do rozważań walcowy układ współrzędnych. W praktyce spotyka się również odlewy o geometrii kulistej, których kształt najprościej opisuje się w układzie sferycznym.

Jedna z istotnych zalet metody brzegowych równań całkowych jest możliwość dokładnego odtworzenia brzegu rozpatrywanego obszaru i w zasadzie obszary osiowo-symetryczne i sferyczne można orientować w układzie prostokątnym. W takim przypadku jednak, z jednej strony rośnie wymiar zagadnienia (osiowo-symetryczny walec nieskończony z jednorodnymi warunkami brzegowymi należy traktować jako obiekt 2D, natomiast walec o wymiarach skończonych czy też kulę lub warstwę kulistą jako obszary przestrzenne), a dodatkowo wprowadzenie do pamięci komputera informacji o geometrii obszaru (współrzędne węzłów brzegowych i wewnętrznych, przyporządkowanie elementom wewnętrznym węzłów tworzących ich wierzchołki itd.) jest bardzo pracochłonne. Tak więc przyjęcie odpowiedniego dla kształtu obszaru układu współrzędnych również w metodzie elementów brzegowych jest korzystne zarówno z punktu widzenia prostoty algorytmu, jak i stopnia złożoności programu realizujacego obliczenia numeryczne.

W literaturze opisane są sposoby wykorzystania klasycznego algorytmu metody elementów brzegowych do obliczeń ustalonej i nieustalonej dyfuzji (I i II schemat) w obszarach walcowych [1, 2, 3, 4, 5, 7] i sferycznych [3, 6]. Punktem wyjściowym rozważań jest opis matematyczny, na który składa się równanie Fouriera-Kirchhoffa dla obszarów przestrzennych zorientowanych w układzie prostokątnym uzupełnione odpowiednimi warunkami brzegowymi lub brzegowo-początkowymi. Dla tak postawionego zadania wprowadza się kryterium metody odchyłek ważonych, przy czym funkcja wagi odpowiadająca rozwiązaniu fundamentalnemu dla problemu 3D jest znana (por. rozdział 2). Po przekształceniach otrzymuje się równanie metody elementów brzegowych, w którym występują całki po brzegu i wnętrzu rozpatrywanego obszaru. W dalszej kolejności zakłada się, że obszar ten jest walcowy lub kulisty i całkowanie realizuje się po powierzchni walca lub kuli i po wnętrzu tych brył. W efekcie końcowym uzyskuje się rozwiązanie fundamentalne dla równania energii we współrzędnych walcowych lub sferycznych. Taki sposób postępowania szczególnie w przypadku nieustalonej dyfuzji prowadzi do bardzo złożonego zarówno od strony matematycznej, jak i numerycznej algorytmu.

Podobne podejście do zadań nieustalonej dyfuzji ciepła w obszarach sferycznych i metody elementów brzegowych z dyskretyzacją czasu przedstawiono w rozdziale 5. Próby

wyznaczenia rozwiązania fundamentalnego dla obszarów walcowych nie zakończyły się sukcesem - zdaniem autora całka odpowiadająca temu rozwiązaniu nie sprowadza się do żadnej z opisanych w literaturze funkcji specjalnych [8, 9].

W rozdziale niniejszym przedstawiony zostanie pewnien sposób adaptacji algorytmu metody kombinowanej dla obszarów prostokątnych z wewnętrznymi źródłami (zadania 1D i 2D) do obliczeń dyfuzji ciepła w obszarach walcowych i sferycznych. Istotą tego podejścia jest potraktowanie pewnych składników równania energii jako "sztucznych" źródeł ciepła, których wydajność określa się wykorzystując proste algorytmy iteracyjne.

4.2. Przepływ ciepła w obszarach walcowych i sferycznych

Nieustalone pole temperatury w walcu o wymiarach skończonych opisuje równanie w postaci [10, 11, 12]

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \lambda \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial T(x,t)}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial z^2} \right]$$
(4.1)

gdzie $x = \{\rho, z, \phi\}$ - rys. 4.1.



Rys. 4.1. Walcowy układ współrzędnych Fig. 4.1. Cylindrical coordinate system

Dla zadania osiowo-symetrycznego (jednorodne warunki brzegowe na pobocznicy walca) równanie (4.1) sprowadza się do prostszego, a mianowicie

$$c \frac{\partial T(\rho, z, t)}{\partial t} = \lambda \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial T(\rho, z, t)}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2 T(\rho, z, t)}{\partial z^2} \right]$$
(4.2)

lub

$$c \frac{\partial T(\rho, z, t)}{\partial t} = \lambda \left[\frac{\partial^2 T(\rho, z, t)}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2 T(\rho, z, t)}{\partial z^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial T(\rho, z, t)}{\partial \rho} \right]$$
(4.3)

Ostatnie równanie zapiszemy w postaci

$$c \frac{\partial T(\rho, z, t)}{\partial t} = \lambda \left[\frac{\partial^2 T(\rho, z, t)}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2 T(\rho, z, t)}{\partial z^2} \right] + Q(\rho, z, t)$$
(4.4)

gdzie

$$Q(\rho, z, t) = \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial T(\rho, z, t)}{\partial \rho}$$
(4.5)

jest sztucznym składnikiem źródłowym w równaniu energii. Można zauważyć, że równanie (4.4) jest identyczne z równaniem Fouriera dla obszarów źródłowych zorientowanych w układzie kartezjańskim (por. rozdział 2). Na powierzchni bocznej walca oraz dla z=0 i z=H dane są warunki brzegowe w postaci

$$\Phi\left[T(\rho, z, t), \frac{\partial T(\rho, z, t)}{\partial n}\right] = 0$$
(4.6)

natomiast w chwili t=0

$$T(\rho, z, 0) = T_0(\rho, z)$$
 (4.7)

Założono, że przyjęte warunki brzegowe (4.6) pozwalają traktować zadanie jako osiowosymetryczne.

Dla walca nieskończonego rozpatruje się równanie jednowymiarowe

$$c \frac{\partial T(\rho, t)}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T(\rho, t)}{\partial \rho^2} + Q(\rho, t)$$
(4.8)

z warunkiem typu (4.6) na pobocznicy walca i warunkiem początkowym $T(\rho, 0) = T_0(\rho)$.

Ogólna postać równania energii we współrzędnych sferycznych jest następująca [10, 11, 12]

$$c\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \lambda \left[\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial T(x,t)}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\rho^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T(x,t)}{\partial \theta} \right) \right]$$
(4.9)

gdzie $x = \{\rho, \varphi, \theta\}$ - rys. 4.2.

W praktyce zakłada się najczęściej jednorodne warunki brzegowe na powierzchni kuli i w takim przypadku ostatnie równanie sprowadza się do

$$c \frac{\partial T(\rho, t)}{\partial t} = \frac{\lambda}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial T(\rho, t)}{\partial \rho} \right)$$
(4.10)



Rys. 4.2. Sferyczny układ współrzędnych Fig. 4.2. Spherical coordinate system

lub

$$c \frac{\partial T(\rho, t)}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T(\rho, t)}{\partial \rho^2} + Q(\rho, t)$$
(4.11)

gdzie

$$Q(\rho, t) = \frac{2\lambda}{\rho} \frac{\partial T(\rho, t)}{\partial \rho}$$
(4.12)

Równanie (4.11) z formalnego punktu widzenia jest takie samo jak równanie (4.8).

4.3. Metoda sztucznego źródła

Koncepcję przekształcenia równania energii dla obszarów bezźródłowych do postaci, w której pojawia się sztuczne źródło, przedstawiono w pracach Mochnackiego i Majchrzak [13, 14, 15, 16]. Istotą metody (w wersji przedstawionej przez autorów cytowanych wyżej prac) było przekształcenie równania dyfuzji dla obszarów, których parametry termofizyczne są zależne od temperatury do postaci częściowo "zlinearyzowanej", dla której znane jest rozwiązanie fundamentalne, czyli do problemu brzegowo-początkowego możliwego do rozwiązania metodą elementów brzegowych. Nieliniowe równanie przewodzenia ciepła można zapisać m.in. w postaci

$$F(U) \frac{\partial U(x, t)}{\partial t} = \nabla^2 U(x, t)$$
(4.13)

gdzie U jest funkcją Kirchhoffa. Funkcję Kirchhoffa definiuje się następująco

$$U = \int \lambda(\mu) d\mu \qquad (4.14)$$

Występująca w równaniu (4.13) funkcja F(U) jest pochodną entalpii fizycznej materiału odniesionej do jednostki objętości względem funkcji Kirchhoffa. Jej przebieg w postaci dyskretnego zbioru punktów lub funkcji ciągłej można wyznaczyć metodami numerycznymi [10, 11].

Równanie (4.13) przekształcono do postaci

$$F_0 \frac{\partial U(x, t)}{\partial t} = \nabla^2 U(x, t) - \Delta F(U) \frac{\partial U(x, t)}{\partial t}$$
(4.15)

czyli funkcję F(U) zastąpiono sumą pewnej stałej wartości F_0 i defektu $\Delta F(U)$. Ostatecznie rozpatrywano równanie

$$F_0 \frac{\partial U(x, t)}{\partial t} = \nabla^2 U(x, t) + Q$$
(4.16)

Funkcję Q nazwano sztucznym źródłem. Jej wyznaczenie wymaga oczywiście uzupełnienia algorytmu przybliżonego rozwiązania rozpatrywanego problemu brzegowo-początkowego procedurą iteracyjnego poprawiania lokalnej wartości źródła, ponieważ o jego wydajności decyduje szybkość stygnięcia, której wyznaczenie wymaga znajomości pola temperatury dla czasów t^{f} i t^{f+1} . Proces iteracyjny jest zbieżny, jeśli $F_0 < |\Delta F(U)|$.

W niniejszej pracy metodę sztucznego źródła wykorzystano do przybliżonego rozwiązywania problemów nieustalonej dyfuzji w obszarach walcowych i kulistych opisanego równaniami (4.4), (4.8) i (4.11) z warunkami typu (4.6) i (4.7). Z formalnego punktu widzenia zadania te odpowiadają opisowi dyfuzji w jednowymiarowych i dwuwymiarowych obszarach zorientowanych w układzie współrzędnych prostokątnych i można je rozwiązywać w sposób przybliżony, wykorzystując algorytmy podstawowej wersji metody kombinowanej opisane w rozdziale trzecim.

4.3.1. Rozwiązania jednowymiarowe

Rozpatrywać będziemy przegrodę walcową (walec nieskończony) lub ściankę kulistą. Powierzchnie graniczne obszarów odpowiadają promieniom $\rho = R_1$ oraz $\rho = R_2$. W przypadku walca pełnego i kuli można przyjąć $R_1 = \varepsilon < < R_2$. Przy założeniu liniowej aproksymacji szybkości stygnięcia (nagrzewania) w przedziale czasu $[t^f, t^{f+1}]$ równanie metody odchyłek ważonych przyjmuje postać

$$\int_{R_{1}}^{R_{1}} \left[\frac{\partial^{2} T(\rho, t^{f+1})}{\partial \rho^{2}} - \frac{1}{a \Delta t} T(\rho, t^{f+1}) - \frac{1}{a \Delta t} T(\rho, t^{f}) + \frac{Q}{\lambda} \right] T^{*}(\xi, \rho) d\rho = 0 \quad (4.17)$$

Jest to równoznaczne założeniu, że wydajność źródeł wewnętrznych w przedziale czasu $[t^{f}, t^{f+1}]$ pozostaje niezmieniona i równa wydajności początkowej. Z punktu widzenia ,,filozofii'' metod numerycznych założenie takie jest w pełni dopuszczalne, i jak wykazały obliczenia testujące, nie wpływa w sposób widoczny na wyniki obliczeń, a dodatkowo pozwala uniknąć iteracji związanych z wyznaczeniem wydajności źródeł.

W przypadku zastosowania elementów liniowych wartość pochodnej $\partial T/\partial \rho$ w obszarze elementu wewnętrznego $\rho \in [\rho_{i-1}, \rho_i]$ jest stała i równa ilorazowi różnicowemu

$$\rho \in [\rho_{j-1}, \rho_j] : \frac{\partial T(\rho, t^s)}{\partial \rho} = \frac{T(\rho_j, t^s) - T(\rho_{j-1}, t^s)}{\rho_j - \rho_{j-1}}$$
(4.24)

Przy powyższym założeniu całkę $z(\xi)$ oblicza się z zależności

$$z(\xi) = m \sum_{j=1}^{n} \frac{T(\rho_{j}, t^{s}) - T(\rho_{j-1}, t^{s})}{\rho_{j} - \rho_{j-1}} \int_{\rho_{j-1}}^{\rho_{j}} \frac{T^{*}(\xi, \rho)}{\rho} d\rho$$
(4.25)

Całki z ilorazów rozwiązania fundamentalnego T^* i współrzędnej geometrycznej ρ oblicza się metodami numerycznymi.

Pozostałe elementy algorytmu metody kombinowanej dla zadania 1D nie ulegają zmianie i zostały omówione w rozdziale poprzednim.

Efektywność i dokładność metody kombinowanej dla omawianych zadań brzegowopoczątkowych przetestowano na licznych przykładach dobranych w ten sposób, aby rozwiązania przybliżone można było porównywać z rozwiązaniami analitycznymi. Poniżej przedstawiono kilka z otrzymanych rozwiązań.

Pierwszy przykład dotyczy stygnięcia walca staliwnego o promieniu 0.1 [m] i temperaturze początkowej 100 °C. Na pobocznicy walca założono warunek brzegowy pierwszego rodzaju: $T(R_2, t)=0$. Promień wewnętrzny $R_1=10^{-3}$ [m] zapewnia w praktyce uzyskanie rozwiązania dla walca pełnego. Na powierzchni wewnętrznej przyjęto zerowy strumień ciepła. Parametry termofizyczne materiału wynosiły $\lambda=35$ [W/mK], $c=4.875 \cdot 10^6$ [J/m³K]. Obliczenia prowadzono z krokiem czasu $\Delta t=2.5$ [s], liczba elementów wewnętrznych wynosiła n=20. Na rys. 4.3 pokazano profile temperatury dla czasów 1, 2, 3, 4 i 5 [min] (linie ciągłe), symbolami zaznaczono rozwiązanie analityczne.

W przykładzie drugim rozważano taki sam walec, z tym że na jego powierzchni zewnętrznej założono warunek brzegowy Robina, przy czym $\alpha = 50$ [W/mK], $T^{\infty} = 20 \,^{\circ}$ C. Temperatura początkowa walca wynosiła 500°C. Wyniki obliczeń numerycznych (linie ciągłe) oraz rozwiązanie dokładne (symbole) pokazano na rys. 4.4.

Przykład trzeci ilustruje wykorzystanie metody kombinowanej do obliczeń nieustalonego pola temperatury w powłoce walcowej. Rozważano tuleję staliwną o wymiarach $R_1 = 0.03$ [m], $R_2 = 0.1$ [m] o temperaturze początkowej 500 °C. Na wewnętrznej i zewnętrznej powierzchni przyjęto warunki brzegowe Robina, przy czym współczynniki wymiany ciepła wynosiły $\alpha = 50$ [W/mK], a temperatury płynu omywającego tuleję $T \approx 20^{\circ}$ C. Obliczenia prowadzono z krokiem czasu $\Delta t = 2.5$ [s], w rozważanym obszarze wyróżniono 20 elementów wewnętrznych. Na rys. 4.5 pokazano wyniki obliczeń dla powłoki walcowej.

$$T^*(\xi, \rho) = \frac{\sqrt{a\Delta t}}{2} \exp\left(-\frac{|\rho - \xi|}{\sqrt{a\Delta t}}\right)$$

(4.18)

jest rozwiązaniem fundamentalnym dla współrzędnych prostokątnych. W równaniach (4.17), (4.18) $a = \lambda/c$. Po przekształceniach otrzymuje się równanie metody kombinowanej w postaci (por. wzór (3.25))

$$T(\xi, t^{f+1}) + \left[\frac{1}{\lambda}T^{*}(\xi, \rho)q(\rho, t^{f+1})\right]_{\rho=R_{1}}^{\rho=R_{2}} = \left[\frac{1}{\lambda}q^{*}(\xi, \rho)T(\rho, t^{f+1})\right]_{\rho=R_{1}}^{\rho=R_{2}} + \frac{1}{a\Delta t}\int_{R_{1}}^{R_{2}}T(\rho, t^{f})T^{*}(\xi, \rho)d\rho + \frac{1}{\lambda}\int_{R_{1}}^{R_{2}}QT^{*}(\xi, \rho)d\rho$$

$$(4.19)$$

lub

$$T(\xi, t^{f+1}) + \frac{1}{\lambda} T^{*}(\xi, R_{2})q(R_{2}, t^{f+1}) - \frac{1}{\lambda} T^{*}(\xi, R_{1})q(R_{1}, t^{f+1}) =$$

$$= \frac{1}{\lambda} q^{*}(\xi, R_{2})T(R_{2}, t^{f+1}) - \frac{1}{\lambda} q^{*}(\xi, R_{1})T(R_{1}, t^{f+1}) + p(\xi) + z(\xi)$$
(4.20)

gdzie

$$\Psi(\xi) = \int_{0}^{k_{2}} T(\rho, t^{f}) T^{*}(\xi, \rho) d\rho$$
 (4.21)

oraz

$$z(\xi) = \frac{1}{\lambda} \int_{0}^{\pi_{2}} Q T^{*}(\xi, \rho) d\rho$$
 (4.22)

W równaniach (4.19), (4.20) $q^* = -\lambda \partial T^* / \partial \rho$.

Dodatkowych wyjaśnień wymaga sposób obliczania $z(\xi)$. Jak wiadomo, w realizacji numerycznej całkę zawierającą źródła wewnętrzne zastępuje się sumą całek po elementach, czyli

$$(\xi) = m \sum_{j=1}^{n} \int_{\rho_{j-1}}^{\rho_{j}} \frac{1}{\rho} \frac{\partial T(\rho, t^{s})}{\partial \rho} T^{*}(\xi, \rho) d\rho \qquad (4.23)$$

przy czym m=1 odpowiada geometrii walcowej, natomiast m=2 - sferycznej. Wskaźnik s oznacza wybrany poziom czasu. Z formalizmu metody kombinowanej wynika, że s=f+1, co wymaga iteracyjnego poprawiania wartości całki $z(\xi)$, ale można również przyjąć s=f.

przy czym





Rys. 4.3. Rozwiązanie z warunkiem I rodzaju Fig. 4.3. Solution of Dirichlet problem



Rys. 4.4. Rozwiązanie z warunkiem Robina Fig. 4.4. Solution of Robin problem





Rys. 4.6. Krzywe nagrzewania (kula) Fig. 4.6. The heating curves (shpere) W celu sprawdzenia poprawności zaproponowanej metody obliczeniowej dla obszarów kulistych rozwiązano między innymi następujące zadanie. Kula o promieniu 0.1[m] wykonana z materiału, którego współczynnik dyfuzji wynosi $a=7.179\cdot10^{-6}$ [m²/s], a temperatura początkowa $T_0(x)=0$ °C, nagrzewa się na skutek przyłożenia na jej powierzchni temperatury brzegowej T(0.1, t)=100°C. Zadanie takie ma rozwiązanie dokładne. Obszar kuli podzielono na 20 elementów wewnętrznych. Obliczenia prowadzono z krokiem czasu $\Delta t=2.5$ [s]. Środek kuli zaizołowano powłoką o promieniu 10^{-8} [m]. Wyniki obliczeń (krzywe nagrzewania w środku kuli i dla promienia $\rho=0.075$ [m]) pokazano na rys. 4.6 - linie ciągłe. Na tym samym rysunku symbolami zaznaczono rozwiązanie dokładne.

4.3.2. Rozwiązanie dwuwymiarowe (walec skończony)

Rozpatrywać będziemy walec skończony o promieniu wewnętrznym $\rho = R_1$ oraz zewnętrznym $\rho = R_2$ i wysokości Z. W przypadku walca pełnego można przyjąć $R_1 = \varepsilon < < R_2$.

Przy założeniu liniowej aproksymacji szybkości stygnięcia (nagrzewania) w przedziale czasu $[t^f, t^{f+1}]$ aproksymacja równania (4.4) jest następująca

$$\frac{T(\rho, z, t^{f+1}) - T(\rho, z, t^{f})}{\Delta t} =$$

$$= a \left[\frac{\partial^2 T(\rho, z, t^{f+1})}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2 T(\rho, z, t^{f+1})}{\partial z^2} \right] + \frac{Q(\rho, z, t^s)}{c}$$
(4.26)

lub

$$\frac{\partial^2 T(\rho, z, t^{f+1})}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2 T(\rho, z, t^{f+1})}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 T(\rho, z, t^{f+1})}{\partial z^2} + \frac{1}{a\Delta t} T(\rho, z, t^{f+1}) + \frac{1}{a\Delta t} T(\rho, z, t^f) + \frac{1}{\lambda} Q(\rho, z, t^s) = 0$$

$$(4.27)$$

i kryterium metody odchyłek ważonych przyjmuje postać

$$\int_{\Omega} \left[\frac{\partial^2 T(\rho, z, t^{f+1})}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2 T(\rho, z, t^{f+1})}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 T(\rho, z, t^{f+1})}{\partial z^2} + \frac{1}{a\Delta t} T(\rho, z, t^{f+1}) + \frac{1}{a\Delta t} T(\rho, z, t^f) + \frac{1}{\lambda} Q(\rho, z, t^s) \right] T^*(\xi, \rho, z) d\Omega = 0$$
(4.28)

gdzie s=f lub s=f+1 oraz $\xi = (\xi_1, \xi_2)$.

Po przekształceniach otrzymuje się równanie metody kombinowanej (dla $\xi \rightarrow \Gamma$)

$$B(\xi) T(\xi, t^{f+1}) + \frac{1}{\lambda} \int_{\Gamma} T^*(\xi, \rho, z) q(\rho, z, t^{f+1}) d\Gamma =$$

$$= \frac{1}{\lambda} \int_{\Gamma} q^{*}(\xi, \rho, z) T(\rho, z, t^{f*1}) d\Gamma + \frac{1}{a\Delta t} \int_{\Omega} T(\rho, z, t^{f}) T^{*}(\xi, \rho, z) d\Omega + \frac{1}{\lambda} \int_{\Omega} Q(\rho, z, t^{s}) T^{*}(\xi, \rho, z) d\Omega$$
(4.29)

Dla stałych elementów brzegowych i wewnętrznych otrzymuje się następującą postać równania (4.29)

$$\frac{1}{2}T(\xi^{i}, t^{f+1}) + \frac{1}{\lambda} \sum_{j=1}^{N} q(\rho^{j}, z^{j}, t^{f+1}) \int_{\Gamma_{j}} T^{*}(\xi^{i}, \rho, z) d\Gamma_{j} = \\ = \frac{1}{\lambda} \sum_{j=1}^{N} T(\rho^{j}, z^{j}, t^{f+1}) \int_{\Gamma_{j}} q^{*}(\xi^{i}, \rho, z) d\Gamma_{j} +$$
(4.30)
$$\frac{1}{a\Delta t} \sum_{l=1}^{L} T(\rho^{l}, z^{l}, t^{f}) \int_{\Omega_{l}} T^{*}(\xi^{i}, \rho, z) d\Omega_{l} + \frac{1}{\lambda} \sum_{l=1}^{L} \int_{\Omega_{l}} Q(\rho, z, t^{s}) T^{*}(\xi^{i}, \rho, z) d\Omega_{l}$$

i po wprowadzeniu oznaczeń

$$g_{ij} = \frac{1}{\lambda} \int_{\Gamma_j} T^*(\xi^i, \rho, z) d\Gamma_j \qquad (4.31)$$

$$\hat{h}_{ij} = \frac{1}{\lambda} \int_{\Gamma_i} q^*(\xi^i, \rho, z) d\Gamma_j$$
(4.32)

$$p_{il} = \frac{1}{a\Delta t} \int_{\Omega_i} T^*(\xi^i, \rho, z) d\Omega_l \qquad (4.33)$$

$$z_{il} = \frac{1}{\lambda} \int_{\Omega_i} Q(\rho, z, t^s) T^*(\xi^i, \rho, z) d\Omega_l \qquad (4.34)$$

mamy (i=1, 2, ..., N)

$$\sum_{j=1}^{N} g_{ij} q(\rho^{j}, z^{j}, t^{f+1}) = \sum_{j=1}^{N} h_{ij} T(\rho^{j}, z^{j}, t^{f+1}) + \sum_{l=1}^{L} p_{il} T(\rho^{l}, z^{l}, T^{f}) + \sum_{l=1}^{l} z_{il}$$
(4.35)

przy czym

$$h_{ij} = \begin{cases} \hat{h}_{ij}, & i \neq j \\ -\frac{1}{2}, & i = j \end{cases}$$
(4.36)

Dodatkowego komentarza wymaga sposób obliczania całki z_{il} zawierającej informację o ,,walcowości'' obszaru, czyli całki

$$z_{il} = \frac{1}{\lambda} \int_{\Omega_l} \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial T(\rho, z, t^s)}{\partial \rho} T^*(\xi^i, \rho, z) d\Omega_l$$
(4.37)

W pierwszej kolejności należy założyć, że wartość pochodnej w kierunku promieniowym w obrębie rozpatrywanego elementu wewnętrznego ma stałą wartość i wtedy

$$z_{il} = \frac{\partial T(\rho^l, z^l, t^s)}{\partial \rho} \int_{\Omega_l} \frac{1}{\rho} T^*(\xi^i, \rho, z) d\Omega_l$$
(4.38)

(4.40)

Sposób określenia przybliżonej wartości pochodnej jest uzależniony od przyjętej dyskretyzacji wnętrza i położenia węzłów centralnych elementów Ω_l . Przykładowo, dla siatki pokazanej na rys. 4.7 i węzłów elementów wewnętrznych *a* (nie stykających się z pobocznicą walca) można wykorzystać przybliżenie rzędu o (h^2) nazywane ilorazem różnicowym centralnym, czyli

$$z_{ll} = \frac{T(\rho^{l+1}, z^{l+1}, t^s) - T(\rho^{l-1}, z^{l-1}, t^s)}{2\Delta\rho} \int_{\Omega_l} \frac{1}{\rho} T^*(\xi^i, \rho, z) d\Omega_l \quad (4.39)$$

Założono przy tym "naturalną" numerację elementów wewnętrznych od lewej do prawej strony obszaru w kolejnych rzędach. Z kolei dla węzłów elementów wewnętrznych, dla których pobocznica obszaru osiowo-symetrycznego jest lewym lub prawym brzegiem, aproksymacja pochodnej po promieniu wynika z różniczkowania wzoru interpolacyjnego Lagrange'a [17, 18], a w szczególności

- dla węzłów typu b

$$z_{il} = \frac{T(\rho^{l+1}, z^{l+1}, t^s) + 3T(\rho^l, z^l, t^s) - 4T(\rho^{l-1}, z^{l-1}, t^s)}{3\Delta\rho} \int_{\Omega} \frac{1}{\rho} T^*(\xi^i, \rho, z) d\Omega_l$$

- dla węzłów typu c

$$z_{il} = \frac{4T(\rho^{l+1}, z^{l+1}, t^s) - 3T(\rho^l, z^l, t^s) - T(\rho^{l-1}, z^{l-1}, t^s)}{3\Delta\rho} \int_{\Omega_l} \frac{1}{\rho} T^*(\xi^i, \rho, z) d\Omega_l$$
(4.41)

W przypadku elementów liniowych problem aproksymacji pochodnej względem współrzędnej ρ można w zasadzie zautomatyzować, ponieważ z założenia funkcja na elemencie jest liniowa i jej pochodne mają wartości stałe. Zachowując oznaczenia jak we wzorze (3.70), mamy

$$\left| \frac{\partial T(\rho, z, t^{s})}{\partial \rho} \right|_{\Omega_{t}} = \frac{1}{2 |\Omega_{t}|} \left[(z^{s} - z^{k}) T_{p}^{s} + (z^{k} - z^{p}) T_{s}^{s} + (z^{p} - z^{s}) T_{k}^{s} \right]$$
(4.42)

Podobnie jak w zadaniach 1D, wskaźnik poziomu czasu s powinien odpowiadać chwili t^{f+1} . Jeśli jednak przyjąć s=f, to określenie lokalnych wartości funkcji sztucznego źródła nie wymaga wprowadzania procedur iteracyjnych, a jak pokazują wykonane przez autora pracy obliczenia testujące, dokładność rozwiązania numerycznego jest w pełni zadowalająca.

Omówioną wyżej metodę można zilustrować następującym przykładem [19]. Odlew w kształcie tarczy o średnicy 300 [mm] zasilany walcowym nadlewem usytuowanym centralnie (por. rys. 4.7) po wybiciu z formy stygnie w powietrzu w warunkach konwekcji naturalnej (warunek brzegowy Robina). Założono, że w chwili przyjętej jako t=0 temperatura w całym obszarze jest jednakowa i wynosi 500°C. Brzeg obszaru podzielono na 58 stałych elementów, a wnętrze na 113 stałych elementów skończonych. Powierzchnia podstawy odlewu nie oddaje ciepła do otoczenia (q=0), taki sam warunek założono na powierzchni "otworu" o średnicy $R_1=10^{-2}$ [mm] otaczającego oś symetrii tarczy i nadlewu.

-	÷	÷.	÷											
•			•											
			+											
. b	-+			+										
	Ŧ			•										
				•										
•	•		+											_
							i				i			
						1						1 1		
•				•	- ?		i			÷	÷	•	•	
•	•	•	•	•		•	÷	•	•	•	•	•	•	0
•	•	•	•	•		•	•	•	•	•	•	•	•	9



Zadanie rozwiązano metodą kombinowaną przyjmując krok czasu $\Delta t = 75$ [s], a wyniki porównano z rozwiązaniem wykorzystującym klasyczny wariant metody brzegowych równań całkowych (I schemat MEB) - również z wprowadzoną sztucznie funkcją źródła. Wyniki obu rozwiązań przedstawiono na rysunkach 4.8, 4.9 i 4.10. Górne części rysunków odpowiadają rozwiązaniu wynikającemu z zastosowania I schematu MEB, a dolne z zastosowania metody kombinowanej. Jak widać, rozwiązania są bardzo podobne i maksymalna różnica lokalnych i chwilowych temperatur nie przekracza 3K.

Rys. 4.8. Temperatury w węzłach wewnętrznych po czasie 600 s Fig. 4.8. Temperatures at internal points for time 600 s

426 426 425 423 421 418	398 398 397 395 393 391	
429 429 428 426 424 421	401 401 400 398 396 394	
432 432 431 429 426 424	404 403 402 401 399 396	
435 435 433 431 429 426	407 406 405 403 401 398	
138 437 436 434 431 427	410 409 408 406 403 400	
41 440 439 437 433 428	413 412 411 409 405 400	
444 443 442 440 438	416 415 414 412 410	
447 446 446 444 442	418 418 417 416 414	
449 449 449 448 447 446 445 444 443 441 440 437 435 433 430	421 420 420 419 419 418 417 416 415 413 411 409	406 404
451 451 451 450 450 449 448 447 446 444 442 440 438 435 432	423 423 423 422 422 421 421 420 418 417 415 414 411	409 406
453 453 453 452 451 451 450 449 447 446 444 442 440 437 434	425 425 424 424 423 423 422 421 420 419 417 415 413	411 408
454 454 453 453 452 451 450 449 448 447 445 443 441 438 435	425 425 425 425 424 424 423 422 421 420 418 416 414	412 409
448 447 446 444 441 439 436	421 420 419 417 415	412 410
27 426 425 423 421 418	397 396 395 394 392 389	
127 426 425 423 421 418 130 429 428 426 424 421	397 396 395 394 392 389 400 399 398 397 395 392	
427 426 425 423 421 418 430 429 428 426 424 421 433 432 431 429 427 424	397 396 395 394 392 389 400 399 398 397 395 392 403 402 401 400 397 395	
27 426 425 423 421 30 429 428 426 424 421 33 432 431 429 424 421 36 435 434 432 429 426	397 396 395 394 392 389 400 399 398 397 395 392 403 402 401 400 397 395 406 405 404 402 400 397	
27 426 425 423 421 418 30 429 428 426 424 421 33 432 431 429 427 424 36 435 434 432 429 426 38 438 436 434 431 427	397 396 395 394 392 389 400 399 398 397 395 392 403 402 401 400 397 395 406 405 404 402 400 397 409 408 407 405 402 398	
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	397 396 395 394 392 396 400 399 398 397 395 392 403 402 401 400 397 395 406 405 404 402 400 397 409 408 407 405 402 398 412 411 410 408 404 399	
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	397 396 395 394 392 389 400 399 398 397 395 392 403 402 401 400 397 395 406 405 404 402 400 397 409 408 407 405 402 398 412 411 410 408 404 399 415 415 413 411 409	
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	397 396 395 394 392 399 400 399 398 397 395 392 403 402 401 400 397 395 406 405 404 402 400 397 409 408 407 405 402 399 412 411 410 408 404 399 415 415 415 411 409	
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	397 396 395 394 392 389 400 399 398 397 395 392 403 402 401 400 397 395 406 405 404 402 400 397 406 405 404 402 400 397 409 408 407 405 402 398 412 411 410 408 404 399 415 415 413 411 409 418 418 417 415 413 421 420 419 418 418 417 416 414 413 411 408	406 403
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	406 403 408 405
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	406 403 408 405 410 407
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	406 403 408 405 410 407 411 409

Rys. 4.9. Temperatury w węzłach wewnętrznych po czasie 900 s Fig. 4.9. Temperatures at internal points for time 900 s

61



Rys. 4.10. Temperatury w węzłach wewnętrznych po czasie 1200 s Fig. 4.10. Temperatures at internal points for time 1200 s

Literatura do rozdziału 4

2.

3.

4.

5.

6.

7.

C.A. Brebbia, J.C.F. Telles and L.C. Wrobel, Boundary element techniques, Springer-1. Verlag, Berlin & New York 1984.

A.Bokota, Sprawozdanie z CPBP 02.09 (nie publikowane).

McGraw-Hill Book Company, 1981.

C.A.Brebbia, J.Dominiguez, Boundary elements - an introductory course, Comp. Mech. Publications and Mc Graww-Hill Book Co., Southampton and Boston 1992.

P.K.Banerjee, R.Butterfield, Boundary element methods in engineering science,

R.Białecki, A.J.Nowak, R.Nahlik, Zastosowanie osiowo-symetrycznego rozwiazania

podstawowego oraz funkcji Greena w metodzie brzegowych równań całkowych, Materiały XXI Sympozjonu PTMTiS "Modelowanie w mechanice", Beskid Ślaski,

E. Majchrzak, Solution of non-steady thermal diffusion problem in spherical domains using the BEM, Z.N. Katedry Mechaniki Stosowanej Pol. Ślaskiej, 7, 1998, 213-218.

R.Nahlik, Zastosowanie metody brzegowych równań całkowych do rozwiązywania

1982. 29-36.

- nieliniowych zagadnień przewodzenia ciepła, Praca doktorska, Bielsko-Biała 1989.
- M. Abramowitz, I.A. Stegun, Handbook of mathematical functions, Dover Publication, 8. New York 1965.
- J.Spanier, K.B.Oldham, An atlas of functions, Hemisphere Publishing Corporation, 9. Springer-Verlag, Berlin 1987.
- B.Mochnacki, J.Suchy, Modelowanie i symulacja krzepnięcia odlewów, PWN, 10. Warszawa 1993.
- B.Mochnacki, J.Suchy, Numerical methods in computations of foundry processes, 11. Polish Foundrymen's Technical Association, Cracow 1995.
- E.Kacki, Równania różniczkowe cząstkowe w zagadnieniach fizyki i techniki, WNT, 12. Warszawa 1995.
- B. Mochnacki, E. Majchrzak, The artificial heat source method in numerical modelling 13. of non-linear conduction problems, Z.N. Pol. Śl., Mechanika, 121, Gliwice 1995, 241-247.

- E.Majchrzak, B.Mochnacki, The BEM application for numerical solution of nonsteady and non-linear thermal diffusion problems, Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences, Vol. 3, No 4, 1996, 327-346.
- B.Mochnacki, E.Majchrzak, J.Suchy, E.Pawlak, Modelling of Fe-C alloys solidification using the artificial heat source method, Journal of Materials Processing Technology, 64, Elsevier, 1997, 293-302.
- 16. B. Mochnacki, Application of the BEM for numerical modelling of continuous casting, Computational Mechanics, 1, 18, 1996, 62-71.
- 17. R.Szopa, Laboratorium metod numerycznych, Wyd. Pol. Śląskiej, Gliwice 1988.
- 18. E.Majchrzak, B.Mochnacki, Metody numeryczne. Podstawy teoretyczne, aspekty praktyczne i algorytmy, Wyd. Pol. Śląskiej, Gliwice 1996.
- 19. R.Szopa, Metoda elementów brzegowych w modelowaniu stygnięcia odlewów o geometrii walcowej, Krzepnięcie Metali i Stopów, 38, 1998, 31-36.

A series. Company a series bargery & charter a series of a series

- Sim You This
- I Species K.S. Onten As an of the second system of Conservation Strengthered Conservation Strengthered Streng
- And an and the second of the second sec
- The second se
- The state of the s
- The same lit at a lit is a lit is and in the same of the same is

5. METODA KOMBINOWANA DLA OBSZARÓW SFERYCZNYCH

5.1. Rozwiązanie fundamentalne dla obszaru sferycznego

Punktem wyjściowym do prezentowanych niżej rozważań jest równanie wynikające z kryterium MOW dla obszarów przestrzennych (równanie (3.47)). Wykorzystamy przy tym podejście zaproponowane dla obszarów walcowych i klasycznego wariantu MEB przez Brebbię, Tellesa i Wrobla [1] oraz Bokotę [2]. Rozważać będziemy sferyczny układ współ-



rzędnych (ρ , φ , θ) - rys. 5.1. Dodatkowo zakładamy takie położenie układu kartezjańskiego, że $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3) = (0, 0, \xi)$ (co nie zmienia ogólności rozważań). Współrzędne punktu bieżącego $x = (x_1, x_2, x_3)$ w sferycznym układzie współrzędnych wynikają ze znanych wzorów

$$\begin{cases} x_1 = \rho \cos \phi \sin \theta \\ x_2 = \rho \sin \phi \sin \theta \\ x_3 = \rho \cos \theta \end{cases}$$
(5.1)

$$r = \sqrt{\rho^2 + \xi^2 - 2\rho\,\xi\cos\theta} \quad (5.2)$$

Rys. 5.1. Sferyczny układ współrzędnych Fig. 5.1. Spherical co-ordinate system

Elementy powierzchni i objętości kuli wynoszą odpowiednio

 $d\Gamma = R^2 \sin\theta d\theta d\phi$ $d\Omega = \rho^2 \sin\theta d\theta d\phi d\rho$

(5.3)

gdzie R jest promieniem kuli.

Równanie metody odchyłek ważonych przyjmuje postać [3]

$$T(\xi, t^{f+1}) + \frac{R^{2}}{\lambda}q(R, t^{f+1}) \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} T^{*}(r)\sin\theta d\theta d\phi =$$

$$= \frac{R^{2}}{\lambda}T(R, t^{f+1}) \int_{0}^{2\pi\pi} \int_{0}^{q} (r)\sin\theta d\theta d\phi + \int_{0}^{R} \rho^{2} \int_{0}^{2\pi\pi} \int_{0}^{\pi} f(\rho) T^{*}(r)\sin\theta d\theta d\phi d\rho + (5.4)$$

$$+ \frac{1}{\lambda} \int_{0}^{R} \rho^{2} \int_{0}^{2\pi\pi} \int_{0}^{\pi} Q(\rho, t^{f}) T^{*}(r)\sin\theta d\theta d\phi d\rho$$

 $T(\xi, t^{f+1}) + \frac{R^2}{\lambda} \hat{T}^*(\xi, R) q(R, t^{f+1}) = \frac{R^2}{\lambda} \hat{q}^*(\xi, R) T(R, t^{f+1}) + \int_0^R \rho^2 f(\rho) \hat{T}^*(\xi, \rho) d\rho + \frac{1}{\lambda} \int_0^R \rho^2 Q(\rho, t^f) \hat{T}^*(\xi, \rho) d\rho$ (5.5)

66

gdzie

$$\bar{T}^{*}(\xi, \rho) = \int_{0}^{2} \int_{0}^{\pi} T^{*}(r) \sin\theta \, d\theta \, d\phi =$$

$$\int_{0}^{\pi} \frac{1}{\sqrt{\rho^{2} + \xi^{2} - 2\rho\xi}} \exp\left(-\sqrt{\frac{\rho^{2} + \xi^{2} - 2\rho\xi}{a\Delta t}}\right) \sin\theta \, d\theta \, d\phi$$
(5)

oraz

$$^{*}(\xi, \rho) = -\lambda \frac{\partial \hat{T}^{*}(\xi, \rho)}{\partial \rho}$$
(5.7)

.6)

Po scałkowaniu otrzymujemy rozwiązanie fundamentalne dla jednowymiarowego zadania nieustalonej dyfuzji w obszarach sferycznych

$$\hat{T}^{*}(\xi, \rho) = \frac{\sqrt{a\Delta t}}{\rho \xi \sqrt{\beta}} \left[\exp(-|\rho - \xi| \sqrt{\beta}) - \exp(-|\rho + \xi| \sqrt{\beta}) \right]$$
(5.8)

natomiast strumień ciepła wynikający z tego rozwiązania wynosi

$$\bar{q}^{*}(\xi, \rho) = \frac{\lambda}{\rho} \bar{T}^{*}(\xi, \rho) +$$

$$+ \frac{\lambda}{2\xi\rho} \left[\operatorname{sgn}(\rho - \xi) \exp(-|\rho - \xi| \sqrt{\beta}) - \operatorname{sgn}(\rho + \xi) \exp(-|\rho + \xi| \sqrt{\beta}) \right]$$
(5.9)

Zmierzając z $\xi \rightarrow R^-$ w zależności (5.5), otrzymujemy równanie brzegowe w postaci

$$T(R, t^{f+1}) + \frac{R^2}{\lambda} \tilde{T}^*(R, R) q(R, t^{f+1}) = \frac{R^2}{\lambda} \tilde{q}^*(R^-, R) T(R, t^{f+1}) + \int_{0}^{R} \rho^2 f(\rho) \tilde{T}^*(R, \rho) d\rho + \frac{1}{\lambda} \int_{0}^{R} \rho^2 Q(\rho, t^f) \hat{T}^*(R, \rho) d\rho$$
(5.10)

Wyznacza się z niego "brakującą" wartość brzegową (strumień ciepła, jeśli znana jest temperatura brzegowa lub temperaturę brzegową, jeśli znany jest strumień ciepła).

W drugim kroku algorytmu oblicza się temperatury w węzłach wewnętrznych kuli $\xi \in (0, R)$

$$T(\xi, t^{f+1}) = \frac{R^2}{\lambda} \hat{q}^*(\xi, R) T(R, t^{f+1}) - \frac{R^2}{\lambda} \hat{T}^*(\xi, R) q(R, t^{f+1}) + \int_0^R \rho^2 f(\rho) \hat{T}^*(\xi, \rho) d\rho + \frac{1}{\lambda} \int_0^R \rho^2 Q(\rho, t^f) \hat{T}^*(\xi, \rho) d\rho$$
(5.11)

Sposoby numerycznego wyznaczania całek występujących w równaniach (5.10), (5.11) omówiono w podrozdziale 3.2.

5.2. Warstwa kulista

Wyznaczone w podrozdziale 5.1 rozwiązanie fundamentalne wykorzystamy do przybliżonego rozwiązania problemu nieustalonej dyfuzji ciepła w warstwie kulistej. Rozpatrywać będziemy równanie energii w postaci

$$R_{1} < \rho < R_{2}: \quad \frac{\partial T(\rho, t)}{\partial t} = \frac{a}{\rho^{2}} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^{2} \frac{\partial T(\rho, t)}{\partial \rho} \right) + \frac{Q(\rho, t)}{c} \quad (5.12)$$

Dla ustalenia uwagi założymy warunek brzegowy Neumanna na wewnętrznej i warunek brzegowy Robina na zewnętrznej powierzchni warstwy:

$$\rho = R_1 : q(\rho, t) = q_b$$

$$\rho = R_2 : q(\rho, t) = \alpha [T(\rho, t) - T^{\circ}]$$
(5.13)

Opis matematyczny uzupełnia warunek początkowy

t = 0: $T(\rho, 0) = T_0(\rho)$ (5.14)

Do rozważań wprowadzamy siatkę czasu zdefiniowaną wzorem (3.3). Równanie różniczkowe dyfuzji ciepła na odcinku $[t^{f}, t^{f+1}]$ lub $[t^{f-1}, t^{f+1}]$ zastępujemy równaniem wynikającym z różnicowej aproksymacji pochodnej temperatury względem czasu [4], czyli

$$\frac{T(\rho, t^{f+1}) - T(\rho, t^{f})}{\Delta t} = \frac{a}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial T(\rho, t^{f+1})}{\partial \rho} \right) + \frac{Q(\rho, t^{f})}{c}$$
(5.15)

lub

$$\frac{3T(\rho, t^{f+1}) - 4T(\rho, t^{f}) + T(\rho, t^{f-1})}{\Delta t} = \frac{a}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial T(\rho, t^{f+1})}{\partial \rho} \right) + \frac{Q(\rho, t^{f})}{c}$$
(5.16)

Wprowadzamy następujące oznaczenia

- dla liniowej aproksymacji po czasie

$$\beta = \frac{1}{a\Delta t}, \quad f(\rho) = \frac{1}{a\Delta t}T(\rho, t^{f}) \quad (5.17)$$

- dla aproksymacji kwadratowej

$$B = \frac{3}{2a\Delta t}, \quad f(\rho) = \frac{1}{2a\Delta t} [4T(\rho, t^{f}) - T(\rho, t^{f-1})] \quad (5.18)$$

W ten sposób otrzymuje się zunifikowaną postać równań (5.15) oraz (5.16), a mianowicie

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial T(\rho, t^{f+1})}{\partial \rho} \right) - \beta T(\rho, t^{f+1}) + f(\rho) + \frac{Q(\rho, t^f)}{\lambda} = 0 \quad (5.19)$$

lub

$$\frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial T(\rho, t^{f+1})}{\partial \rho} \right) - \beta \rho^2 T(\rho, t^{f+1}) + \rho^2 f(\rho) + \frac{\rho^2 Q(\rho, t^f)}{\lambda} = 0 \quad (5.20)$$

Kryterium metody odchyłek ważonych prowadzi do zależności

$$\int_{R_{1}}^{R_{2}} \left[\frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^{2} \frac{\partial T(\rho, t^{f+1})}{\partial \rho} \right) - \beta \rho^{2} T(\rho, t^{f+1}) + \rho^{2} f(\rho) + \frac{\rho^{2} Q(\rho, t^{f})}{\lambda} \right] T^{*}(\xi, \rho) d\rho = 0 \quad (5.21)$$

Funkcja wagi (5.8) spełnia równanie

$$\frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial^*(\xi, \rho)}{\partial \rho} \right) - \beta \rho^2 T^*(\xi, \rho) = -\delta(\xi, \rho)$$
(5.22)

gdzie $\delta(\xi, \rho)$ jest deltą Diraca (dla uproszczenia oznaczeń pomijamy daszek nad T^* oraz q^*). Po dwukrotnym scałkowaniu przez części pierwszego składnika równania (5.21) otrzymujemy

$$\int_{R_{1}}^{R_{2}} \left[\frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^{2} \frac{\partial T^{*}(\xi, \rho)}{\partial \rho} \right) - \beta \rho^{2} T^{*}(\xi, \rho) \right] T(\rho, t^{f+1}) d\rho + \\ + \left[\rho^{2} T^{*}(\xi, \rho) \frac{\partial T(\rho, t^{f+1})}{\partial \rho} - \rho^{2} T(\rho, t^{f+1}) \frac{\partial T^{*}(\xi, \rho)}{\partial \rho} \right]_{\rho=R_{1}}^{\rho=R_{2}} + (5.23) \\ + \int_{R_{1}}^{R_{2}} \rho^{2} f(\rho) T^{*}(\xi, \rho) d\rho + \frac{1}{\lambda} \int_{R_{1}}^{R_{2}} \rho^{2} Q(\rho, t^{f}) T^{*}(\xi, \rho) d\rho = 0$$

Wykorzystując własność rozwiązania fundamentalnego oraz twierdzenie o całce iloczynu funkcji, z których jedna jest funkcją Diraca, dochodzimy do równania

$$T(\xi, t^{f+1}) + \left[\frac{\rho^2}{\lambda}T^*(\xi, \rho)q(\rho, t^{f+1})\right]_{\rho=R_1}^{\rho=R_2} = \left[\frac{\rho^2}{\lambda}q^*(\xi, \rho)T(\rho, t^{f+1})\right]_{\rho=R_1}^{\rho=R_2} + \int_{R_1}^{R_2}\rho^2 f(\rho)T^*(\xi, \rho)d\rho + \frac{1}{\lambda}\int_{R_1}^{R_2}\rho^2 Q(\rho, t^f)T^*(\xi, \rho)d\rho$$
(5.24)

przy czym $q(\rho, t^{f+1}) = -\lambda \partial T(\rho, t^{f+1})/\partial \rho, q^*(\xi, \rho) = -\lambda \partial T^*(\xi, \rho)/\partial \rho.$ Równanie (5.24) można zapisać w postaci

$$T(\xi, t^{f+1}) + \frac{R_2^2}{\lambda} T^*(\xi, R_2) q(R_2, t^{f+1}) - \frac{R_1^2}{\lambda} T^*(\xi, R_1) T(R_1, t^{f+1}) =$$

$$= \frac{R_2^2}{\lambda} q^*(\xi, R_2) T(R_2, t^{f+1}) - \frac{R_1^2}{\lambda} q^*(\xi, R_1) T(R_1, t^{f+1}) + p(\xi) + z(\xi)$$
(5.25)

gdzie

$$p(\xi) = \int_{R_{1}}^{R_{2}} \rho^{2} f(\rho) T^{*}(\xi, \rho) d\rho$$
 (5.26)

oraz

$$z(\xi) = \frac{1}{\lambda} \int_{R_1}^{R_2} \rho^2 Q(\rho, t^f) T^*(\xi, \rho) d\rho$$
 (5.27)

Zmierzając z ξ do brzegu obszaru, tzn. $\xi \rightarrow R_1^+, \xi \rightarrow R_2^-$, dochodzimy do równań

$$T(R_1, t^{f+1}) + \frac{R_2^2}{\lambda} T^*(R_1, R_2) q(R_2, t^{f+1}) - \frac{R_1^2}{\lambda} T^*(R_1, R_1) T(R_1, t^{f+1}) =$$

$$= \frac{R_2^2}{\lambda} q^*(R_1^+, R_2) T(R_2, t^{f+1}) - \frac{R_1^2}{\lambda} q^*(R_1^+, R_1) T(R_1, t^{f+1}) + p(R_1) + z(R_1)$$
(5.28)

oraz

$$T(R_{2}, t^{f+1}) + \frac{R_{2}^{2}}{\lambda}T^{*}(R_{2}, R_{2})q(R_{2}, t^{f+1}) - \frac{R_{1}^{2}}{\lambda}T^{*}(R_{2}, R_{1})T(R_{1}, t^{f+1}) =$$

$$= \frac{R_{2}^{2}}{\lambda}q^{*}(R_{2}^{-}, R_{2})T(R_{2}, t^{f+1}) - \frac{R_{1}^{2}}{\lambda}q^{*}(R_{2}^{-}, R_{1})T(R_{1}, t^{f+1}) + p(R_{2}) + z(R_{2})$$
(5.29)

które można zapisać w postaci macierzowej
$$\begin{bmatrix} -\frac{R_{1}^{2}}{\lambda}T^{*}(R_{1}, R_{1}) & \frac{R_{2}^{2}}{\lambda}T^{*}(R_{1}, R_{2}) \\ -\frac{R_{1}^{2}}{\lambda}T^{*}(R_{2}, R_{1}) & \frac{R_{2}^{2}}{\lambda}T^{*}(R_{2}, R_{2}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q(R_{1}, t^{f+1}) \\ q(R_{2}, t^{f+1}) \end{bmatrix} =$$
(5.30)
$$= \begin{bmatrix} -\frac{R_{1}^{2}}{\lambda}q^{*}(R_{1}^{*}, R_{1}) - 1 & \frac{R_{2}^{2}}{\lambda}q^{*}(R_{1}^{*}, R_{2}) \\ -\frac{R_{1}^{2}}{\lambda}q^{*}(R_{2}^{*}, R_{1}) & \frac{R_{2}^{2}}{\lambda}q^{*}(R_{2}^{*}, R_{2}) - 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T(R_{1}, t^{f+1}) \\ T(R_{2}, t^{f+1}) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} p(R_{1}) \\ p(R_{2}) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} z(R_{1}) \\ z(R_{2}) \end{bmatrix}$$

lub

$$\frac{g_{11}}{g_{21}} \frac{g_{12}}{g_{21}} \begin{bmatrix} q(R_1, t^{f+1}) \\ q(R_2, t^{f+1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T(R_1, t^{f+1}) \\ T(R_2, t^{f+1}) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix}$$
(5.31)

Dla założonych w opisie matematycznym warunków brzegowych (5.13) układ równań (5.31) przyjmuje postać

$$\begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_b \\ \alpha \begin{bmatrix} T(R_2, t^{f+1}) - T^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T(R_1, t^{f+1}) \\ T(R_2, t^{f+1}) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix}$$
(5.32)

czyli

$$\begin{bmatrix} -h_{11} & \alpha g_{12} - h_{12} \\ -h_{21} & \alpha g_{22} - h_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T(R_1, t^{f+1}) \\ T(R_2, t^{f+1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -g_{11} & \alpha g_{12} \\ -g_{21} & \alpha g_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_b \\ T^{\circ} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix}$$
(5.33)

Z tego układu wyznacza się "brakujące" temperatury brzegowe w chwili t^{f+1} , a następnie strumień ciepła dla $\rho = R_2$

$$q(R_2, t^{f+1}) = \alpha \left[T(R_2, t^{f+1}) - T^{\infty} \right]$$
(5.34)

Wartości temperatur w wewnętrznych punktach obszaru dla $\xi \in (R_1, R_2)$ oblicza się na podstawie równania (por. wzór (5.25))

$$T(\xi, t^{f+1}) = \frac{R_2^2}{\lambda} q^*(\xi, R_2) T(R_2, t^{f+1}) - \frac{R_1^2}{\lambda} q^*(\xi, R_1) T(R_1, t^{f+1}) + \frac{R_2^2}{\lambda} T^*(\xi, R_2) q(R_2, t^{f+1}) + \frac{R_1^2}{\lambda} T^*(\xi, R_1) q(R_1, t^{f+1}) + p(\xi) + z(\xi)$$
(5.35)

Należy w tym miejscu przypomnieć, że zastosowanie schematu rzędu wyższego wymaga znajomości pola temperatury z dwóch poprzednich poziomów czasu, w związku z

powyższym, pierwsze przejście $t^0 \rightarrow t^1$ realizuje się przy założeniu liniowej aproksymacji szybkości stygnięcia (nagrzewania). Kolejne kroki $t^1 \rightarrow t^2$, ..., $t^f \rightarrow t^{f+1}$ można przeliczać wykorzystując aproksymację kwadratową.

5.3. Obszary niejednorodne

Nieustalone pole temperatury w niejednorodnym obszarze sferycznym opisuje następujący układ równań

$$R_{m-1} < \rho < R_m : \frac{\partial T_m(\rho, t)}{\partial t} = \frac{a_m}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left[\rho^2 \frac{\partial T_m(\rho, t)}{\partial \rho} \right]$$
(5.36)

gdzie $m=1, 2, ..., M, a_m = \lambda_m / c_m$ jest współczynnikiem dyfuzji ciepła "m" warstwy (c_m - ciepło właściwe na jednostkę objętości, λ_m - współczynnik przewodzenia ciepła). Dla uproszczenia dalszych wywodów założono, że rozpatrywane obszary są obszarami bezźródłowymi.

Dla $\rho = R_m, m=1, 2, ..., M-1$ przyjmuje się warunki ciągłości

$$\rho = R_m: \begin{cases} -\lambda_m \frac{\partial T_m(\rho, t)}{\partial \rho} = -\lambda_{m+1} \frac{\partial T_{m+1}(\rho, t)}{\partial \rho} \\ T_m(\rho, t) = T_{m+1}(\rho, t) \end{cases}$$
(5.37)

natomiast dla $\rho = R_0$ oraz $\rho = R_M$ założono warunki brzegowe w ogólnej postaci

$$\rho = R_0: \quad \Phi_1 \left[T_1(\rho, t), \frac{\partial T_1(\rho, t)}{\partial \rho} \right] = 0$$

$$\rho = R_M: \quad \Phi_2 \left[T_M(\rho, t), \frac{\partial T_M(\rho, t)}{\partial \rho} \right] = 0$$
(5.38)

Znany jest również rozkład temperatury w poszczególnych warstwach dla czasu t = 0

$$T_m(\rho, 0) = T_{m0}(\rho)$$
(5.39)

W pierwszej kolejności dla każdego podobszaru $R_{m-1} < \rho < R_m$ zapisujemy równanie wynikające z kryterium odchyłek ważonych (por. wzór (5.25))

$$T_{m}(\xi, t^{f+1}) + g_{m}(\xi, R_{m})q_{m}(R_{m}, t^{f+1}) - g_{m}(\xi, R_{m-1})q_{m}(R_{m-1}, t^{f+1}) = = h_{m}(\xi, R_{m})T_{m}(R_{m}, t^{f+1}) - h_{m}(\xi, R_{m-1})T_{m}(R_{m-1}, t^{f+1}) + p_{m}(\xi)$$
(5.40)

gdzie

$$g_m(\xi, \rho) = \frac{\rho^2}{\lambda} T_m^*(\xi, \rho)$$
(5.41)

Warunek ciągłości dla $\rho = R_1$ można zapisać w postaci (wzór (5.37))

$$\rho = R_1 : \begin{cases} q_1(\rho, t^{f+1}) = q_2(\rho, t^{f+1}) = q(R_1, t^{f+1}) \\ T_1(\rho, t^{f+1}) = T_2(\rho, t^{f+1}) = T(R_1, t^{f+1}) \end{cases} (5.49)$$





Wprowadzamy równania (5.49) do układów (5.47) dla m=1, 2. Biorąc dodatkowo pod uwagę warunki brzegowe dla $\rho = R_0$ i $\rho = R_2$ mamy

$$\begin{bmatrix} g_{11}^{1} & g_{12}^{1} \\ g_{21}^{1} & g_{22}^{1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_{b} \\ q(R_{1}, t^{f+1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_{11}^{1} & h_{12}^{1} \\ h_{21}^{1} & h_{22}^{1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{1}(R_{0}, t^{f+1}) \\ T(R_{1}, t^{f+1}) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} p_{1}^{1} \\ p_{2}^{1} \end{bmatrix}$$
(5.50)

oraz

$$\begin{bmatrix} g_{11}^2 & g_{12}^2 \\ g_{21}^2 & g_{22}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q(R_1, t^{f+1}) \\ \alpha \begin{bmatrix} T_2(R_2, t^{f+1}) - T^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_{11}^2 & h_{12}^2 \\ h_{21}^2 & h_{22}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T(R_1, t^{f+1}) \\ T_2(R_2, t^{f+1}) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} p_1^2 \\ p_2^2 \end{bmatrix}$$
(5.51)

Po przeniesieniu niewiadomych na lewą stronę otrzymuje się

$$\begin{bmatrix} -h_{11}^{1} & -h_{12}^{1} & g_{12}^{1} \\ -h_{21}^{1} & -h_{22}^{1} & g_{22}^{1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{1}(R_{0}, t^{f+1}) \\ T(R_{1}, t^{f+1}) \\ q(R_{1}, t^{f+1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -g_{11}^{1}q_{b} + p_{1}^{1} \\ -g_{21}^{1}q_{b} + p_{2}^{1} \end{bmatrix}$$
(5.52)

oraz

72

$$h_m(\xi, \rho) = \frac{\rho^2}{\lambda_-} q_m^*(\xi, \rho)$$
 (5.42)

i.

oraz

$$p_{m}(\xi) = \int_{R_{m-1}}^{R_{m}} \rho^{2} f(\rho) T_{m}^{*}(\xi, \rho) d\rho$$
(5.43)

Rozwiązania fundamentalne wyrażają się zależnościami (por. wzór (5.8))

$$R_{m-1} < \xi, \rho < R_m : T_m^*(\xi, \rho) = \frac{\sqrt{a_m \Delta t}}{\rho \xi \sqrt{\beta}} \left[\exp(-|\rho - \xi| \sqrt{\beta}) - \exp(-|\rho + \xi| \sqrt{\beta}) \right] (5.44)$$

natomiast strumienie ciepła wynikające z tych rozwiązań wynoszą

$$q^{*}(\xi, \rho) = -\lambda_{m} \frac{\partial T^{*}(\xi, \rho)}{\partial \rho} = \frac{\lambda_{m}}{\rho} T^{*}(\xi, \rho) + \frac{\lambda_{m}}{2\xi\rho} [\operatorname{sgn}(\rho - \xi) \exp(-|\rho - \xi|\sqrt{\beta}) - \operatorname{sgn}(\rho + \xi) \exp(-|\rho + \xi|\sqrt{\beta})]$$
(5.45)

Dla $\xi \rightarrow R_{m-1}^+$ oraz $\xi \rightarrow R_m^-$ otrzymujemy następujące równania

$$\begin{bmatrix} -g_m(R_{m-1}, R_{m-1}) & g_m(R_{m-1}, R_m) \\ -g_m(R_m, R_{m-1}) & g_e(R_m, R_m) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_m(R_{m-1}, t^{f+1}) \\ q_m(R_m, t^{f+1}) \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} -h_m(R_{m-1}^*, R_{m-1}) - 1 & h_m(R_{m-1}^*, R_m) \\ -h_m(R_m^-, R_{m-1}) & h_m(R_m^+, R_m) - 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_m(R_{m-1}, t^{f+1}) \\ T_m(R_m, t^{f+1}) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} p_m(R_{m-1}) \\ p_m(R_m) \end{bmatrix}$$
(5.46)

lub

$$\begin{bmatrix} g_{11}^{m} g_{12}^{m} \\ g_{21}^{m} g_{22}^{m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_{m}(R_{m-1}, t^{f+1}) \\ q_{m}(R_{m}, t^{f+1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_{11}^{m} h_{12}^{m} \\ h_{21}^{m} h_{22}^{m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{m}(R_{m-1}, t^{f+1}) \\ T_{m}(R_{m}, t^{f+1}) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} p_{1}^{m} \\ p_{2}^{m} \end{bmatrix}$$
(5.47)

Końcowy układ rozwiązujący dla obszaru wielowarstwowego otrzymuje się poprzez sprzężenie układów typu (5.47) za pomocą warunków ciągłości (5.37) dla $\rho = R_m$, m = 1, ..., M-1 [5].

Dła przykładu, rozpatrywać będziemy obszar dwuwarstwowy (M=2) - rys. 5.2 zakładając następujące warunki brzegowe dla $\rho = R_0$ oraz $r = r_2$

$$\rho = R_0: \quad q_1(\rho, t^{f+1}) = q_b$$

$$\rho = R_2: \quad q_2(\rho, t^{f+1}) = \alpha [T_2(\rho, t^{f+1}) - T^{\infty}]$$
(5.48)

$$\begin{bmatrix} -h_{11}^2 & g_{11}^2 & \alpha g_{12}^2 - h_{12}^2 \\ -h_{21}^2 & g_{21}^2 & \alpha g_{22}^2 - h_{22}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T(R_1, t^{f+1}) \\ q(R_1, t^{f+1}) \\ T_2(R_2, t^{f+1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha g_{12}^2 T^* + p_1^2 \\ \alpha g_{22}^2 T^* + p_2^2 \end{bmatrix}$$
(5.53)

Ostatecznie dochodzimy do następującego układu

$$\begin{vmatrix} -h_{11}^{1} & -h_{12}^{1} & g_{12}^{1} & 0 \\ -h_{21}^{1} & -h_{22}^{1} & g_{22}^{1} & 0 \\ 0 & -h_{11}^{2} & g_{11}^{2} & \alpha g_{12}^{2} - h_{12}^{2} \\ 0 & -h_{21}^{2} & g_{21}^{2} & \alpha g_{22}^{2} - h_{22}^{2} \end{vmatrix} \begin{bmatrix} T_{1}(R_{0}, t^{f+1}) \\ T(R_{1}, t^{f+1}) \\ q(R_{1}, t^{f+1}) \\ T_{2}(R_{2}, t^{f+1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -g_{11}^{1}q_{b} + p_{1}^{1} \\ -g_{21}q_{b} + p_{2}^{1} \\ \alpha g_{12}^{2}T^{-} + p_{1}^{2} \\ \alpha g_{22}^{2}T^{-} + p_{2}^{2} \end{bmatrix}$$
(5.54)

przy czym

$$q_2(R_2, t^{f+1}) = \alpha \left[T_2(R_2, t^{f+1}) - T^{\infty} \right]$$
(5.55)

Znajomość wartości brzegowych dla $\rho = R_0$, $\rho = R_1$ oraz $\rho = R_2$ pozwala na obliczenie temperatur w węzłach wewnętrznych dla czasu t^{f+1} na podstawie równania

$$T_{m}(\xi, t^{f+1}) = g_{m}(\xi, R_{m-1})q_{m}(R_{m-1}, t^{f+1}) - g_{m}(\xi, R_{m})q_{m}(R_{m}, t^{f+1}) + + h_{m}(\xi, R_{m})T_{m}(R_{m}, t^{f+1}) - h_{m}(\xi, R_{m-1})T_{m}(r_{m-1}, t^{f+1}) + p_{m}(\xi)$$
(5.56)

Podobny algorytm można wykorzystać w przypadku niezerowego oporu cieplnego na styku między rozpatrywanymi podobszarami. Warunek ciągłości ma postać

$$\rho = R_1 : -\lambda_1 \frac{\partial T_1(\rho, t)}{\partial \rho} = \frac{T_1(\rho, t) - T_2(\rho, t)}{Res} = -\lambda_2 \frac{\partial T_2(\rho, t)}{\partial \rho}$$
(5.57)

lub

$$\rho = R_1 : \begin{cases} q_1(\rho, t^{f+1}) = q_2(\rho, t^{f+1}) = q(R_1, t^{f+1}) \\ T_2(\rho, t^{f+1}) = T_1(\rho, t^{f+1}) - Res \cdot q(R_1, t^{f+1}) \end{cases}$$
(5.58)

gdzie Res jest oporem cieplnym. Dla Res =0 ostatni warunek przyjmuje postać (5.49). Można bowiem zauważyć, że strumień ciepła będzie miał wartość skończoną jedynie w przypadku, gdy iloraz różnicy temperatur i oporu cieplnego przyjmie postać symbolu nieoznaczonego [0/0], czyli $T_1(\rho, t) = T_2(\rho, t)$.

Układ rozwiązujący dla takiego zadania z dodatkowym oporem cieplnym styku jest następujący

$$\begin{vmatrix} -h_{11}^{1} & -h_{12}^{1} & g_{12}^{1} & 0 \\ -h_{21}^{1} & -h_{22}^{1} & g_{22}^{1} & 0 \\ 0 & -h_{21}^{2} & g_{21}^{2} + Res h_{11}^{2} & \alpha g_{12}^{2} - h_{12}^{2} \\ 0 & -h_{21}^{2} & g_{21}^{2} + Res h_{21}^{2} & \alpha g_{22}^{2} - h_{22}^{2} \end{vmatrix} \begin{bmatrix} T_{1}(R_{0}, t^{f+1}) \\ T_{1}(R_{1}, t^{f+1}) \\ q(R_{1}, t^{f+1}) \\ T_{2}(R_{2}, t^{f+1}) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -g_{11}q_{b} + p_{1}^{1} \\ -g_{21}q_{b} + p_{2}^{1} \\ \alpha g_{12}^{2}T^{m} + p_{1}^{2} \\ \alpha g_{22}^{2}T^{m} + p_{2}^{2} \\ \alpha g_{22}^{2}T^{m} + p_{2}^{2} \end{vmatrix}$$
(5.59)

równocześnie

$$T_2(R_1, t^{f+1}) = T_1(R_1, t^{f+1}) - Res \cdot q(R_1, t^{f+1})$$
(5.60)

5.4. Przykłady obliczeń

Przykład pierwszy dotyczy zadania brzegowo-początkowego, dla którego temperatura brzegowa na powierzchni kuli ma stałą wartość $T(R, t) = T_b$, natomiast dla t=0: $T(\rho, 0)=0$. Zadanie takie posiada rozwiązanie dokładne cytowane m.in. w [6, 7]. Obliczenia testujące pokazały, że bardzo dobrą dokładność rozwiązania numerycznego uzyskuje się dla szerokiego przedziału kroków czasu i uzyskane wyniki dla siatek odpowiadających przyrostom liczb Fouriera $\Delta Fo \in [0.001, 0.009]$ są praktycznie takie same jak rozwiązania analityczne. Na rysunkach 5.3 i 5.4 pokazano krzywe nagrzewania w wybranych punktach kuli odpowiadających promieniom $\rho=0.05R, 0.5R, 0.75R, 0.95R$. Pierwsze rozwiązanie uzyskano dla następujących danych: $R=0.1[m], T_b=100[^{\circ}C] = \lambda=35[W/mK], c=4.875\cdot10^{6} [J/m^{3}K], \Delta t=4.17[s] (\Delta Fo=0.003) oraz <math>\Delta t=8.35[s] (\Delta Fo=0.006)$, natomiast drugie dla $R=0.2[m], T_b=100[^{\circ}C], \lambda=1[W/mK], c=1.75\cdot10^{6} [J/m^{3}K], \Delta t=210[s] (\Delta Fo=0.003) oraz <math>\Delta t=420[s]$ ($\Delta Fo=0.006$). Tak więc rozpatrywano ekstremalnie różne parametry termofizyczne materiału kuli. Na omawianych rysunkach zaznaczono również rozwiązanie dokładne, ale wszystkie trzy wyniki są prawie takie same.

Bardzo dobrą zgodność rozwiązania numerycznego i analitycznego uzyskano również dla zadania z warunkiem brzegowym trzeciego rodzaju: $q(R, t) = \alpha[T(R, t) - T^{\infty}]$ (jak poprzednio α jest współczynnikem wnikania, a T^{∞} - temperaturą otoczenia). Na rysunku 5.5 pokazano rozwiązanie dokładne (symbole) i rozwiązania numeryczne (linie ciągłe) dla następujących parametrów: R=0.2, $\lambda=35$ [W/mK], $c=4.875 \cdot 10^6$ [J/m³ K], $\alpha=350$ [W/m² K] (liczba Biota Bi=1), $T^{\infty}=0$, temperatura początkowa $T(\rho, 0)=100$ °C, Δ Fo=0.002, 0.003, 0.006, 0.01. Krzywe stygniecia odpowiadają punktom $\rho=0.05R$, 0.5*R*, 0.75*R*, 0.95*R*.

Podsumowując, należy stwierdzić, że zaproponowany w podrozdziale 5.1 algorytm metody kombinowanej zapewnia bardzo dużą dokładność rozwiązania przybliżonego.

the second property of the party of the second second







Rys. 5.4. Krzywe nagrzewania (przykład 2) Fig. 5.4. Heating curves (example 2)





Rys. 5.5. Krzywe stygnięcia Fig. 5.5. Cooling curves

Kolejna seria obliczeń testujących dotyczyła algorytmu dla warstwy kulistej opisanego w podrozdziale 5.2. Niżej zostaną przedstawione trzy z przeliczonych przykładów. W przykładzie pierwszym rozważano staliwną warstwę kulistą o promieniach $R_1 = 0.05$ [m], $R_2=0.1$ [m]. Krok czasu zmieniano od $\Delta t=1$ [s] (Δ Fo=0.03) do $\Delta t=2$ [s] (Δ Fo=0.06). Na powierzchniach granicznych warstwy założono warunki $q(R_1, t) = 0$, $T(R_2, t) = 100^{\circ}$ C, natomiast temperatura początkowa warstwy wynosiła $T_0 = 100^{\circ}$ C. Na rys. 5.6 pokazano krzywe nagrzewania w pobliżu powierzchni granicznych, w środku warstwy i w odległości $3/4(R_2-R_1)$. Wynik porównano z rozwiązaniem dokładnym i stwierdzono bardzo dobrą zgodność rozwiązań. Przykład drugi dotyczy warstwy kulistej ($R_1 = 0.1$ [m], $R_2 = 0.2$ [m]) wykonanej z materiału izolacyjnego o parametrach $\lambda = 1$ [W/mK], $c = 1.75 \cdot 10^6$ [J/m³ K]. Przyjęto kroki czasu $\Delta t = 52.5$ [s] i $\Delta t = 105$ [s], co odpowiadało przyrostowi czasu bezwymiarowego $\Delta F_0 = 0.003$ i $\Delta F_0 = 0.006$. Przyjęto, że dla $\rho = R_1$: $q(\rho, t) = 0$, dla $\rho = R_2$: $T_{\rm b} = 100 \,^{\circ}$ C, $T(\rho, 0) = 0$. Wyniki przedstawione na rys. 5.7 odpowiadają obliczonym analitycznie i numerycznie krzywym nagrzewania w punktach zlokalizowanych podobnie jak w przykładzie poprzednim. Trzeci z przedstawionych przykładów różni się od poprzednich parametrami geometrycznymi ($R_1=1$ [m], $R_2=2$ [m]) i termofizycznymi ($\lambda=1$ [W/mK], $c=1[J/m^{3}K]$). Dla powyższych danych krok czasu odpowiada przyrostowi liczby Fouriera, na rys. 5.8 zaznaczono rozwiązania dla kroków $\Delta t = \Delta Fo = 0.003$ i $\Delta t = \Delta Fo = 0.006$ oraz dokładne. Obliczenia testujące, których fragmenty omówiono wyżej, w pełni potwierdziły bardzo dobra dokładność rozwiązania numerycznego problemu dyfuzji w warstwie kulistej.

77

T[°C]





Rys. 5.6. Krzywe stygnięcia - warstwa (przykład 1) Fig. 5.6. Cooling curves - shell (example 1)



Fig. 5.7. Cooling curves - shell (example 2)



Rys. 5.8. Krzywe stygnięcia - warstwa (przykład 3) Fig. 5.8. Cooling curves - shell (example 3)

W toku dalszych badań testowano dokładność algorytmu dla nieustalonej dyfuzji w obszarach niejednorodnych. Rozpatrywano m.in. kulę wykonaną z żeliwa ($R_1=0.05[m]$) wzmocnioną warstwą staliwną o grubości 0.01[m]. Temperatura początkowa obszaru wewnętrznego wynosiła $T_{10} = 20^{\circ}$ C. W omawianym przykładzie kulę żeliwną potraktowano jako warstwę, której promień wewnętrzny wynosi $R_0 = 10^{-5}$ [m] - chciano bowiem zbadać dodatkowo przydatność algorytmu opisanego w podrozdziale 5.2 do obliczeń dyfuzji ciepła w kuli pełnej traktowanej jako warstwa sferyczna o bardzo małym promieniu wewnętrznym. Temperatura początkowa powłoki zewnętrznej wynosiła $T_{20} = 300 \,^{\circ}$ C. Duże zróżnicowanie tych temperatur wynika z potrzeby zapewnienia dobrego przylegania warstw po osiągnięciu przez nie temperatury otoczenia, a z punktu widzenia obliczeń testujących chodziło o uzyskanie dużych gradientów temperarury w pobliżu brzegu - a więc niekorzystnych z punktu widzenia symulacji numerycznej warunków przepływu ciepła na styku warstw. Parametry cieplne podobszarów były następujące: $\lambda_1 = 53$ [W/mK], $c_1 = 3.917 \cdot 10^6$ [J/m³ K], $\lambda_2 = 30$ [W/mK], $c_2 = 4.875 \cdot 10^6$ [J/m³K]. Współczynnik wnikania ciepła na powierzchni zewnętrznej $\rho = R_2$: $\alpha = 30$ [W/m²K], temperatura otoczenia $T^{\infty} = 20^{\circ}$ C. Dla $\rho = R_0$ (umowne wydrążenie wokół środka kuli) przyjęto warunek adiabatyczny. Wnętrze obszaru podzielono na 25 elementów liniowych, przyjęto krok czasu $\Delta t = 2.5[s]$ (rys. 5.9) i $\Delta t = 1.25$ (rys. 5.10).

Otrzymane wyniki porównano z wielokrotnie weryfikowanym rozwiązaniem uzyskanym metodą różnic skończonych [8] (symbole na rysunkach 5.9 i 5.10). Należy podkreślić, że rozwiązania są bardzo podobne - nieco lepszą zgodność uzyskano dla kroku czasu $\Delta t = 1.25$ [s].

79





Rys. 5.9. Pole temperatury ($\Delta t = 2.5[s]$) Fig. 5.9. Temperature field ($\Delta t = 2.5[s]$)



Rys. 5.10. Pole temperatury ($\Delta t = 1.25$ [s]) Fig. 5.10. Temperature field ($\Delta t = 1.25$ [s]) Drugi przykład dotyczy problemu przepływu ciepła w przypadku niezerowego oporu cieplnego między warstwami [9]. Założono, że $Res = const = 0.001[m^2 K/W]$. Geometria oraz parametry termofizyczne podobszarów są takie same jak w przykładzie poprzednim. Dla $\rho = R_0$: $q(\rho, t) = 0$, dla $\rho = R_2$: $\alpha = 30$ [W/m² K], $T^{\infty} = 20^{\circ}$ C, temperatury początkowe $T_{10} = 20^{\circ}$ C, $T_{20} = 300^{\circ}$ C. Wyniki obliczeń pokazano na rysunku 5.11. Pełne linie odpowiadają rozwiązaniu własnemu, a symbole rozwiązaniu uzyskanemu metodą różnic skończonych.

Zgodność obu wyników jest w pełni zadowalająca. Tak więc potwierdzono poprawność, dokładność i efektywność zaproponowanego w podrozdziale 5.3 algorytmu dla obszarów niejednorodnych.



Rys. 5.11. Rozwiązanie z oporem cieplnym ($\Delta t = 1.25$ [s]) Fig. 5.11. The solution with thermal resistance ($\Delta t = 1.25$ [s])

Przykłady zastosowań algorytmu metody kombinowanej dla obszarów sferycznych w zagadnieniach odlewniczych zostaną przedstawione w rozdziale następnym (krzepnięcie odlewu ze stopu Cu-Zn z uwzględnieniem makrosegregacji oraz symulacja przepływu ciepła w objętości kontrolnej kompozytu odlewanego). Zadania te rozwiązano łącząc metodę kombinowaną z innymi metodami numerycznymi (metodą bilansów elementarnych [10, 11] i metodą elementów skończonych np. [12]), aby pokazać możliwości konstrukcji algorytmów hybrydowych, których elementem jest metoda kombinowana.

Literatura do rozdziału 5

- C.A.Brebbia, J.C.F.Telles and L.C.Wrobel, Boundary element techniques, Springer-Verlag, Berlin & New York 1984.
- 2. A.Bokota, Sprawozdanie z CPBP 02.09 (nie publikowane).
- R.Szopa, Application of combined BEM for numerical modelling of heat diffusion in spherical domains, Zeszyty Naukowe Katedry Mechaniki Stosowanej Politechniki Śląskiej, 6, 1998, 329-334.
- 4. D.A.S. Curran, M.Cross and B.A.Lewis, Solution of parabolic differential equations by the BEM using discretization in time. Appl. Math. Modelling, 4, 1980, 398-400.
- 5. E.Majchrzak, R.Szopa, Modelling of non-steady heat transfer in non-homogeneous spherical domains using combined variant of the BEM, Fifth International Conference on Advanced Computational Methods in Heat Transfer, Heat Transfer V, Computational Mechanics Publications, Southampton, UK and Boston, USA, 43-52.
- E.Kacki, Równania różniczkowe cząstkowe w zagadnieniach fizyki i techniki, WNT, Warszawa 1995.
- 7. E.Kącki, Termokinetyka, WNT, Warszawa 1966.
- B. Mochnacki and J.S.Suchy, Numerical methods in computations of foundry processes, PFTA, Cracow 1995.
- 9. R.Szopa, Numerical modelling of heat diffusion in spherical domains using the combined variant of the BEM, Conference on Numerical Methods and Computational Mechanics, August 24-27, 1998, Miskolc, Hungary, Book of Abstracts, 110-111.
- 10. J.Szargut, Obliczenia cieplne pieców przemysłowych, Śląsk, Katowice 1977.
- 11. Poradnik Inżyniera, Odlewnictwo, t. 2, rozdz. XVIII, Metody matematyczne w cieplnych obliczeniach procesów odlewniczych, WNT, Warszawa 1986.
- 12. A.R.Mitchel, R.Wait, The finite element method in partial differential equations, Chichester, J.Willey and Sons, 1977.

6. MODELOWANIE NUMERYCZNE PROCESU KRZEPNIĘCIA I STYGNIĘCIA. PODEJŚCIE MAKROSKOPOWE

6.1. Wstęp

Obliczenia cieplne, związane z numerycznym modelowaniem pól temperatury w krzepnącym odlewie, należą z reguły do grupy zadań dotyczących tzw. pól źródłowych. W bilansie energii, którego matematycznym zapisem jest najczęściej równanie Fouriera Kirchhoffa uzupełnione odpowiednimi warunkami jednoznaczności, występuje składnik nazywany funkcją źródła [1, 2, 3],,sterujący" przebiegiem procesu przechodzenia od stanu ciekłego do stanu stałego.

Tak więc równanie bilansu opisujące przebieg procesów cieplnych w objętości krzepnącego metalu zawiera człon źródłowy związany z wydzielaniem się ciepła przemiany fazowej, przy czym rozważa się źródła objętościowe (rozmieszczone w całym obszarze Ω).

W warunkach brzegowych mogą z kolei pojawiać się źródła powierzchniowe lub liniowe działające tylko na pewnych ruchomych lub nieruchomych powierzchniach (liniach) wewnątrz obszaru (tzw. problem Stefana [4, 5, 6]). Można wreszcie rozpatrywać źródła punktowe. Zagadnienia numerycznego modelowania problemu Stefana omówiono w znanej książce J. Cranka "Free and moving boundary problems"[7]. Problematyka ta nie jest w zasadzie przedmiotem niniejszej pracy, ponieważ niżej rozpatrywać będziemy nieco inne opisy procesu krzepnięcia bazujące na podejściu nazywanym metoda jednego obszaru. Problem Stefana należy jednak do klasycznych zadań termodynamiki procesów odlewniczych, wiec przedstawienie kilku najważniejszych informacji dotyczących przybliżonych metod rozwiązywania tego zagadnienia wydaje się uzasadnione. W wersji pierwotnej zadanie zostało sformułowane jako opis matematyczny namarzania wilgotnego gruntu, na którego powierzchni zadana jest temperatura niższa od temperatuty granicznej T_{tr}. Grunt traktowano jako ośrodek półnieskończony. Przyjęty model można przenieść na przypadek krzepniecia półprzestrzeni wypełnionej czystym metalem lub stopem eutektycznym, oddziaływanie formy zastępuje sie warunkiem brzegowym I rodzaju. Istotnym rozszerzeniem bazowego modelu Stefana jest problem sformułowany i rozwiązany przez Schwarza. Półprzestrzeń wypełniona ciekłym metalem styka się płaską powierzchnią z półprzestrzenią formy, na powierzchni odlew forma przyjęto warunek IV rodzaju bez dodatkowego oporu cieplnego. Zadanie Schwarza można również rozwiązać w sposób ścisły dla warunku IV rodzaju z oporem cieplnym styku, trzeba tylko założyć w pewien specjalny sposób zależność tego oporu od czasu. Problemy analitycznego rozwiązywania zadań Stefana i pokrewnych przedstawiono szczegółowo w [6]. Pierwsze algorytmy numeryczne dla jednowymiarowego problemu Stefana przedstawili w latach 50 Eyres i Schniewind [8]. Model numeryczny zadania zbudowano wykorzystujac metodę różnic skończonych. Bardziej atrakcyjny okazał się pomysł przedstawiony przez Schniewinda, a polegający na takim doborze zmiennego kroku czasu, aby front krzepniecia przemieszczał się z węzła do węzła. Tego typu algorytm dla zadania 1D (płyta) przedstawił Tomeczek w pracy [9] (rozważano tu zarówno jawny, jak i niejawny schemat różnicowy, na powierzchni granicznej założono warunek III rodzaju), Majchrzak i Mochnacki [10]

rozwiązali w podobny sposób problem krzepnięcia wlewka ciągłego (metoda kollokacji), natomiast w [11] pokazano możliwość wykorzystania metody elementów brzegowych. Model numeryczny problemu Stefana komplikuje się w przypadku obszarów o bardziej złożonej geometrii. Stosunkowo proste algorytmy można uzyskać stosując metode bilansów elementarnych. I tak w pracy Mochnackiego [12] dotyczącej krzepnięcia walcowego wlewka stalowego rozważano dwa typy równań bilansów dla stygnących i krzepnących objętości kontrolnych odpowiednio. Obliczoną z bilansu objętość zakrzepłą przeliczano na bryłę typu schodkowego wprowadzając dodatkowe kryterium wynikające z wartości strumieni ciepła w kierunku osiowym i promieniowym. Podejmowane były również próby wykorzystania metody bilansów do wyznaczania frontu krzepnięcia w postaci linii łamanej (zadanie 2D). Na obecnym etapie rozwoju metod numerycznego rozwiązywania zagadnienia Stefana wyróżnia się kilka schematów. Pierwszy z nich został nazwany przez Cranka [7] metodą śledzenia frontu krzepnięcia (front-tracking method). Do tej grupy zalicza się metody wykorzystujące stałą siatkę geometryczną, siatki geometryczne modyfikowane (zarówno w metodzie różnic, jak i elementów skończonych), jak i wspomniane wyżej metody, w których krok czasu jest zmienny. Drugą grupę stanowią metody nazwane front-fixed - drogą formalnych przekształceń matematycznych utrzymuje się front krzepnięcia w pozycji nieruchomej.

Źródła objętościowe są typowym składnikiem równania bilansu w przypadku zadań dotyczących krzepnięcia w interwale temperatury. Rozważa się wówczas podobszar tzw. strefy dwufazowej (strefy przejściowej), w której wydziela się utajone ciepło krzepnięcia, natomiast podobszary cieczy i ciała stałego traktuje się jako bezźródłowe.

Źródła punktowe, liniowe lub powierzchniowe pojawiają się z kolei w matematycznych opisach krzepnięcia czystych metali i stopów eutektycznych (ujęcie makroskopowe) i są one związane z wydzielaniem się ciepła utajonego na granicy ciecz - ciało stałe. W zależności od wymiaru rozpatrywanego zagadnienia ruchoma izoterma graniczna jest punktowym (zadanie 1D), liniowym (zadanie płaskie), lub powierzchniowym (zadanie 3D) źródłem ciepła.

Najbardziej ogólnym sformułowaniem różniczkowym bilansu energii jest równanie Fouriera-Kirchhoffa w postaci [13]

$$x \in \Omega : c \left[\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \operatorname{grad} T(x, t) \right] = \operatorname{div}[\lambda \operatorname{grad} T(x, t)] + q_{V}(x, t) + \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \operatorname{grad} p(x, t)$$

$$(6.1)$$

gdzie c=c(T) jest ciepłem właściwym odniesionym do jednostki objętości, $\lambda = \lambda(T)$ - współczynnikiem przewodzenia, u jest polem prędkości, q_v - funkcją źródła, p - ciśnieniem.

W termodynamice procesów odlewniczych obszar odlewu traktuje się jako izobaryczny i w takim przypadku równanie energii sprowadza się do prostszego, a mianowicie

$$x \in \Omega$$
 : $c \left[\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \operatorname{grad} T(x, t) \right] = \operatorname{div}[\lambda \operatorname{grad} T(x, t)] + q_V$ (6.2)

Jeżeli pominiemy efekty konwekcyjne występujące w początkowych etapach procesu (wypełnianie wnęki formy ciekłym metalem) i założymy, że model matematyczny dotyczy

kondukcyjnego przepływu ciepła w obszarze odlewu, to pochodna materialna po lewej stronie równania energii redukuje się do pochodnej temperatury wzgledem czasu, czyli

$$x \in \Omega$$
: $c \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \operatorname{div}[\lambda \operatorname{grad} T(x, t)] + q_V$ (6.3)

Pochodna materialna jest typowym składnikiem równania opisującego proces ciągłego odlewania [14, 15, 16]. W takim przypadku jednak zakłada się z reguły, że pole prędkości u wynika jedynie z prędkości przesuwu wlewka przez urządzenie do ciągłego odlewania. Efekty konwekcyjnego mieszania ciekłego metalu można uwzględnić pośrednio, zakładając, że efektywny współczynnik przewodzenia ciepła λ' w tym podobszarze (lub jego części [8, 9]) jest istotnie większy od rzeczywistego (np. $\lambda' = 7 \lambda$ - [14]), co zapewnia bardziej intensywne wyrównywanie pola temperatury w cieczy.

Funkcję źródła w równaniach (6.1), (6.2), (6.3) można zapisać w postaci [17, 18]

$$q_{V}(x, t) = L_{V} \frac{\partial f_{S}(x, t)}{\partial t} = -L_{V} \frac{\partial f_{L}(x, t)}{\partial t}$$
(6.4)

gdzie L_v jest utajonym ciepłem krzepnięcia (odniesionym do jednostki objętości), f_L , f_s udziałami cieczy i ciała stałego w punkcie x z obszaru Ω .

Równanie różniczkowe

3

$$c \in \Omega : \quad c \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \operatorname{div}[\lambda \operatorname{grad} T(x, t)] + L_{V} \frac{\partial f_{S}(x, t)}{\partial t}$$
(6.5)

będziemy w dalszej części pracy nazywać równaniem krzepnięcia.

6.2. Modele makroskopowe

Równanie krzepnięcia może stanowić podstawę opisu matematycznego typowego zarówno dla modeli makroskopowych, jak i dla modeli makro/mikro. W literaturze spotyka się również zaproponowaną przez Stefanescu [19] klasyfikację, a mianowicie modele I i II generacji.

Istotą modeli makroskopowych (w przypadku opisu krzepnięcia w przedziale temperatury) jest założenie, że funkcja uzależniająca lokalny udział fazy stałej f_s od temperatury jest znana. Jeżeli przez T_s oraz T_L oznaczyć temperatury końca i początku krzepnięcia stopu, to jest rzeczą oczywistą, że dla $T(x, t) < T_s : f_s(x, t) = 1$, natomiast dla $T(x, t) > T_L : f_s(x, t) = 0$. W interwale temperatur krzepnięcia funkcja f_s zmienia się w pewien określony sposób od 0 do 1. Ponieważ

$$q_{\nu}(x, t) = L_{\nu} \frac{\partial f_{s}(x, t)}{\partial t} = L_{\nu} \frac{\mathrm{d}f_{s}}{\mathrm{d}T} \cdot \frac{\partial T(x, t)}{\partial t}$$
(6.6)

wiec po przeniesieniu funkcji źródła na lewą stronę równania krzepnięcia otrzymuje się

równanie typowe dla pól bezźródłowych:

$$\mathbf{x} \in \mathbf{\Omega} : \left[c\left(T\right) - L_{V} \frac{\mathrm{d}f_{S}}{\mathrm{d}T} \right] \frac{\partial T\left(x, t\right)}{\partial t} = \operatorname{div}[\lambda \operatorname{grad} T(x, t)]$$
(6.7)

Parametr

$$C(T) = c(T) - L_V \frac{\mathrm{d}f_S}{\mathrm{d}T}$$
(6.8)

nazywa się zastępczą pojemnością cieplną strefy dwufazowej [J/m³-K]. Postać funkcji opisującej zastępczą pojemność cieplną zależy od przyjęcia pewnej hipotezy dotyczącej zmiany udziału objętościowego fazy stalej w elementarnej objętości strefy dwufazowej wraz z temperaturą. Równanie krzepnięcia w postaci (6.7) dotyczy całego formalnie ujednorodnionego obszaru odlewu, ponieważ definicja zastępczej pojemności "rozciąga się" w sposób naturalny na podobszary fazy stałej i cieczy, dla których pochodna $df_s/dT=0$ i ostatecznie

86

$$(T) = \begin{cases} c_L & T > T_L \\ c_P - L_V \frac{\mathrm{d}f_S}{\mathrm{d}T} & T_S \le T \le T_L \\ c_S & T < T_S \end{cases}$$
(6.9)

Powyższe podejście nazywa się w literaturze metodą jednego obszaru [19, 20, 21], co wynika z umownej homogenizacji obszaru odlewu.

6.3. Dobór zastępczej pojemności cieplnej

W literaturze można znaleźć kilka hipotez dotyczących funkcji C(T). Niektóre z nich wynikają z pewnych prostych rozważań dotyczących fizycznych aspektów zjawiska krzepnięcia (np. hipoteza Borisowa [22], hipoteza Samojłowicza [23]), inne natomiast mają charakter czysto formalny i sprowadzają się do wyznaczenia funkcji spełniającej określone warunki.

W pierwszej kolejności zostaną pokrótce omówione wzory Borisowa i Samojłowicza. Wzór Borisowa wynika z bilansu masy składnika stopowego w rozpatrywanej objętości elementarnej strefy przejściowej. Przy licznych uproszczeniach bilans ten prowadzi do równania różniczkowego

$$\frac{df_L}{f_L} = -\frac{dz}{[1-k(z)]z}$$
(6.10)

gdzie z jest koncentracją składnika w fazie cieklej, k (z) - współczynnikiem rozdziału. Po

scałkowaniu równania (6.10) otrzymuje się

$$f_L = \exp\left(-\int_{z_0}^{z} \frac{\mathrm{d}z}{[1-k(z)]z}\right)$$
(6.11)

gdzie z_0 jest stężeniem początkowym (dla $z=z_0, f_L=1$).

Jeżeli przyjąć, że k(z) = k ma wartość stałą, co odpowiada założeniu liniowych przebiegów linii granicznych w układzie równowagi, to

 $f_L = \left(\frac{z_0}{z}\right)^{\frac{1}{1-k}} \tag{6.12}$

Zakładając dodatkowo, że linie graniczne wychodzą z tego samego punktu $(0, T_p)$, otrzymuje się po prostych przekształceniach

 $f_{L} = \left(\frac{T_{p} - T_{0}}{T_{p} - T}\right)^{\frac{1}{1-k}}$ (6.13)

Temperatura T_p oznacza temperaturę krzepnięcia czystego metalu. Zastępcza pojemność cieplna $C(T) = c_P + L_V df_L / dT$ (por. wzór (6.8)) wynosi

$$C(T) = c_p + \frac{L_v}{(1-k)(T_p - T_0)} \left(\frac{T_p - T_0}{T_p - T}\right)^{\frac{2-k}{1-k}}$$
(6.14)

Można zauważyć, że dla $T=T_0$ (temperatura likwidusu dla stężenia z_0) udział objętościowy cieczy wynosi 1, natomiast dla temperatury końca krzepnięcia nie osiąga on wartości 0. W związku z powyższym, najczęściej przyjmuje się, że proces krzepnięcia jest zakończony po osiągnięciu przez f_L pewnej z góry zadanej wartości, np. $f_L < 0.05$.

Hipoteza Samojłowicza wynika również z pewnych rozważań związanych z procesem makrosegregacji i bilansem masy składnika stopowego. W szczególności rozpatruje się model pełnego mieszania i wynikającą z niego regułę dźwigni. Funkcję $f_s(T)$ J.A.Samojłowicz definiuje następująco

$$f_{s} = \frac{z_{L}(T) - z_{0}}{z_{L}(T) - z_{s}(T)}$$
(6.15)

Symbole użyte w tym wzorze pokazano na rys. 6.1. Na tym samym rysunku zaznaczono przyjęte przez autora hipotezy uproszczenie polegające na zastąpieniu rzeczywistego przebiegu linii granicznych dwoma liniami prostymi. Można zauważyć, że dla $T=T_L$ jest $z_L(T_L)=z_0$ i $f_s=0$, natomiast dla $T=T_s$ mamy $z_s(T_s)=z_0$ i $f_s=1$.

Po zróżniczkowaniu tej funkcji względem temperatury, wykorzystaniu liniowych zależności między stężeniem a temperaturami granicznymi i wstawieniu otrzymanego wyniku do równania (6.8) otrzymuje się

$$C(T) = c_{p} - m_{L}m_{s} \frac{L_{v}(T_{s} - T_{L})}{[m_{L}(T - T_{L}) - m_{s}(T - T_{s})]^{2}}$$
(6.16)

gdzie m_L i m_s są odwrotnościami współczynników kierunkowych prostych $T_L = f(z)$ i $T_s = f(z)$.



Rys. 6.1. Hipoteza Samojłowicza Fig. 6.1. Samojlovitch's hypothesis

Hipotezy formalne sprowadzają się, ogólnie rzecz biorąc, do konstrukcji funkcji spełniających warunki $f_s(T_L) = 0$ oraz $f_s(T_s) = 1$. Równocześnie całka z zastępczej pojemności cieplnej w przedziale $[T_s, T_L]$ musi spełniać warunek

$$\int_{T_{s}} C(T) dT = c_{p} (T_{L} - T_{s}) + L_{v}$$
(6.17)

Przykładem funkcji spełniającej warunki graniczne dla T_L i T_S jest funkcja typu

$$f_{\mathcal{S}}(T) = \left(\frac{T_L - T}{T_L - T_S}\right)^n \tag{6.18}$$

skad

$$\frac{\mathrm{d}f_{S}(T)}{\mathrm{d}T} = -\frac{n}{T_{L} - T_{S}} \left(\frac{T_{L} - T}{T_{L} - T_{S}}\right)^{n-1} \tag{6.19}$$

czyli

$$C(T) = c_{P} + \frac{L_{V}}{T_{L} - T_{S}} n \left(\frac{T_{L} - T}{T_{L} - T_{S}} \right)^{n-1}$$
(6.20)

Iloraz $L_V/(T_L - T_S) = c_{sp}$ nazywany jest w literaturze (Wiejnik, Longa) spektralnym ciepłem krzepnięcia [24, 25].

Tak więc wzór (6.20) można zapisać w postaci

C

$$(T) = c_p + c_{sp} n \left(\frac{T_L - T}{T_L - T_s} \right)^{n-1}$$
(6.21)

Jak latwo sprawdzić

$$\int_{T_s}^{T_L} \left[c_p + c_{sp} n \left(\frac{T_L - T}{T_L - T_s} \right)^{n-1} \right] dT = c_p (T_L - T_s) + L_V$$
(6.22)

Literatura nie dostarcza konkretnych informacji dotyczących wartości wykładnika n. W licznych pracach [6, 24, 25] podaje się zależność (6.21) dla wykładnika n=1. Ponieważ

$$\frac{\mathrm{d}f_s}{\mathrm{d}T} = -\frac{1}{T_L - T_s} \tag{6.23}$$

więc

$$C(T) = c_p + \frac{L_v}{T_L - T_s} = c_p + c_{sp}, \quad T \in [T_s, T_L]$$
(6.24)

Jak widać, przyjęcie liniowej zależności między udziałem f_s a temperaturą prowadzi do stałej wartości pojemności zastępczej (dla stałego c_p).

Pewne ulepszenie opisu matematycznego odpowiadającego metodzie jednego obszaru, a w szczególności modyfikację zastępczej pojemności cieplnej określonej zależnością (6.24) przedstawiono w pracy [26] - rys. 6.2.



Rys. 6.2. Zastępcza pojemność cieplna [20] Fig. 6.2. Substitute thermal capacity [20]

Założono zmienne, zależne od stężenia składnika stopowego w fazie ciekłej wartości temperatur granicznych $T_L = T_L(z)$ oraz $T_s = T_s(z)$. Przebieg zastępczej pojemności cieplnej przy powyższym założeniu pokazano na rys. 6.2. Stężenie składnika stopowego w fazie ciekłej wyznaczano z bilansu masy, przy czym rozważano dwa przypadki, a mianowicie model pełnego mieszania oraz model Scheila. Pełne wymieszanie domieszki w fazie stałej i ciekłej uzyskuje się zakładając, że współczynniki dyfuzji w rozważanych podobszarach są nieskończenie wielkie, natomiast w modelu Scheila zakłada się brak dyfuzji w fazie stałej $(D_s=0)$ i pełne mieszanie w cieczy $(D_L \rightarrow \infty)$. Wyniki symulacji numerycznych zamieszczone w cytowanej pracy pokazują, że uwzględnienie makrosegregacji w krzepnącym odlewie zmienia zarówno przebieg lokalnych krzywych stygnięcia, jak i przebieg kinetyki krzepnięcia stopu, przy czym różnice te są zauważalne zwłaszcza w końcowych etapach trwania procesu.

Do kolejnej grupy hipotez formalnych można zaliczyć wzory określające bezpośrednio przebieg zastępczej pojemności cieplnej (bez definiowania funkcji $f_s(T)$). Przykładem takiego podejścia jest cytowania w monografii Kozdoby [27] zależność

$$C(T) = c_{s} + (c_{\max} - c_{s}) \frac{T - T_{s}}{T_{L} - T_{s}}, \quad T \in [T_{s}, T_{L}]$$
(6.25)

gdzie c_s jest ciepłem właściwym fazy stałej w pobliżu izotermy granicznej solidusu, natomiast c_{max} (rys. 6.3) oblicza się na podstawie warunku (6.17).



Rys. 6.3. Rozkład C(T) wg Kozdoby [21] Fig. 6.3. Function C(T) according to Kozdoba [21]

Zastępcza pojemność cieplna materiału odlewu charakteryzuje się nieciągłością w pobliżu izotermy granicznej T_L , z drugiej jednak strony doświadczenia pokazują, że największą wartość parametr ten osiąga w początkowych etapach procesu krzepnięcia, więc przebieg funkcji pokazanej na rys. 6.3 dość dobrze odzwierciedla rzeczywistą zmianę C(T).

W pracy [28] i monografiach [29, 30] przedstawiono pewną modyfikację wzoru (6.21). Przyjęto, że

$$C(T) = c_s + \beta (T - T_s)^p, \quad T \in [T_s, T_L]$$
(6.26)

przy czym parametr β wyznaczono z warunku (6.17):

$$\beta = \frac{(p+1)(c_p + c_{sp} - c_s)}{(T_L - T_s)^p}$$
(6.27)

i ostatecznie

$$C(T) = c_s + (p+1)(c_p + c_{sp} - c_s) \left(\frac{T - T_s}{T_L - T_s}\right)^p, \quad T \in [T_s, T_L]$$
(6.28)

Wykładnik p wyznaczano doświadczalnie i dla odlewów staliwnych najlepszą zgodność z eksperymentem uzyskano dla $p \in [5, 7]$.

Zastępcza pojemność cieplna jest funkcją o bardzo szerokim zakresie wartości. Ciepło właściwe fazy stałej lub ciekłej i zastępcze ciepło właściwe strefy dwufazowej różnią się o rząd wielkości. Tak więc równanie krzepnięcia jest silnie nieliniowe, co powoduje znaczne utrudnienia na etapie obliczeń numerycznych. Sposoby formalnej linearyzacji powyższego równania zostaną omówione w podrozdziale następnym.

Założony przebieg C(T) pozwala zdefiniować entalpię fizyczną stopu odniesioną do jednostki objętości:

$$H(T) = \int_{T}^{T} C(\mu) d\mu \qquad (6.29)$$

Znajomość tej funkcji jest niezbędna przy stosowaniu zmodyfikowanego opisu matematycznego procesów krzepnięcia i stygnięcia, w którym równanie (6.5) zapisuje się w tzw. konwencji entalpowej. Na rys. 6.4 pokazano dla przykładu funkcję entalpii dla żeliwa weglowego o zawartości 3% wegla [31].



Wybór materiału nie jest tu przypadkowy i pozwala zilustrować pewne podejście do klasycznego problemu Stefana. Ponieważ proces krzepnięcia żeliwa zachodzi częściowo w stałej temperaturze (faza eutektyczna), więc wykorzystanie do opisu tego procesu równania krzepnięcia z zastępczą pojemnością cieplną lub odpowiadającego mu równania w konwencji entalpowej wymaga pewnej przebudowy wykresu entalpia-temperatura, a w szczególności umownego rozszerzenia temperatury eutektyki na przedział $[T_e - \Delta T, T_e + \Delta T]$. Jak pokazują obliczenia, szerokość tego przedziału nie wpływa w sposób istotny na wyniki symulacji numerycznych. Na rys. 6.5 pokazano zmodyfikowany wykres entalpia-temperatura, na którym wprowadzono umownie przedział temperatur krzepnięcia fazy eutektycznej. Współczynnik kierunkowy prostej między punktami $[T_e - \Delta T, T_e + \Delta T]$ jest umownie wprowadzoną zastępczą pojemnością cieplną fazy eutektycznej.





Przy rozszerzaniu temperatury przemiany eutektycznej zastosowano tzw. wygładzanie rzędu zerowego [32] - funkcja entalpii jest funkcja ciągła klasy C⁰.

6.4. Metody linearyzacji równania krzepnięcia

Równanie krzepnięcia jest równanniem typu parabolicznego z nieliniowościami wynikającymi ze zmiennych parametrów termofizycznych materiału, a w szczególności jego zastępczej pojemności cieplnej. Niektóre z powszechnie stosowanych metod numerycznego rozwiązywania zadań brzegowo-początkowych (metoda różnic skończonych, metoda elementów skończonych) dopuszczają w zasadzie występowanie tego typu nieliniowości. I tak, w przypadku MRS macierz pojemności cieplnych definiuje się dla zbioru węzłów

wewnętrznych siatki i jej wartość może być dla każdego węzła inna i sukcesywnie modyfikowana. Ale nawet w przypadku tak "przyjaznej" dla nieliniowości metody, jaką jest MRS należy stosować pewne dodatkowe procedury [33, 34], polepszające dokładność rozwiązania numerycznego, szczególnie dla węzłów siatki, które chwilowo należą do podobszaru strefy dwufazowej. Przykładowo, może się zdarzyć, że temperatura w węźle P_0 w chwili t jest wyższa od temperatury likwidusu, a obliczona dla $t+\Delta t$ temperatura w tym węźle będzie niższa od temperatury solidusu. Ponieważ w odpowiednim elemencie macierzy pojemności zarejestrowana była wartość ciepła właściwego ciekłego metalu (stan w chwili t), więc proces krzepnięcia, jaki miał miejsce w czasie $t \rightarrow t+\Delta t$, nie będzie w ogóle uwzględniony.

W metodzie elementów skończonych pojemności cieplne i współczynniki przewodzenia definiuje się dla kolejnych elementów oddzielnie i mogą być one oczywiście różne. Z reguły przyjmuje się wartości uśrednione wynikające z chwilowych temperatur w wierzchołkach elementów skończonych. Dla niewielkich zmian parametrów termofizycznych materiału podejście takie jest w pełni dopuszczalne i istnieje jedynie problem wyboru sposobu uśredniania. Można jednak wyobrazić sobie trójkątny element skończony, którego w chwili t dwa wierzchołki należą do podobszaru cieczy (dla staliwa węglowego 0.4%C pojemność cieplna tej fazy jest rzędu $C (T) = 5.9 \cdot 10^6 [J/m^3 \text{ K}]$), a trzeci do podobszaru strefy przejściowej: $C(T) = 62 \cdot 10^6 [J/m^3 \text{ K}]$. Wszelkie uśrednianie musi w takim przypadku budzić duże wątpliwości.

Najbardziej ,,dramatyczna'' sytuacja pojawia się w przypadku metody elementów brzegowych (zarówno w jej klasycznym wariancie, jak i w metodzie kombinowanej). Rozwiązania fundamentalne stanowiące podstawę konstrukcji algorytmu MEB są znane jedynie dla zadań nieustalonej dyfuzji w obszarach o stałych parametrach termofizycznych (jedynie funkcja źródła może być zależna od współrzędnych, czasu lub bezpośrednio od temperatury).

Powyższe problemy były inspiracją do licznych badań, których cel sprowadzał się do opracowania procedur "linearyzujących" (na etapie obliczń numerycznych) zadanie opisane równaniem krzepnięcia i odpowiednimi warunkami brzegowo-początkowymi. Przegląd tych metod można znaleźć m.in. w książkach Mochnackiego i Suchego [29, 30], a ich modyfikacje w pracach [33, 34, 35]. Również autor niniejszej monografii prowadził badania z tego zakresu i opracowane przez niego procedury zostały wykorzystane do rozwiązania niektórych zagadnień omówionych w dalszej części rozdziału 6. Przegląd metod linearyzacji równania krzepnięcia ograniczono do prezentacji badań własnych i tych procedur, które wykorzystano do symulacji krzepnięcia i stygnięcia odlewów.

6.4.1. Metoda zapasu temperatury

Metoda zapasu temperatury podana została przez Ruddla w pracy [36]. Jest to jedna z najprostszych, a zarazem wystarczająco dokładnych metod modelowania procesu krzepnięcia zachodzącego w stałej temperaturze i należy do grupy metod jednego obszaru. Połączenie tej metody z klasycznym algorytmem MEB przedstawiono w monografii [37].

Zakłada się, że parametry termofizyczne ciekłej i zakrzepłej części odlewu są takie same,

chociaż założenie to nie jest konieczne, ale znacznie upraszcza sposób realizacji obliczeń numerycznych. Zapas temperatury θ definiujemy jako stosunek ciepła krzepnięcia L_{ν} (odniesionego do jednostki objętości) do pojemności cieplnej C

$$\theta = \frac{L_{\nu}}{C} \tag{6.30}$$

Rozpatrujemy wyróżniony punkt P_0 z obszaru odlewu. W warunku początkowym, tzn. w chwili t=0, węzłowi temu przyporządkowujemy temperaturę zalewania oraz zapas temperatury θ_0 – wynikający ze wzoru (6.30).

Dowolną metodą numeryczną wyznaczamy dyskretne pole temperatury w węzłach P_0 na kolejnych poziomach czasu. Jeżeli w kroku $\Delta t = t^{f+1} - t^f$ temperatura T_d^{f+1} w węźle P_0 spadnie poniżej temperatury krzepnięcia, to węzłowi P_0 przyporządkowujemy temperature T_{kr} , a od θ_0 odejmujemy $\Delta \theta_d^{f+1}$, zapamiętując aktualny zapas temperatury θ_0^{f+1} w punkcie P_0 . Tak więc otrzymane dla chwili t^{f+1} pole temperatury jest korygowane w następujący sposób:

- Dla węzłów, w których $T_0^{f+1} > T_k$, zapas θ_0 pozostaje nienaruszony i obliczona temperatura pozostaje niezmieniona.
- Dla węzłów, w których $T_0^f = T_{kr}$, $T_0^{f+1} < T_{kr}$ i które mają jeszcze zapas temperatury, przyjmuje się $T_0^{f+1} = T_{kr}$ i zmniejsza ich zapas o $\Delta \theta_0^{f+1}$.
- Dla węzłów, w których $T_0^{f} \le T_{kr}$ i które wyczerpały swój zapas, nie koryguje się temperatury T_0^{f+1} .

Metodę zapasu temperatury można zastosować również w przypadku krzepnięcia stopów, zakładając, że temperatura początku krzepnięcia odpowiada temperaturze T_{kr} lub że tej temperaturze odpowiada tzw. ekwiwalentna temperatura krzepnięcia [24]:

$$T_{ekw} = \frac{\int_{T_s}^{T_s} TC(T) dT}{\int_{T_s}^{T_s} C(T) dT} = \frac{\int_{T_s}^{T_s} TC(T) dT}{c_p (T_L - T_s) + L_v}$$
(6.31)

Ostatnie równanie wynika z uogólnionego twierdzenia o wartości średniej w calce oznaczonej.

Autor niniejszej monografii (wspólnie z J. Mendakiewiczem) zastosował metodę zapasu temperatury do obliczeń krzepnięcia miedzianego wlewka ciągłego o przekroju kołowym [38]. Wykorzystano przedstawiony w rozdziale 4 algorytm metody kombinowanej dla obszarów prostokątnych, który dzięki wprowadzeniu sztucznego źródła zastosowano do rozwiązania liniowego równania nieustalonej dyfuzji w walcu nieskończonym. Problem sprowadzono do zadania 1D pomijając kondukcyjny przepływ ciepła wzdłuż kierunku przesuwu wlewka (metoda wędrującego przekroju poprzecznego [39]). Analizowano procesy cieplne w krystalizatorze urządzenia do ciągłego odlewania, a w szczególności wpływ współczynnika wymiany ciepła w tej strefie na kinetykę krzepnięcia wlewka. Rozważano wlewek o promieniu R=0.1 [m], założono prędkość wyciągania równą w=0.002[m/s]. Współczynniki

wymiany ciepła α [W/m²K] w krystalizatorze przyjmowały wartości α =800, 1100, 1400. Temperatura wody chłodzącej wynosiła T^{∞} =20°C, temperatura zalewania T_0 =1145 °C. Na rysunkach 6.6 i 6.7 pokazano pola temperatury w odległościach 5, 10, 15, 20 i 25 [cm] od powierzchni zalewania. Wyniki symulacji numerycznych moga stanowić podstawe do szczegółowej analizy aspektów cieplnych procesu (pola temperatury, krzywe stygnięcia, ocena lokalnych gradientów temperatury, kinetyka krzepnięcia itd.).





6.4.2. Metoda przemiennej fazy

Metoda przemiennej fazy (APTM – Alternating Phase Truncation Method) w swojej pierwotnej wersji dotyczyła obliczeń związanych z numerycznym rozwiązywaniem klasycznego zadania Stefana. Metoda została przedstawiona w pracach J. Rogersa, A. Bergera oraz M. Cimenta [40, 41]. Istotą algorytmu jest formalne sprowadzanie obszaru odlewu do obszaru jednorodnego (ciecz lub ciało stałe), przy czym w kolejnych sekwencjach programu odpowiadających przejściu z warstwy czasu t do poziomu wyższego $t+\Delta t$ realizuje się obliczenia dla obu jednorodnych obszarów (począwszy od fazy "cieplejszej"). Zastosowanie APTM wymaga sformułowania wyściowego modelu matematycznego w konwencji entalpowej. Rozpatruje się więc układ dwóch równań różniczkowych w postaci

$$c\in\Omega: \frac{\partial H_{e}(x, t)}{\partial t} = \operatorname{div}[a_{e}\operatorname{grad} H_{e}(x, t)], \quad e=1, 2 \quad (6.32)$$

gdzie e=1, 2 wyróżnia kolejno fazę stałą i ciekła, a_e jest współczynnikiem dyfuzji fazy "e". Układ ten uzupełniają warunki brzegowo-początkowe

$$x \in \Gamma_{12}(t) : \begin{cases} -a_2 \frac{\partial H_2(x, t)}{\partial n} = -a_1 \frac{\partial H_1(x, t)}{\partial n} + L_{\nu} \nu_n \\ A_2 = A_1 + L_{\nu} \end{cases}$$

$$x \in \Gamma_0 : \Phi \left[H, \frac{\partial H(x, t)}{\partial n} \right] = 0$$

$$t = 0 : H_{\epsilon}(x, 0) = H_{\epsilon 0}(x), \quad e = 1, 2 \end{cases}$$
(6.33)

gdzie $\Gamma_{12}(t)$ jest ruchomą granicą rozdziału faz, Γ_0 - brzegiem zewnętrznym obszaru, $\partial H/\partial n$ - pochodną entalpii w kierunku normalnym, A_1 , A_2 - jak na rys. 6.8 (na tym samym rysunku pokazano modyfikację funkcji entalpii uzyskaną przez sztuczne rozszerzenie temperatury T_{kr} - por. podrozdział 6.3), ν_n - szybkością narastania fazy stałej w kierunku normalnym do granicy $\Gamma_{12}(t)$.

Algorytm numerycznego rozwiązania zadania opisanego równaniami (6.32), (6.33), a w szczególności przejścia od chwili t^{f} do chwili t^{f+1} jest następujący.

Oznaczmy przez H_0^f zbiór dyskretnych wartości entalpii w obszarze odlewu w chwili t^f w węzłach P_0 .

- W pierwszym kroku obliczeń obszar odlewu sprowadzamy do fazy ciekłej. W węzłach P_0 , dla których entalpia H_j^f jest mniejsza niż A_2 , przyjmuje się umownie entalpię A_2 , entalpia w pozostałych węzłach pozostaje niezmieniona. Tak więc rzeczywisty rozkład entalpii zastąpiony zostaje rozkładem wynikającym z zależności

$$V_1(P_0, t^f) = \max\left[H_0^f, A_2\right]$$
 (6.34)

- Dla obszaru jednorodnego obliczamy dowolną metodą numeryczną pole entalpii dla czasu t^{f+1} , tzn.: $V_1'(P_0, t^{f+1})$ (parametr *a* w równaniu różniczkowym energii odpowiada współczynnikowi wyrównywania temperatury fazy ciekłej).
- Pierwszy etap kończy się odjęciem dodanej uprzednio w niektórych węzlach entalpii, czyli

$$V_1(P_0, t^{f+1}) = V'_1(P_0, t^{f+1}) + H_0^f - V_1(P_0, t^f)$$
(6.35)

– Drugi etap obliczeń rozpoczyna przebudowanie warunku początkowego dla przejścia $t^f \rightarrow t^{f+1}$, a mianowicie

$$V_2(P_0, t^f) = \min \left[A_1, V_1(P_0, t^{f+1}) \right]$$
(6.36)

co odpowiada sprowadzeniu obszaru odlewu do fazy stałej.

- Oblicza się pole entalpii $V_2'(P_0, t^{f+1})$ z liniowego równania energii, w którym współczynnik wyrównywania temperatury wynosi a_2 .
- Końcowe pole entalpii w chwili t^{f+1} wynika z zależności

$$H_0^{f+1} = V'_2(P_0, t^{f+1}) + V_1(P_0, t^{f+1}) - V_2(P_0, t^f)$$
(6.37)



Rys. 6.8. Entalpia dla czystego metalu Fig. 6.8. Enthalpy function for pure metal

Niżej przedstawione zostanie połączenie APTM z metodą kombinowaną dla obszarów cylindrycznych (por. rozdział 4). Rozważać będziemy wlewek miedziany o średnicy 150 mm wytwarzany na urządzeniu, w którym krystalizator ma długość 500 mm, a po wyjściu z niego powierzchnia wlewka chłodzona jest wodą. Szybkość wyciągania wlewka wynosiła 0.002[m/s]. Przyjęto następujące parametry termofizyczne $a_1 = 8.8084 \cdot 10^{-5} \text{ [m}^2/\text{s]}$, $a_2 = 5.3368 \cdot 10^{-5} \text{ [m}^2/\text{s]}$, $L_V = 182 \cdot 10^{-4} \text{ [kJ/m}^3$], temperaturę początkową $T_0 = 1145^{\circ}$ C, temperaturę krzepnięcia $T_{kr} = 1083$. Współczynniki wymiany ciepła w strefach chłodzenia wynosiły $\alpha_1 = 250[\text{W/m}^2 \text{ K}]$, $\alpha_2 = 100$.

Na rys. 6.9 pokazano krzywe stygnięcia wzdłuż kierunku przesuwu wlewka (krzywa 1 dotyczy jego powierzchni, krzywa 4 punktu w pobliżu osi, a krzywe 2 i 3 - punktów pośrednich). Na następnym rysunku pokazano to samo rozwiązanie uzyskane metodą różnic skończonych [42] uzupełnioną algorytmem metody zapasu temperatury. Jak widać, różnice między nimi nie są zauważalne.



Na rysunku 6.11 pokazano z kolei granicę rozdzialu faz na przekroju wlewka.





W pracach E. Majchrzak i R. Szopy [43, 44] rozszerzono zakres zastosowań połączenia metody kombinowanej (geometria walcowa [43], kulista [44]) i bazowego wariantu APTM na przypadek krzepnięcia stopu dwuskładnikowego. Założono, że temperatura krzepnięcia T_{kr} odpowiada temperaturze granicznej likwidusu i jest funkcją stężenia składnika stopowego w fazie ciekłej, w której następuje pełne mieszanie (model dźwigni i model Sheila). Tak więc entalpię fizyczną stopu zdefiniowano następująco

$$H(T) = \int_{T} C(\mu) d\mu + L_{\nu} \eta(T)$$
 (6.38)

gdzie

 $\eta(T) = \begin{cases} 0 & T < T_L(z_L) \\ 1 & T \ge T_L(z_L) \end{cases}$ (6.39)

przy czym dla $T > T_L(z_L) C(T) = c_L$, natomiast dla $T < T_L(z_L) C(T) = c_s$. Wykres funkcji entalpii pokazano na rys. 6.12.

Model makrosegregacji zbudowano wykorzystując metodę bilansów (*control volume method*). Obszar odlewu podzielono na objętości kontrolne (pierścienie lub warstwy sferyczne) - w dalszej części rozważany będzie odlew o geometrii kulistej - rys. 6.13.



Rys. 6.12. Założony przebieg entalpii Fig. 6.12. Assumed course of enthalpy

Bilans masy składnika stopowego w obszarze odlewu jest następujący

$$m_0 z_0 = m_s(t) z_s(t) + m_L(t) z_L(t)$$
(6.40)

gdzie m_0 oznacza masę domieszki.

Rozważany obszar (kula o promieniu R) podzielono na objętości kontrolne. Promień wewnętrzny elementu V_i oznaczono przez r_{i-1} , a zewnętrzny przez r_i - rys. 6.13.



Rys. 6.13. Objętość kontrolna V_j Fig. 6.13. Control volume V_j

Udział fazy stałej w objętości kontrolnej V_j w chwili t oznaczono przez $f_{sj}(t)$. Masa metalu w stanie ciekłym i stałym w tej objętości wynosi odpowiednio

 $m_{sj}(t) = f_{sj}(t) V_j \rho_s \qquad m_{Lj}(t) = \left[1 - f_{sj}(t)\right] V_j \rho_L \tag{6.41}$

gdzie ρ_L , ρ_S - gęstości fazy cieklej i stałej.

Lokalne wartości funkcji f_{sj} wynikaja z modelu numerycznego procesu krzepnięcia i zdefiniowano je w sposób następujący

$$f_{s_j}(t^{f+1}) = \frac{A_2 - H(r_j, t^{f+1})}{A_2 - A_1} , \quad A_1 \le H(r_j, t^{f+1}) \le A_2$$
(6.42)

natomiast na zewnątrz tego przedziału funkcja f_{si} równa się odpowiednio 1 i 0.

Bilans (6.40) zapisany dla chwili t^{f+1} przy założeniu natychmiastowego wyrównania udziału składnika stopowego w cieczy i w fazie stałej przyjmuje postać

$$z_{L}(t^{f+1}) = \frac{m_{0} z_{0}}{k m_{s}(t^{f+1}) + m_{L}(t^{f+1})}$$
(6.43)

W równaniu (6.43) uwzględniono definicję współczynnika rozdziału k. Tak więc

$$z_{L}(t^{f+1}) = \frac{R^{3} \rho_{L} z_{0}}{k \sum_{j=1}^{n} (r_{j}^{3} - r_{j-1}^{3}) \rho_{S} f_{Sj}(t^{f+1}) + \sum_{j=1}^{n} (r_{j}^{3} - r_{j-1}^{3}) \rho_{L} \left[1 - f_{Sj}(t^{f+1})\right]}$$
(6.44)

Obliczona chwilowa wartość stężenia składnika stopowego w obszarze ciekłym determinuje nową, zmienioną temperaturę początku krzepnięcia oraz wartości graniczne A_2 i A_1 .

Model Scheila jest wynikiem przyjęcia granicznej postaci rzeczywistego przebiegu procesu segregacji w odlewie, w którym dyfuzja zachodzi zarówno w fazie ciekłej, jak i stałej. Ponieważ wiadomo, że współczynnik dyfuzji dla cieczy jest wielokrotnie większy od współczynnika dyfuzji dla fazy stałej, więc w granicznym podejściu Scheila zakłada się $D_s = 0$, natomiast $D_L \rightarrow \infty$. Model Scheila znakomicie odpowiada warunkom krzepnięcia stopów w polu magnetycznym, jest również dość dobrym opisem procesów segregacji zachodzacych przy "klasycznych" warunkach krzepnięcia odlewów. Tak więc bilans masy wynikający z modelu Scheila można zapisać w sposób następujący

$$m_0 z_0 = m_s(t^1) z_s(t^1) + m_s(t^2) z_s(t^2) + \dots + + m_s(t^f) z_s(t^f) + m_s(t^{f+1}) z_s(t^{f+1}) + m_L(t^{f+1}) z_L(t^{f+1})$$
(6.45)

skąd

$$z_{L}(t^{f+1}) = \frac{m_{0}z_{0} - \left[m_{S}(t^{1})z_{S}(t^{1}) + m_{S}(t^{2})z_{S}(t^{2}) + \dots + m_{S}(t^{f})z_{S}(t^{f})\right]}{k m_{S}(t^{f+1}) + m_{L}(t^{f+1})}$$
(6.46)

Po przekształceniach

$$z_{L}(t^{f+1}) = \frac{R^{3}\rho_{L}z_{0} - \sum_{p=1}^{f} \sum_{j=1}^{n} (r_{j}^{3} - r_{j-1}^{3})\rho_{S}z_{S}(t^{p})(f_{Sj}^{p} - f_{Sj}^{p-1})}{k\sum_{j=1}^{n} (r_{j}^{3} - r_{j-1}^{3})\rho_{S}(f_{Sj}^{f+1} - f_{Sj}^{f}) + \sum_{j=1}^{n} (r_{j}^{3} - r_{j-1}^{3})\rho_{L}(1 - f_{Sj}^{f+1})}$$
(6.47)

gdzie $f_{S_j}^p = f_{S_j}(t^p)$ itd.

101

Podobnie jak w modelu poprzednim, obliczona wartość $z_L(t^{f+1})$ determinuje chwilowa temperaturę T^L i granice A_2 oraz A_1 .

Przykładem ilustrującym przedstawiony wyżej model krzepnięcia z uwzględnieniem makrosegregacji jest następujące zadanie. Rozważa się proces krzepnięcia odlewu w kształcie kuli o promieniu 0.05[m] wytwarzanego ze stopu Cu-Zn (10% Zn). Przyjęto następujące parametry $\lambda_L = \lambda_S = \lambda = 120$ [W/mK], $c_L = c_S = c = 390$ [J/kgK], $\rho_L = \rho_S = \rho = 8600$ [kg/m³], $L_V = 1.63 \cdot 10^6$ [kJ/m³], k=0.855, funkcja $T_L = f(z_L)$ jest postaci $T_L = 1083 - 473.68 \cdot z_L$, temperatura początkowa: $T_0(r) = 1080$ °C, koncentracja początkowa składnika stopowego $z_0 = 0.1$. Na zewnętrznej powierzchni odlewu założono warunek brzegowy III rodzaju (współczynnik wymiany ciepła $\alpha = 35$ [W/m² K], temperatura otoczenia $T^{\infty} = 0^{\circ}$ C).

Na rysunkach 6.14 i 6.15 pokazano kinetykę krzepnięcia odlewu oraz krzywe stygnięcia w wybranych punktach uzyskane na podstawie symulacji numerycznych, w których kolejno

- nie uwględniano procesu segregacji,
- wprowadzono model pełnego wyrównywania składu chemicznego,
- wprowadzono model Scheila.

Na rys. 6.16 pokazano zmianę zależnego od czasu punktu krzepnięcia, z kolei rys. 6.17 ilustruje zmianę koncentracji składnika stopowego.



Rys. 6.14. Kinetyka krzepnięcia Fig. 6.14. Kinetics of solidification

Symulacja procesu krzepnięcia z uwzględnieniem makrosegregacji jest bliższa rzeczywistemu przebiegowi tego procesu i z punktu widzenia obliczeń numerycznych przedstawione modele tego zjawiska nie są czasochłonne. Wydaje się, że prezentowane w niniejszej pracy podejście do numerycznych obliczeń krzepnięcia odlewów można rekomendować jako prosty sposób rozszerzenia znanych modeli krzepnięcia.





Rys. 6.17. Koncentracja składnika stopowego Fig. 6.17. Concentration of alloy component

W przypadku obliczeń dotyczących krzepnięcia walca z uwzględnieniem makrosegregacji różnice między kolejnymi rozwiązaniami numerycznymi były mniejsze. Z kolei dla stopów o mniejszych wartościach współczynnika rozdziału k rozwiązania różnią się istotnie, problemy te nie są przedmiotem prezentowanych w niniejszej monografii rozważań, ale wymagają z pewnością dalszych poglębionych badań.

Podstawowy wariant APTM został uogólniony przez A.Kapustę i B.Mochnackiego [45]. W cytowanej pracy pokazano uogólnienie bazowego algorytmu APTM na przypadek *n* przemian fazowych zachodzących w stałej temperaturze. Dalsze badania np. [46, 47, 48] doprowadziły do opracowania takiego wariantu metody przemiennej fazy, który może być wykorzystywany do symulacji krzepnięcia w interwale temperatury oraz do zadań ,,mieszanych" (metal krzepnie częściowo w stałej temperaturze, a częściowo w przedziale temperatury). Model krzepnięcia żeliwnej płyty zbudowany na podstawie uogólnionej APTM przedstawiono w [47].

Rozszerzony algorytm przemiennej fazy sprowadza się do realizacji w każdym kroku czasu następującej procedury numerycznej - rys. 6.18. Zakładamy (jak poprzednio), że t^{f} i t^{f+1} są dwoma sąsiednimi węzłami siatki czasu o kroku $\Delta t = t^{f+1} - t^{f}$. Pierwszy krok obliczeń nie różni się od pierwszego kroku omówionego poprzednio algorytmu i polega na sprowadzeniu obszaru Ω do fazy "najcieplejszej", czyli następującego przekształcenia warunku pseudopoczątkowego

$$V_{m+1}(P_0, t^f) = \max\left[A_{2m}, H(P_0, t^f)\right]$$
(6.48)

Obliczamy teraz pole entalpii dla chwili t^{f+1} i rozwiązanie korygujemy zgodnie ze wzorem

$$V_{m+1}(P_0, t^{f+1}) = V_{m+1}^*(P_0, t^{f+1}) + H(P_0, t^f) - V_{m+1}(P_0, t^f)$$
(6.49)



Rys. 6.18. Uogólniony wykres entalpia-temperatura Fig. 6.18. Generalized enthalpy-temperature diagram

Jeżeli rozpatrujemy kolejny etap ,,p" (p=2, 3, ..., m), to oczywiście rozkład entalpii $V_{p+1}(P_0, t^{f+1})$ jest znany. Sprowadzenie obszaru Ω do fazy Ω_p odpowiada przyjęciu następującego warunku pseudopoczątkowego

$$V_p(P_0, t^f) = \min \left\{ A_{2p-1}, \max \left[A_{2p-2}, V_{p+1}(P_0, t^{f+1}) \right] \right\}$$
(6.50)

Jeżeli $V_p^*(P_0, t^{f+1})$ oznacza pole entalpii wyznaczone w tym kroku, to

$$V_p(P_0, t^{f+1}) = V_p^*(P_0, t^{f+1}) + V_{p+1}(P_0, t^{f+1}) - V_p(P_0, t^f)$$
(6.51)

W ostatnim kroku procedury APTM (p=1) przyjmuje się następujący warunek

$$V_1(P_0, t^f) = \min\left[A_1, V_2(P_0, t^{f+1})\right]$$
(6.52)

Po wyznaczeniu $V_1^*(P_0, t^{f+1})$ mamy

$$H(P_0, t^{f+1}) = V_1^*(P_0, t^{f+1}) + V_2(P_0, t^{f+1}) - V_1(P_0, t^f)$$
(6.53)

Rozwiązanie $H(P_0, t^{f+1})$ znalezione na tym etapie odpowiada polu entalpii w obszarze odlewu w chwili $t=t^{f+1}$.

W przypadku algorytmu uogólnionego przejście $t^f \rightarrow t^{f+1}$ wymaga rozwiązania , m+1'' liniowych zadań dyfuzji w obszarach jednorodnych, ale wszystkie problemy charakterystyczne dla zadań z ruchomymi granicami zostają w ten sposób , ominięte'', co jest największą zaletą metody.

Metoda przemiennej fazy dobrze "współpracuje" z warunkami brzegowymi I, II, i III rodzaju, stąd też może być bardzo efektywnym narzędziem do obliczeń związanych z technologia odlewania ciągłego.

Połączenie metody kombinowanej z uogólnionym algorytmem przemiennej fazy przetestowano na przykładzie prezentowanym w pracy [49]. Rozpatrywano wielkogabarytowy prostokątny wlewek ciągły wytwarzany na urządzeniu radialnym - rys. 6.19. Równanie różniczkowe opisujące pole temperatury w obszarze wlewka (zapisane w konwencji entalpowej) jest postaci

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \frac{w}{R} \frac{\partial H}{\partial \varphi} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(a r \frac{\partial H}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(a \frac{\partial H}{\partial \varphi} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(a \frac{\partial H}{\partial z} \right)$$
(6.54)

gdzie w jest prędkością wyciągania wlewka, R - promieniem krzywizny urządzenia COS.

W literaturze [14] podaje się, że składowa kondukcyjna w kierunku wyciągania stanowi mniej niż 5% składowej skierowanej do powierzchni zewnętrznej wlewka i można ją pominąć. Jeżeli do rozważań wprowadzimy ruchomy układ współrzędnych związany z przemieszczającym się przekrojem poprzecznym $r \rightarrow r$, $z \rightarrow z$, $\varphi \rightarrow \varphi - wt/R$, to równanie (6.54) przy dodatkowym założeniu, że a=const, co wynika z "filozofii" metody przemiennej fazy, sprowadza się do następującego

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{a}{r} \frac{\partial H}{\partial r} + a \left(\frac{\partial^2 H}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial z^2} \right) = a \nabla^2 H + Q \qquad (6.55)$$

Otrzymano w ten sposób równanie paraboliczne, w którym po prawej stronie występuje dodatkowy składnik będący sztucznym źródłem -por. rozdział 4.



Rys. 6.19. Przekrój poprzeczny wlewka Fig. 6.19. Lateral cross section of cast slab

Do obliczeń przyjęto wlewek ciągły o wymiarach przekroju poprzecznego 0.2×0.6 [m], promieniu krzywizny R=15 [m], prędkość wyciągania wynosiła w=0.018 [m/s], temperatura wody chłodzącej $T^{\infty}=20^{0}$ C. W kolejnych sektorach chłodzenia założono następujące współczynniki wymiany ciepła [W/m2K] (u oznacza odległość od poziomu zalewania)

$$u \le 0.7 : \qquad \alpha_1(u) = 1500$$

$$u \in (0.7, 2.6] : \qquad \alpha_2(u) = 1200$$

$$u \in (2.6, 4.5] : \qquad \alpha_3(u) = 950$$

$$u \in (4.5, 8.2] : \qquad \alpha_4(u) = 550$$

$$u \in (8.2, 12.2] : \qquad \alpha_5(u) = 430$$

$$u \in (12.2, 16.3] : \qquad \alpha_6(u) = 250$$

$$u \ge 16.3 : \qquad \alpha_7(u) = 225$$

Funkcję entalpii skonstruowano zakładając, że właściwa pojemność cieplna materiału wlewka zmienia się w sposób następujący

	$5.904 \cdot 10^{6} [J/m^{3}K]$,	$T > 1505 [^{\circ}C]$	
C(T) = c	56.700 · 10 ⁶ ,	$1470 \leq T \leq 1505$	(6.57)
and the second second	$4.875 \cdot 10^6$,	T < 1470	

natomiast $\lambda_L = \lambda_P = \lambda_S = 35$ [W/mK].

Na rys. 6.20 pokazano krzywe stygnięcia w punktach zaznaczonych na rysunku poprzednim - metoda kombinowana, natomiast symbole oznaczają rozwiązanie uzyskane metodą różnie skończonych.



Rys. 6.20. Krzywe stygnięcia Fig. 6.20. Cooling curves

(6.56)

Szczegóły algorytmu numerycznego dotyczącego rozwiązywania problemu COS metoda różnic skończonych można znaleźć między innymi w pracach [14, 50, 51]. Ponieważ promień krzywizny wlewka jest dużo większy od jego wymiarów poprzecznych, więc składnik stanowiący sztuczne źródło w równaniu (6.55) jest niewielki w stosunku do pozostałych. W związku z powyższym, przy szacowaniu funkcji sztucznego źródła pominięto procedurę iteracyjnego poprawiania jej wartości (rozkład tej funkcji odpowiada czasowi t^f i nie jest korygowany).

6.4.3. Metoda korygowania chwilowego pola temperatury

Podstawy metody korygowania chwilowego pola temperatury sformułowali Szargut i Mochnacki w pracy [52]. W cytowanym artykule rozważano krzepnięcie wlewka stali uspokojonej. Układ rozwiązujący tworzyły dwa rodzaje bilansów odpowiadających elementom w fazie ciekłej i stałej oraz elementom aktualnie krzepnącym. W równaniach bilansu dla objętości kontrolnych, w których rozpoczynał się lub kończył proces krzepnięcia, wprowadzono poprawki uwzględniające bardzo istotną zmianę zastępczej pojemności cieplnej w pobliżu izoterm granicznych.

Bardziej ogólne podejście do korygowania chwilowego pola temperatury przedstawili w latach 1983-1986 Hong, Umeda i Kimura [53, 54, 55]. W szczególności pokazano, że obszar odlewu można traktować jako jednorodny (sprowadzony formalnie do fazy ciekłej), natomiast przebieg procesu krzepnięcia i stygnięcia w zakrzepłej części odlewu modelować na podstawie rozwiązania dla fazy ciekłej uzupełnionego odpowiednimi wzorami korygującymi wartości temperatur w wyróżnionych punktach odlewu. Koncepcję Honga, Umedy i Kimury rozwinęła Majchrzak, w monografii [37] przedstawiono między innymi matematyczny dowód poprawności metody i podano pełny zestaw wzorów korygujących lokalne pola temperatury dla różnego rodzaju przejść przez izotermy graniczne. Algorytm ten omówiony jest również w książkach Mochnackiego i Suchego [29, 30].

Autor niniejszej monografii prowadził również badania dotyczące zastosowań tej metody w termodynamice procesów odlewniczych. W szczególności w pracy [56] przedstawiono prostszy od opisanego w literaturze sposób poprawiania pola temperatury. Zbadano również wpływ wyboru fazy bazowej (może być nią ciecz, strefa przejściowa lub ciało stałe) na dokładność obliczeń numerycznych.

W pierwszej części niniejszego podrozdziału zostanie przedstawiony algorytm omówiony w [34, 35]. Przedział $[T^{\infty}, T_0]$ (temperatura otoczenia - temperatura zalewania) podzielono na podprzedziały, dla których zakłada się stałą wartość pojemności cieplnej (ciepła właściwego). Granice podprzedziału $[U_{m+1}, U_m]$ odpowiadają "fazie" m - rys. 6.21.

Obliczenia realizuje się przy założeniu, że cały rozpatrywany obszar odpowiada fazie bazowej, co jest równoważne przyjęciu w algorytmie numerycznym stałych parametrów termofizycznych odpowiadających wyróżnionej fazie. Autorzy pracy [34] sugerują w tym miejscu przyjęcie fazy "najcieplejszej" jako fazy bazowej (por. rys. 6.21).

Załóżmy, że temperatura w korygowanym węźle P_0 odpowiada fazie m - rys. 6.22.





Oznaczmy

$$\Delta_{m} = c_{m} \left[T(P_{0}, t) - U_{m+1} \right]$$

$$\Delta_{m+1} = \Delta_{m} + c_{m+1} \left[U_{m+1} - U_{m+2} \right]$$

$$\Delta_{m+2} = \Delta_{m+1} + c_{m+2} \left[U_{m+2} - U_{m+3} \right]$$
(6.58)

gdzie U_m , U_{m+1} , U_{m+2} , ..., U_{M+1} są temperaturami ograniczającymi kolejne 'fazy'. Interpretacja fizyczna wielkości Δ jest oczywista - są to zmiany entalpii jednostkowej [J/m³] odpowiadające pokazanym na rysunku 6.22 zmianom temperatury.

.



Rys. 6.22. Różnice między $T(P_0, t)$ a temperaturami granicznymi Fig. 6.22. Differences between $T(P_0, t)$ and border temperatures Procedura poprawiania chwilowego pola temperatury w weźle P_0 jest następująca. Jeżeli

$$c_0[T(P_0, t) - T(P_0, t + \Delta t)] < \Delta_m$$
(6.59)

gdzie c_0 jest ''bazowym'' ciepłem właściwym, to korekta wartości $T(P_0, t+\Delta t)$ wynika z równania

$$c_0[T(P_0, t) - T(P_0, t + \Delta t)] = c_m[T(P_0, t) - \hat{T}(P_0, t + \Delta t)]$$
(6.60)

skad

$$T(P_0, t + \Delta t) = T(P_0, t) - \frac{c_0}{c_m} [T(P_0, t) - T(P_0, t + \Delta t)]$$
(6.61)

W przypadku

$$\Delta_m < c_0 [T(P_0, t) - T(P_0, t + \Delta t)] < \Delta_{m+1}$$
(6.62)

dochodzi się do następującego bilansu entalpii

$$c_0[T(P_0, t) - T(P_0, t + \Delta t)] = \Delta_m + c_{m+1}[U_{m+1} - \hat{T}(P_0, t + \Delta t)]$$
(6.63)

skąd

$$\hat{T}(P_0, t+\Delta t) = U_{m+1} + \frac{\Delta_m}{c_{m+1}} - \frac{c_0}{c_{m+1}} [T(P_0, t) - T(P_0, t+\Delta t)]$$
(6.64)

Jeżeli

$$\Delta_{m+1} < c_0 [T(P_0, t) - T(P_0, t + \Delta t)] < \Delta_{m+2}$$
(6.65)

to

$$C_0[T(P_0, t) - T(P_0, t + \Delta t)] = \Delta_{m+1} + c_{m+2}[U_{m+2} - \hat{T}(P_0, t + \Delta t)]$$
(6.66)

czyli

$$\hat{T}(P_0, t+\Delta t) = U_{m+2} + \frac{\Delta_{m+1}}{c_{m+2}} - \frac{c_0}{c_{m+2}} \left[T(P_0, t) - T(P_0, t+\Delta t) \right]$$
(6.67)

Analogiczne formuły można wyprowadzić również dla dalszych przejść, ale tak dużych zmian temperatury należy unikać ze względu na dokładność rozwiązania numerycznego.

Omówiona wyżej procedura dotyczy oczywiście procesu stygnięcia i w takiej wersji została przedstawiona w pracach [34, 35]. W procesie krzepnięcia i stygnięcia odlewu może pojawić się jednak również sytuacja odwrotna. Przykładowo, podczas przejścia wlewka ciagłego przez kolejne sektory strefy chłodzenia wtórnego na granicach tych sektorów pasmo wlewka leżace w pobliżu jego brzegu zewnętrznego nagrzewa się, co wynika ze skokowej zmiany współczynnika wymiany ciepła, który w kolejnych sektorach tej strefy z reguły maleje.

Rozwiązania numeryczne prezentowane między innymi w cytowanych wyżej publikacjach [34, 35] są wprawdzie poprawne, bo przeliczane było tylko przejście od fazy bazowej (ciecz) do fazy stałej, a nie przejścia bardziej złożone, ale, ogólnie rzecz biorąc, w procedurze korygowania pola temperatury należy uwzględnić zarówno możliwość wzrostu, jak i spadku temperatury w węźle P_0 z obszaru krzepnącego odlewu.

Na rys. 6.23 pokazano różnice między temperatura $T(P_0, t)$ a temperaturami granicznymi w procesie nagrzewania otoczenia węzła P_0 .



Rys. 6.23. Różnice między $T(P_0, t)$ a temperaturami granicznymi (nagrzewanie) Fig. 6.23. Differences between $T(P_0, t)$ and border temperatures (heating)

Oznaczmy

$$\Delta'_{m} = c_{m} [T(P_{0}, t) - U_{m}]$$

$$\Delta'_{m-1} = \Delta'_{m} + c_{m-1} [U_{m} - U_{m-1}]$$

$$\Delta'_{m-2} = \Delta'_{m-1} + c_{m-2} [U_{m-1} - U_{m-2}]$$
(6.68)

Zdefiniowane wyżej różnice entalpii są oczywiście ujemne. Procedura korygowania chwilowego pola temperatury w węźle P_0 jest następująca. Jeżeli

.

$$c_0[T(P_0, t) - T(P_0, t + \Delta t)] > \Delta'_m$$
(6.69)

to skorygowana wartość $T(P_0, t+\Delta t)$ wynika z równania (6.61). W przypadku

$$\Delta'_{m-1} < c_0 [T(P_0, t) - T(P_0, t + \Delta t)] < \Delta'_m$$
(6.70)

mamy

$$\hat{T}(P_0, t+\Delta t) = U_{m-1} + \frac{\Delta_m}{c_{m-1}} - \frac{c_0}{c_{m-1}} \left[T(P_0, t) - T(P_0, t+\Delta t) \right]$$
(6.71)

Z kolei gdy

$$\Delta'_{m-2} < c_0 [T(P_0, t) - T(P_0, t + \Delta t)] < \Delta'_{m-1}$$
(6.72)

to

$$\hat{T}(P_0, t + \Delta t) = U_{m-2} + \frac{\Delta'_{m-1}}{c_{m-2}} - \frac{c_0}{c_{m-2}} [T(P_0, t) - T(P_0, t + \Delta t)]$$
(6.73)

itd.

Dokładnie taki sam sposób poprawiania chwilowego pola temperatury zapewnia algorytm prostszy - szczególnie na etapie realizacji numerycznej [56] (wzory zostaną podane dla przypadku stygnięcia). Pierwszym jego krokiem jest przeliczenie wyniku otrzymanego dla fazy bazowej na wynik dotyczący fazy m odpowiadającej temperaturze początkowej $T(P_0, t)$. Z bilansu

$$c_{B}[T(P_{0}, t) - T(P_{0}, t + \Delta t)] = c_{m}[T(P_{0}, t) - \hat{T}(P_{0}, t + \Delta t)]$$
(6.74)

gdzie c_B jest pojemnościa cieplna wybranej arbitralnie fazy bazowej, otrzymujemy

$$\hat{T}(P_0, t + \Delta t) = T(P_0, t) - \frac{c_B}{c_m} [T(P_0, t) - T(P_0, t + \Delta t)]$$
(6.75)

Jeżeli poprawiona temperatura w punkcie P_0 w chwili $t + \Delta t$ mieści się w granicach fazy m, to znaczy jest wyższa niż U_{m+1} , to proces korygowania zostaje zakończony. Jeżeli natomiast jest ona niższa od wartości granicznej U_{m+1} , ale wyższa od U_{m+2} , to

$$\bar{T}(P_0, t+\Delta t) = U_{m+1} - \frac{c_m}{c_{m+1}} \left[U_{m+1} - \hat{T}(P_0, t+\Delta t) \right]$$
(6.76)

Jeżeli poprawiona temperatura w punkcie P_0 w chwili $t+\Delta t$ mieści się w granicach fazy następnej, czyli w przedziale $[U_{m+2}, U_{m+3}]$, to

$$\hat{T}(P_0, t + \Delta t) = U_{m+2} - \frac{C_m}{C_{m+2}} \left[U_{m+1} - \hat{T}(P_0, t + \Delta t) \right] + \frac{C_{m+1}}{C_{m+2}} \left[U_{m+1} - U_{m+2} \right]$$
(6.77)

Analogiczne wzory można wyprowadzić również dla dalszych przejść, ale tak dużych zmian temperatury należy unikać ze względu na dokładność rozwiązania numerycznego.

Jeżeli poprawianie dotyczy węzłów, w których w rozpatrywanym kroku czasu zachodził proces nagrzewania, to przeliczanie temperatury na fazę aktualną realizuje wzór (6.75). Podobnie jak w przypadku stygnięcia nie korygujemy wyniku, jeśli "trafimy" w przedział

fazy m: $[U_m, U_{m-1}]$. Dla wartości wstępnie skorygowanej, która zawiera się w przedziale $[U_{m-1}, U_{m-2}]$, dokonujemy drugiej korekty, a mianowicie

$$\check{T}(P_0, t + \Delta t) = U_{m-1} - \frac{c_m}{c_{m-1}} \left[U_{m+1} - \hat{T}(P_0, t + \Delta t) \right]$$
(6.78)

Jeżeli poprawiona temperatura w punkcie P_0 w chwili $t+\Delta t$ mieści się w granicach fazy następnej, czyli w przedziale $[U_{m-2}, U_{m-3}]$, to

$$\check{T}(P_0, t+\Delta t) = U_{m-2} - \frac{c_m}{c_{m-2}} \left[U_{m-1} - \check{T}(P_0, t+\Delta t) \right] + \frac{c_{m-1}}{c_{m-2}} \left[U_{m-1} - U_{m-2} \right]$$
(6.79)

itd.

Działanie opisanego wyżej algorytmu przetestowano na następującym przykładzie. Rozważano staliwną kulę o średnicy 60 mm i temperaturze początkowej $T_0 = 900[^{\circ} \text{ C}]$ chłodzoną w ośrodku o temperaturze $T^{\circ} = 30[^{\circ} \text{ C}]$, przy czym współczynnik wymiany ciepła przyjęto jako stały i równy $\alpha = 200[\text{W/m}^2\text{ K}]$. Ciepło właściwe materiału zmieniało się zgodnie z zależnością

$$C(T) = \begin{cases} 4.680 \cdot 10^6 , & T > 750[^{\circ} C] \\ 9.550 \cdot 10^6 , & 700 \le T \le 750 \\ 4.125 \cdot 10^6 , & T < 700 \end{cases}$$
(6.80)

Istotna zmiana pojemności cieplnej stali w przedziale [700, 750 ° C] wiąże się z przemianą fazową w stanie stałym (przemiana eutektoidalna). Współczynnik przewodzenia ciepła materiału kuli wynosił λ =35 [W/mK].



Algorytm korygowania chwilowego pola temperatury był uzupełnieniem metody kombinowanej dla obszarów sferycznych (por. rozdział 5). Na rysunku 6.24 pokazano krzywe stygnięcia w środku kuli, na jej powierzchni zewnętrznej oraz powierzchni odpowiadającej połowie promienia. Należy podkreślić, że nałożono na siebie trzy rozwiązania numeryczne uzyskane dla trzech różnych faz bazowych - jak widać krzywe stygnięcia pokrywają się dokładnie, co świadczy o możliwości dowolnego wyboru fazy bazowej. Zauważmy jednak, że parametry wszystkich faz były tego samego rzędu.

Otrzymane wyniki świadczą o potrzebie uwzględnienia przemian fazowych w modelowaniu procesu obróbki cieplnej, ponieważ przebieg krzywych stygnięcia wyraźnie zmienia się w pobliżu izoterm granicznych.

Inne rozwiązane przez Autora niniejszej rozprawy przykłady [58] pokazują, że najlepsze wyniki osiąga się przyjmując jako fazę bazową - fazę, dla której wartość pojemności cieplnej jest najmniejsza. Zalecane w literaturze dotyczącej modelowania krzepnięcia stopów przyjęcie jako bazy fazy "najcieplejszej" jest również w pełni dopuszczalne, ponieważ parametry termofizyczne ciekłego metalu nie różnią się w sposób bardzo istotny od parametrów fazy stałej, dla której pojemność cieplna jest najmniejsza. Za przyjęciem fazy stałej przemawia również fakt, że natychmiast po zalaniu formy, na jej wewnętrznej powierzchni generuje się faza stała i węzły brzegowe liczone są z ich prawdziwymi parametrami, co jest z całą pewnością korzystne ze względu na prostotę modelowania warunków brzegowych i wy-znaczania temperatury kontaktu na styku odlewu i formy.

Przedstawioną wyżej metodę korygowania chwilowego pola temperatury wykorzystano również do obliczeń krzepnięcia i stygnięcia złożonego geometrycznie odlewu (węzeł typu H) w piaskowej masie formierskiej. Zadanie rozwiązano na dwa sposoby. Pierwszy z nich sprowadzał się do skonstruowania algorytmu wykorzystującego metodę kombinowaną dla obszarów niejednorodnych (por. [57, 58]). Sposób łączenia układów rozwiązujących dla zadań 1D i obszarów sferycznych przedstawiono w rozdziale 5. Niżej natomiast zostanie omówiony ten sam problem dla przypadku obszarów płaskich zorientowanych w układzie kartezjańskim.

Nieustaloną dyfuzję ciepła w obszarze niejednorodnym będącym złożeniem dwóch podobszarów (odlew i forma) opisuje układ równań różniczkowych w postaci

$$\begin{vmatrix} x \in \Omega_1 : & c_1 \frac{\partial T_1(x, t)}{\partial t} = \lambda_1 \operatorname{div}[\operatorname{grad} T_1(x, t)] \\ x \in \Omega_2 : & c_2 \frac{\partial T_2(x, t)}{\partial t} = \lambda_2 \operatorname{div}[\operatorname{grad} T_2(x, t)] \end{aligned}$$
(6.81)

gdzie wskaźnik 1 identyfikuje obszar odlewu, natomiast wskaźnik 2 - obszar formy.

Jak wiadomo, operator div(grad T) w obszarze płaskim zorientowanym w prostokątnym układzie współrzędnych jest postaci

$$\operatorname{div}[\operatorname{grad} T(x, t)] = \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x_2^2}$$
(6.82)

Pojemność cieplna c_1 odpowiada pojemności cieplnej fazy bazowej ($c_1=c_B$). Na zewnętrznej powierzchni formy ciepło oddawane jest do otoczenia

$$x \in \Gamma_0$$
: $q_2(x, t) = -\lambda_2 \frac{\partial T_2(x, t)}{\partial n}$ (6.83)

w szczególności można przyjąć zgodnie z prawem Newtona

$$x \in \Gamma_0$$
: $q_2(x, t) = \alpha \left[T_2(x, t) - T^{\infty} \right]$ (6.84)

Jeżeli na styku odlewu i formy założyć idealny kontakt cieplny, to warunek brzegowy na tej powierzchni przyjmuje postać

$$x \in \Gamma_{12} : \begin{cases} -\lambda_1 \frac{\partial T_1(x, t)}{\partial n} = -\lambda_2 \frac{\partial T_2(x, t)}{\partial n} \\ T_1(x, t) = T_2(x, t) \end{cases}$$
(6.85)

Warunek początkowy sprowadza się do przyjęcia temperatury zalewania i temperatury początkowej masy formierskiej:

$$t = 0 : \begin{cases} T_1(x, 0) = T_0(x) \\ T_2(x, 0) = T_{20}(x) \end{cases}$$
(6.86)

Wprowadzamy następujące oznaczenia (por. rys. 6.25)

- **T**₁, **q**₁ są wektorami temperatur i strumieni ciepła na zewnętrznej powierzchni podobszaru Ω_1 ,
- T₂, q₂ są wektorami temperatur i strumieni ciepła na zewnętrznej powierzchni podobszaru Ω_2 ,
- T₁₂, T₂₁, q₁₂, q₂₁ są wektorami temperatur i strumieni ciepła na wspólnym brzegu Γ_{12} .



Rys. 6.25. Obszary Ω_1 i Ω_2 Fig. 6.25. Domains Ω_1 and Ω_2

,,działanie'' algorytmu metody kombinowanej dla obszarów niejednorodnych rozpatrywano układ podstawowy składający się z symetrycznego wycinka węzła typu H i ścianek przylegających [57, 58]. Zgodnie z definicją układu podstawowego na jego powierzchniach granicznych przyjęto warunki adiabatyczne (współczynnik wnikania w warunku (6.84) wynosi 0, co determinuje $q_1 = q_2 = 0$). Sprzegając równania (6.92) i (6.93) otrzymujemy

$\begin{bmatrix} -\mathbf{H}_1 & -\mathbf{H}_{12} & \mathbf{G}_{12} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}_1^t \\ \mathbf{T}^{f+1} \end{bmatrix} =$	
$\begin{bmatrix} 0 & -\mathbf{H}_{21} & -\mathbf{G}_{21} & -\mathbf{H}_{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{q}^{f+1} \\ \mathbf{T}_{2}^{f+1} \end{bmatrix}$	(6.94)
$= \begin{bmatrix} -\mathbf{G}_1 & 0 \\ 0 & -\mathbf{G}_2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1^{f+1} \\ \mathbf{q}_2^{f+1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{P}_1 & 0 \\ 0 & \mathbf{P}_2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{T}_1^f \\ \mathbf{T}_2^f \end{bmatrix}$	

[-/+1]

Po wyznaczeniu brzegowych temperatur i strumieni ciepła w chwili t^{f+1} temperatury w wezłach wewnętrznych oblicza się dla każdego podobszaru oddzielnie (por. wzór (3.59) - rozdział 3). Przykład realizacji numerycznej omawianego zadania przedstawiono w pracy [58].

Niezwykle korzystnym, z numerycznego punktu widzenia, podejściem do rozwiązywania zadań nieustalonej dyfuzji ciepła w obszarach niejednorodnych jest łączenie różnych metod obliczeń dla różnych podobszarów. Można wówczas w sposób optymalny wykorzystać zalety każdej z nich. Algorytm taki był wykorzystany m.in. w pracach [21, 37, 59], w których przepływ ciepła w krzepnącym odlewie modelowano za pomocą I schematu MEB, natomiast do obliczeń dotyczących podobszaru formy wykorzystano II schemat metody. II schemat metody brzegowych równań całkowych (w przypadku jednorodnego, zerowego warunku początkowego i pół bezźródłowych) nie wymaga całkowania po wnętrzu obszaru i problem sprowadza się do zadania całkowicie brzegowego - jak w przypadku zadań ustalonych [60, 61, 62]. Tak więc w stosunkowo prosty sposób można uwzględnić zarówno rzeczywistą geometrię formy, jej parametry termofizyczne, temperaturę początkową itp., a więc rozpatrywać problem w całej jego złożoności, a równocześnie istotnie zmniejszyć liczbę niewiadomych w układzie rozwiązującym. W pracach [31, 47, 48] omówiono z kolei różne aspekty łączenia II schematu z metodą elementów skończonych.

Autor niniejszej rozprawy podjął również zakończone sukcesem próby kojarzenia różnych metod numerycznych. Niżej zostanie omówiony algorytm dotyczący modelowania przepływu ciepła w układzie odlew - forma - otoczenie, w którym dokonano połączenia metody kombinowanej i klasycznej metody elementów brzegowych. Ponieważ obszar odlewu jest obszarem źródłowym, więc do obliczeń procesu krzepnięcia wykorzystano metodę kombinowaną uzupełnioną omówioną wyżej procedurą korygowania chwilowego pola temperatury, natomiast dla obszaru masy formierskiej, w którym modeluje się pole bezźródłowe, wykorzystano II schemat MEB.

Aby przedstawić pokrótce istotę II schematu, rozpatrywać będziemy równanie (6.81b) opisujące bezźródłowe pole temperatury w obszarze formy odlewniczej, przy czym wskaźnik

Metoda kombinowana prowadzi do następujących układów rozwiązujących (por. wzór (3.58) - rozdział 3)

– dla obszaru odlewu Ω_1

$$\begin{bmatrix} \mathbf{G}_1 & \mathbf{G}_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1^{f+1} \\ \mathbf{q}_{12}^{f+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{H}_1 & \mathbf{H}_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}_1^{f+1} \\ \mathbf{T}_{12}^{f+1} \end{bmatrix} + \mathbf{P}_1 \cdot \mathbf{T}_1^f$$
(6.87)

dla obszaru masy formierskiej Ω₂

$$\mathbf{G}_{2} \quad \mathbf{G}_{21} \begin{bmatrix} \mathbf{q}_{2}^{f+1} \\ \mathbf{q}_{21}^{f+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{H}_{2} & \mathbf{H}_{21} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{2}^{f+1} \\ \mathbf{T}_{21}^{f+1} \end{bmatrix} + \mathbf{P}_{2} \cdot \mathbf{T}_{2}^{f}$$
(6.88)

Warunek brzegowy (6.85) na styku podobszarów Γ_{12} można zapisać w postaci

$$x \in \Gamma_{12} : \begin{cases} \mathbf{q}_{12}^{f+1} = -\mathbf{q}_{21}^{f+1} = \mathbf{q}^{f+1} \\ \mathbf{T}_{12}^{f+1} = \mathbf{T}_{21}^{f+1} = \mathbf{T}^{f+1} \end{cases}$$
(6.89)

i jest on wprowadzany do układów rozwiązujących (6.87) oraz (6.88), czyli

$$\begin{bmatrix} \mathbf{G}_1 & \mathbf{G}_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1^{f+1} \\ \mathbf{q}^{f+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{H}_1 & \mathbf{H}_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}_1^{f+1} \\ \mathbf{T}^{f+1} \end{bmatrix} + \mathbf{P}_1 \cdot \mathbf{T}_1^f$$
(6.90)

oraz

$$\mathbf{G}_{2} - \mathbf{G}_{21} \begin{bmatrix} \mathbf{q}_{2}^{f+1} \\ \mathbf{q}^{f+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{H}_{2} & \mathbf{H}_{21} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{2}^{f+1} \\ \mathbf{T}^{f+1} \end{bmatrix} + \mathbf{P}_{2} \cdot \mathbf{T}_{2}^{f}$$
(6.91)

Po przeniesieniu niewiadomych na lewą stronę mamy

$$\begin{bmatrix} -\mathbf{H}_{1} & -\mathbf{H}_{12} & \mathbf{G}_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{1}^{f+1} \\ \mathbf{T}^{f+1} \\ \mathbf{q}^{f+1} \end{bmatrix} = -\mathbf{G}_{1} \cdot \mathbf{q}_{1}^{f+1} + \mathbf{P}_{1} \cdot \mathbf{T}_{1}^{f}$$
(6.92)

oraz

$$\begin{bmatrix} -\mathbf{H}_{21} & -\mathbf{G}_{21} & -\mathbf{H}_{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}^{f+1} \\ \mathbf{q}^{f+1} \\ \mathbf{T}_{2}^{f+1} \end{bmatrix} = -\mathbf{G}_{2} \cdot \mathbf{q}_{2}^{f+1} + \mathbf{P}_{2} \cdot \mathbf{T}_{2}^{f}$$
(6.93)

Należy w tym miejscu zaznaczyć, że równania powyższe zapisano zakładając znajomość strumieni ciepła na zewnętrznych powierzchniach układu. W przykładzie ilustrującym

,2' wyróżniający ten obszar zostanie na pewien czas pominiety.

Równanie całkowe w omawianym przypadku przyjmuje postać [31, 37, 59]

$$B(\xi) T(\xi, t^{f+1}) + \frac{1}{c} \sum_{s=1}^{f+1} \int_{\Gamma} \int_{t^{s+1}}^{t^s} T^*(\xi, x, t^{f+1}, t) q(x, t) dt d\Gamma =$$

$$= \frac{1}{c} \sum_{s=1}^{f^{s+1}} \int_{\Gamma} \int_{t^{s-1}}^{t^s} q^*(\xi, x, t^{f+1}, t) T(x, t) dt d\Gamma + \int_{\Omega} T^*(\xi, x, t^{f+1}, t^0) T(x, t^0) d\Omega$$
(6.95)

gdzie $T^*(\xi, x, t^{f+1}, t)$ jest rozwiązaniem fundamentalnym. Dla zadań 2D i obszarów zorientowanych we współrzędnych prostokątnych jest to funkcja

$$T^{*}(\xi, x, t^{f+1}, t) = \frac{1}{4\pi a(t^{f+1} - t)} \exp\left[-\frac{r^{2}}{4a(t^{f+1} - t)}\right]$$
(6.96)

przy czym r jest odległością między punktem obserwacji ξ a punktem bieżącym x, $q^{*}(\xi, x, t^{f+1}, t) = -\lambda \partial T^{*}(\xi, x, t^{f+1}, t)/\partial n$ jest strumieniem ciepła wynikającym z rozwiązania fundamentalnego, natomiast $q(x, t) = -\lambda \partial T(x, t)/\partial n$, $B(\xi) \in [0, 1]$.

Jak można zauważyć, przyjęcie zerowego warunku początkowego znacznie upraszcza i skraca obliczenia numeryczne, ponieważ powoduje zerowanie się występującej w równaniu (6.95) całki po wnętrzu obszaru. Zakładając, że w chwili t=0 temperatura w obszarze formy T_{20} jest stała, wystarczy zmienić odpowiednio poziom odniesienia dla temperatury $T=T-T_{20}$ (w dalszych rozdziałach funkcję T należy traktować jako temperaturę zredukowaną T).

Jeżeli przyjmiemy elementy stałe względem czasu (por. rozdział 3), to zależność (6.95) można zapisać następująco

$$B(\xi) T(\xi, t^{f+1}) + \frac{1}{c} \sum_{s=1}^{f+1} \int_{\Gamma} \left[\int_{t^{s+1}}^{t^s} T^*(\xi, x, t^{f+1}, t) dt \right] q(x, t^s) d\Gamma =$$

$$= \frac{1}{c} \sum_{s=1}^{f+1} \int_{\Gamma} \left[\int_{t^{s+1}}^{t^s} q^*(\xi, x, t^{f+1}, t) dt \right] T(x, t^s) d\Gamma$$
(6.97)

i wówczas całkowanie względem czasu można wykonać analitycznie, a mianowicie

$$\frac{1}{c} \int_{t^{r+1}}^{t^{*}} q^{*}(\xi, x, t^{f+1}, t) dt = \frac{d}{2\pi r^{2}} \left\{ \exp\left[-\frac{r^{2}}{4a(t^{f+1} - t^{r-1})}\right] - \exp\left[-\frac{r^{2}}{4a(t^{f+1} - t^{s})}\right] \right\} = \frac{d}{2\pi r^{2}} \left\{ \exp\left[-\frac{r^{2}}{4a[f+1 - (s-1)]\Delta t}\right] - \exp\left[-\frac{r^{2}}{4a(f+1 - s)\Delta t}\right] \right\}$$
(6.98)

$$\frac{1}{c} \int_{t^{r-1}}^{t^{r}} T^{*}(\xi, x, t^{f+1}, t) dt = \frac{1}{4\pi\lambda} \left\{ \operatorname{Ei} \left[\frac{r^{2}}{4a(t^{f+1} - t^{x-1})} \right] - \operatorname{Ei} \left[\frac{r^{2}}{4a(t^{f+1} - t^{s})} \right] \right\} = \frac{1}{4\pi\lambda} \left\{ \operatorname{Ei} \left[\frac{r^{2}}{4a[f+1-(s-1)]\Delta t} \right] - \operatorname{Ei} \left[\frac{r^{2}}{4a(f+1-s)\Delta t} \right] \right\}$$
(6.99)

gdzie Ei() jest eksponencjalną funkcją calkową

$$Ei(\nu) = \int_{\nu}^{-} \frac{1}{\mu} \exp(-\mu) d\mu$$
 (6.100)

natomiast

0107

$$d = (x_1 - \xi_1) \cos \alpha_1 + (x_2 - \xi_2) \cos \alpha_2$$
 (6.101)

gdzie $\cos\alpha_1$, $\cos\alpha_2$ są cosinusami kierunkowymi wektora normalnego do brzegu.

Wystarczającą dla celów obliczeń numerycznych dokładność oszacowania funkcji Ei() zapewnia podana w literaturze [63] jej aproksymacja funkcją elementarną. Tak więc równanie (6.97) przyjmuje postać

$$B(\xi) T(\xi, t^{f+1}) + \frac{1}{4\pi\lambda} \int_{\Gamma} \operatorname{Ei}\left(\frac{r^{2}}{4a\Delta t}\right) q(x, t^{f+1}) d\Gamma =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma} \frac{d}{r^{2}} \exp\left(-\frac{r^{2}}{4a\Delta t}\right) T(x, t^{f+1}) d\Gamma +$$

$$+ \frac{1}{2\pi} \sum_{s=1}^{f} \int_{\Gamma} \frac{d}{r^{2}} \left[\exp\left(-\frac{r^{2}}{4a(s+1)\Delta t}\right) - \exp\left(-\frac{r^{2}}{4as\Delta t}\right)\right] T(x, t^{f+1-s}) d\Gamma -$$

$$- \frac{1}{4\pi\lambda} \sum_{s=1}^{f} \int_{\Gamma} \left[\operatorname{Ei}\left(\frac{r^{2}}{4a(s+1)\Delta t}\right) - \operatorname{Ei}\left(\frac{r^{2}}{4as\Delta t}\right)\right] q(x, t^{f+1-s}) d\Gamma$$
(6.102)

Po dyskretyzacji brzegu rozpatrywanego obszaru elementami stałymi otrzymujemy następującą postać układu rozwiązującego

$$\frac{1}{2}T(\xi^{i}, t^{f+1}) + \sum_{j=1}^{N} g_{ij}q(x^{j}, t^{f+1}) = \sum_{j=1}^{N} h_{ij}T(x^{j}, t^{f+1}) + \sum_{x=1}^{f} \left[h_{ij}^{x}T(x^{j}, t^{f+1-x}) - g_{ij}^{x}q(x^{j}, t^{f+1-x})\right]$$
(6.103)

W zależności (6.103) wprowadzono następujące oznaczenia

$$g_{ij} = \frac{1}{4\pi\lambda} \int_{\Gamma_j} \operatorname{Ei}\left(\frac{r^2}{4a\Delta t}\right) \mathrm{d}\Gamma_j \tag{6.104}$$

$$h_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma_j} \frac{d}{r^2} \exp\left(-\frac{r^2}{4a\Delta t}\right) d\Gamma_j, & i \neq j \\ -\frac{1}{2}, & i = j \end{cases}$$
(6.105)

oraz

$$g_{ij}^{*} = \frac{1}{4\pi\lambda} \int_{\Gamma_{j}} \left[\operatorname{Ei}\left(\frac{r^{2}}{4a(s+1)\Delta t}\right) - \operatorname{Ei}\left(\frac{r^{2}}{4as\Delta t}\right) \right] d\Gamma_{j}$$

$$f_{ij}^{*} = \frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma_{i}} \frac{d}{r^{2}} \left[\exp\left(-\frac{r^{2}}{4a(s+1)\Delta t}\right) - \exp\left(-\frac{r^{2}}{4as\Delta t}\right) \right] d\Gamma_{j}$$
(6.106)

Układ (6.103) można również zapisać w postaci macierzowej

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{q}^{f+1} = \mathbf{H} \cdot \mathbf{T}^{f+1} + \sum_{s=1}^{f} \left(\mathbf{H}^{s} \cdot \mathbf{T}^{f+1-s} - \mathbf{G}^{s} \cdot \mathbf{q}^{f+1-s} \right)$$
(6.107)

Opis sposobu połączenia metody kombinowanej z II wariantem MEB wymaga ,,powrotu'' do oznaczeń z rysunku 6.25, w szczególności równanie (6.107) przyjmuje postać

$$\begin{bmatrix} \mathbf{G}_{2} & \mathbf{G}_{21} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{q}_{2}^{f+1} \\ \mathbf{q}_{21}^{f+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{H}_{2} & \mathbf{H}_{21} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{2}^{f+1} \\ \mathbf{T}_{21}^{f+1} \end{bmatrix} + \\ + \sum_{s=1}^{f} \left(\begin{bmatrix} \mathbf{H}_{2}^{s} & \mathbf{H}_{21}^{s} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{2}^{f+1-s} \\ \mathbf{T}_{21}^{f+1-s} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{G}_{2}^{s} & \mathbf{G}_{21}^{s} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{q}_{2}^{f+1-s} \\ \mathbf{q}_{21}^{f+1-s} \end{bmatrix} \right)$$
(6.108)

Po wprowadzeniu warunku brzegowego (6.89) do układu (6.108) i przeniesieniu niewiadomych na lewą stronę (na powierzchni Γ_2 założono warunek II rodzaju) otrzymuje się

$$\begin{bmatrix} -\mathbf{H}_{21} & \mathbf{G}_{21} & -\mathbf{H}_{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}^{f+1} \\ \mathbf{q}^{f+1} \\ \mathbf{T}_{2}^{f+1} \end{bmatrix} = -\mathbf{G}_{2} \cdot \mathbf{q}_{2}^{f+1} + \mathbf{T}_{2}^{f+1} \end{bmatrix}$$

+
$$\sum_{s=1}^{f} \left[\begin{bmatrix} \mathbf{H}_{2}^{s} & \mathbf{H}_{21}^{s} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{2}^{f+1-s} \\ \mathbf{T}_{21}^{f+1-s} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{G}_{2}^{s} & \mathbf{G}_{21}^{s} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{q}_{2}^{f+1-s} \\ \mathbf{q}_{21}^{f+1-s} \end{bmatrix} \right]$$
 (6.109)

Sprzegając układy rozwiązujące metody kombinowanej (wzór (6.92)) i II schematu (wzór (6.109)) mamy

$$\begin{bmatrix} -\mathbf{H}_{1} & -\mathbf{H}_{12} & \mathbf{G}_{12} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{H}_{21} & -\mathbf{G}_{21} & -\mathbf{H}_{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{1}^{f+1} \\ \mathbf{T}_{2}^{f+1} \\ \mathbf{T}_{2}^{f+1} \end{bmatrix} = (6.110)$$

$$= \begin{bmatrix} -\mathbf{G}_{1} \mathbf{q}_{1}^{f+1} + \mathbf{P}_{1} \mathbf{T}_{1}^{f} \\ -\mathbf{G}_{2} \cdot \mathbf{q}_{2}^{f+1} + \sum_{s=1}^{f} \left(\begin{bmatrix} \mathbf{H}_{2}^{s} & \mathbf{H}_{21}^{s} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{2}^{f+1-s} \\ \mathbf{T}_{21}^{f+1-s} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{G}_{2}^{s} & \mathbf{G}_{21}^{s} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{q}_{2}^{f+1-s} \\ \mathbf{q}_{21}^{f+1-s} \end{bmatrix} \right)$$

Temperatury w węzłach wewnętrznych oblicza się niezależnie dla każdego z obszarów, przy czym znajomość pola temperatury we wnętrzu obszaru masy formierskiej nie jest konieczna do dalszych obliczeń.

Efektywność i dokładność opisanego wyżej algorytmu przetestowano na przykładzie obliczeń przepływu ciepła w obszarze pokazanym na rysunku 6.26 (rozwiązanie tego samego zadania wyłącznie metodą kombinowaną przedstawiono w [57]).



Rys. 6.26. Obszar odlewu i podobszary formy Fig. 6.26. Casting domain and sub-domains of mould

W wariancie omówionym w [57, 58] na obszar odlewu i formy nałożono siatkę stalych elementów brzegowych i wewnętrznych, brzeg obszaru podzielono na 96 elementów

brzegowych, natomiast we wnętrzu wyróżniono 180 elementów (kwadraty). Dyskretyzację symetrycznego fragmentu obszaru pokazano na rys. 6.27a. Na rys. 6.27b przedstawiono siatkę przyjętą do numerycznego rozwiązania tego samego zadania za pomocą kombinacji MEB z dyskretyzacją czasu i II schematu.

Liczba elementów brzegowych jest w obu przypadkach taka sama, ale najbardziej istotną korzyścią wynikającą ze złożenia dwóch algorytmów jest fakt, że całkowanie po wnętrzu obszaru dotyczy jedynie pierwszego z nich, temperatury we wnętrzu formy nie muszą być wyznaczane.



Rys. 6.27. Dyskretyzacja obszaru Fig. 6.27. Discretization of domain

Do obliczeń przyjęto następujące parametry termofizyczne

- dla obszaru odlewu $\lambda_1 = 35$ [W/mK], $c_B = 5.9 \cdot 10^6$ [J/m³K], dla podobszaru strefy dwufazowej $C(T) = c_p + L_V / (T_L T_S) = 61.44 \cdot 10^6$, $T_S = 1470^\circ$ C, $T_L = 1505^\circ$ C,
- dla podobszaru formy $\lambda_2 = 1.2$, $c_2 = 1.74 \cdot 10^6$,
- dla podobszaru rdzenia $\lambda_3 = 0.7$, $c_3 = 1.88 \cdot 10^6$.

Temperatura zalewania wynosiła T_{10} =1550° C, temperatura początkowa podobszaru formy i rdzenia - 20° C.

Chwilowy rozkład izoterm oraz kształt zakrzepłej części odlewu dla czasów 10, 20, 30, 40 minut pokazano na rysunku 6.28.

Porównując otrzymane wyniki z wynikami obliczeń przedstawionymi w [57, 58] należy stwierdzić, że różnice między rozwiązaniami są praktycznie niezauważałne.



Rys. 6.28. Pole temperatury dla czasów 10, 20, 30, 40 min Fig. 6.28. Temperature field for time 10, 20, 30, 40 minutes

6.4.4. Uogólnienie metody korygowania chwilowego pola temperatury

Metoda omówiona w podrozdziale poprzednim może być stosowana w przypadku obszarów, dla których założono stałą wartość współczynnika przewodzenia ciepła (takie założenie dla typowych materiałów odlewniczych jest w zasadzie dopuszczalne), natomiast pojemność cieplną C(T) zastąpiono funkcją kawałkami stałą. Drugie z tych założeń ogranicza w jakimś stopniu przebieg funkcji C(T), ale okazuje się, że powyższy postulat nie jest konieczny.

Rozpatrywać będziemy obszar, w którym C(T) jest funkcją ciągłą (z wyjątkiem skończonej liczby punktów) i ograniczoną, jak poprzednio współczynnik λ jest stały.

Oznaczmy przez $T(P_0, t)$ oraz $T(P_0, t+\Delta t)$ wartości temperatur w dwóch sąsiednich chwilach czasu w węźle P_0 z obszaru odlewu, w którym realizowana jest procedura poprawiania. Obliczenia prowadzono przy założeniu, że pojemność cieplna materiału odlewu odpowiada pojemności bazowej c_B . Wynika stąd, że zmiana entalpii fizycznej stopu w objętości kontrolnej V_0 , dla której punkt P_0 jest węzłem centralnym, wynosi

$$\Delta H_0 = c_B \left[T(P_0, t + \Delta t) - T(P_0, t) \right] V_0$$
(6.111)

Biorąc pod uwagę rzeczywistą pojemność cieplną C(T), należy powyższą zmianę entalpii przyrównać z wyrażeniem

$$V_{0} \int_{T(P_{0}, t)}^{T(P_{0}, t+\Delta t)} C(\mu) d\mu$$
(6.112)

Z równania

$$c_{B}[T(P_{0}, t+\Delta t) - T(P_{0}, t)]V_{0} = V_{0} \int_{T(P_{0}, t)}^{T(P_{0}, t+\Delta t)} C(\mu)d\mu$$
(6.113)

należy wyznaczyć górną granicę w calce po prawej stronie.

σ

Równanie powyższe można rozwiązać metodami numerycznymi, wykorzystując np. wzór trapezów. Oznaczmy przez ΔT krok całkowania. Dolna granica odpowiada oczywiście temperaturze $T(P_0, t)$, a kolejne wartości argumentów wynoszą $T(P_0, t) - \Delta T$, $T(P_0, t) - 2\Delta T$ itd. Wykorzystujemy procedurę sumowania pól kolejnych trapezów, które wynoszą

$$_{i} = \frac{C[T(P_{0}, t) - (i - 1)\Delta T] + C[T(P_{0}, t) - i\Delta T]}{2}\Delta T$$
(6.114)

i przerywamy ją po osiągnięciu (z założoną dokładnością) wartości

$$c_{B}[T(P_{0}, t + \Delta t) - T(P_{0}, t)]$$
(6.115)

Ostatnia ,,zarejestrowana'' wartość $T(P_0, t) + i\Delta T$ odpowiada skorygowanej temperaturze w węźle P_0 w chwili $t + \Delta t$. Jak łatwo sprawdzić, dla funkcji kawałkami stałej opisana wyżej metoda sprowadza się do metody opisanej w podrozdziale poprzednim.

Przykładem wykorzystania metody uogólnionej mogą być obliczenia dotyczące oddziaływań cieplnych między pojedynczą cząstką a matrycą metalową w procesie krzepnięcia kompozytu odlewanego. Rozważano kompozyt AlSi9-Pb, a w szczególności obszar objętości kontrolnej [64] pokazany na rys. 6.29. Objętość kontrolna jest obszarem niejednorodnym, którego centralną część stanowi kulista cząstka ołowiu o promieniu R_1 , natomiast warstwa sferyczna wypełniona jest stopem Al-Si. Zewnętrzny promień tej warstwy oznaczono przez R_2 i na powierzchni $\rho = R_2$ założono warunek adiabatyczny q=0.

Jeżeli przyjąć, że parametry termofizyczne ołowiu są wartościami stałymi i takimi samymi w podobszarze cieczy i ciała stałego oraz dodatkowo na etapie obliczeń numerycznych wykorzystać metodę zapasu temperatury (por. podrozdział 6.4.1), to przepływ ciepła w obszarze czastki ołowianej opisuje równanie dyfuzji ciepła w postaci

$$c_{1}\frac{\partial T_{1}(\rho, t)}{\partial t} = \frac{\lambda_{1}}{\rho^{2}}\frac{\partial}{\partial \rho}\left[\rho^{2}\frac{\partial T_{1}(\rho, t)}{\partial \rho}\right]$$
(6.116)

gdzie c_1 , λ_1 oznaczają ciepło właściwe odniesione do jednostki objętości i współczynnik przewodzenia.



Rys. 6.29. Objętości kontrolne Fig. 6.29. Control volumes

Równanie przewodnictwa dla podobszaru matrycy jest następujące

$$c_{2}(T)\frac{\partial T_{2}(\rho, t)}{\partial t} = \frac{\lambda_{2}}{\rho^{2}}\frac{\partial}{\partial \rho}\left[\rho^{2}\frac{\partial T_{2}(\rho, t)}{\partial \rho}\right]$$
(6.117)

gdzie $c_2(T)$ jest zastępczą pojemnością cieplną stopu Al-Si. Przebieg tej funkcji pokazano na rys. 6.30.

Na powierzchni kontaktu $\rho = R_1$ przyjęto warunek ciągłości

$$\rho = R_1 : \begin{cases} -\lambda_1 \frac{\partial T_1(\rho, t)}{\partial \rho} = -\lambda_2 \frac{\partial T_2(\rho, t)}{\partial \rho} \\ T_1(\rho, t) = T_2(\rho, t) \end{cases}$$
(6.118)

natomiast (jak wspomniano poprzednio) dla $\rho = R_2$: q=0. W chwili t=0 temperatury początkowe w podobszarach $T_1(r, 0)$ i $T_2(r, 0)$ są znane.

Do rozwiązania zadania wykorzystano algorytm będący złożeniem metody kombinowanej (obszar cząstki ołowianej) oraz metody elementów skończonych (obszar matrycy) [65]. Metoda elementów skończonych dopuszcza przyjęcie zmiennych parametrów termofizycznych, ponieważ zarówno wartość zastępczej pojemności cieplnej, jak i współczynnika przewodzenia definiuje się dla każdego elementu oddzielnie. Z drugiej jednak strony, dla zadania tak silnie nieliniowego jak problem opisany równaniem (6.117) uśrednianie pojemności zastępczej na elemencie skończonym nie ma racjonalnych przesłanek, w związku z powyższym w miejsce równania dyfuzji dla podobszaru matrycy wprowadzono równanie liniowe, a na etapie obliczeń numerycznych wartości temperatur w wezłach elementów na t^{f+1} poziomie czasu

poprawiano wykorzystując opisaną w tym podrozdziale metodę korygowania chwilowego pola temperatury. Tak więc, obliczenia dla przejścia $t^{f} \rightarrow t^{f+1}$ realizowano w sposób następujący. Na podstawie układu rozwiązującego powstałego przez skojarzenie obu metod wyznaczano pole temperatury w obszarze w chwili t^{f+1} , a następnie wartości temperatur w podobszarze cząstki korygowano wykorzystując metodę zapasu, natomiast rozwiązanie w węzłach podobszaru matrycy - wykorzystując uogólnioną wersję metody poprawiania chwilowego pola temperatury.



Rys. 6.30. Pojemność cieplna stopu Al-Si $[J/m^3 K]$ Fig. 6.30. Thermal capacity for Al-Si alloy $[J/m^3 K]$

Układ rozwiązujący hybrydowego algorytmu MEB-MES ma oczywiście mniej niewiadomych niż taki sam układ zbudowany na podstawie MES. Podobszar cząstki kulistej generuje tylko dwa równania (jeżeli punkt osobliwy $\rho=0$ otoczyć kulką o bardzo małym promieniu - por. rozdział 5), natomiast liczba niewiadomych związana z podobszarem matrycy odpowiada liczbie węzłów wyróżnionych w tym podobszarze. Fragment układu rozwiązującego związanego z matrycą jest z formalnego punktu widzenia taki sam jak w przypadku modelowania dyfuzji ciepła w płycie [29, 30], różnice występują w sposobie obliczania elementów macierzy sztywności (przewodności) oraz pojemności cieplnych.

Sprzężenie obu fragmentów końcowego układu rozwiązującego realizuje się poprzez warunek ciągłości na powierzchni kontaktu i w swojej istocie nie odbiega od sposobu łączenia układów rozwiązujących dla obszarów niejednorodnych, który opisano w rozdziale 5.

W realizacji numerycznej wykorzystano dane z cytowanej już pracy [64], w szczególności przyjęto, że promień cząstki ołowianej wynosi $R_1=0.5$ mm, a promień objętości kotrolnej $R_2=2$ mm. Temperatury początkowe w podobszarach wynosiły 20 °C i 650 °C odpowiednio. Na rys. 6.31, 6.32 pokazano profile temperatury w obszarze cząstki ołowianej i matrycy

metalowej dla wybranych chwil czasu.



Rys. 6.32. Profile temperatury w matrycy Fig. 6.32. Temperature profiles in metal matrix

Objętość kontrolna będąca przedmiotem analizy położona jest w centralnych częściach odlewu i jak widać z otrzymanych wyników, cząsteczka ołowiu nie jest na tyle efektywnym

ochładzalnikiem, aby zapewnić zakrzepnięcie objętości kontrolnej. Proces krzepnięcia kompozytu determinują więc przede wszystkim warunki odprowadzenia ciepła na powierzchni odlew-forma. Tak więc, otrzymane wyniki odpowiadają sytuacji bezpośrednio po wypełnieniu wnęki formy i rozszerzenie algorytmu na dalsze etapy procesu krzepnięcia wymagałoby wprowadzenia innych niż adiabatyczne warunków brzegowych na zewnętrznej powierzchni objętości kontrolnej.

6.5. Modele makroskopowe a struktura pierwotna odlewu

Makroskopowe modele krzepnięcia dostarczaja wielu wiarygodnych i istotnych informacji dotyczących procesów cieplnych zachodzących w układzie odlew-forma-otoczenie, natomiast niewiele mówią o zjawiskach na poziomie mikro. Z drugiej strony przebieg procesu krystalizacji i w konsekwencji struktura odlewu powinny być w jakiś sposób powiązane z makroskopowym przepływem ciepła. W literaturze związki te ujmuje się najczęściej w sposób jakościowy, chociaż pojawiały się również prace ujmujące w sposób ilościowy zależności między makroskopowymi parametrami procesu krzepnięcia a cechami struktury odlewu. Jednym z najbardziej znanych wzorów określających zależność między polem temperatury w ściance odlewu a rodzajem krzepnięcia (objętościowym - endogenicznym i warstwowym egzogenicznym) jest wzór Wiejnika (np. [25]). Gdy

$$\frac{T_L - T_S}{\Delta T} > 1 \tag{6.119}$$

to mamy do czynienia z krzepnięciem endogenicznym. We wzorze (6.119) ΔT jest spadkiem temperatury w przekroju ścianki odlewu. Dla wartości mniejszych od 1 krzepnięcie ma charakter egzogeniczny. Z kolei Patterson i Engler (por. [66]) wprowadzili wielkość będącą stosunkem gradientu temperatury w pobliżu izotermy T_L (od strony cieczy) do pierwiastka z prędkości krzepnięcia. Na jego podstawie dla określonego stopu odlewniczego można prognozować charakter krzepnięcia (endogeniczne, egzogeniczne, dendrytyczne itd.).

Innym kryterium stosowanym między innymi przez Grugela [67] jest lokalny czas krzepnięcia zdefiniowany następująco

$$= \frac{T_L - T_S}{w \,|\, \text{grad}\,T\,|} \tag{6.120}$$

gdzie w jest prędkością krzepnięcia. Wartość lokalnego czasu krzepnięcia pozwala wyznaczać między innymi wymiary kolejnych odgałęzień dendrytów [67, 68].

Należy w tym miejscu zauważyć, że kompletu danych do określenia wielkości występujących w omówionych wyżej kryteriach dostarczają rozwiązania modeli I generacji. Analiza krystalizacji na podstawie obliczeń modeli makroskopowych ma z całą pewnością określone walory praktyczne, ale z drugiej strony, informacje uzyskane w ten sposób nie są w pełni wiarygodne. W związku z powyższym rozwija się intensywnie inne sposoby

modelowania krzepnięcia metali i stopów, dla których przyjęła się nazwa modeli makro/mikro. Pewne problemy z tej dziedziny, a w szczególności zagadnienia połączenia takiego sposobu opisu procesu krzepnięcia z algorytmem numerycznym metody kombinowanej zostaną omówione w rozdziale następnym.

Literatura do rozdziału 6

- W.Longa, The problem of the generalization of crystallization heat source function for a homogeneous alloy with a constant number of nuclei, Metalurgia i Odlewnictwo, 18,4, 1990, 579-603.
- W.Longa, Zagadnienie modelowania funkcji źródła ciepła krystalizacji, Z.N.AGH, Metalurgia i Odlewnictwo, 125, 1989, 103-110.
- S.Jura, Z.Jura, Krzywa kalorymetryczna i źródło ciepła w analizie termicznej i deriwacyjnej procesu krzepnięcia żeliwa, Krzepnięcie Metali i Stopów, 16, 1992, 126-139.
- 4. L.I. Rubinstein, Problema Stefana, Zvjazgnie, Riga 1967.
- 5. A. Flemings, Solidification processing, Mc Graw-Hill Book Co., New York 1974.
- 6. W.Longa, Krzepnięcie odlewów, Śląsk, Katowice 1985.
- 7. J.Crank, Free and moving boundary problems, Claredon Press, Oxford 1984.
- 8. J.Schniewind, Solution of the solidification problem of a one-dimensional medium by a new numerical method, Journal Iron & Steel Ind., 5, 1963.
- 9. J.Tomeczek, Numeryczne rozwiązanie krzepnięcia płaskiej warstwy, Z.N.Pol.Śl., Energetyka, 34, 1970, 109-118.
- E. Majchrzak, B. Mochnacki, The collocational method of determining the solidification front in the continuous casting volume, Bull. of Pol.Ac.of Sc., Techn.Sc., vol.36, No 5-6, Warsaw 1988, 301-308.
- E. Majchrzak, E. Ładyga, M. Prażmowski, Problem Stefana. Model numeryczny dla zadania 1D, Międzyuczelniane Seminarium Zastosowań MEB, Częstochowa 1996, 73-78.

- 130
- 12. B. Mochnacki, Model krzepnięcia wlewka i powstawania jamy skurczowej, Praca doktorska, Gliwice 1970.
- 13. E.Kacki, Termokinetyka, WNT, Warszawa 1967.
- R.Grzymkowski, B.Mochnacki, Analiza krzepnięcia wlewka w procesie odlewania ciagłego, Krzepnięcie Metali i Stopów, 2, 1980, 69-125.
- B.Mochnacki, J.S.Suchy, Designing of technological process and continuous casting properties on the basis of numerical simulation, Gietwerk Perspektief, 13, 4, 1994, 22-28.
- B. Mochnacki, J.S. Suchy, Application of numerical methods for continuous casting process simulation, International GIFA Congress, Metal Casting'94, Congress Papers, Dusseldorf 1994, 128-133.
- 17. E.Fraś, Krystalizacja metali i stopów, PWN, Warszawa 1992.
- 18. E.Fraś, W.Kapturkiewicz, H.F.Lopez, Macro and micro modelling of the solidification cinetics of casting, AFS Transactions, 92-48, 1993, 583-591.
- V.R.Voller, Recent developments in the modelling of solidification processes, Computational Modelling of Free and Moving Boundary Problems, Comp. Mech. Publ., de Gruyter, 1991, 3-21.
- 20. S.R.Idelsohn, M.A.Storti, L.A.Crivelli, Numerical methods in phase change problems, Archives of Computational Methods in Engineering, 1, 1994, 49-74.
- 21. E.Majchrzak, B.Mochnacki, Application of the BEM in the thermal theory of foundry, Engineering Analysis with Boundary Elements, 16, 1995, 99-121.
- 22. V.T.Borisov, Kristallizacja binarnovo splava pri sochranieni ustojcivosti, Dokłady An SSSR, 136, 1961, 583-586.
- 23. L.A.Samojłowicz, Formirovanie slitka, Metallurgia, Moskwa 1977.
- 24. W.Longa, Krzepnięcie odlewów w formach piaskowych, Ślask, Katowice 1973.
- 25. A.L. Wiejnik, Tieorija zatwierdiewanija otliwki, Maszgiz, Moskwa 1960.

- 26. B.Mochnacki, J.S.Suchy, The boundary element model of coupled heat and mass transfer in solidifying casting domain, Int. Conf. Free and Moving Boundary Problems, Ghent, Belgium, 1997.
- 27. L.A.Kozdoba, Metody riesenia nielinejnych zadac teploprovodnosti, Nauka, Moskwa 1975.
- 28. B.Mochnacki, Substitute thermal capacity of metal solidifying in an interval of temperature, Bull. of the Pol. Ac. of Sc. Techn. Sc., 3-4, 1984, 127-143.
- 29. B.Mochnacki, J.S.Suchy, Modelowanie i symulacja krzepnięcia odlewów, PWN, Warszawa 1993.
- 30. B. Mochnacki B., J. Suchy, Numerical methods in computations of foundry processes, Polish Foundrymen's Technical Association, Cracow 1995.
- 31. J. Mendakiewicz, Symulacja krzepnięcia żeliwa jako sposób oceny jego skłonności do zabieleń, Praca doktorska, Gliwice 1994.
- 32. B.M.Budak, E.H.Solovieva, A.B.Uspienskij, Raznostnyj metod so sglazivaniem koefficentov dla resenija zadac Stefana, Z.W.M. i M.F., 5, 1965, 828-840.
- B. Mochnacki B., J.Suchy, Numerical modelling of casting solidification: The concept of problem linearization, AFS Transactions, 96-11, 1997, 203-209.
- E. Majchrzak, B. Mochnacki, The BEM application for numerical solution of nonsteady and non-linear thermal diffusion problems, Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences, 3, 4, 1996, 327-346.
- 35. B. Mochnacki, Application of the BEM for numerical modelling of continuous casting, Computational Mechanics, 18, 1, 1996, 62-72.
- 36. R.W.Ruddle, The solidification of castings, Institute of Metals, London 1957.
- 37. E. Majchrzak, Zastosowanie metody elementów brzegowych w termodynamice procesów odlewniczych, Wyd. Pol. Śl., Mechanika, Nr 102, Gliwice 1991.
- R.Szopa, J.Mendakiewicz, Numerical simulation of cylindrical casting solidification on the basis of combined BEM, Z.N. Katedry Mechaniki Stosowanej Pol. Śląskiej, 6, 1998, 335-340.

- 39. E.Majchrzak, Numerical simulation of continuous casting solidification by boundary elements, Engineering Analysis with Boundary Elements, 11, 1993, 95-99.
- 40. J.Rogers, A.Berger, M.Ciment, Numerical solution of a diffusion consumption problem with free boundary, SIAM J. Num. Anal., 12, 1975, 645-659.
- 41. J.Rogers, A.Berger, M.Ciment, The alternating phase truncation method for a Stefan problem, SIAM J. Num. Anal., 16, 1979, 562-587.
- 42. K.W.Morton, D.F.Mayers, Numerical solution of partial differential equations, University Press, Cambridge 1996.
- 43. E. Majchrzak, R. Szopa, Symulacja przepływu ciepła i masy w odlewie wytwarzanym ze stopu dwuskładnikowego, Materiały Konferencji Naukowej, "Nowoczesne tendencje w odlewnictwie metali nieżelaznych", Instytut Odlewnictwa, Kraków 1997, 63-70.
- 44. E.Majchrzak, R.Szopa, Simulation of Heat and Mass Transfer in Domain of Solidifying Binary Alloy, Archives of Metallurgy, Vol. 43, 4, 1998, 341-351.
- 45. B.Mochnacki, A.Kapusta, The analysis of heat transfer processes in the cylindrical radial continuous casting volume, Bull. of the Pol. Ac. of Sc., Techn. Sc., 36, 5-6, 1988, 309-320.
- 46. B.Mochnacki, E.Majchrzak, A.Kapusta, Numerical model of heat transfer processes in solidifying and cooling steel ingot (on the basis of the BEM), Computational Modelling of Free and Moving Boundary Problems, 2, Walter de Gruyter, Berlin, New York 1991, 177-189.
- 47. E. Majchrzak, J. Mendakiewicz, Numerical analysis of cast iron solidification process, Journal of Materials Processing Technology, 53, 1995, 285-292.
- 48. E.Majchrzak, Application of combined BEM-FEM algorithm in numerical modelling of diffusion problems, Computational Mechanics, 18, 1, 1996, 55-61.
- 49. E. Majchrzak, B. Mochnacki, R. Szopa, Numerical modelling of cylindrical or spherical casting solidification. A new approach basing on the artificial source introduction, Proceedings of the International Conference "Challenges to Civil and Mechanical Engineering in 2000 and Beyond", 1997, 221-230.
- 50. B. Mochnacki, O pewnych metodach obliczeń procesu krzepnięcia i stygnięcia odlewu w formie, Krzepnięcie Metali i Stopów, 2, 1980, 135-174.

- 51. B. Mochnacki, Metody matematyczne w cieplnych obliczeniach procesów odlewniczych, rozdz. XVIII, Poradnik Inżyniera, Odlewnictwo, WNT, Warszawa 1986.
- 52. J. Szargut, B. Mochnacki, Różnicowy model matematyczny procesu krzepnięcia wlewka stali uspokojonej, Arch. Hutn., 3, 1971, 270-289.
- C.P.Hong, T.Umeda, Y.Kimura, Numerical models for casting solidification. Part I. The coupling of the boundary element method and finite difference methods for solidification problems, Metall. Trans. B, 15B, 1984, 91-99.
- 54. C.P.Hong, T.Umeda, Y.Kimura, Numerical models for casting solidification problems, Part II, Metall. Trans. B, 15B, 1984, 101-105.
- 55. C.P.Hong, T.Umeda, Y.Kimura, Solidification of shaped casting by the BEM and prediction of shrinkage cavity, 53rd Word Foundry Congress, Official Exchange, Prague 1986.
- 56. R.Szopa, Nieustalone pole temperatury w obszarze ciała stałego z uwzględnieniem przemian fazowych, Materiały V Konferencji "Zastosowanie komputerów w zakładach przetwórstwa metali KomPlasTech'98, Bukowina Tatrzańska, 11-14 stycznia, 1998, 105-112.
- E. Majchrzak, Model krzepnięcia złożonego geometrycznie odlewu w wykorzystaniem kombinowanej metody elementów brzegowych, Krzepnięcie Metali i Stopów, 36, 1998, 33-40.
- 58. E. Majchrzak, R. Szopa, Analysis of thermal processes in solidifying casting using the combined variant of the BEM, Journal of Materials Processing Technology (w druku).
- 59. B. Mochnacki, R. Szopa, Application of the boundary element method in numerical modelling of solidification Part I. The one domain approach, Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2, 36, 1998, 457-468.
- 60. Boundary element methods in heat transfer, Eds.L.C.Wrobel, C.A.Brebbia, Computational Mechanics Publications, Southampton Boston, Elsevier Applied Science, London, New York 1992.
- 61. C.A.Brebbia, J.Domingues, Boundary elements. An introductory course, Comp. Mechanics Publications, McGraw-Hill Book Company, 1992.

- 62. P.K.Banerjee, R.Butterfield, Boundary element methods in engineering science, McGraw-Hill Company, London, New York 1981.
- 63. J.Spanier, K.B.Oldham, An atlas of functions, Hemisphere Publishing Corporation, Springer-Verlag, Berlin 1987.
- 64. Z.Konopka, Kristalizacja i krzepnięcie kompozytu AlSi9-Pb, Wyd. Politechniki Częstochowskiej, seria Monografie, 34, Częstochowa 1994.
- 65. R.Szopa, Solidification of cast composite with spherical particles, Z.N.Pol. Opolskiej, seria Mechanika, z. 56, 1998, 7-11.
- 66. R. Parkitny, N. Sczygiol, Równania krzepnięcia objętościowego dwuskładnikowych stopów metali, Krzepnięcie Metali i Stopów, 12, 1987, 29-44.
- 67. R.N.Grugel, Secondary and tertiary dendrite arm spacing relationships in directionally solidified Al-Si alloys, Journal of Materials Science, 28, 1982, 441-450.
- 68. C.T.Rios, R.Caram, The use of heat transfer simulation in the microstructure prediction during a foundry process, Advanced Computational Methods in Heat Transfer V, Computational Mechanics Publications, 1998, 243-252.

7. MODELOWANIE KRYSTALIZACJI METALI I STOPÓW (MODELE MIKRO-MAKRO)

7.1. Wstęp

W rozdziale niniejszym zostaną przedstawione opisy matematyczne oraz algorytmy numeryczne dotyczące rozwiązywania pewnych zagadnień z dziedziny termodynamiki procesów odlewniczych, w których rozpatruje się proces krzepnięcia w ujęciu mikro-makro. Pierwsze prace dotyczące symulacji komputerowej procesów cieplnych na poziomie mikro pojawiły się pod koniec lat siedemdziedsiątych i zgodnie z klasyfikacją zaproponowaną przez Stefanescu [1] nazwane zostały modelami drugiej generacji. W Polsce badania w tym zakresie prowadzone były na Wydziale Odlewnictwa AGH w Krakowie (W. Longa, E.Fraś, W.Kapturkiewicz, R.Skoczylas - m.in. [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9]).

Najbardziej istotna różnica między modelami pierwszej generacji (w tym problemem Stefana [10] i omówionymi w rozdziale poprzednim opisami procesu krzepnięcia z wykorzystaniem zastępczej pojemności cieplnej itd.) a modelami mikro-makro jest sposób podejścia do składnika źródłowego w równaniu energii lub odpowiednim warunku brzegowym. W modelu Stefana i licznych jego ulepszeniach [11] rozpatruje się równania dla pól bezźródłowych (podobszary fazy stałej i ciekłej, ewentualnie podobszar formy odlewniczej), natomiast ciepło przemiany wydziela się na ruchomej powierzchni rozdziału faz. Bilans energii dla otoczenia tej powierzchni prowadzi do warunku brzegowego nazywanego warunkiem Stefana. Jak wiadomo, model Stefana dotyczy w zasadzie krzepnięcia czystych metali i stopów eutektycznych.

Z kolei równanie krzepnięcia dla typowych stopów odlewniczych (omówione w rozdziale poprzednim) zawiera funkcję źródła proporcjonalną do lokalnej prędkości krzepnięcia

$$q_{\nu} = L_{\nu} \frac{\partial f_{\mathcal{S}}(x, t)}{\partial t}$$
(7.1)

gdzie L_v jest ciepłem krzepnięcia, f_s - udziałem objętościowym fazy stałej w otoczeniu rozpatrywanego punktu x. Zmiana lokalnych wartości funkcji f_s wynika z pewnych rozważań dotyczących skali makro - np. zakłada się zależność między wartościa f_s a temperaturą, co prowadzi do pojawienia się w równaniu różniczkowym zastępczej pojemności cieplnej strefy dwufazowej (por. rozdział poprzedni).

W modelach drugiej generacji zmianę lokalnego udziału fazy stałej szacuje się na podstawie rozważań dotyczących mechanizmu krystalizacji w skali mikroskopowej, a w szczególności praw zarodkowania i wzrostu. Zakłada się przy tym, że siłą pędną tego procesu jest przechłodzenie poniżej temperatury równowagi. Tak więc model Stefana nie ma swojego odpowiednika wyższej generacji i zastępuje się go opisem matematycznym, którego centralnym elementem jest równanie krzepnięcia z funkcją źródła. Funkcję q_v modeluje się na podstawie wymienionych poprzednio praw. Podobnie postępuje się w przypadku analizy krzepnięcia stopów odlewniczych.

Rozdział niniejszy składa się z kilku podrozdziałów. Pierwszy z nich zawiera najważniejsze informacje dotyczące podstaw teorii krystalizacji, a w szczególności krystalizacji homogenicznej i heterogenicznej. Dalej omówiono pewne sposoby opisu zjawiska krzepnięcia w ujęciu mikro-makro (aspekty cieplne procesu krzepnięcia i krystalizacji), a w szczególności modele prezentowane w cytowanych już pracach Longi, Frasia, Kapturkiewicza, Skoczylasa, jak również E. Majchrzak [12] i autora niniejszej monografii [13, 14, 15, 16]. Kolejne podrozdziały prezentują możliwości wykorzystania metody kombinowanej do modelowania procesu krystalizacji numerycznych.

7.2. Krystalizacja na zarodkach homogenicznych i heterogenicznych

Krystalizacja jest złożonym procesem fizykochemicznym, w którym zachodzi wymiana ciepła i dyfuzja atomów pierwiastków wchodzących w skład stopu. Składa się ona z procesu zarodkowania (nukleacji) i procesów wzrostu kryształów na utworzonych zarodkach. Zarodki krystalizacji mogą być homogeniczne lub heterogeniczne. Zarodki homogeniczne to powstające w cieczy zgrupowania atomów krystalizującej fazy o symetrii właściwej danej strukturze sieciowej. Zarodki heterogeniczne są zwykle cząstkami faz stałych, nie rozpuszczonych w kąpieli metalowej i mogą powstawać w wyniku procesów zachodzących w ciekłym metalu (zarodki endogeniczne) lub też mogą być wprowadzone do metalu z zewnątrz (zarodki egzogeniczne). Zarodki mogą być wprowadzone przypadkowo (zanieczyszczenia) lub celowo w tzw. procesie modyfikacji.

Zarodkowanie homogeniczne, jak już wspomniano, jest to proces powstawania ośrodków (klasterów) będących ugrupowaniami atomów zbliżonymi do budowy krystalicznej metalu (stopu w stanie stałym). Tego rodzaju zarodkowanie praktycznie nie występuje w warunkach rzeczywistych – dotyczy ono bowiem metalu idealnie czystego oraz nie stykającego się w trakcie krystalizacji z powierzchniami materialnymi (np. ścianki formy odlewniczej).

Zakładając, że klastery mają kształt sferyczny o promieniu ρ można przyjąć, że zmiana entalpii swobodnej wywołanej powstaniem w cieczy zarodka kulistego wynosi [17]

$$\Delta G_{\rho} = \frac{4}{3} \pi \rho^3 \Delta G_{\nu} \tag{7.2}$$

gdzie ΔG_{ν} jest zmianą entalpii jednostki objętości cieczy przekształconej w zarodek:

$$\Delta G_{\nu} = \frac{L_{\nu} \Delta T}{T_{e}}$$
(7.3)

przy czym ΔT jest przechłodzeniem równym różnicy między temperaturą równowagową krystalizacji T_e i rzeczywistą temperaturą początku krystalizacji T_p , L_v - ciepłem krystalizacji. Równocześnie powstawanie klastera związane jest z utworzeniem powierzchni F, co prowadzi do powiekszenia entalpii swobodnej układu o wartość

 $\Delta G_F = 4\pi\rho^2\sigma$

(7.4)

gdzie σ jest napięciem powierzchniowym granicy klaster - ciecz. Tak więc całkowita zmiana entalpii swobodnej związana z utworzeniem klastera o promieniu ρ jest różnicą energii związanej ze zmianą powierzchni ΔG_F i objętości ΔG_V :

$$\Delta G = 4\pi \rho^2 \sigma - \frac{4}{3}\pi \rho^3 \frac{L_V \Delta T}{T_e}$$
(7.5)

Powyższą zależność ilustruje rys.7.1 [18].





Utworzony w stygnącej cieczy klaster (embrion fluktuacyjny) może samorzutnie wzrastać, jedynie gdy sumaryczna entalpia swobodna układu ulega zmniejszeniu. Jak wynika z rysunku 7.1, ma to miejsce po przekroczeniu wartości ΔG_{max} , co odpowiada uzyskaniu przez zarodek wymiaru krytycznego ($\rho > \rho_{kr}$). Klastery o promieniu mniejszym od krytycznego nie moga samorzutnie wzrastać, ponieważ spowodowałoby to zwiększenie sumarycznej energii układu. Krytyczny promień zarodka można wyznaczyć z warunku koniecznego ekstremum funkcji jednej zmiennej d(ΔG)/d ρ =0, skąd [19]

$$=\frac{2\sigma T_{\star}}{L_{V}\Delta T}$$
(7.6)

Po wstawieniu (7.6) do (7.5) otrzymuje się wzór na entalpię swobodną (pracę) zarodkowania homogenicznego

Pk,

$$\Delta G_{\max} = \frac{16 \pi \sigma^3 T_e^2}{3 L_V^2 (\Delta T)^2}$$
(7.7)

Z powyższej zależności wynika, że zwiększenie przechłodzenia cieczy powoduje zmniejszenie promienia krytycznego i zmniejszenie pracy zarodkowania, co ułatwia proces zarodkowania homogenicznego. W równowagowej temperaturze krystalizacji T_e entalpia swobodna fazy ciekłej jest równa entalpii fazy stałej ($\Delta G=0$). Z zależności (7.7) wynika zatem, że dla temperatury T_e promień $\rho_{kr} \rightarrow \infty$, co oznacza niemożność zarodkowania samoistnego. Dla zapoczątkowania tego procesu nieodzowne jest odpowiednie przechłodzenie kapieli. Zależność krytycznego promienia zarodka od wartości przechłodzenia przedstawiono na rysunku 7.2 [20].



Rys. 7.2. Zależność ρ_{kr} od przechłodzenia Fig. 7.2. Radius ρ_{kr} as a function of undercooling

Na zakończenie należy podkreślić, że zarodkowanie homogeniczne w czystym metalu wymaga dużego przechłodzenia ($\Delta T \approx 0.2T_e$ [20]), nie występującego w przypadku klasycznych warunków krzepnięcia odlewów.

Krystalizację metali i stopów odlewniczych inicjuje zazwyczaj zarodkowanie heterogeniczne, w którym zarodki określonej fazy powstają na podłożu stałym, np. na wtrąceniach niemetalicznych znajdujących się zwykle w kapieli bądź na ściankach formy odlewniczej.

W teorii zarodkowania heterogenicznego przyjmuje się najczęściej [21], że stykający się z podłożem klaster ma kształt zbliżony do czaszy kulistej, a jego geometrię charakteryzują kąt zwilżania φ i promień ρ - rys. 7.3 [18, 22].



Fig. 7.3. Claster on the base

W układzie występuja napięcia powierzchniowe między poszczególnymi fazami $\sigma_{p/l}$ (podłoże - ciecz), $\sigma_{z/l}$ (klaster - ciecz), $\sigma_{z/l}$ (podłoże - klaster).

Warunkiem samorzutnego wzrostu klastera jest uzyskanie przez niego rozmiaru krytycznego (ρ_{kr}). Trwałość klastera na podłożu określa warunek równowagi w postaci równania Younga [18]

$$\sigma_{p/l} = \sigma_{p/z} + \sigma_{z/l} \cos \varphi \tag{7.8}$$

Uwzględniając powyższą zależność, można obliczyć zmianę energii swobodnej przy zarodkowaniu heterogenicznym [18]

$$\Delta G_{het} = 2 \pi \rho^2 \sigma_{z/l} (1 - \cos \varphi) - \pi \rho^2 \sigma_{z/l} (1 - \cos^2 \varphi) - \frac{1}{3} \pi \rho^2 (2 - 3 \cos \varphi + \cos^3 \varphi) \frac{L_V \Delta T}{T_c}$$
(7.9)

Po zróżniczkowaniu wyrażenia (7.9) względem ρ i przyrównaniu pochodnej do zera otrzymujemy zależność na wartość promienia krytycznego zarodka

$$\rho_{kr} = \frac{2\sigma_{ell}T_e}{L_V\Delta T} \tag{7.10}$$

Podstawiając (7.10) do (7.9) uzyskuje się wzór na pracę zarodkowania heterogenicznego

$$\Delta G_{het} = \frac{16 \pi \sigma_{z/l}^2 T_e}{3 L_{\nu} (\Delta T)^2} \frac{(2 + \cos \varphi) (1 - \cos \varphi)^2}{4}$$
(7.11)

Z powyższej zależności można wykazać, że dla pełnej zwilżalności podłoża ($\sigma \rightarrow 0$) praca zarodkowania heterogenicznego $\Delta G_{het} \rightarrow 0$. W drugim, skrajnym przypadku przy całkowitym braku zwilżalności podłoża kat styku $\sigma \rightarrow \pi$, a praca zarodkowania heterogenicznego równa jest pracy zarodkowania homogenicznego. W pierwszym przypadku w stopie (metalu) w całości zachodzi proces zarodkowania heterogenicznego, w drugim natomiast w całości przebiega zarodkowanie homogeniczne.

Stosunek entalpii swobodnych obu procesów zarodkowania wynosi [23]

$$\frac{\Delta G_{het}}{\Delta G_{hom}} = \frac{(2 + \cos \varphi)(1 - \cos \varphi)^2}{4}$$
(7.12)

Z przytoczonych zależności wynika, że zarodkowanie heterogeniczne wymaga znacznie mniejszego przechłodzenia, co wiąże się ze znacznie mniejszą barierą energetyczną tworzenia zarodka na istniejącym w ciekłym metalu stałym podłożu (wtrącenia niemetaliczne, ścianka formy).

Dla porównania mechanizmów zarodkowania należy założyć, że intensywność stygnięcia stopu (metalu) jest dla każdego z przypadków taka sama. W przypadku zarodkowania heterogenicznego (rys. 7.3) można obliczyć objętość zarodka z zależności

$$V_{her} = \frac{1}{2} \pi \rho^3 (2 - 3\cos\varphi + \cos^3\varphi)$$
 (7.13)

Przykładowo, dla $\rho_{hei} = 1$ i $\varphi = \pi/4$: $V_{hei} = 0.25$ [j³].

Przyjmując kulisty kształt zarodka homogenicznego, można obliczyć jego promień w przypadku, gdyby jego objętość była taka sama jak zarodka heterogenicznego $\rho_{hom} = 0.39$ [j], czyli stosunek $\rho_{het} / \rho_{hom} = 2.56$. Tak więc dla $\varphi = \pi/4$: $\rho_{het} = 2.56 \rho_{hom}$.

Wychodząc z zależności na krytyczną wartość promieni zarodkowania (7.6), (7.10) można przyjąć, że promienie te są odwrotnie proporcjonalne do wartości przechłodzenia odpowiedniego dla rozważanego typu zarodkowania, czyli $\Delta T_{hom} / \Delta T_{hel} = 2.56$, stąd $\Delta T_{hom} = 2.56 \Delta T_{hel}$. Proporcja ta dotyczy oczywiście kąta zwilżania $\varphi = \pi/4$. Dla kątów mniejszych przechłodzenie przy zarodkowaniu heterogenicznym będzie jeszcze mniejsze. Ogólnie rzecz biorąc, dla $\varphi = 0$: $\Delta T_{hel} \rightarrow 0$, a dla $\varphi = \pi$: $\Delta T_{hel} \rightarrow \Delta T_{hom}$.

Wnioski płynące z powyższych rozważań można sformułować następująco:

- Obecność w metalu lub w stopie wtrąceń niemetalicznych stwarza możliwość zarodkowania heterogenicznego, co zachodzi prawie zawsze w rzeczywistych warunkach topienia, odlewania i krystalizacji stopów.
- Konsekwencją zarodkowania heterogenicznego jest obniżenie przechłodzenia wymaganego do uzyskania krytycznego promienia zarodka. Im większa zwilżalność podłoża (φ → 0), tym większy krytyczny promień zarodka i mniejsze wymagane przechłodzenie.

Można zatem przewidywać, że modelując proces krystalizacji przy założeniu zarodkowania według mechanizmu heterogenicznego większa liczba zarodków (ziaren), będzie prowadziła do krystalizacji przy mniejszej wartości przechłodzenia. Ponadto intensywne wydzielanie się (od poczatku) utajonego ciepła krzepnięcia przyspiesza "powrót" temperatury (a raczej jej zbliżenie się) do wartości równowagowej T_e . Efektem tego jest mniejsza wartość rekalescencji, tj. różnicy pomiędzy maksymalną i minimalną temperaturą krystalizacji (ΔT_R).

Na zakończenie tej części rozważań należy podkreślić, że cieplny model krystalizacji opisany w podrozdziałach następnych dotyczy przypadku krzepnięcia stopów rzeczywistych z udziałem zarodkowania heterogenicznego.

7.3. Model krystalizacji czystych metali i stopów eutektycznych

Rozważać będziemy równanie krzepnięcia w postaci

$$x \in \Omega : \quad c(T) \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \operatorname{div}[\lambda(T)\operatorname{grad} T(x, t)] + q_{\mathcal{V}}(x, t)$$
(7.14)

Ponieważ proces krystalizacji zachodzi w stosunkowo niewielkim interwale temperatury, więc z reguły przyjmuje się stałe (uśrednione) wartości parametrów termofizycznych materiału i wówczas równanie (7.14) sprowadza się do prostszego, a mianowicie

$$x \in \Omega$$
: $\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = a \operatorname{div}[\operatorname{grad} T(x, t)] + \frac{q_V(x, t)}{c}$ (7.15)

gdzie *a* jest współczynnikiem wyrównywania temperatury (dyfuzyjnością cieplną). Należy w tym miejscu podkreślić, że postać ostatniego równania umożliwia bezpośrednie wykorzystanie MEB bez dodatkowych procedur uwzględniających nieliniowości równania krzepnięcia omówionego w rozdziale poprzednim, czyli metoda może być prostym i bardzo efektywnym narzędziem do modelowania w konwencji mikro/makro.

Rozkład funkcji $f_s(x, t)$ oraz $f_L = 1 - f_s$ wynika z przyjętego modelu krystalizacji. W literaturze rozważa się najczęściej model następujący [6, 7, 8, 24, 25].

- Liczba ziaren generujacych się w jednostce objętości cieczy jest proporcjonalna do kwadratu przechłodzenia poniżej temperatury przemiany T_{tr} :

$$N(x, t) = \Psi \Delta T^2(x, t) \tag{(7.10)}$$

gdzie Ψ [ziaren/m³ K²] jest współczynnikiem zarodkowania, ΔT - przechłodzeniem poniżej temperatury równowagi. Należy przy tym założyć, że proces zarodkowania zostaje przerwany po przekroczeniu maksymalnej wartości przechłodzenia, tzn. gdy $\Delta T(x, t+\Delta t) < \Delta T(x, t)$.

- Wzrost fazy stałej (ziarna równoosiowe) determinuje równanie w postaci

$$u(x, t) = \frac{\partial R(x, t)}{\partial t} = \mu \Delta T^2(x, t)$$
(7.17)

gdzie R jest promieniem ziarna, μ [m/s K²] – współczynnikiem wzrostu. Do rozważań wprowadzamy funkcję ω zdefiniowaną następująco

$$\omega = \frac{4}{3}\pi \int_{0}^{t} \frac{\partial N}{\partial t} \left[\int_{t'}^{t} u(\tau) d\tau \right]^{3} dt \qquad (7.18)$$

gdzie t' jest czasem odpowiadającym pojawieniu się w rozważanej objętości kontrolnej pierwszej porcji ziaren. W miejsce t' można przyjąć również 0, ponieważ dla temperatur wyższych od temperatury granicznej przyrost wymiaru liniowego ziarna jest równy 0, czyli

$$\int u(\tau) d\tau = 0 \tag{7.19}$$

Jak widać, wartość ω we wzorze (7.17) dotyczy ziaren kulistych. W literaturze podaje się również zmodyfikowaną postać omawianej zależności, a mianowicie [8]

.

$$\omega = \frac{4}{3} \pi \int_{0}^{t} v \frac{\partial N}{\partial t} \left[\int_{t'}^{t} u(\tau) d\tau \right] dt$$
(7.20)

- - -

gdzie $\nu = 1$ dla ziaren sferycznych, $\nu \in (0.4, 0.8)$ dla wzrostu dendrytycznego. Sens fizyczny wprowadzenia do wzoru 7.18 dodatkowego współczynnika zmniejszającego objętość pojedynczego ziarna ilustruje rysunek 7.4.


Rys. 7.4. Krystalizacja dendrytyczna Fig. 7.4. Dendritic crystallization

Modelowaniu wzrostu dendrytycznego poświęcono wiele prac, ale rozważania w nich prezentowane "nie przystają" zarówno do formalizmu matematycznego równania krzepnięcia w postaci (7.14), jak i do metod obliczeniowych stosowanych w niniejszej monografii. W związku z powyższym ograniczono się do modelu krystalizacji bazującego na wyznaczaniu funkcji ω .

Na rys. 7.5 pokazano krzywa stygnięcia w wybranym punkcie z obszaru krzepnącego metalu, na której zaznaczono czas t' i maksymalną wartość przechłodzenia osiągniętą w chwili t''. W przedziale (t', t') zachodzi proces zarodkowania a także wzrostu, natomiast po czasie t'' trwa jedynie proces wzrostu ziaren do momentu, w którym lokalny udział fazy stałej osiągnie wartość $f_s = 1$.



Rys. 7.5. Krzywa stygnięcia w wybranym punkcie x Fig. 7.5. Cooling curve at selected point x

Jeżeli założyć stałą liczbę ziaren w jednostce objętości, to wzór (7.18) sprowadza się do prostszego, a mianowicie

$$\omega = \frac{4}{3} \pi N \left[\int_{0}^{t} u(\tau) d\tau \right]^{3}$$
(7.21)

Z numerycznego punktu widzenia uproszczenie takie nie jest konieczne, w dalszej części niniejszego rozdziału przedstawiono wyniki symulacji zarówno dla stałej, jak i zmiennej liczby ziaren.

Interpretacja funkcji ω jest oczywista. Jej wartość odpowiada względnej objętości fazy zakrzepłej [m³ fazy zakrzepłej/m³ metalu]. Jeżeli więc rozpatrujemy objętość kontrolną V_i , której punktem centralnym jest punkt x_i , to dla określonej wartości ω objętość zajęta przez ciekły metal wynosi

$$V_{L}(x_{i}, t) = V_{i}[1 - \omega(x_{i}, t)], \quad \omega(x_{i}, t) \in [0, 1]$$
(7.22)

Powyższy wzór dotyczy ,,liniowego'' modelu krystalizacji. Rozważania teoretyczne prezentowane w pracach Mehla, Avrami, Johnsona i Kołmogorowa (np. [26, 27]) prowadza do innego (obecnie częściej wykorzystywanego) modelu, a mianowicie

$$V_L(x_i, t) = V_i \exp[-\omega(x_i, t)]$$
(7.23)

lub

$$f_L(x_i, t) = \exp[-\omega(x_i, t)], \quad f_S(x_i, t) = 1 - \exp[-\omega(x_i, t)]$$
(7.24)

W modelu ",wykładniczym" całkowite zakrzepnięcie rozważanej objętości wymaga uzyskania odpowiednio dużej i z całą pewnością przekraczającej 1 wartości wykładnika ω_i . Interpretację tej własności równania Kołmogorowa przedstawiono m.in. w monografii Frasia [6] i pracy doktorskiej Burbiełki [28] (objętość rzeczywista i geometryczna).

Ponieważ funkcja źródła (7.1) w równaniu (7.14) jest proporcjonalna do lokalnej szybkości krzepnięcia $\partial f_s / \partial t$, więc

$$q_{V}(x, t) = L_{V} \frac{\partial f_{S}(x, t)}{\partial t} = L_{V} \exp(-\omega) \frac{\partial \omega(x, t)}{\partial t}$$
(7.25)

i ostatecznie rozpatrywać będziemy równanie krzepnięcia w postaci

$$x \in \Omega : \quad c(T) \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \operatorname{div}[\lambda(T)\operatorname{grad} T(x, t)] + L_{v} \exp(-\omega) \frac{\partial \omega(x, t)}{\partial t} \quad (7.26)$$

przy czym, jak wspomniano poprzednio, parametry termofizyczne materiału przyjmuje się z reguły jako stałe. W literaturze można znaleźć wiele prac dotyczących numerycznych aspektów modelowania procesu krystalizacji i wszystkie praktycznie prezentują algorytmy bazujące na metodzie różnic skończonych. Niżej przedstawione zostanie podejście zaproponowane przez Longę i Majchrzak w pracy [12] i rozwijane przez autora niniejszej monografii [13, 14, 15] ze względu na stosunkowo proste możliwości połączenia tego modelu z metodą kombinowaną. Podobnie jak w metodzie kombinowanej, do rozważań wprowadzamy siatkę czasu

$$0 = t^{0} < t^{1} < t^{2} < \ldots < t^{f} < t^{f+1} < \ldots < t^{F}, \quad \Delta t = t^{f+1} - t^{f}$$
(7.27)

natomiast obszar Ω dzielimy na elementy wewnętrzne (objętości kontrolne) V_i , i=1, 2, ..., n. Wykładnik ω_i w równaniu (7.23) odpowiadający względnej objętości zakrzepłego metalu w elemencie V_i zastępuje się sumą kolejnych "porcji" odpowiadających przyjętym przedziałom czasu

$$\delta(x_i, t^{f+1}) = \delta V_i^1 + \delta V_i^2 + \dots + \delta V_i^f + \delta V_i^{f+1}$$
(7.28)

czyli (por. 7.24)

$$f_{L}(x_{i}, t^{f+1}) = \exp\left[-\omega(x_{i}, t^{f+1})\right] = \exp\left[-\left(\delta V_{i}^{1} + \delta V_{i}^{2} + \dots + \delta V_{i}^{f+1}\right)\right] =$$

$$= \exp\left(-\delta V_{i}^{1}\right) \cdot \exp\left(-\delta V_{i}^{2}\right) \cdots \exp\left(-\delta V_{i}^{f+1}\right)$$
(7.29)

Biorąc pod uwagę niewielkie przyrosty objętości zakrzepłych i wykorzystując rozwiniecie funkcji exp(-x) w szereg Taylora z dokładnością do dwóch pierwszych wyrazów: exp(-x) = 1-x, mamy

$$f_{L}(x_{i}, t^{f+1}) = (1 - \delta V_{i}^{1}) \cdot (1 - \delta V_{i}^{2}) \cdots (1 - \delta V_{i}^{f+1})$$
(7.30)

Występująca w równaniu krzepnięcia (7.26) chwilową wartość pochodnej $\partial \omega / \partial t$ zastępujemy odpowiednim ilorazem różnicowym i otrzymujemy

$$q_{V}(x_{i}, t^{f+1}) = L_{V} \exp\left[-\omega(x_{i}, t^{f})\right] \frac{\delta V_{i}^{f+1}}{\Delta t} = L_{V} f_{L}(x_{i}, t^{f}) \frac{\delta V_{i}^{f+1}}{\Delta t}$$
(7.31)

Ten sam wzór wynika z równania (7.30). Załóżmy, że

$$q_{\nu}(x_{t}, t^{f+1}) = -L_{\nu} \frac{f_{L}(x_{t}, t^{f+1}) - f_{L}(x_{t}, t^{f})}{\Delta t}$$
(7.32)

Ponieważ

$$f_{L}(x_{i}, t^{f+1}) - f_{L}(x_{i}, t^{f}) = (1 - \delta V_{i}^{1})(1 - \delta V_{i}^{2}) \cdots (1 - \delta V_{i}^{f})(1 - \delta V_{i}^{f+1}) - (1 - \delta V_{i}^{1})(1 - \delta V_{i}^{2}) \cdots (1 - \delta V_{i}^{f}) = (7.33)$$
$$= -(1 - \delta V_{i}^{1})(1 - \delta V_{i}^{2}) \cdots (1 - \delta V_{i}^{f})\delta V_{i}^{f+1} = -f_{L}(x_{i}, t^{f})\delta V_{i}^{f+1}$$

 $q_v(x_i, t^f)$

więc

$$(t^{*1}) = L_V f_L(x_i, t^f) \frac{\delta V_i^{f+1}}{\Delta t}$$

(7.34)

W pracy W.Longi [4] przedstawiono inny sposób określania wykładnika
$$\omega$$
, a w szczególności jej Autor prezentuje następujące rozumowanie.

Rozważamy objętość V_i wypełnioną ciekłym metalem. Załóżmy, że po czasie Δt (nazwanym w omawianej pracy pierwszym krokiem krystalizacji) w objętości tej zakrzepła porcja metalu, którą oznaczymy przez δV_i (jak we wzorze (7.28)). W rozważanej objętości pozostało

$$V_{i}^{1} = V_{i} - \delta V_{i}^{1} = V_{i} \left(1 - \frac{\delta V_{i}^{1}}{V_{i}} \right) = V_{i} \left(1 - \delta V_{i}^{1} \right)$$
(7.35)

gdzie

$$V_i^1 = \frac{\delta V_i^1}{V_i} \tag{7.36}$$

W drugim kroku faza stała może wykrystalizować tylko z objętośći V_i^1 . I tak

$$V_i^2 = V_i^1 - \delta V_i^2 = V_i^1 \left(1 - \frac{\delta V_i^2}{V_i^1} \right)$$
(7.37)

Ostatecznie

 $V_i^2 = V_i (1 - \delta V_i^1) (1 - \delta V_i^2)$ (7.38)

Analogicznie po f+1-szym kroku krystalizacji

$$V_i^{f+1} = V_i \left(1 - \delta V_i^1 \right) \left(1 - \delta V_i^2 \right) \cdots \left(1 - \delta V_i^{f+1} \right)$$
(7.39)

lub po podzieleniu przez V_i

$$f_L(x_i, t^{f+1}) = \left(1 - \hat{\delta} V_i^1\right) \left(1 - \hat{\delta} V_i^2\right) \cdots \left(1 - \hat{\delta} V_i^{f+1}\right)$$
(7.40)

przy czym

$$\delta V_i^{f+1} = \frac{\delta V_i^{f+1}}{V_i^f}$$
 (7.41)

Uważny Czytelnik dostrzeże natychmiast różnicę między wzorem (7.40) a wzorem (7.30).

Jeżeli kolejne kroki czasu są bardzo małe, to i porcje krzepnącego metalu są niewielkie. ,,Odwracając'' rozumowanie przedstawione na stronach poprzednich, zastępujemy wyrażenie 1-x funkcją exp(-x), czyli

$$f_L(x_i, t^{f+1}) = \exp(-\delta V_i^1) \cdot \exp(-\delta V_i^2) \cdot \dots \cdot \exp(-\delta V_i^{f+1})$$
(7.42)

i ostatecznie

$$f_{L}(x_{i}, t) = \exp[-\hat{\omega}(x_{i}, t)], \quad f_{S}(x_{i}, t) = 1 - \exp[-\hat{\omega}(x_{i}, t)] \quad (7.43)$$

146

W ujęciu autora omawianej pracy, wykładnik w równaniu Kołmogorowa jest więc postaci

$$\hat{\omega}(x_i, t^{f+1}) = \hat{\delta} V_i^1 + \hat{\delta} V_i^2 + \dots + \hat{\delta} V_i^f + \hat{\delta} V_i^{f+1}$$
(7.44)

Po przekształceniach analogicznych do wzorów (7.32) - (7.34) otrzymujemy

$$f_L(x_i, t^f) = \left(1 - \hat{\delta} V_i^1\right) \left(1 - \hat{\delta} V_i^2\right) \cdots \left(1 - \hat{\delta} V_i^f\right)$$
(7.45)

czyli (por. wzór (7.32))

$$q_{V}(x_{i}, t^{f+1}) = -L_{V} \frac{f_{L}(x_{i}, t^{f+1}) - f_{L}(x_{i}, t^{f})}{\Delta t} = L_{V} f_{L}(x_{i}, t^{f}) \frac{\delta V_{i}^{f+1}}{\Delta t} \quad (7.46)$$

Autor niniejszej pracy nie podejmuje się oceny, który z przedstawionych sposobów określania wykładnika w równaniu Kołmogorowa lepiej odzwierciedla rzeczywisty przebieg procesu krystalizacji. Należy podkreślić, że podejście omówione w pierwszej kolejności jest powszechnie cytowane w literaturze. Z drugiej strony jednak klasyczny model wykładniczy wymaga istotnie większej od 1 objętości geometrycznej części zakrzeplej, aby uzyskać bliski zeru udział objętościowy fazy ciekłej (np. $e^{-3} = 0.05$). Wprawdzie w literaturze fakt ten wyjaśnia się różnicą między objętością rzeczywistą a geometryczną i nachodzeniem na siebie ziaren sferycznych, ale różnica objętości wydaje się być zbyt duża. W modelu W.Longi bliskie zera wartości f, uzyskuje się szybciej, ponieważ kolejne "porcje" krzepnącego metalu dzielimy przez aktualną ilość fazy ciekłej, która maleje i zwiększa w ten sposób kolejne składniki wykładnika (7.41). W niniejszej pracy wiekszość przykładów zastosowań metody kombinowanej do modelowania krystalizacji metali i stopów rozwiązano przy założeniu ujęcia klasycznego. Pokazany zostanie również przykład ilustrujący różnice w rozwiązaniach numerycznych uzyskanych na podstawie obu omówionych modeli. Sposoby numerycznego modelowania funkcji źródła, a w szczególności rozważania prowadzące do wzorów (7.34) i (7.36) nie były do tej pory opisane w literaturze.

Szczegóły dotyczące aspektów komputerowej realizacji przyjętych modeli mikro/makro zostaną omówione w podrozdziale następnym.

7.4. Model numeryczny procesu krystalizacji

W pierwszej kolejności będzie przedstawiony model odpowiadający równaniu (7.21), w którym przyjmuje się stałą liczbę ziaren. Uproszczenie to jest często stosowane w analizie procesu krystalizacji (między innymi w pracy Longi [3]). Jak pokazują eksperymenty numeryczne, wyniki uzyskane przy takim założeniu mogą być bardzo zbliżone do wyników uwzględniających proces zarodkowania, z tym że trzeba odpowiednio przyjąć a'priori liczbę N, co nie jest zadaniem prostym. Na rys. 7.6 pokazano element wewnętrzny V_i zawierający stałą liczbę ziaren sferycznych N_i [ziaren/m³].

Początek procesu wzrostu w rozważanym elemencie V_i ma miejsce, gdy odpowiadająca mu temperatura $T(x_i, t^{f+1}) = T_i^{f+1}$ spadnie poniżej temperatury granicznej T_{kr} . Jeżeli

rozpatrujemy przejście $t^f \rightarrow t^{f+1}$, to wzrost wykładnika $\omega(\mathbf{x}_i, t^{f+1})$ wynosi

$$\delta V_i^{f+1} = \frac{4}{3} \pi N_i \Big[\left(R_i^{f+1} \right)^3 - \left(R_i^f \right)^3 \Big]$$
(7.47)

przy czym

$$R_i^{f+1} = R_i^f + \mu \left(T_{kr} - T_i^{f+1} \right)^2 \Delta t$$
(7.48)

Oczywiście dla $T_i^{f} > T_{k}$: $R_i^{f} = 0$. Cytowane w literaturze dane wskazują, że gęstość ziaren dla typowych metali i stopów eutektycznych zawiera się w granicach $10^9 - 10^{11}$ [ziaren/m³].



Rys. 7.6. Stała liczba ziaren Fig. 7.6. Constant number of grains

W najprostszym wariancie symulacji numerycznej procesu krystalizacji ze zmienną liczbą ziaren wykorzystuje się zależność (7.16), przy czym w każdym kroku czasu uśrednia się ich wymiary (promienie). Istotę takiego podejścia ilustruje rys. 7.7.



Rys. 7.7. Zmienna liczba ziaren Fig. 7.7. Changing number of grains

W pierwszej kolejności wyznacza się liczbę ziaren w elemencie V_i w chwili t^{f+1} (por. wzór (7.16))

$$N_i^{f+1} = \Psi \left(T_{kr} - T_i^{f+1} \right)^2 \tag{7.49}$$

oraz (podobnie jak poprzednio) przyrost promienia ziarna

$$\Delta R_i^{f+1} = \mu \left(T_{kr} - T_i^{f+1} \right)^2 \Delta t$$
(7.50)

Zmiana wykładnika $\omega(x_i, t^{f+1})$ dla przejścia $t^f \rightarrow t^{f+1}$ w elemencie V, wynosi

$$W_i^{f+1} = \frac{4}{3}\pi N_i^f \left[\left(R_i^f + \Delta R_i^{f+1} \right)^3 - \left(R_i^f \right)^3 \right] + \frac{4}{3}\pi \left(N_i^{f+1} - N_i^f \right) \left(\Delta R_i^{f+1} \right)^3$$
(7.51)

Przed przejściem do kolejnej pętli obliczeń dokonuje się uśrednienia promieni ziaren zgodnie ze wzorem

$$R_i^{f+1} = \sqrt[3]{\frac{3\left[\delta V_i^1 + \delta V_i^2 + \dots + \delta V_i^f + \delta V_i^{f+1}\right]}{4\pi N_i^{f+1}}}$$
(7.52)

Eksperymenty numeryczne pokazują, że pomimo pewnych uproszczeń (uśredniania promieni ziaren) wyniki symulacji numerycznych są bardzo zbliżone do modelu, w którym analizuje się losy kolejnych generacji ziaren i który zostanie omówiony poniżej.

Załóżmy, że w objętości kontrolnej V_i temperatura obniżyła się poniżej temperatury T_{kr} i rozpoczął się proces krystalizacji. Wyznaczamy liczebność pierwszej "generacji" ziaren N_i^1 oraz ich promienie $R_i^1 = \Delta R_i^1$ (jak poprzednio), a następnie wartość δV_i^1 z zależności

$$\delta V_i^1 = \frac{4}{2} \pi N_i^1 \Delta R_i^1 \tag{7.53}$$

W następnym kroku Δt mamy inną liczbę ziaren: $N_i = \Psi \Delta T_i^2$. Liczebność drugiej generacji wynika z odjęcia od N_i ziaren poprzedniej "rodziny", a mianowicie $N_i^2 = N_i - N_i^1$. Możemy również obliczyć przyrost promienia pojedynczego ziarna ΔR_i^2 . W tym momencie promienie pierwszej generacji wynoszą $\Delta R_i^1 + \Delta R_i^2$, natomiast promienie drugiej generacji ΔR_i^2 . Przyrost objętości fazy stałej δV_i^2 oblicza się z zależności

$$\delta V_i^2 = \frac{4}{3} \pi \left[N_i^1 \left(\Delta R_i^1 + \Delta R_i^2 \right)^3 + N_i^2 \left(\Delta R_i^2 \right)^3 \right] - \delta V_i^1 \tag{7.54}$$

Dalsze etapy proponowanego algorytmu są prostym uogólnieniem prezentowanych wyżej rozważań. Tak więc w każdej objętości kontrolnej "śledzimy" wzrost wymiarów liniowych kolejnych generacji ziaren o różnej liczebności (rys. 7.8). Z numerycznego punktu widzenia model taki jest dosyć skomplikowany i sukces zapewniają jedynie szybkoliczące komputery o odpowiednio dużej pamięci zewnętrznej. Dla każdej objętości kontrolnej należy przewidzieć macierz dwukolumnową - liczba jej wierszy powinna odpowiadać liczbie kroków czasu, w których w rozważanym elemencie wewnętrznym V_i zachodzi proces zarodkowania, czyli

przechłodzenie osiągnie wartość maksymalną. W pierwszej kolumnie macierzy rejestrujemy liczebności kolejnych generacji ziaren i ta kolumna nie jest modyfikowana, natomiast w kolumnie drugiej aktualne wymiary ziaren dodając do "zapamiętanych" promieni obliczone dla przejścia $t^f \rightarrow t^{f+1}$ ich przyrosty.



Symulację numeryczną modeli mikro/makro powinno realizować się z małym krokiem czasu. Spełnienie tego postulatu powoduje szybkie zapełnienie pamięci komputera informacjami o liczebności i aktualnych "losach" kolejnych generacji ziaren. Tak więc jedynym możliwym kompromisem między zamiarem wykorzystania omawianego podejścia a możliwościami dostępnego sprzętu było łączenie kilku lub kilkunastu generacji ziaren w jedną "rodzinę" o odpowiedniej liczebności i tych samych chwilowych wymiarach. Unifikację taką osiągnięto łącząc opisywaną procedurę z przedstawionym poprzednio algorytmem uśredniania wymiarów ziaren. Należy jeszcze podkreślić, że model uwzględniający zróżnicowane co do liczebności i wymiarów generacje dostarcza nie tylko informacji o cieplnych aspektach procesu krystalizacji, ale również pozwala oszacować strukturę pierwotną odlewu. Wszystkie prezentowane wyżej rozważania dotyczą ziaren kulistych. Można je w zasadzie przenieść na inne modele krystalizacji (np. krystalizację dendrytyczną), o czym wspomniano w poprzednim podrozdziale.

Metoda brzegowych równań całkowych, w tym również metoda z dyskretyzacją czasu, jest szczególnie dogodna do jej wykorzystania w modelowaniu procesu krystalizacji, ponieważ biorąc pod uwagę niewielki zakres temperatury, w którym przebiega ten proces, można z dużą dokładnością przyjąć, że parametry termofizyczne materiału są wartościami stałymi i rozpatrywać równanie energii, w którym nieliniowości występują wyłącznie w składniku źródłowym. Jak wiadomo, tego typu zadania można bez dodatkowych zabiegów rozwiązywać wykorzystując podstawowe algorytmy MEB opisane w rozdziale 3.

Dla przetestowania opisanych wyżej procedur rozwiązano między innymi następujące zadanie. Rozważano płyte aluminiową o grubości L=0.02[m] wytwarzaną w typowej piasko-

wej masie formierskiej - rys. 7.9. Grubość masy była na tyle duża, aby na jej umownie przyjętej powierzchni zewnętrznej można było założyć warunek adiabatyczny. Współczynnik wzrostu wynosił $\mu = 3 \cdot 10^{-6}$ [m/sK²], natomiast liczba zarodków była stała i wynosiła odpowiednio 10¹⁰, 10¹¹ oraz 10¹² [zarodków/m³]. Temperatura zalewania: $T_0 = 700$ °C, temperatura krzepnięcia: $T_{kr} = 660$ °C, temperatura początkowa masy formierskiej: $T_{m,0} = 20$ °C.



Rys. 7.9. Obszar odlewu i formy Fig. 7.9. Casting and mould domains

Tak więc rozważano problem brzegowo-początkowy

$$0 < x < L/2 : \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} + \frac{L_V}{c} \exp[-\omega(x, t)] \frac{\partial \omega(x, t)}{\partial t}$$

$$L/2 < x < 2L : \frac{\partial T_m(x, t)}{\partial t} = a_m \frac{\partial^2 T_m(x, t)}{\partial x^2}$$
(7.55)

z następującymi warunkami brzegowymi – w osi symetrii płyty

$$x = 0 : \quad q(x, t) = -\lambda \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} = 0$$
 (7.56)

na zewnętrznej powierzchni masy formierskiej

$$x=2L: \quad q_m(x, t) = -\lambda_m \frac{\partial T_m(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (7.57)$$

- na powierzchni kontaktu odlew-forma

$$x = L/2: \begin{cases} -\lambda \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} = -\lambda_m \frac{\partial T_m(x, t)}{\partial x} \\ T(x, t) = T_m(x, t) \end{cases}$$
(7.58)

W chwili t=0:

$$t=0: T(x, t) = T_0 > T_{tr}, T_m(x, t) = T_{m0}$$
 (7.59)

W obszarze płyty wyróżniono 20 liniowych elementów wewnętrznych, natomiast w obszarze masy formierskiej - 80 elementów. Parametry termofizyczne aluminium i materiału formy przyjęto zgodnie z [29]. Do rozwiązania zadania wykorzystano algorytm metody kombinowanej dla zadań 1D i obszarów niejednorodnych, przy czym jeden z nich był obszarem ze źródłami wewnętrznymi. Podstawowy algorytm uzupełniono procedurą numerycznego modelowania lokalnych wydajności źródeł.

Na rys. 7.10 pokazano krzywe stygnięcia w osi płyty uzyskane dla różnych liczb ziaren.





Rys. 7.11 ilustruje powiększony fragment rysunku poprzedniego. Symulacja komputerowa bardzo dobrze odtwarza efekt przechłodzenia, przy czym (co było oczywiste) zmniejszenie liczby ziaren powoduje wzrost maksymalnego przechłodzenia, ponieważ wymiary liniowe ziaren muszą być większe, aby zapewnić odpowiednią wartość funkcji $\omega(x, t)$. Krzywe stygnięcia rozchodzą się w pobliżu temperatury 665 ° C, a więc jeszcze w fazie ciekłej. Wynika to z faktu, że rys. 7.10 dotyczy osi płyty i o szybkości stygnięcia decydują procesy cieplne związane z krzepnięciem i stygnięciem obszarów położonych w pobliżu brzegu, a te procesy dla różnych wartości N przebiegały różnie. Po zakończeniu procesu krzepnięcia krzywe stygnięcia leżą bardzo blisko siebie.

Na rys. 7.12 pokazano fragment krzywych stygnięcia dla różnych liczb ziaren w punkcie położonym w pobliżu brzegu płyty, natomiast na rys. 7.13 kinetykę procesu krzepnięcia, tzn. zależność globalnego udziału fazy stałej w objętości płyty od czasu. Okazało się, że dla

wszystkich rozpatrywanych liczb ziaren przebiegi funkcji $f_s(t)$ prawie się pokrywają (na omawianym rysunku naniesiono wszystkie trzy krzywe).











Fig. 7.13. Kinetics of solidification

Przedstawione wyżej wyniki pokazują, że z punktu widzenia makroskopowej analizy przebiegu procesów cieplnych w krzepnącym metalu przyjęcie "rozsądnej" i realnej, ale różnej liczby ziaren nie wpływa w sposób istotny na końcowy efekt symulacji numerycznej.

Drugi z przykładów [13] dotyczy również płyty aluminiowej. Oddziaływanie formy zastąpiono warunkiem I rodzaju przyjmując na zewnętrznej powierzchni odlewu stalą temperaturę $T_B = 655$ °C wynikającą ze znanego rozwiązania Schwarza [29]. Podobnie jak poprzednio, rozważano model ze stałą liczbą ziaren (10¹⁰, 10¹¹ oraz 10¹² [ziaren/m³]), natomiast współczynnik wzrostu wynosił $\mu = 3 \cdot 10^{-6}$ [m/sK²]. Temperatura zalewania: $T_0 = 700$ °C, temperatura krzepnięcia: $T_{kr} = 660$ °C. Rozważano również model z uśrednianiem wymiarów w każdym kroku czasu oraz model uwzględniający losy kolejnych generacji ziaren. Współczynnik zarodkowania: $\Psi = 10^{10}$ [m⁻³ K⁻²].

Na rys. 7.14 pokazano krzywe stygnięcia w osi płyty dla wszystkich analizowanych modeli. Okazało się, że wyniki uzyskane na podstawie najbardziej rozbudowanego modelu (generacje ziaren) nie różnią się od rozwiązania, w którym wymiary ziaren były uśredniane, co z punktu widzenia praktyki obliczeniowej jest faktem bardzo istotnym. Dodatkowo, rozwiązania uwzględniające zarodkowanie nie różnią się od wyników uzyskanych dla stałej liczby ziaren $N=10^{11}$, ale oczywiście trudno z góry przewidzieć, jaka założona a'priori liczba ziaren da tak dobry efekt symulacji. Na rys. 7.15 pokazano kinetykę krzepnięcia płyty (zmiana globalnego f_s z czasem).

Jak widać, wyniki uzyskane dla stałych liczb ziaren różnią się między sobą. Spowodowane jest to pominięciem masy formierskiej i przyjęciem stałej temperatury na powierzchni odlewu. W warunkach rzeczywistych temperatura kontaktu w początkowych etapach trwania procesu prawie nie zmienia się, natomiast dla czasów dalszych zaczyna wolno spadać. Rozwiązanie numeryczne, które narzuca krzywym stygnięcia stałą temperaturę brzegową, musi być zależne od lokalnych wydajności źródeł, czyli przyjęcia określonej liczby zarodków.







Rys. 7.15. Kinetyka krzepnięcia Fig. 7.15. Kinetics of solidification

W celu weryfikacji doświadczalnej przedstawionych wyżej rozwiązań numerycznych, a w szczególności wartości maksymalnego przechłodzenia, wykonano pomiary krzywych stygniecia odlewu aluminiowego modyfikowanego zarodkami TiAl. Do badań wytypowano aluminium gatunku AR-O (rafinowane, o czystości 99.9%Al - reszta Fe, Mn, Ni). Wytop prowadzono w sylitowym piecu komorowym. Aluminium topiono w tyglu z Si₃ N₄. Eksperyment przeprowadzono dla:

- aluminium bez modyfikacji,
- aluminium + 0.01% Ti,
- aluminium + 0.05% Ti,
- aluminium + 0.1% Ti.

Dodatki heterogeniczne (prawdopodobnie Ti Al₃) wprowadzono w zaprawie Al-Ti zawierającej 9.5% Ti (reszta Al). Temperatura odlewania dla wszystkich eksperymentów była taka sama i wynosiła 800 °C.

Przebieg krzepnięcia i stygnięcia poszczególnych "stopów" badano rejestując krzywe T=f(t) i ich pierwsze pochodne. Aluminium odlewano do standardowego próbnika ATD (forma skorupowa). Sygnał z termoelementu NiCr-NiAl rejestrowano na urządzeniu MC-201 stosując stałą próbkowania 200 ms. Uzyskane wyniki poddano obróbce komputerowej programem "ANALDTA". Przykładowo, na rys. 7.16 pokazano krzywą stygnięcia i jej pochodną dla "stopu" zawierającego 0.01% Ti.



Dla kolejnych eksperymentów otrzymano następujące wartości maksymalnego przechłodzenia

*	
- Al	$\Delta T_{max} = 4.7 \mathrm{K},$
- Al+0.01%Ti	$\Delta T_{max} = 2.3 \mathrm{K},$
- Al+0.05%Ti	$\Delta T_{max} = 1.7 \mathrm{K},$
— Al+0.1%Ti	$\Delta T_{max} = 1.0 \mathrm{K}.$

Można zauważyć, że dodatek modyfikatora spełnia rolę heterogenicznych zarodków krystalizacji Al, efektem czego jest zmniejszenie przechłodzenia będącego siłą pędną procesu krystalizacji. Obliczone na podstawie symulacji numerycznych wartości maksymalnego przechłodzenia mieszczą się w granicach przechłodzeń wyznaczonych eksperymentalnie.

Bardziej dokładną analizę zgodności eksperymentu i modelu numerycznego przeprowadzono rozwiązując następujące zadanie [30]. Rozważano odlew aluminiowy (99.1% Al) wytwarzany w formie skorupowej, której parametry odpowiadały standardowemu próbnikowi ATD. Grubość ścianki odlewu dobrano w ten sposób, aby jego moduł krzepnięcia (definiowany jako stosunek objętości do sumy powierzchni oddających ciepło) był równy modułowi krzepnięcia próbnika. Zmierzoną krzywą stygnięcia i jej pierwszą pochodną pokazano na rys. 7.17.





W dalszej kolejności rozwiązano problem brzegowo-początkowy opisany równaniami (7.55) - (7.59), z tym że na zewnętrznej powierzchni formy założono warunek brzegowy III rodzaju, przyjęto wynikającą z równości modułów grubość ścianki odlewu i rzeczywistą grubość ścianki formy. Wykorzystano procedurę uwzględniającą zarodkowanie i wzrost z uśrednianiem wymiarów ziaren w kolejnych krokach czasu. Na rys. 7.18 przedstawiono porównanie zmierzonej (symbole) i obliczonej (linia ciągła) krzywej stygnięcia w centralnym punkcie próbnika ATD. Temperatura zalewania wynosiła 770 ° C, temperatura początkowa formy 20 ° C. Parametry termofizyczne oraz współczynniki zarodkowania i wzrostu przyjęto jak w przykładach poprzednich.



Rys. 7.18. Porównanie z eksperymentem Fig. 7.18. Comparison with experiment

Obliczona i zmierzona wartość maksymalnego przechłodzenia są praktycznie takie same, również podobny jest przebieg krzywej stygnięcia. Efekt rekalescencji jest bardziej widoczny w przypadku symulacji numerycznej, ale ogólnie rzecz biorąc, zgodność między eksperymentem i obliczeniami jest zadowalająca.

Omówione w niniejszym podrozdziałe metody modelowania problemów mikro/makro mogą być kojarzone również z algorytmem metody kombinowanej dla bardziej złożonych zagadnień brzegowo-początkowych. Przykład, który zostanie omówiony niżej, dotyczy właśnie takiego zagadnienia. Rozważać będziemy odlew aluminowy w kształcie cylindrycznej tarczy zasilany umieszczonym centralnie nadlewem - rys. 7.19. Odlew wytwarzany jest w piaskowej masie formierskiej. Na bocznej powierzchni formy założono warunek brzegowy Robina ($\alpha = 10 [W/m^2K]$), podobny warunek ($\alpha = 50[W/m^2K]$) przyjęto na górnej powierzchni układu. Podstawa formy jest zaizolowana (q=0), to znaczy, że pominięto ciepło oddawane od masy formierskiej do podłoża. Wykorzystano algorytm metody kombinowanej dla niejednorodnych obszarów 2D zorientowanych w układzie kartezjańskim, ze sztucznym źródłem - dokładnie tak jak opisano to w rozdziale 4. Wokół osi odlewu przyjęto otwór o bardzo małym promieniu, aby uniknąć osobliwości wynikających z postaci równania różniczkowego. Rozważano model ze stałą liczbą ziaren 10¹² [ziaren/m³]), współczynnik wzrostu wynosił $\mu = 3 \cdot 10^{-6}$ [m/sK²]. Temperatura zalewania: $T_0 = 680 \,^{\circ}$ C, temperatura krzepnięcia: $T_{kr} = 660 \,^{\circ}$ C, temperatura początkowa masy formierskiej: $T_{m0} = 20 \,^{\circ}$ C.



Rys. 7.19. Kształt obszaru i jego dyskretyzacja Fig. 7.19. The shape of domain and its discretization

Pole temperatury w obszarze odlewu opisuje równanie

$$\frac{\partial T(\rho, z, t)}{\partial t} = a \nabla^2 T(\rho, z, t) + \frac{a}{\rho} \frac{\partial T(\rho, z, t)}{\partial \rho} + \frac{L_v}{c} \exp[-\omega(\rho, z, t)] \frac{\partial \omega(\rho, z, t)}{\partial t}$$
(7.60)

a w obszarze formy

$$\frac{\partial T_m(\rho, z, t)}{\partial t} = a_m \nabla^2 T_m(\rho, z, t) + \frac{a_m}{\rho} \frac{\partial T_m(\rho, z, t)}{\partial \rho}$$
(7.61)

Na powierzchni kontaktu zadany jest warunek ciągłości

$$(\rho, z) \in \Gamma_c: \begin{cases} -\lambda \frac{\partial T(\rho, z, t)}{\partial n} = -\lambda_m \frac{\partial T_m(\rho, z, t)}{\partial n} \\ T(\rho, z, t) = T_m(\rho, z, t) \end{cases}$$
(7.62)

Pozostale warunki brzegowe i początkowe omówiono wyżej.

Na rys. 7.19 przedstawiono dyskretyzację obszaru odlewu i formy. W obszarze odlewu wyróżniono 72 stałe elementy wewnętrzne, a w obszarze formy liczba elementów wynosiła 149. Brzeg obszaru zdyskretyzowano elementami stałymi, na styku podobszarów przyjęto podwójne węzły brzegowe.

Rysunki 7.20 oraz 7.21 ilustrują krzywe stygnięcia (obszar przechłodzenia) w wybranych punktach. Położenie punktów a, b, c, d, e, f zaznaczono na rysunku poprzednim.



Rys. 7.20. Krzywe stygnięcia w punktach a, b, c Fig. 7.20. Cooling curves at points a, b, c

Na rysunku 7.22 pokazano z kolei zależność lokalnych wydajności źródeł wewnętrznych w punktach a, b, c od czasu.

Jak widać, rozkłady funkcji źródła są różne w różnych punktach odlewu, choć oczywiście całkowanie tych funkcji w odpowiednim przedziale czasu daje zawsze ten sam wynik, czyli ciepło krzepnięcia odniesione do jednostki objętości. Wynika stąd, że badania, których celem byłoby określenie a'priori składnika źródłowego przy podejściu mikro/makro, są raczej bezcelowe, chociaż z drugiej strony znalezienie reguł konstrukcji tej funkcji w zależności od warunków technologicznych procesu, wymiarów geometrycznych, położenia punktu w obszarze odlewu itp. byłoby niezwykle korzystne z punktu widzenia numerycznej analizy procesów krzepnięcia i krystalizacji.

Rys. 7.23 ilustruje kinetykę krzepnięcia, tzn. zmianę lokalnego udzialu f_s w punktach a, b, c w funkcji czasu.







Rys. 7.23. Kinetyka krzepnięcia w punktach a, b, c Fig. 7.23. Kinetics of solidification at points a, b, c

Różnice między rozwiązaniem makro a rozwiązaniem uwzględniającym mikroskopowe aspekty procesu krystalizacji ilustrują rysunki 7.24 i 7.25. Na rysunkach tych linią ciągłą zaznaczono kinetykę krzepnięcia w punktach b i c (por. rys. 7.23), natomiast symbolami - rozwiązanie numeryczne uzyskane z zastosowaniem konwencji makroskopowej. Do porównania wybrano przebiegi lokalnych wartości funkcji f_s , ponieważ pola temperatury w przypadku rozważanej technologii są mało zróżnicowane. Rowiązanie makroskopowe uzyskano łącząc algorytm metody kombinowanej z procedurą zapasu temperatury (*temperature recovery method*) omówioną w podrozdziale 6.4.1. Dla parametrów termofizycznych aluminium wyjściowa wartość zapasu do zera. W metodzie zapasu temperatury istnieje pewna dowolność w definiowaniu udziału fazy stałej w objętości kontrolnej. Można wprowadzić wielkość będącą stosunkiem aktualnego zapasu do zapasu maksymalnego

$$\frac{\theta - \sum_{k=0} \Delta \theta_0^k}{\theta}$$
(7.63)

gdzie (podobnie jak w podrozdziale 6.4.1) $\Delta \theta_0^k$ jest zapasem wyczerpywanym w kolejnych krokach czasu, a θ - zapasem wyjściowym. Funkcja f_s spełniająca oczywisty warunek $f_s \in [0, 1]$ może być zdefiniowana następująco

μ

=

1.1

$$f_s = 1 - \mu^p, \quad p > 0$$
 (7.64)

Na rysunkach 7.24 i 7.25 pokazano zmianę lokalnej wartości f_s w punktach b i c dla wykładników p=1 i p=3/4.



Rys. 7.24. Porównanie kinetyki krzepniecia (b, c) Fig. 7.24. Comparison of solidification kinetics (b, c)





Jak widać, przyjęcie wykładnika p=3/4 zapewniło bardzo dobrą zgodność modelu makroskopowego z modelem makro/mikro, chociaż trudno z góry przewidywać, jaka będzie optymalna wartość tego wykładnika - w analizowanym przypadku wykładnik p dobrano metodą prób.

163

Z całą pewnością rozwiązanie mikro/makro jest bliższe rzeczywistemu przebiegowi procesu, przede wszystkim pozwala zarejestrować krzywe przechłodzenia poniżej temperatury krzepnięcia. Z drugiej jednak strony, dla oszacowania takich parametrów makroskopowych, jak czas krzepnięcia odlewu czy też kinetyka procesu przejścia od fazy ciekłej do stałej, modele makroskopowe wydają się być wystarczająco dokładne - nawet jeśli przyjmie się najprostszą definicję funkcji f_s .

Ostatni z prezentowanych w niniejszym podrozdziale przykładów dotyczy porównania wyników symulacji numerycznej procesu krystalizacji z wykorzystaniem modelu Longi [4] oraz modelu ,,klasycznego'' (np. [7]). Rozważano płytę aluminiową o grubości 0.02 [m] odlewaną w formie piaskowej o grubości 0.05 [m] (grubość formy dobrano w ten sposób, aby na jej zewnętrznym brzegu można było przyjąć zerowy strumień ciepła). Omawiany problem brzegowo-początkowy opisany jest równaniami (7.55) –(7.59). Różnice występują w definicji wykładnika ω , w szczególności w pierwszej wersji przyjęto zależność (7.44), a w drugiej - (7.28). W obu wariantach założono model ze zmienną liczbą ziaren, których wymiary uśredniano w każdym kroku czasu - por. podrozdział 7.4. Współczynnik wzrostu wynosił $3 \cdot 10^{-6}$ [m/sK²], a współczynnik zarodkowania 10^{10} [m⁻³K⁻²]. Zadanie rozwiązano metodą kombinowaną, zakładając liniowe elementy wewnętrzne (w obszarze [0, *L*/2] wyróżniono 20 elementów).

Na rysunkach 7.26-7.29 cyfra ,,1" zaznaczono rozwiązanie wykorzystujące podejście Longi, natomiast cyfra ,,2" - rozwiązanie ,,klasyczne". Rysunki 7.26 i 7.27 ilustrują fragmenty krzywych stygnięcia w regionie przechłodzenia odpowiednio w osi płyty i w pobliżu jej brzegu.

Na rys. 7.28 pokazano kinetykę wydzielania się utajonego ciepła krzepnięcia w węźle w pobliżu brzegu płyty, czyli całkę z lokalnej wydajności źródeł wewnętrznych w przedziale czasu od 0 to t. Oczywistym sprawdzianem poprawności modelu krystalizacji jest osiągnięcie przez tę całkę wartości L_V (w rozważanym przypadku 975 [MJ/m³]). Rysunek 7.29 pokazuje zmianę globalnego udziału fazy stałej w czasie trwania procesu.

Porównując oba rozwiązania należy stwierdzić, że różnią się one nieznacznie. Przebieg zmian globalnego udziału fazy stałej jest praktycznie taki sam, krzywe stygnięcia w pobliżu temperatury przemiany różnią się nie więcej niż o ułamek stopnia. Bardziej widoczne sa różnice w kinetyce wydzielania się ciepła utajonego, ale okazuje się, że ich wpływ na pola temperatury i kinetykę krzepnięcia odlewu jest niezbyt duży. Dominującym zjawiskiem jest samo wydzielenie się ciepła utajonego i niewielkie różnice w kinetyce tego procesu nie wpływają w sposób widoczny na pole temperatury w odlewie. Podsumowując wyniki obliczeń porównawczych należy stwierdzić, że z punktu widzenia realizacji numerycznej oba analizowane modele dają bardzo podobne rozwiązania.



Rys. 7.27. Fragment obliczonej krzywej w pobliżu brzegu Fig. 7.27. Fragment of calculated curve near the boundary



164

7.5. Krystalizacja stopów wielofazowych

Model krystalizacji stopów wielofazowych jest w zasadzie uogólnieniem rozważań przedstawionych w podrozdziałach poprzednich. Dotyczy on najczęściej przypadku, gdy bezpośrednio po sobie lub równocześnie krystalizuje kilka faz (np. dla żeliwa austenit i eutektyka, lub austenit, eutektyka grafitowa i eutektyka cementytowa) - por. [7, 8, 31]. Równanie krzepnięcia dla takiego przypadku jest "naturalnym" uogólnieniem równania (7.15):

$$\mathbf{x} \in \mathbf{\Omega} : \quad \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = a \operatorname{div}[\operatorname{grad} T(\mathbf{x}, t)] + \frac{1}{c} \sum_{t} q_{\mathbf{y}_{t}}(\mathbf{x}, t) \quad (7.65)$$

wskaźnik e wyróżnia kolejne fazy, a q_{ve} są wydajnościami źródeł związanych z ich krystalizacja, czyli

$$q_{Ve} = L_{Ve} \frac{\partial f_{se}(x, t)}{\partial t}$$
(7.66)

Można założyć, jak poprzednio, że liczba zarodków składników struktury jest proporcjonalna do drugiej potęgi przechłodzenia w rozważanym punkcie $x \in \Omega$:

$$N_{e}(x, t) = \Psi_{e} \Delta T_{e}^{2}(x, t)$$
(7.67)

gdzie Ψ_e są współczynnikami zarodkowania dla kolejnych faz, ΔT_e - przechłodzeniami, czyli $\Delta T_e(x, t) = T_e - T(x, t)$ (7.68)

przy czym temperatury $T_e moga zależeć od lokalnej koncentracji składników. Przykładowo, jeżeli rozpatrywać będziemy krystalizację żeliwa, w którym wyróżnimy fazę austenitu i eutektyki, to <math>T_1$ (temperatura likwidusu) zmienia się, a temperatura równowagi dla eutektyki T_2 jest stała.

Przyjmując, że składniki struktury wzrastają z prędkością proporcjonalną do kwadratu przechłodzenia, mamy

$$u_e(x, t) = \frac{\partial R_e(x, t)}{\partial t} = \mu_e \Delta T_e^2(x, t)$$
(7.69)

Jeżeli (podobnie jak w modelu opisanym w podrozdziale poprzednim) związek między liniową prędkością wzrostu a ułamkiem fazy stałej opisuje równanie Mehla - Johnsona -Avramiego - Kołmogorowa, to dla układu kilku krystalizujących faz otrzymuje się [7, 31]

$$\frac{f_{\mathcal{S}}^{(e)}(x, t)}{f_{\mathcal{L}}(x, t) + f_{\mathcal{S}}^{(e)}(x, t)} = 1 - \exp\left(-\frac{4}{3}\pi\int_{0}^{t}\nu_{e}\frac{\partial N_{e}}{\partial t}\left[\int_{t'}^{t}u_{e}(\tau)d\tau\right]^{3}dt\right)$$
(7.70)

przy czym

$$f_L + \sum_{e} f_S^{(e)} = 1 \tag{7.71}$$

Jak wspomniano poprzednio, w literaturze rozpatruje się dwa przypadki. Pierwszy z nich dotyczy faz krystalizujących jedna po drugiej. Wówczas

- dla fazy pierwszej

$$f_{\mathcal{S}}^{(1)}(x, t) = 1 - \exp\left(-\frac{4}{3}\pi \int_{0}^{t} v_1 \frac{\partial N_1}{\partial t} \left[\int_{0}^{t} u_1(\tau) d\tau\right]^3 dt\right)$$
(7.72)

– dla fazy drugiej

$$\frac{f_{S}^{(2)}(x, t)}{1 - f_{S}^{(1)}(x)} = 1 - \exp\left(-\frac{4}{3}\pi \int_{0}^{t} v_{2} \frac{\partial N_{2}}{\partial t} \left[\int_{t'}^{t} u_{2}(\tau) d\tau\right]^{3} dt\right)$$
(7.73)

- dla fazy trzeciej

$$\frac{f_{S}^{(3)}(x,t)}{1-f_{S}^{(1)}(x)-f_{S}^{(2)}(x)} = 1 - \exp\left[-\frac{4}{3}\pi\int_{0}^{t}\nu_{3}\frac{\partial N_{3}}{\partial t}\left[\int_{t'}^{t}u_{3}(\tau)d\tau\right]^{3}dt\right]$$
(7.74)

itd. Ponieważ fazy krystalizują po sobie, więc proces krystalizacji fazy ,,2" rozpoczyna się po zakończeniu krystalizacji fazy ,,1" - stąd w równaniu (7.73) argumentem funkcji $f_s^{(1)}$ jest tylko współrzędna geometryczna. Podobna sytuacja ma miejsce w przypadku wzoru (7.74). Kolejne funkcje źródła w równaniu energii uruchamiają się sukcesywnie i w analizowanym interwale czasu w punkcie x tylko jedna z nich jest różna od zera.

W przypadku faz krystalizujących równocześnie należy rozwiązać układ równań typu (7.70), przykładowo dla dwóch faz jest to układ równań w postaci

$$\frac{f_{s}^{(1)}(x,t)}{1-f_{s}^{(2)}(x,t)} = 1 - \exp\left(-\frac{4}{3}\pi\int_{0}^{t}\nu_{1}\frac{\partial N_{1}}{\partial t}\left[\int_{t'}^{t}u_{1}(\tau)d\tau\right]^{3}dt\right)$$
$$\frac{f_{s}^{(2)}(x,t)}{1-f_{s}^{(1)}(x,t)} = 1 - \exp\left(-\frac{4}{3}\pi\int_{0}^{t}\nu_{2}\frac{\partial N_{2}}{\partial t}\left[\int_{t'}^{t}u_{2}(\tau)d\tau\right]^{3}dt\right)$$
(7.75)

Cytowany wielokrotnie w tym rozdziale W.Longa w pracy [2] rozważa również dwa modele krystalizacji stopów. Dla faz krystalizujących jedna po drugiej przedstawia rozumowanie prowadzące do równań (7.72) - (7.74), natomiast dla faz krystalizujących równocześnie podaje wzory umożliwiające obliczanie różnicowych przyrostów tych faz.

Ilustracją przedstawionych wyżej rozważań dotyczących krystalizacji stopów może być następujący przykład obliczeń numerycznych. Rozpatrywać będziemy odlew w kształcie płyty o grubości 0.02 [m] wykonany z żeliwa o zawartości węgla 3.5% i wytwarzany w typowej masie formierskiej. W objętości krzepnącego metalu wyróżniono fazę austenityczną i eutektyczną, przy czym temperatura odpowiadająca początkowi krystalizacji fazy austenitycznej zmieniała się wraz ze zmianą zawartości węgla w ciekłej części odlewu. Bilans masy składnika stopowego sporządzono przy założeniu pełnego mieszania. Dane liczbowe zaczerpnięto z rozprawy habilitacyjnej W.Kapturkiewicza [7] i pracy doktorskiej J. Mendakiewicza [32]. Założono (co nie było dotychczas praktykowane) zmienne, zależne od zawartości węgla w fazie ciekłej wartości ciepła krzepnięcia fazy austenitycznej i eutektycznej. Wykorzystano tu dane wynikające z cytowanego w książce J.Szarguta [33] wykresu entalpia-węgiel - rys. 7.30.



Rys. 7.30. Wykres entalpia - wegiel [33] Fig. 7.30. Enthalpy-carbon diagram [33]

Na podstawie wstępnych symulacji numerycznych stwierdzono, że fazy krzepną jedna po drugiej i do modelowania kinetyki procesu wykorzystano równania (7.72), (7.73). Równanie (7.72) należy stosować aż do osiągnięcia przez całkę z funkcji źródła związanej z wydzielaniem się fazy austenitycznej wartości ciepła utajonego L_v austenitu. Przy takim podejściu udział f_s fazy austenitycznej zatrzyma się osiągając odpowiednią wartość graniczną, natomiast wykorzystanie równania (7.72) bez dodatkowych ograniczeń powoduje wzrost tego udziału do 1. Do obliczeń wykorzystano metodę kombinowaną dla źródłowych pół temperatury. W programie uwzględniono dwie funkcje źródła (por. równanie (7.65)). Na obszar odpowiadający połowie grubości płyty nałożono siatkę zawierającą 20 liniowych elementów wewnętrznych, w obszarze formy wyróżniono 80 takich elementów. Z dużej liczby informacji uzyskanych po rozwiązaniu omawianego zadania wybrano do prezentacji profile temperatury w obszarze połowy płyty - rys. 7.31 oraz zmianę w czasie lokalnych udziałów fazy stałej (rys. 7.32) w punktach odpowiadających współrzędnym x=25, 50 i 75 [mm] przyjmując, że osi płyty odpowiada x=0 (krzywe te oznaczono wskaźnikami 3, 2 i 1 odpowiednio).



170

Lokalna kinetyka krzepnięcia stopu przedstawiona na ostatnim rysunku pokazuje, że krzepnięcie fazy austenitycznej przebiega bardziej "dynamicznie". Wynika to z faktu, że zarówno współczynnik zarodkowania austenitu, jak i współczynnik wzrostu tej fazy są wyraźnie większe od tych samych współczynników dla eutektyki - por. [7].

Podsumowując powyższy rozdział należy stwierdzić, że metoda kombinowana jest użytecznym narzędziem rozwiązywania problemów opisanych równaniem krzepnięcia z funkcją źródła modelowaną zgodnie z teorią Mehla-Avrami-Johnsona-Kołmogorowa.

Literatura do rozdziału 7

- D.M.Stefanescu, Critical review of the second generation of solidification models for castings; Macro transport - transformation kinetics codes, Modelling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VI, Edited by T.S.Piwonka, V.Voller, L.Katgerman, The Minerals, Metals & Materials Society, 1993, 3-20.
- 2. W.Longa, Zagadnienie modelowania funkcji źródła ciepła krystalizacji, Z.N.AGH, Metalurgia i Odlewnictwo, 125, 1989, 103-110.
- 3. W.Longa, The problem of the generalization of crystallization heat source function for a homogeneous alloy with a constant number of nuclei, Metalurgia i Odlewnictwo, 18,4, 1990, 579-603.
- 4. W.Longa, Generalized equation for calculating the volume of the crystallizing phase, Metallurgy and Foundry Engineering, 1993, 19, 3, 367-377.
- 5. E. Fraś, Teoretyczne podstawy krystalizacji, AGH w Krakowie, cz. I i II, Kraków 1984.
- 6. E.Fraś, Krystalizacja metali i stopów, PWN, Warszawa 1992.
- W Kapturkiewicz, Model i numeryczna symulacja krystalizacji odlewu, Metalurgia i Odlewnictwo, 119, Kraków 1988.
- E.Fraś, W.Kapturkiewicz, H.F.Lopez, Macro and micro modelling of the solidification cinetics of casting, AFS Transactions, 92-48, 1993, 583-591.
- R. Skoczylas, Micro-macroscopic modelling of solidification of complex shaped casting using PC, Solidification of Metals and Alloys, 17, 1992, 145-153.
- 10. L.I. Rubinstein, Problema Stefana, Zwajgzne, Riga 1967.

11. W.Longa, Krzepnięcie odlewów, Śląsk, Katowice 1985.

- E. Majchrzak, W. Longa, The Macro/micro model of solidification process, 62nd World Foundry Congress, 23 April - 26 April 1996, Philadelphia, Pensylvania, Exchange Paper Poland, 1-10.
- R.Szopa, The Micro/macro model of solidification process, International Conference on Parallel Processing and Applied Matematics PPAM'97, Zakopane, 619-626.
- R.Szopa, The influence of assumed nuclei number on the results of crystallization process simulation, Z.N.Pol. Opolskiej, Mechanika, 55, 1997, 217-220.
- R.Szopa, Application of the boundary element method in numerical modelling of solidification - Part II. The Micro-macro approach, Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2, 36, 1998, 469-478.
- 16. E. Majchrzak, R. Szopa, Numerical aspects of pure metal crystallization modelling, Int. Conference ,,34th Foundry Days'', Brno, 30.09-1.10.1997.
- 17. J.W.Gibbs, The scientific papers, vol. 1, Thermodynamics, Dover Publ. New York 1961.
- A.Gierek, T.Mikuszewski, Kształtowanie struktury pierwotnej metali i stopów, Wyd. Pol. Śl., Gliwice 1998.
- 19. B. Chalmers, Principles of solidification, J. Willey and Sons, New York 1964.
- P.Crosley, A.Douglas, L.Mandolfo, The solidification of metals, The Iron and Steel Institute, London 1968.
- 21. J.Minkoff, The physical metallurgy of cast iron, John Willey and Sons, New York 1983.
- 22. J.Braszczyński, Krystalizacja odlewów, WNT, Warszawa 1991.
- 23. W. Missol, Energia powierzchni rozdziału faz w metalach, Śląsk, Katowice 1974.
- 24. B.Mochnacki, J.S.Suchy, Numerical methods in computations of foundry processes, Polish Foundrymen's Technical Association, Cracow 1995.
- 25. B.Leube, L.Arnberg, R.Mai, Predicting the microstructure of gray iron by solidification simulation, T39, 63rd Word Foundry Congress, Budapest 1998.

- 26. N.A.Awdonin, Matematiceskoje opisanie kristalizacji, Zinatne, Riga 1980.
- A.N.Kolmogorow, O statisticeskoj teorii kristallizacji metallov, IAN SSSR, Matematika, 3, Moskva, 1937, 355-340.
- A.Burbiełko, Optymalizacja obliczeń numerycznych w komputerowej symulacji krystalizacji odlewów, AGH, Kraków 1993.
- 29. W.Longa, Krzepnięcie odlewów w formach piaskowych, Śląsk, Katowice 1973.
- 30. R.Szopa, F.Binczyk, Numerical model of aluminium casting solidification, XXXVIII Sympozjon ,,Modelowanie w mechanice'' (w druku).
- 31. R.Skoczylas, Komputerowa symulacja pierwotnej struktury żeliwa, Przegląd Odlewnictwa, 2, 1991, 56-59.
- 32. J. Mendakiewicz, Symulacja krzepnięcia żeliwa jako sposób oceny jego skłonności do zabieleń, Praca doktorska, Politechnika Śląska, Gliwice 1994.
- 33. J. Szargut, Obliczenia cieplne pieców przemysłowych, Ślask, Katowice 1977.

A DESCRIPTION OF THE OWNER OWNER OF THE OWNER OWNER OF THE OWNER OWNER

- A. K.Loon, L. Konnel, T.M.L., Frencher, M. Stater, S. (20), Nucl. 5, Mathematics (and first first (code); Congress, Bulletin 1998.

8. PODSUMOWANIE I WNIOSKI KOŃCOWE

Metoda brzegowych równań całkowych w swoich licznych odmianach nie jest oczywiście jedynym narzędziem umożliwiającym przybliżone rozwiązywanie zagadnień nieustalonej dyfuzji. Powszechnie znane i stosowane są również inne metody, a w szczególności metoda bilansów elementarnych (*contol volume method - CVM*), metoda różnic skończonych, uogólniona metoda różnic skończonych, metoda elementów skończonych, metody kollokacyjne. Każda z tych metod ma oczywiście swoje zalety i wady, a dosyć zasadniczym pytaniem, na jakie należy odpowiedzieć w podsumowaniu niniejszej pracy, jest problem wad i zalet metody kombinowanej na tle innych metod. Analizując znane algorytmy numerycznej symulacji przepływu ciepła można wyróżnić pewne ich cechy charakterystyczne, a w szczególności

- złożoność metody z punktu widzenia podstaw teoretycznych,
- stopień trudności na etapie realizacji numerycznej,
- dyskretyzacja czasoprzestrzeni i stopień jej zagęszczenia, problem przystawania obszaru siatkowego do rzeczywistego,
- liczba niewiadomych w układzie rozwiązującym,
- struktura macierzy głównej tego układu,
- przydatność metody w przypadku zadań nieliniowych z nieliniowościami w równaniu różniczkowym (przede wszystkim problem zależnych od temperatury parametrów termofizycznych),
- możliwości uwzględnienia nieliniowych warunków brzegowych,
- stabilność schematu numerycznego,
- dokładność metody,
- czas obliczeń.

Z punktu widzenia złożoności rozważań teoretycznych metoda elementów brzegowych jest niestety najbardziej skomplikowana, z tym że omówiona w pracy odmiana MEB, pozwalajaca uniknąć całkowania po czasie, wyróżnia ją korzystnie (w omawianym aspekcie) spośród innych algorytmów metody brzegowych równań całkowych.

Na etapie realizacji numerycznej metoda nie jest trudna, Podstawowymi elementami algorytmu są procedury generowania węzłów brzegowych i wewnętrznych, numerycznego całkowania i rozwiązywania końcowego układu równań. Tak więc standardowy program obliczeń numerycznych jest zbliżony do programu typowego dla metody elementów skończonych, ale trudniejszy niż program realizujący obliczenia metodą różnic, czy też bilansów elementarnych.

Metoda (podobnie jak MES i uogólniona MRS) zapewnia możliwość dokładnego odtworzenia brzegu obszaru rzeczywistego, co jest jej oczywistą zaletą. Jak pokazuja obliczenia testujące, bardzo dobrą dokładność obliczeń uzyskuje się dla niewielkiej liczby wezłów (istotnie mniejszej niż np. w przypadku metody bilansów, czy też różnic skończonych). Krok czasu może być zmieniany w dość szerokich granicach, przy czym cechą charakterystyczną MEB jest dolne ograniczenie kroku czasu. Większość metod numerycznych ,,działa'' tym dokładniej, im bardziej (w rozsądnych granicach) zmniejszamy krok czasu. W metodzie elementów brzegowych, również w omawianym jej wariancie, zbyt małe kroki czasu powodują wygenerowanie niekorzystnych, z punktu widzenia metod numerycznego całkowania, argumentów funkcji podcałkowych. Podsumowując ten fragment rozważań należy stwierdzić, że dyskretyzacja czasoprzestrzeni w obliczeniach wykorzystujących metodę elementów brzegowych może być mniej "gęsta" niż w przypadku innych metod.

Liczba niewiadomych w układzie rozwiązującym jest zdecydowanie mniejsza w porównaniu z innymi metodami rozwiązywania zadań brzegowo-początkowych, co wynika z samej istoty MEB, dla której niewiadomymi tworzącymi układ równań są tylko wartości brzegowe.

Macierz główna układu rozwiązującego jest macierzą pełną (podobnie jak w przypadku uogólnionej MRS, metod kollokacyjnych czy też MES przy niewłaściwej numeracji węzłów). Jest to do pewnego stopnia wadą metody, ponieważ algorytmy rozwiązywania układów równań o strukturze pasmowej są z reguły szybsze. Z drugiej strony jednak rząd macierzy głównej układu rozwiązującego metody elementów brzegowych jest zdecydowanie niższy niż w przypadku innych metod, co w pewnym stopniu kompensuje różnice wynikające ze stopnia złożoności metod rozwiązywania układów o macierzach pełnych i macierzach diagonalnych.

Zbudowanie efektywnego algorytmu metody wymaga znajomości odpowiedniego rozwiązania fundamentalnego. Autorowi pracy udało się znaleźć takie rozwiązanie dla nieustalonej dyfuzji w kuli, inne zaczerpnięto z literatury. Rozwiązania podstawowe można wyznaczyć tylko dla równań o stałych parametrach termofizycznych i to jest najbardziej istotną wadą metody. Stąd też sposoby adaptacji bazowego wariantu metody kombinowanej do symulacji krzepnięcia stanowią bardzo obszerną i ważną część niniejszej pracy. Należy jednak podkreślić, że jedynie bezkrytycznie nastawieni użytkownicy innych metod wierzą w ich niezawodność w symulacji zadań nieliniowych. W przypadku tak silnie zmiennych z temperaturą parametrów, jak np. zastępcza pojemność cieplna krzepnącego stopu, nawet tak ,,przyjazne'' dla modeli nieliniowych metody, jak MRS czy CVM, zastosowane bez dodatkowych procedur poprawiających dają niestety bardzo złe wyniki.

Nieliniowości modelu matematycznego nieustalonej dyfuzji ciepła wynikające z warunków brzegowych (w szczególności warunków III rodzaju przy zmiennym, zależnym od temperatury współczynniku wnikania) można uwzględnić w stosunkowo prosty sposób bez względu na wybraną do obliczeń metodę numeryczną i zdaniem autora niniejszej pracy stopień trudności w modelowaniu nieliniowych warunków brzegowych jest dla wszystkich metod podobny.

Metoda kombinowana zalicza się do grupy schematów niejawnych i jest stabilna bez względu na założony krok czasu, co nie oznacza oczywiście, że dla każdego kroku Δt będzie wystarczająco dokładna.

Autor nie prowadził badań teoretycznych dotyczących dokładności metody. Z takiego punktu widzenia problemy oszacowania błędu rozwiązania numerycznego są niezwykle trudne, a w zadaniach praktyki inżynierskiej mają raczej charakter formalny i nie dający liczbowej informacji o błędzie. W pracy, tam gdzie to było możliwe, dokonywano porównania z rozwiązaniami dokładnymi (analitycznymi), lub z rozwiązaniami uzyskanymi innymi, wielokrotnie weryfikowanymi w praktyce rozwiązaniami przybliżonymi. Wszystkie wykonane przez autora obliczenia testujące potwierdziły dużą dokładność metody.

Jeżeli za kryterium efektywności metody przyjąć czas obliczeń, to metoda kombinowana wypada pozytywnie. Nie prowadzono wprawdzie zbyt szczególówych badań z tego zakresu, ale przy okazji rozwiązywania podobnych problemów brzegowo-początkowych kilkoma metodami numerycznymi okazywało się, że metoda kombinowana dawała rozwiązanie po czasie porównywalnym, lub nawet krótszym niż np. MRS czy też MES. Należy jednak podkreślić, że programy wykorzystujące różne metody numeryczne nie były skonstruowane optymalnie i podawanie "liczbowych" informacji dotyczących czasu symulacji nie byłoby w

Podsumowując ten fragment rozważań należy stwierdzić, że metoda kombinowana zapewnia dobre przybliżenie rzeczywistego brzegu obszaru i dobrze "odtwarza" warunki na nim zadane - co wynika z samej "filozofii" metody. Dobra aproksymacja warunków brzegowych zapewnia odpowiednia dokładność rozwiązania we wnętrzu rozpatrywanego obszaru. Liczba niewiadomych w układzie rozwiązującym jest niewielka, a po wyznaczeniu "brakujących" warunków brzegowych można natychmiast wyznaczyć pole temperatury w dowolnie wybranym zbiorze węzłów wewnętrznych. Dla większości zadań macierz główna układu rozawiązującego jest taka sama dla wszystkich przejść $t^{f} \rightarrow t^{f+1}$ i konstruuje się ją tylko raz, co znacznie skraca czas obliczeń.

pełni obiektywne.

Badania prowadzone nad modelami krzepnięcia w skali makro pokazały, że metoda kombinowana bardzo dobrze "współpracuje" z procedurami uwzględniającymi przebieg tego procesu. Najłatwiejsze (z numerycznego punktu widzenia) jest połączenie metody kombiniowanej z rożnymi wariantami procedury korygowania chwilowego pola temperatury. Z formalnego punktu widzenia algorytm taki może być stosowany jedynie dla obszarów o stałej wartości współczynnika przewodzenia, a w praktyce dla mało zmieniających się wartości tego współczynnika. Jeżeli jednak uśredniona przewodność cieplna znacznie odbiega od wartości lokalnych, to należy rekomendować połączenie MEB z metodą przemiennej fazy.

Metoda kombinowana okazała się bardzo dogodna i efektywna w rozwiązywaniu zadań ,,drugiej generacji'', a bardziej ogólnie do wyznaczania źródłowych pól temperatury. Bez względu na przyjęty model krystalizacji (w pracy rozważano model stosunkowo prosty), problem symulacji procesu krzepnięcia traktowanego jako zadanie brzegowo-początkowe sprowadzi się zawsze do równania różniczkowego z funkcją źródła, tak więc metodę kombinowaną można w przyszłości adaptować również do analizy bliższych warunkom rzeczywistym modelom krystalizacji metali i stopów.

Dostępne na rynku programy narzędziowe wspomagające projektowanie technologii odlewniczych bazują na metodzie różnic skończonych (np. Magma, AFS Solid) lub metodzie elementów skończonych (Cosmos, RWD). Realizują one obliczenia dotyczące przebiegu krzepnięcia traktowanego jako proces makroskopowy (w najprostszym ujęciu) i umoźliwiają śledzenie kinetyki procesu dla różnych warunków technologicznych (położenie nadlewów, i ochładzalników zewnętrznych, analizują dobór różnego rodzaju mas formierskich i rdzeniowych itp.). Metoda elementów brzegowych jako "najmłodsza" ze znanych metod nie doczekała się jeszcze profesjonalnego oprogramowania (z wyjątkiem programu BEASY dla najprostszych zadań liniowych), ale biorąc pod uwagę liczne jej zalety, należy sądzić, że w przyszłości może ona nawet zdominować rynek programów narzędziowych.

MODELOWANIE KRZEPNIĘCIA I KRYSTALIZACJI Z WYKORZYSTANIEM KOMBINOWANEJ METODY ELEMENTÓW BRZEGOWYCH

Streszczenie

W pracy przedstawiono możliwości wykorzystania jednej z odmian metody elementów brzegowych nazywanej w literaturze MEB z dyskretyzacją czasu (*the BEM using discretization in time*) do modelowania procesu krzepnięcia. Rozważano modele makroskopowe, w których przejście od stanu ciekłego do stałego i wydzielanie utajonego ciepła krzepnięcia uwzględnia się w równaniu różniczkowym energii przez wprowadzenie zastępczej pojemności ciepłnej materiału. Rozpatrywano również modele mikro-makro, w których analizuje się procesy zarodkowania i wzrostu. Zjawiska te determinują wydajność wewnętrznych źródeł w równaniu różniczkowym opisującym przepływ ciepła w układzie.

Zakres zastosowań metody kombinowanej rozszerzono na obszary walcowe i kuliste, pokazano sposoby jej wykorzystania do modelowania zadań nieliniowych i obliczeń źródłowych pól temperatury.

Opisy opracowanych algorytmów numerycznych uzupelniono licznymi przykładami dotyczącymi symulacji procesu krzepnięcia metali i stopów dla różnych warunków geometrycznych, fizycznych, brzegowych i początkowych, tzn. różnych technologii odlewniczych.

MODELLING OF SOLIDIFICATION AND CRYSTALLIZATION USING COMBINED BOUNDARY ELEMENT METHOD

Summary

The possibilities of application of the combined boundary element method (*the BEM using discretization in time*) to numerical modelling of solidification process are presented. The macroscopic models, in which the transition from liquid to solid state and latent heat evolution are taken into account in adequate energy equation by introducing the substitute thermal capacity are analyzed. The micro-macro models consisting in the analysis of nucleation and growth processes are also discussed. These phenomena determine the capacity of internal sources in differential equation describing the heat diffusion in a domain considered.

The scope of the combined BEM applications is widened on the cylindrical and spherical domains. The ways of the method utilization for modelling of non-linear solidification problems and computations of temperature field in domains with sources are also presented.

The descriptions of algorithms discussed are supplemented by the numerous examples concerning the numerical simulation of metals and alloys solidification for different geometrical, physical, boundary and initial conditions, in other words for different foundry technologies.

